

(12) 특허협력조약에 의하여 공개된 국제출원

(19) 세계지식재산권기구
국제사무국



(43) 국제공개일
2013년 7월 25일 (25.07.2013) WIPO | PCT

(10) 국제공개번호

WO 2013/108997 A1

(51) 국제특허분류:

C07D 495/04 (2006.01) H01L 51/50 (2006.01)
C09K 11/06 (2006.01)

(21) 국제출원번호:

PCT/KR2012/011234

(22) 국제출원일:

2012년 12월 21일 (21.12.2012)

(25) 출원언어:

한국어

(26) 공개언어:

한국어

(30) 우선권정보:

10-2012-0005545 2012년 1월 18일 (18.01.2012) KR
10-2012-0118629 2012년 10월 24일 (24.10.2012) KR

(71) 출원인: 덕산하이메탈(주) (DUKSAN HIGH METAL CO., LTD.) [KR/KR]; 683-804 울산시 북구 연암동 597-3, Ulsan (KR). 삼성디스플레이 주식회사 (SAMSUNG DISPLAY CO., LTD.) [KR/KR]; 446-711 경기도 용인시 기흥구 삼성 2로 95(농서동), Gyeonggi-do (KR).

(72) 발명자: 박정환 (PARK, Junghwan); 138-803 서울시 송파구 가락본동 80 성원상떼빌 아파트 101동 703호,

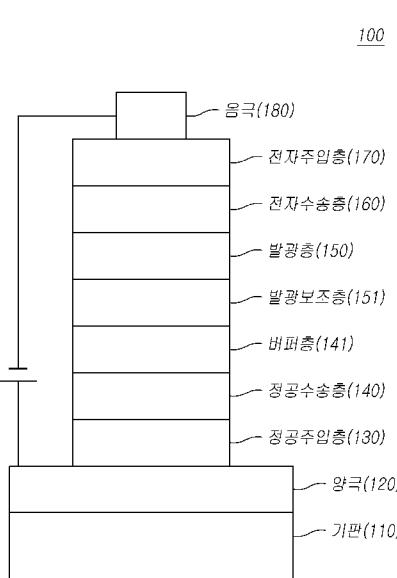
Seoul (KR). 이선희 (LEE, Sunhee); 331-937 충청남도 천안시 서북구 성정공원 6길 23-6, 406호, Chungcheongnam-do (KR). 문성윤 (MUN, Soungyun); 448-170 경기도 용인시 수지구 풍덕천동 664번지 초입마을 동아아파트 111동 810호, Gyeonggi-do (KR). 김대성 (KIM, Daesung); 449-709 경기도 용인시 처인구 김량장동 현대아파트 101동 601호, Gyeonggi-do (KR). 정화순 (JUNG, Hwasoon); 456-843 경기도 안성시 미양면 보체리 경동메르빌 107동 501호, Gyeonggi-do (KR). 김원삼 (KIM, Wonsam); 331-836 충청남도 천안시 서북구 성거읍 천흥리 438-5 신비텔 12동 202호, Chungcheongnam-do (KR). 변지훈 (BYUN, Jihun); 331-836 충청남도 천안시 서북구 성거읍 천흥리 438-5 신비텔 12동 202호, Chungcheongnam-do (KR). 이범성 (LEE, Bumsung); 331-220 충청남도 천안시 서북구 백석동 백석마을 아이파크 아파트 112동 2101호, Chungcheongnam-do (KR).

(74) 대리인: 김은구 (KIM, Eungu) 등; 135-908 서울시 강남구 역삼동 636-15 상원빌딩 2층, Seoul (KR).

[다음 쪽 계속]

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

(54) 발명의 명칭: 유기전기소자용 화합물, 이를 포함하는 유기전기소자 및 그 전자 장치



(57) Abstract: The present invention provides a novel compound comprising a five-atom heterocycle which can enhance light-emitting efficiency, stability, and life of a device, and an organic electronic device and an electronic apparatus comprising same.

(57) 요약서: 본 발명은 소자의 발광효율, 안정성 및 수명을 향상시킬 수 있는 오원자 혼태로 고리를 포함하는 신규 화합물 및 이를 이용한 유기전기소자, 그 전자 장치를 제공한다.

- 110 ... Substrate
120 ... Anode
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 ... Cathode



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

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

공개:

— 국제조사보고서와 함께 (조약 제 21 조(3))

명세서

발명의 명칭: 유기전기소자용 화합물, 이를 포함하는 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, 발광 재료와 전하수송 재료, 예컨대 정공주입 재료, 정공수송 재료, 전자수송 재료, 전자주입 재료 등으로 분류될 수 있다.

[4] 유기 전기 발광소자에 있어 가장 문제시되는 것은 수명과 효율인데, 디스플레이가 대면적화되면서 이러한 효율이나 수명 문제는 반드시 해결해야 되는 상황이다. 효율과 수명, 구동전압 등은 서로 연관이 있으며, 효율이 증가되면 상대적으로 구동전압이 떨어지고, 구동전압이 떨어지면서 구동시 발생되는 주울열(Joule heating)에 의한 유기물질의 결정화가 적어져 결과적으로 수명이 높아지는 경향을 나타낸다.

[5] 하지만 상기 유기물층을 단순히 개선한다고 하여 효율을 극대화시킬 수는 없다. 왜냐하면 각 유기물층 간의 에너지 level 및 T1 값, 물질의 고유특성(mobility, 계면특성 등) 등이 최적의 조합을 이루었을 때 긴 수명과 높은 효율을 동시에 달성할 수 있기 때문이다.

[6] 또한, 최근 유기 전기 발광소자에 있어 정공수송층에서의 발광 문제를 해결하기 위해서는 반드시 정공수송층과 발광층 사이에 발광보조층이 존재하여야 하며, 각각의 발광층(R, G, B)에 따른 서로 다른 발광 보조층의 개발이 필요한 시점이다. 일반적으로 전자수송층에서 발광층으로 전자(electron)이 전달되고 정공(hole)이 정공수송층에서 발광층으로 전달되어 재조합(recombination)에 의해 엑시톤(exciton)이 생성된다. 하지만 정공수송층에 사용되는 물질의 경우 낮은 HOMO 값을 가져야 하기 때문에 대부분 낮은 T1 값을 가지며, 이로 인해 발광층에서 생성된 엑시톤(exciton)이 정공수송층으로 넘어가게 되어 결과적으로 발광층 내 전하불균형(charge unbalance)을 초래하여

정공수송층 계면에서 발광하게 된다.

[7] 정공수송층 계면에서 발광될 경우, 유기전기소자의 색순도 및 효율이 저하되고 수명이 짧아지는 문제점이 발생하게 된다. 따라서 높은 T₁ 값을 가지며, 정공수송층 HOMO 에너지 level과 발광층의 HOMO 에너지 level 사이의 HOMO level를 갖는 발광보조층의 개발이 절실히 요구된다.

[8] 한편, 유기전기소자의 수명단축 원인 중 하나인 양극전극(ITO)으로부터 금속 산화물이 유기층으로 침투 확산되는 것을 자연시키며, 소자 구동시 발생되는 주울열(Joule heating)에 대해서도 안정된 특성, 즉 높은 유리 전이 온도를 갖는 정공 주입층 재료에 대한 개발이 필요하다. 또한 정공 수송층 재료의 낮은 유리전이 온도는 소자 구동시에 박막 표면의 균일도가 무너지는 특성에 따라 소자수명에 큰 영향을 미치는 것으로 보고되고 있다. 또한, OLED 소자의 형성에 있어서 증착방법이 주류를 이루고 있으며, 이러한 증착방법에 오랫동안 견딜 수 있는 재료 즉 내열성 특성이 강한 재료가 필요한 실정이다.

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

발명의 상세한 설명

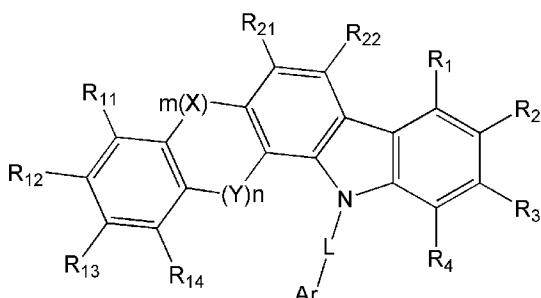
기술적 과제

[10] 본 발명은 소자의 높은 발광효율, 낮은 구동전압, 색순도, 및 수명을 향상시킬 수 있는 오원자 혼합 고리를 포함하는 화합물 및 이를 이용한 유기전기소자, 그 전자 장치를 제공하는 것을 목적으로 한다.

과제 해결 수단

[11] 일측면에서, 본 발명은 하기 화학식으로 표시되는 화합물을 제공한다.

[12]



[13] 다른 측면에서, 본 발명은 상기 화학식으로 표시되는 화합물을 이용한 유기전기소자 및 그 전자장치를 제공한다.

발명의 효과

[14] 본 발명에 따른 화합물을 이용함으로써 소자의 구동전압을 낮출 수 있고,

색순도, 발광효율 및 수명을 크게 향상시킬 수 있다.

도면의 간단한 설명

[15] 도 1은 본 발명의 일실시예에 따른 유기전기발광소자의 예시도이다.

발명의 실시를 위한 형태

[16] 이하에서 본 발명의 일부 실시예들을 예시적인 도면을 통해 상세하게 설명한다.

[17] 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.

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

[19] 한편, 본 명세서에서 사용된 용어 "할로" 또는 "할로겐"은 다른 설명이 없는 한 불소, 염소, 브롬, 및 요오드를 포함한다.

[20] 본 발명에 사용된 용어 "알킬" 또는 "알킬기"는 다른 설명이 없는 한 1 내지 60의 탄소수를 가지며, 여기에 제한되는 것은 아니다.

[21] 본 발명에 사용된 용어 "알케닐" 또는 "알키닐"은 다른 설명이 없는 한 각각 2 내지 60의 탄소수의 이중결합 또는 삼중결합을 가지며, 여기에 제한되는 것은 아니다.

[22] 본 발명에 사용된 용어 "시클로알킬"은 다른 설명이 없는 한 3 내지 60의 탄소수를 갖는 고리를 형성하는 알킬을 의미하며, 여기에 제한되는 것은 아니다.

[23] 본 발명에 사용된 용어 "알콕시기"는 다른 설명이 없는 한 1 내지 60의 탄소수를 가지며, 여기에 제한되는 것은 아니다.

[24] 본 발명에 사용된 용어 "아릴기" 및 "아릴렌기"는 다른 설명이 없는 한 각각 6 내지 60의 탄소수를 가지며, 이에 제한되는 것은 아니다.

[25] 본 발명에서 아릴기 또는 아릴렌기는 단일환 또는 복소환의 방향족을 의미하며, 예컨대, 아릴기는 페닐기, 비페닐기, 플루오렌기, 스파이로플루오렌기일 수 있다.

[26] 본 명세서에서 사용된 용어 "헤테로알킬"은 다른 설명이 없는 한 하나 이상의 헤테로원자를 포함하는 알킬을 의미한다. 본 발명에 사용된 용어 "헤테로아릴기" 또는 "헤�테로아릴렌기"는 다른 설명이 없는 한 각각 하나 이상의

헤테로원자를 포함하는 탄소수 3 내지 60의 아릴기 또는 아릴렌기를 의미하며, 여기에 제한되는 것은 아니며, 단일환뿐만 아니라 복소환을 포함하며, 이웃한 기가 결합하여 형성될 수도 있다.

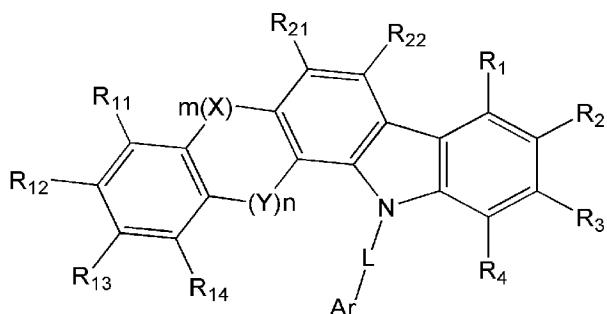
- [27] 본 발명에 사용된 용어 "헤테로시클로알킬", "헤테로고리기"는 다른 설명이 없는 한 하나 또는 그 이상의 헤�테로원자를 포함하고, 2 내지 60의 탄소수를 가지며, 단일환뿐만 아니라 복소환을 포함하며, 이웃한 기가 결합하여 형성될 수도 있다. 또한, "헤테로고리기"는 헤�테로원자를 포함하는 지방족 및/또는 방향족을 의미할 수 있다.
- [28] 본 명세서에서 사용된 용어 "헤테로원자"는 다른 설명이 없는 한 N, O, S, P 및 Si 중 적어도 하나를 나타낸다.
- [29] 다른 설명이 없는 한, 본 발명에 사용된 용어 "지방족"은 탄소수 1 내지 60의 지방족 탄화수소를 의미하며, "지방족고리"는 탄소수 3 내지 60의 지방족 탄화수소 고리를 의미한다.
- [30] 다른 설명이 없는 한, 본 발명에 사용된 용어 "포화 또는 불포화 고리"는 포화 또는 불포화 지방족고리 또는 탄소수 6 내지 60의 방향족고리 또는 헤테로고리를 의미한다.
- [31] 전술한 헤테로화합물 이외의 그 밖의 다른 헤�테로화합물 또는 헤테로라디칼은 하나 이상의 헤�테로원자를 포함하며, 여기에 제한되는 것은 아니다.
- [32] 또한 명시적인 설명이 없는 한, 본 발명에서 사용된 용어 "치환 또는 비치환된"에서 "치환"은 중수소, 할로겐, 아미노기, 니트릴기, 니트로기, $C_1 \sim C_{20}$ 의 알킬기, $C_1 \sim C_{20}$ 의 알콕시기, $C_1 \sim C_{20}$ 의 알킬아민기, $C_1 \sim C_{20}$ 의 알킬티오기, $C_6 \sim C_{20}$ 의 아릴티오기, $C_2 \sim C_{20}$ 의 알케닐기, $C_2 \sim C_{20}$ 의 알키닐기, $C_3 \sim C_{20}$ 의 시클로알킬기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴기, 중수소로 치환된 $C_6 \sim C_{20}$ 의 아릴기, $C_8 \sim C_{20}$ 의 아릴알케닐기, 실란기, 봉소기, 게르마늄기, 및 $C_5 \sim C_{20}$ 의 헤�테로고리기로 이루어진 군으로부터 선택되는 1개 이상의 치환기로 치환됨을 의미하며, 이들 치환기에 제한되는 것은 아니다.
- [33] 도 1은 본 발명에 일 실시예에 따른 유기전기소자에 대한 예시도이다.
- [34] 도 1을 참조하면, 본 발명에 따른 유기전기소자(100)는 기판(110) 상에 형성된 제 1전극(120), 제 2전극(180) 및 제 1전극(110)과 제 2전극(180) 사이에 화학식 1로 표시되는 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.
- [35] 유기물층은 제 1전극(120) 상에 순차적으로 정공주입층(130), 정공수송층(140), 발광층(150), 전자수송층(160) 및 전자주입층(170)을 포함할 수 있다. 이때, 발광층(150)을 제외한 나머지 층들이 형성되지 않을 수 있다. 정공저지층, 전자저지층, 발광보조층(151), 베피층(141) 등을 더 포함할 수도 있고, 전자수송층(160) 등이 정공저지층의 역할을 할 수도 있을 것이다.
- [36] 또한, 미도시하였지만, 본 발명에 따른 유기전기소자는 제 1전극과 제 2전극 중

적어도 일면 중 상기 유기물층과 반대되는 일면에 형성된 보호층을 더 포함할 수 있다.

- [37] 상기 유기물층에 적용되는 본 발명에 따른 화합물은 정공주입층(130), 정공수송층(140), 전자수송층(160), 전자주입층(170), 발광층(150)의 호스트 또는 도편트 또는 캐핑층의 재료로 사용될 수 있을 것이다. 바람직하게는, 본 발명의 화합물은 발광층(150), 정공수송층(140) 및/또는 발광보조층(151)으로 사용될 수 있을 것이다.
- [38] 한편, 동일한 코어일지라도 어느 위치에 어느 치환기를 결합시키느냐에 따라 밴드갭(band gap), 전기적 특성, 계면 특성 등이 달라질 수 있으므로, 코어의 선택 및 이에 결합된 서브(sub)-치환체의 조합도 아주 중요하며, 특히 각 유기물층 간의 에너지 level 및 T1 값, 물질의 고유특성(mobility, 계면특성 등) 등이 최적의 조합을 이루었을 때 긴 수명과 높은 효율을 동시에 달성할 수 있다.
- [39] 이미 설명한 것과 같이, 최근 유기 전기 발광소자에 있어 정공수송층에서의 발광 문제를 해결하기 위해서는 정공수송층과 발광층 사이에 발광보조층이 형성하는 것이 바람직하며, 각각의 발광층(R, G, B)에 따른 서로 다른 발광 보조층의 개발이 필요한 시점이다. 한편, 발광보조층의 경우 정공수송층 및 발광층(호스트)과의 상호관계를 파악해야하므로 유사한 코어를 사용하더라도 사용되는 유기물층이 달라지면 그 특징을 유추하기는 매우 어려울 것이다.
- [40] 따라서, 본 발명에서는 화학식 1로 표시되는 화합물을 사용하여 발광층 또는 발광보조층을 형성함으로써 각 유기물층 간의 에너지 레벨(level) 및 T1 값, 물질의 고유특성(mobility, 계면특성 등) 등을 최적화하여 유기전기소자의 수명 및 효율을 동시에 향상시킬 수 있다.
- [41] 본 발명의 일 실시예에 따른 유기전기발광소자는 PVD(physical vapor deposition) 방법을 이용하여 제조될 수 있다. 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.
- [42] 또한, 유기물층은 다양한 고분자 소재를 사용하여 증착법이 아닌 용액 공정 또는 솔벤트 프로세스(solvent process), 예컨대 스펀 코팅, 딥 코팅, 닉터 블레이딩, 스크린 프린팅, 잉크젯 프린팅 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.
- [43] 본 발명에 따른 유기전기소자는 사용되는 재료에 따라 전면 발광형, 후면 발광형 또는 양면 발광형일 수 있다.
- [44] 또한, 본 발명에 따른 유기전기소자는 유기전기발광소자(OLED), 유기태양전지, 유기감광체(OPC), 유기트랜지스터(유기 TFT), 단색 또는 백색

조명용 소자 중 하나일 수 있다.

- [45] 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 이동통신 단말기, PDA, 전자사전, PMP, 리모콘, 네비게이션, 게임기, 각종 TV, 각종 컴퓨터 등 모든 전자장치를 포함한다.
- [46] 이하, 본 발명의 일측면에 따른 화합물에 대하여 설명한다
- [47] 이하, 본 발명의 일측면에 따른 화합물에 대하여 설명한다.
- [48] 본 발명의 일측면에 따른 화합물은 하기 화학식 1로 표시된다.
- [49] 화학식 1



- [50] 상기 화학식 1에서,
- [51] $R_1 \sim R_4$ 및 $R_{11} \sim R_{14}$ 는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 할로겐, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴기, 플루오렌일기, $C_3 \sim C_{60}$ 의 지방족고리와 $C_6 \sim C_{60}$ 의 방향족고리의 융합고리기, O, N, S, Si 및 P 중 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 $C_2 \sim C_{60}$ 의 헤테로 고리기, $-L-N(R')(R'')$, $C_1 \sim C_{50}$ 의 알킬기, $C_2 \sim C_{20}$ 의 알켄일기, $C_1 \sim C_{30}$ 의 알콕시기 및 $C_6 \sim C_{30}$ 의 아릴옥시기로 이루어진 군에서 선택된다.
- [52] R_{21} 과 R_{22} 는 i) 서로 독립적으로, 수소, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴기, 플루오렌일기, $C_3 \sim C_{60}$ 의 지방족고리와 $C_6 \sim C_{60}$ 의 방향족고리의 융합고리기, O, N, S, Si 및 P 중 적어도 하나의 헤�테로원자를 포함하는 $C_2 \sim C_{60}$ 의 헤�테로 고리기 및 $-L-N(R')(R'')$ 로 이루어진 군에서 선택되거나, 또는 ii) 서로 결합하여 단환 또는 다환고리를 형성한다.
- [53] 단, R_{21} 과 R_{22} 가 서로 결합하여 고리를 형성하는 경우에 한하여 $R_1 \sim R_4$ 와 $R_{11} \sim R_{14}$ 가 동시에 모두 수소일 수 있으며, R_{21} 과 R_{22} 가 서로 결합하여 고리를 형성하지 않는 경우에는 $R_1 \sim R_4$ 중 적어도 하나가 수소가 아니면서 동시에 $R_{11} \sim R_{14}$ 중 적어도 하나가 수소가 아니다.
- [54] R_{21} 과 R_{22} 가 서로 결합하여 고리를 형성하는 경우, 이들이 서로 결합하여 고리를 형성한다는 자체가 중요하므로, 이들이 어떤 치환기이고 어떤 반응을 통해 고리가 형성되는지에 의해 본 발명의 권리범위가 제한되지는 않는다.
- [55] R_{21} 과 R_{22} 가 서로 결합하여 형성된 고리는 방향족고리 또는 헤�테로 원자를 적어도 하나 포함하는 헤�테로고리일 수 있을 뿐만 아니라 방향족

고리가 융합된 형태일 수도 있다. 예시적으로, R₂₁과 R₂₂가 서로 결합하여 벤젠, 나프탈렌, 페난트렌 등과 같은 방향족고리를 형성할 수 있는데, 방향족고리의 핵탄소수는 6 내지 60인 것이 바람직하다. 또한, R₂₁과 R₂₂가 서로 결합하여 싸이오펜, 퓨란, 피리딘, 인돌, 쿠놀린 등과 같은 헤테로고리를 형성할 수 있는데, 이때 핵탄소수는 2 내지 60일 수 있다. 또한, 다환고리인 경우 서로 융합된(fused) 형태일 수도 있고 복수개의 환이 서로 융합되지 않은 형태일 수도 있으며, 융합된 형태와 비융합된 형태가 혼합된 환일 수도 있다.

[56] 상기 화학식 1에서, X와 Y는 서로 독립적으로, S, O 또는 SiR₃₁R₃₂이다. 여기서, R₃₁과 R₃₂는 서로 독립적으로 수소, C₆~C₆₀의 아릴기, O, N, S, Si 및 P 중 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C₂~C₆₀의 헤테로고리기, 또는 C₁~C₅₀의 알킬기일 수 있다. 한편, 상기 화학식에서 m과 n 각각은 0 또는 1일 수 있으나, 단 m과 n이 모두 0인 경우는 제외한다. m+n=1 이상의 정수이어야 하므로, X, Y 중 적어도 하나는 반드시 존재해야 한다.

[57] L은 단일결합; C₆~C₆₀의 아릴렌기; 플루오렌일렌기; O, N, S, Si 및 P 중 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C₂~C₆₀의 헤테로고리기; 및 2가의 지방족 탄화수소기;로 이루어진 군에서 선택된다. 이때, 아릴렌기, 플루오렌일렌기, 헤�테로고리기 및 지방족 탄화수소기는 니트로기, 시아노기, 할로겐기, C₁~C₂₀의 알킬기, C₆~C₂₀의 아릴기, C₂~C₂₀의 헤�테로고리기, C₁~C₂₀의 알콕시기 및 아미노기로 이루어진 군에서 선택되는 하나 이상의 치환기로 치환될 수 있다.

[58] Ar은 O, N, S, Si 및 P 중 적어도 하나의 헤�테로원자를 포함하는 C₂~C₆₀의 헤�테로고리기, C₆~C₆₀의 아릴기 또는 -N(R')(R")이다.

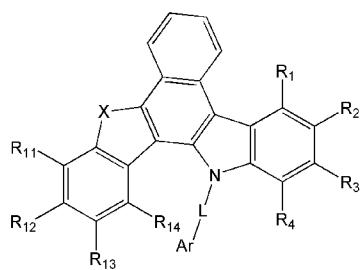
[59] 한편, R₁~R₄ 및 R₁₁~R₁₄, R₂₁과 R₂₂, Ar 등에서 정의된 상기 R'과 R"은 서로 독립적으로 O, N, S, Si 및 P 중 적어도 하나의 헤�테로원자를 포함하는 C₂~C₂₀의 헤�테로고리기, C₆~C₂₀의 아릴기 또는 플루오렌일기일 수 있다.

[60] 한편, R₁~R₄, R₁₁~R₁₄, R₂₁, R₂₂, R₃₁, R₃₂, Ar, R' 및 R"이 아릴기인 경우, 이는 중수소, 할로겐, 실란기, 봉소기, 게르마늄기, 시아노기, 니트로기, C₁~C₂₀의 알킬싸이오기, C₁~C₂₀의 알콕실기, C₁~C₂₀의 알킬기, C₂~C₂₀의 알켄일기(alkenyl), C₂~C₂₀의 알카인일기(alkynyl), C₆~C₂₀의 아릴기, 중수소로 치환된 C₆~C₂₀의 아릴기, C₂~C₂₀의 헤�테로고리기, C₃~C₂₀의 시클로알킬기, C₇~C₂₀의 아릴알킬기 및 C₈~C₂₀의 아릴알켄일기로 이루어진 군에서 선택된 하나 이상의 치환기로 치환될 수 있고,

[61] 상기 R₁~R₄, R₁₁~R₁₄, R₂₁, R₂₂, R₃₁, R₃₂, Ar, R' 및 R"가 헤�테로고리기인 경우, 이는 중수소, 할로겐, 실란기, 시아노기, 니트로기, C₁~C₂₀의 알콕실기, C₁~C₂₀의 알킬기, C₂~C₂₀의 알켄일기(alkenyl), C₆~C₂₀의 아릴기, 중수소로 치환된 C₆~C₂₀의 아릴기, C₂~C₂₀의 헤�테로고리기, C₃~C₂₀의 시클로알킬기, C₇~C₂₀의 아릴알킬기 및 C₈~C₂₀의 아릴알켄일기로 이루어진 군에서 선택된 하나 이상의 치환기로 치환될 수 있고,

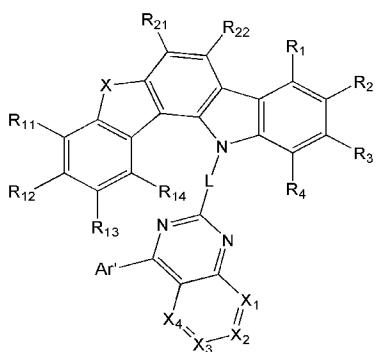
[62] 상기 R₁~R₄, R₁₁~R₁₄, R₂₁, R₂₂, R' 및 R"가 플루오렌일기인 경우, 이는 중수소,

- 할로젠, 실란기, 시아노기, C₁~C₂₀의 알킬기, C₂~C₂₀의 알켄일기(alkenyl), C₆~C₂₀의 아릴기, 중수소로 치환된 C₆~C₂₀의 아릴기, C₂~C₂₀의 헤테로고리기 및 C₃~C₂₀의 시클로알킬기로 이루어진 군에서 선택된 하나 이상의 치환기로 치환될 수 있고,
- [63] 상기 R₁~R₄, R₁₁~R₁₄, R₂₁ 및 R₂₂의 융합고리기인 경우, 이는 중수소, 할로젠, 실란기, 봉소기, 게르마늄기, 시아노기, 니트로기, C₁~C₂₀의 알킬싸이오기, C₁~C₂₀의 알콕실기, C₁~C₂₀의 알킬기, C₂~C₂₀의 알켄일기(alkenyl), C₆~C₂₀의 알카인일기(alkynyl), C₆~C₂₀의 아릴기, 중수소로 치환된 C₆~C₂₀의 아릴기, C₂~C₂₀의 헤테로고리기, C₃~C₂₀의 시클로알킬기, C₇~C₂₀의 아릴알킬기 및 C₈~C₂₀의 아릴알켄일기로 이루어진 군에서 선택된 하나 이상의 치환기로 치환될 수 있고,
- [64] 상기 R₁~R₄, R₁₁~R₁₄, R₃₁ 및 R₃₂가 알킬기인 경우, 이는 할로젠, 실란기, 봉소기, 시아노기, C₁~C₂₀의 알콕실기, C₁~C₂₀의 알킬기, C₂~C₂₀의 알켄일기(alkenyl), C₆~C₂₀의 아릴기, 중수소로 치환된 C₆~C₂₀의 아릴기, C₂~C₂₀의 헤�테로고리기, C₇~C₂₀의 아릴알킬기 및 C₈~C₂₀의 아릴알켄일기로 이루어진 군에서 선택된 하나 이상의 치환기로 치환될 수 있고,
- [65] 상기 R₁~R₄ 및 R₁₁~R₁₄가 알켄일기인 경우, 이는 중수소, 할로젠, 실란기, 시아노기, C₁~C₂₀의 알콕실기, C₁~C₂₀의 알킬기, C₂~C₂₀의 알켄일기(alkenyl), C₆~C₂₀의 아릴기, 중수소로 치환된 C₆~C₂₀의 아릴기, C₂~C₂₀의 헤테로고리기, C₃~C₂₀의 시클로알킬기, C₇~C₂₀의 아릴알킬기 및 C₈~C₂₀의 아릴알켄일기로 이루어진 군에서 선택된 하나 이상의 치환기로 치환될 수 있고,
- [66] 상기 R₁~R₄ 및 R₁₁~R₁₄가 알콕실기인 경우, 이는 중수소, 할로젠, 실란기, C₁~C₂₀의 알킬기, C₆~C₂₀의 아릴기, 중수소로 치환된 C₆~C₂₀의 아릴기, C₂~C₂₀의 헤�테로고리기 및 C₃~C₂₀의 시클로알킬기로 이루어진 군에서 선택된 하나 이상의 치환기로 치환될 수 있고,
- [67] 상기 R₁~R₄ 및 R₁₁~R₁₄가 아릴옥시기인 경우, 이는 중수소, 실란기, 시아노기, C₁~C₂₀의 알킬기, C₆~C₂₀의 아릴기, 중수소로 치환된 C₆~C₂₀의 아릴기, C₂~C₂₀의 헤테로고리기 및 C₃~C₂₀의 시클로알킬기로 이루어진 군에서 선택된 하나 이상의 치환기로 치환될 수 있다.
- [68] 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 하기 화학식 중 하나로 표시될 수 있다.
- [69] <화학식 2>
- [70]
-
- [71] <화학식 3>
- [72]



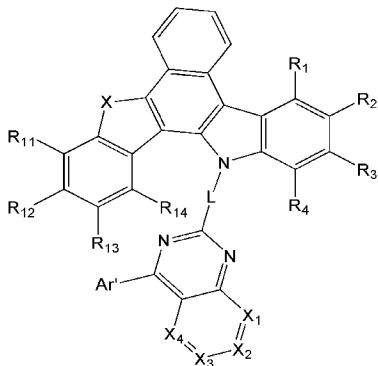
[73] <화학식 4>

[74]



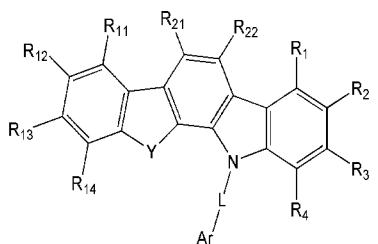
[75] <화학식 5>

[76]



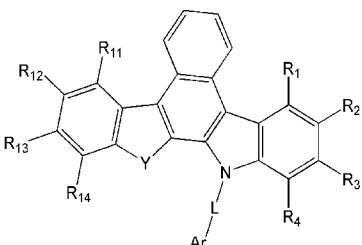
[77] <화학식 6>

[78]



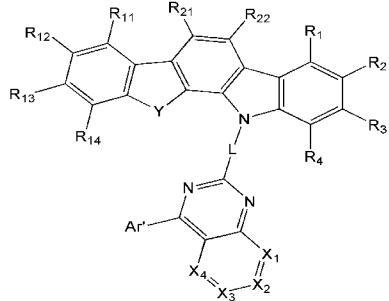
[79] <화학식 7>

[80]



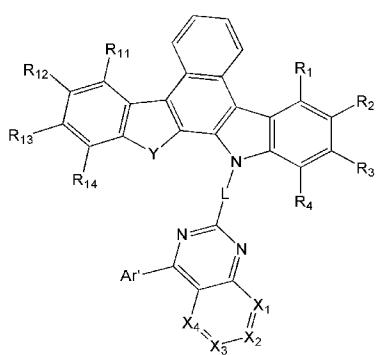
[81] <화학식 8>

[82]



[83] <화학식 9>

[84]

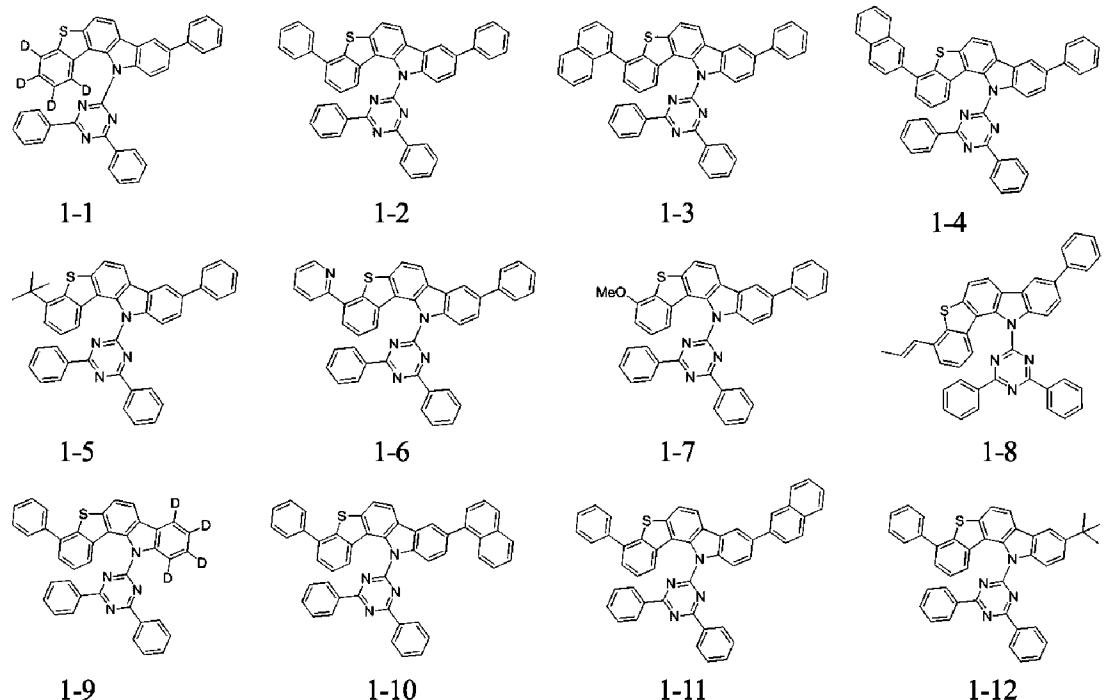


[85] 상기 화학식 2 내지 9에서, Ar'은 수소, 중수소, 할로겐기, C₁~C₂₀의 알킬기, C₂~C₂₀의 알케닐기, C₁~C₂₀의 알콕시기, -L-N(R')(R''), C₆~C₂₀의 아릴기, 중수소로 치환된 C₆~C₂₀의 아릴기, C₇~C₂₀의 아릴알킬기, C₈~C₂₀의 아릴알케닐기, C₂~C₂₀의 헤테로 고리기, 니트릴기 및 아세틸렌기로 이루어진 군에서 선택되며,

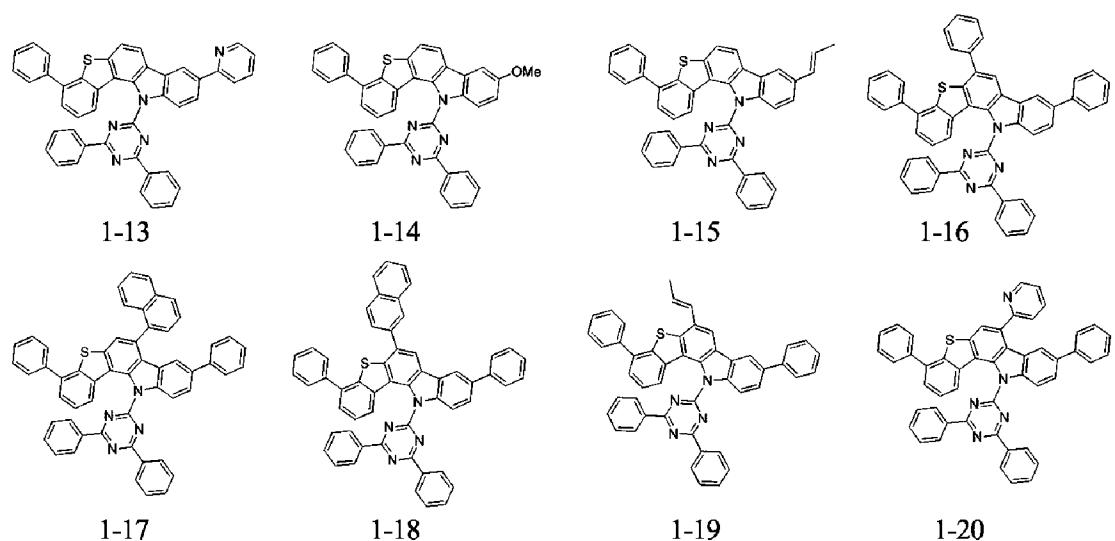
[86] X₁~X₄는 CR₄₁ 또는 N이다. 이 때, R₄₁은 수소, 중수소, C₆~C₂₀의 아릴기 또는 C₂~C₂₀의 헤테로 고리기일 수 있으며, R₁~R₄, R₁₁~R₁₄, R₂₁, R₂₂, R', R'', X, Y, L 및 Ar은 화학식 1에서 정의된 것과 같다,

[87] 보다 구체적으로, 상기 화학식 1 또는 2로 표시되는 화합물은 하기 화합물 중 하나일 수 있다.

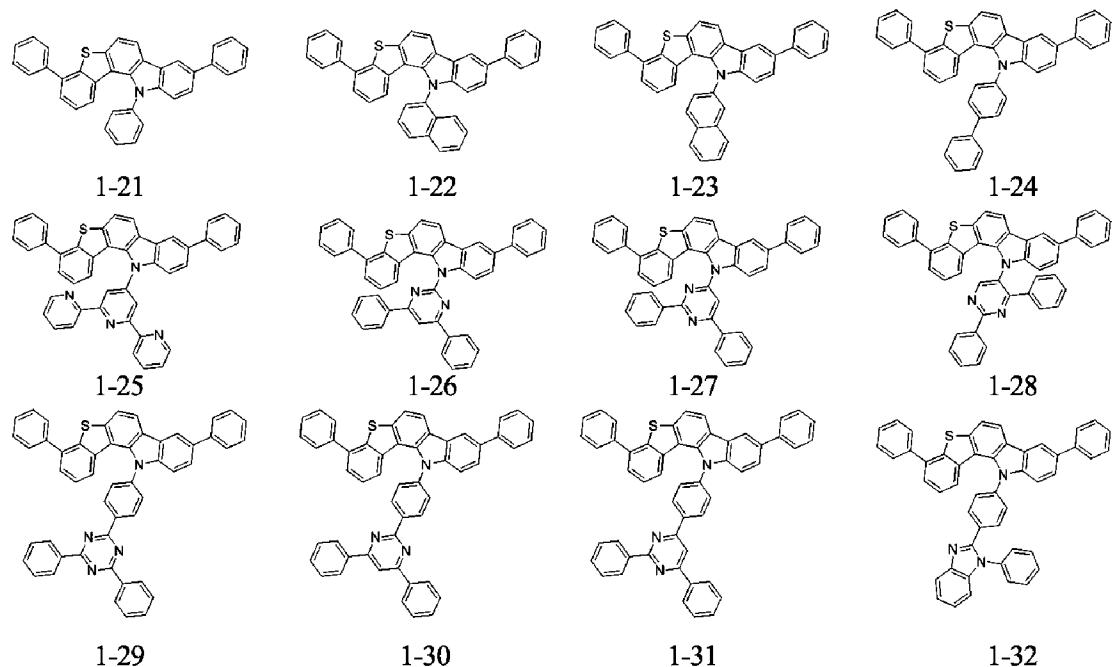
[88]



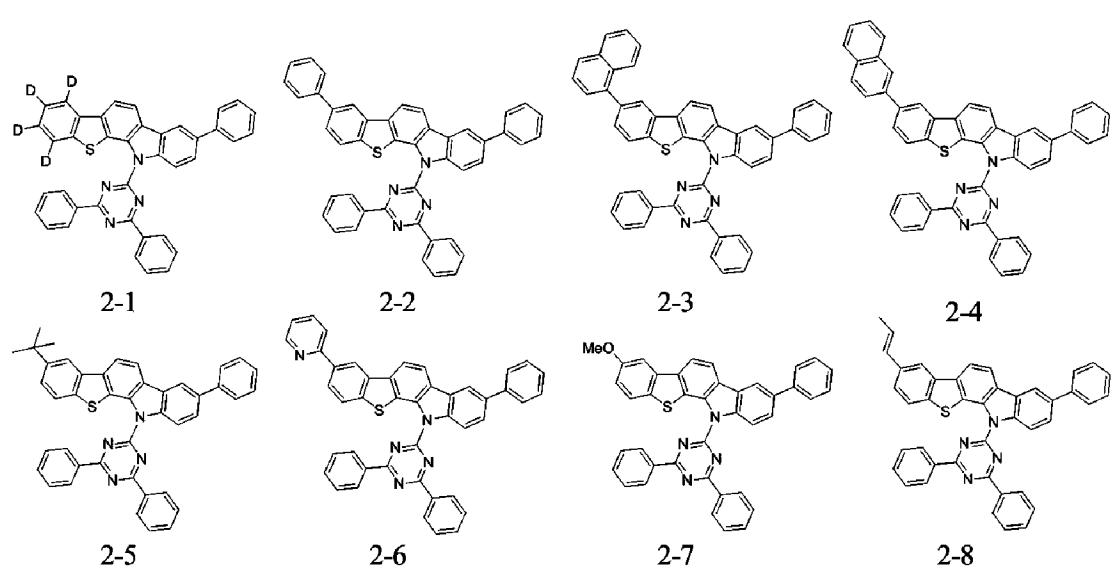
[89]



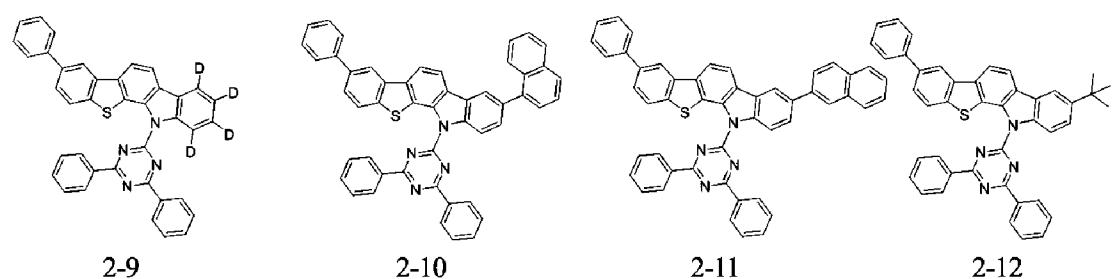
[90]



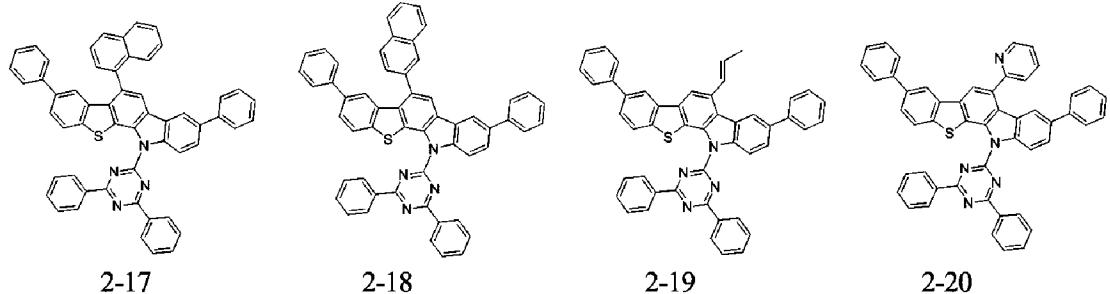
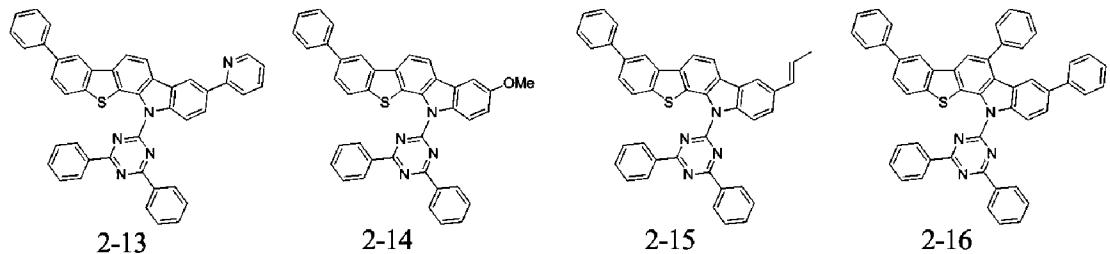
[91]



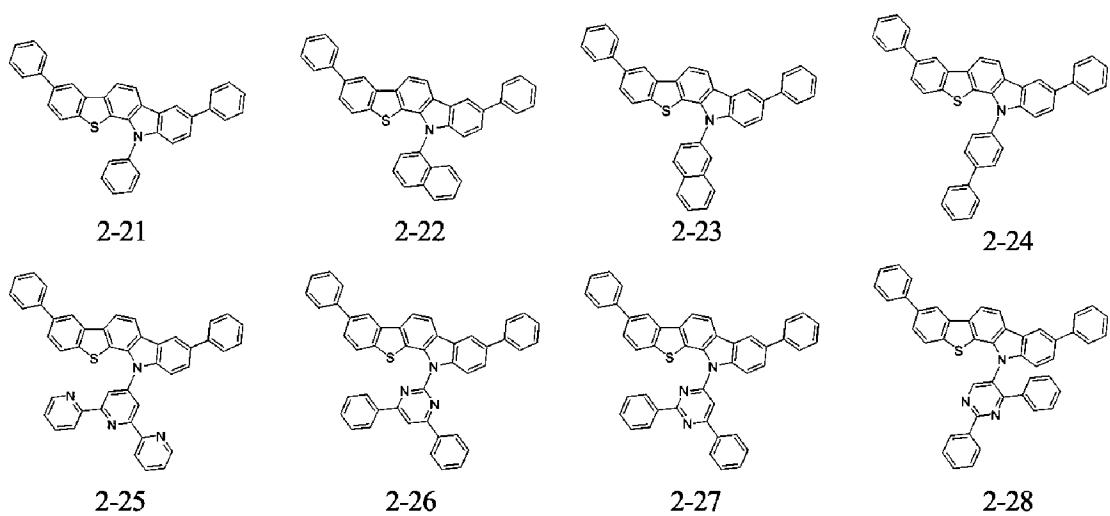
[92]



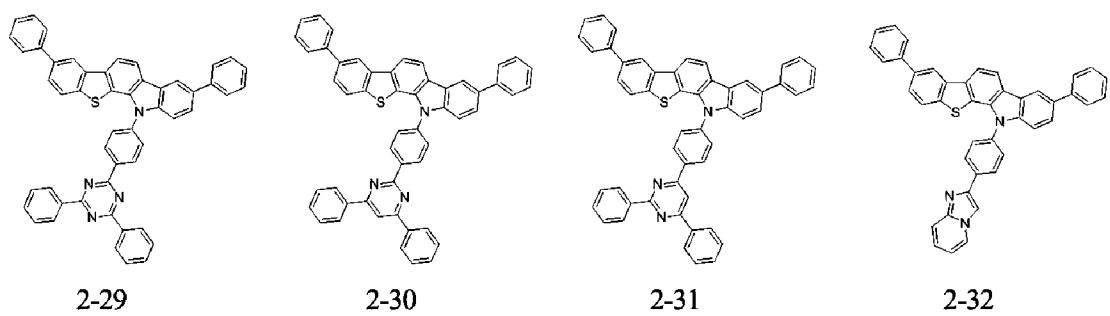
[93]



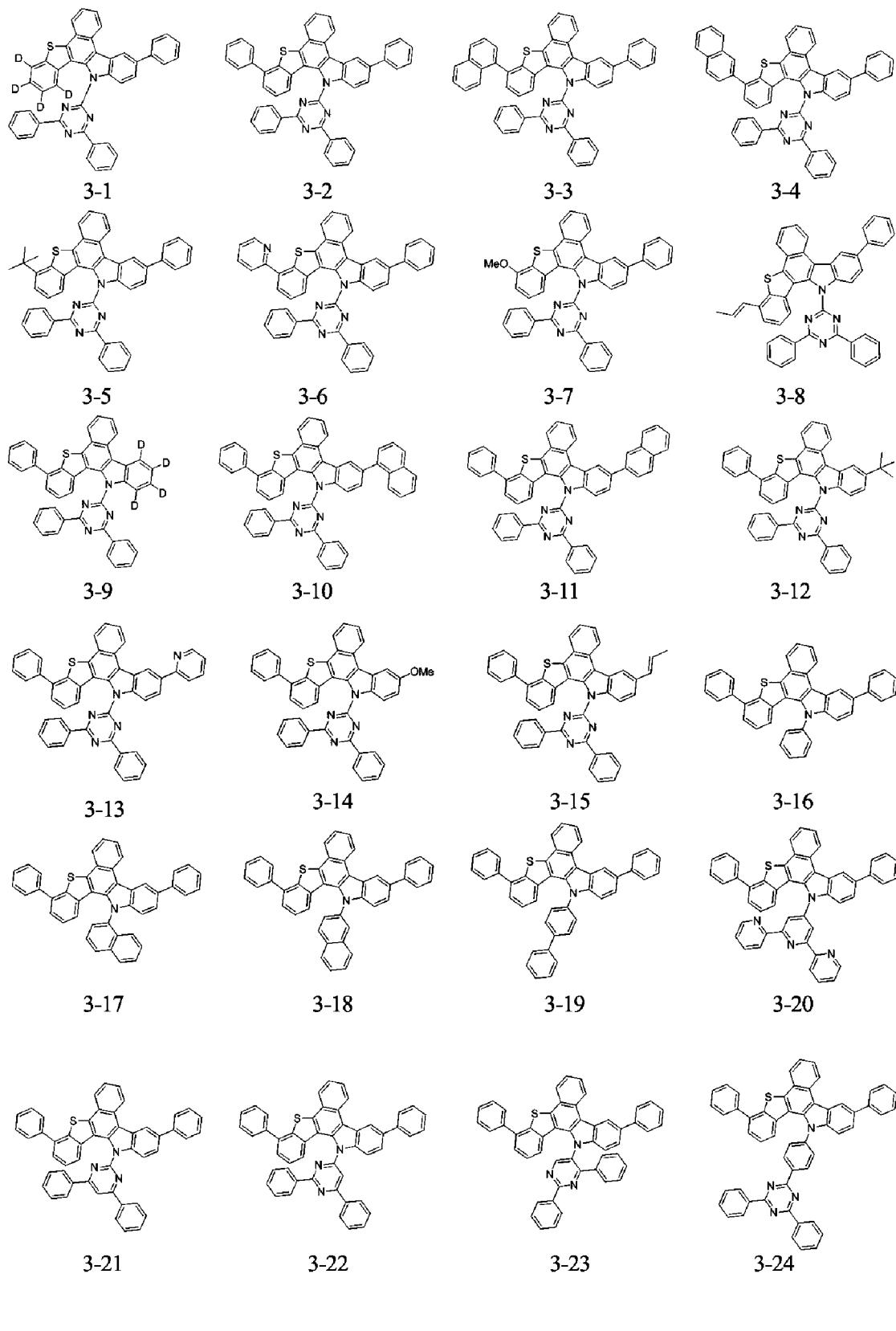
[94]

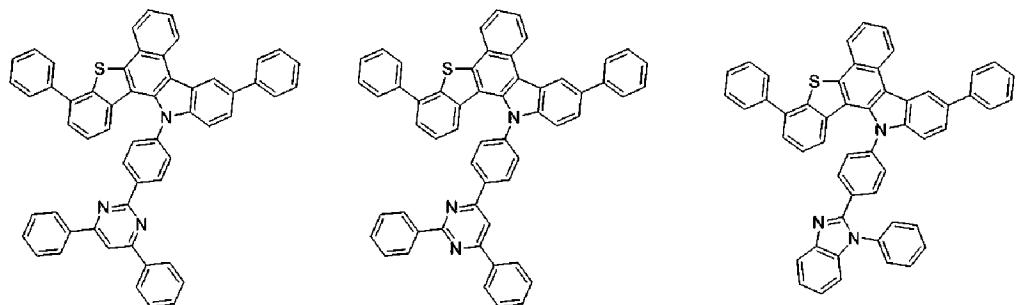


[95]



[96]

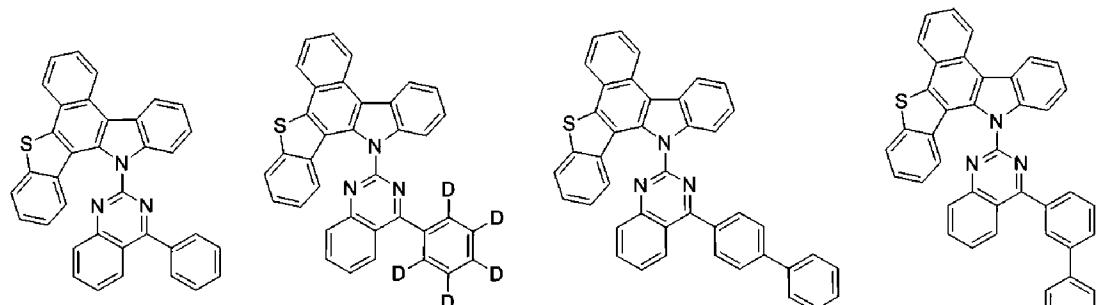




3-25

3-26

3-27



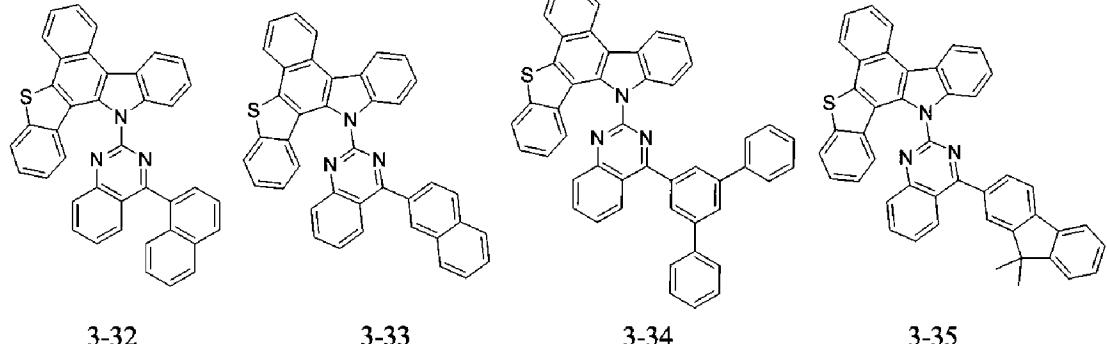
3-28

3-29

3-30

3-31

[100]

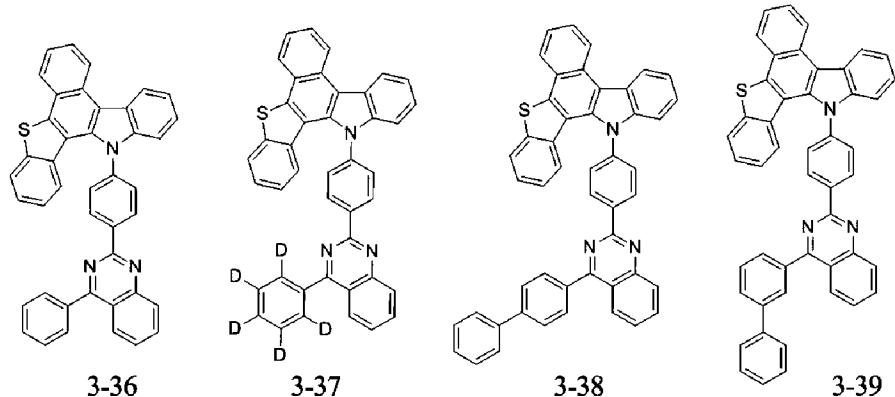


3-32

3-33

3-34

3-35



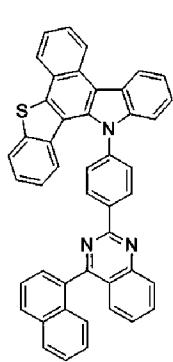
3-36

3-37

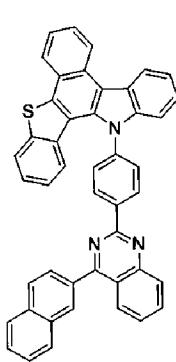
3-38

3-39

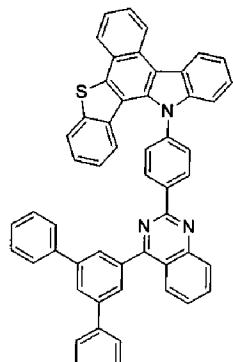
[101]



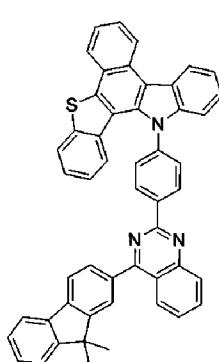
3-40



3-41

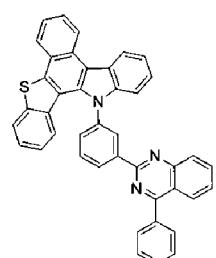


3-42

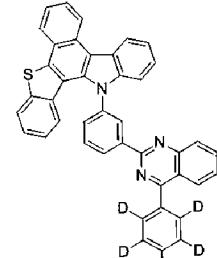


3-43

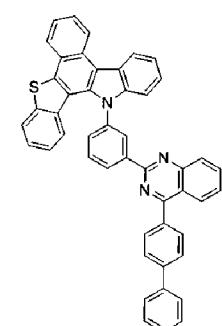
[102]



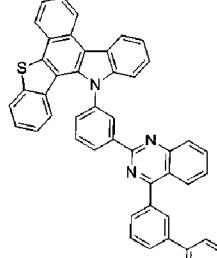
3-44



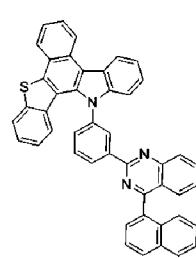
3-45



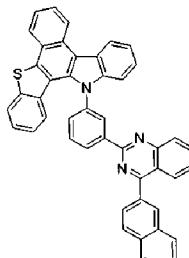
3-46



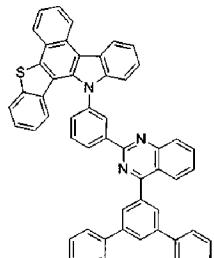
3-47



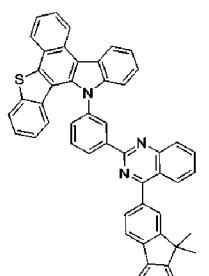
3-48



3-49

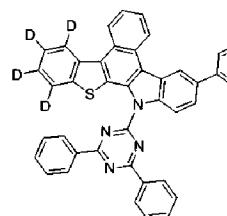


3-50

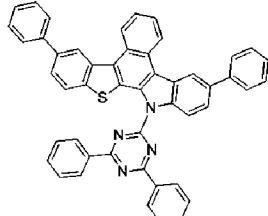


3-51

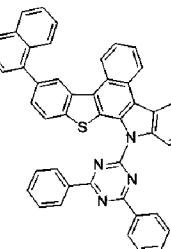
[103]



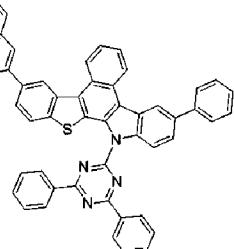
4-1



4-2

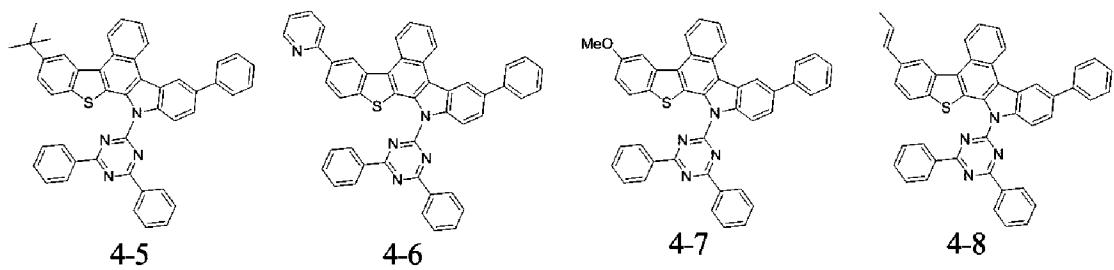


4-3

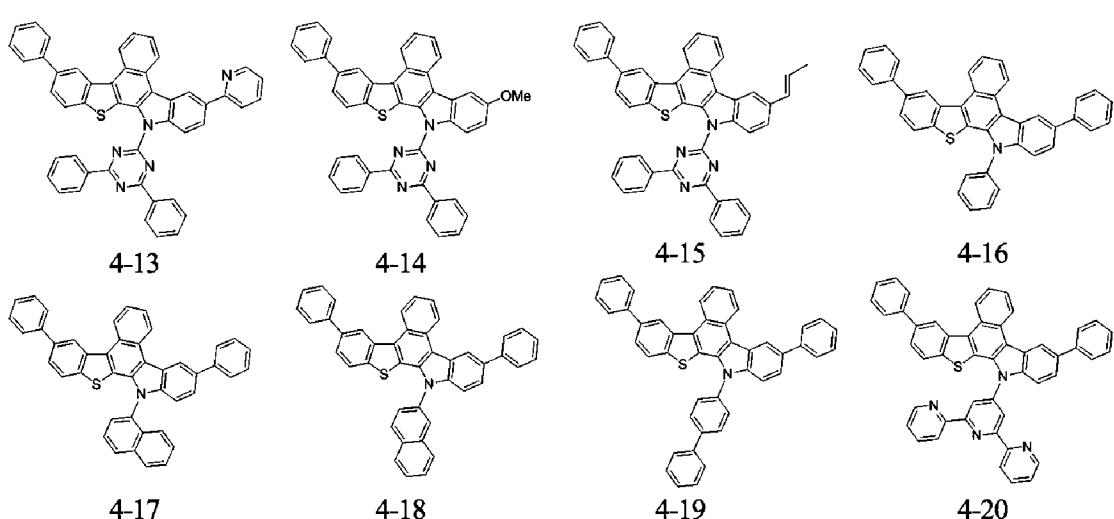


4-4

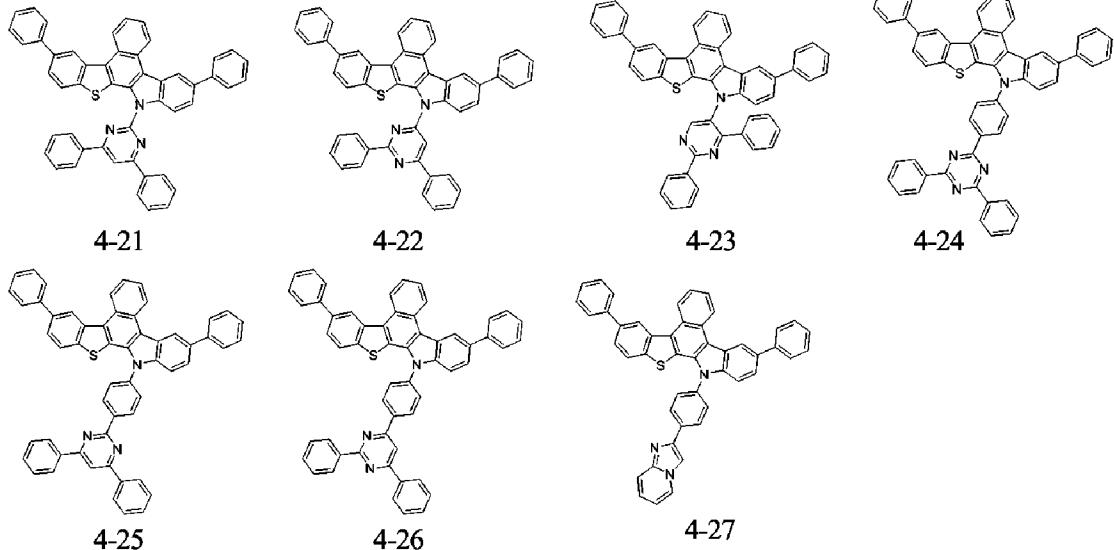
[104]



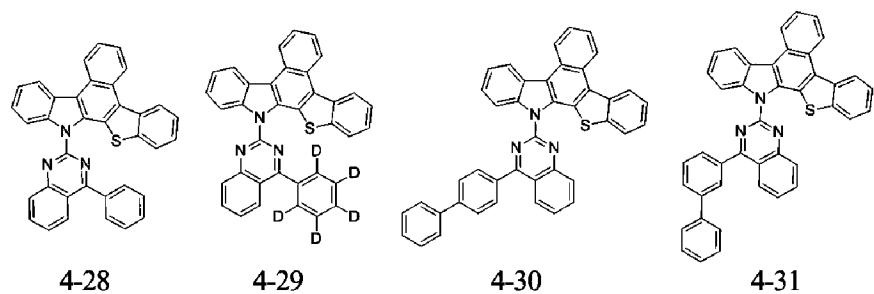
[105]



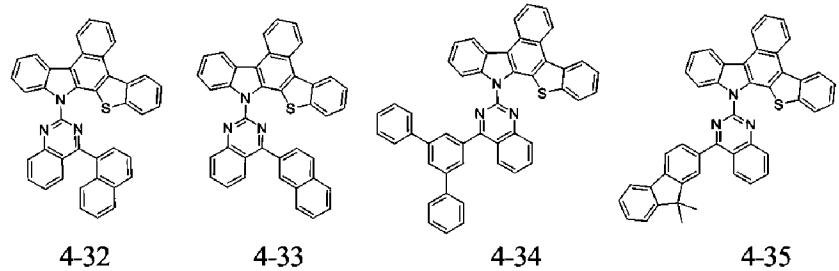
[106]



[107]

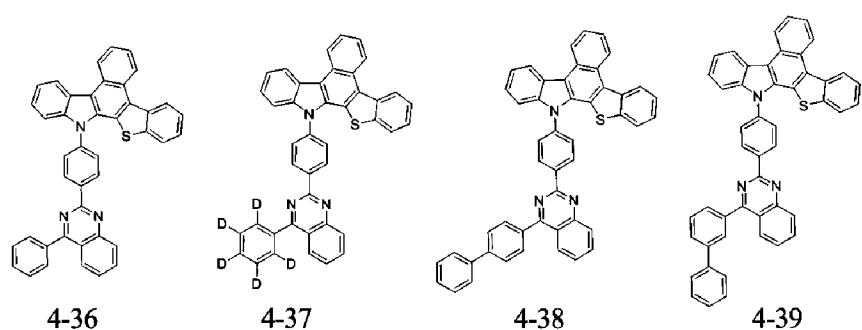


4-28 4-29 4-30 4-31

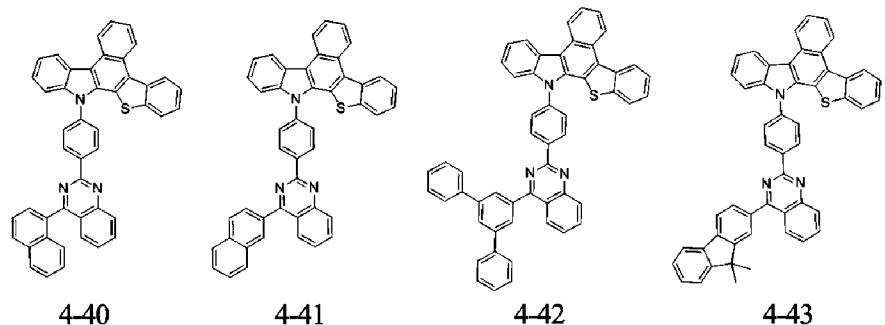


4-32 4-33 4-34 4-35

[108]

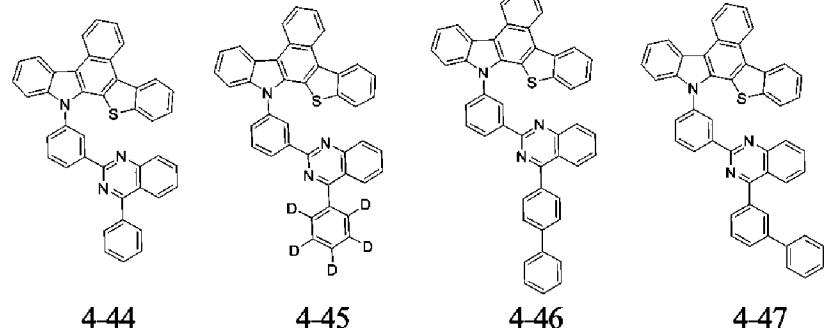


4-36 4-37 4-38 4-39



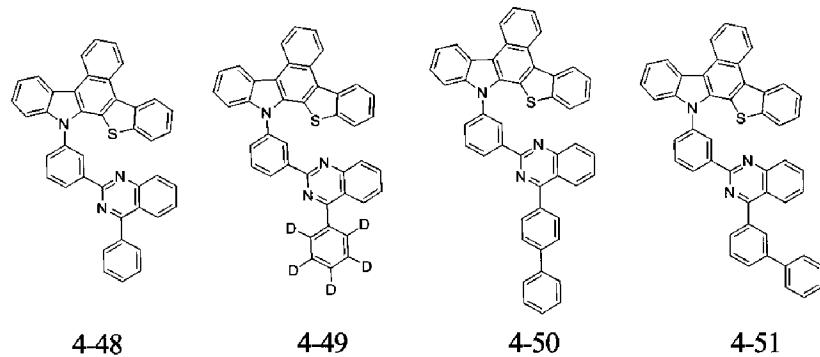
4-40 4-41 4-42 4-43

[109]

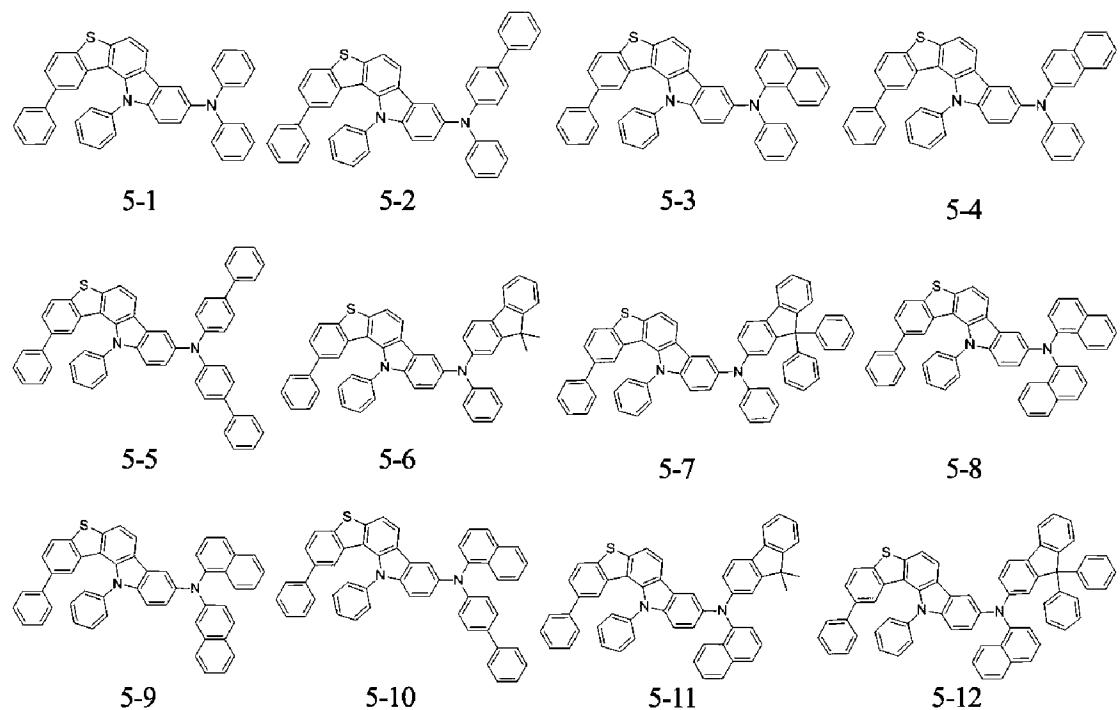


4-44 4-45 4-46 4-47

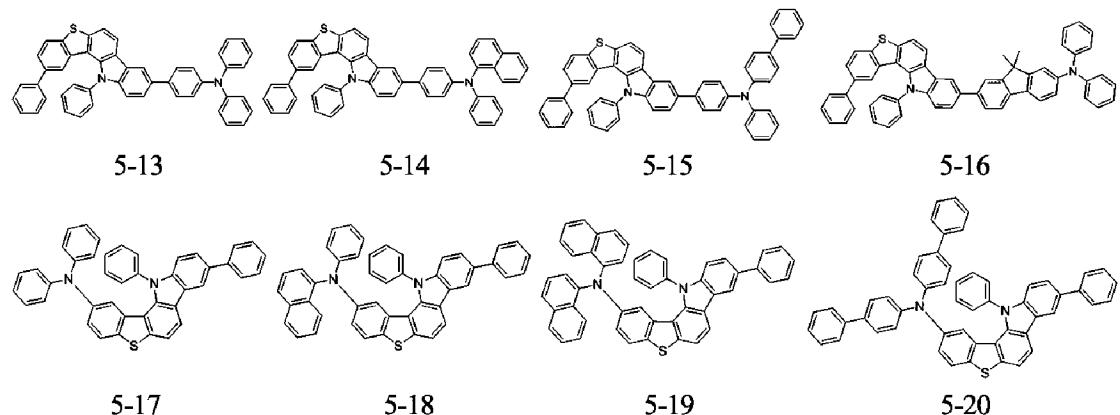
[110]



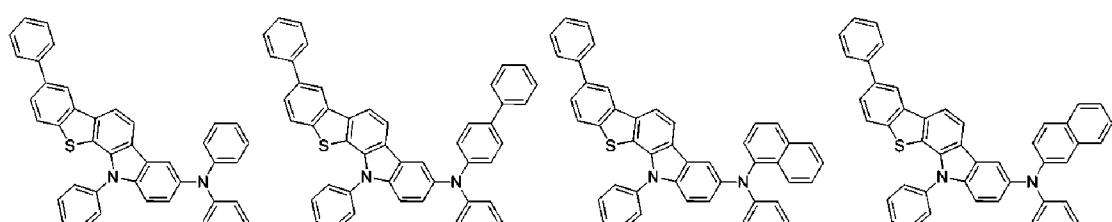
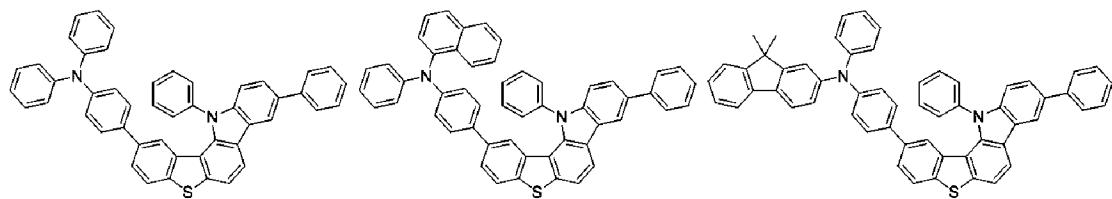
[111]



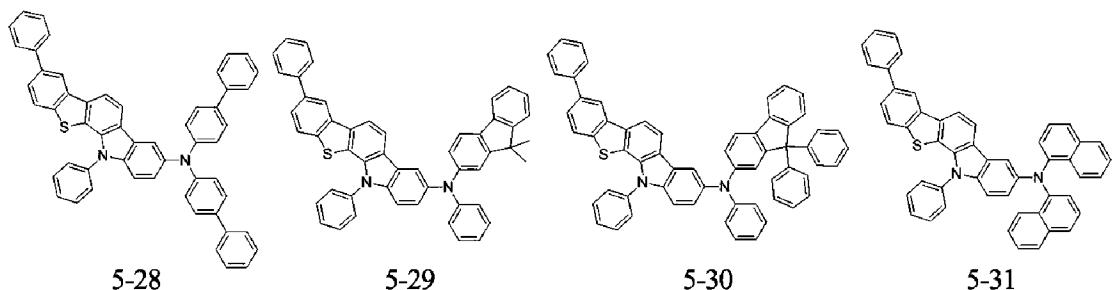
[112]



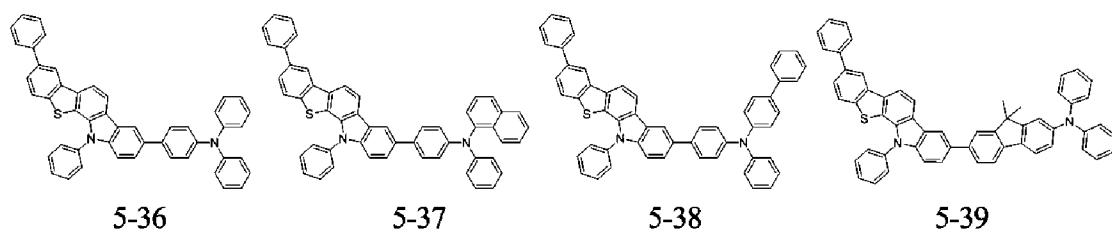
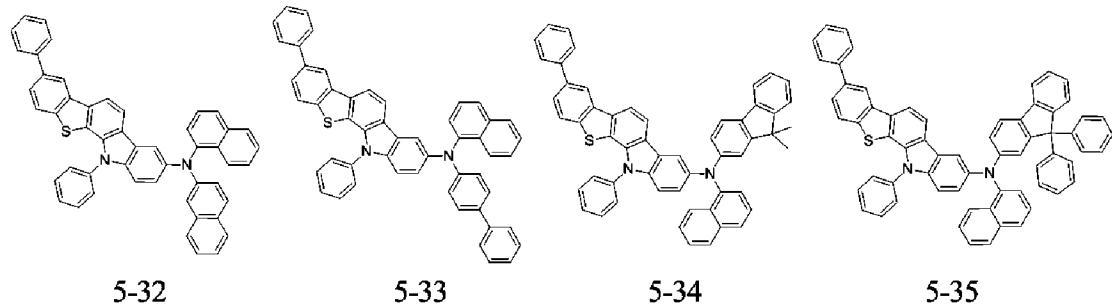
[113]



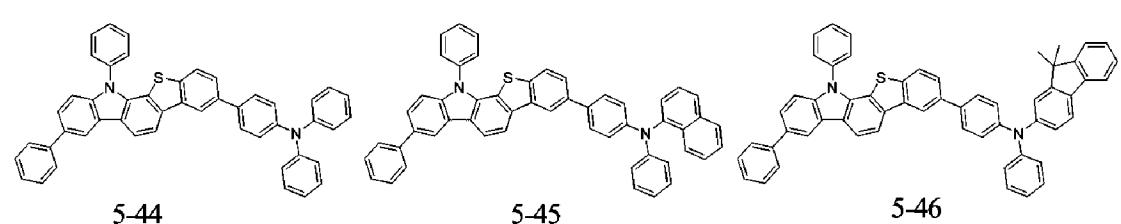
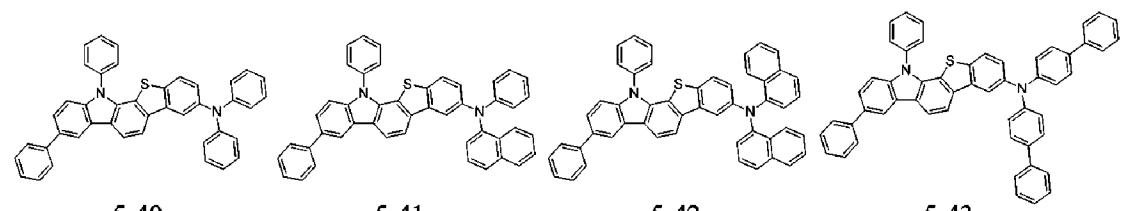
[114]



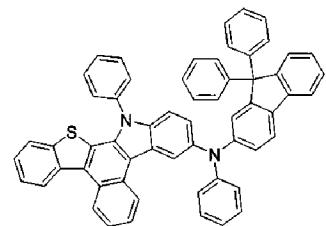
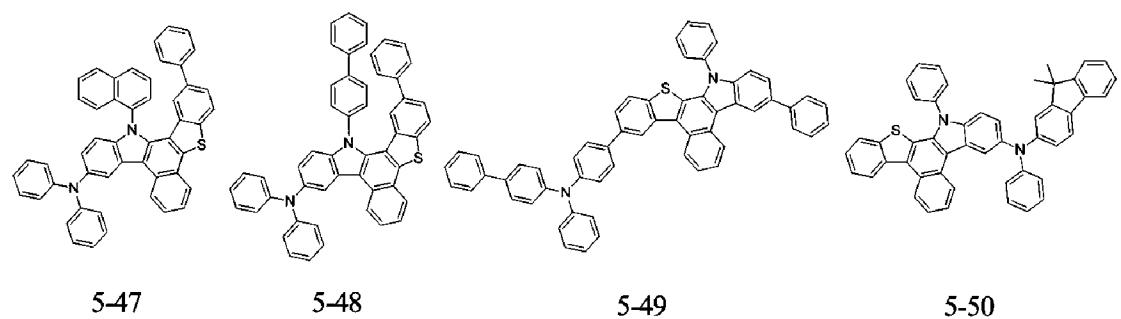
[115]



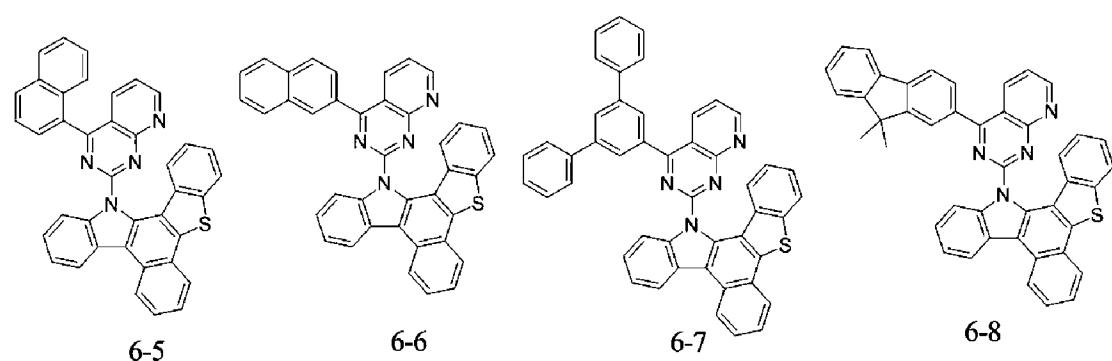
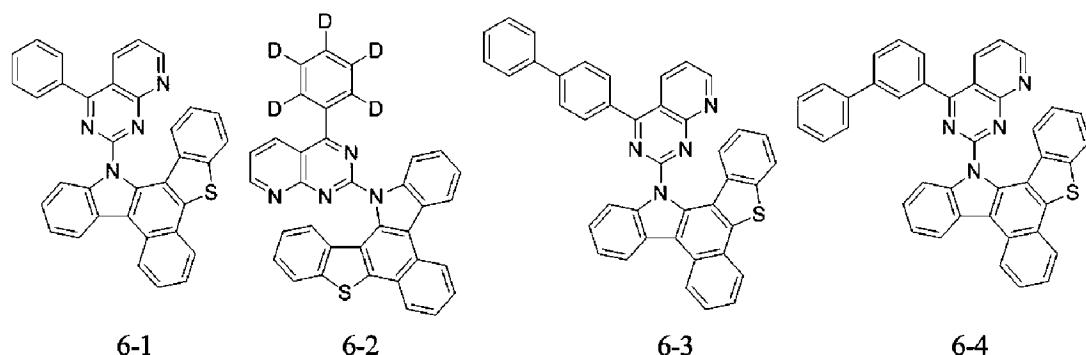
[116]



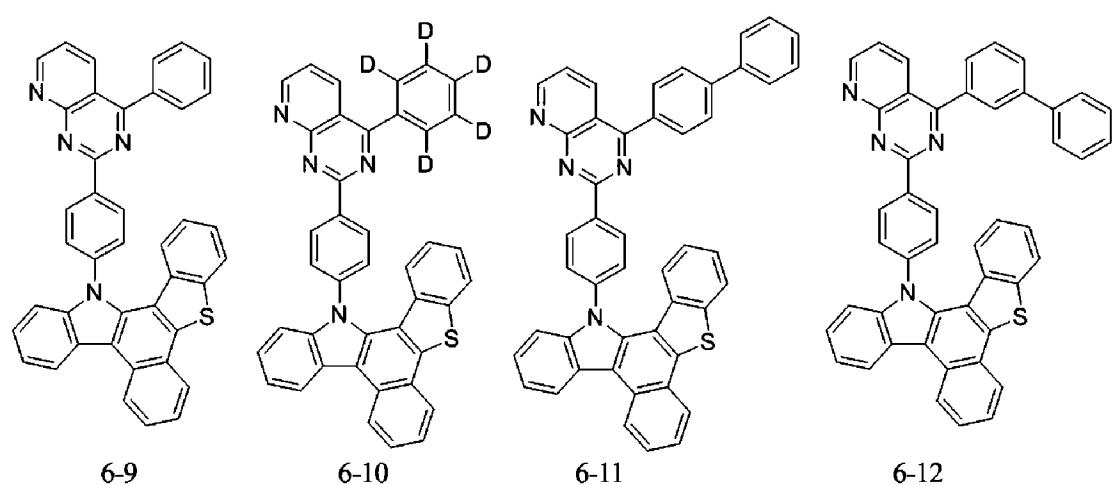
[117]



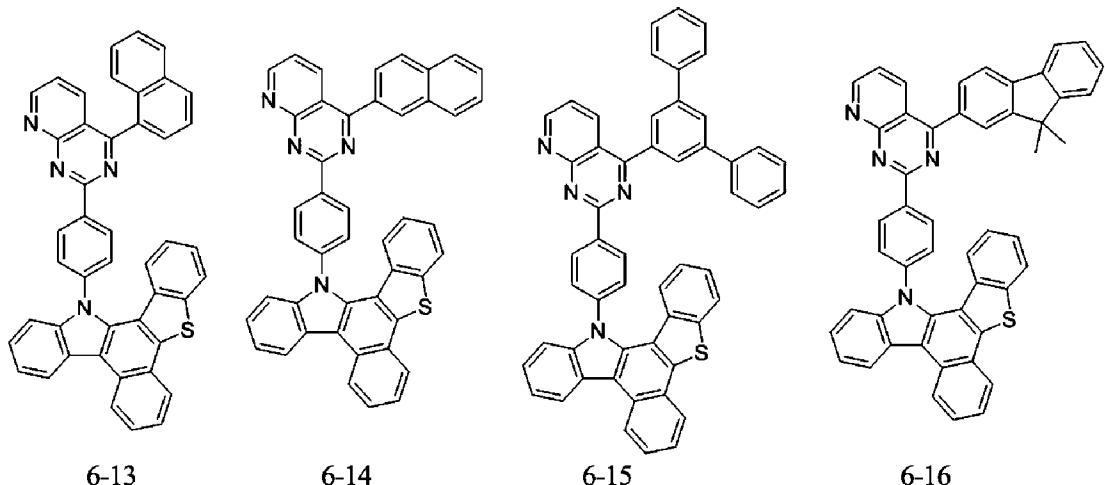
[118]



[119]



[120]



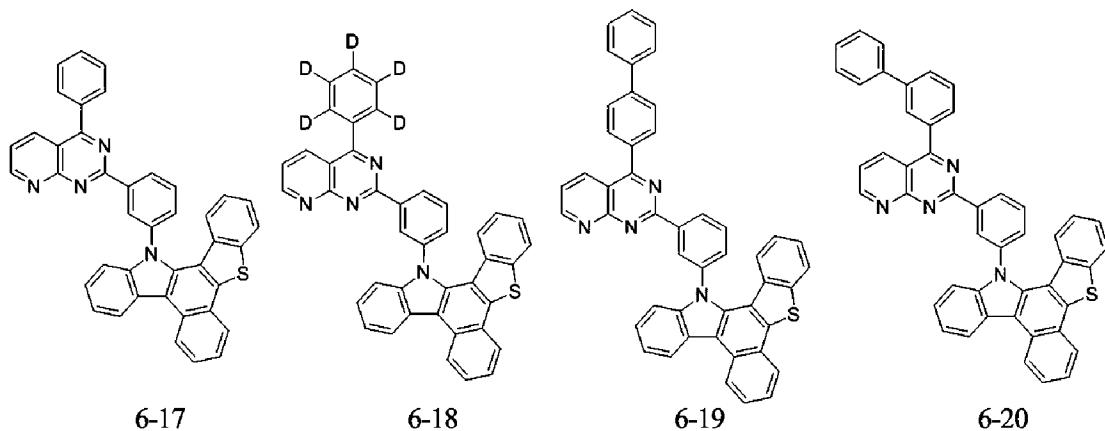
6-13

6-14

6-15

6-16

[121]



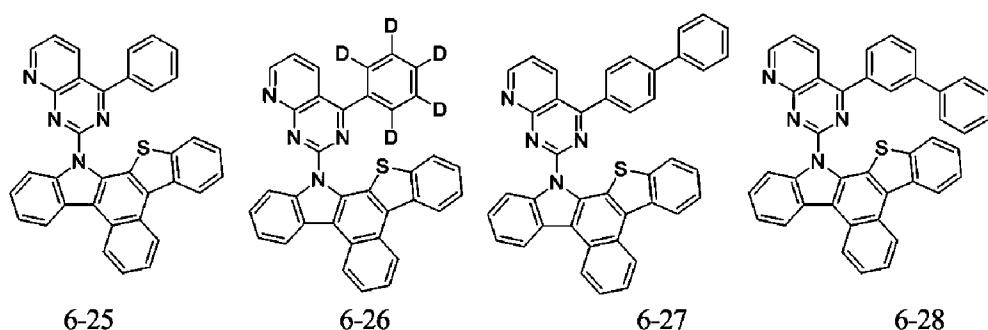
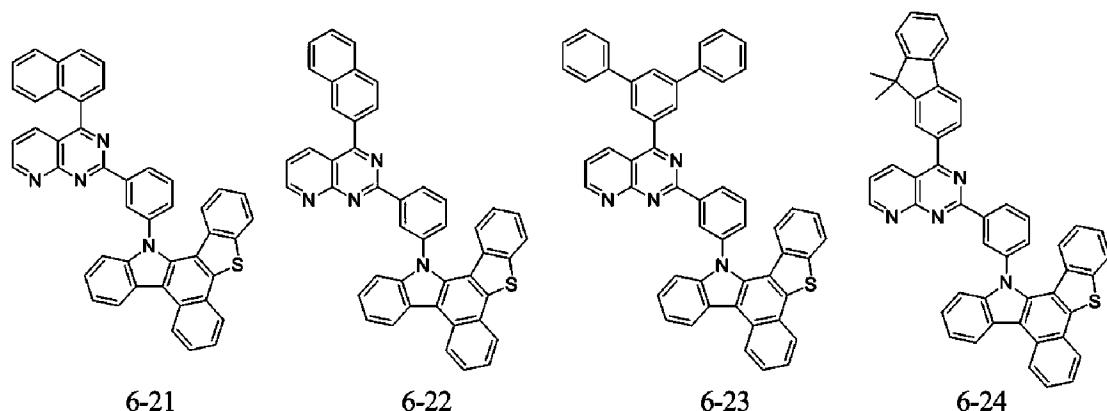
6-17

6-18

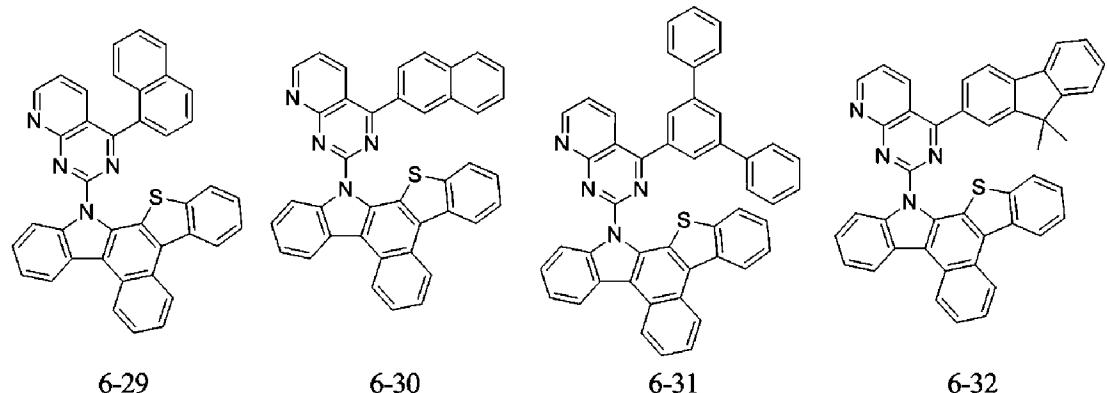
6-19

6-20

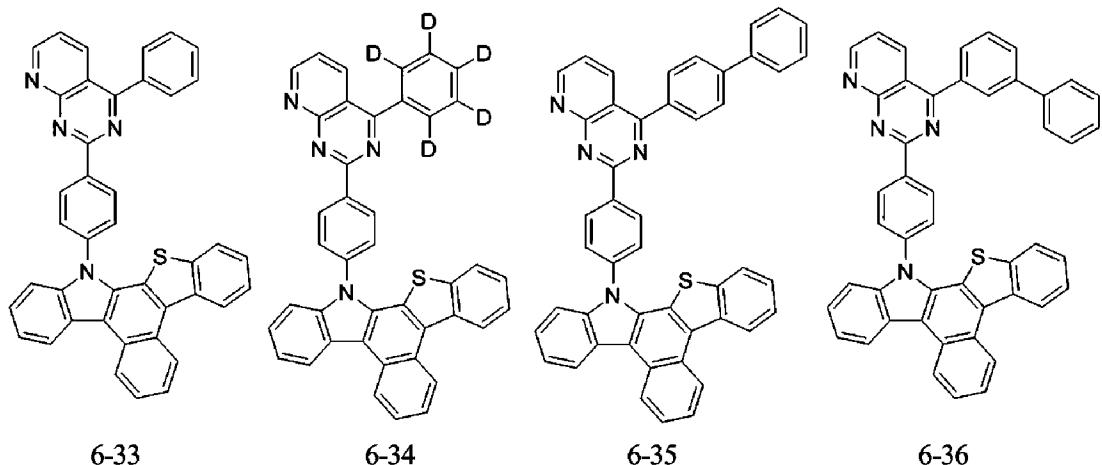
[122]



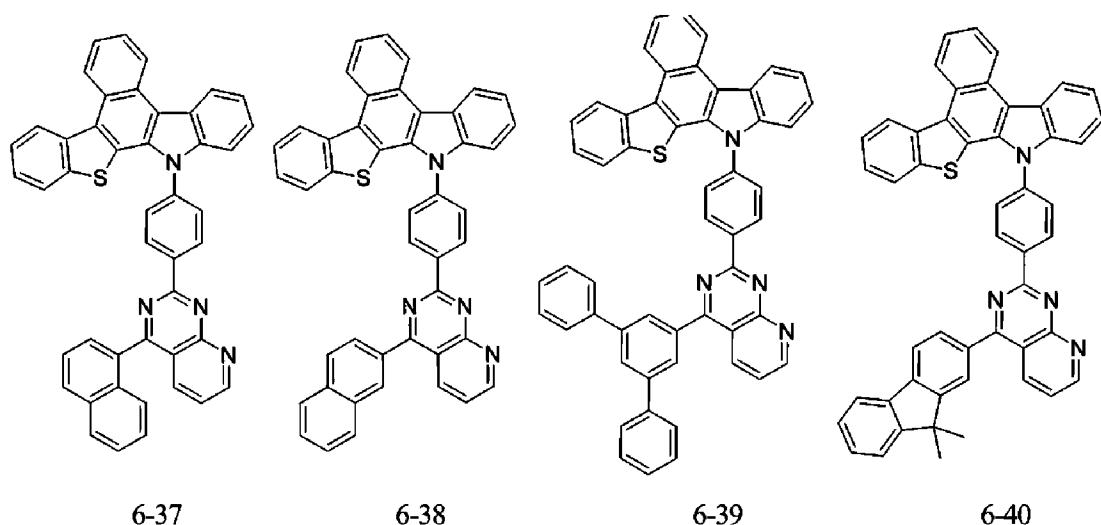
[123]



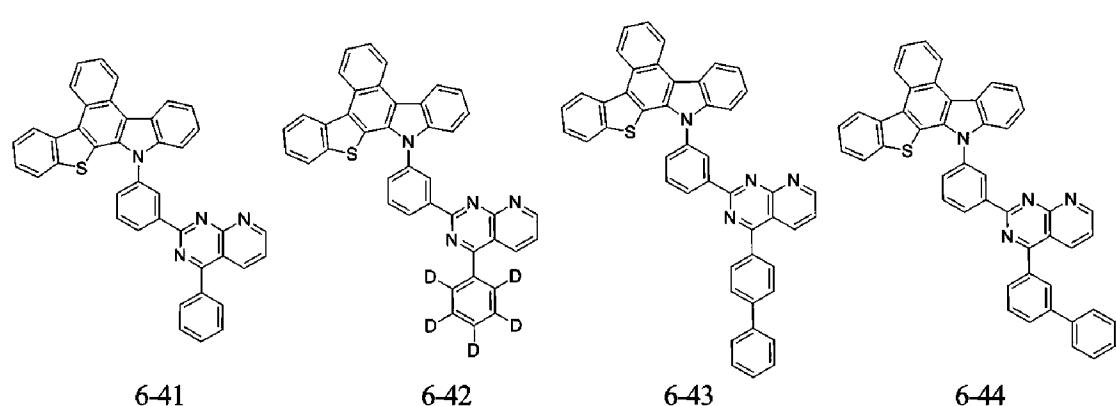
[124]



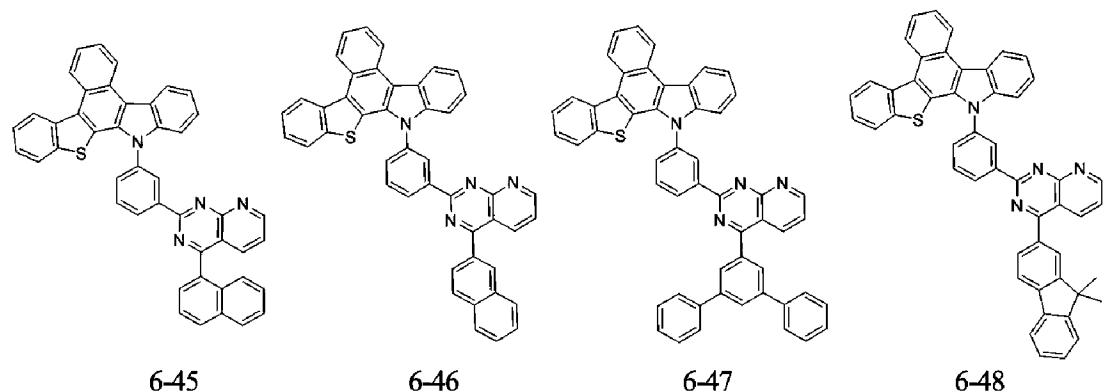
[125]



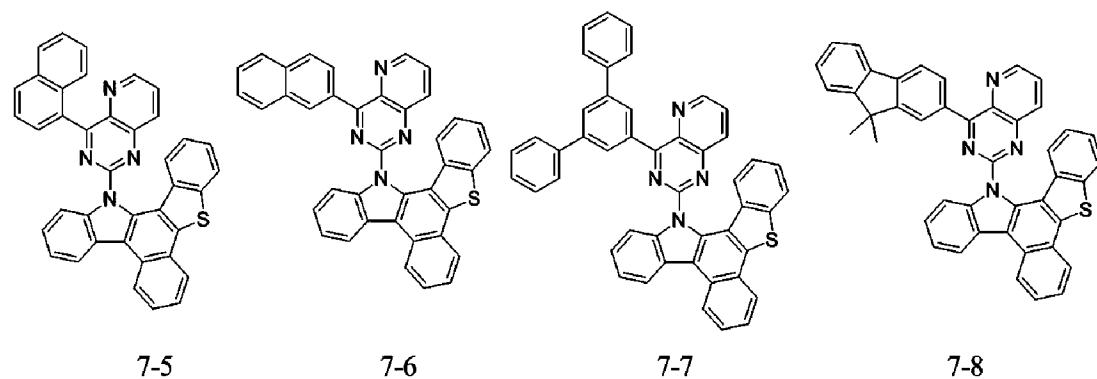
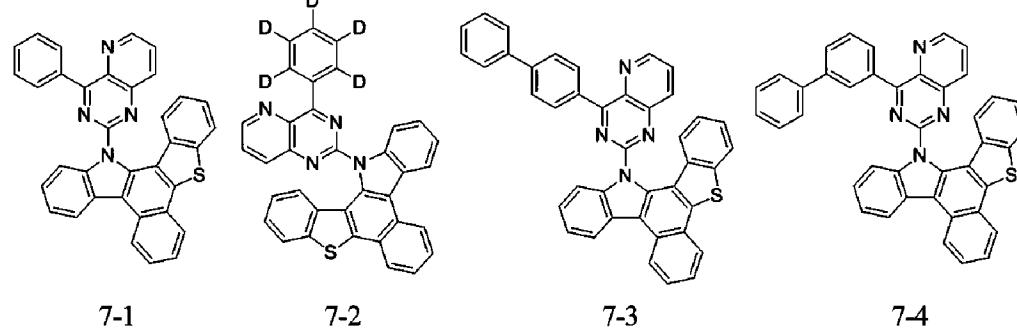
[126]



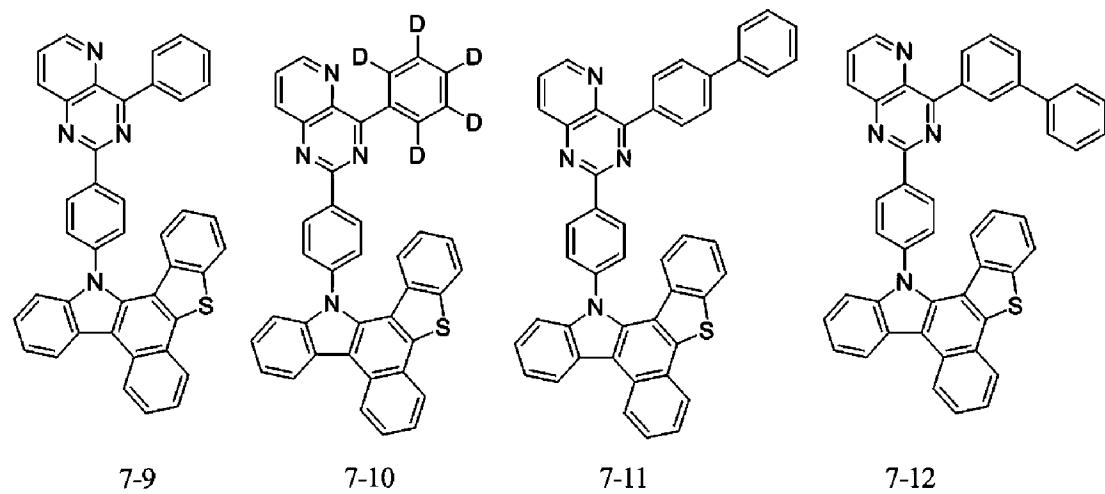
[127]



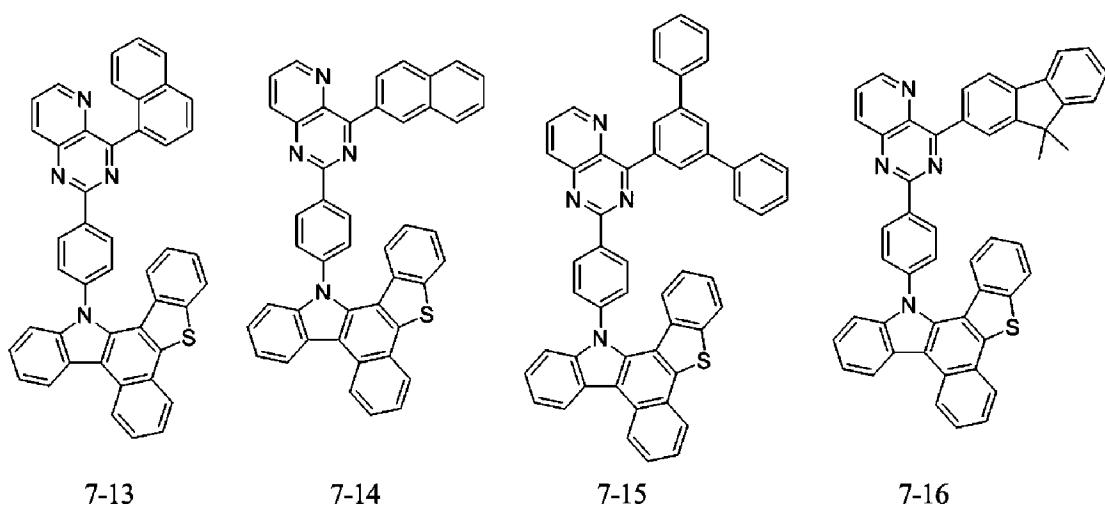
[128]



[129]



[130]



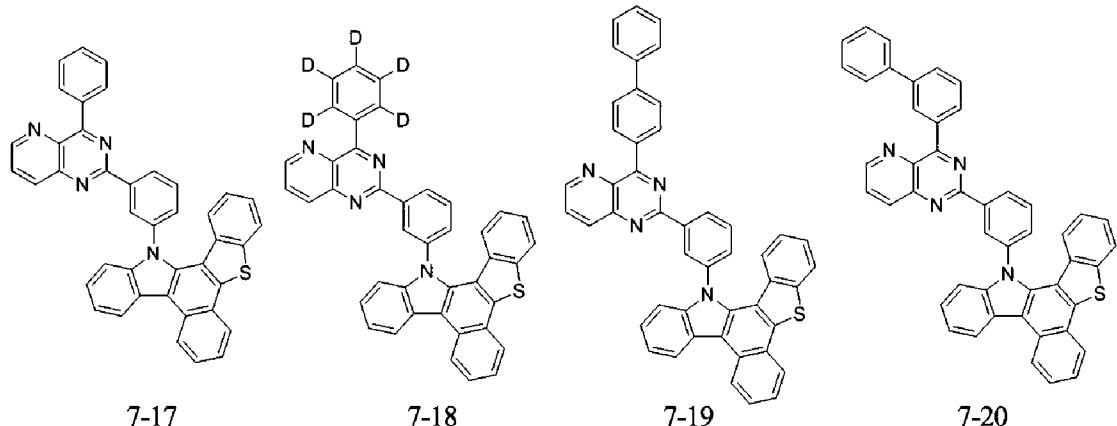
7-13

7-14

7-15

7-16

[131]



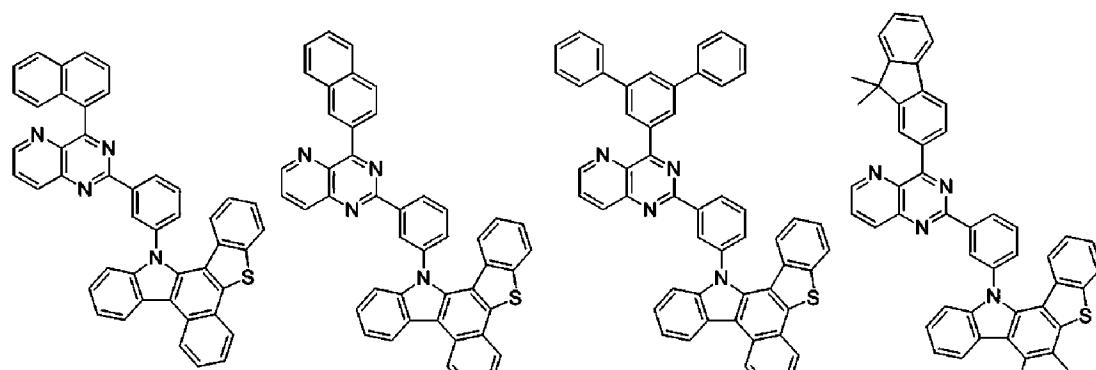
7-17

7-18

7-19

7-20

[132]

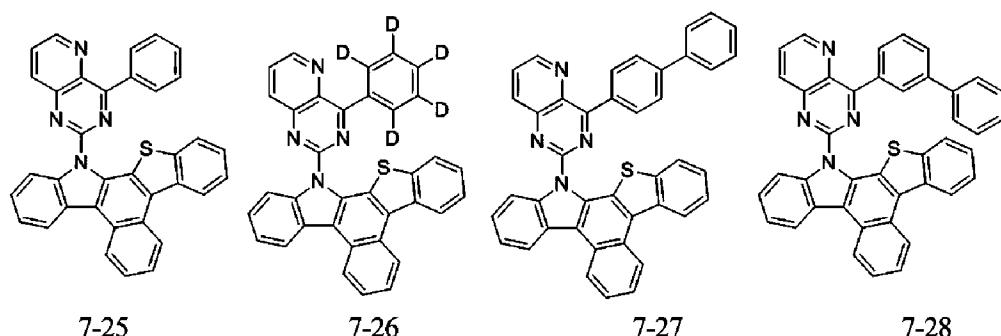


7-21

7-22

7-23

7-24



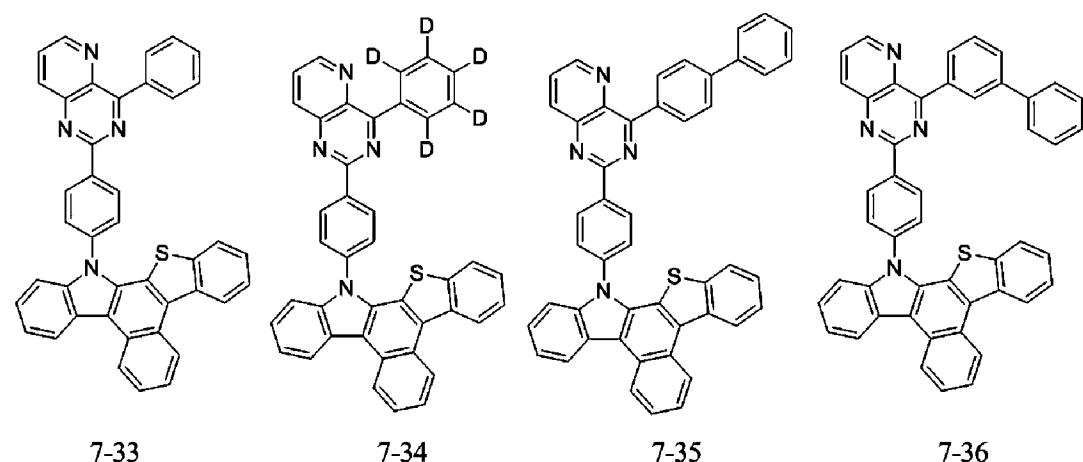
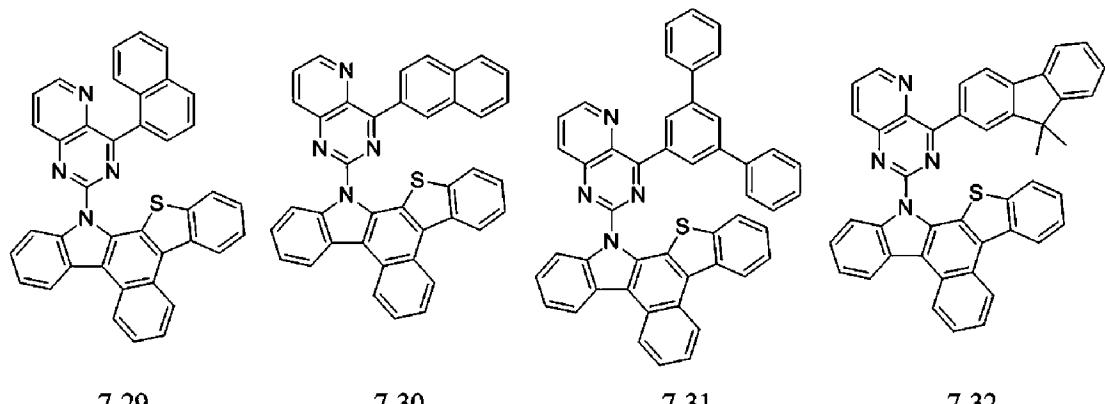
7-25

7-26

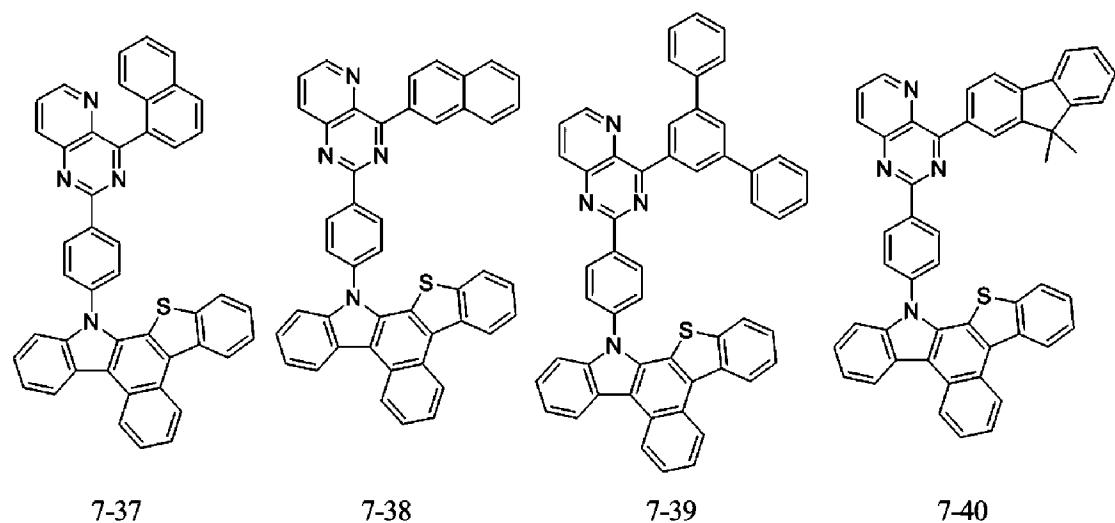
7-27

7-28

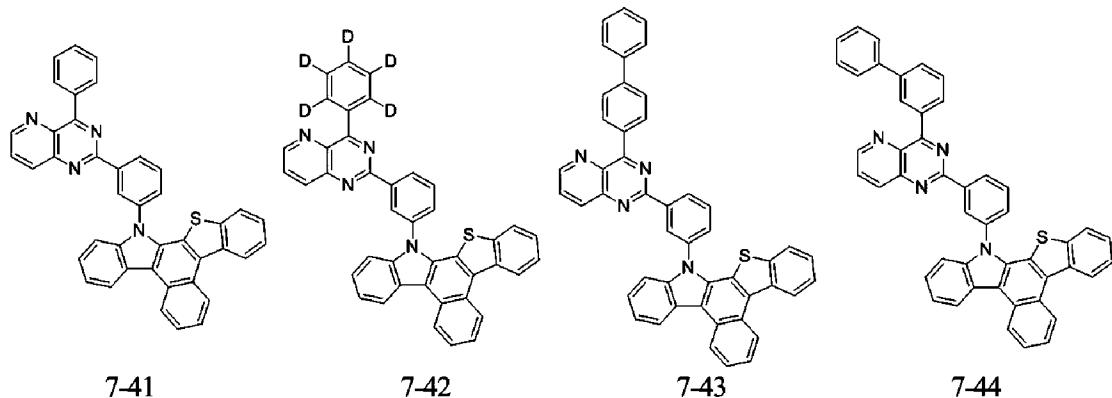
[133]



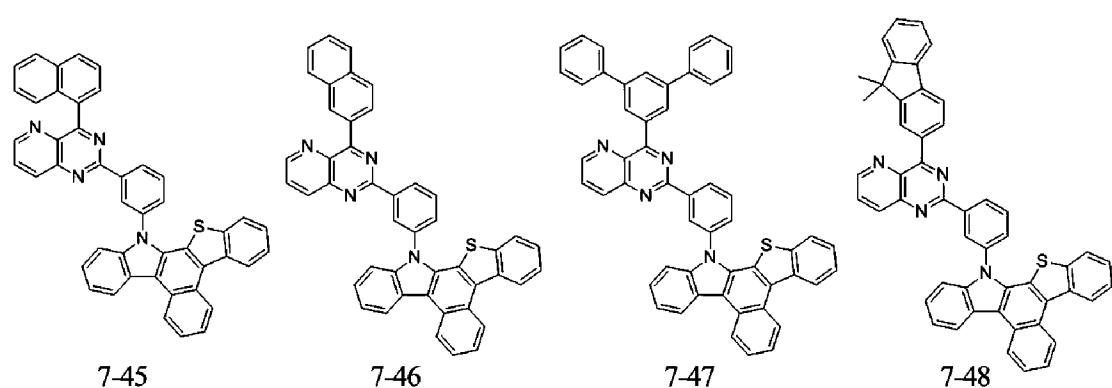
[134]



[135]



[136]



[137] 이하에서, 상기 화학식으로 표시되는 본 발명 화합물의 합성에 및 유기전기소자의 제조예에 대하여 실시예를 들어 구체적으로 설명하지만, 본 발명이 하기의 실시예로 한정되는 것은 아니다.

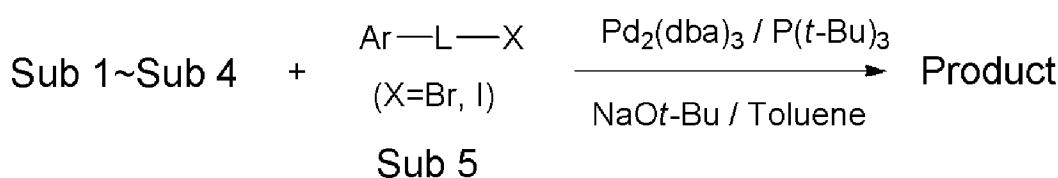
합성예

[138] 예시적으로 본 발명에 따른 화합물은 하기 반응식 1과 같아], Sub 1 내지 Sub 4 중 하나와 Sub 5를 반응시켜 제조한다. 하기 합성법에서는 X가 S인 경우를 예시하여 설명하지만, X가 O나 Si인 경우에도 하기의 합성방법과 유사하므로 별도로 기재하지 않기로 한다. 하기 반응식 등에서 기호 R₁은 화학식 1에 기재된 R₁~R₄ 중 하나이고, R₂는 R₂₁ 또는 R₂₂이며, R₃은 R₁₁~R₁₄ 중 하나이다.

[140] 본 발명의 화합물은 예시적으로 하기 반응식 1또는 반응식 2에 의해 제조될 수 있다.

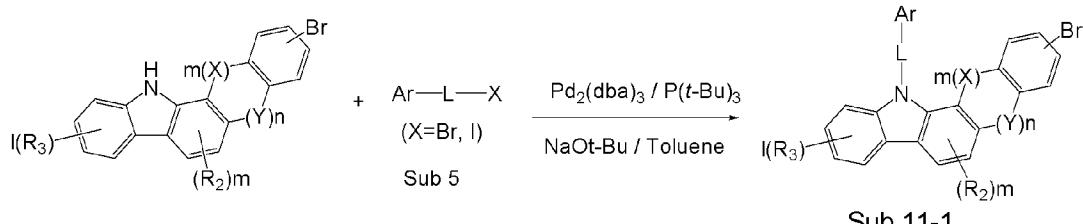
<반응식 1>

[142]

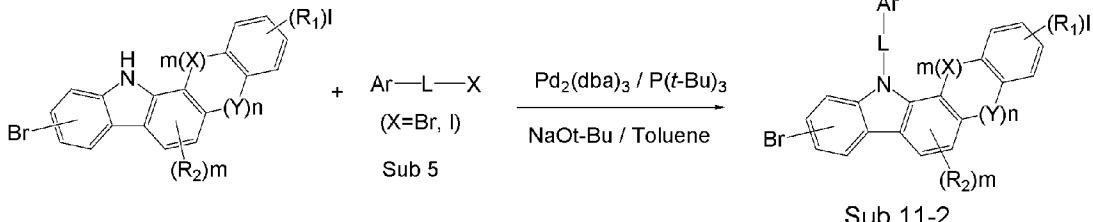


<반응식 2>

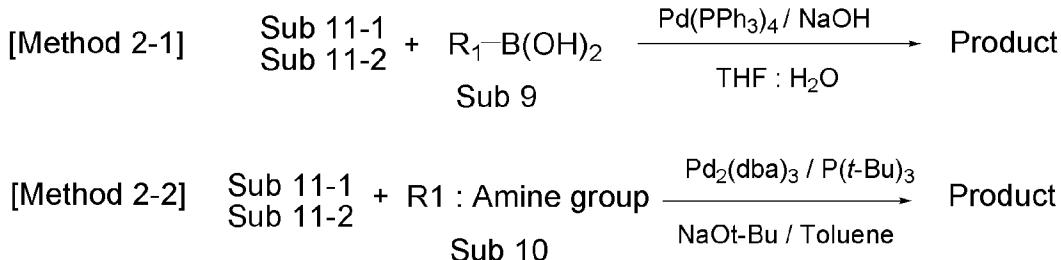
[144]



[145]



[146]



[147] 이하, Sub 1~Sub 4의 합성방법 등을 설명한 이후 상기 반응식에 따른 본 발명의 화합물의 제조방법에 대해 설명한다.

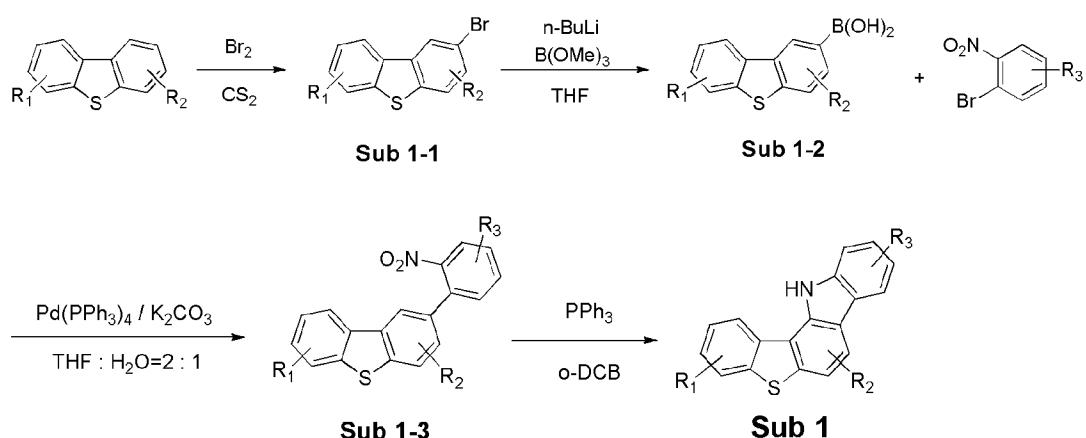
[148]

Sub 1 합성법 예시:

[149]

<반응식 3>

[150]



[151]

Sub 1-1 합성법

[152]

질소 대기 상태에서 R₁, R₂로 치환된 dibenzothiophene 유도체를 carbon disulfide 용매에 녹인 후, bromine을 서서히 적가시켰다. 상온에서 12시간 동안 교반시킨 후, 반응이 종료되면 감압장치를 이용하여 유기용매를 농축하고 생성된 생성물을 ethanol 용매를 이용하여 재결정화하여 원하는 Sub 1-1을 얻었다.

[153]

Sub 1-2 합성법

- [154] 얻은 Sub 1-1을 무수 THF에 녹이고, 반응물의 온도를 -78 °C로 낮추고, n-BuLi (2.5 M in hexane)을 천천히 적가하고 난 후, 반응물을 0 °C에서 1시간 동안 교반시켰다. 반응물의 온도를 -78°C로 낮추고, trimethyl borate를 적가하고 난 후, 상온에서 12시간 동안 교반시켰다. 반응이 종결되면 2N-HCl 수용액을 넣고, 30분간 교반시킨 후, ether로 추출하였다. 유기층을 MgSO₄로 건조하고 농축한 후 생성된 유기물을 Silicagel column 및 재결정하여 원하는 Sub 1-2를 얻었다.

[155] Sub 1-3 합성법

- [156] 얻은 Sub 1-2와 R_3 로 치환된 1-bromo-2-nitrobenzene, $Pd(PPh_3)_4$, K_2CO_3 를 무수 THF와 소량의 물에 녹이고 난 후, 24시간 동안 환류시켰다. 반응이 종료되면 반응물의 온도를 상온으로 식히고, CH_2Cl_2 로 추출하고 물로 닦아주었다. 유기층을 $MgSO_4$ 로 건조하고 농축한 후 생성된 유기물을 Silicagel column 을 이용하여 분리하여 원하는 Sub 1-3을 얻었다.

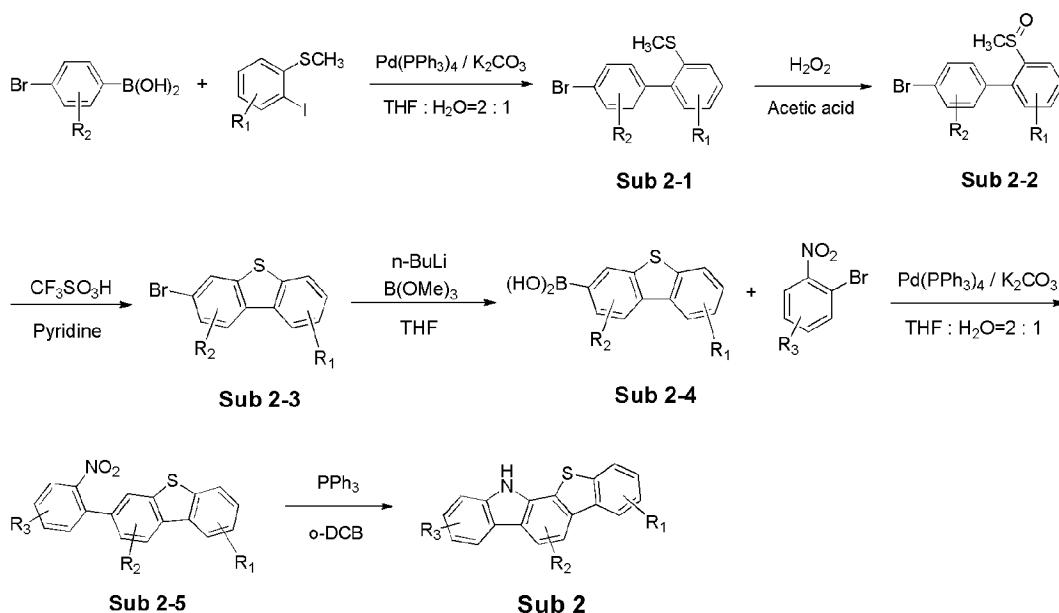
[157] **Sub 1**

- [158] 얻은 Sub 1-3과 triphenylphosphine을 o-dichlorobenzene에 녹이고, 24시간 동안 환류시켰다. 반응이 종결되면 감압 증류를 이용하여 용매를 제거한 후, 농축된 생성물을 Silicagel column 및 재결정하여 원하는 Sub 1을 얻었다.

[159] Sub 2 합성법 예시:

[160] <반응식 4>

[161]



[162] Sub 2-1 합성법

- [163] R_2 로 치환된 4-bromophenylboronic acid, R_1 로 치환된 (2-iodophenyl)(methyl)sulfane와 $Pd(PPh_3)_4$, K_2CO_3 , THF, 물을 넣고 상기 Sub 1-3의 합성법과 동일하게 진행하여 원하는 Sub 2-1을 얻었다.

[164] Sub 2-2 합성법

- [165] Sub 2-1을 아세트산에 녹이고 과산화수소를 아세트산에 용해시킨 것을 적가한

후 상온에서 6시간 교반한다. 반응이 종결되면 감압 장치를 이용하여 아세트산(acetic acid)를 제거하고 Silicagel column 을 이용하여 분리하여 원하는 Sub 2-2를 얻었다.

[166] **Sub 2-3 합성법**

[167] 얻은 Sub 2-2와 트리플루오로메탄술폰산을 넣고 상온에서 24시간 교반한 다음 물과 피리딘(8:1) 을 천천히 넣고 30분 환류한다. 온도를 내리고 CH₂Cl₂로 추출하고 물로 닦아준다. 소량의 물을 무수 MgSO₄로 제거하고 감압 여과 후, 유기용매를 농축하여 생성된 생성물을 Silicagel column 및 재결정하여 원하는 Sub 2-3을 얻었다.

[168] **Sub 2-4 합성법**

[169] 얻은 Sub 2-3을 상기 Sub 1-2의 합성법과 동일하게 진행하여, Sub 2-4를 얻었다.

[170] **Sub 2-5 합성법**

[171] 얻은 Sub 2-4과 R₃로 치환된 1-bromo-2-nitrobenzene, Pd(PPh₃)₄와 K₂CO₃, THF, 물을 넣고 상기 Sub 1-3의 합성법과 동일하게 진행하여 원하는 Sub 2-5를 얻었다.

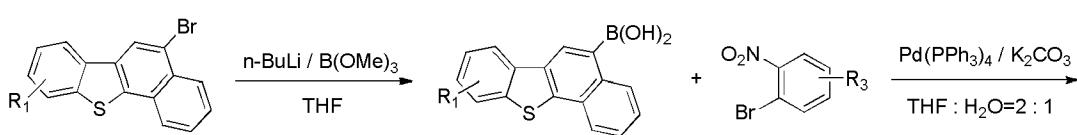
[172] **Sub 2 합성법**

[173] 얻은 Sub 2-5을 상기 Sub 1의 합성법과 동일하게 진행하여 원하는 Sub 2을 얻었다.

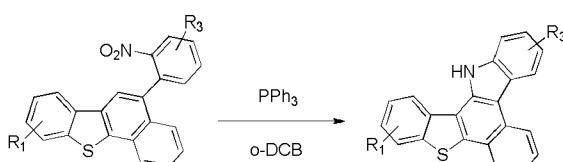
[174] **Sub 3 합성 법 예시:**

[175] <반응식 5>

[176]



Sub 3-1



Sub 3-2

Sub 3

[177] **Sub 3-1 합성법**

[178] R₁으로 치환된 5-bromobenzo[b]naphtho[2,1-d]thiophene을 상기 Sub 1-2의 합성법과 동일하게 진행하여 원하는 Sub 3-1을 얻었다.

[179] **Sub 3-2 합성법**

[180] 얻은 Sub 3-1과 R₃로 치환된 1-bromo-2-nitrobenzene, Pd(PPh₃)₄, K₂CO₃, THF, 물을 상기 Sub 1-3의 합성과 동일하게 진행하여 원하는 Sub 3-2를 얻었다.

[181] **Sub 3 합성법**

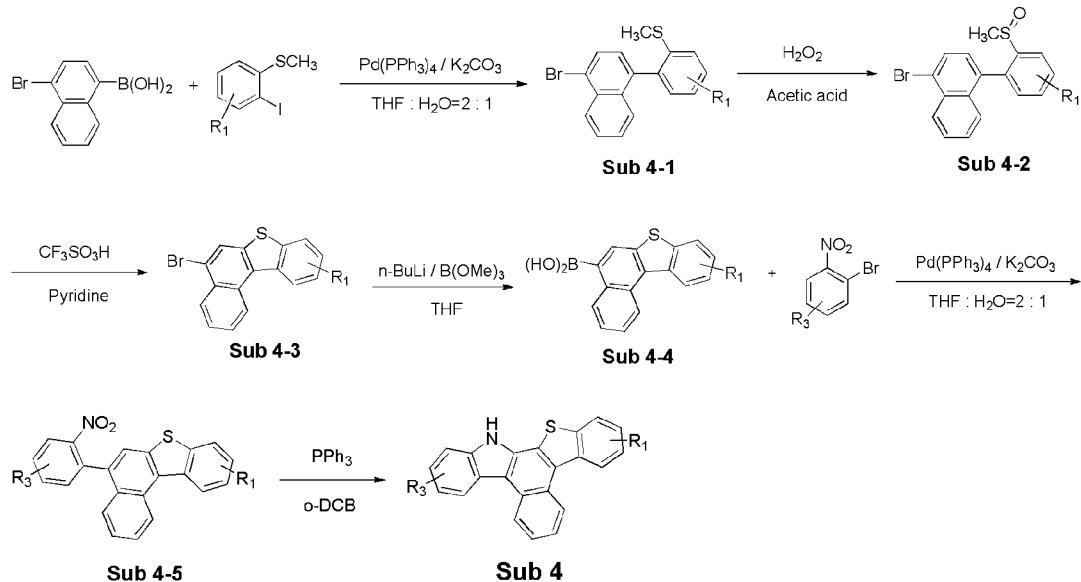
[182] 얻은 Sub 3-2을 상기 Sub 1의 합성법과 동일하게 진행하여 원하는 Sub 3를

얻었다.

[183] **Sub 4 합성 법 예시:**

[184] <반응식 6>

[185]



[186] **Sub 4-1 합성 법**

[187] 4-bromonaphthalen-1-ylboronic acid, R₁으로 치환된

(2-bromophenyl)(methyl)sulfane와 Pd(PPh₃)₄와 K₂CO₃, THF, 물을 넣고 상기 Sub 1-3의 합성법과 동일하게 진행하여 원하는 Sub 4-1을 얻었다.

[188] **Sub 4-2 합성 법**

[189] Sub 4-1을 상기 Sub 2-2의 합성법과 동일하게 진행하여 원하는 Sub 4-2를 얻었다.

[190] **Sub 4-3 합성 법**

[191] 얻은 Sub 4-2를 상기 Sub 2-3의 합성법과 동일하게 진행하여 원하는 Sub 4-3을 얻었다.

[192] **Sub 4-4 합성 법**

[193] 얻은 Sub 4-3을 상기 Sub 1-2의 합성법과 동일하게 진행하여, Sub 4-4를 얻었다.

[194] **Sub 4-5 합성 법**

[195] 얻은 Sub 4-4과 R₃로 치환된 1-bromo-2-nitrobenzene, Pd(PPh₃)₄와 K₂CO₃, THF, 물을 넣고 상기 Sub 1-3의 합성법과 동일하게 진행하여 원하는 Sub 2-5를 얻었다.

[196] **Sub 4 합성 법**

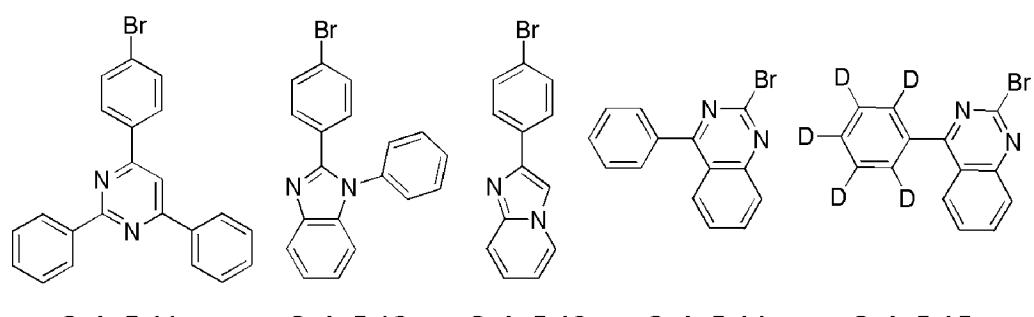
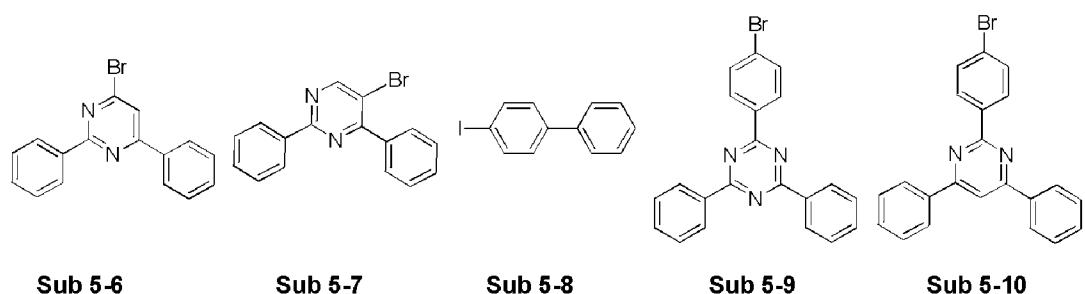
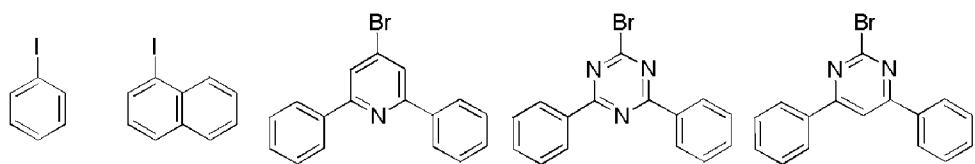
[197] 얻은 Sub 4-4를 상기 Sub 1 의 합성법과 동일하게 진행하여 원하는 Sub 4를 얻었다.

[198] **Product 합성 법 예시**

[199] 상기 반응식 1 및 2에 의해 본 발명에 따른 화합물을 합성할 수 있다. 두 가지 방법으로 본 발명의 화합물을 합성하는 예시는 다음과 같다.

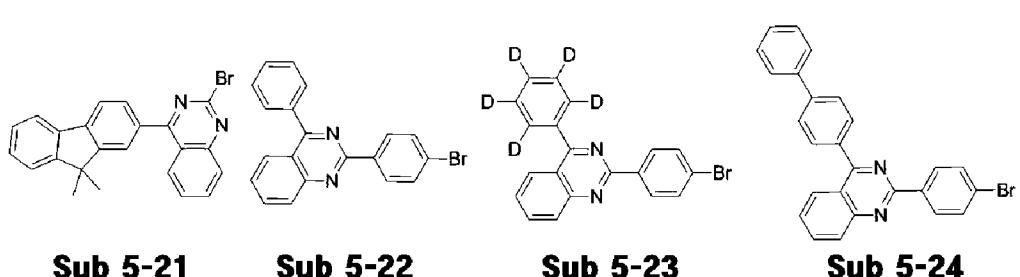
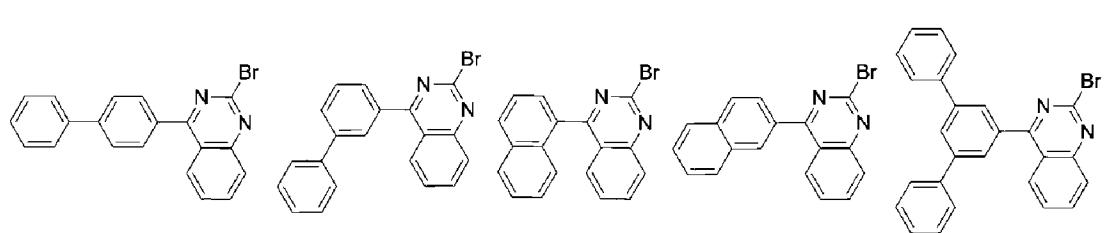
[200] **[Method 1] (반응식 1)**

- [201] Sub 1~4와 Sub 5를 톨루엔에 혼합 후에 Pd₂(dba)₃, P(t-Bu)₃, NaOt-Bu을 각각 첨가한 뒤, 100°C에서 24시간 교반 환류시킨다. ether와 물로 추출한 후 유기층을 MgSO₄로 건조하고 농축한 후 생성된 유기물을 silicagel column 및 재결정하여 최종 product를 얻었다.
- [202] **[Method 2-1] (반응식 2)**
- [203] 둑근 바닥 플라스크에 Sub 11-1 또는 Sub 11-2 (1당량)를 THF에 녹인 후에, Sub 9 (1.2당량), Pd(PPh₃)₄ (0.03당량), NaOH(3당량), 물을 첨가한 후, 교반 환류시킨다. 반응이 완료되면 ether와 물로 추출한 후 유기층을 MgSO₄로 건조하고 농축한 후 생성된 유기물을 silicagel column 및 재결정하여 생성물 Product를 얻었다.
- [204] **[Method 2-2] (반응식 2)**
- [205] 둑근 바닥 플라스크에 Sub 11-1 또는 Sub 11-2 화합물 (1당량), Sub 10 화합물 (1.2당량), Pd₂(dba)₃ (0.05당량), P(t-Bu)₃ (0.1당량), NaOt-Bu (3당량), toluene (10.5 mL / 1 mmol)을 넣은 후에 100 °C에서 반응을 진행한다. 반응이 완료되면 ether와 물로 추출한 후 유기층을 MgSO₄로 건조하고 농축 한 후 생성된 유기물을 silicagel column 및 재결정하여 생성물 Product를 얻었다.
- [206] 상기 Method 1 및 Method 2에서 사용되는 Sub 5, Sub 9, Sub 10의 예시는 아래와 같으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [207] **Sub 5 예시**
- [208] Sub 5의 예시는 아래와 같으나, 이에 한정된 것은 아니다.
- [209]

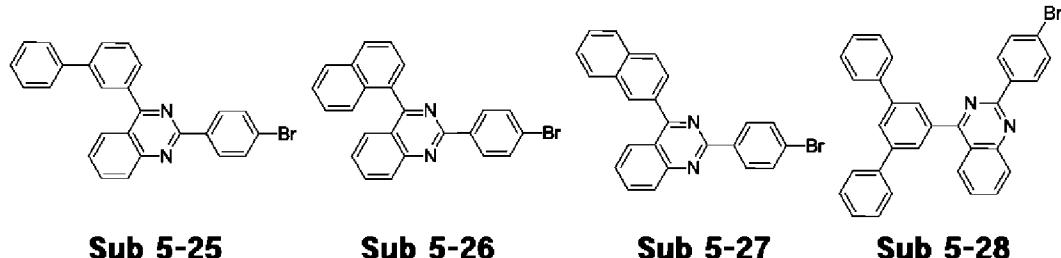


[210]

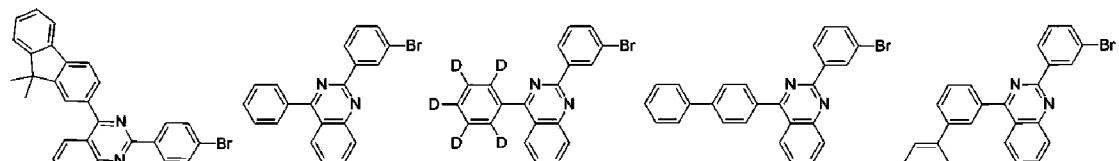
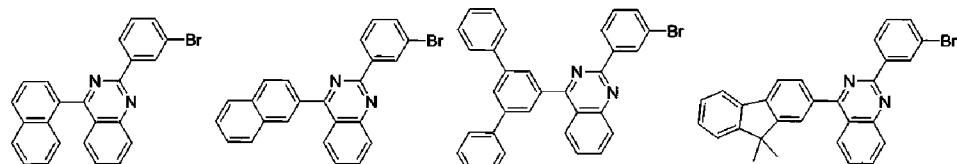
[211]



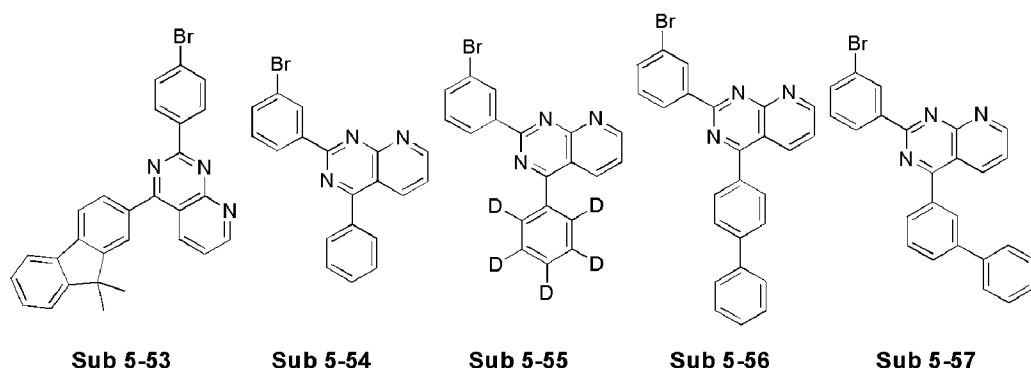
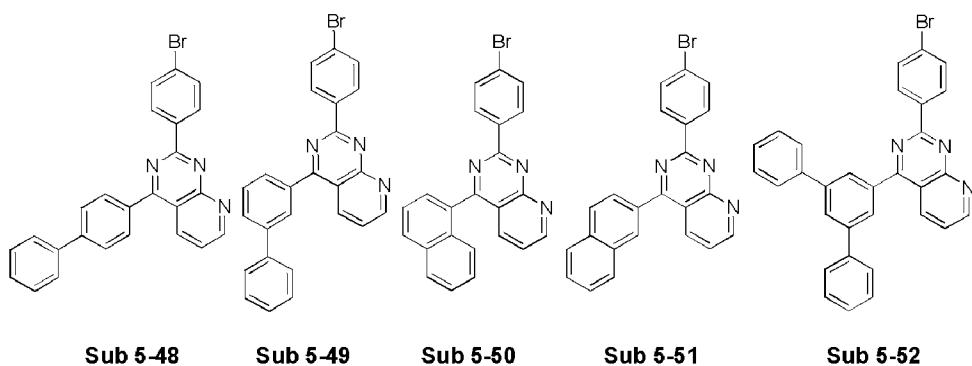
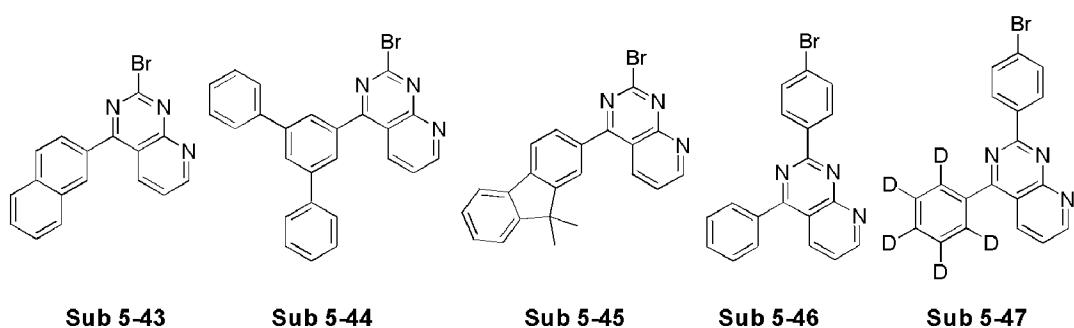
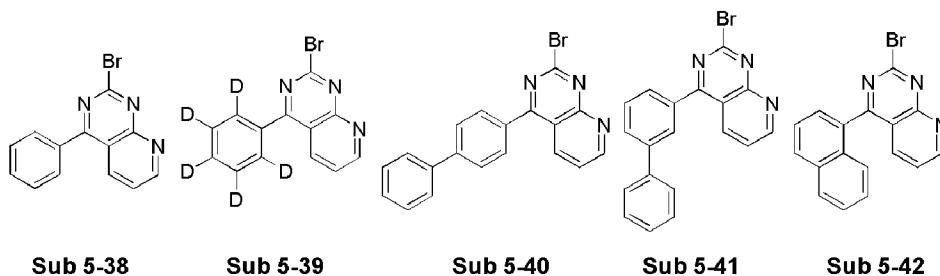
[212]

**Sub 5-25****Sub 5-26****Sub 5-27****Sub 5-28**

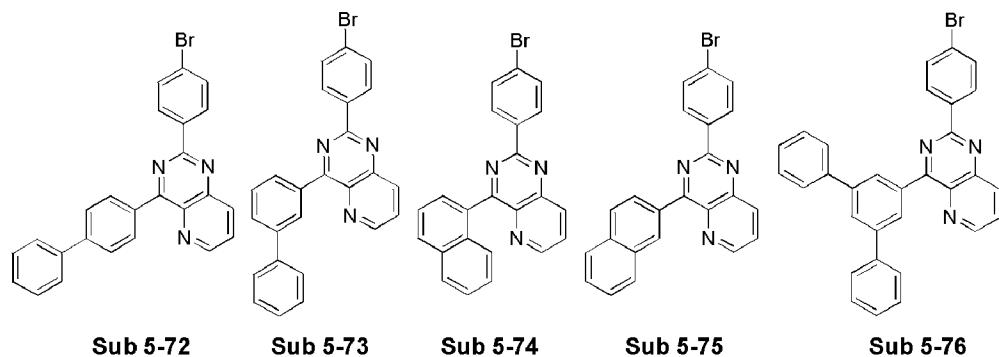
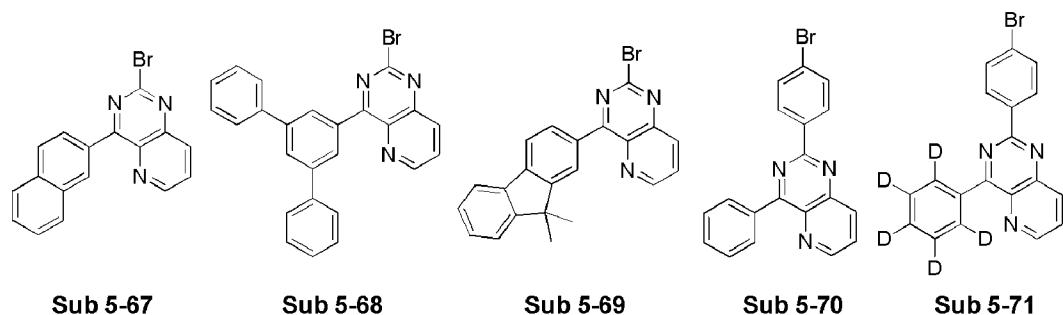
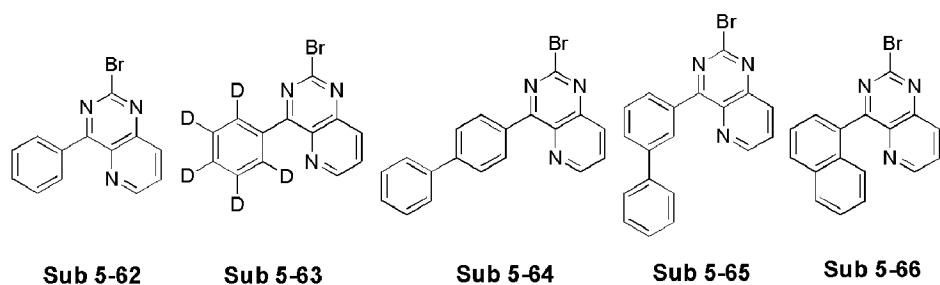
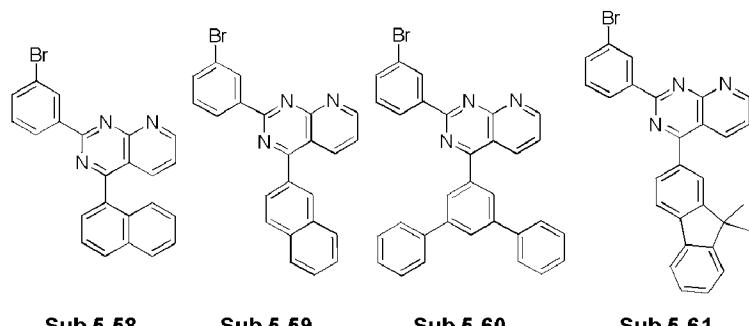
[213]

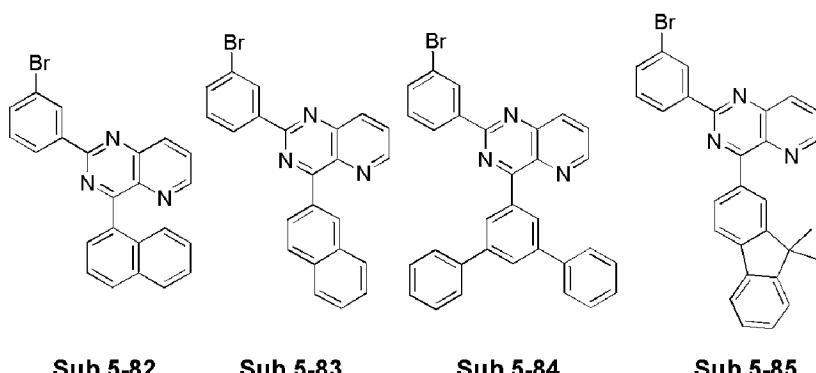
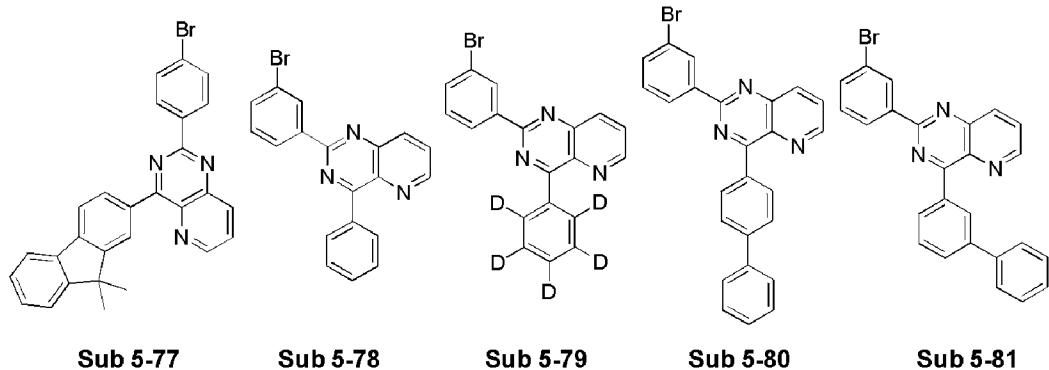
**Sub 5-29****Sub 5-30****Sub 5-31****Sub 5-32****Sub 5-33****Sub 5-34****Sub 5-35****Sub 5-36****Sub 5-37**

[214]



[215]





[217] 상기 Sub 5의 예시적 물질에 대한 FD-MS 검은 하기 표 1과 같다.

[218] [표 1]

[219]

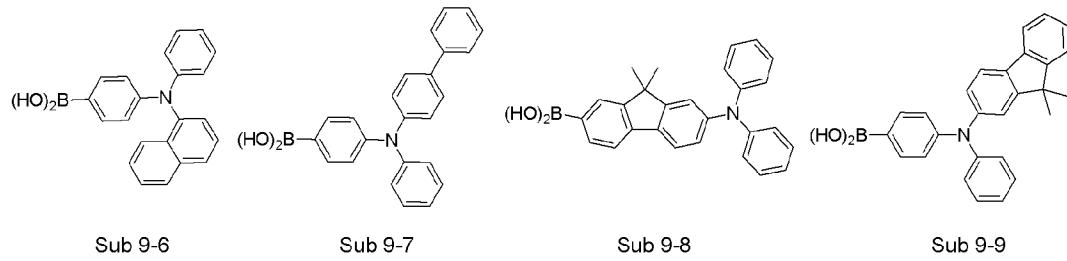
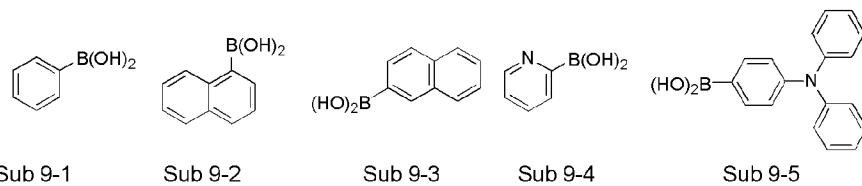
화합물	FD-MS	화합물	FD-MS
Sub 5-1	m/z=203.94(C ₆ H ₅ I =204.01)	Sub 5-2	m/z=253.96(C ₁₀ H ₇ I=254.07)
Sub 5-3	m/z=309.02(C ₁₇ H ₁₂ BrN=310.19)	Sub 5-4	m/z=311.01(C ₁₅ H ₁₀ BrN ₃ =312.16)
Sub 5-5	m/z=310.01(C ₁₆ H ₁₁ BrN ₂ =311.18)	Sub 5-6	m/z=310.01(C ₁₆ H ₁₁ BrN ₂ =311.18)
Sub 5-7	m/z=310.01(C ₁₆ H ₁₁ BrN ₂ =311.18)	Sub 5-8	m/z=279.97(C ₁₂ H ₉ I=280.10)
Sub 5-9	m/z=387.04(C ₂₁ H ₁₄ BrN ₃ =388.26)	Sub 5-10	m/z=386.04(C ₂₂ H ₁₅ BrN ₂ =387.27)
Sub 5-11	m/z=386.04(C ₂₂ H ₁₅ BrN ₂ =387.27)	Sub 5-12	m/z=348.03(C ₁₉ H ₁₃ BrN ₂ =349.22)
Sub 5-13	m/z=271.99(C ₁₃ H ₉ BrN ₂ =273.13)	Sub 5-14	m/z=283.99 (C ₁₄ H ₉ BrN ₂ =285.14)
Sub 5-15	m/z=289.03(C ₁₄ H ₄ D ₅ BrN ₂ =290.17)	Sub 5-16	m/z=360.03 (C ₂₀ H ₁₃ BrN ₂ =361.23)
Sub 5-17	m/z=360.03 (C ₂₀ H ₁₃ BrN ₂ =361.23)	Sub 5-18	m/z=334.01 (C ₁₈ H ₁₁ BrN ₂ =335.20)
Sub 5-19	m/z=334.01 (C ₁₈ H ₁₁ BrN ₂ =335.20)	Sub 5-20	m/z=436.06 (C ₂₆ H ₁₇ BrN ₂ =437.33)
Sub 5-21	m/z=400.06 (C ₂₃ H ₁₇ BrN ₂ =401.30)	Sub 5-22	m/z=360.03 (C ₂₀ H ₁₃ BrN ₂ =361.23)
Sub 5-23	m/z=365.06 (C ₂₀ H ₈ D ₅ BrN ₂ =366.27)	Sub 5-24	m/z=436.06 (C ₂₆ H ₁₇ BrN ₂ =437.33)
Sub 5-25	m/z=436.06 (C ₂₆ H ₁₇ BrN ₂ =437.33)	Sub 5-26	m/z=410.04 (C ₂₄ H ₁₅ BrN ₂ =411.29)
Sub 5-27	m/z=410.04(C ₂₄ H ₁₅ BrN ₂ =411.29)	Sub 5-28	m/z=512.09 (C ₃₂ H ₂₁ BrN ₂ =513.43)
Sub 5-29	m/z=476.09 (C ₂₉ H ₂₁ BrN ₂ =477.39)	Sub 5-30	m/z=360.03 (C ₂₀ H ₁₃ BrN ₂ =361.23)
Sub 5-31	m/z=365.06 (C ₂₀ H ₈ D ₅ BrN ₂ =366.27)	Sub 5-32	m/z=436.06 (C ₂₆ H ₁₇ BrN ₂ =437.33)
Sub 5-33	m/z=436.06 (C ₂₆ H ₁₇ BrN ₂ =437.33)	Sub 5-34	m/z=410.04 (C ₂₄ H ₁₅ BrN ₂ =411.29)
Sub 5-35	m/z=410.04 (C ₂₄ H ₁₅ BrN ₂ =411.29)	Sub 5-36	m/z=512.09 (C ₃₂ H ₂₁ BrN ₂ =513.43)
Sub 5-37	m/z=476.09 (C ₂₉ H ₂₁ BrN ₂ =477.39)	Sub 5-38	m/z=284.99 (C ₁₃ H ₈ BrN ₃ =286.13)
Sub 5-39	m/z=290.02 (C ₁₃ H ₃ D ₅ BrN ₃ =291.16)	Sub 5-40	m/z=361.02 (C ₁₉ H ₁₂ BrN ₃ =362.22)
Sub 5-41	m/z=361.02 (C ₁₉ H ₁₂ BrN ₃ =362.22)	Sub 5-42	m/z=335.01 (C ₁₇ H ₁₀ BrN ₃ =336.19)
Sub 5-43	m/z=335.01 (C ₁₇ H ₁₀ BrN ₃ =336.19)	Sub 5-44	m/z=437.05 (C ₂₅ H ₁₆ BrN ₃ =438.32)
Sub 5-45	m/z=401.05 (C ₂₂ H ₁₆ BrN ₃ =402.29)	Sub 5-46	m/z=361.02 (C ₁₉ H ₁₂ BrN ₃ =362.22)
Sub 5-47	m/z=366.05 (C ₁₉ H ₇ D ₅ BrN ₃ =367.25)	Sub 5-48	m/z=437.05 (C ₂₅ H ₁₆ BrN ₃ =438.32)
Sub 5-49	m/z=437.05 (C ₂₅ H ₁₆ BrN ₃ =438.32)	Sub 5-50	m/z=411.04 (C ₂₃ H ₁₄ BrN ₃ =412.28)
Sub 5-51	m/z=411.04 (C ₂₃ H ₁₄ BrN ₃ =412.28)	Sub 5-52	m/z=513.08 (C ₃₁ H ₂₀ BrN ₃ =514.41)
Sub 5-53	m/z=477.08 (C ₂₈ H ₂₀ BrN ₃ =478.38)	Sub 5-54	m/z=361.02 (C ₁₉ H ₁₂ BrN ₃ =362.22)
Sub 5-55	m/z=366.05 (C ₁₉ H ₇ D ₅ BrN ₃ =367.25)	Sub 5-56	m/z=437.05 (C ₂₅ H ₁₆ BrN ₃ =438.32)
Sub 5-57	m/z=437.05 (C ₂₅ H ₁₆ BrN ₃ =438.32)	Sub 5-58	m/z=411.04 (C ₂₃ H ₁₄ BrN ₃ =412.28)
Sub 5-59	m/z=411.04 (C ₂₃ H ₁₄ BrN ₃ =412.28)	Sub 5-60	m/z=513.08 (C ₃₁ H ₂₀ BrN ₃ =514.41)
Sub 5-61	m/z=477.08 (C ₂₈ H ₂₀ BrN ₃ =478.38)	Sub 5-62	m/z=284.99 (C ₁₃ H ₈ BrN ₃ =286.13)

Sub 5-63	m/z=290.02 ($C_{13}H_3D_5BrN_3=291.16$)	Sub 5-64	m/z=361.02 ($C_{19}H_{12}BrN_3=362.22$)
Sub 5-65	m/z=361.02 ($C_{19}H_{12}BrN_3=362.22$)	Sub 5-66	m/z=335.01 ($C_{17}H_{10}BrN_3=336.19$)
Sub 5-67	m/z=335.01 ($C_{17}H_{10}BrN_3=336.19$)	Sub 5-68	m/z=437.05 ($C_{25}H_{16}BrN_3=438.32$)
Sub 5-69	m/z=401.05 ($C_{22}H_{16}BrN_3=402.29$)	Sub 5-70	m/z=361.02 ($C_{19}H_{12}BrN_3=362.22$)
Sub 5-71	m/z=366.05 ($C_{19}H_7D_5BrN_3=367.25$)	Sub 5-72	m/z=437.05 ($C_{25}H_{16}BrN_3=438.32$)
Sub 5-73	m/z=437.05 ($C_{25}H_{16}BrN_3=438.32$)	Sub 5-74	m/z=411.04 ($C_{23}H_{14}BrN_3=412.28$)
Sub 5-75	m/z=411.04 ($C_{23}H_{14}BrN_3=412.28$)	Sub 5-76	m/z=513.08 ($C_{31}H_{20}BrN_3=514.41$)
Sub 5-77	m/z=477.08 ($C_{28}H_{20}BrN_3=478.38$)	Sub 5-78	m/z=361.02 ($C_{19}H_{12}BrN_3=362.22$)
Sub 5-79	m/z=366.05 ($C_{19}H_7D_5BrN_3=367.25$)	Sub 5-80	m/z=437.05 ($C_{25}H_{16}BrN_3=438.32$)
Sub 5-81	m/z=437.05 ($C_{25}H_{16}BrN_3=438.32$)	Sub 5-82	m/z=411.04 ($C_{23}H_{14}BrN_3=412.28$)
Sub 5-83	m/z=411.04 ($C_{23}H_{14}BrN_3=412.28$)	Sub 5-84	m/z=513.08 ($C_{31}H_{20}BrN_3=514.41$)
Sub 5-85	m/z=477.08 ($C_{28}H_{20}BrN_3=478.38$)		

[221] **Sub 9 예시**

[222] Sub 9의 예시는 아래와 같으나, 이에 한정된 것은 아니다.

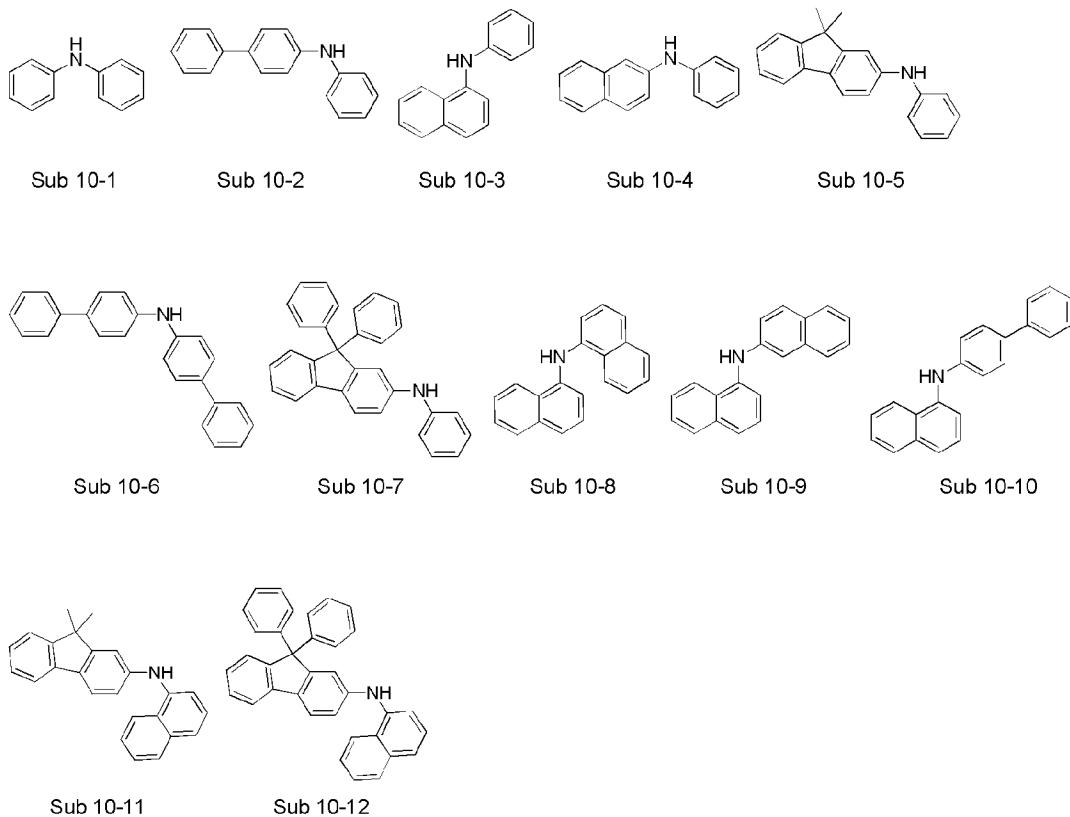
[223]



[224] **Sub 10 예시**

[225] Sub 10의 예시는 아래와 같으나, 이에 한정된 것은 아니다.

[226]



[227] 상기 Sub 9 및 10의 예시적 물질에 대한 FD-MS 값은 하기 표 2와 같다.

[표 2]

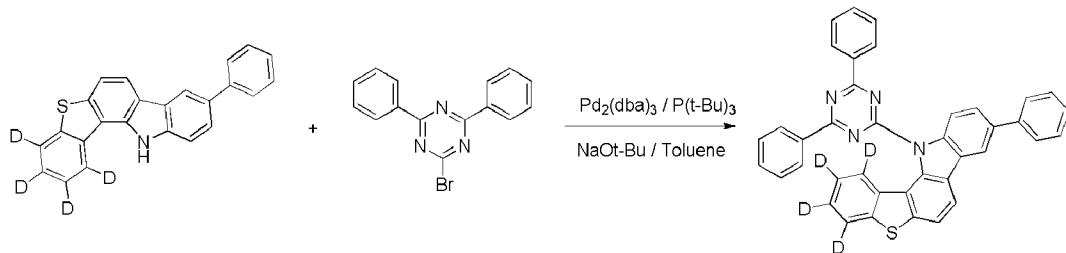
[229]

화합물	FD-MS	화합물	FD-MS
Sub 9-1	m/z=122.05 ($C_6H_7BO_2=121.93$)	Sub 9-2	m/z=172.07 ($C_{10}H_9BO_2=171.99$)
Sub 9-3	m/z=172.07 ($C_{10}H_9BO_2=171.99$)	Sub 9-4	m/z=123.05 ($C_5H_6BNO_2=122.92$)
Sub 9-5	m/z=289.13 ($C_{18}H_{16}BNO_2=289.14$)	Sub 9-6	m/z=339.14 ($C_{22}H_{18}BNO_2=339.19$)
Sub 9-7	m/z=365.16 ($C_{24}H_{20}BNO_2=365.23$)	Sub 9-8	m/z=405.19 ($C_{27}H_{24}BNO_2=405.30$)
Sub 9-9	m/z=405.19 ($C_{27}H_{24}BNO_2=405.30$)		
Sub 10-1	m/z=169.09 ($C_{12}H_{11}N=169.22$)	Sub 10-2	m/z=245.12 ($C_{18}H_{15}N=245.32$)
Sub 10-3	m/z=219.10 ($C_{16}H_{13}N=219.28$)	Sub 10-4	m/z=219.10 ($C_{16}H_{13}N=219.28$)
Sub 10-5	m/z=285.15 ($C_{21}H_{19}N=285.38$)	Sub 10-6	m/z=321.15 ($C_{24}H_{19}N=321.41$)
Sub 10-7	m/z=409.18 ($C_{31}H_{23}N=409.52$)	Sub 10-8	m/z=269.12 ($C_{20}H_{15}N=269.34$)
Sub 10-9	m/z=269.12 ($C_{20}H_{15}N=269.34$)	Sub 10-10	m/z=295.14 ($C_{22}H_{17}N=295.38$)
Sub 10-11	m/z=335.17 ($C_{25}H_{21}N=335.44$)	Sub 10-12	m/z=459.20 ($C_{35}H_{25}N=459.58$)

[230] **Product 1-1 합성 예시 [Method 1]**

[231] <반응식 7>

[232]

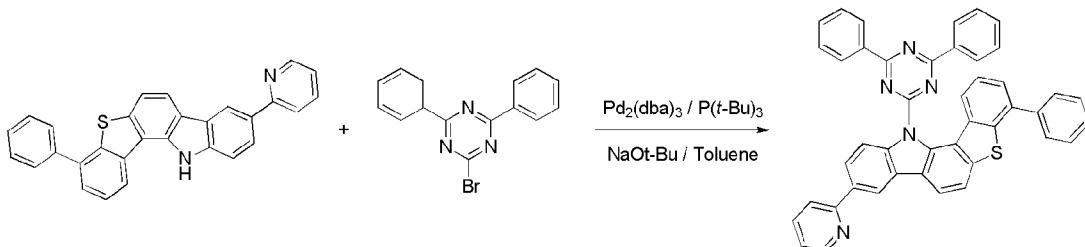


[233] 오원자 혼합화합물 (7.1g, 20mmol)과 2-bromo-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine (7.5g, 24mmol)을 툴루엔(210 mL)에 혼합 후에 $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (0.92g, 1 mmol), $\text{P}(t\text{-Bu})_3$ (0.4g, 2 mmol), NaOt-Bu (5.8g, 60 mmol)을 각각 첨가한 뒤, 100°C에서 24시간 교반 환류 시킨다. Methylene chloride와 물로 추출한 후 유기층을 MgSO_4 로 건조하고 농축 한 후 생성된 유기물을 silicagel column 및 재결정하여 product 1-1을 8.0g (수율 68%)를 얻었다.

Product 1-13 합성 예시 [Method 1]

<반응식 8>

[236]

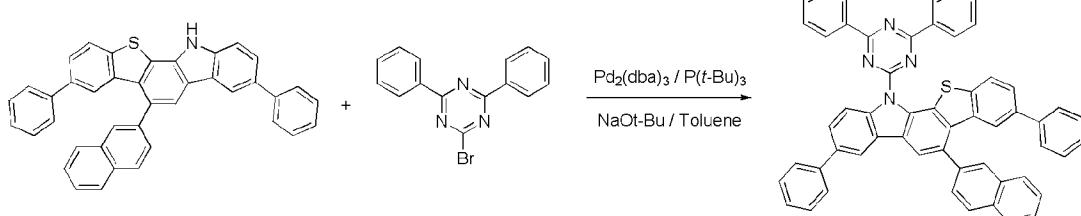


[237] 오원자 혼합화합물 (8.5g, 20mmol)과 2-bromo-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine (7.5g, 24mmol), 툴루엔 (210 mL), $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (0.92g, 1 mmol), $\text{P}(t\text{-Bu})_3$ (0.4g, 2 mmol), NaOt-Bu (5.8g, 60 mmol)을 상기 Product 1-1의 합성법과 동일하게 하여 product 1-13을 8.4g (수율 64%)를 얻었다.

Product 2-18 합성 예시 [Method 1]

<반응식 9>

[240]

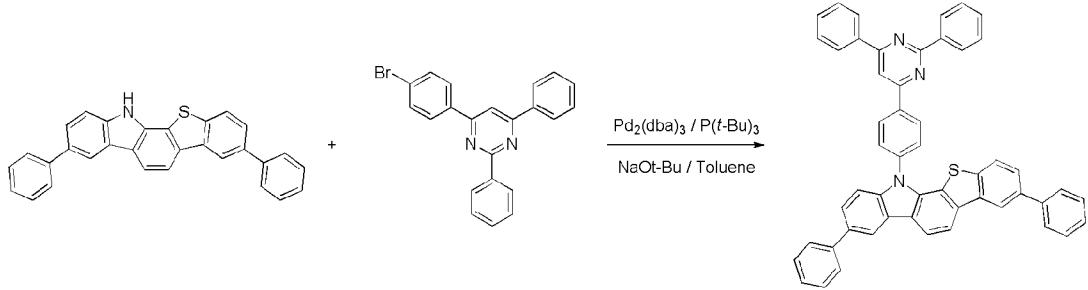


[241] 오원자 혼합화합물 (11g, 20mmol)과 bromobenzene (7.5g, 24mmol)을 툴루엔 (210 mL), $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (0.92g, 1 mmol), $\text{P}(t\text{-Bu})_3$ (0.4g, 2 mmol), NaOt-Bu (5.8g, 60 mmol)을 상기 Product 1-1의 합성법과 동일하게 하여 product 2-18을 9.7g (수율 62%)를 얻었다.

Product 2-31 합성 예시 [Method 1]

<반응식 10>

[244]



[245] 오원자 헤테로 화합물 (8.5g, 20mmol) 과

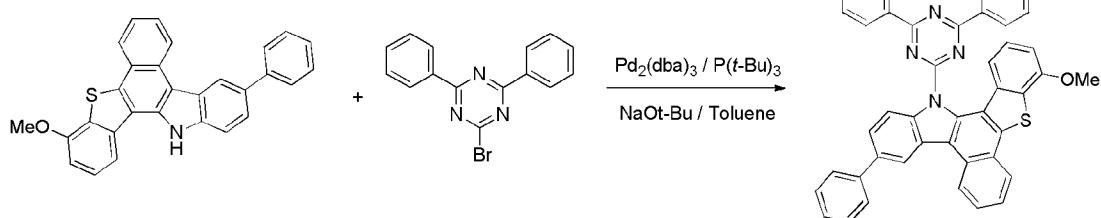
4-(4-bromophenyl)-2,6-diphenylpyrimidine (9.3g, 24mmol), 툴루엔 (210 mL), $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (0.92g, 1 mmol), $\text{P}(t\text{-Bu})_3$ (0.4g, 2 mmol), NaOt-Bu (5.8g, 60 mmol)을 상기

Product 1-1의 합성법과 동일하게 하여 product 2-31을 9.2g (수율 63%)를 얻었다.

[246] **Product 3-7 합성 예시 [Method 1]**

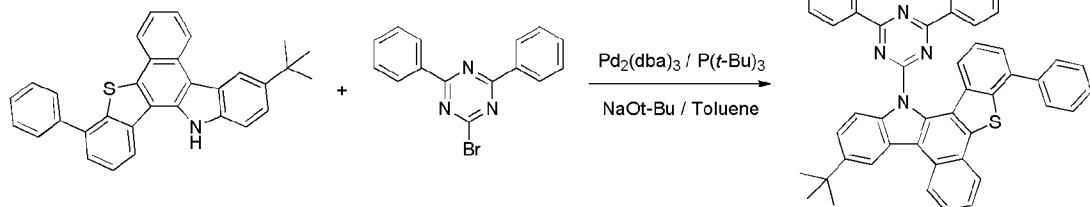
[247] <반응식 11>

[248]

[249] 오원자 헤테로 화합물 (8.6g, 20mmol) 과 2-bromo-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine (7.5g, 24mmol), 툴루엔 (210 mL), $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (0.92g, 1 mmol), $\text{P}(t\text{-Bu})_3$ (0.4g, 2 mmol), NaOt-Bu (5.8g, 60 mmol)을 상기 Product 1-1의 합성법과 동일하게 하여 product 3-7을 8.5g (수율 64%)를 얻었다.[250] **Product 3-12 합성 예시 [Method 1]**

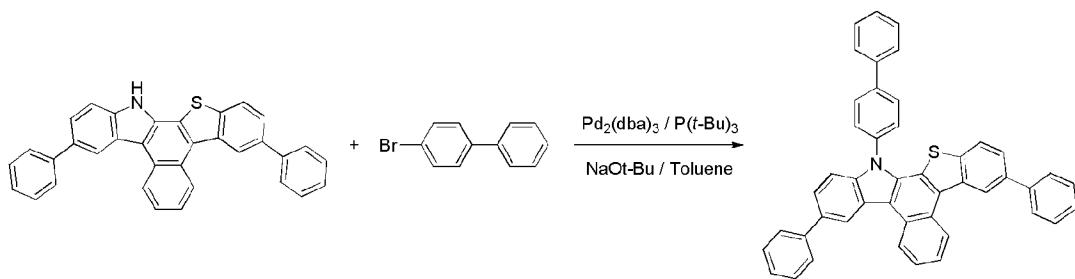
[251] <반응식 12>

[252]

[253] 오원자 헤테로 화합물 (9.1g, 20mmol) 과 2-bromo-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine (7.5g, 24mmol), 툴루엔 (210 mL), $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (0.92g, 1 mmol), $\text{P}(t\text{-Bu})_3$ (0.4g, 2 mmol), NaOt-Bu (5.8g, 60 mmol)을 상기 Product 1-1의 합성법과 동일하게 하여 product 3-12을 8.5g (수율 62%)를 얻었다.[254] **Product 4-19 합성 예시 [Method 1]**

[255] <반응식 13>

[256]

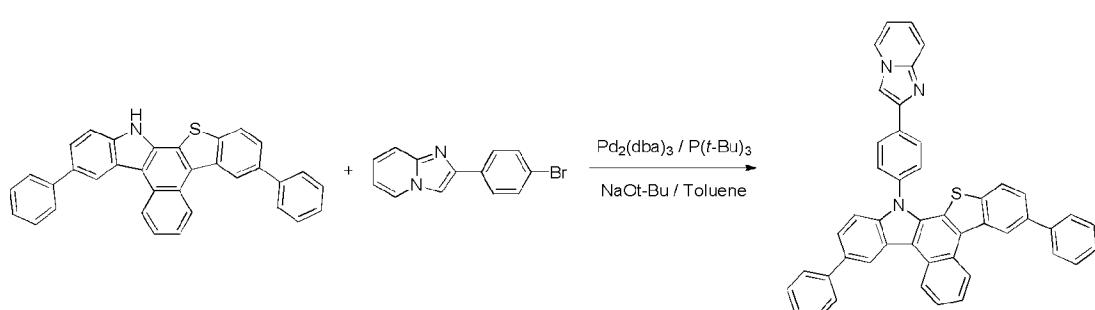


[257] 오원자 혼테로 화합물 (9.5g, 20mmol) 과 4-bromobiphenyl (5.6g, 24mmol), 톨루엔 (210 mL), $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (0.92g, 1 mmol), $\text{P}(t\text{-Bu})_3$ (0.4g, 2 mmol), NaOt-Bu (5.8g, 60 mmol)을 상기 Product 1-1의 합성법과 동일하게 하여 product 4-19을 8.2g (수율 65%)를 얻었다.

Product 4-27 합성 예시 [Method 1]

[259] <반응식 14>

[260]

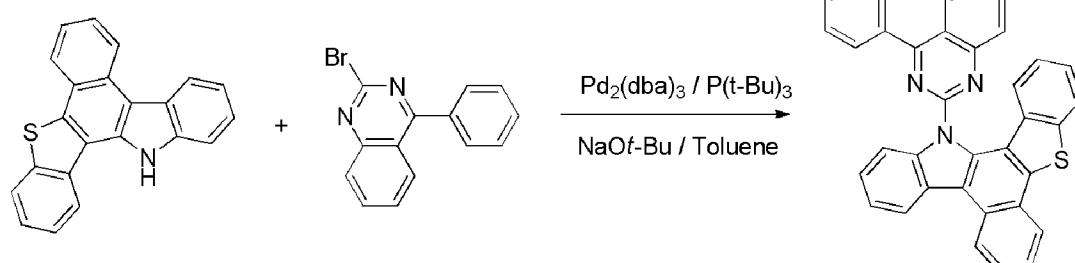


[261] 오원자 혼테로 화합물 (9.5g, 20mmol) 과 2-(4-bromophenyl)imidazo[1,2-a]pyridine (6.6g, 24mmol), 톨루엔 (210 mL), $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (0.92g, 1 mmol), $\text{P}(t\text{-Bu})_3$ (0.4g, 2 mmol), NaOt-Bu (5.8g, 60 mmol)을 상기 Product 1-1의 합성법과 동일하게 하여 product 4-27을 8.1g (수율 61%)를 얻었다.

Product 3-28 합성 예시 [Method 1]

[263] <반응식 15>

[264]

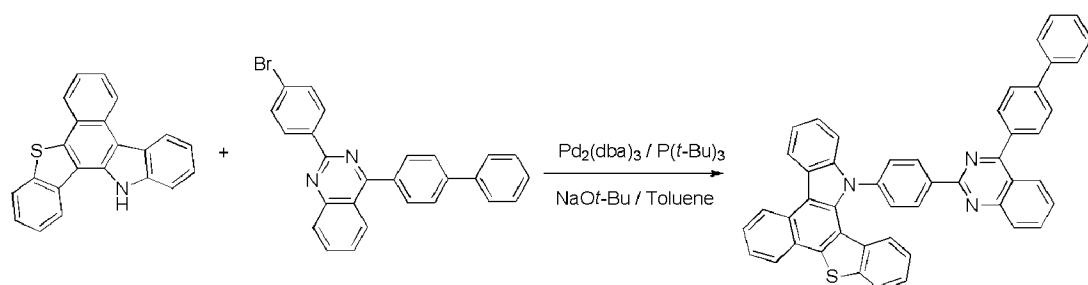


[265] 오원자 혼테로 화합물 (6.5g, 20 mmol)과 2-bromo-4-phenylquinazoline (6.8g, 24 mmol), 톨루엔 (210 mL), $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (0.92g, 1 mmol), $\text{P}(t\text{-Bu})_3$ (0.4g, 2 mmol), NaOt-Bu (5.8g, 60 mmol)을 상기 Product 1-1 합성법과 동일하게 하여 Product 3-28를 7.2g (수율 68%)를 얻었다.

Product 3-38 합성 예시 [Method 1]

[267] <반응식 16>

[268]

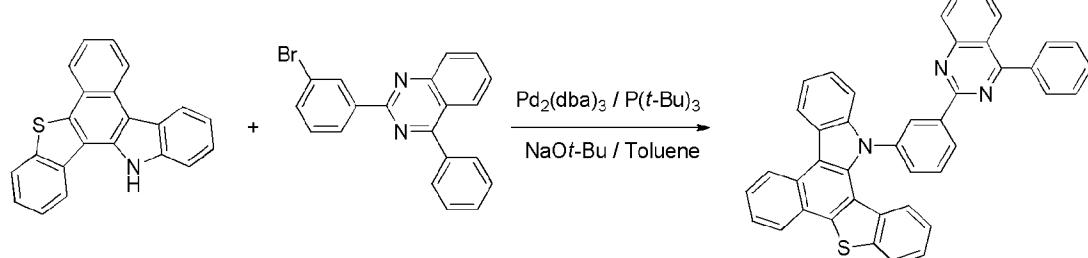


[269] 오원자 혼합화합물 (6.5g, 20 mmol)과 2-bromo-4-phenylquinazoline (10.5g, 24 mmol), 톨루엔(210 mL), $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (0.92g, 1 mmol), $\text{P}(t\text{-Bu})_3$ (0.4g, 2 mmol), NaOt-Bu (5.8g, 60 mmol)을 상기 Product 1-1의 합성법과 동일하게 하여 Product 3-38를 8.7g (수율 64%)을 얻었다.

[270] **Product 3-44 합성 예시[Method 1]**

[271] <반응식 17>

[272]

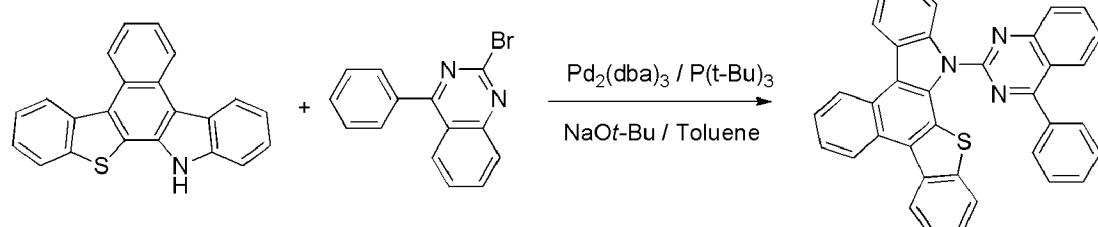


[273] 오원자 혼합화합물 (6.5g, 20 mmol)과 2-(3-bromophenyl)-4-phenylquinazoline (8.7g, 24 mmol), 톨루엔(210 mL), $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (0.92g, 1 mmol), $\text{P}(t\text{-Bu})_3$ (0.4g, 2 mmol), NaOt-Bu (5.8g, 60 mmol)을 상기 Product 1-1의 합성법과 동일하게 하여 Product 3-44를 7.4g (수율 61%)을 얻었다.

[274] **Product 4-28 합성 예시[Method 1]**

[275] <반응식 18>

[276]

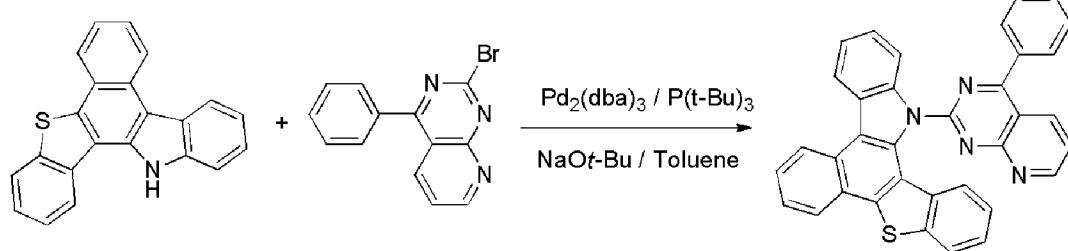


[277] 오원자 혼합화합물 (6.5g, 20 mmol)과 2-bromo-4-phenylquinazoline (6.8g, 24 mmol), 톨루엔(210 mL), $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (0.92g, 1 mmol), $\text{P}(t\text{-Bu})_3$ (0.4g, 2 mmol), NaOt-Bu (5.8g, 60 mmol)을 상기 Product 1-1의 합성법과 동일하게 하여 Product 4-28를 7.1g (수율 67%)을 얻었다.

[278] **Product 6-1 합성 예시[Method 1]**

[279] <반응식 19>

[280]



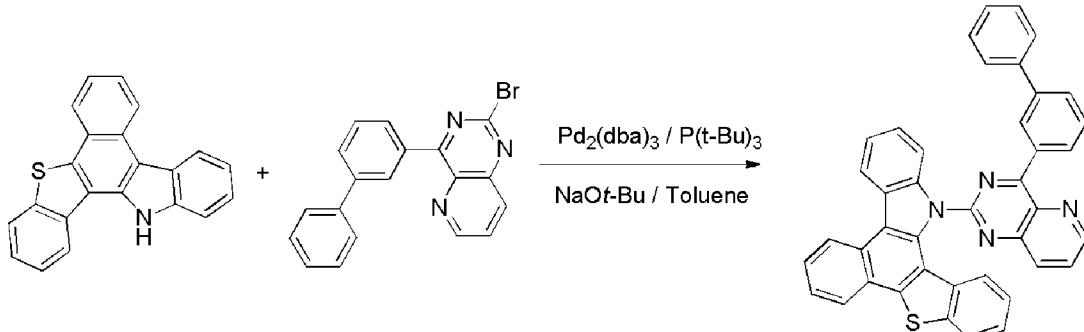
[281] 오원자 해테로 화합물 (6.5g, 20 mmol)과

2-bromo-4-phenylpyrido[2,3-d]pyrimidine (6.9g, 24 mmol), 툴루엔(210 mL), $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (0.92g, 1 mmol), $\text{P}(t\text{-Bu})_3$ (0.4g, 2 mmol), NaOt-Bu (5.8g, 60 mmol)을 상기 Product 1-1의 합성법과 동일하게 하여 Product 6-1를 6.7g (수율 63%)을 얻었다.

[282] Product 7-4 합성 예시 [Method 1]

[283] <반응식 20>

[284]



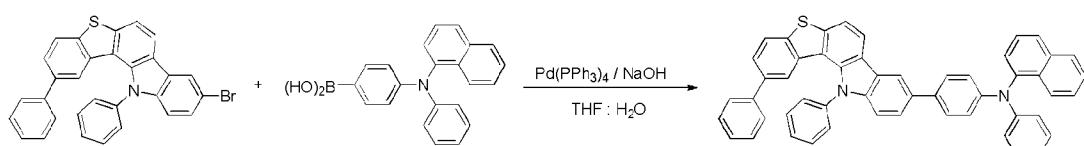
[285] 오원자 해테로 화합물 (6.5g, 20 mmol)과

4-((1,1'-biphenyl)-3-yl)-2-bromopyrido[3,2-d]pyrimidine (8.7g, 24 mmol), 툴루엔(210 mL), $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (0.92g, 1 mmol), $\text{P}(t\text{-Bu})_3$ (0.4g, 2 mmol), NaOt-Bu (5.8g, 60 mmol)을 상기 Product 1-1의 합성법과 동일하게 하여 Product 7-4를 7.5g (수율 62%)을 얻었다.

[286] Product 5-14 합성 예시 [Method 2-1]

[287] <반응식 21>

[288]



[289] 오원자 해테로 화합물 (10.1g, 20 mmol),

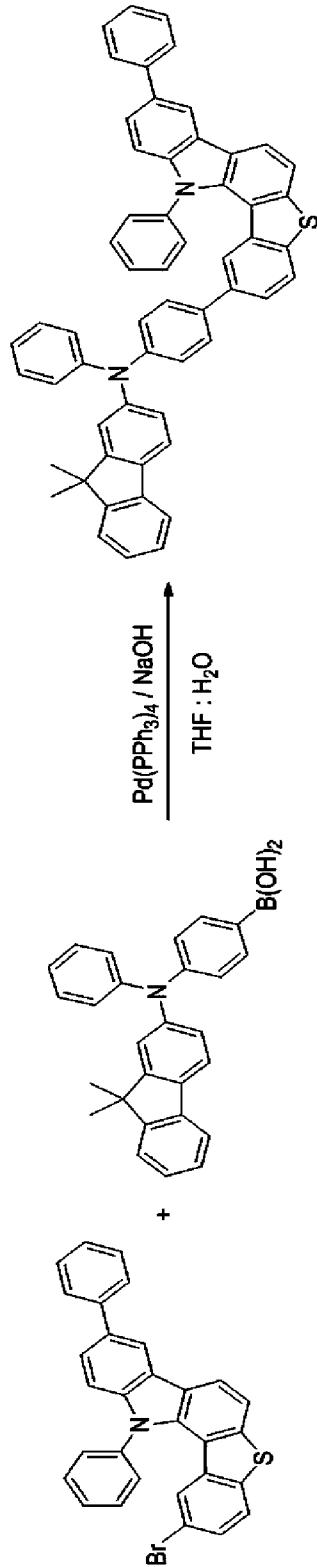
(4-(naphthalen-1-yl(phenyl)amino)phenyl)boronic acid(8.14g, 24 mmol)를 THF에 녹인 후에, $\text{Pd}(\text{PPh}_3)_4$ (0.7g, 0.6 mmol), NaOH (2.4g, 60 mmol), 물을 첨가한 후, 교반 환류 시킨다. 반응이 완료되면 ether와 물로 추출한 후 유기층을 MgSO_4 로 건조하고 농축한 후 생성된 유기물을 silicagel column 및 재결정하여 생성물

Product 5-14를 8.9g (수율 62%)을 얻었다.

[290] **Product 5-23 합성 예시[Method 2-1]**

[291] <반응식 22>

[292]



[293] 오원자 헤테로 화합물 (10.1g, 20 mmol), (4-((9,9-dimethyl-9H-fluoren-2-

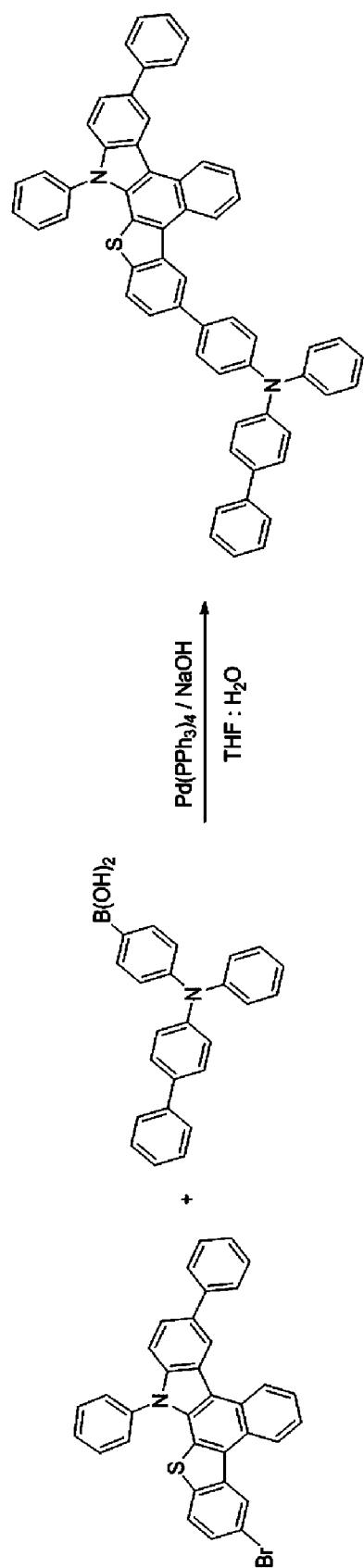
yl)(phenyl)amino)phenyl) boronic acid (9.73g, 24 mmol), Pd(PPh₃)₄ (0.7g, 0.6 mmol), NaOH(2.4g, 60 mmol), 상기 Product 5-14의 합성법과 동일하게 하여 생성물 Product 5-23를 9.4g (수율 60%)을 얻었다.

[294]

[295] **Product 5-49 합성 예시[Method 2-1]**

[296] <반응식 23>

[297]



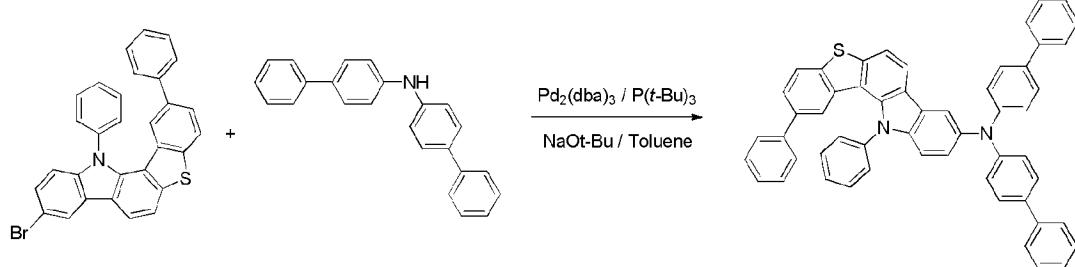
[298] 오원자 혼합화합물 (11.1g, 20 mmol),
 (4-([1,1'-biphenyl]-4-yl(phenyl)amino)phenyl)boronic acid(8.77g, 24 mmol), Pd(PPh_3)

₄ (0.7g, 0.6 mmol), NaOH(2.4g, 60 mmol), 상기 Product 5-14의 합성법과 동일하게 하여 생성물 Product 5-49를 10g (수율 63%)을 얻었다.

[299] **Product 5-5 합성 예시(Method 2-2)**

[300] <반응식 24>

[301]

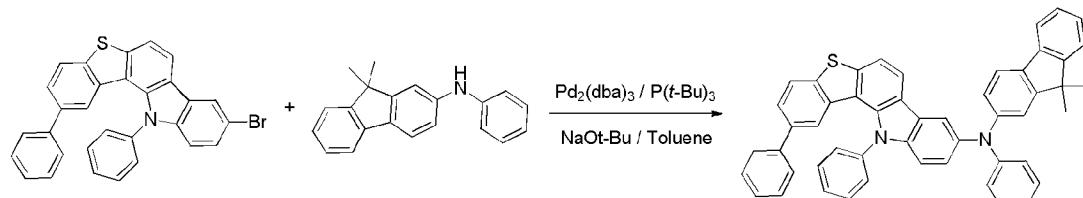


[302] Di([1,1'-biphenyl]-4-yl)amine (6.4g, 20mmol)와 오원자 해테로 화합물 (12.1g, 24mmol) 과 톨루엔 (210 mL), Pd₂(dba)₃ (0.92g, 1 mmol), P(t-Bu)₃ (0.4g, 2 mmol), NaOt-Bu (5.8g, 60 mmol)을 상기 Product 1-1의 합성법과 동일하게 하여 product 5-5를 9.39g (수율 63%)를 얻었다.

[303] **Product 5-6 합성 예시(Method 2-2)**

[304] <반응식 25>

[305]



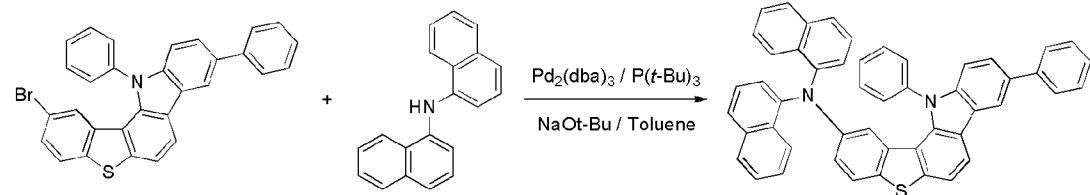
[306] 9,9-dimethyl-N-phenyl-9H-fluoren-2-amine (5.7g, 20mmol)와 오원자 해테로 화합물 (12.1g, 24mmol) 과 톨루엔 (210 mL), Pd₂(dba)₃ (0.92g, 1 mmol), P(t-Bu)₃ (0.4g, 2 mmol), NaOt-Bu (5.8g, 60 mmol)을 상기 Product 1-1의 합성법과 동일하게 하여 product 5-6을 8.8g (수율 62%)를 얻었다.

[307]

[308] **Product 5-19 합성 예시(Method 2-2)**

[309] <반응식 26>

[310]



[311] [표 3]

[312]

화합물	FD-MS	화합물	FD-MS
5-1	m/z=592.20 ($C_{42}H_{28}N_2S=592.75$)	5-2	m/z=668.23 ($C_{48}H_{32}N_2S=668.85$)
5-3	m/z=642.21 ($C_{46}H_{30}N_2S=642.81$)	5-4	m/z=642.21 ($C_{46}H_{30}N_2S=642.81$)
5-5	m/z=744.26 ($C_{54}H_{36}N_2S=744.94$)	5-6	m/z=708.26 ($C_{51}H_{36}N_2S=708.91$)
5-7	m/z=832.29 ($C_{61}H_{40}N_2S=833.05$)	5-8	m/z=692.23 ($C_{50}H_{32}N_2S=692.87$)
5-9	m/z=692.23 ($C_{50}H_{32}N_2S=692.87$)	5-10	m/z=718.24 ($C_{52}H_{34}N_2S=718.90$)
5-11	m/z=758.28 ($C_{55}H_{38}N_2S=758.97$)	5-12	m/z=882.31 ($C_{65}H_{42}N_2S=883.11$)
5-13	m/z=668.23 ($C_{48}H_{32}N_2S=668.85$)	5-14	m/z=718.24 ($C_{52}H_{34}N_2S=718.90$)
5-15	m/z=744.26 ($C_{54}H_{36}N_2S=744.94$)	5-16	m/z=784.29 ($C_{57}H_{40}N_2S=785.01$)
5-17	m/z=592.20 ($C_{42}H_{28}N_2S=592.75$)	5-18	m/z=642.21 ($C_{46}H_{30}N_2S=642.81$)
5-19	m/z=692.23 ($C_{50}H_{32}N_2S=692.87$)	5-20	m/z=744.26 ($C_{54}H_{36}N_2S=744.94$)
5-21	m/z=668.23 ($C_{48}H_{32}N_2S=668.85$)	5-22	m/z=718.24 ($C_{52}H_{34}N_2S=718.90$)
5-23	m/z=784.29 ($C_{57}H_{40}N_2S=785.01$)	5-24	m/z=592.20 ($C_{42}H_{28}N_2S=592.75$)
5-25	m/z=668.23 ($C_{48}H_{32}N_2S=668.85$)	5-26	m/z=642.21 ($C_{46}H_{30}N_2S=642.81$)
5-27	m/z=642.21 ($C_{46}H_{30}N_2S=642.81$)	5-28	m/z=744.26 ($C_{54}H_{36}N_2S=744.94$)
5-29	m/z=708.26 ($C_{51}H_{36}N_2S=708.91$)	5-30	m/z=832.29 ($C_{61}H_{40}N_2S=833.05$)
5-31	m/z=692.23 ($C_{50}H_{32}N_2S=692.87$)	5-32	m/z=692.23 ($C_{50}H_{32}N_2S=692.87$)
5-33	m/z=718.24 ($C_{52}H_{34}N_2S=718.90$)	5-34	m/z=758.28 ($C_{55}H_{38}N_2S=758.97$)
5-35	m/z=882.31 ($C_{65}H_{42}N_2S=883.11$)	5-36	m/z=668.23 ($C_{48}H_{32}N_2S=668.85$)
5-37	m/z=718.24 ($C_{52}H_{34}N_2S=718.90$)	5-38	m/z=744.26 ($C_{54}H_{36}N_2S=744.94$)
5-39	m/z=784.29 ($C_{57}H_{40}N_2S=785.01$)	5-40	m/z=592.20 ($C_{42}H_{28}N_2S=592.75$)
5-41	m/z=642.21 ($C_{46}H_{30}N_2S=642.81$)	5-42	m/z=692.23 ($C_{50}H_{32}N_2S=692.87$)
5-43	m/z=744.26 ($C_{54}H_{36}N_2S=744.94$)	5-44	m/z=668.23 ($C_{48}H_{32}N_2S=668.85$)
5-45	m/z=718.24 ($C_{52}H_{34}N_2S=718.90$)	5-46	m/z=784.29 ($C_{57}H_{40}N_2S=785.01$)
5-47	m/z=692.23 ($C_{50}H_{32}N_2S=692.87$)	5-48	m/z=718.24 ($C_{52}H_{34}N_2S=718.90$)
5-49	m/z=794.28 ($C_{58}H_{38}N_2S=795.00$)	5-50	m/z=682.24 ($C_{49}H_{34}N_2S=682.87$)
5-51	m/z=806.28 ($C_{59}H_{38}N_2S=807.01$)	6-1	m/z=528.14 ($C_{35}H_{20}N_4S=528.63$)
6-2	m/z=533.17 ($C_{35}H_{15}D_5N_4S=533.66$)	6-3	m/z=604.17 ($C_{41}H_{24}N_4S=604.72$)
6-4	m/z=604.17 ($C_{41}H_{24}N_4S=604.72$)	6-5	m/z=578.16 ($C_{39}H_{22}N_4S=578.68$)
6-6	m/z=578.16 ($C_{39}H_{22}N_4S=578.68$)	6-7	m/z=680.20 ($C_{47}H_{28}N_4S=680.82$)
6-8	m/z=644.20 ($C_{44}H_{28}N_4S=644.78$)	6-9	m/z=604.17 ($C_{41}H_{24}N_4S=604.72$)
6-10	m/z=609.20 ($C_{41}H_{19}D_5N_4S=609.75$)	6-11	m/z=680.20 ($C_{47}H_{28}N_4S=680.82$)

6-12	m/z=680.20 ($C_{47}H_{28}N_4S=680.82$)	6-13	m/z=654.19 ($C_{45}H_{26}N_4S=654.78$)
6-14	m/z=654.19 ($C_{45}H_{26}N_4S=654.78$)	6-15	m/z=756.23 ($C_{53}H_{32}N_4S=756.91$)
6-16	m/z=720.23 ($C_{50}H_{32}N_4S=720.88$)	6-17	m/z=604.17 ($C_{41}H_{24}N_4S=604.72$)
6-18	m/z=609.20 ($C_{41}H_{19}D_5N_4S=609.75$)	6-19	m/z=680.20 ($C_{47}H_{28}N_4S=680.82$)
6-20	m/z=680.20 ($C_{47}H_{28}N_4S=680.82$)	6-21	m/z=654.19 ($C_{45}H_{26}N_4S=654.78$)
6-22	m/z=654.19 ($C_{45}H_{26}N_4S=654.78$)	6-23	m/z=756.23 ($C_{53}H_{32}N_4S=756.91$)
6-24	m/z=720.23 ($C_{50}H_{32}N_4S=720.88$)	6-25	m/z=528.14 ($C_{35}H_{20}N_4S=528.63$)
6-26	m/z=533.17 ($C_{35}H_{15}D_5N_4S=533.66$)	6-27	m/z=604.17 ($C_{41}H_{24}N_4S=604.72$)
6-28	m/z=604.17 ($C_{41}H_{24}N_4S=604.72$)	6-29	m/z=578.16 ($C_{39}H_{22}N_4S=578.68$)
6-30	m/z=578.16 ($C_{39}H_{22}N_4S=578.68$)	6-31	m/z=680.20 ($C_{47}H_{28}N_4S=680.82$)
6-32	m/z=644.20 ($C_{44}H_{28}N_4S=644.78$)	6-33	m/z=604.17 ($C_{41}H_{24}N_4S=604.72$)
6-34	m/z=609.20 ($C_{41}H_{19}D_5N_4S=609.75$)	6-35	m/z=680.20 ($C_{47}H_{28}N_4S=680.82$)
6-36	m/z=680.20 ($C_{47}H_{28}N_4S=680.82$)	6-37	m/z=654.19 ($C_{45}H_{26}N_4S=654.78$)
6-38	m/z=654.19 ($C_{45}H_{26}N_4S=654.78$)	6-39	m/z=756.23 ($C_{53}H_{32}N_4S=756.91$)
6-40	m/z=720.23 ($C_{50}H_{32}N_4S=720.88$)	6-41	m/z=604.17 ($C_{41}H_{24}N_4S=604.72$)
6-42	m/z=609.20 ($C_{41}H_{19}D_5N_4S=609.75$)	6-43	m/z=680.20 ($C_{47}H_{28}N_4S=680.82$)
6-44	m/z=680.20 ($C_{47}H_{28}N_4S=680.82$)	6-45	m/z=654.19 ($C_{45}H_{26}N_4S=654.78$)
6-46	m/z=654.19 ($C_{45}H_{26}N_4S=654.78$)	6-47	m/z=756.23 ($C_{53}H_{32}N_4S=756.91$)
6-48	m/z=720.23 ($C_{50}H_{32}N_4S=720.88$)	7-1	m/z=528.14 ($C_{35}H_{20}N_4S=528.63$)
7-2	m/z=533.17 ($C_{35}H_{15}D_5N_4S=533.66$)	7-3	m/z=604.17 ($C_{41}H_{24}N_4S=604.72$)
7-4	m/z=604.17 ($C_{41}H_{24}N_4S=604.72$)	7-5	m/z=578.16 ($C_{39}H_{22}N_4S=578.68$)
7-6	m/z=578.16 ($C_{39}H_{22}N_4S=578.68$)	7-7	m/z=680.20 ($C_{47}H_{28}N_4S=680.82$)
7-8	m/z=644.20 ($C_{44}H_{28}N_4S=644.78$)	7-9	m/z=604.17 ($C_{41}H_{24}N_4S=604.72$)
7-10	m/z=609.20 ($C_{41}H_{19}D_5N_4S=609.75$)	7-11	m/z=680.20 ($C_{47}H_{28}N_4S=680.82$)
7-12	m/z=680.20 ($C_{47}H_{28}N_4S=680.82$)	7-13	m/z=654.19 ($C_{45}H_{26}N_4S=654.78$)
7-14	m/z=654.19 ($C_{45}H_{26}N_4S=654.78$)	7-15	m/z=756.23 ($C_{53}H_{32}N_4S=756.91$)
7-16	m/z=720.23 ($C_{50}H_{32}N_4S=720.88$)	7-17	m/z=604.17 ($C_{41}H_{24}N_4S=604.72$)
7-18	m/z=609.20 ($C_{41}H_{19}D_5N_4S=609.75$)	7-19	m/z=680.20 ($C_{47}H_{28}N_4S=680.82$)
7-20	m/z=680.20 ($C_{47}H_{28}N_4S=680.82$)	7-21	m/z=654.19 ($C_{45}H_{26}N_4S=654.78$)
7-22	m/z=654.19 ($C_{45}H_{26}N_4S=654.78$)	7-23	m/z=756.23 ($C_{53}H_{32}N_4S=756.91$)
7-24	m/z=720.23 ($C_{50}H_{32}N_4S=720.88$)	7-25	m/z=528.14 ($C_{35}H_{20}N_4S=528.63$)
7-26	m/z=533.17 ($C_{35}H_{15}D_5N_4S=533.66$)	7-27	m/z=604.17 ($C_{41}H_{24}N_4S=604.72$)

[314]

7-28	m/z=604.17 ($C_{41}H_{24}N_4S=604.72$)	7-29	m/z=578.16 ($C_{39}H_{22}N_4S=578.68$)
7-30	m/z=578.16 ($C_{39}H_{22}N_4S=578.68$)	7-31	m/z=680.20 ($C_{47}H_{28}N_4S=680.82$)
7-32	m/z=644.20 ($C_{44}H_{28}N_4S=644.78$)	7-33	m/z=604.17 ($C_{41}H_{24}N_4S=604.72$)
7-34	m/z=609.20 ($C_{41}H_{19}D_5N_4S=609.75$)	7-35	m/z=680.20 ($C_{47}H_{28}N_4S=680.82$)
7-36	m/z=680.20 ($C_{47}H_{28}N_4S=680.82$)	7-37	m/z=654.19 ($C_{45}H_{26}N_4S=654.78$)
7-38	m/z=654.19 ($C_{45}H_{26}N_4S=654.78$)	7-39	m/z=756.23 ($C_{53}H_{32}N_4S=756.91$)
7-40	m/z=720.23 ($C_{50}H_{32}N_4S=720.88$)	7-41	m/z=604.17 ($C_{41}H_{24}N_4S=604.72$)
7-42	m/z=609.20 ($C_{41}H_{19}D_5N_4S=609.75$)	7-43	m/z=680.20 ($C_{47}H_{28}N_4S=680.82$)
7-44	m/z=680.20 ($C_{47}H_{28}N_4S=680.82$)	7-45	m/z=654.19 ($C_{45}H_{26}N_4S=654.78$)
7-46	m/z=654.19 ($C_{45}H_{26}N_4S=654.78$)	7-47	m/z=756.23 ($C_{53}H_{32}N_4S=756.91$)
7-48	m/z=720.23 ($C_{50}H_{32}N_4S=720.88$)		

[315] **유기전기소자의 제조평가**

[316] **[실험 예 1] (인광 그린 호스트)**

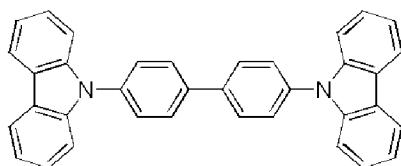
[317] 합성을 통해 얻은 화합물을 발광층의 호스트 물질로 사용하여 통상적인 방법에 따라 유기전계 발광소자를 제작하였다. 먼저, 유리 기판에 형성된 ITO층(양극) 위에 N¹-(naphthalen-2-yl)-N⁴,N⁴-bis(4-(naphthalen-2-yl(phenyl)amino)phenyl)-N¹-phenylbenzene-1,4-diamine (2-TNATA로 약기함) 막을 진공증착하여 60 nm 두께의 정공주입층을 형성하였다. 이어서, 정공주입층 상에 4,4'-비스[N-(1-나프탈)-N-페닐아미노]비페닐 (이하 -NPD로 약기함)을 20 nm 두께로 진공증착하여 정공수송층을 형성하였다. 그리고, 정공수송층 상부에 본 발광의 화합물(1-1~1-32, 2-1~2-32, 3-1~3-27, 4-1~4-27)을 호스트 물질로, Ir(ppy)₃ [tris(2-phenylpyridine)-iridium] 을 도편트물질로 사용하여 95:5 중량으로 도핑하여 30nm 두께의 발광층을 증착하였다. 다음으로, 발광층 상에 (1,1'-비스페닐)-4-올레이토)비스(2-메틸-8-퀴놀린올레이토)알루미늄(이하 BALq로 약기함)을 10 nm 두께로 진공증착하여 정공저지층을 형성한 후, 트리스(8-퀴놀리놀)알루미늄(이하 Alq₃로 약칭 함)을 40 nm 두께로 성막하여 전자주입층을 형성하였다. 이후, 할로젠헤 알칼리 금속인 LiF를 0.2 nm 두께로 증착하고, 이어서 Al을 150 nm의 두께로 증착하여 Al/LiF를 음극을 형성하여 유기 전계 발광소자를 제조하였다.

[318] **[비교 예 1]**

[319] 발광 호스트 물질로 하기 비교화합물 1(4,4'-di(9H-carbazol-9-yl)-1,1'-biphenyl)을 사용한 점을 제외하고, 실험 예 1과 동일한 방법으로 유기 전계발광소자를 제작하였다.

[320] <비>교화합물 1>

[321]



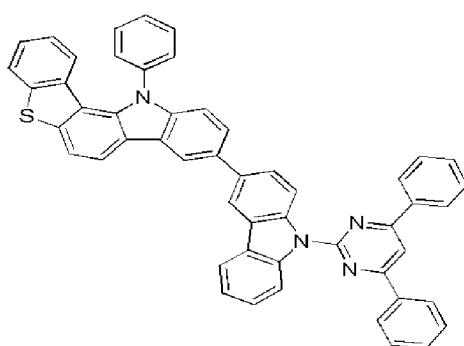
[322] [비]교예 2]

[323] 발광 호스트 물질로 하기 비교화합물

2(9-(9-(4,6-diphenylpyrimidin-2-yl)-9H-carbazol-3-yl)-12-phenyl-12H-benzo[4,5]thieno[3,2-a]carbazole)를 사용한 점을 제외하고, 실험 예 1과 동일한 방법으로 유기 전계발광소자를 제작하였다.

[324] <비>교화합물 2>

[325]



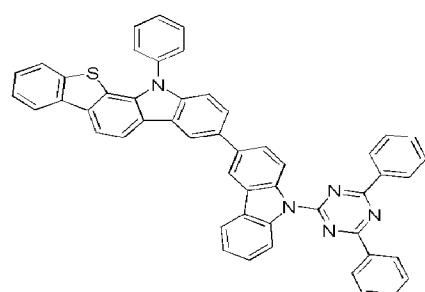
[326] [비]교예 3]

[327] 발광 호스트 물질로 하기 비교화합물

3(3-(9-(4,6-diphenyl-1,3,5-triazin-2-yl)-9H-carbazol-3-yl)-12-phenyl-12H-benzo[4,5]thieno[2,3-a]carbazole)을 사용한 점을 제외하고, 실험 예 1과 동일한 방법으로 유기 전계발광소자를 제작하였다.

[328] <비>교화합물 3>

[329]



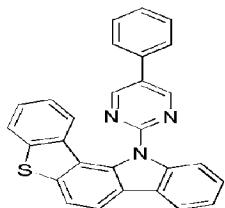
[330] [비]교예 4]

[331] 발광 호스트 물질로 하기 비교화합물

4(12-(5-phenylpyrimidin-2-yl)-12H-benzo[4,5]thieno[3,2-a]carbazole)를 사용한 점을 제외하고, 실험 예 1과 동일한 방법으로 유기 전계발광소자를 제작하였다.

[332] <비>교화합물 4>

[333]



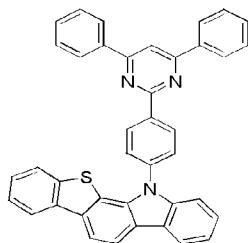
[334] [비교예 5]

[335] 발광 호스트 물질로 하기 비교화합물

5(12-(4-(4,6-diphenylpyrimidin-2-yl)phenyl)-12H-benzo[4,5]thieno[2,3-a]carbazole)를 사용한 점을 제외하고, 실험 예 1과 동일한 방법으로 유기 전계발광소자를 제작하였다.

[336] <비>교화합물 5>

[337]



[338] 상기 실험 예 1 및 비교 예 1 내지 5에 의해 제조된 유기전기발광소자들에 순바이어스 직류전압을 가하여 포토리서치(photoresearch)사의 PR-650으로 전기발광(EL) 특성을 측정한 결과는 하기 표 4와 같으며, 이 때 300cd/m² 기준 휘도에서 맥사이언스사에서 제조된 수명 측정 장비를 통해 T95 수명을 측정하였다. 하기 표에서, 본 발명의 실시 예 1에 따라 제조된 유기전계발광소자를 실시 예 1 내지 103으로 기재하였다.

[339] [표 4]

[340]

	화합물	구동 전압	전류 (mA/cm ²)	휘도 (cd/m ²)	효율 (cd/A)	T(95)	CIE (x, y)
비교예(1)	비교화합물 (1)	6.3	7.0	300	4.3	51.8	(0.33, 0.61)
비교예(2)	비교화합물 (2)	5.8	5.9	300	5.1	70.6	(0.33, 0.61)
비교예(3)	비교화합물 (3)	5.7	6.0	300	5	65.6	(0.33, 0.61)
비교예(4)	비교화합물 (4)	5.6	5.8	300	5.2	82.5	(0.33, 0.61)
비교예(5)	비교화합물 (5)	5.6	5.9	300	5.1	86.7	(0.33, 0.61)
실시예(1)	화합물(1-1)	5.3	4.6	300	6.6	110.6	(0.32, 0.61)
실시예(2)	화합물(1-2)	5.1	4.7	300	6.4	113.9	(0.33, 0.60)
실시예(3)	화합물(1-3)	5.1	4.9	300	6.2	109.0	(0.30, 0.61)
실시예(4)	화합물(1-4)	5.4	5.0	300	6.0	107.5	(0.30, 0.61)
실시예(5)	화합물(1-5)	5.4	4.6	300	6.6	108.9	(0.31, 0.60)
실시예(6)	화합물(1-6)	5.6	5.8	300	5.2	82.7	(0.33, 0.61)
실시예(7)	화합물(1-7)	5.0	5.0	300	6.0	115.7	(0.32, 0.60)
실시예(8)	화합물(1-8)	4.9	4.3	300	7.0	136.2	(0.32, 0.61)
실시예(9)	화합물(1-9)	5.0	4.2	300	7.2	145.9	(0.33, 0.60)
실시예(10)	화합물(1-10)	5.3	4.7	300	6.3	137.4	(0.30, 0.60)
실시예(11)	화합물(1-11)	5.2	4.3	300	7.0	145.2	(0.30, 0.61)
실시예(12)	화합물(1-12)	4.9	4.7	300	6.4	134.8	(0.31, 0.61)
실시예(13)	화합물(1-13)	5.5	5.7	300	5.3	93.5	(0.31, 0.61)
실시예(14)	화합물(1-14)	4.9	5.1	300	5.9	130.8	(0.31, 0.60)
실시예(15)	화합물(1-15)	5.2	4.5	300	6.7	132.9	(0.31, 0.60)
실시예(16)	화합물(1-16)	5.1	5.2	300	5.8	114.5	(0.32, 0.61)
실시예(17)	화합물(1-17)	5.0	4.0	300	7.5	147.7	(0.31, 0.61)
실시예(18)	화합물(1-18)	5.0	4.2	300	7.2	137.7	(0.33, 0.60)
실시예(19)	화합물(1-19)	5.0	4.4	300	6.9	123.8	(0.31, 0.60)
실시예(20)	화합물(1-20)	5.0	4.0	300	7.4	138.6	(0.32, 0.61)
실시예(21)	화합물(1-21)	5.4	4.8	300	6.3	129.8	(0.32, 0.61)
실시예(22)	화합물(1-22)	4.9	4.6	300	6.5	132.2	(0.33, 0.60)
실시예(23)	화합물(1-23)	5.0	4.9	300	6.2	115.0	(0.30, 0.61)
실시예(24)	화합물(1-24)	5.1	4.1	300	7.3	112.9	(0.31, 0.61)
실시예(25)	화합물(1-25)	5.3	4.2	300	7.2	120.7	(0.30, 0.60)
실시예(26)	화합물(1-26)	4.9	5.2	300	5.8	120.6	(0.33, 0.61)
실시예(27)	화합물(1-27)	5.3	4.4	300	6.9	140.7	(0.32, 0.61)
실시예(28)	화합물(1-28)	5.0	4.2	300	7.2	137.7	(0.33, 0.60)
실시예(29)	화합물(1-29)	5.3	5.1	300	5.9	106.8	(0.30, 0.61)

실시예(30)	화합물(1-30)	5.1	4.6	300	6.6	139.2	(0.31, 0.61)
실시예(31)	화합물(1-31)	5.0	4.8	300	6.3	143.0	(0.31, 0.60)
실시예(32)	화합물(1-32)	5.2	4.2	300	7.2	123.3	(0.33, 0.61)
실시예(33)	화합물(2-1)	4.9	5.2	300	5.8	149.0	(0.32, 0.60)
실시예(34)	화합물(2-2)	5.4	5.3	300	5.6	123.5	(0.32, 0.61)
실시예(35)	화합물(2-3)	5.2	4.7	300	6.3	129.4	(0.33, 0.60)
실시예(36)	화합물(2-4)	5.0	5.2	300	5.8	105.8	(0.30, 0.60)
실시예(37)	화합물(2-5)	5.0	4.9	300	6.1	132.9	(0.30, 0.61)
실시예(38)	화합물(2-6)	5.6	6.1	300	4.9	80.2	(0.32, 0.61)
실시예(39)	화합물(2-7)	5.1	4.5	300	6.7	131.2	(0.30, 0.61)
실시예(40)	화합물(2-8)	5.1	4.8	300	6.3	117.8	(0.31, 0.60)
실시예(41)	화합물(2-9)	5.3	5.1	300	5.9	102.8	(0.31, 0.60)
실시예(42)	화합물(2-10)	5.0	4.2	300	7.2	108.6	(0.32, 0.61)
실시예(43)	화합물(2-11)	5.1	4.7	300	6.3	114.6	(0.31, 0.61)
실시예(44)	화합물(2-12)	5.0	5.2	300	5.8	114.4	(0.33, 0.60)
실시예(45)	화합물(2-13)	5.7	5.8	300	5.2	81.9	(0.31, 0.60)
실시예(46)	화합물(2-14)	4.9	5.1	300	5.8	131.1	(0.32, 0.60)
실시예(47)	화합물(2-15)	4.8	4.9	300	6.1	119.0	(0.32, 0.61)
실시예(48)	화합물(2-16)	4.9	4.6	300	6.6	139.4	(0.33, 0.60)
실시예(49)	화합물(2-17)	4.9	5.3	300	5.6	131.2	(0.30, 0.61)
실시예(50)	화합물(2-18)	5.3	4.7	300	6.4	136.8	(0.31, 0.61)
실시예(51)	화합물(2-19)	5.0	4.4	300	6.8	127.5	(0.31, 0.60)
실시예(52)	화합물(2-20)	5.0	4.3	300	7.0	145.6	(0.33, 0.61)
실시예(53)	화합물(2-21)	5.1	5.0	300	6.0	132.6	(0.32, 0.61)
실시예(54)	화합물(2-22)	4.9	5.1	300	5.9	106.9	(0.33, 0.60)
실시예(55)	화합물(2-23)	5.3	4.5	300	6.7	127.7	(0.30, 0.61)
실시예(56)	화합물(2-24)	4.9	4.5	300	6.7	110.6	(0.31, 0.61)
실시예(57)	화합물(2-25)	5.3	4.4	300	6.8	116.4	(0.31, 0.60)
실시예(58)	화합물(2-26)	5.0	4.5	300	6.7	102.7	(0.33, 0.61)
실시예(59)	화합물(2-27)	5.3	4.2	300	7.1	105.1	(0.32, 0.60)
실시예(60)	화합물(2-28)	4.9	4.0	300	7.5	100.7	(0.32, 0.60)
실시예(61)	화합물(2-29)	5.3	5.3	300	5.6	137.9	(0.33, 0.60)
실시예(62)	화합물(2-30)	5.1	4.1	300	7.2	123.7	(0.30, 0.60)
실시예(63)	화합물(2-31)	5.3	4.8	300	6.2	123.7	(0.30, 0.61)
실시예(64)	화합물(2-32)	5.0	4.4	300	6.9	112.8	(0.32, 0.60)
실시예(65)	화합물(3-1)	5.2	4.2	300	7.1	103.2	(0.31, 0.61)
실시예(66)	화합물(3-2)	5.2	4.7	300	6.4	135.2	(0.31, 0.60)

[342]

실시예(67)	화합물(3-3)	4.8	4.5	300	6.6	140.5	(0.31, 0.60)
실시예(68)	화합물(3-4)	5.0	4.2	300	7.1	141.5	(0.32, 0.61)
실시예(69)	화합물(3-5)	4.8	4.7	300	6.3	133.8	(0.31, 0.61)
실시예(70)	화합물(3-6)	5.6	5.8	300	5.2	93.1	(0.33, 0.60)
실시예(71)	화합물(3-7)	5.0	4.0	300	7.5	112.9	(0.31, 0.60)
실시예(72)	화합물(3-8)	5.3	4.9	300	6.1	130.1	(0.32, 0.61)
실시예(73)	화합물(3-9)	5.1	4.2	300	7.2	123.3	(0.32, 0.61)
실시예(74)	화합물(3-10)	4.8	4.5	300	6.6	149.0	(0.33, 0.60)
실시예(75)	화합물(3-11)	5.1	4.6	300	6.5	106.1	(0.30, 0.61)
실시예(76)	화합물(3-12)	5.0	4.3	300	7.0	127.6	(0.31, 0.61)
실시예(77)	화합물(3-13)	5.5	5.8	300	5.2	85.6	(0.31, 0.60)
실시예(78)	화합물(3-14)	5.1	4.9	300	6.2	134.0	(0.33, 0.61)
실시예(79)	화합물(3-15)	5.2	4.5	300	6.7	132.2	(0.32, 0.61)
실시예(80)	화합물(3-16)	5.3	4.7	300	6.4	124.4	(0.33, 0.60)
실시예(81)	화합물(3-17)	5.1	4.3	300	7.0	113.8	(0.32, 0.61)
실시예(82)	화합물(3-18)	5.0	4.1	300	7.3	147.6	(0.33, 0.60)
실시예(83)	화합물(3-19)	5.1	4.2	300	7.1	100.6	(0.30, 0.61)
실시예(84)	화합물(3-20)	4.9	5.0	300	6.0	106.7	(0.30, 0.61)
실시예(85)	화합물(3-21)	5.0	5.1	300	5.9	140.2	(0.31, 0.60)
실시예(86)	화합물(3-22)	5.1	4.8	300	6.2	118.8	(0.33, 0.61)
실시예(87)	화합물(3-23)	5.4	4.1	300	7.3	100.0	(0.32, 0.60)
실시예(88)	화합물(3-24)	5.2	5.0	300	6.0	121.2	(0.32, 0.61)
실시예(89)	화합물(3-25)	5.1	4.7	300	6.3	145.9	(0.33, 0.60)
실시예(90)	화합물(3-26)	5.0	4.2	300	7.1	136.9	(0.30, 0.60)
실시예(91)	화합물(3-27)	5.1	4.1	300	7.3	132.8	(0.30, 0.61)
실시예(92)	화합물(4-1)	4.8	4.7	300	6.4	106.2	(0.31, 0.61)
실시예(93)	화합물(4-2)	5.3	5.1	300	5.9	106.6	(0.31, 0.61)
실시예(94)	화합물(4-3)	4.9	4.3	300	7.0	146.7	(0.31, 0.60)
실시예(95)	화합물(4-4)	5.1	4.1	300	7.4	146.4	(0.31, 0.60)
실시예(96)	화합물(4-5)	4.9	4.9	300	6.1	135.8	(0.32, 0.61)
실시예(97)	화합물(4-6)	5.7	6.0	300	5.0	80.3	(0.31, 0.61)
실시예(98)	화합물(4-7)	4.8	4.4	300	6.8	127.4	(0.33, 0.60)
실시예(99)	화합물(4-8)	5.3	4.9	300	6.1	131.6	(0.31, 0.60)
실시예(100)	화합물(4-9)	4.9	5.1	300	5.8	100.8	(0.32, 0.61)
실시예(101)	화합물(4-10)	4.9	5.0	300	6.1	107.3	(0.32, 0.61)
실시예(102)	화합물(4-11)	5.2	4.6	300	6.5	119.6	(0.33, 0.60)
실시예(103)	화합물(4-12)	4.9	4.2	300	7.2	127.7	(0.30, 0.61)

[343]

실시예(104)	화합물(4-13)	5.6	5.8	300	5.2	84.7	(0.31, 0.61)
실시예(105)	화합물(4-14)	5.0	4.7	300	6.4	135.5	(0.30, 0.60)
실시예(106)	화합물(4-15)	5.4	4.4	300	6.8	112.7	(0.33, 0.61)
실시예(107)	화합물(4-16)	5.1	4.0	300	7.4	107.2	(0.32, 0.61)
실시예(108)	화합물(4-17)	5.1	4.4	300	6.7	139.7	(0.33, 0.60)
실시예(109)	화합물(4-18)	5.2	5.1	300	5.9	104.8	(0.30, 0.61)
실시예(110)	화합물(4-19)	5.1	4.6	300	6.5	109.3	(0.31, 0.61)
실시예(111)	화합물(4-20)	4.9	4.6	300	6.5	115.0	(0.31, 0.60)
실시예(112)	화합물(4-21)	5.3	5.2	300	5.8	139.2	(0.33, 0.61)
실시예(113)	화합물(4-22)	5.2	5.0	300	5.9	133.3	(0.32, 0.60)
실시예(114)	화합물(4-23)	4.9	4.1	300	7.2	141.0	(0.32, 0.61)
실시예(115)	화합물(4-24)	5.3	5.3	300	5.7	137.9	(0.33, 0.60)
실시예(116)	화합물(4-25)	5.3	4.3	300	7.0	120.8	(0.30, 0.60)
실시예(117)	화합물(4-26)	5.2	5.1	300	5.9	124.0	(0.30, 0.61)
실시예(118)	화합물(4-27)	4.9	4.4	300	6.8	107.0	(0.32, 0.61)

[344] 상기 표에서 보듯이 비교예 1 내지 비교예 5보다 본 발명의 화합물들이 대부분 낮은 구동전압과 높은 효율, 높은 수명을 나타내는 것을 확인할 수 있었다. 또한 코어의 $R_1 \sim R_4$, $R_{11} \sim R_{14}$ 의 위치에 헤테로고리기를 포함하는 본 발명의 화합물의 경우 비교예 2 및 비교예 3과 같이 비교적 높은 구동전압과 낮은 효율 및 낮은 수명을 나타냈다. 이는 $R_1 \sim R_4$, $R_{11} \sim R_{14}$ 의 위치에 헤테로 고리기가 연결되었을 경우 비교적 작은 band gap을 갖게 되며, HOMO가 높아지게 되어 정공 이동도가 떨어지게 되고, 구동전압이 증가하게 되면서 효율 및 수명이 낮아지는 것으로 판단된다. 또한, 코어의 $R_1 \sim R_4$, $R_{11} \sim R_{14}$ 의 위치에 수소로 치환된 화합물인 비교예 4, 비교예 5의 경우 본 발명의 화합물보다 낮은 수명을 나타내는 것을 확인할 수 있었다.

[345]

[실험 예 2](인광 레드)

[346] 먼저, 유리 기판에 형성된 ITO층(양극) 위에 2-TNATA를 진공증착하여 60 nm 두께의 정공주입층을 형성한 후, 이 막 상에 NPD를 20 nm 두께로 진공 증착하여 정공수송층을 형성하였다. 이어서, 상기 정공수송층 상부에 본 발명의 화합물(3-28~3-51, 4-28~4-51, 6-1~6-48, 7-1~7-48)을 호스트물질로, $(\text{piq})_2\text{Ir(acac)}$ [$\text{bis}-(1\text{-phenylisoquinolyl})\text{iridium(III)}\text{acetylacetone}$] 을 도편트 물질로 사용하여 95:5 중량으로 도핑함으로써 30nm 두께의 발광층을 증착한 후, BALq를 10 nm 두께로 진공증착하여 정공저지층을 형성하고, Alq₃를 40 nm 두께로 성막하여 전자주입층을 형성하였다. 이후, 할로젠헤 알칼리 금속인 LiF를 0.2 nm 두께로 증착하고, 이어서 Al을 150 nm의 두께로 증착하여 이 Al/LiF 음극을 형성함으로써 유기 전계 발광소자를 제조하였다.

[348] [비교예 6]

[349] 발광 호스트 물질로 비교화합물 1(4,4'-di(9H-carbazol-9-yl)-1,1'-biphenyl)을 사용한 점을 제외하고, 실험 예 2와 동일한 방법으로 유기 전계발광소자를 제작하였다.

[350] [비교예 7]

[351] 발광 호스트 물질로 비교화합물

2(9-(9-(4,6-diphenylpyrimidin-2-yl)-9H-carbazol-3-yl)-12-phenyl-12H-benzo[4,5]thieno[3,2-a]carbazole)를 사용한 점을 제외하고, 실험 예 2와 동일한 방법으로 유기 전계발광소자를 제작하였다.

[352] [비교예 8]

[353] 발광 호스트 물질로 비교화합물

3(3-(9-(4,6-diphenyl-1,3,5-triazin-2-yl)-9H-carbazol-3-yl)-12-phenyl-12H-benzo[4,5]thieno[2,3-a]carbazole)을 사용한 점을 제외하고, 실험 예 2와 동일한 방법으로 유기 전계발광소자를 제작하였다.

[354] [비교예 9]

[355] 발광 호스트 물질로 비교화합물

4(12-(5-phenylpyrimidin-2-yl)-12H-benzo[4,5]thieno[3,2-a]carbazole)를 사용한 점을 제외하고, 실험 예 2와 동일한 방법으로 유기 전계발광소자를 제작하였다.

[356] [비교예 10]

[357] 발광 호스트 물질로 비교화합물

5(12-(4-(4,6-diphenylpyrimidin-2-yl)phenyl)-12H-benzo[4,5]thieno[2,3-a]carbazole)를 사용한 점을 제외하고, 실험 예 2와 동일한 방법으로 유기 전계발광소자를 제작하였다.

[358] 상기 실험 예 2 및 비교예 6 내지 10에 의해 제조된 유기전기발광소자들에 순바이어스 직류전압을 가하여 포토리서치(photoresearch)사의 PR-650으로 전기발광(EL) 특성을 측정한 결과는 하기 표 5와 같으며, 이 때 $300\text{cd}/\text{m}^2$ 기준 휙도에서 맥사이언스사에서 제조된 수명 측정 장비를 통해 T95 수명을 측정하였다. 하기 표에서, 본 발명의 실험 예 2에 따라 제조된 유기전계발광소자를 실시 예 119 내지 262로 기재하였다.

[359] [표 5]

[360]

	화합물	구동 전압	전류 (mA/cm ²)	휘도 (cd/m ²)	효율 (cd/A)	T(95)	CIE (x, y)
비교예(6)	비교화합물(1)	6.0	7.5	300	4.0	55.6	(0.62, 0.37)
비교예(7)	비교화합물(2)	5.4	5.6	300	5.4	76.4	(0.62, 0.37)
비교예(8)	비교화합물(3)	5.6	5.2	300	5.8	86.8	(0.62, 0.37)
비교예(9)	비교화합물(4)	5.5	5.8	300	5.2	72.9	(0.62, 0.37)
비교예(10)	비교화합물(5)	5.7	6.3	300	4.8	71.7	(0.62, 0.37)
실시예(119)	화합물(3-28)	5.2	4.9	300	6.2	131.0	(0.66, 0.32)
실시예(120)	화합물(3-29)	5.3	4.8	300	6.2	129.0	(0.67, 0.33)
실시예(121)	화합물(3-30)	5.2	4.8	300	6.2	97.4	(0.67, 0.33)
실시예(122)	화합물(3-31)	4.9	4.6	300	6.5	122.2	(0.65, 0.33)
실시예(123)	화합물(3-32)	5.0	4.2	300	7.2	138.5	(0.67, 0.32)
실시예(124)	화합물(3-33)	5.1	4.8	300	6.2	115.4	(0.66, 0.32)
실시예(125)	화합물(3-34)	5.3	4.0	300	7.5	129.3	(0.66, 0.33)
실시예(126)	화합물(3-35)	4.8	4.1	300	7.4	136.9	(0.66, 0.33)
실시예(127)	화합물(3-36)	5.3	4.4	300	6.9	125.7	(0.66, 0.32)
실시예(128)	화합물(3-37)	5.3	4.8	300	6.2	110.5	(0.66, 0.32)
실시예(129)	화합물(3-38)	5.1	4.2	300	7.1	126.3	(0.66, 0.32)
실시예(130)	화합물(3-39)	4.8	5.1	300	5.9	96.0	(0.66, 0.33)
실시예(131)	화합물(3-40)	5.0	4.6	300	6.5	121.8	(0.67, 0.32)
실시예(132)	화합물(3-41)	5.3	4.6	300	6.5	122.6	(0.66, 0.33)
실시예(133)	화합물(3-42)	4.9	4.4	300	6.9	130.4	(0.65, 0.32)
실시예(134)	화합물(3-43)	4.9	4.7	300	6.3	135.9	(0.66, 0.32)
실시예(135)	화합물(3-44)	5.2	4.2	300	7.2	132.7	(0.66, 0.32)
실시예(136)	화합물(3-45)	4.8	4.3	300	6.9	95.1	(0.66, 0.32)
실시예(137)	화합물(3-46)	5.3	4.9	300	6.1	125.3	(0.65, 0.33)
실시예(138)	화합물(3-47)	5.2	4.5	300	6.6	101.7	(0.65, 0.32)
실시예(139)	화합물(3-48)	5.0	4.7	300	6.4	119.8	(0.67, 0.33)
실시예(140)	화합물(3-49)	5.3	4.2	300	7.1	122.2	(0.66, 0.32)
실시예(141)	화합물(3-50)	4.9	4.9	300	6.1	139.7	(0.67, 0.33)
실시예(142)	화합물(3-51)	5.1	4.6	300	6.5	105.8	(0.66, 0.33)
실시예(143)	화합물(4-28)	5.3	4.3	300	6.9	122.1	(0.65, 0.32)
실시예(144)	화합물(4-29)	5.3	4.3	300	7.0	111.7	(0.66, 0.32)
실시예(145)	화합물(4-30)	4.9	4.0	300	7.4	114.3	(0.67, 0.32)
실시예(146)	화합물(4-31)	5.2	4.6	300	6.5	136.9	(0.65, 0.32)
실시예(147)	화합물(4-32)	5.3	4.1	300	7.2	131.4	(0.65, 0.33)

실시예(148)	화합물(4-33)	4.9	4.3	300	7.0	137.5	(0.66, 0.32)
실시예(149)	화합물(4-34)	5.3	4.4	300	6.8	138.4	(0.67, 0.33)
실시예(150)	화합물(4-35)	5.4	4.7	300	6.4	98.9	(0.66, 0.33)
실시예(151)	화합물(4-36)	4.9	5.0	300	6.0	103.6	(0.66, 0.32)
실시예(152)	화합물(4-37)	5.2	4.5	300	6.7	131.1	(0.66, 0.33)
실시예(153)	화합물(4-38)	5.1	4.8	300	6.3	127.2	(0.66, 0.32)
실시예(154)	화합물(4-39)	5.2	4.4	300	6.8	117.6	(0.65, 0.32)
실시예(155)	화합물(4-40)	5.2	5.0	300	6.0	123.5	(0.65, 0.33)
실시예(156)	화합물(4-41)	5.3	4.1	300	7.3	109.0	(0.66, 0.33)
실시예(157)	화합물(4-42)	5.2	4.0	300	7.5	106.0	(0.66, 0.33)
실시예(158)	화합물(4-43)	5.0	4.5	300	6.6	119.5	(0.65, 0.32)
실시예(159)	화합물(4-44)	5.1	5.1	300	5.9	138.1	(0.66, 0.32)
실시예(160)	화합물(4-45)	5.3	4.3	300	6.9	101.8	(0.66, 0.32)
실시예(161)	화합물(4-46)	5.3	4.2	300	7.2	117.2	(0.67, 0.32)
실시예(162)	화합물(4-47)	5.3	4.7	300	6.4	100.5	(0.67, 0.33)
실시예(163)	화합물(4-48)	5.2	4.4	300	6.8	105.5	(0.66, 0.32)
실시예(164)	화합물(4-49)	5.2	4.8	300	6.3	114.5	(0.65, 0.33)
실시예(165)	화합물(4-50)	5.0	5.1	300	5.9	115.5	(0.67, 0.32)
실시예(166)	화합물(4-51)	4.9	4.8	300	6.3	117.3	(0.66, 0.33)
실시예(167)	화합물(6-1)	5.1	4.7	300.0	6.4	131.4	(0.66, 0.32)
실시예(168)	화합물(6-2)	5.1	4.1	300.0	7.4	128.3	(0.65, 0.33)
실시예(169)	화합물(6-3)	5.2	4.0	300.0	7.5	110.2	(0.65, 0.32)
실시예(170)	화합물(6-4)	4.9	4.3	300.0	7.0	116.3	(0.67, 0.33)
실시예(171)	화합물(6-5)	4.9	4.3	300.0	7.0	97.3	(0.66, 0.32)
실시예(172)	화합물(6-6)	5.2	4.2	300.0	7.1	105.6	(0.67, 0.33)
실시예(173)	화합물(6-7)	4.9	4.2	300.0	7.2	126.2	(0.66, 0.33)
실시예(174)	화합물(6-8)	5.1	4.1	300.0	7.3	118.4	(0.65, 0.32)
실시예(175)	화합물(6-9)	5.3	4.8	300.0	6.3	108.1	(0.66, 0.32)
실시예(176)	화합물(6-10)	5.2	4.3	300.0	7.0	127.3	(0.67, 0.32)
실시예(177)	화합물(6-11)	4.8	4.3	300.0	7.0	134.8	(0.65, 0.32)
실시예(178)	화합물(6-12)	4.9	4.5	300.0	6.7	139.0	(0.65, 0.33)
실시예(179)	화합물(6-13)	5.0	4.3	300.0	7.0	102.4	(0.66, 0.32)
실시예(180)	화합물(6-14)	5.0	4.7	300.0	6.4	132.9	(0.67, 0.33)
실시예(181)	화합물(6-15)	5.0	4.2	300.0	7.2	104.3	(0.66, 0.33)
실시예(182)	화합물(6-16)	5.0	4.4	300.0	6.8	126.0	(0.66, 0.32)
실시예(183)	화합물(6-17)	4.8	4.4	300.0	6.8	133.7	(0.66, 0.33)
실시예(184)	화합물(6-18)	5.1	4.7	300.0	6.4	121.3	(0.66, 0.32)

실시 예(185)	화합물(6-19)	4.9	4.0	300.0	7.4	102.1	(0.65, 0.32)
실시 예(186)	화합물(6-20)	4.9	4.0	300.0	7.5	96.8	(0.65, 0.33)
실시 예(187)	화합물(6-21)	5.2	4.1	300.0	7.4	117.6	(0.66, 0.32)
실시 예(188)	화합물(6-22)	5.1	4.1	300.0	7.3	96.9	(0.65, 0.33)
실시 예(189)	화합물(6-23)	4.9	4.5	300.0	6.7	106.8	(0.65, 0.32)
실시 예(190)	화합물(6-24)	5.1	4.1	300.0	7.3	136.7	(0.67, 0.33)
실시 예(191)	화합물(6-25)	4.9	4.1	300.0	7.3	97.2	(0.66, 0.32)
실시 예(192)	화합물(6-26)	5.2	4.1	300.0	7.4	112.6	(0.67, 0.33)
실시 예(193)	화합물(6-27)	4.9	4.6	300.0	6.5	124.0	(0.66, 0.33)
실시 예(194)	화합물(6-28)	5.1	4.2	300.0	7.1	127.3	(0.65, 0.32)
실시 예(195)	화합물(6-29)	4.9	4.6	300.0	6.5	102.5	(0.66, 0.32)
실시 예(196)	화합물(6-30)	5.0	4.6	300.0	6.5	115.8	(0.67, 0.32)
실시 예(197)	화합물(6-31)	4.9	4.2	300.0	7.2	138.2	(0.65, 0.32)
실시 예(198)	화합물(6-32)	4.9	4.4	300.0	6.8	134.9	(0.65, 0.33)
실시 예(199)	화합물(6-33)	4.9	4.5	300.0	6.7	115.9	(0.66, 0.32)
실시 예(200)	화합물(6-34)	5.1	4.3	300.0	7.0	128.8	(0.67, 0.33)
실시 예(201)	화합물(6-35)	5.0	4.4	300.0	6.8	117.4	(0.66, 0.33)
실시 예(202)	화합물(6-36)	5.1	4.7	300.0	6.4	135.0	(0.66, 0.32)
실시 예(203)	화합물(6-37)	5.1	4.1	300.0	7.2	124.0	(0.66, 0.33)
실시 예(204)	화합물(6-38)	5.1	4.7	300.0	6.4	105.6	(0.66, 0.32)
실시 예(205)	화합물(6-39)	5.0	4.8	300.0	6.3	133.9	(0.65, 0.32)
실시 예(206)	화합물(6-40)	5.3	4.4	300.0	6.8	109.1	(0.65, 0.33)
실시 예(207)	화합물(6-41)	4.9	4.2	300.0	7.2	95.5	(0.66, 0.32)
실시 예(208)	화합물(6-42)	5.3	4.7	300.0	6.4	109.6	(0.65, 0.33)
실시 예(209)	화합물(6-43)	5.1	4.7	300.0	6.3	109.7	(0.65, 0.32)
실시 예(210)	화합물(6-44)	5.0	4.3	300.0	7.0	135.5	(0.67, 0.33)
실시 예(211)	화합물(6-45)	5.2	4.8	300.0	6.3	131.0	(0.66, 0.32)
실시 예(212)	화합물(6-46)	4.9	4.2	300.0	7.2	109.1	(0.67, 0.33)
실시 예(213)	화합물(6-47)	4.8	4.1	300.0	7.2	108.6	(0.66, 0.33)
실시 예(214)	화합물(6-48)	5.0	4.5	300.0	6.7	116.7	(0.65, 0.32)
실시 예(215)	화합물(7-1)	5.2	4.6	300.0	6.5	130.8	(0.66, 0.32)
실시 예(216)	화합물(7-2)	5.1	4.5	300.0	6.7	137.3	(0.67, 0.32)
실시 예(217)	화합물(7-3)	5.1	4.5	300.0	6.6	123.2	(0.65, 0.32)
실시 예(218)	화합물(7-4)	5.2	4.6	300.0	6.5	101.9	(0.65, 0.33)
실시 예(219)	화합물(7-5)	5.1	4.4	300.0	6.8	119.1	(0.66, 0.32)
실시 예(220)	화합물(7-6)	5.0	4.5	300.0	6.7	107.7	(0.67, 0.33)
실시 예(221)	화합물(7-7)	4.8	4.7	300.0	6.4	128.5	(0.66, 0.33)

[363]

실시 예(222)	화합물(7-8)	4.9	4.2	300.0	7.1	101.7	(0.66, 0.32)
실시 예(223)	화합물(7-9)	5.0	4.5	300.0	6.7	102.9	(0.66, 0.33)
실시 예(224)	화합물(7-10)	5.1	4.3	300.0	7.0	110.8	(0.66, 0.32)
실시 예(225)	화합물(7-11)	5.1	4.7	300.0	6.4	114.7	(0.65, 0.32)
실시 예(226)	화합물(7-12)	5.0	4.3	300.0	7.0	121.7	(0.65, 0.33)
실시 예(227)	화합물(7-13)	5.1	4.4	300.0	6.8	121.2	(0.66, 0.32)
실시 예(228)	화합물(7-14)	5.0	4.4	300.0	6.9	128.8	(0.65, 0.33)
실시 예(229)	화합물(7-15)	5.0	4.8	300.0	6.3	122.2	(0.65, 0.32)
실시 예(230)	화합물(7-16)	4.9	4.7	300.0	6.3	132.4	(0.67, 0.33)
실시 예(231)	화합물(7-17)	4.9	4.2	300.0	7.1	114.6	(0.66, 0.32)
실시 예(232)	화합물(7-18)	4.8	4.2	300.0	7.1	102.1	(0.67, 0.33)
실시 예(233)	화합물(7-19)	4.9	4.8	300.0	6.3	135.9	(0.66, 0.33)
실시 예(234)	화합물(7-20)	5.1	4.2	300.0	7.1	113.2	(0.65, 0.32)
실시 예(235)	화합물(7-21)	5.1	4.8	300.0	6.2	136.6	(0.66, 0.32)
실시 예(236)	화합물(7-22)	4.8	4.8	300.0	6.3	136.0	(0.67, 0.32)
실시 예(237)	화합물(7-23)	4.8	4.0	300.0	7.5	117.6	(0.65, 0.32)
실시 예(238)	화합물(7-24)	5.3	4.5	300.0	6.6	118.2	(0.65, 0.33)
실시 예(239)	화합물(7-25)	5.2	4.1	300.0	7.4	96.5	(0.66, 0.32)
실시 예(240)	화합물(7-26)	5.0	4.6	300.0	6.5	122.8	(0.67, 0.33)
실시 예(241)	화합물(7-27)	4.8	4.6	300.0	6.6	138.3	(0.66, 0.33)
실시 예(242)	화합물(7-28)	4.9	4.7	300.0	6.3	127.8	(0.66, 0.32)
실시 예(243)	화합물(7-29)	5.3	4.2	300.0	7.2	116.1	(0.66, 0.33)
실시 예(244)	화합물(7-30)	4.9	4.1	300.0	7.3	117.2	(0.66, 0.32)
실시 예(245)	화합물(7-31)	4.9	4.3	300.0	6.9	121.4	(0.65, 0.32)
실시 예(246)	화합물(7-32)	4.9	4.5	300.0	6.7	108.3	(0.65, 0.33)
실시 예(247)	화합물(7-33)	5.1	4.4	300.0	6.9	123.9	(0.66, 0.32)
실시 예(248)	화합물(7-34)	5.1	4.2	300.0	7.1	102.7	(0.67, 0.32)
실시 예(249)	화합물(7-35)	5.0	4.8	300.0	6.2	114.8	(0.65, 0.32)
실시 예(250)	화합물(7-36)	5.1	4.1	300.0	7.3	120.6	(0.65, 0.33)
실시 예(251)	화합물(7-37)	5.1	4.6	300.0	6.5	100.0	(0.66, 0.32)
실시 예(252)	화합물(7-38)	5.2	4.7	300.0	6.4	132.4	(0.67, 0.33)
실시 예(253)	화합물(7-39)	5.0	4.1	300.0	7.4	119.4	(0.66, 0.33)
실시 예(254)	화합물(7-40)	4.9	4.3	300.0	6.9	124.4	(0.66, 0.32)
실시 예(255)	화합물(7-41)	5.3	4.5	300.0	6.7	108.5	(0.66, 0.33)
실시 예(256)	화합물(7-42)	5.2	4.2	300.0	7.2	100.9	(0.66, 0.32)
실시 예(257)	화합물(7-43)	5.2	4.3	300.0	7.0	117.7	(0.65, 0.32)
실시 예(258)	화합물(7-44)	4.9	4.6	300.0	6.6	110.5	(0.66, 0.33)

[364]

실시예(259)	화합물(7-45)	5.2	4.3	300.0	7.0	116.3	(0.66, 0.32)
실시예(260)	화합물(7-46)	4.8	4.0	300.0	7.4	120.5	(0.66, 0.33)
실시예(261)	화합물(7-47)	4.9	4.7	300.0	6.4	132.9	(0.66, 0.32)
실시예(262)	화합물(7-48)	5.0	4.1	300.0	7.3	135.4	(0.65, 0.32)

[365] 상기 표의 결과로부터 알 수 있듯이 인광 레드 호스트로 사용된 본 발명 화합물의 경우 비교예 6 내지 비교예 10보다 낮은 구동전압과, 높은 발광효율 및 높은 수명을 나타내는 것을 확인할 수 있었다. 특히 비교 화합물 4, 비교 화합물 5의 경우 인광 그린 호스트로 사용 시 비교 화합물 2, 비교 화합물 3보다 높은 수명을 나타내었으나 인광 레드 호스트로 사용된 상기 표에서 알 수 있듯이 비교 화합물 2, 비교 화합물 3보다 낮은 효율 및 낮은 수명을 나타내는 것을 확인할 수 있었다.

[366]

[실험 예 3] (정공수송층)

[368] 먼저, 유기 기판에 형성된 ITO층(양극)위에 2-TNATA를 진공증착하여 60nm 두께의 정공주입층을 형성한 후, 본 발명의 화합물(5-1~5-7, 5-11~5-14, 5-17~5-31, 5-33~5-35)을 20nm 두께로 진공증착하여 정공수송층을 형성하였다. 이어서, 정공수송층 위에 CBP[4,4'-N,N'-dicarbazole-biphenyl]를 호스트 물질로, Ir(ppy)₃ [tris(2-phenylpyridine)-iridium] 을 도편트물질로 90:10 중량으로 도핑하여 30nm 두께의 발광층을 증착하였다. 다음으로, 발광층 상에 BAlq를 10 nm 두께로 진공증착하여 정공저지층을 형성한 후, Alq₃를 40 nm 두께로 성막하여 전자주입층을 형성하였다. 이후, 할로젠회 알칼리 금속인 LiF를 0.2 nm 두께로 증착하고, 이어서 Al을 150 nm의 두께로 증착하여 음극을 형성하여 유기전계 발광소자를 제조하였다.

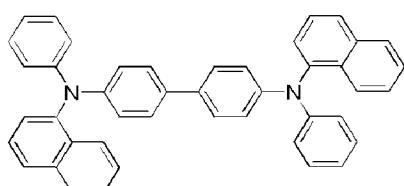
[비교 예 11]

[370] 정공수송층 재료로 본 발명의 화합물 대신 하기 비교 화합물

6(N₄,N_{4'}-di(naphthalen-1-yl)-N₄,N_{4'}-diphenyl-[1,1'-biphenyl]-4,4'-diamine)을 사용하는 점을 제외하면, 상기 실험 예 3과 동일하게 유기전계발광소자를 제작하였다.

<비교 화합물 6>

[372]



[비교 예 12]

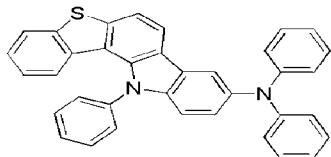
[374] 상기 실험 예 3과 동일하게 유기전계발광소자를 제작하되, 본 발명의 화합물 대신 비교 화합물

7(N,N,12-triphenyl-12H-benzo[4,5]thieno[3,2-a]carbazol-9-amine)을 이용하여 정공

수송층을 형성하였다

[375] <비교 화합물 7>

[376]



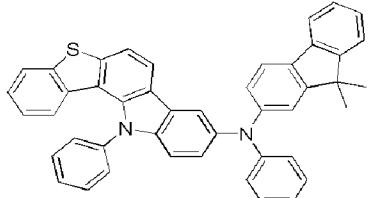
[377] [비교예 13]

[378] 상기 실험 예 3과 동일하게 유기전계발광소자를 제작하되, 본 발명의 화합물 대신 비교 화합물

8(N-(9,9-dimethyl-9H-fluoren-2-yl)-N,12-diphenyl-12H-benzo[4,5]thieno[3,2-a]carbazol-9-amine)을 이용하여 정공 수송층을 형성하였다.

[379] <비교 화합물 8>

[380]



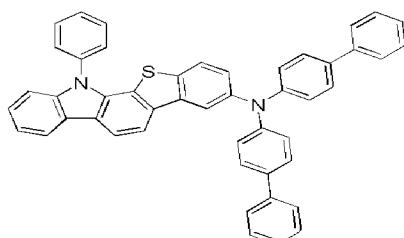
[381] [비교예 14]

[382] 상기 실험 예 3과 동일하게 유기전계발광소자를 제작하되, 본 발명의 화합물 대신 비교 화합물

9(N,N-di([1,1'-biphenyl]-4-yl)-12-phenyl-12H-benzo[4,5]thieno[2,3-a]carbazol-8-amine)을 이용하여 정공 수송층을 형성하였다.

[383] <비교 화합물 9>

[384]



[385] 실험 예 3 및 비교예에 의해 제조된 유기전계발광소자들에 순바이어스 직류전압을 가하여 포토리서치(photoresearch)사의 PR-650으로 전기발광(EL) 특성을 측정한 결과 표 6과 같았다. 이 때, 300cd/m² 기준 휘도에서 맥사이언스사에서 제조된 수명 측정 장비를 통해 T95 수명을 측정하였다. 하기 표에서, 실험 예 3에 따라 제조된 유기전계발광소자를 실시 예 262 내지 290으로 기재하였다.

[386] [표 6]

[387]

	화합물	구동전압	전류(mA/cm ²)	휘도(cd/m ²)	효율(cd/A)	T(95)
비교예(11)	비교화합물(6)	6.2	7.5	300.0	4.0	74.0
비교예(12)	비교화합물(7)	5.5	5.3	300.0	5.7	94.9
비교예(13)	비교화합물(8)	5.1	5.8	300.0	4.8	93.1
비교예(14)	비교화합물(9)	5.4	5.2	300.0	5.8	60.5
실시예(262)	화합물(5-1)	5.1	4.8	300.0	6.2	124.5
실시예(263)	화합물(5-2)	5.1	4.8	300.0	6.2	106.7
실시예(264)	화합물(5-3)	4.8	4.4	300.0	6.8	120.0
실시예(265)	화합물(5-4)	5.0	4.4	300.0	6.8	127.0
실시예(266)	화합물(5-5)	5.1	4.8	300.0	6.3	105.6
실시예(267)	화합물(5-6)	5.0	4.7	300.0	6.3	120.0
실시예(268)	화합물(5-7)	4.8	4.6	300.0	6.5	108.1
실시예(269)	화합물(5-11)	5.1	4.5	300.0	6.7	121.3
실시예(270)	화합물(5-12)	5.0	4.7	300.0	6.4	107.4
실시예(271)	화합물(5-13)	4.9	4.5	300.0	6.6	97.7
실시예(272)	화합물(5-14)	4.8	4.8	300.0	6.3	115.3
실시예(273)	화합물(5-17)	4.9	4.6	300.0	6.5	121.9
실시예(274)	화합물(5-18)	4.8	4.9	300.0	6.2	108.2
실시예(275)	화합물(5-19)	4.9	4.6	300.0	6.5	119.7
실시예(276)	화합물(5-20)	5.0	4.8	300.0	6.2	113.9
실시예(277)	화합물(5-21)	4.8	4.9	300.0	6.2	112.5
실시예(278)	화합물(5-22)	5.1	4.4	300.0	6.8	110.2
실시예(279)	화합물(5-23)	4.8	4.5	300.0	6.7	127.2
실시예(280)	화합물(5-24)	4.6	4.2	300.0	7.1	112.9
실시예(281)	화합물(5-25)	4.7	4.6	300.0	6.5	108.3
실시예(282)	화합물(5-26)	4.9	4.1	300.0	7.3	102.1
실시예(283)	화합물(5-27)	4.8	4.1	300.0	7.3	141.7
실시예(284)	화합물(5-28)	4.7	4.5	300.0	6.7	128.9
실시예(285)	화합물(5-29)	4.8	4.4	300.0	6.8	122.6
실시예(286)	화합물(5-30)	4.5	4.3	300.0	6.9	122.0
실시예(287)	화합물(5-31)	4.5	4.5	300.0	6.6	114.4
실시예(288)	화합물(5-33)	4.8	4.1	300.0	7.3	126.6
실시예(289)	화합물(5-34)	4.8	4.1	300.0	7.3	105.9
실시예(290)	화합물(5-35)	4.5	4.2	300.0	7.2	148.4

[388] 상기 표의 결과를 통해 알 수 있듯이, 비교예 11 내지 비교예 14보다 본 발명 화합물이 낮은 구동전압과 높은 효율 특히 높은 수명을 나타내고 있다. 이는 코어의 $R_1 \sim R_4$, $R_{11} \sim R_{14}$ 의 위치 중 한곳이 아릴기로 치환되며 다른 한곳에 아릴아민기를 포함한 화합물의 경우 HOMO level이 떨어져 발광층에 보다 쉽게 정공을 전달하며, 이로 인해 낮은 구동전압을 나타내 결과적으로 수명이

길어지는 것으로 판단된다.

[389] [실험 예 4](발광보조층)

[390] 먼저, 유리 기판에 형성된 ITO층(양극) 위에 2-TNATA를 진공증착하여 60 nm 두께의 정공주입층을 형성한 후, 정공주입층 상에 4,4'-비스[N-(1-나프틸)-N-페닐아미노]비페닐 (비교화합물 6)를 20 nm 두께로 진공증착하여 흘수송층을 형성하였다. 이어서, 본 발명 화합물(5-1~5-7, 5-11~5-14, 5-17~5-31, 5-33~5-35, 5-47~5-51)을 20nm의 두께로 진공증착하여 발광보조층을 형성하였다. 발광 보조층을 형성한 후, 발광 보조층 상부에 CBP[4,4'-N,N'-dicarbazole-biphenyl]를 호스트 물질로, Ir(ppy)₃ [tris(2-phenylpyridine)-iridium]를 도편트 물질로 95:5 중량으로 도핑함으로써 30nm 두께의 발광층을 증착하였다. 그리고, 발광층 상에 BALq를 10 nm 두께로 진공증착하여 흘저지층을 형성한 이후, Alq₃를 40 nm 두께로 성막하여 전자주입층을 형성하였다. 이후, 할로젠판 알칼리 금속인 LiF를 0.2 nm 두께로 증착하고, 이어서 Al을 150 nm의 두께로 증착하여 음극을 형성함으로서 유기전계 발광소자를 제조하였다.

[391] [비교예 15]

[392] 발광보조층 재료로 본 발명의 화합물 대신 비교화합물

6(N₄,N₄'-di(naphthalen-1-yl)-N₄,N₄'-diphenyl-[1,1'-biphenyl]-4,4'-diamine)을 사용하는 점을 제외하면, 상기 실험 예 4와 동일하게 유기전계발광소자를 제작하였다.

[393] [비교예 16]

[394] 상기 실험 예 4와 동일하게 유기전계발광소자를 제작하되, 본 발명의 화합물 대신 비교화합물

7(N,N,12-triphenyl-12H-benzo[4,5]thieno[3,2-a]carbazol-9-amine)을 이용하여 발광보조층을 형성하였다.

[395] [비교예 17]

[396] 상기 실험 예 4와 동일하게 유기전계발광소자를 제작하되, 본 발명의 화합물 대신 비교화합물

8(N-(9,9-dimethyl-9H-fluoren-2-yl)-N,12-diphenyl-12H-benzo[4,5]thieno[3,2-a]carbazol-9-amine)을 이용하여 발광보조층을 형성하였다.

[397] [비교예 18]

[398] 상기 실험 예 3과 동일하게 유기전계발광소자를 제작하되, 본 발명의 화합물 대신 비교화합물

9(N,N-di([1,1'-biphenyl]-4-yl)-12-phenyl-12H-benzo[4,5]thieno[2,3-a]carbazol-8-amine)을 이용하여 발광보조층을 형성하였다

[399]

[400] 실험 예 4 및 비교예에 의해 제작된 유기전계발광소자들에 순바이어스 직류전압을 가하여 포토리서치(photoresearch)사의 PR-650으로 전기발광(EL)

특성을 측정한 결과는 하기 표와 같다. 이때, 300cd/m² 기준 휘도에서 맥사이언스사에서 제조된 수명 측정 장비를 통해 T95 수명을 측정하였다. 본 발명의 실험 예 4에 의해 제조된 유기전기소자를 하기 표 7에서 실시 예 291 내지 324로 표시하였다.

[401] [표 7]

[402]

	화합물	구동전압	전류(mA/cm ²)	휘도(cd/m ²)	효율(cd/A)	T(95)
비교예(15)	비교화합물(6)	5.9	6.3	300.0	4.8	86.3
비교예(16)	비교화합물(7)	5.1	5.8	300.0	5.2	91.3
비교예(17)	비교화합물(8)	5.7	5.8	300.0	5.2	92.7
비교예(18)	비교화합물(9)	5.7	5.8	300.0	5.2	89.1
실시예(291)	화합물(5-1)	5.0	4.0	300.0	7.4	109.4
실시예(292)	화합물(5-2)	5.2	3.8	300.0	7.8	112.5
실시예(293)	화합물(5-3)	5.2	3.9	300.0	7.6	97.9
실시예(294)	화합물(5-4)	5.2	3.9	300.0	7.6	104.9
실시예(295)	화합물(5-5)	5.0	4.1	300.0	7.4	129.8
실시예(296)	화합물(5-6)	4.9	3.7	300.0	8.0	111.8
실시예(297)	화합물(5-7)	5.2	4.0	300.0	7.4	101.1
실시예(298)	화합물(5-11)	5.0	3.9	300.0	7.7	97.9
실시예(299)	화합물(5-12)	5.2	3.8	300.0	8.0	121.1
실시예(300)	화합물(5-13)	5.1	4.0	300.0	7.5	126.1
실시예(301)	화합물(5-14)	5.0	4.0	300.0	7.6	118.2
실시예(302)	화합물(5-17)	5.1	4.1	300.0	7.3	97.0
실시예(303)	화합물(5-18)	5.0	4.1	300.0	7.2	104.0
실시예(304)	화합물(5-19)	5.1	3.9	300.0	7.8	103.0
실시예(305)	화합물(5-20)	4.9	3.6	300.0	8.4	109.0
실시예(306)	화합물(5-21)	5.1	3.7	300.0	8.1	107.8
실시예(307)	화합물(5-22)	5.1	3.5	300.0	8.5	113.2
실시예(308)	화합물(5-23)	5.2	3.7	300.0	8.1	116.2
실시예(309)	화합물(5-24)	5.0	3.9	300.0	7.8	142.7
실시예(310)	화합물(5-25)	5.1	3.6	300.0	8.3	100.0
실시예(311)	화합물(5-26)	5.1	3.9	300.0	7.7	120.4
실시예(312)	화합물(5-27)	5.1	4.0	300.0	7.4	134.9
실시예(313)	화합물(5-28)	5.0	3.7	300.0	8.2	146.0
실시예(314)	화합물(5-29)	5.2	4.0	300.0	7.5	142.3
실시예(315)	화합물(5-30)	5.0	3.9	300.0	7.7	114.9
실시예(316)	화합물(5-31)	5.0	3.7	300.0	8.2	123.9
실시예(317)	화합물(5-33)	5.0	4.0	300.0	7.4	136.8
실시예(318)	화합물(5-34)	4.8	3.7	300.0	8.1	130.5
실시예(319)	화합물(5-35)	4.9	4.0	300.0	7.6	130.9
실시예(320)	화합물(5-47)	4.6	3.3	300.0	9.0	125.3
실시예(321)	화합물(5-48)	4.5	3.7	300.0	8.1	136.8
실시예(322)	화합물(5-49)	4.4	3.5	300.0	8.7	123.2
실시예(323)	화합물(5-50)	4.7	3.4	300.0	8.9	140.8
실시예(324)	화합물(5-51)	4.5	4.0	300.0	7.5	129.5

[403] 효율과 수명을 증가시키기 위해 상기 표에서와 같이 정공 수송층과 발광층 사이에 발광보조층으로 본 발명의 화합물을 사용한 결과 비교화합물을 발광보조층으로 사용한 것보다 효율 및 수명이 증가하는 것을 확인할 수 있었다.

이는 정공 수송층으로 사용한 비교화합물 6의 HOMO level과 발광층의 HOMO level 사이에 정공

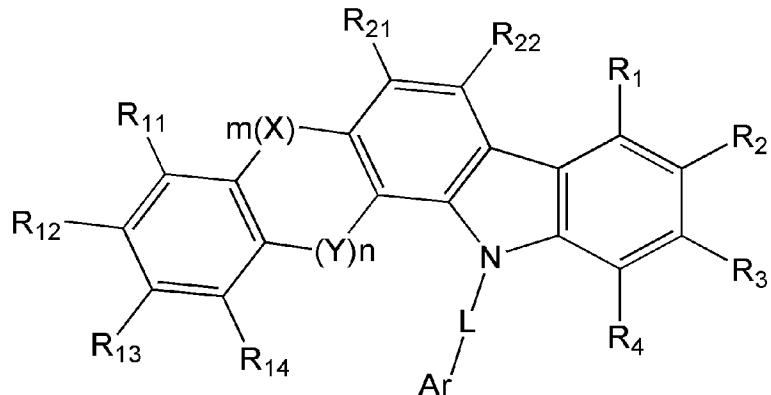
- [404] 을 보다 빠르게 전달할 수 있는 HOMO level을 갖는 발광보조층을 사용함으로써 높은 효율 및 높은 수명을 보이는 것으로 판단할 수 있다.
- [405] 본 발명의 화합물들을 유기전계발광소자의 다른 유기물층들, 예를 들어 전자주입층, 전자수송층, 정공주입층 등에 사용되더라도 동일한 효과를 얻을 수 있는 것은 자명하다.
- [406] 이상의 설명은 본 발명을 예시적으로 설명한 것에 불과한 것으로, 본 발명이 속하는 기술분야에서 통상의 지식을 가지는 자라면 본 발명의 본질적인 특성에서 벗어나지 않는 범위에서 다양한 변형이 가능할 것이다. 따라서, 본 명세서에 개시된 실시 예들은 본 발명을 한정하기 위한 것이 아니라 설명하기 위한 것이고, 이러한 실시 예에 의하여 본 발명의 사상과 범위가 한정되는 것은 아니다. 본 발명의 보호범위는 아래의 청구범위에 의하여 해석되어야 하며, 그와 동등한 범위 내에 있는 모든 기술은 본 발명의 권리범위에 포함하는 것으로 해석되어야 할 것이다.
- [407]
- [408] **CROSS-REFERENCE TO RELATED APPLICATION**
- [409] 본 특허출원은 2012년 01월 18일 한국에 출원한 특허출원번호 제 10-2012-0005545 호 및 2012년 10월 24일 한국에 출원한 특허출원번호 제 10-2012-0118629 호에 대해 미국 특허법 119(a)조 (35 U.S.C § 119(a))에 따라 우선권을 주장하며, 그 모든 내용은 참고문헌으로 본 특허출원에 병합된다. 아울러, 본 특허출원은 미국 이외에 국가에 대해서도 위와 동일한 이유로 우선권을 주장하면 그 모든 내용은 참고문헌으로 본 특허출원에 병합된다.

청구범위

[청구항 1]

하기 화학식 1로 표시되는 화합물.

<화학식 1>



상기 화학식 1에서,

R₁~R₄ 및 R₁₁~R₁₄는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 할로겐, C₆~C₆₀의 아릴기, 플루오렌일기, C₃~C₆₀의 지방족고리와 C₆~C₆₀의 방향족고리의 용합고리기, O, N, S, Si 및 P 중 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C₂~C₆₀의 헤테로 고리기, -L-N(R')(R''), C₁~C₅₀의 알킬기, C₂~C₂₀의 알켄일기, C₁~C₃₀의 알콕시기 및 C₆~C₃₀의 아릴옥시기로 이루어진 군에서 선택되며,

R₂₁과 R₂₂는 i) 서로 독립적으로, 수소, C₆~C₆₀의 아릴기, 플루오렌일기, C₃~C₆₀의 지방족고리와 C₆~C₆₀의 방향족고리의 용합고리기, O, N, S, Si 및 P 중 적어도 하나의 헤�테로원자를 포함하는 C₂~C₆₀의 헤�테로 고리기 및 -L-N(R')(R'')로 이루어진 군에서 선택되거나, 또는 ii) 서로 결합하여 단환 또는 다환고리를 형성하며,

단, R₂₁과 R₂₂가 서로 결합하여 고리를 형성하는 경우에 한해 R₁~R₄ 와 R₁₁~R₁₄가 동시에 모두 수소일 수 있으며, R₂₁과 R₂₂가 서로 결합하여 고리를 형성하지 않는 경우에는 R₁~R₄ 중 적어도 하나가 수소가 아니면서 동시에 R₁₁~R₁₄ 중 적어도 하나가 수소가 아니며, X와 Y는 서로 독립적으로, S, O 또는 SiR₃₁R₃₂이며(여기서, R₃₁과 R₃₂는 서로 독립적으로 수소, C₆~C₆₀의 아릴기, O, N, S, Si 및 P 중 적어도 하나의 헤�테로원자를 포함하는 C₂~C₆₀의 헤�테로고리기, 또는 C₁~C₅₀의 알킬기임), m과 n 각각은 0 또는 1이며(단, m+n=1 이상의 정수임),

L은 단일결합; C₆~C₆₀의 아릴렌기; 플루오렌일렌기; O, N, S, Si 및 P 중 적어도 하나의 헤�테로원자를 포함하는 C₂~C₆₀의 헤�테로고리기; 및 2가의 지방족 탄화수소기;로 이루어진 군에서

선택되며(이 때, 아릴렌기, 플루오렌일렌기, 헤테로고리기 및 지방족 탄화수소기는 니트로기, 시아노기, 할로겐기, C₁~C₂₀의 알킬기, C₆~C₂₀의 아릴기, C₂~C₂₀의 헤�테로고리기, C₁~C₂₀의 알콕시기 및 아미노기로 이루어진 군에서 선택되는 하나 이상의 치환기로 치환될 수 있음),

Ar은 O, N, S, Si 및 P 중 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C₂~C₆₀의 헤�테로고리기, C₆~C₆₀의 아릴기 또는 -N(R')(R")이고, 상기 R'과 R"은 서로 독립적으로 O, N, S, Si 및 P 중 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C₂~C₆₀의 헤�테로고리기, C₆~C₆₀의 아릴기 또는 플루오렌일기이다.

(상기) R₁~R₄, R₁₁~R₁₄, R₂₁, R₂₂, R₃₁, R₃₂, Ar, R' 및 R"이 아릴기인 경우, 이는 중수소, 할로겐, 실란기, 봉소기, 게르마늄기, 시아노기, 니트로기, C₁~C₂₀의 알킬싸이오기, C₁~C₂₀의 알콕실기, C₁~C₂₀의 알킬기, C₂~C₂₀의 알켄일기(alkenyl), C₂~C₂₀의 알카인일기(alkynyl), C₆~C₂₀의 아릴기, 중수소로 치환된 C₆~C₂₀의 아릴기, C₂~C₂₀의 헤�테로고리기, C₃~C₂₀의 시클로알킬기, C₇~C₂₀의 아릴알킬기 및 C₈~C₂₀의 아릴알켄일기로 이루어진 군에서 선택된 하나 이상의 치환기로 치환될 수 있고,

상기 R₁~R₄, R₁₁~R₁₄, R₂₁, R₂₂, R₃₁, R₃₂, Ar, R' 및 R"가 헤테로고리기인 경우, 이는 중수소, 할로겐, 실란기, 시아노기, 니트로기, C₁~C₂₀의 알콕실기, C₁~C₂₀의 알킬기, C₂~C₂₀의 알켄일기(alkenyl), C₆~C₂₀의 아릴기, 중수소로 치환된 C₆~C₂₀의 아릴기, C₂~C₂₀의 헤�테로고리기, C₃~C₂₀의 시클로알킬기, C₇~C₂₀의 아릴알킬기 및 C₈~C₂₀의 아릴알켄일기로 이루어진 군에서 선택된 하나 이상의 치환기로 치환될 수 있고,

상기 R₁~R₄, R₁₁~R₁₄, R₂₁, R₂₂, R' 및 R"가 플루오렌일기인 경우, 이는 중수소, 할로겐, 실란기, 시아노기, C₁~C₂₀의 알킬기, C₂~C₂₀의 알켄일기(alkenyl), C₆~C₂₀의 아릴기, 중수소로 치환된 C₆~C₂₀의 아릴기, C₂~C₂₀의 헤�테로고리기 및 C₃~C₂₀의 시클로알킬기로 이루어진 군에서 선택된 하나 이상의 치환기로 치환될 수 있고,

상기 R₁~R₄, R₁₁~R₁₄, R₂₁ 및 R₂₂의 융합고리기인 경우, 이는 중수소, 할로겐, 실란기, 봉소기, 게르마늄기, 시아노기, 니트로기, C₁~C₂₀의 알킬싸이오기, C₁~C₂₀의 알콕실기, C₁~C₂₀의 알킬기, C₂~C₂₀의 알켄일기(alkenyl), C₂~C₂₀의 알카인일기(alkynyl), C₆~C₂₀의 아릴기, 중수소로 치환된 C₆~C₂₀의 아릴기, C₂~C₂₀의 헤�테로고리기, C₃~C₂₀의 시클로알킬기, C₇~C₂₀의 아릴알킬기 및 C₈~C₂₀의 아릴알켄일기로 이루어진 군에서 선택된 하나 이상의 치환기로 치환될 수 있고,

상기 $R_1 \sim R_4$, $R_{11} \sim R_{14}$, R_{31} 및 R_{32} 가 알킬기인 경우, 이는 할로겐, 실란기, 봉소기, 시아노기, $C_1 \sim C_{20}$ 의 알콕실기, $C_1 \sim C_{20}$ 의 알킬기, $C_2 \sim C_{20}$ 의 알켄일기(alkenyl), $C_6 \sim C_{20}$ 의 아릴기, 중수소로 치환된 $C_6 \sim C_{20}$ 의 아릴기, $C_2 \sim C_{20}$ 의 헤테로고리기, $C_7 \sim C_{20}$ 의 아릴알킬기 및 $C_8 \sim C_{20}$ 의 아릴알켄일기로 이루어진 군에서 선택된 하나 이상의 치환기로 치환될 수 있고,

상기 $R_1 \sim R_4$ 및 $R_{11} \sim R_{14}$ 가 알켄일기인 경우, 이는 중수소, 할로겐, 실란기, 시아노기, $C_1 \sim C_{20}$ 의 알콕실기, $C_1 \sim C_{20}$ 의 알킬기, $C_2 \sim C_{20}$ 의 알켄일기(alkenyl), $C_6 \sim C_{20}$ 의 아릴기, 중수소로 치환된 $C_6 \sim C_{20}$ 의 아릴기, $C_2 \sim C_{20}$ 의 헤�테로고리기, $C_3 \sim C_{20}$ 의 시클로알킬기, $C_7 \sim C_{20}$ 의 아릴알킬기 및 $C_8 \sim C_{20}$ 의 아릴알켄일기로 이루어진 군에서 선택된 하나 이상의 치환기로 치환될 수 있고,

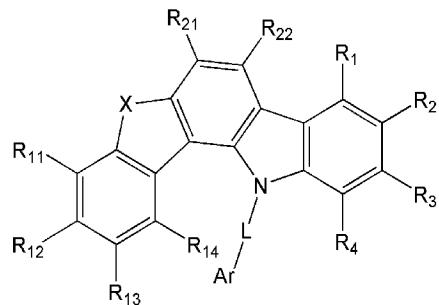
상기 $R_1 \sim R_4$ 및 $R_{11} \sim R_{14}$ 가 알콕실기인 경우, 이는 중수소, 할로겐, 실란기, $C_1 \sim C_{20}$ 의 알킬기, $C_6 \sim C_{20}$ 의 아릴기, 중수소로 치환된 $C_6 \sim C_{20}$ 의 아릴기, $C_2 \sim C_{20}$ 의 헤�테로고리기 및 $C_3 \sim C_{20}$ 의 시클로알킬기로 이루어진 군에서 선택된 하나 이상의 치환기로 치환될 수 있고,
 상기 $R_1 \sim R_4$ 및 $R_{11} \sim R_{14}$ 가 아릴옥시기인 경우, 이는 중수소, 실란기, 시아노기, $C_1 \sim C_{20}$ 의 알킬기, $C_6 \sim C_{20}$ 의 아릴기, 중수소로 치환된 $C_6 \sim C_{20}$ 의 아릴기, $C_2 \sim C_{20}$ 의 헤�테로고리기 및 $C_3 \sim C_{20}$ 의 시클로알킬기로 이루어진 군에서 선택된 하나 이상의 치환기로 치환될 수 있다)

[청구항 2]

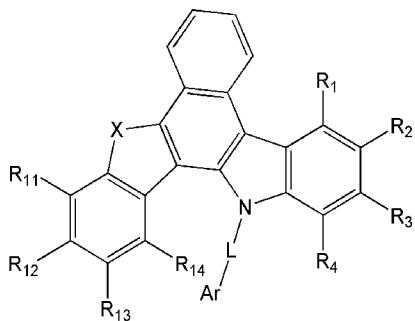
제 1항에 있어서,

하기 화학식 중 하나로 표시되는 것을 특징으로 하는 화합물.

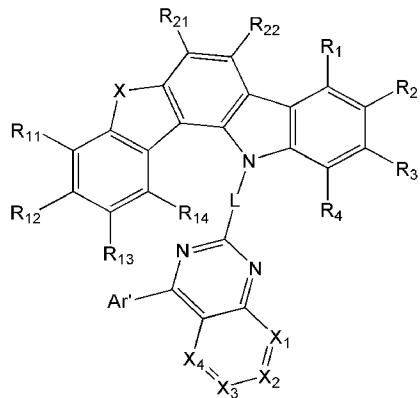
<화학식 2>



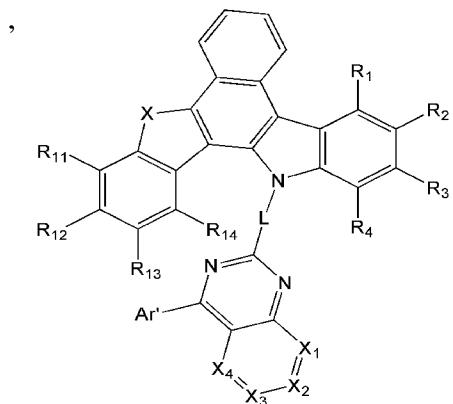
<화학식 3>



<화학식 4>



<화학식 5>



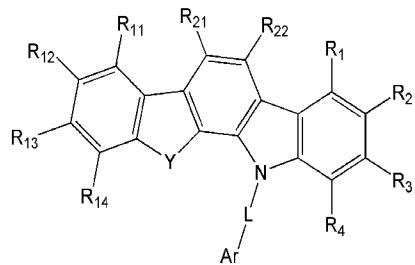
(상기 화학식에서, Ar'은 수소, 중수소, 할로겐기, C₁~C₂₀의 알킬기, C₂~C₂₀의 알케닐기, C₁~C₂₀의 알콕시기, -L-N(R')(R''), C₆~C₂₀의 아릴기, 중수소로 치환된 C₆~C₂₀의 아릴기, C₇~C₂₀의 아릴알킬기, C₈~C₂₀의 아릴알케닐기, C₂~C₂₀의 헤테로 고리기, 니트릴기 및 아세틸렌기로 이루어진 군에서 선택되고, X₁~X₄는 CR₄₁ 또는 N^o며(여기서, R₄₁은 수소, 중수소, C₆~C₂₀의 아릴기 또는 C₂~C₂₀의 헤�테로 고리기임), R₁~R₄, R₁₁~R₁₄, R₂₁, R₂₂, R', R'', X, L 및 Ar은 화학식 1에서 정의된 것과 같다)

[청구항 3]

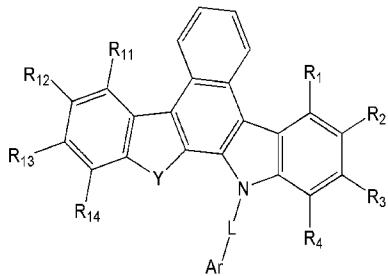
제 1항에 있어서,

하기 화학식 중 하나로 표시되는 것을 특징으로 하는 화합물.

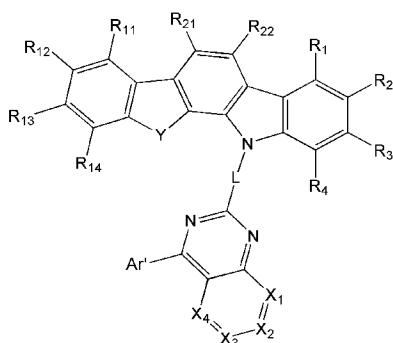
<화학식 6>



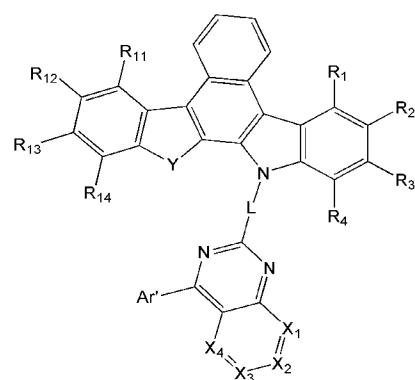
<화학식 7>



<화학식 8>



<화학식 9>



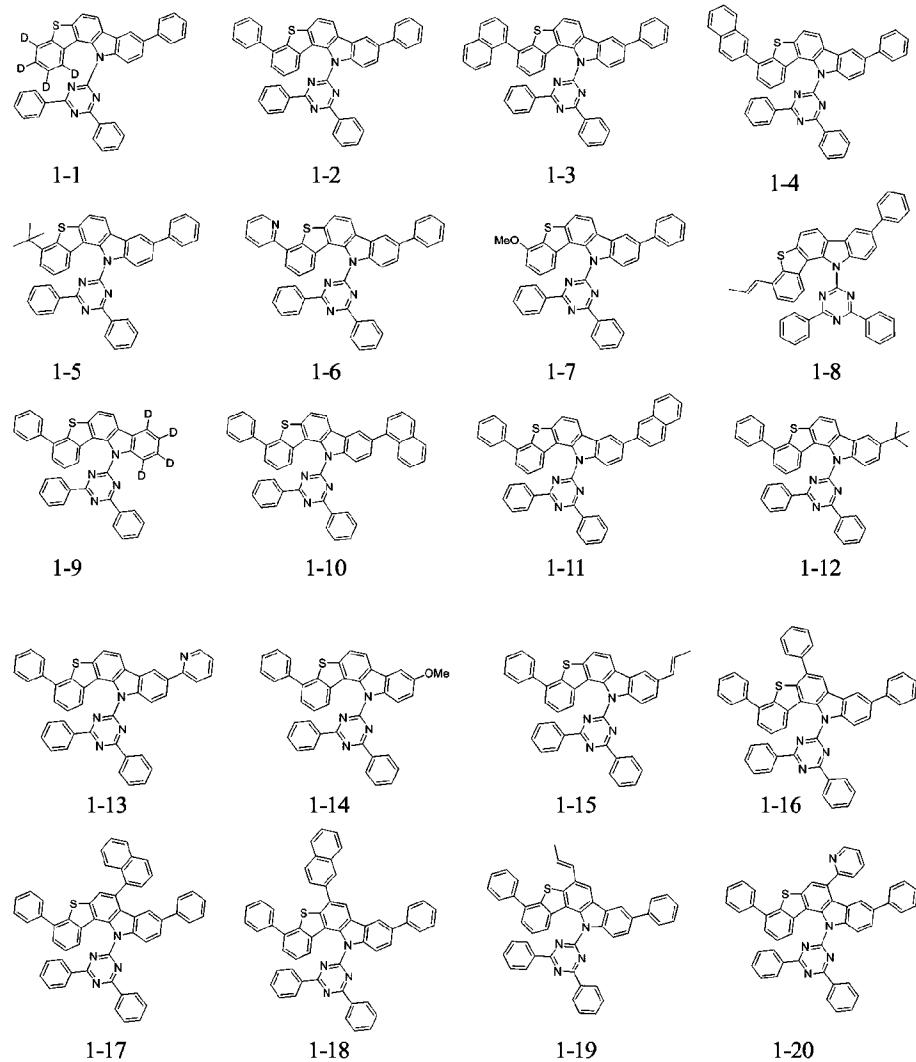
(상기 화학식에서, Ar'은 수소, 중수소, 할로겐기, C₁~C₂₀의 알킬기, C₂~C₂₀의 알케닐기, C₁~C₂₀의 알콕시기, -L-N(R')(R''), C₆~C₂₀의 아릴기, 중수소로 치환된 C₆~C₂₀의 아릴기, C₇~C₂₀의 아릴알킬기, C₈~C₂₀의 아릴알케닐기, C₂~C₂₀의 헤테로 고리기, 니트릴기 및 아세틸렌기로 이루어진 군에서 선택되고, X₁~X₄는 CR₄₁ 또는

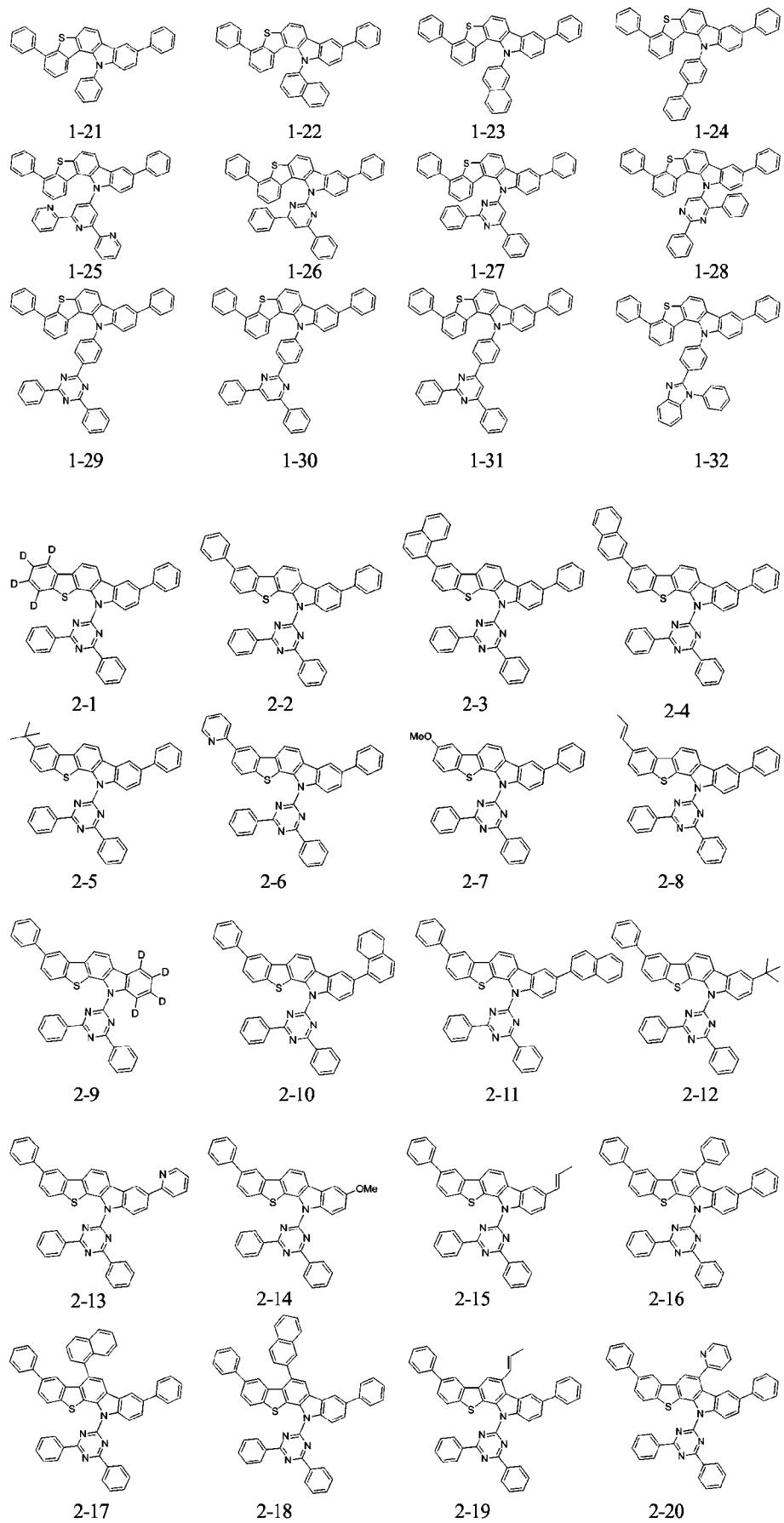
N이며(여기서, R_{41} 은 수소, 중수소, $C_6\sim C_{20}$ 의 아릴기 또는 $C_2\sim C_{20}$ 의 헤테로 고리기임), $R_1\sim R_4$, $R_{11}\sim R_{14}$, R_{21} , R_{22} , R' , R'' , Y, L 및 Ar은 화학식 1에서 정의된 것과 같다)

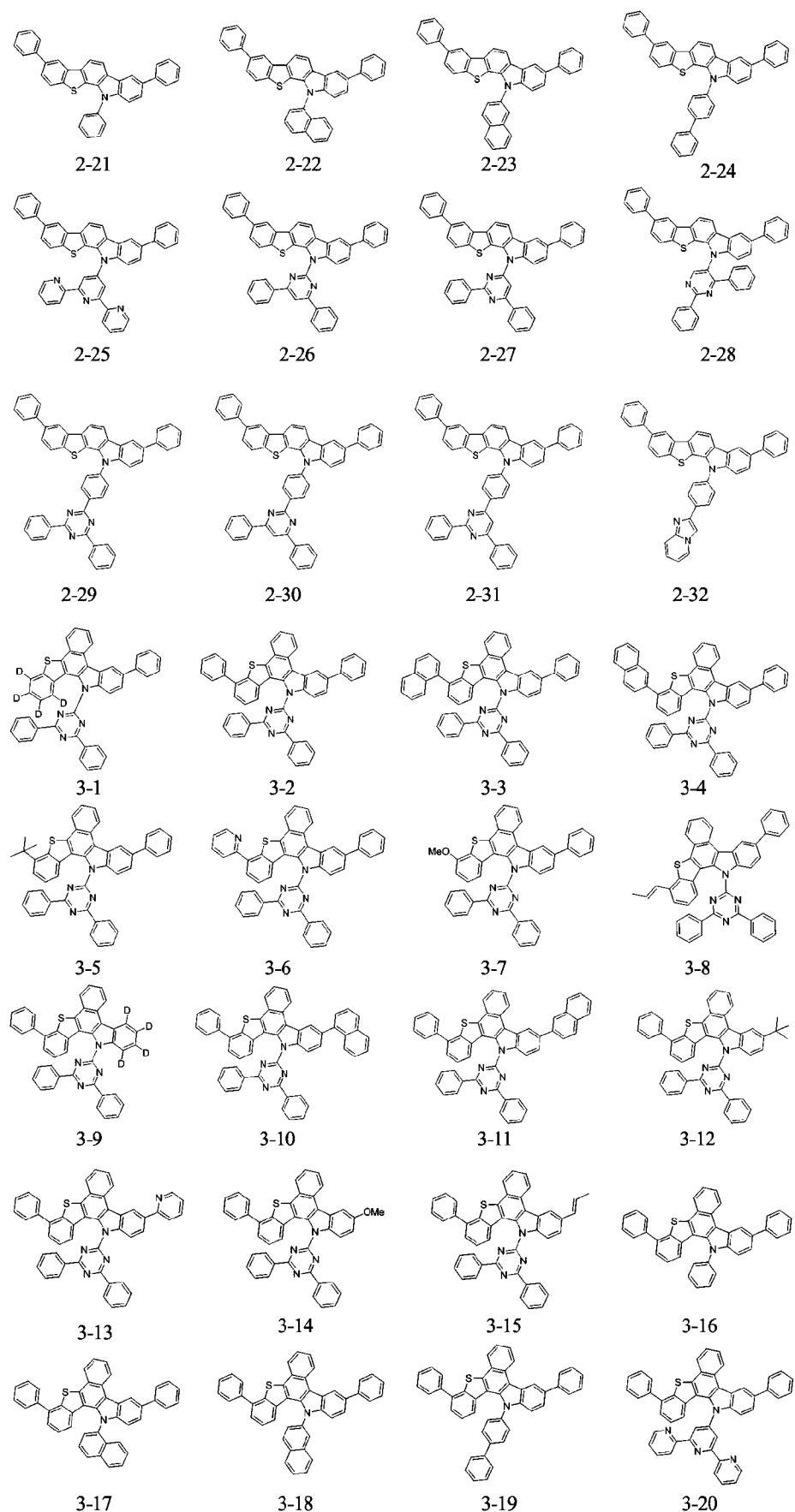
[청구항 4]

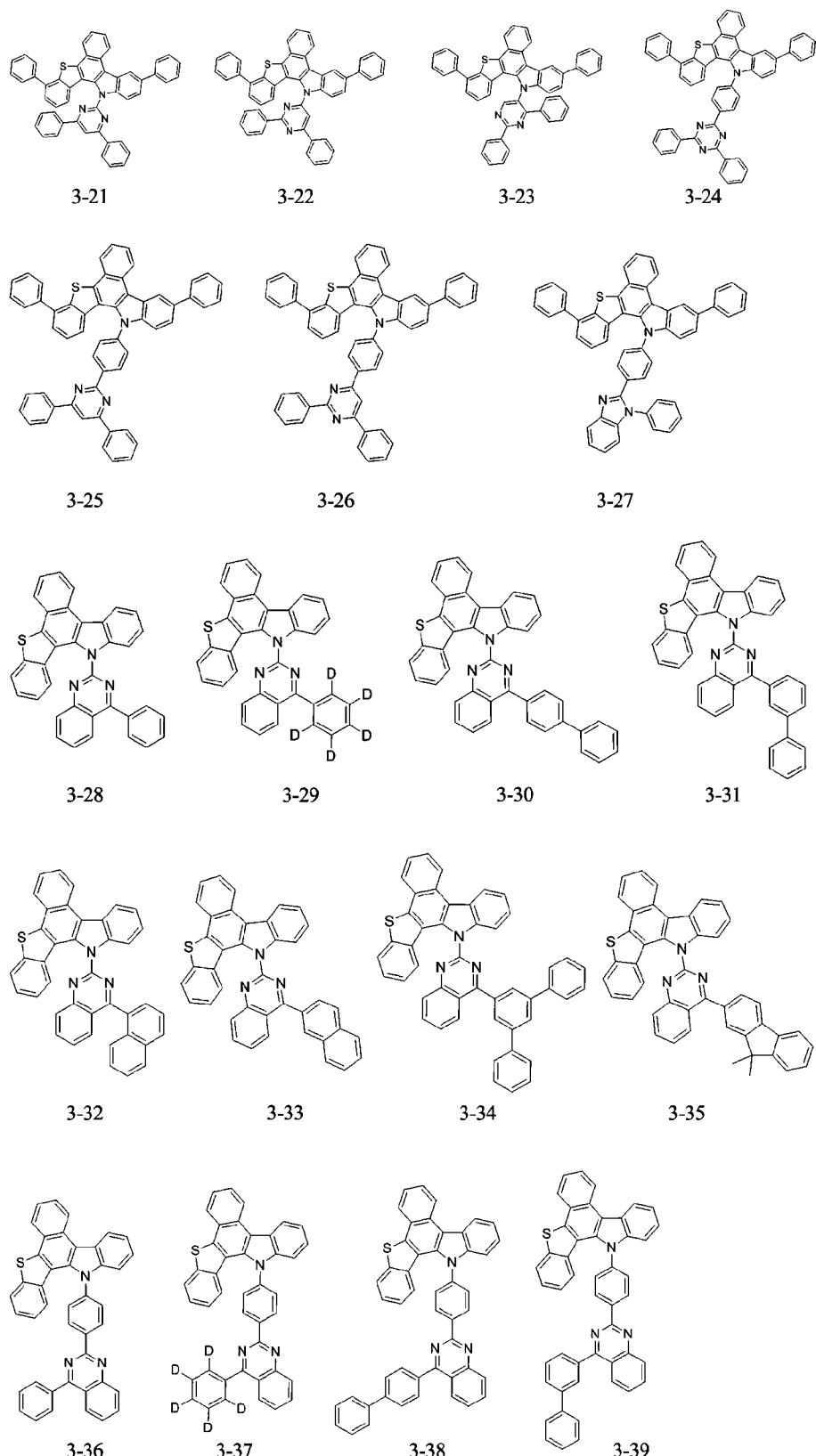
제 1항에 있어서,

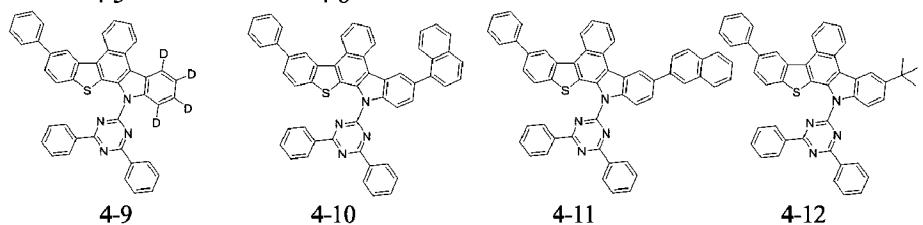
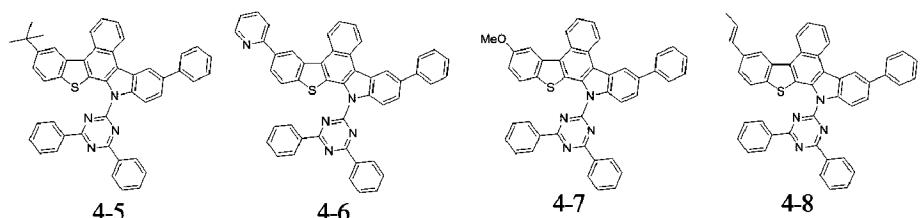
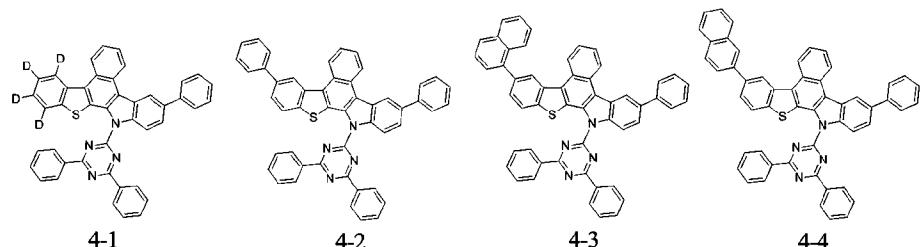
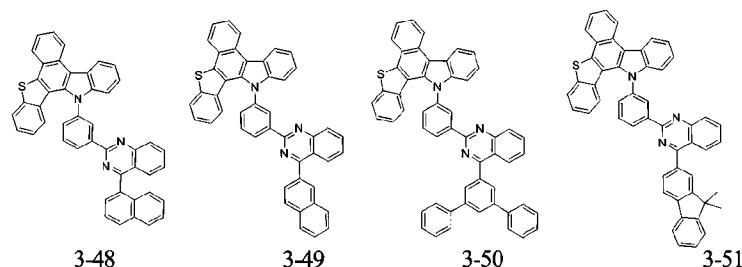
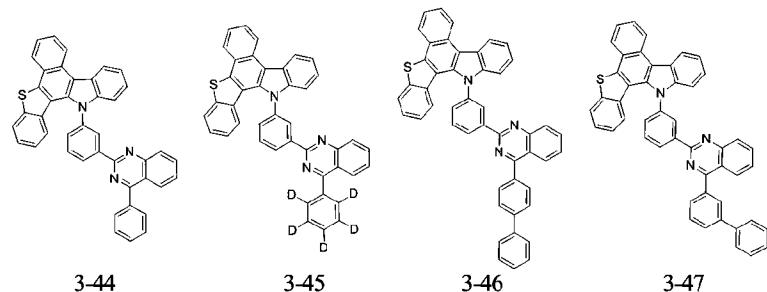
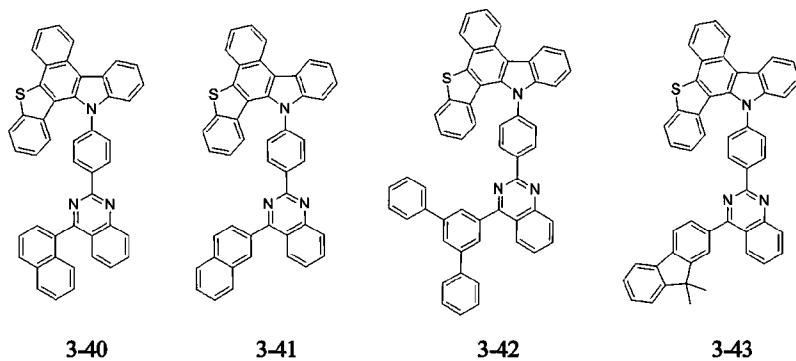
하기 화합물 중 하나인 것을 특징으로 하는 화합물.

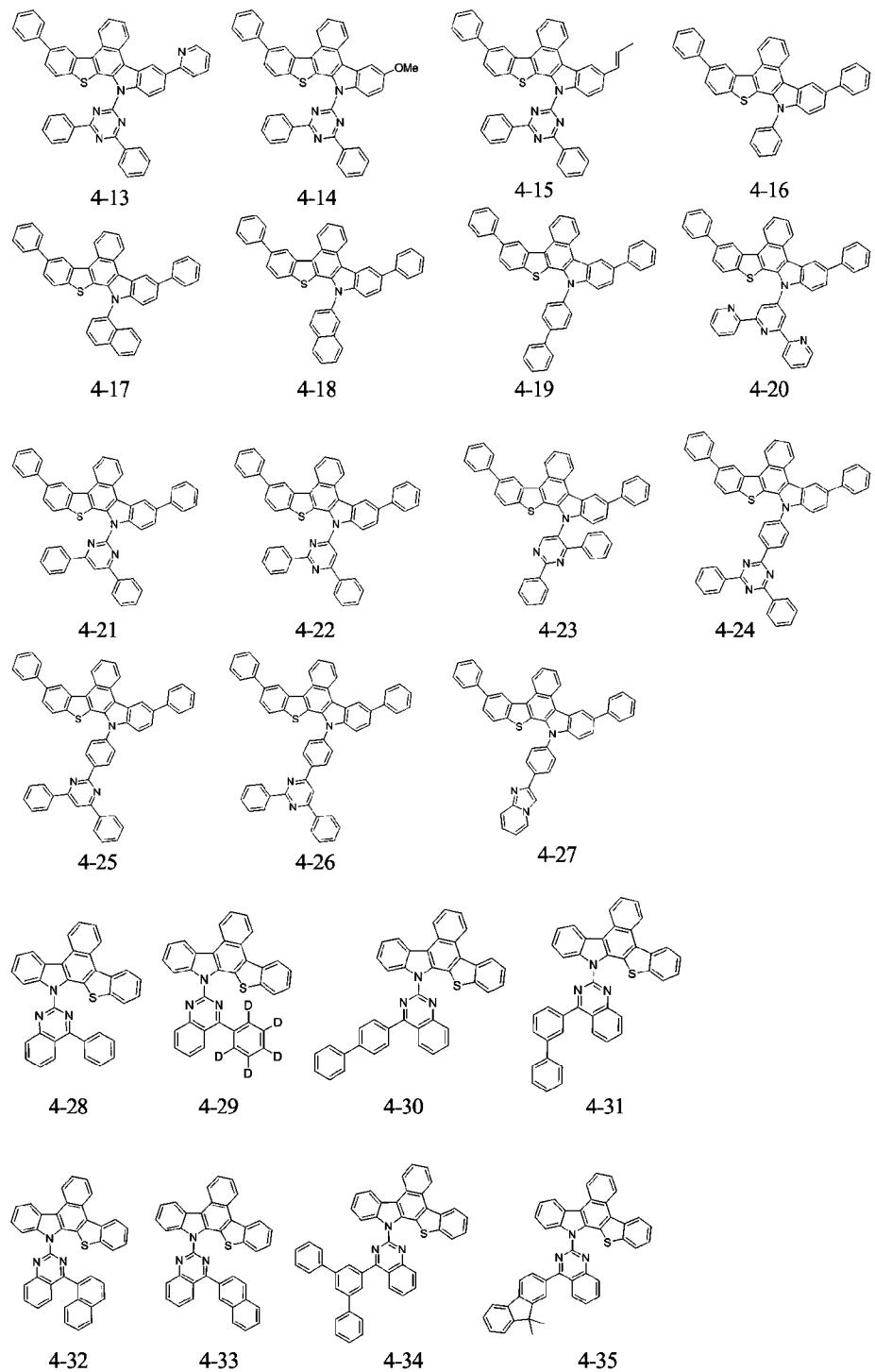


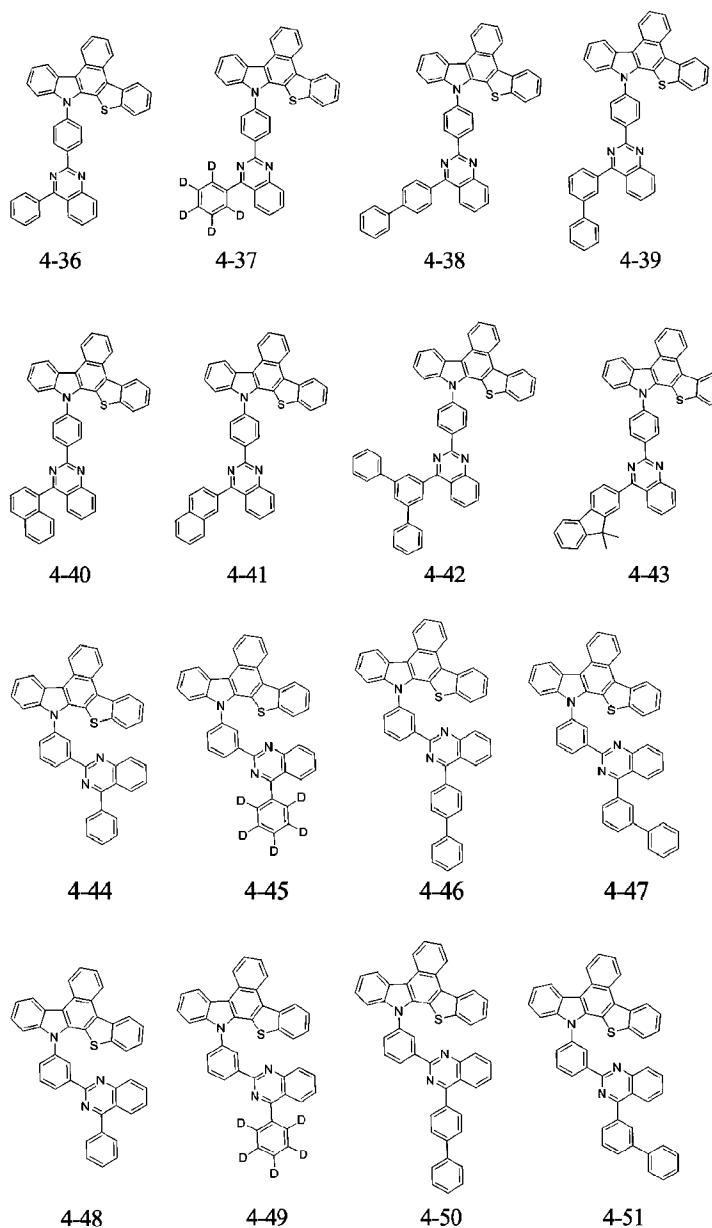


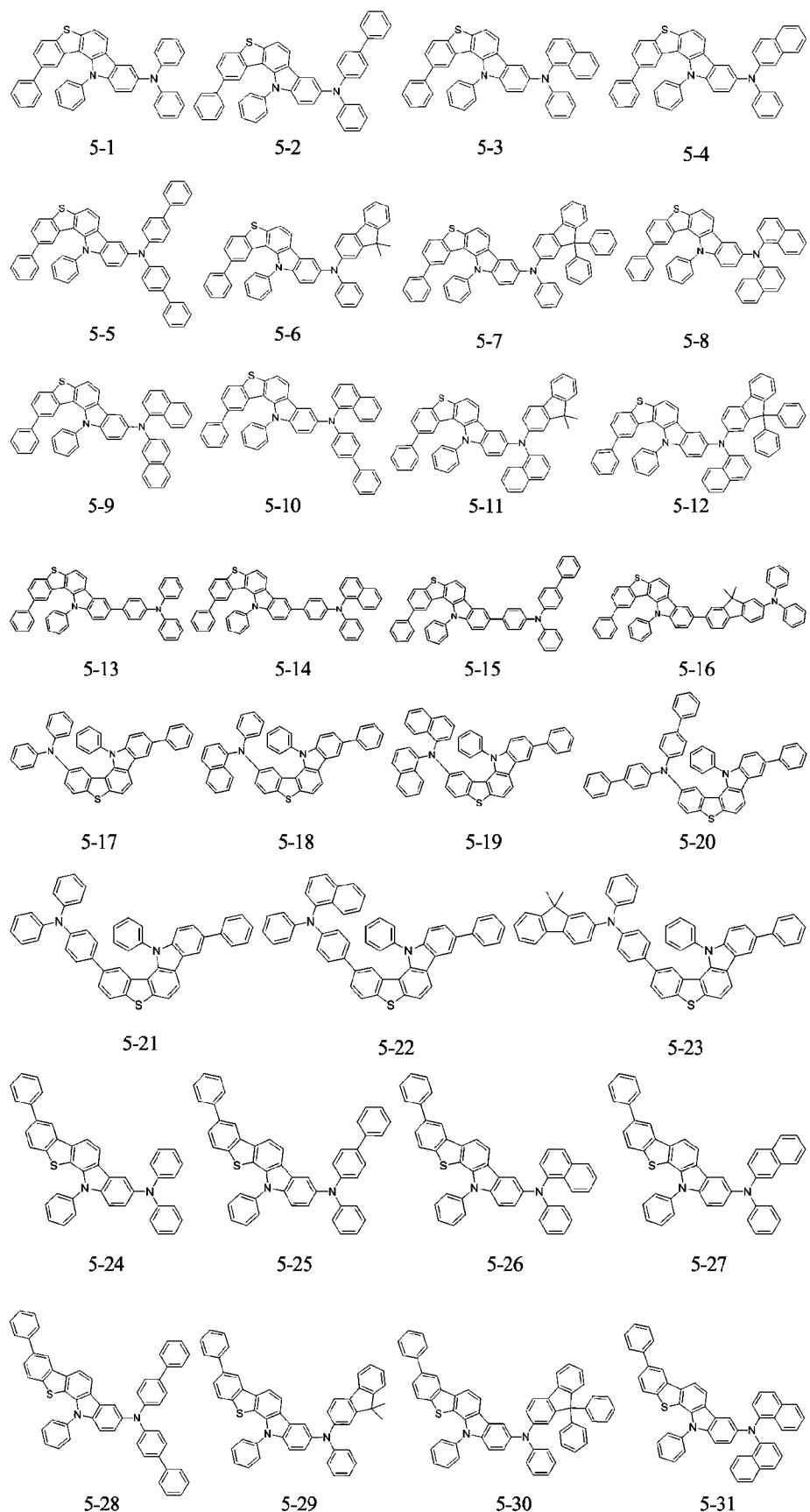


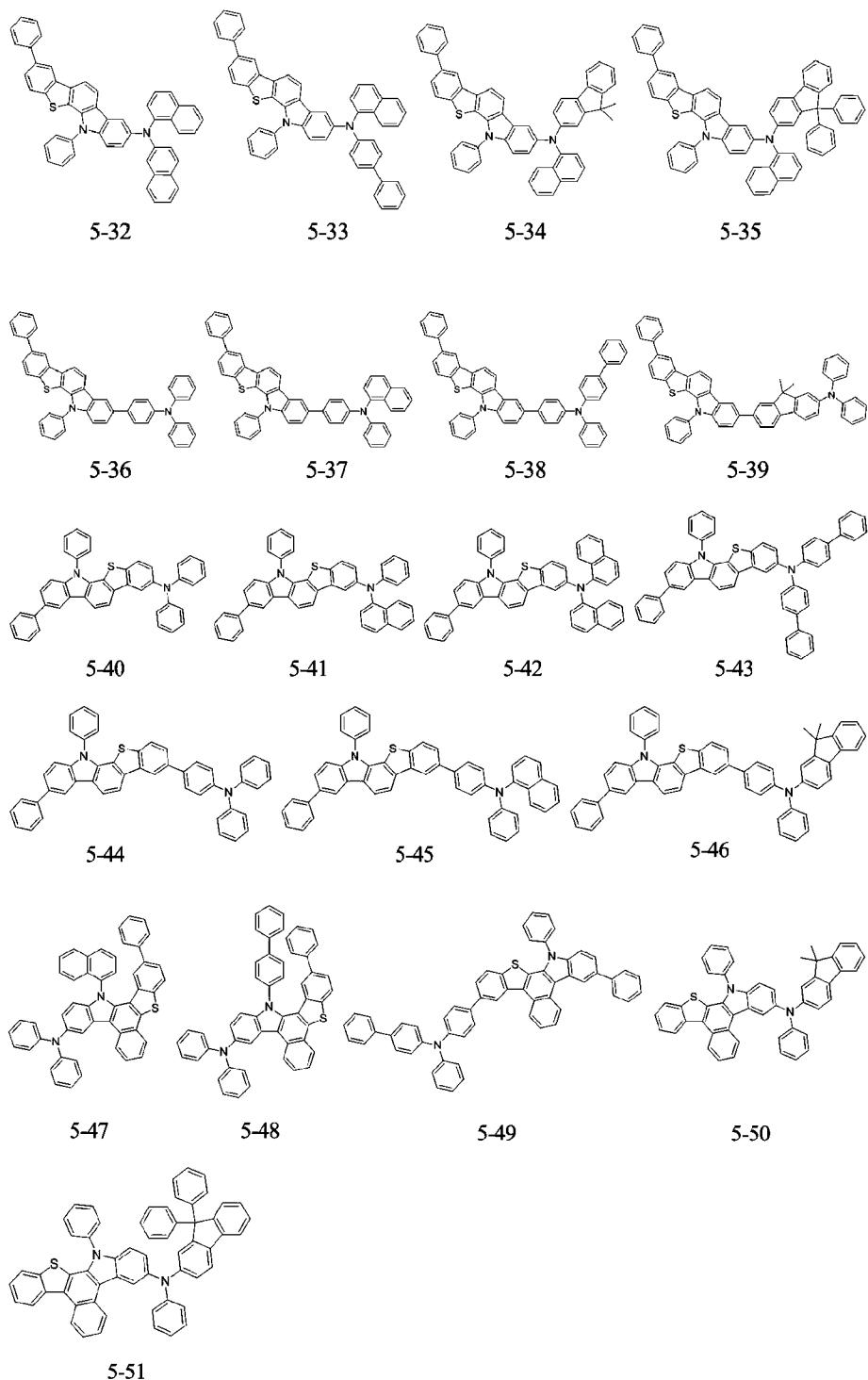


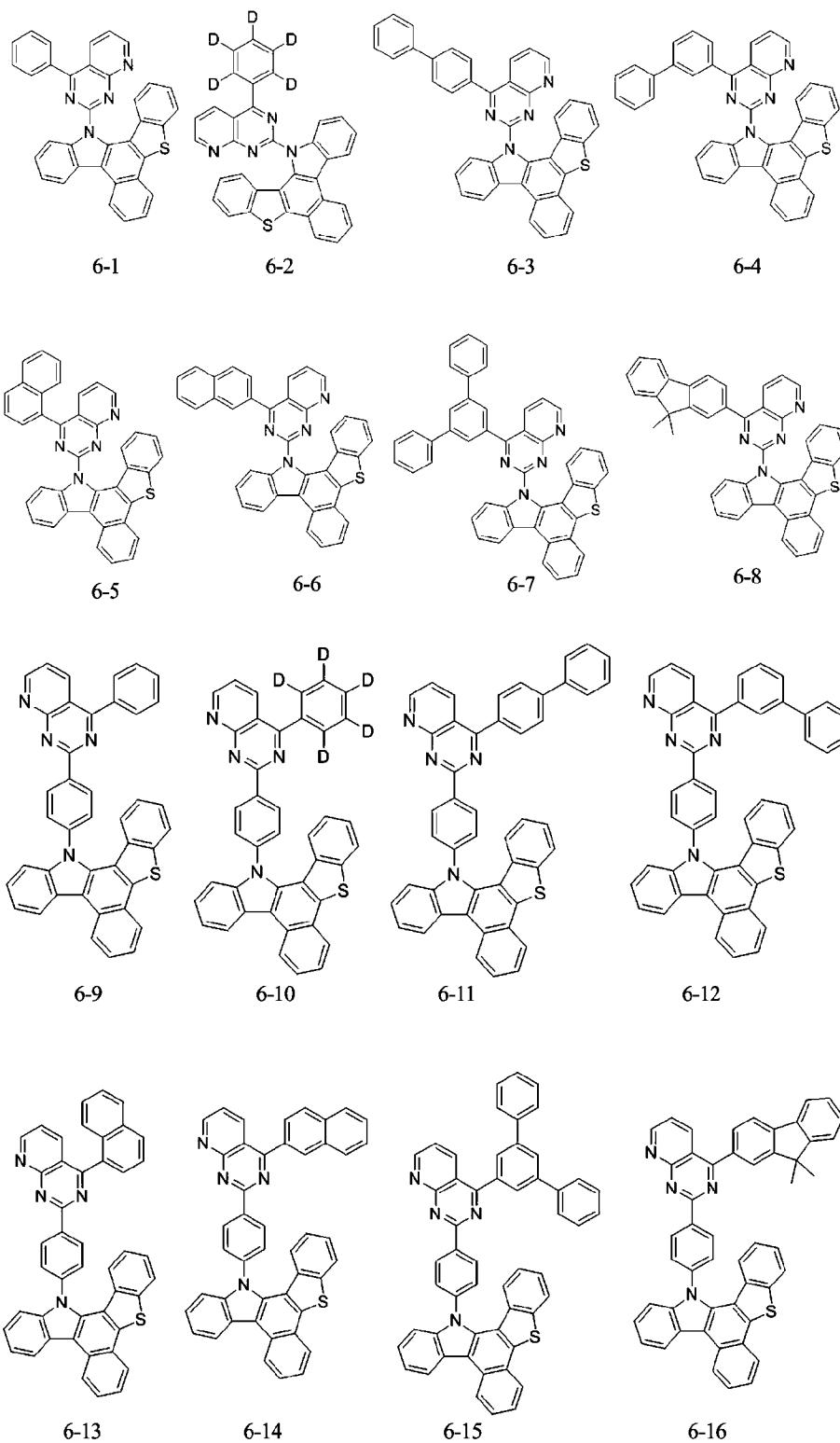


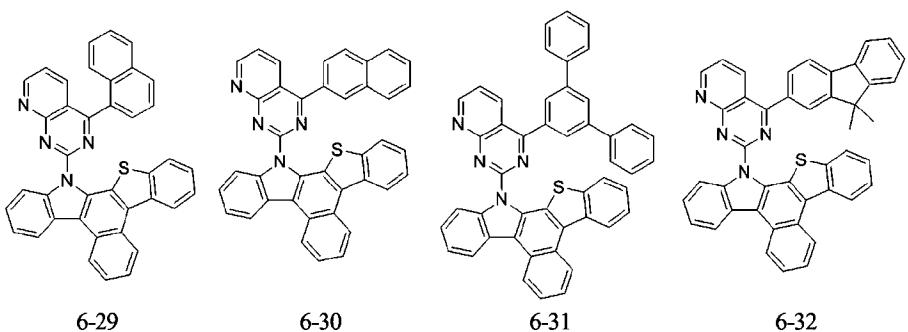
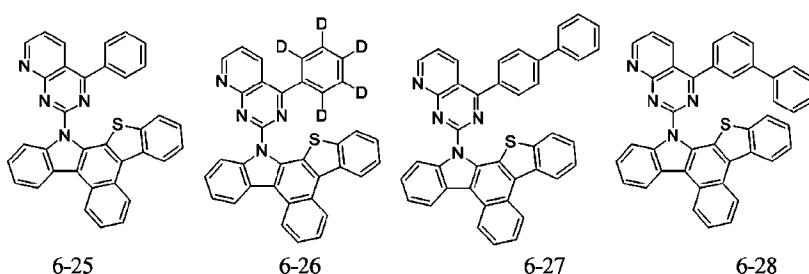
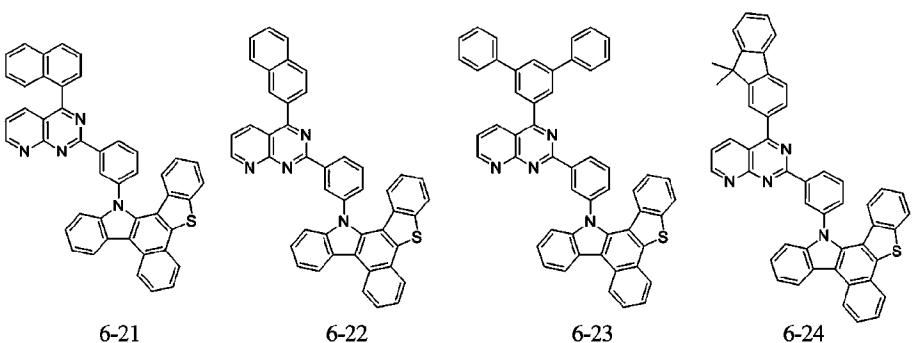
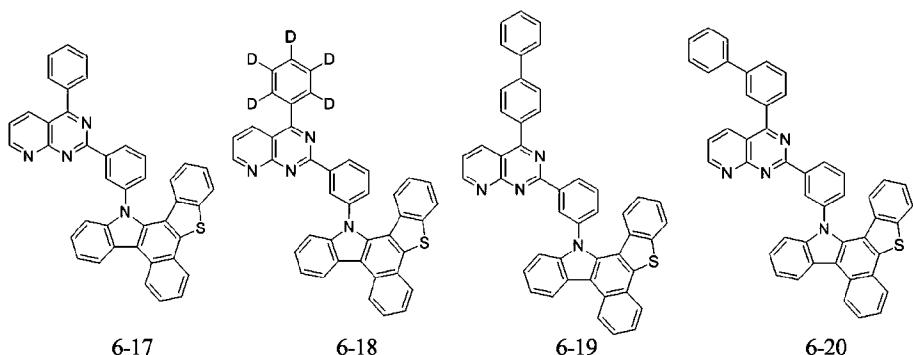


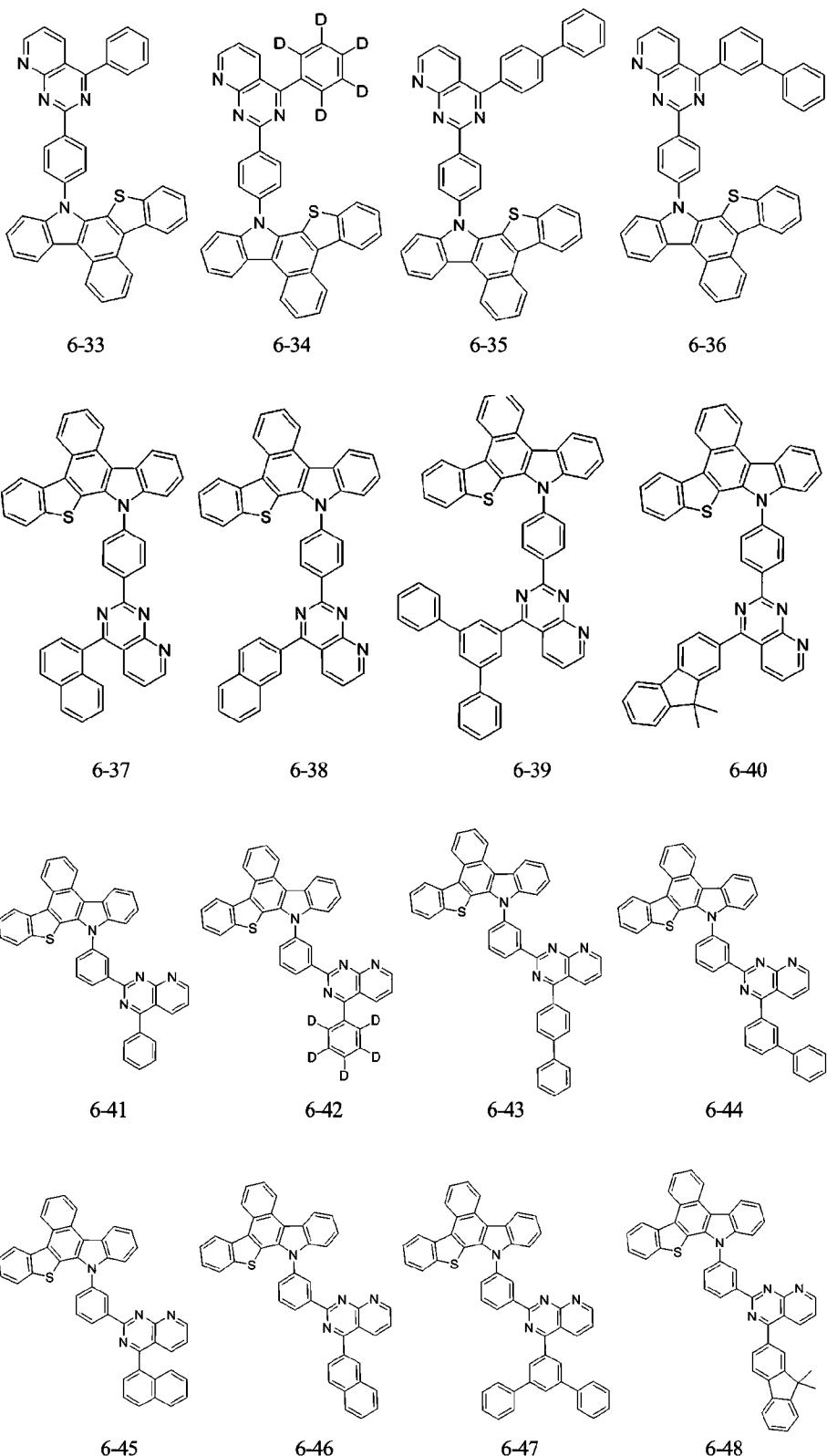


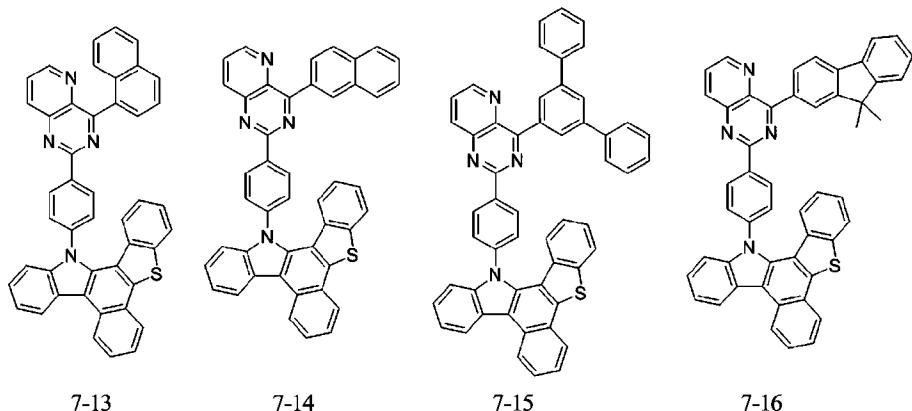
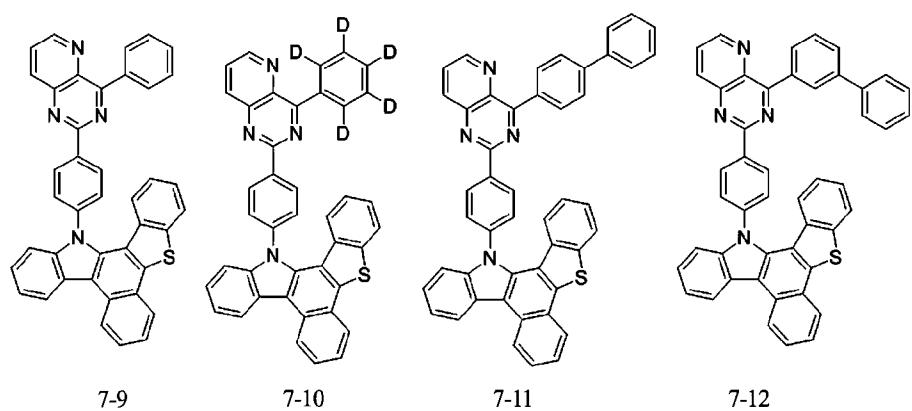
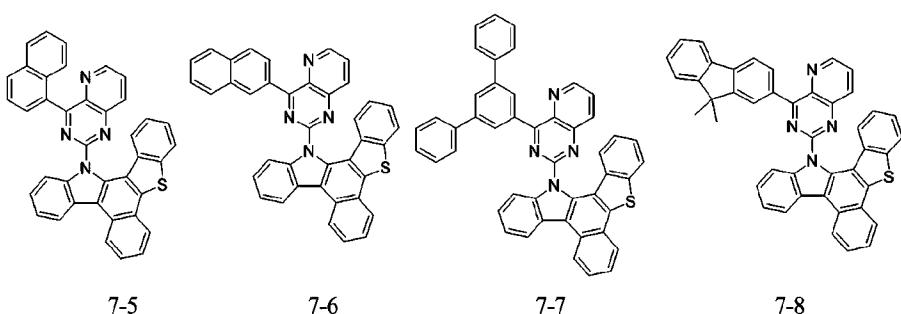
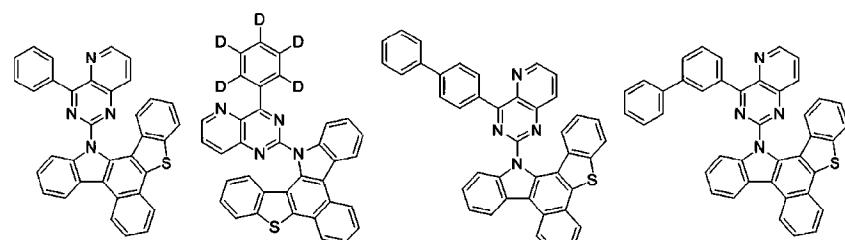


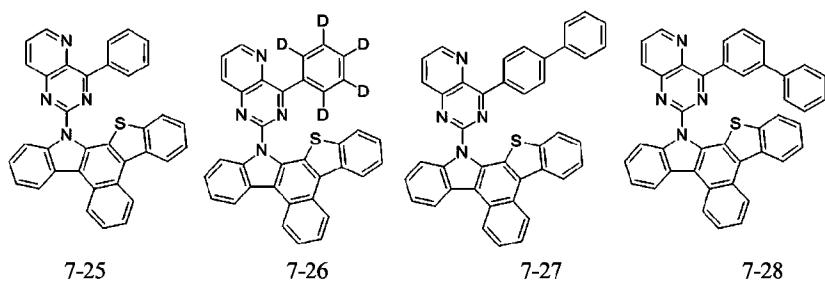
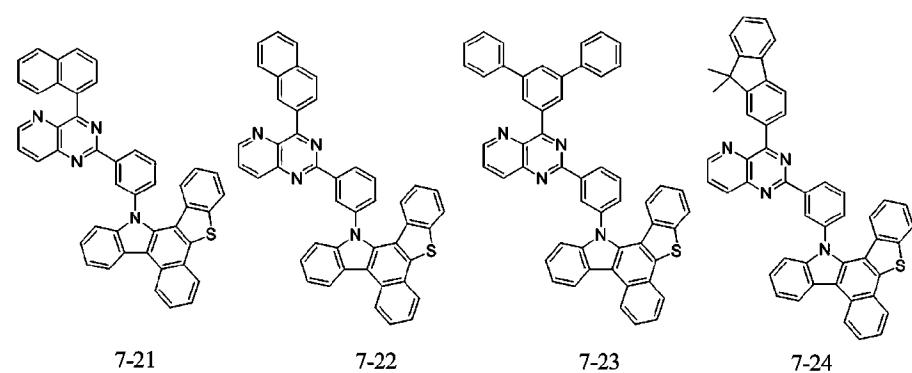
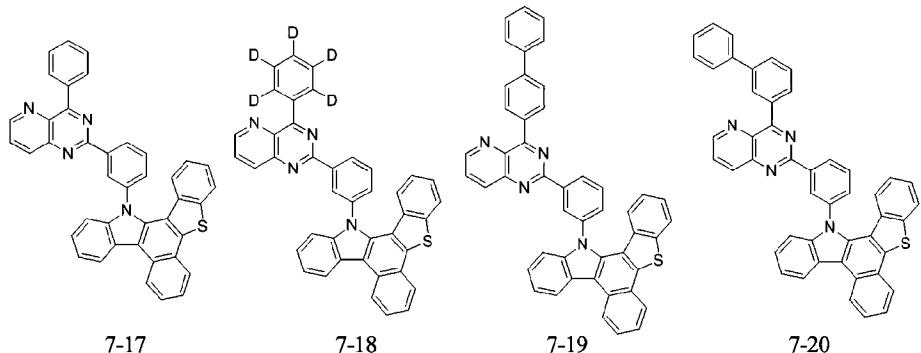


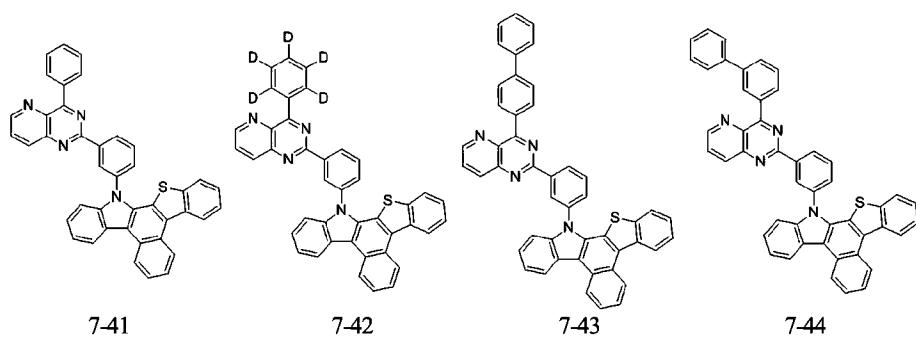
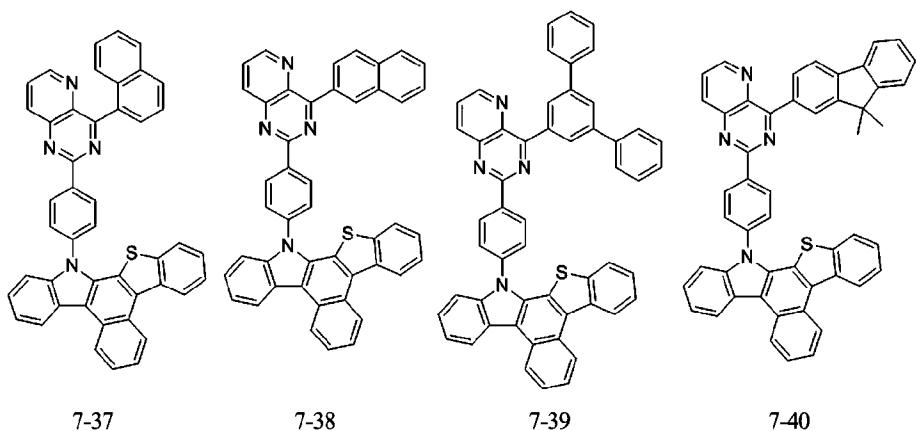
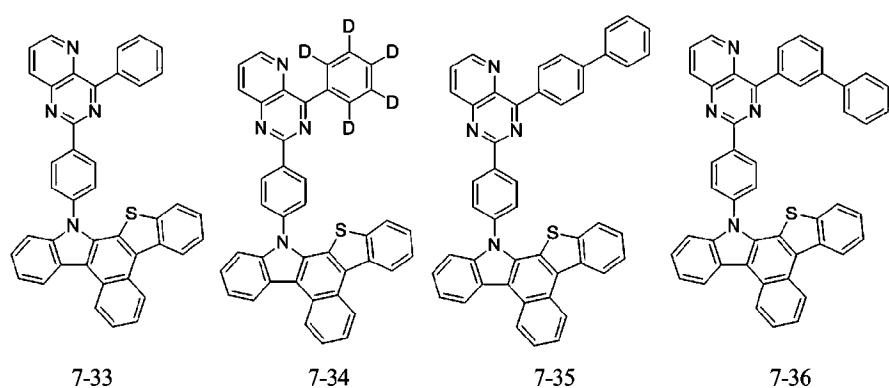
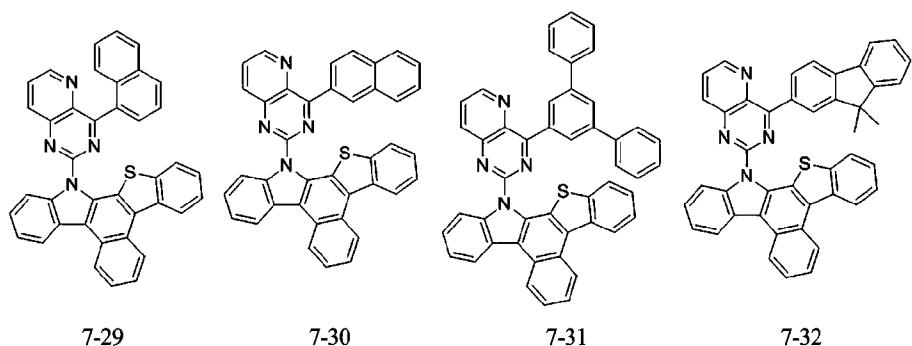


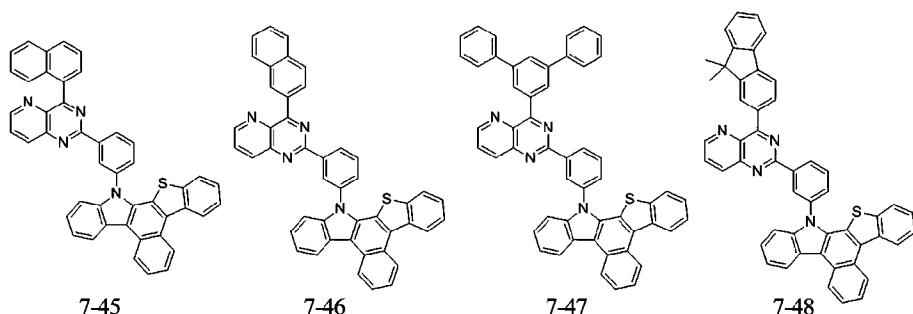












[청구항 5]

제 1전극, 제 2전극, 및 상기 제 1전극과 제 2전극 사이에 위치하는 유기물층을 포함하는 유기전기소자에 있어서,
상기 유기물층은 제 1항 내지 제 4항 중 어느 한 항의 화합물을 함유하는 것을 특징으로 하는 유기전기소자.

[청구항 6]

제 5항에 있어서,
상기 화합물을 용액공정(soluble process)에 의해 상기 유기물층으로 형성하는 것을 특징으로 하는 유기전기소자.

[청구항 7]

상기 유기물층은 발광층, 정공 주입층, 정공 수송층, 발광보조층, 전자 주입층 및 전자 수송층 중 적어도 하나인 것을 특징으로 하는 유기전기소자.

[청구항 8]

제 7항에 있어서,
상기 발광층, 정공주입층 및 발광보조층 중 적어도 일층은 상기 화합물로 형성되는 것을 특징으로 하는 유기전기소자.

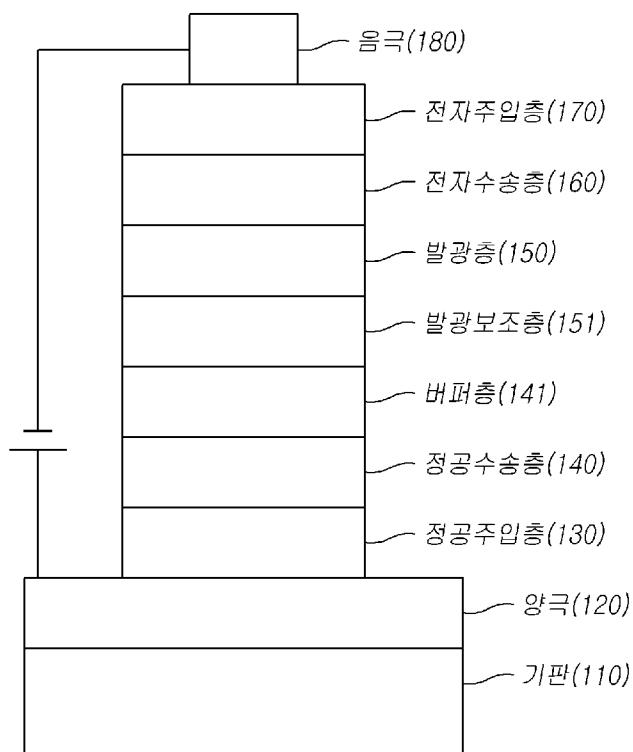
[청구항 9]

제 5항의 유기전기소자를 포함하는 디스플레이장치; 및
상기 디스플레이장치를 구동하는 제어부;를 포함하는 전자장치.

[청구항 10]

상기 유기전기소자는 유기전기발광소자(OLED), 유기태양전지, 유기감광체(OPC), 유기트랜지스터(유기 TFT), 및 단색 또는 백색 조명용 소자 중 적어도 하나인 것을 특징으로 하는 전자장치.

[Fig. 1]

100

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/KR2012/011234**A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER****C07D 495/04(2006.01)i, C09K 11/06(2006.01)i, H01L 51/50(2006.01)i**

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

B. FIELDS SEARCHED

Minimum documentation searched (classification system followed by classification symbols)

C07D 495/04; C07D 487/04; C07D 307/78; C09K 11/06; C07D 333/52; C09B 57/00; H01J 1/63; C07F 7/18

Documentation searched other than minimum documentation to the extent that such documents are included in the fields searched
 Korean Utility models and applications for Utility models: IPC as above
 Japanese Utility models and applications for Utility models: IPC as above

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

eKOMPASS (KIPO internal) & Keywords: Electro Luminescence, organic electronic device, carbazole, organic light-emitting layer

C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
X	WO 2011-000455 A1 (MERCK PATENT GMBH et al.) 06 January 2011 See abstract, compounds 78, 79, 3b, 3c, 3d, 5b, 5c, 6b, 6c, 7b, 7c, the examples, claims 12-14.	1-10
X	WO 2010-126234 A1 (DOW ADVANCED DISPLAY MATERIALS,LTD. et al.) 04 November 2010 See abstract, compounds 58, 59 (page 12), compounds 62, 63, 64 (page 13), claims 6-7, 9-10.	1-10
X	WO 2010-136109 A1 (MERCK PATENT GMBH et al.) 02 December 2010 See abstract, pages 39-40, compounds 1 to 6, claims 9-13.	1-10
A	US 2009-0309488 A1 (KATO, Tomoki et al.) 17 December 2009 See abstract, compounds 214, 215, 220, 221, 226, 227, claims 24-35.	1-10



Further documents are listed in the continuation of Box C.



See patent family annex.

* Special categories of cited documents:	
"A" document defining the general state of the art which is not considered to be of particular relevance	"T" later document published after the international filing date or priority date and not in conflict with the application but cited to understand the principle or theory underlying the invention
"E" earlier application or patent but published on or after the international filing date	"X" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered novel or cannot be considered to involve an inventive step when the document is taken alone
"L" document which may throw doubts on priority claim(s) or which is cited to establish the publication date of another citation or other special reason (as specified)	"Y" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered to involve an inventive step when the document is combined with one or more other such documents, such combination being obvious to a person skilled in the art
"O" document referring to an oral disclosure, use, exhibition or other means	"&" document member of the same patent family
"P" document published prior to the international filing date but later than the priority date claimed	

Date of the actual completion of the international search	Date of mailing of the international search report
29 MARCH 2013 (29.03.2013)	29 MARCH 2013 (29.03.2013)

Name and mailing address of the ISA/KR  Korean Intellectual Property Office Government Complex-Daejeon, 189 Seonsa-ro, Daejeon 302-701, Republic of Korea Facsimile No. 82-42-472-7140	Authorized officer Telephone No.
---	---

INTERNATIONAL SEARCH REPORT
Information on patent family members

International application No.

PCT/KR2012/011234

Patent document cited in search report	Publication date	Patent family member	Publication date
WO 2011-000455 A1	06.01.2011	CN 102471602 A DE 102009031021 A1 KR 10-2012-0103551 A TW 201127811 A US 2012-0097899 A1	23.05.2012 05.01.2011 19.09.2012 16.08.2011 26.04.2012
WO 2010-126234 A1	04.11.2010	KR 10-2010-0118700 A	08.11.2010
WO 2010-136109 A1	02.12.2010	CN 102448946 A CN 102498120 A CN 102498121 A DE 10-2009-023155 A1 EP 2477999 A1 KR 10-2010-0129101 A KR 10-2010-0130197 A KR 10-2012-0081155 A KR 10-2012-0081603 A KR 10-2012-0113735 A TW 201114742 A US 2012-0068170 A1 US 2012-0175561 A1 US 2012-0228552 A1 US 2012-0228554 A1 US 2012-0238105 A1 WO 2011-032626 A1 WO 2011-032686 A1 WO 2011-060859 A1 WO 2011-060877 A2 WO 2011-060877 A3 WO 2011-137922 A1 WO 2011-157339 A1	09.05.2012 13.06.2012 13.06.2012 02.12.2010 25.07.2012 08.12.2010 10.12.2010 18.07.2012 19.07.2012 15.10.2012 01.05.2011 22.03.2012 12.07.2012 13.09.2012 13.09.2012 20.09.2012 24.03.2011 24.03.2011 26.05.2011 26.05.2011 29.03.2012 10.11.2011 22.12.2011
US 2009-0309488 A1	17.12.2009	CN 102056911 A EP 2301926 A1 JP 20-09148015 A1 KR 10-2011-0018340 A TW 201008932 A US 2011-0253995 A1 US 2012-0104943 A1 US 8049411 B2 WO 2009-148015 A1	11.05.2011 30.03.2011 10.12.2009 23.02.2011 01.03.2010 20.10.2011 03.05.2012 01.11.2011 10.12.2009

A. 발명이 속하는 기술분류(국제특허분류(IPC))

C07D 495/04(2006.01)i, C09K 11/06(2006.01)i, H01L 51/50(2006.01)i

B. 조사된 분야

조사된 최소문현(국제특허분류를 기재)

C07D 495/04; C07D 487/04; C07D 307/78; C09K 11/06; C07D 333/52; C09B 57/00; H01J 1/63; C07F 7/18

조사된 기술분야에 속하는 최소문현 이외의 문현

한국등록실용신안공보 및 한국공개실용신안공보: 조사된 최소문현란에 기재된 IPC

일본등록실용신안공보 및 일본공개실용신안공보: 조사된 최소문현란에 기재된 IPC

국제조사에 이용된 전산 데이터베이스(데이터베이스의 명칭 및 검색어(해당하는 경우))

eKOMPASS(특허청 내부 검색시스템) & 키워드: 유기 전계발광 소자, 유기 전자 소자, 카바졸, 유기발광층

C. 관련 문헌

카테고리*	인용문현명 및 관련 구절(해당하는 경우)의 기재	관련 청구항
X	WO 2011-000455 A1 (MERCK PATENT GMBH 외 5명) 2011.01.06 초록, 화합물 78, 79, 3b, 3d, 5b, 5c, 6b, 6c, 7b, 7c, 실시예, 청구항 12-14 참조.	1-10
X	WO 2010-126234 A1 (DOW ADVANCED DISPLAY MATERIALS,LTD. 외 6명) 2010.11.04 초록, 화합물 58, 59 (페이지 12), 화합물 62, 63, 64 (페이지 13), 청구항 6-7, 9-10 참조.	1-10
X	WO 2010-136109 A1 (MERCK PATENT GMBH 외 6명) 2010.12.02 초록, 페이지 39-40, 화합물 1 내지 6, 청구항 9-13 참조.	1-10
A	US 2009-0309488 A1 (KATO TOMOKI 외 4명) 2009.12.17 초록, 화합물 214, 215, 220, 221, 226, 227, 청구항 24-35 참조.	1-10

 추가 문헌이 C(계속)에 기재되어 있습니다. 대응특허에 관한 별지를 참조하십시오.

* 인용된 문헌의 특별 카테고리:

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

“E” 국제출원일보다 빠른 출원일 또는 우선일을 가지나 국제출원일 이후
에 공개된 선출원 또는 특허 문헌“L” 우선권 주장에 의문을 제기하는 문헌 또는 다른 인용문헌의 공개일
또는 다른 특별한 이유(이유를 명시)를 밝히기 위하여 인용된 문헌

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

“P” 우선일 이후에 공개되었으나 국제출원일 이전에 공개된 문헌

“T” 국제출원일 또는 우선일 후에 공개된 문헌으로, 출원과 상충하지
않으면 발명의 기초가 되는 원리나 이론을 이해하기 위해 인용된
문헌“X” 특별한 관련이 있는 문헌. 해당 문헌 하나만으로 청구된 발명의 신
규성 또는 진보성이 없는 것으로 본다.“Y” 특별한 관련이 있는 문헌. 해당 문헌이 하나 이상의 다른 문헌과
조합하는 경우로 그 조합이 당업자에게 자명한 경우 청구된 발명
은 진보성이 없는 것으로 본다.

“&” 동일한 대응특허문헌에 속하는 문헌

국제조사의 실제 완료일

2013년 03월 29일 (29.03.2013)

국제조사보고서 발송일

2013년 03월 29일 (29.03.2013)

ISA/KR의 명칭 및 우편주소

대한민국 특허청

(302-701) 대전광역시 서구 청사로 189,
4동(둔산동, 정부대전청사)

팩스 번호 82-42-472-7140

심사관

정명주

전화번호 82-42-481-5584



국제조사보고서에서
인용된 특허문현

공개일

대응특허문현

공개일

WO 2011-000455 A1	2011.01.06	CN 102471602 A DE 102009031021 A1 KR 10-2012-0103551 A TW 201127811 A US 2012-0097899 A1	2012.05.23 2011.01.05 2012.09.19 2011.08.16 2012.04.26
WO 2010-126234 A1	2010.11.04	KR 10-2010-0118700 A	2010.11.08
WO 2010-136109 A1	2010.12.02	CN 102448946 A CN 102498120 A CN 102498121 A DE 10-2009-023155 A1 EP 2477999 A1 KR 10-2010-0129101 A KR 10-2010-0130197 A KR 10-2012-0081155 A KR 10-2012-0081603 A KR 10-2012-0113735 A TW 201114742 A US 2012-0068170 A1 US 2012-0175561 A1 US 2012-0228552 A1 US 2012-0228554 A1 US 2012-0238105 A1 WO 2011-032626 A1 WO 2011-032686 A1 WO 2011-060859 A1 WO 2011-060877 A2 WO 2011-060877 A3 WO 2011-137922 A1 WO 2011-157339 A1	2012.05.09 2012.06.13 2012.06.13 2010.12.02 2012.07.25 2010.12.08 2010.12.10 2012.07.18 2012.07.19 2012.10.15 2011.05.01 2012.03.22 2012.07.12 2012.09.13 2012.09.13 2012.09.20 2011.03.24 2011.03.24 2011.05.26 2011.05.26 2012.03.29 2011.11.10 2011.12.22
US 2009-0309488 A1	2009.12.17	CN 102056911 A EP 2301926 A1 JP 20-09148015 A1 KR 10-2011-0018340 A TW 201008932 A US 2011-0253995 A1 US 2012-0104943 A1 US 8049411 B2 WO 2009-148015 A1	2011.05.11 2011.03.30 2009.12.10 2011.02.23 2010.03.01 2011.10.20 2012.05.03 2011.11.01 2009.12.10