(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 공개특허공보(A)

(11) 공개번호 10-2016-0146023
(43) 공개일자 2016년12월21일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)
C09K 11/06 (2006.01) *C07D 209/82* (2006.01)
C07D 403/10 (2006.01) *H01L 51/50* (2006.01)
(52) CPC특허분류
C09K 11/06 (2013.01)
C07D 209/82 (2013.01)
(21) 출원번호 10-2015-0082531
(22) 출원일자 2015년06월11일
심사청구일자 없음

(71) 출원인
덕산네오룩스 주식회사
충청남도 천안시 서북구 입장면 쑥골길 21-32
경희대학교 산학협력단
경기도 용인시 기흥구 덕영대로 1732 (서천동, 경희대학교 국제캠퍼스내)
(72) 발명자
권장혁
경기도 용인시 기흥구 용구대로2394번길 27 113동 103호
김경헌
경기도 용인시 기흥구 동백2로 11길 어은목마을 벽산블루밍 아파트 4205동 303호
(뒷면에 계속)
(74) 대리인
김은구

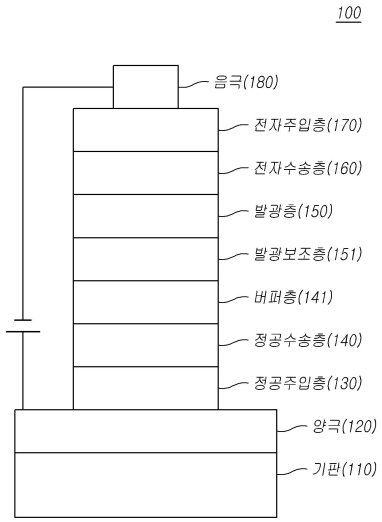
전체 청구항 수 : 총 13 항

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

(57) 요 약

본 발명은 소자의 높은 발광효율, 낮은 구동전압 및 수명을 향상시킬 수 있는 화합물, 이를 이용한 유기전기소자 및 그 전자장치를 제공하는 것을 목적으로 한다.

대 표 도 - 도1



(52) CPC특허분류
C07D 403/10 (2013.01)
H01L 51/50 (2013.01)
C09K 2211/1029 (2013.01)
(72) 발명자
이주영
경기도 수원시 팔달구 일월로 18번길 4-26 꽃뫼버들마을 코오롱아파트 172-1604
김슬기
대전광역시 대덕구 동춘당로31번길 31(송촌동, 대호빌라) A동 201호
이범성
경기도 화성시 탄요 1길 98번지 29동 2호
이석종
경기도 고양시 일산서구 킨텍스로 284 문촌마을 19단지 1905-702

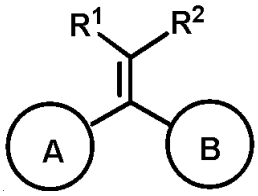
명 세 서

청구범위

청구항 1

하기 화학식으로 표시되는 지연형광 화합물.

<화학식 1>



[상기 화학식 1에서,

R^1 및 R^2는 서로 독립적으로 수소; 중수소; C_1-C_{60}의 알킬기; C_6-C_{60}의 아릴기; 시아노기;로 이루어진 군에서 선택되고, R^1과 R^2 중 적어도 하나는 시아노기이며,

A환 및 B환은 카르보사이클릭 또는 헤테로사이클릭 방향족 고리를 포함하고, 서로 같거나 상이할 수 있으며,

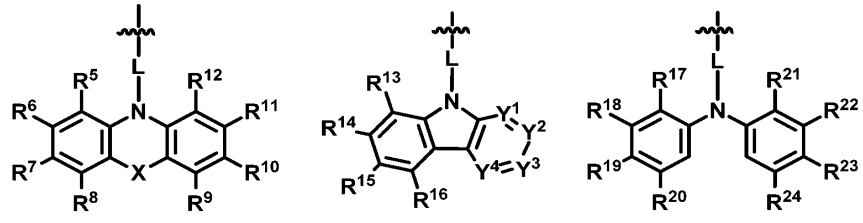
상기 아릴기, 알킬기, 시아노기, 카르보사이클릭 방향족 고리, 헤테로사이클릭 방향족 고리 각각은 중수소, 할로겐, 실란기, 실록산기, 붕소기, 게르마늄기, 시아노기, 니트로기, -L'-N(R_a)(R_b)(여기서 상기 L'은 단일결합; C_6~C_{60}의 아릴렌기; 플루오렌일렌기; C_3~C_{60}의 지방족고리와 C_6~C_{60}의 방향족고리의 융합고리기; 및 C_2~C_{60}의 헤테로고리기;로 이루어진 군에서 선택되고, 상기 R_a 및 R_b은 서로 독립적으로 C_6~C_{60}의 아릴기; 플루오렌일기; C_3~C_{60}의 지방족고리와 C_6~C_{60}의 방향족고리의 융합고리기; 및 O, N, S, Si 및 P 중 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C_2~C_{60}의 헤테로고리기;로 이루어진 군에서 선택됨), C_1~C_{20}의 알킬싸이오기, C_1~C_{20}의 알콕실기, C_1~C_{20}의 알킬기, C_2~C_{20}의 알켄일기, C_2~C_{20}의 알킨일기, C_6~C_{20}의 아릴기, 중수소로 치환된 C_6~C_{20}의 아릴기, 플루오렌일기, C_2~C_{20}의 헤테로고리기, C_3~C_{20}의 시클로알킬기, C_7~C_{20}의 아릴알킬기, C_8~C_{20}의 아릴알켄일기, 카르보닐기, 에테르기, C_2~C_{20}의 알콕실카르보닐기, C_6~C_{30}의 아릴옥시기, -O-Si(R^x)$_3$, 및 R^xO-Si(R^x)$_2$- (여기서 상기 R^x은 수소, C_6~C_{20}의 아릴기, C_1~C_{20}의 알킬기, C_2~C_{20}의 알켄일기, C_8~C_{20}의 아릴알켄일기, C_7~C_{20}의 아릴알콕실기, 또는 C_2~C_{20}의 알콕실카르보닐기임)로 이루어진 군에서 선택된 하나 이상의 치환기로 치환될 수 있다.]

청구항 2

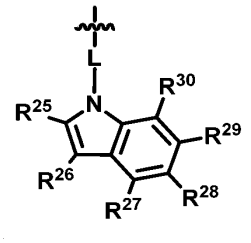
제 1항에 있어서,

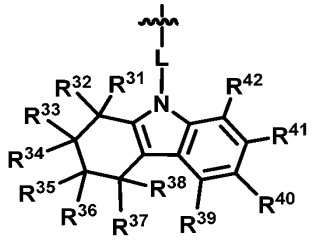
상기 A환 및 B환은 하기 화학식 중 하나로 표시되는 것을 특징으로 하는 지연형광 화합물.

<화학식 2> <화학식 3> <화학식 4>



<화학식 5> <화학식 6>





[상기 화학식 2 내지 화학식 6에서,

X는 O, S, CR^3R^4 또는 단일결합이고,

Y^1 내지 Y^4는 서로 독립적으로 CR' 또는 N이며, 적어도 하나는 N이고, 복수의 R'이 존재할 경우 복수의 R'는 서로 동일하거나 상이하며,

상기 R^3 및 R^4는 i) 서로 독립적으로 수소; 중수소; C_1-C_{60}의 알킬기; C_6-C_{60}의 아릴기;로 이루어진 군에서 선택되거나, 또는 ii) R^3과 R^4는 서로 결합하여 적어도 하나의 고리를 형성할 수 있으며(단, 고리를 형성하지 않는 R^3과 R^4는 상기 i)에서 정의된 것과 동일함),

R^5 내지 R^{42} 및 R'은 i) 서로 독립적으로 수소; 중수소; 할로겐; 나이트로; C_1-C_{60}의 알킬기(직쇄, 분지쇄); C_1-C_{60}의 알콕시기; C_6-C_{60}의 아릴옥시; 아미노기; 실릴기; C_2-C_{60}의 알케닐기; C_6-C_{60}의 아릴기; C_2-C_{60}의 헤테로아릴기; 카보닐기; 에스테르기; 니트릴기; 술파닐기; 술피닐기; 술포닐기; 포스피노기; 플루오렌일기;로 이루어진 군에서 선택되거나, 또는 ii) R^5 내지 R^{12} 중 임의의 인접한 2개의 기끼리, R^{13} 내지 R^{16} 중 임의의 인접한 2개의 기끼리, R^{17} 내지 R^{24} 중 임의의 인접한 2개의 기끼리, R^{27} 내지 R^{30} 중 임의의 인접한 2개의 기끼리, R^{39} 내지 R^{42} 중 임의의 인접한 2개의 기끼리 및 복수의 R' 중 임의의 인접한 2개의 기끼리는 각각 서로 결합하여 적어도 하나의 고리를 형성할 수 있고(단, 고리를 형성하지 않는 R^5 내지 R^{42} 및 R'은 상기 i)에서 정의된 것과 동일함),

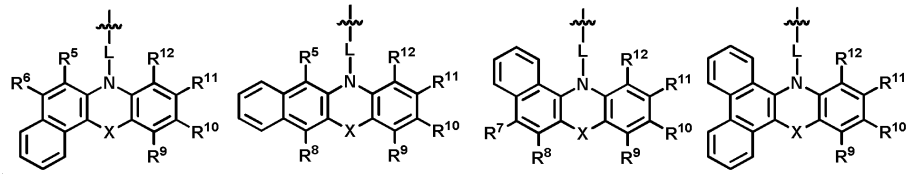
L은 C_6-C_{60}의 아릴렌기; C_2-C_{60}의 헤테로고리기; 플루오렌일렌기;로 이루어진 군에서 선택된다.]

청구항 3

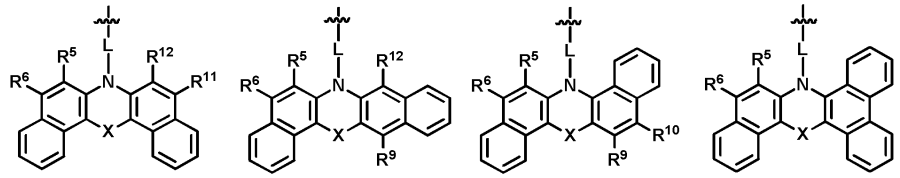
제 2항에 있어서,

상기 화학식 2의 R^5 내지 R^{12} 중 인접한 2개의 기끼리 서로 결합하여 고리를 형성할 경우 상기 화학식 2는 하기 화학식으로 표시되는 것을 특징으로 하는 지연형광 화합물.

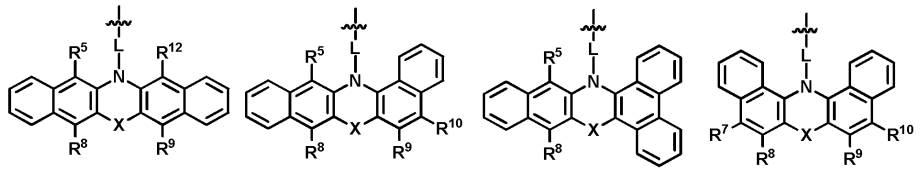
<화학식 2-1> <화학식 2-2> <화학식 2-3> <화학식 2-4>



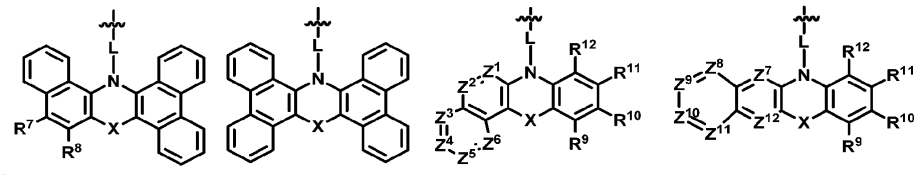
<화학식 2-5> <화학식 2-6> <화학식 2-7> <화학식 2-8>



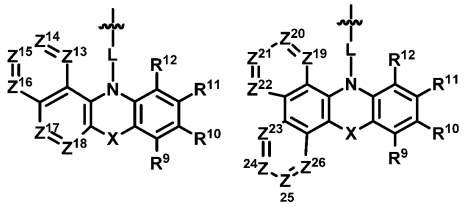
<화학식 2-9> <화학식 2-10> <화학식 2-11> <화학식 2-12>



<화학식 2-13> <화학식 2-14> <화학식 2-15> <화학식 2-16>



<화학식 2-17> <화학식 2-18>



[상기 화학식 2-1 내지 화학식 2-18에서,

상기 X, R^5 내지 R^{12} 및 L은 상기 화학식 2 내지 화학식 6에서 정의된 것과 동일하고,

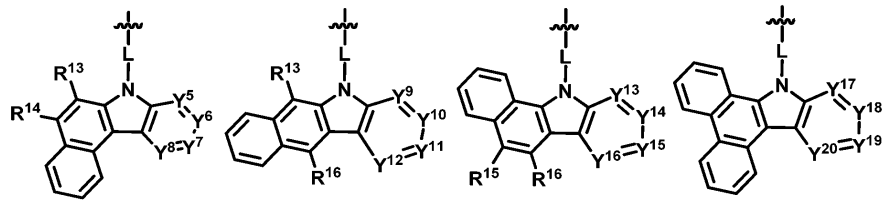
Z^1 내지 Z^{26}은 서로 독립적으로 CR' 또는 N이고, R'는 상기 화학식 2 내지 화학식 6에서 정의된 것과 동일하며, 복수의 R'이 존재할 경우 복수의 R'는 서로 동일하거나 상이하다.]

청구항 4

제 2항에 있어서,

상기 화학식 3의 R^{13} 내지 R^{16} 중 인접한 2개의 기끼리 서로 결합하여 고리를 형성할 경우 상기 화학식 3은 하기 화학식으로 표시되는 것을 특징으로 하는 지연형광 화합물.

<화학식 3-1> <화학식 3-2> <화학식 3-3> <화학식 3-4>



(상기 화학식 3-1 내지 화학식 3-4에서,

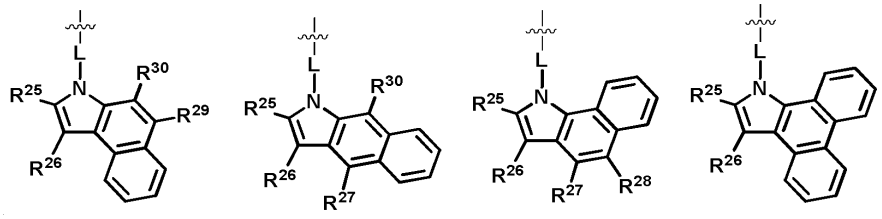
상기 R^{13} 내지 R^{16} 및 L은 상기 화학식 2 내지 화학식 6에서 정의된 것과 동일하고, 상기 Y^5 내지 Y^{20}은 상기 화학식 2 내지 화학식 6에서 정의된 Y^1 내지 Y^4와 동일함)

청구항 5

제 2항에 있어서,

상기 화학식 5의 R^{27} 내지 R^{30} 중 인접한 2개의 기끼리 서로 결합하여 고리를 형성할 경우 상기 화학식 5는 하기 화학식으로 표시되는 것을 특징으로 하는 지연형광 화합물.

<화학식 5-1> <화학식 5-2> <화학식 5-3> <화학식 5-4>



(상기 화학식 5-1 내지 화학식 5-4에서,

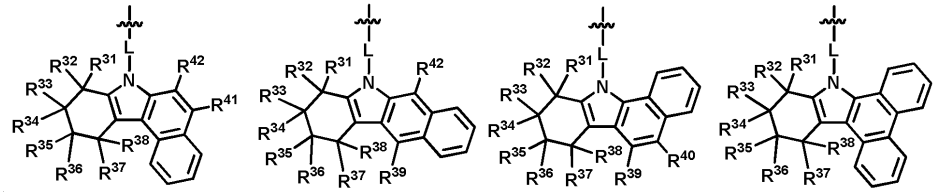
상기 R^{25} 내지 R^{30} 및 L은 상기 화학식 2 내지 화학식 6에서 정의된 것과 동일함)

청구항 6

제 2항에 있어서,

상기 화학식 6의 R^{39} 내지 R^{42} 중 인접한 2개의 기끼리 서로 결합하여 고리를 형성할 경우 상기 화학식 6은 하기 화학식으로 표시되는 것을 특징으로 하는 지연형광 화합물.

<화학식 6-1> <화학식 6-2> <화학식 6-3> <화학식 6-4>



(상기 화학식 6-1 내지 화학식 6-4에서,

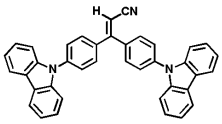
상기 R^{31} 내지 R^{42} 및 L은 상기 화학식 2 내지 화학식 6에서 정의된 것과 동일함)

청구항 7

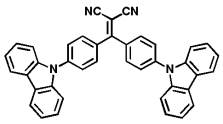
제 1항에 있어서,

하기 화합물 중 하나인 것을 특징으로 하는 지연형광 화합물.

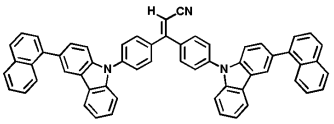
1'-1



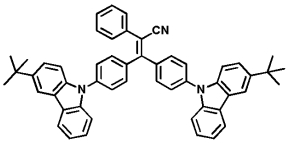
1'-2



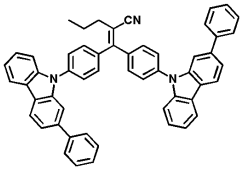
1'-3



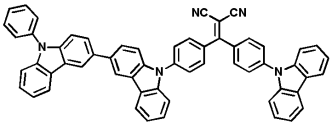
1'-4



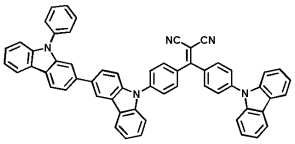
1'-5



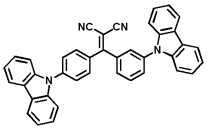
1'-6



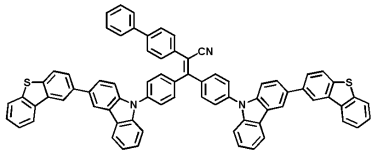
1'-7



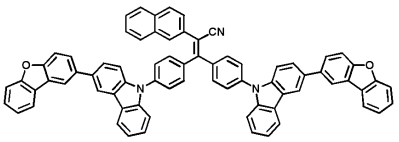
1'-8



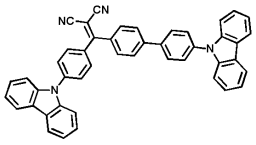
1'-9



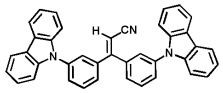
1'-10



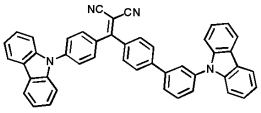
1'-11



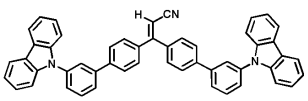
1'-12



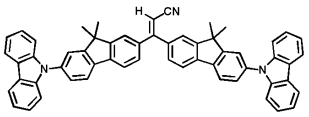
1'-13



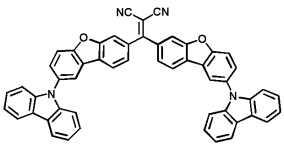
1'-14



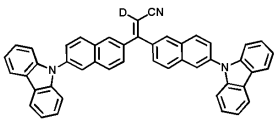
1'-15



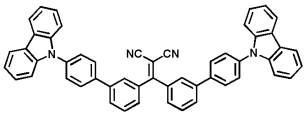
1'-16



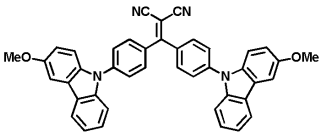
1'-17



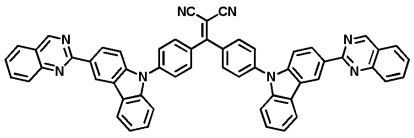
1'-18



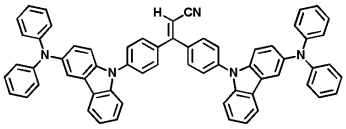
1'-19



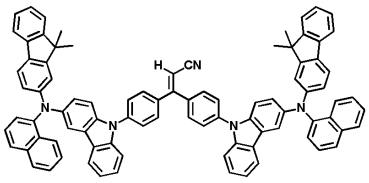
1'-20



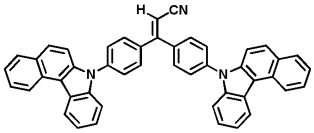
1'-21



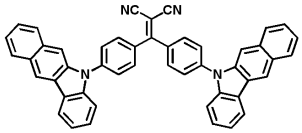
1'-22



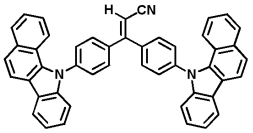
1'-23



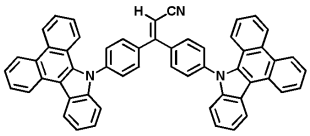
1'-24



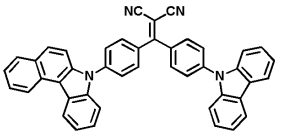
1'-25



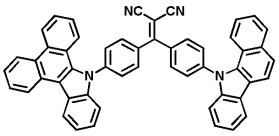
1'-26



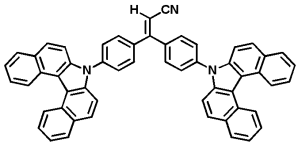
1'-27



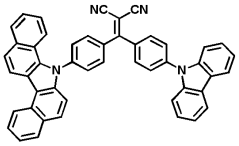
1'-28



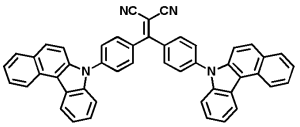
1'-29



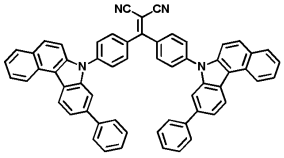
1'-30



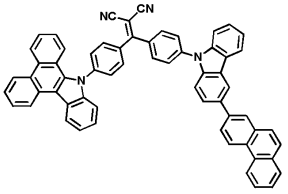
1'-31



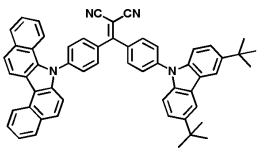
1'-32



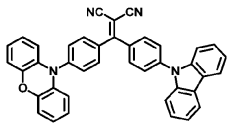
1'-33



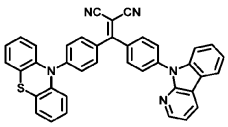
1'-34



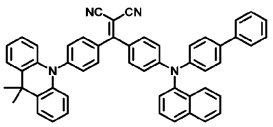
1'-35



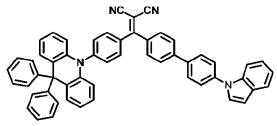
1'-36



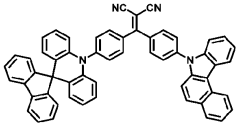
1'-37



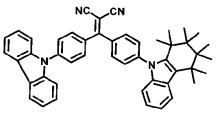
1'-38



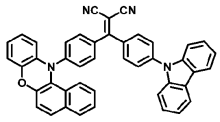
1'-39



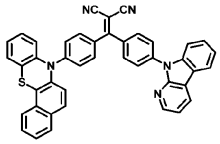
1'-40



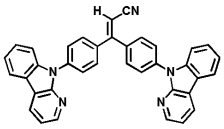
1'-41



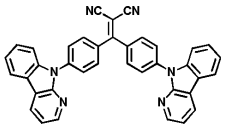
1'-42



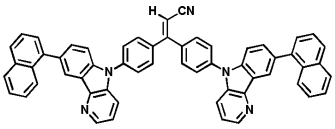
2'-1



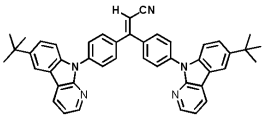
2'-2



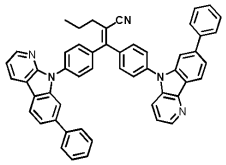
2'-3



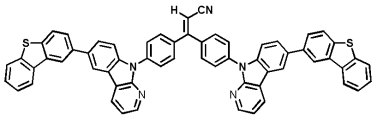
2'-4



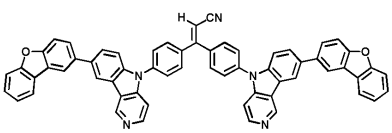
2'-5



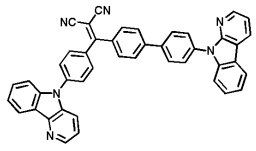
2'-6



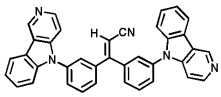
2'-7



2'-8



2'-9

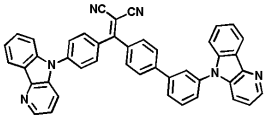


2'-10

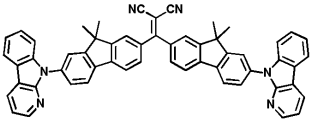
2'-11

2'-12

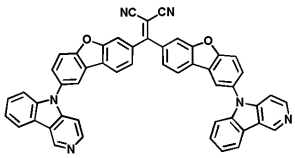
2'-13



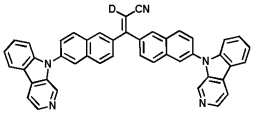
2'-14



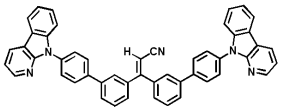
2'-15



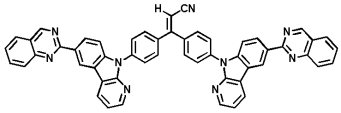
2'-16

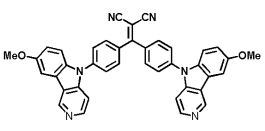


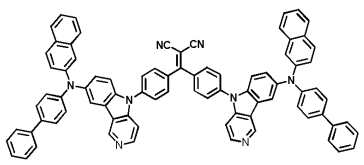
2'-17

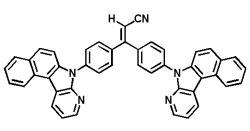


2'-18

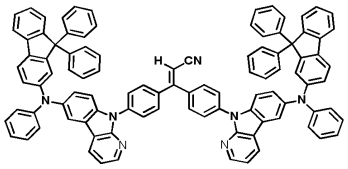




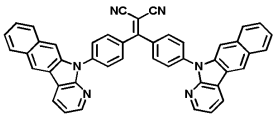




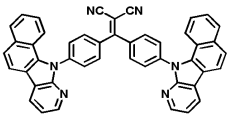
2'-19



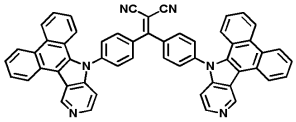
2'-20



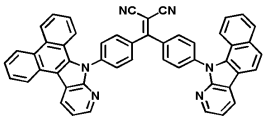
2'-21



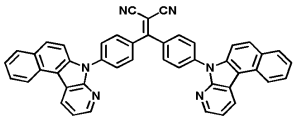
2'-22



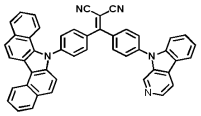
2'-23



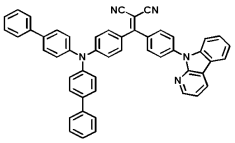
2'-24



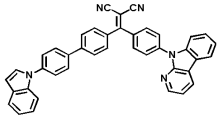
2'-25



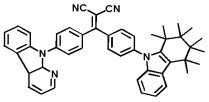
2'-26



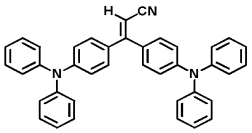
2'-27



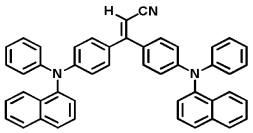
2'-28



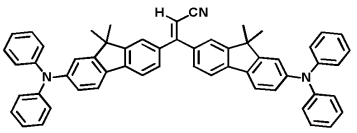
3'-1



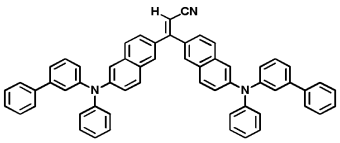
3'-2



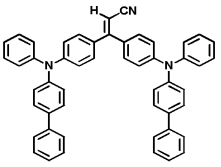
3'-3



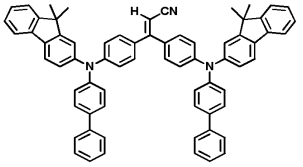
3'-4



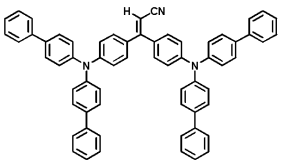
3'-5



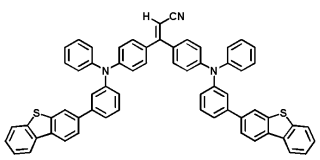
3'-6



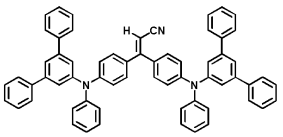
3'-7



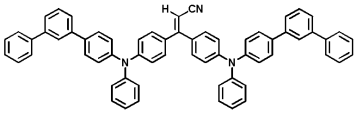
3'-8



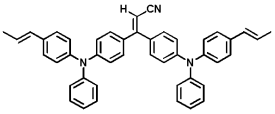
3'-9



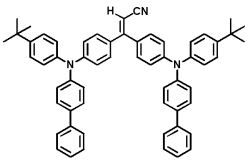
3'-10



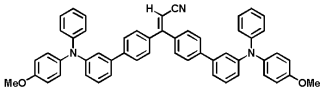
3'-11



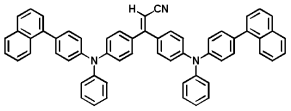
3'-12



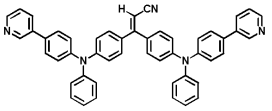
3'-13



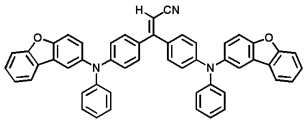
3'-14



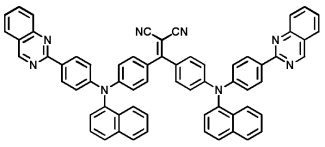
3'-15



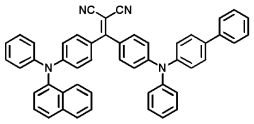
3'-16



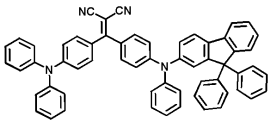
3'-17



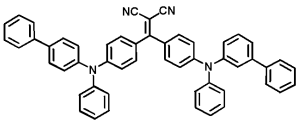
3'-18



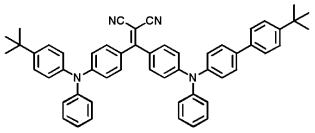
3'-19



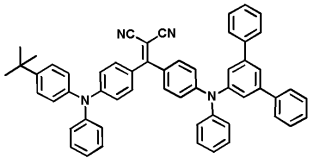
3'-20



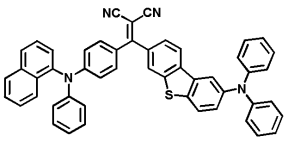
3'-21



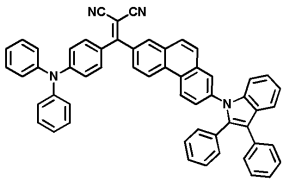
3'-22



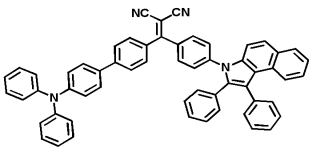
3'-23



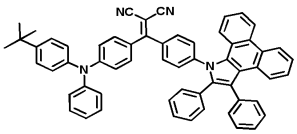
3'-24



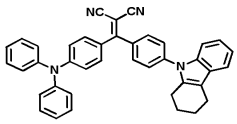
3'-25



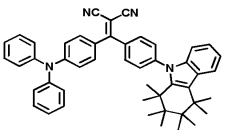
3'-26



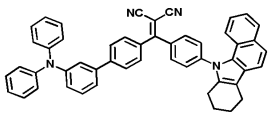
3'-27



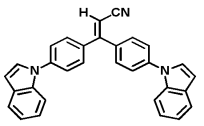
3'-28



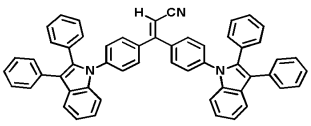
3'-29



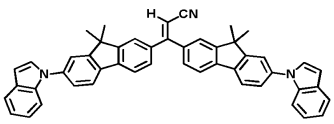
4'-1



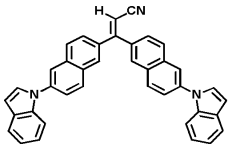
4'-2



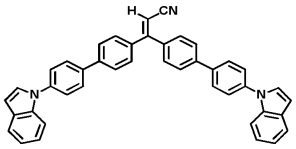
4'-3



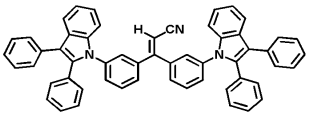
4'-4



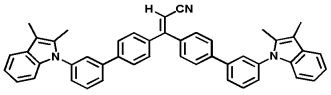
4'-5



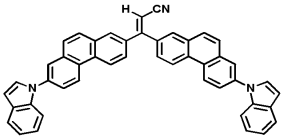
4'-6



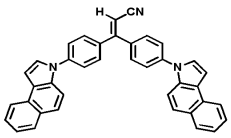
4'-7



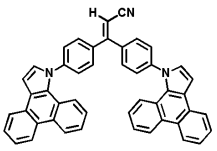
4'-8



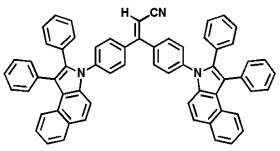
4'-9



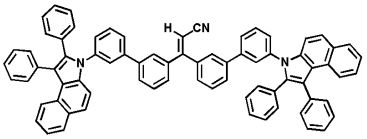
4'-10



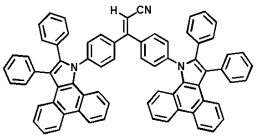
4'-11



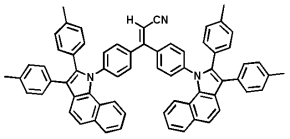
4'-12



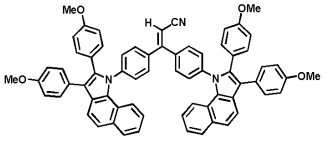
4'-13



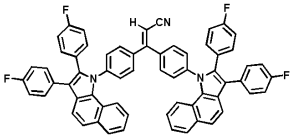
4'-14



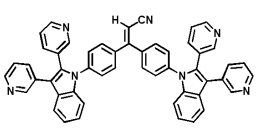
4'-15



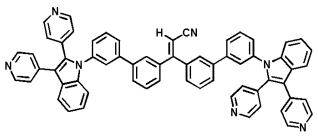
4'-16



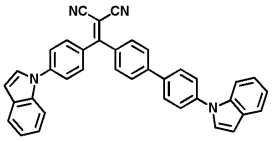
4'-17



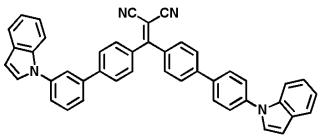
4'-18



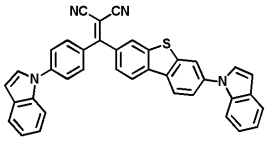
4'-19



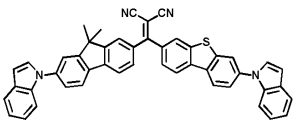
4'-20



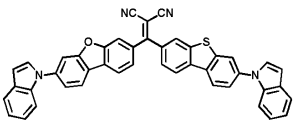
4'-21



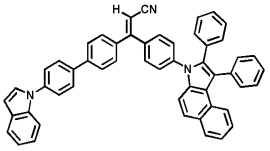
4'-22



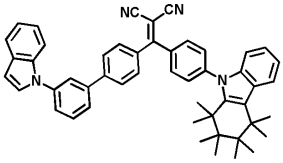
4'-23



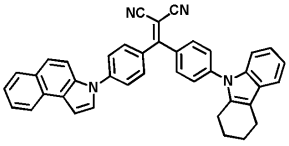
4'-24



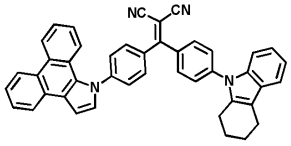
4'-25



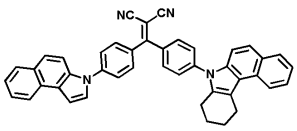
4'-26



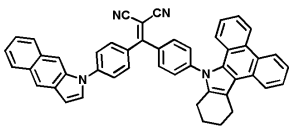
4'-27



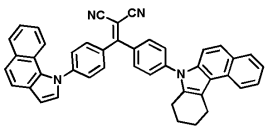
4'-28



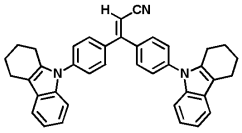
4'-29



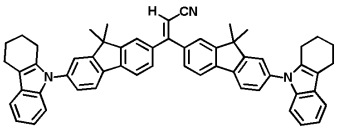
4'-30



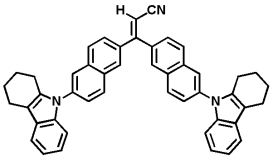
5'-1



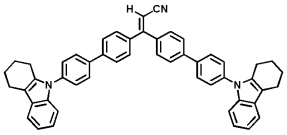
5'-2



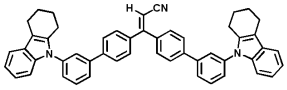
5'-3



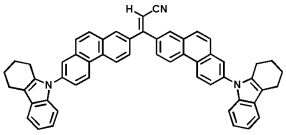
5'-4



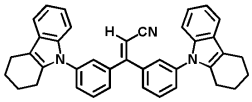
5'-5



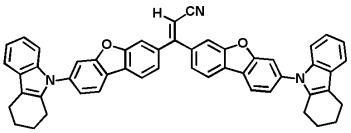
5'-6



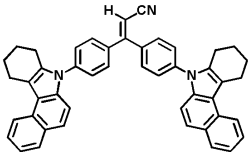
5'-7



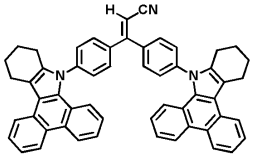
5'-8



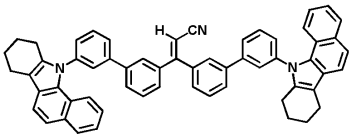
5'-9



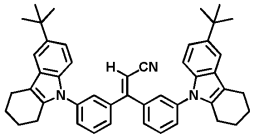
5'-10

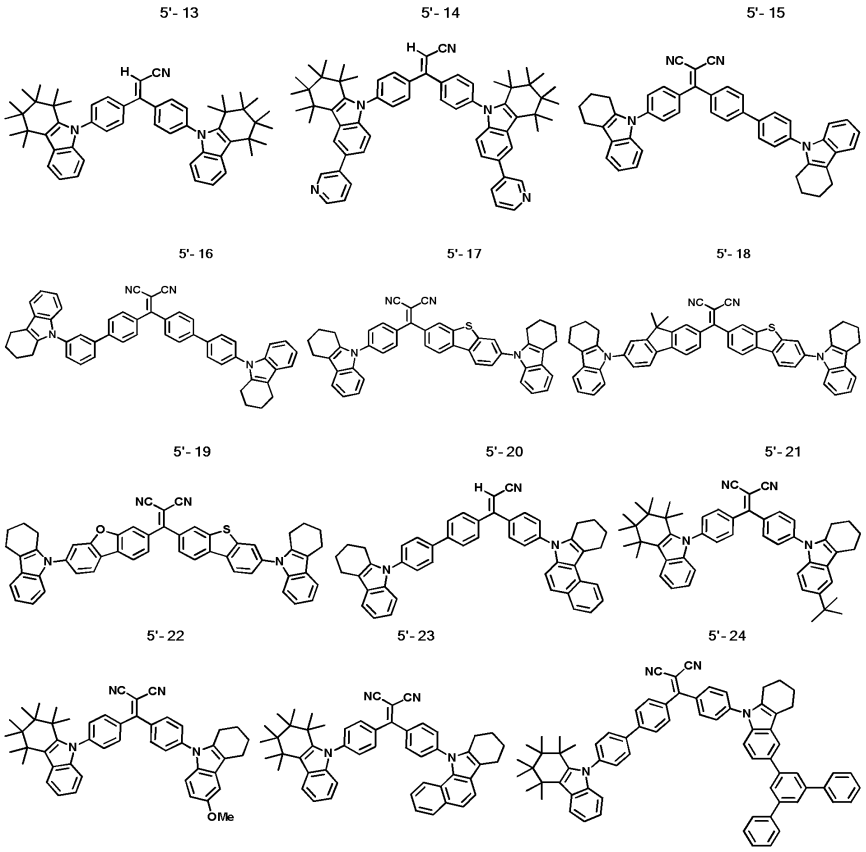


5'-11



5'-12





청구항 8

제 1전극;

제 2전극; 및

상기 제 1전극과 제 2전극 사이에 발광층을 포함하는 적어도 1 층의 유기물층을 갖는 유기전기소자에 있어서,

상기 발광층은 제 1항 내지 제 7항 중 어느 한 항에 기재된 지연형광 화합물을 함유하는 것을 특징으로 하는 유기전기소자.

청구항 9

제 8항에 있어서,

상기 발광층에 제 1항 내지 제 7항 중 어느 한 항의 화합물의 동종 또는 2 이상의 이종의 화합물이 혼합되어 사용되는 것을 특징으로 하는 유기전기소자.

청구항 10

제 8항에 있어서,

상기 제 1전극과 제 2전극의 일면 중 상기 유기물층과 반대되는 적어도 일면에 형성되는 광효율 개선층을 더 포함하는 유기전기소자.

청구항 11

제 8항에 있어서,

상기 유기물층은 스핀코팅 공정, 노즐 프린팅 공정, 잉크젯 프린팅 공정, 슬롯코팅 공정, 딥코팅 공정 또는 롤 투롤 공정에 의해 형성되는 것을 특징으로 하는 유기전기소자.

청구항 12

제 8항의 유기전기소자를 포함하는 디스플레이장치; 및

상기 디스플레이장치를 구동하는 제어부;를 포함하는 전자장치.

청구항 13

제 12항에 있어서,

상기 유기전기소자는 유기전기발광소자, 유기태양전지, 유기감광체, 유기트랜지스터 및 단색 또는 백색 조명용 소자 중 하나인 것을 특징으로 하는 전자장치.

발명의 설명

기 술 분 야

[0001] 본 발명은 신규 지연형광 재료와 그 지연형광 재료를 이용한 유기전기발광소자 및 그 전자 장치에 관한 것이다.

배 경 기 술

[0002] 유기전기소자(유기 EL소자)의 발광 효율을 높이는 연구가 최근까지 활발히 진행되고 있으며, 이는 유기전기발광소자 개발에 있어 큰 이슈화가 되어지고 있다.

[0003] 특히 최근에는 형광과 인광물질에 이어 3세대 유기전기소자용 물질로 평가 받고 있는 지연형광 물질을 이용한 유기전기발광소자가 관심을 끌고 있다.

[0004] 이 물질은 일중항 여기자를 삼중항으로 바꾸어 빛으로 전환하는 인광물질과 달리 삼중항 여기자를 일중항으로 바꾸어 빛으로 전환하는 물질이며, 이 과정 때문에 지연형광특색을 보인다. 이 지연형광물질도 이론적으로 일중항과 삼중항 여기자를 모두 빛으로 바꿀 수 있기 때문에 100% 내부양자효율이 가능하여 청색 인광 물질이 가지고 있는 수명과 효율의 한계를 극복 할 수 있는 물질로 기대되고 있다.

[0005] 지금까지 Cu, Pt, In, Pd, Sn, Zn 등의 금속을 포함한 지연 형광 화합물을 이용한 유기전기발광소자는 하기 특허문헌 1 내지 특허문헌 4에 보고되어져 왔으며, 또한 acceptor화합물과 donor 화합물을 조합한 Exciplex를 이용한 지연형광 재료에 대해서는 연구 보고가 최근 들어 증가되는 추세이다.

[0006] Exciplex를 이용한 지연 형광 재료로는 주로 헤테로고리를 포함하는 5환 고리 화합물 유도체, 안트라센 유도체, 비스 카바졸 유도체, 플루오렌 유도체 등이 특허문헌 5 내지 특허문헌 8에 보고되어졌다.

[0007] [특허문헌 1] JP2011-213643 (공개)

[0008] [특허문헌 2] JP2013-095688 (공개)

[0009] [특허문헌 3] JP2013-112608 (공개)

[0010] [특허문헌 4] JP2013-120770 (공개)

[0011] [특허문헌 5] JP2014-009352 (공개)

[0012] [특허문헌 6] JP5565743 (등록)

[0013] [특허문헌 7] JP2013-265214 (공개)

[0014] [특허문헌 8] JP2014-141571 (공개)

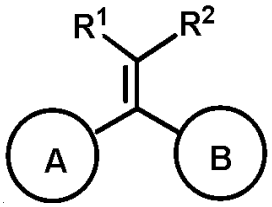
발명의 내용

해결하려는 과제

[0015] Exciplex를 이용한 새로운 지연형광 재료를 개발하고, 이를 유기전기발광소자에 적용함으로써 발광효율을 개선하는 것을 과제로서 검토를 진행하였다.

과제의 해결 수단

[0016] 일측면에서, 본 발명은 하기 화학식으로 표시되는 화합물을 제공한다.

[0017] 

[0018] (A환 및 B환은 카르보사이클릭 또는 헤테로사이클릭 방향족 고리를 포함하고, 서로 같거나 상이함)

[0019] 다른 측면에서, 본 발명은 상기 화학식으로 표시되는 화합물을 이용한 유기전기소자 및 그 전자장치를 제공한다.

발명의 효과

[0020] 본 발명에 따른 화합물을 이용함으로써 소자의 높은 발광효율, 낮은 구동전압을 달성할 수 있고, 소자의 수명을 크게 향상시킬 수 있다.

도면의 간단한 설명

[0021] 도 1은 본 발명에 따른 유기전기발광소자의 예시도이다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

[0022] 이하, 본 발명의 실시예를 첨부된 도면을 참조하여 상세하게 설명한다.

[0023] 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.

[0024] 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.

[0025] 본 명세서 및 첨부된 청구의 범위에서 사용된 바와 같이, 달리 언급하지 않는 한, 하기 용어의 의미는 하기와 같다.

[0026] 본 명세서에서 사용된 용어 "할로" 또는 "할로겐"은 다른 설명이 없는 한 불소(F), 브롬(Br), 염소(Cl) 또는 요오드(I)이다.

[0027] 본 발명에 사용된 용어 "알킬" 또는 "알킬기"는 다른 설명이 없는 한 1 내지 60의 탄소수의 단일결합을 가지며, 직쇄 알킬기, 분지쇄 알킬기, 사이클로알킬(지환족)기, 알킬-치환된 사이클로알킬기, 시클로알킬-치환된 알킬기를 비롯한 포화 지방족 작용기의 라디칼을 의미한다.

[0028] 본 발명에 사용된 용어 "할로알킬기" 또는 "할로겐알킬기"는 다른 설명이 없는 한 할로겐으로 치환된 알킬기를 의미한다.

[0029] 본 발명에 사용된 용어 "헤테로알킬기"는 알킬기를 구성하는 탄소 원자 중 하나 이상이 헤테로원자로 대체된 것을 의미한다.

[0030] 본 발명에 사용된 용어 "알켄일기" 또는 "알킨일기"는 다른 설명이 없는 한 각각 2 내지 60의 탄소수의 이중결합 또는 삼중결합을 가지며, 직쇄형 또는 측쇄형 사슬기를 포함하며, 여기에 제한되는 것은 아니다.

[0031] 본 발명에 사용된 용어 "시클로알킬"은 다른 설명이 없는 한 3 내지 60의 탄소수를 갖는 고리를 형성하는 알킬을 의미하며, 여기에 제한되는 것은 아니다.

[0032] 본 발명에 사용된 용어 "알콕실기", "알콕시기", 또는 "알킬옥시기"는 산소 라디칼이 부착된 알킬기를 의미하며, 다른 설명이 없는 한 1 내지 60의 탄소수를 가지며, 여기에 제한되는 것은 아니다.

[0033] 본 발명에 사용된 용어 "알켄옥실기", "알켄옥시기", "알켄일옥실기", 또는 "알켄일옥시기"는 산소 라디칼이 부착된 알켄일기를 의미하며, 다른 설명이 없는 한 2 내지 60의 탄소수를 가지며, 여기에 제한되는 것은 아니다.

[0034] 본 발명에 사용된 용어 "아릴옥실기" 또는 "아릴옥시기"는 산소 라디칼이 부착된 아릴기를 의미하며, 다른 설명이 없는 한 6 내지 60의 탄소수를 가지며, 여기에 제한되는 것은 아니다.

[0035] 본 발명에 사용된 용어 "아릴기" 및 "아릴렌기"는 다른 설명이 없는 한 각각 6 내지 60의 탄소수를 가지며, 이에 제한되는 것은 아니다. 본 발명에서 아릴기 또는 아릴렌기는 단일 고리 또는 다중 고리의 방향족을 의미하며, 이웃한 치환기가 결합 또는 반응에 참여하여 형성된 방향족 고리를 포함한다. 예컨대, 아릴기는 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 안트라센일기, 플루오렌기, 스파이로플루오렌기, 스파이로바이플루오렌기일 수 있다.

[0036] 접두사 "아릴" 또는 "아르"는 아릴기로 치환된 라디칼을 의미한다. 예를 들어 아릴알킬기는 아릴기로 치환된 알킬기이며, 아릴알켄일기는 아릴기로 치환된 알켄일기이며, 아릴기로 치환된 라디칼은 본 명세서에서 설명한 탄소수를 가진다.

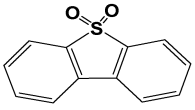
[0037] 또한 접두사가 연속으로 명명되는 경우 먼저 기재된 순서대로 치환기가 나열되는 것을 의미한다. 예를 들어, 아릴알콕시기의 경우 아릴기로 치환된 알콕시기를 의미하며, 알콕실카르보닐기의 경우 알콕실기로 치환된 카르보닐기를 의미하며, 또한 아릴카르보닐알켄일기의 경우 아릴카르보닐기로 치환된 알켄일기를 의미하며 여기서 아릴카르보닐기는 아릴기로 치환된 카르보닐기이다.

[0038] 본 명세서에서 사용된 용어 "헤테로알킬"은 다른 설명이 없는 한 하나 이상의 헤테로원자를 포함하는 알킬을 의미한다. 본 발명에 사용된 용어 "헤테로아릴기" 또는 "헤테로아릴렌기"는 다른 설명이 없는 한 각각 하나 이상의 헤테로원자를 포함하는 탄소수 2 내지 60의 아릴기 또는 아릴렌기를 의미하며, 여기에 제한되는 것은 아니며, 단일 고리 및 다중 고리 중 적어도 하나를 포함하며, 이웃한 작용기기가 결합하여 형성될 수도 있다.

[0039] 본 발명에 사용된 용어 "헤테로고리기"는 다른 설명이 없는 한 하나 이상의 헤테로원자를 포함하고, 2 내지 60의 탄소수를 가지며, 단일 고리 및 다중 고리 중 적어도 하나를 포함하며, 헤테로지방족 고리 및 헤테로방향족 고리를 포함한다. 이웃한 작용기가 결합하여 형성될 수도 있다.

[0040] 본 명세서에서 사용된 용어 "헤테로원자"는 다른 설명이 없는 한 N, O, S, P 또는 Si를 나타낸다.

[0041] 또한 "헤테로고리기"는, 고리를 형성하는 탄소 대신 SO_2를 포함하는 고리도 포함할 수 있다. 예컨대, "헤테로고리기"는 다음 화합물을 포함한다.

[0042] 

[0043] 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.

[0044] 다른 설명이 없는 한, 본 발명에 사용된 용어 "고리"는 탄소수 3 내지 60의 지방족고리 또는 탄소수 6 내지 60의 방향족고리 또는 탄소수 2 내지 60의 헤테로고리 또는 이들의 조합으로 이루어진 융합 고리를 말하며, 포화 또는 불포화 고리를 포함한다.

[0045] 전술한 헤테로화합물 이외의 그 밖의 다른 헤테로화합물 또는 헤테로라디칼은 하나 이상의 헤테로원자를 포함하며, 여기에 제한되는 것은 아니다.

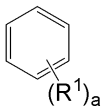
[0046] 다른 설명이 없는 한, 본 발명에 사용된 용어 "카르보닐"이란 -COR'로 표시되는 것이며, 여기서 R'은 수소, 탄소수 1 내지 20 의 알킬기, 탄소수 6 내지 30 의 아릴기, 탄소수 3 내지 30의 사이클로알킬기, 탄소수 2 내지 20의 알켄일기, 탄소수 2 내지 20의 알킨일기, 또는 이들의 조합인 것이다.

[0047] 다른 설명이 없는 한, 본 발명에 사용된 용어 "에테르"란 -R-O-R'로 표시되는 것이며, 여기서 R 또는 R'은 각각 서로 독립적으로 수소, 탄소수 1 내지 20의 알킬기, 탄소수 6 내지 30의 아릴기, 탄소수 3 내지 30의 사이클로

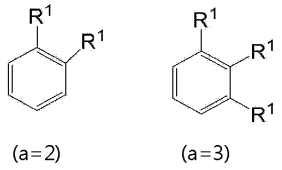
알킬기, 탄소수 2 내지 20의 알켄일기, 탄소수 2 내지 20의 알킨일기, 또는 이들의 조합인 것이다.

[0048] 또한 명시적인 설명이 없는 한, 본 발명에서 사용된 용어 "치환 또는 비치환된"에서 "치환"은 중수소, 할로겐, 아미노기, 니트릴기, 니트로기, C_1~C_{20}의 알킬기, C_1~C_{20}의 알콕실기, C_1~C_{20}의 알킬아민기, C_1~C_{20}의 알킬티오펜기, C_6~C_{20}의 아릴티오펜기, C_2~C_{20}의 알켄일기, C_2~C_{20}의 알킨일기, C_3~C_{20}의 시클로알킬기, C_6~C_{20}의 아릴기, 중수소로 치환된 C_6~C_{20}의 아릴기, C_8~C_{20}의 아릴알켄일기, 실란기, 붕소기, 게르마늄기, 및 C_2~C_{20}의 헤테로고리기로 이루어진 군으로부터 선택되는 1개 이상의 치환기로 치환됨을 의미하며, 이들 치환기에 제한되는 것은 아니다.

[0049] 또한 명시적인 설명이 없는 한, 본 발명에서 사용되는 화학식은 하기 화학식의 지수 정의에 의한 치환기 정의와 동일하게 적용된다.

[0050] 

[0051] 여기서, a가 0의 정수인 경우 치환기 R^1은 부존재하며, a가 1의 정수인 경우 하나의 치환기 R^1은 벤젠 고리를 형성하는 탄소 중 어느 하나의 탄소에 결합하며, a가 2 또는 3의 정수인 경우 각각 다음과 같이 결합하며 이때 R^1은 서로 동일하거나 다를 수 있으며, a가 4 내지 6의 정수인 경우 이와 유사한 방식으로 벤젠 고리의 탄소에 결합하며, 한편 벤젠 고리를 형성하는 탄소에 결합된 수소의 표시는 생략한다.

[0052] 

[0053] 도 1은 본 발명에 일 실시예에 따른 유기전기소자에 대한 예시도이다.

[0054] 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 본 발명에 따른 화합물을 포함하는 유기물층을 구비한다. 이때, 제 1전극(120)은 애노드(양극)이고, 제 2전극(180)은 캐소드(음극)일 수 있으며, 인버트형의 경우에는 제 1전극이 캐소드이고 제 2전극이 애노드일 수 있다.

[0055] 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), 버퍼층(141) 등을 더 포함할 수도 있고, 전자수송층(160) 등이 정공저지층의 역할을 할 수도 있을 것이다.

[0056] 또한, 미도시하였지만, 본 발명에 따른 유기전기소자는 제 1전극과 제 2전극 중 적어도 일면 중 상기 유기물층과 반대되는 일면에 형성된 보호층 또는 광효율 개선층(Capping layer)을 더 포함할 수 있다.

[0057] 상기 유기물층에 적용되는 본 발명에 따른 화합물은 정공주입층(130), 정공수송층(140), 전자수송층(160), 전자주입층(170), 발광층(150)의 호스트 또는 도펀트 또는 광효율 개선층의 재료로 사용될 수 있을 것이다. 바람직하게는, 본 발명의 화합물은 발광층(150)으로 사용될 수 있을 것이다.

[0058] 한편, 동일한 코어일지라도 어느 위치에 어느 치환기를 결합시키냐에 따라 밴드갭(band gap), 전기적 특성, 계면 특성 등이 달라질 수 있으므로, 코어의 선택 및 이에 결합된 서브(sub)-치환체의 조합도 아주 중요하며, 특히 각 유기물층 간의 에너지 준위 및 T1 값, 물질의 고유특성(이동도, 계면특성 등) 등이 최적의 조합을 이루었을 때 장수명과 높은 효율을 동시에 달성할 수 있다.

[0059] 따라서, 본 발명에서는 화학식 1로 표시되는 화합물을 사용하여 발광층을 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.

[0060] 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.

[0061] 또한, 유기물층은 다양한 고분자 소재를 사용하여 증착법이 아닌 용액 공정 또는 솔벤트 프로세스(solvent process), 예컨대 스핀코팅 공정, 노즐 프린팅 공정, 잉크젯 프린팅 공정, 슬롯코팅 공정, 딥코팅 공정, 롤투롤 공정, 닥터 블레이딩 공정, 스크린 프린팅 공정, 또는 열 전사법 등의 방법에 의하여 더 적은 수의 층으로 제조할 수 있다. 본 발명에 따른 유기물층은 다양한 방법으로 형성될 수 있으므로, 그 형성방법에 의해 본 발명의 권리범위가 제한되는 것은 아니다.

[0062] 본 발명에 따른 유기전기소자는 사용되는 재료에 따라 전면 발광형, 후면 발광형 또는 양면 발광형일 수 있다.

[0063] WOLED(White Organic Light Emitting Device)는 고해상도 실현이 용이하고 공정성이 우수한 한편, 기존의 LCD의 칼라필터 기술을 이용하여 제조될 수 있는 이점이 있다. 주로 백라이트 장치로 사용되는 백색 유기발광소자에 대한 다양한 구조들이 제안되고 특허화되고 있다. 대표적으로, R(Red), G(Green), B(Blue) 발광부들을 상호 평면적으로 병렬배치(side-by-side) 방식, R, G, B 발광층이 상하로 적층되는 적층(stacking) 방식이 있고, 청색(B) 유기발광층에 의한 전계발광과 이로부터의 광을 이용하여 무기형광체의 자발광(photo-luminescence)을 이용하는 색변환물질(color conversion material, CCM) 방식 등이 있는데, 본 발명은 이러한 WOLED에도 적용될 수 있을 것이다.

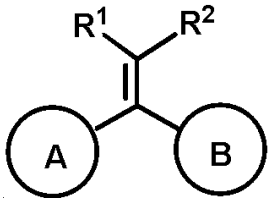
[0064] 또한, 본 발명에 따른 유기전기소자는 유기전기발광소자(OLED), 유기태양전지, 유기감광체(OPC), 유기트랜지스터(유기 TFT), 단색 또는 백색 조명용 소자 중 하나일 수 있다.

[0065] 본 발명의 다른 실시예는 상술한 본 발명의 유기전기소자를 포함하는 디스플레이장치와, 이 디스플레이장치를 제어하는 제어부를 포함하는 전자장치를 포함할 수 있다. 이때, 전자장치는 현재 또는 장래의 유무선 통신단말일 수 있으며, 휴대폰 등의 이동 통신 단말기, PDA, 전자사전, PMP, 리모콘, 네비게이션, 게임기, 각종 TV, 각종 컴퓨터 등 모든 전자장치를 포함한다.

[0066] 이하, 본 발명의 일 측면에 따른 화합물에 대하여 설명한다.

[0067] 본 발명의 일 측면에 따른 화합물은 하기 화학식 1로 표시된다. 본 화합물은 지연형광 화합물일 수 있다.

[0068] <화학식 1>

[0069] 

[0070] 상기 화학식 1에서,

[0071] R^1 및 R^2는 서로 독립적으로 수소; 중수소; C_1-C_{60}의 알킬기; C_6-C_{60}의 아릴기; 시아노기;로 이루어진 군에서 선택될 수 있고, 상기 R^1과 R^2 중 적어도 하나는 시아노기이다.

[0072] A환 및 B환은 카르보사이클릭 또는 헤테로사이클릭 방향족 고리를 포함하고, 서로 같거나 상이할 수 있다.

[0073] 상기 아릴기, 알킬기, 시아노기, 카르보사이클릭 방향족 고리, 헤테로사이클릭 방향족 고리 각각은 중수소, 할로겐, 실란기, 실록산기, 붕소기, 게르마늄기, 시아노기, 니트로기, -L'-N(R_a)(R_b)(여기서 상기 L'은 단일결합; C_6~C_{60}의 아릴렌기; 플루오렌일렌기; C_3~C_{60}의 지방족고리와 C_6~C_{60}의 방향족고리의 융합고리기; 및 C_2~C_{60}의 헤테로고리기;로 이루어진 군에서 선택되고, 상기 R_a 및 R_b은 서로 독립적으로 C_6~C_{60}의 아릴기; 플루오렌일기; C_3~C_{60}의 지방족고리와 C_6~C_{60}의 방향족고리의 융합고리기; 및 O, N, S, Si 및 P 중 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C_2~C_{60}의 헤테로고리기;로 이루어진 군에서 선택됨), C_1~C_{20}의 알킬싸이오기, C_1~C_{20}의 알콕실기, C_1~C_{20}의 알킬기, C_2~C_{20}의 알켄일기, C_2~C_{20}의 알킨일기, C_6~C_{20}의 아릴기, 중수소로 치환된 C_6~C_{20}의 아릴기, 플루오렌일기,

C_2~C_{20}의 헤테로고리기, C_3~C_{20}의 시클로알킬기, C_7~C_{20}의 아릴알킬기, C_8~C_{20}의 아릴알켄일기, 카르보닐기, 에테르기, C_2~C_{20}의 알콕실카르보닐기, C_6~C_{30}의 아릴옥시기, $-O-Si(R^x)_3$, 및 $R^xO-Si(R^x)_2-$ (여기서 상기 R^x은 수소, C_6~C_{20}의 아릴기, C_1~C_{20}의 알킬기, C_2~C_{20}의 알켄일기, C_8~C_{20}의 아릴알켄일기, C_7~C_{20}의 아릴알콕실기, 또는 C_2~C_{20}의 알콕실카르보닐기임)로 이루어진 군에서 선택된 하나 이상의 치환기로 치환될 수 있다.

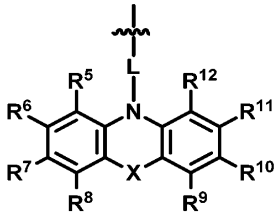
[0074] 여기서, 상기 아릴기인 경우 탄소수는 6~60, 바람직하게는 탄소수 6~40, 보다 바람직하게는 탄소수 6~30의 아릴기일 수 있으며,

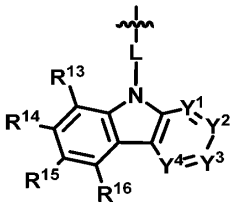
[0075] 상기 헤테로고리기인 경우 탄소수는 2~60, 바람직하게는 탄소수 2~30, 보다 바람직하게는 탄소수 2~20의 헤테로고리일 수 있으며,

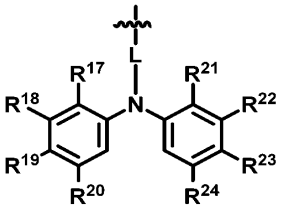
[0076] 상기 알킬기인 경우 탄소수는 1~50, 바람직하게는 탄소수 1~30, 보다 바람직하게는 탄소수 1~20, 특히 바람직하게는 탄소수 1~10의 알킬기일 수 있다.

[0077] 구체적으로, 상기 화학식 1의 A환 및 B환은 하기 화학식 중 하나로 표시될 수 있다.

[0078] <화학식 2> <화학식 3> <화학식 4>

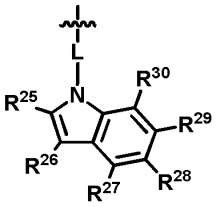


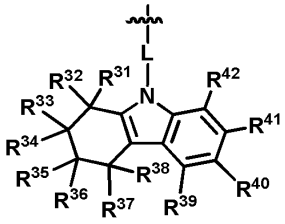




[0079]

[0080] <화학식 5> <화학식 6>





[0081]

[0082] 상기 화학식 2 내지 화학식 6에서,

[0083] X는 O, S, CR^3R^4 또는 단일결합이다.

[0084] 여기서, 단일결합이라 함은 X가 부존재하여 직접 결합하는 것을 의미하며, 본 발명의 화학식 1에 포함될 수 있는 화학식 1'-1 내지 1'-35, 1'-39 내지 1'-41, 2'-25 등에는 X가 단일결합인 화합물이 기재되어 있다.

[0085] Y^1 내지 Y^4는 서로 독립적으로 CR' 또는 N이며, 적어도 하나는 N이고, 복수의 R'이 존재할 경우 복수의 R'는 서로 같거나 상이할 수 있다.

[0086] 상기 R^3 및 R^4는 서로 독립적으로 수소; 중수소; C_1-C_{60}의 알킬기; C_6-C_{60}의 아릴기;로 이루어진 군에서 선택될 수 있다.

[0087] 또한, R^3과 R^4는 서로 결합하여 적어도 하나의 고리를 형성할 수 있다. 이때, 고리를 형성하지 않는 R^3, R^4는 상기에서 정의된 것과 동일하게 정의될 수 있다.

[0088] R^5 내지 R^{42} 및 R'은 서로 독립적으로 수소; 중수소; 할로겐; 나이트로; C_1-C_{60}의 알킬기(직쇄, 분지쇄); C_1-C_{60}의 알콕시기; C_6-C_{60}의 아릴옥시; 아미노기; 실릴기; C_2-C_{60}의 알케닐기; C_6-C_{60}의 아릴기; C_2-C_{60}의 헤테로아릴기; 카보닐기; 에스테르기; 니트릴기; 술파닐기; 술피닐기; 술포닐기; 포스피노기; 플루오렌일기;로 이루어진 군에서 선택될 수 있다.

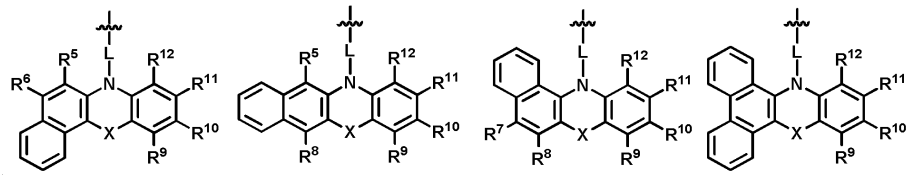
[0089] 또한, R^5 내지 R^{12} 중 임의의 인접한 2개의 기끼리, R^{13} 내지 R^{16} 중 임의의 인접한 2개의 기끼리, R^{17} 내지 R^{24} 중 임의의 인접한 2개의 기끼리, R^{27} 내지 R^{30} 중 임의의 인접한 2개의 기끼리, R^{39} 내지 R^{42} 중 임의의 인접한 2개의 기끼리 및 복수의 R' 중 임의의 인접한 2개의 기끼리는 각각 서로 결합하여 적어도 하나의 고리를 형성할 수 있다. 이때, 고리를 형성하지 않는 R^5 내지 R^{42} 및 R'은 상기에서 정의된 것과 동일하게 정의될 수 있다.

[0090] L은 C_6-C_{60}의 아릴렌기; C_2-C_{60}의 헤테로고리기; 플루오렌일렌기;로 이루어진 군에서 선택될 수 있다.

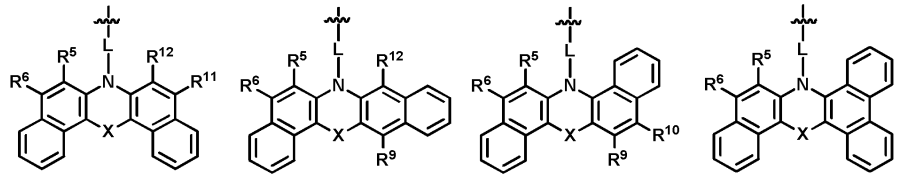
[0091] 예컨대, 상기 R^1 내지 R^{42}, R' 및 L이 아릴기 또는 아릴렌기일 경우 R^1 내지 R^{42}, R' 및 L은 서로 독립적으로 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 페난트릴기 또는 페닐렌기, 비페닐렌기, 터페닐렌기, 나프틸렌기 또는 페난트릴렌기 등일 수 있다.

[0092] 구체적으로, 상기 화학식 2의 R^5 내지 R^{12} 중 인접한 2개의 기끼리 서로 결합하여 고리를 형성할 경우 상기 화학식 2는 하기 화학식 중 하나로 표시될 수 있으며, 이에 한정되는 것은 아니다.

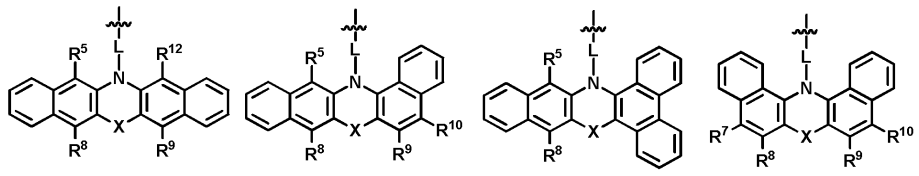
[0093] <화학식 2-1> <화학식 2-2> <화학식 2-3> <화학식 2-4>

[0094] 

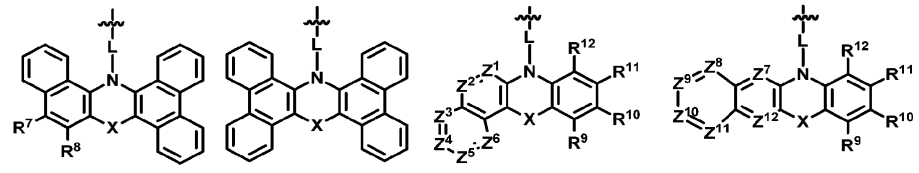
[0095] <화학식 2-5> <화학식 2-6> <화학식 2-7> <화학식 2-8>

[0096] 

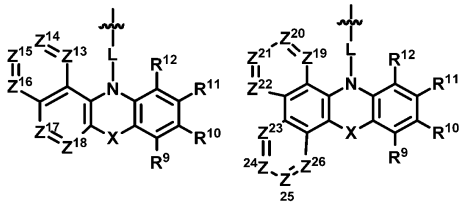
[0097] <화학식 2-9> <화학식 2-10> <화학식 2-11> <화학식 2-12>

[0098] 

[0099] <화학식 2-13> <화학식 2-14> <화학식 2-15> <화학식 2-16>

[0100] 

[0101] <화학식 2-17> <화학식 2-18>

[0102] 

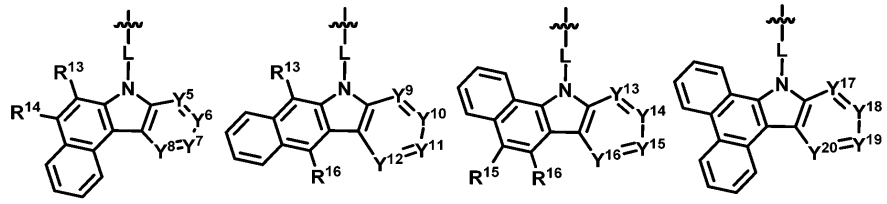
[0103] 상기 화학식 2-1 내지 화학식 2-18에서,

[0104] 상기 X, R^5 내지 R^{12} 및 L은 상기 화학식 2 내지 화학식 6에서 정의된 X, R^5 내지 R^{12} 및 L과 같다.

[0105] Z^1 내지 Z^{26}은 서로 독립적으로 CR' 또는 N이이고, R'는 상기 화학식 2 내지 화학식 6에서 정의된 R'과 같으며, 복수의 R'이 존재할 경우 복수의 R'는 서로 같거나 상이하다.

[0106] 구체적으로, 상기 화학식 3의 R^{13} 내지 R^{16} 중 인접한 2개의 기끼리 서로 결합하여 고리를 형성할 경우 상기 화학식 3은 하기 화학식 중 하나로 표시될 수 있으며, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0107] <화학식 3-1> <화학식 3-2> <화학식 3-3> <화학식 3-4>

[0108] 

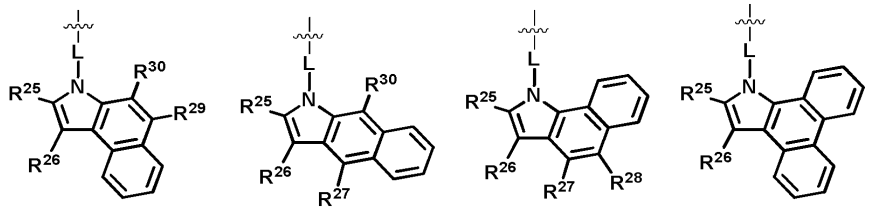
[0109] 상기 화학식 3-1 내지 화학식 3-4에서,

[0110] 상기 R^{13} 내지 R^{16} 및 L은 상기 화학식 2 내지 화학식 6에서 정의된 R^{13} 내지 R^{16} 및 L과 같다.

[0111] 상기 Y^5 내지 Y^{20}은 상기 화학식 2 내지 화학식 6에서 정의된 Y^1 내지 Y^4와 같다.

[0112] 구체적으로, 상기 화학식 5의 R^{27} 내지 R^{30} 중 인접한 2개의 기끼리 서로 결합하여 고리를 형성할 경우 상기 화학식 5는 하기 화학식 중 하나로 표시될 수 있으며, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0113] <화학식 5-1> <화학식 5-2> <화학식 5-3> <화학식 5-4>

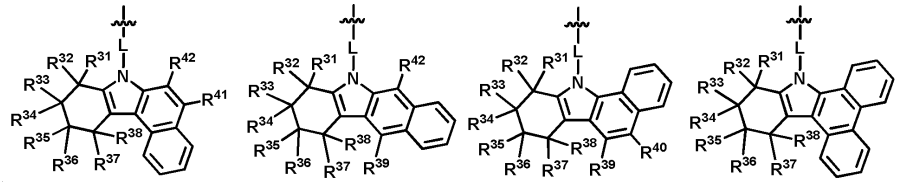
[0114] 

[0115] 상기 화학식 5-1 내지 화학식 5-4에서,

[0116] 상기 R^{25} 내지 R^{30} 및 L은 상기 화학식 2 내지 화학식 6에서 정의된 R^{25} 내지 R^{30} 및 L과 같다.

[0117] 구체적으로, 상기 화학식 6의 R^{39} 내지 R^{42} 중 인접한 2개의 기끼리 서로 결합하여 고리를 형성할 경우 상기 화학식 6은 하기 화학식 중 하나로 표시될 수 있으며, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0118] <화학식 6-1> <화학식 6-2> <화학식 6-3> <화학식 6-4>

[0119] 

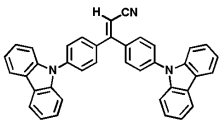
[0120] 상기 화학식 6-1 내지 화학식 6-4에서,

[0121] 상기 R^{31} 내지 R^{42} 및 L은 상기 화학식 2 내지 화학식 6에서 정의된 R^{31} 내지 R^{42} 및 L과 같다.

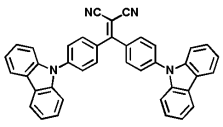
[0122] 보다 구체적으로, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 하기 화합물들 중 어느 하나일 수 있으며, 하기 화합물에

만 한정하는 것은 아니다.

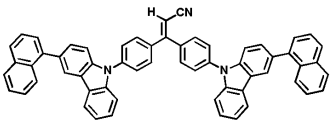
1'-1



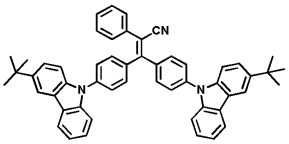
1'-2



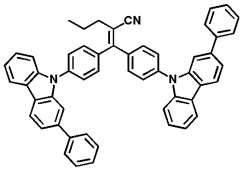
1'-3



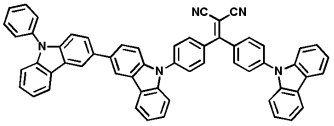
1'-4



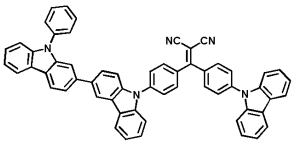
1'-5



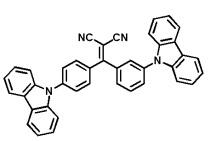
1'-6



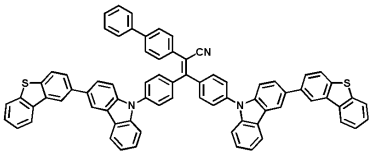
1'-7



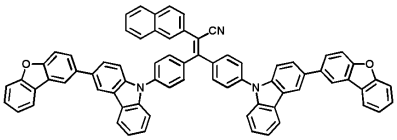
1'-8



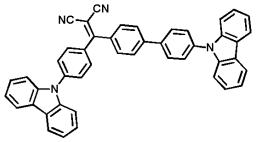
1'-9



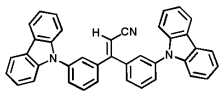
1'-10



1'-11

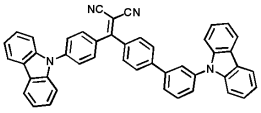


1'-12

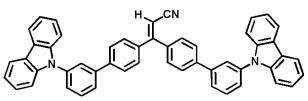


[0123]

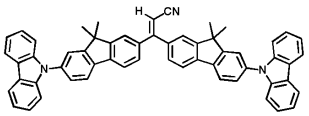
1'-13



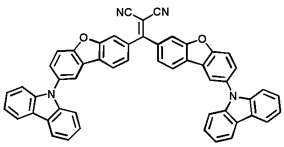
1'-14



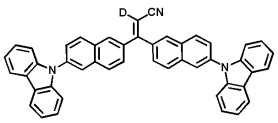
1'-15



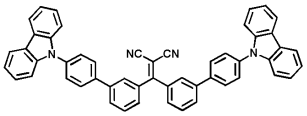
1'-16



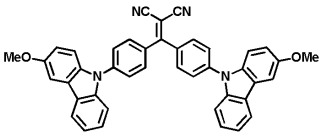
1'-17



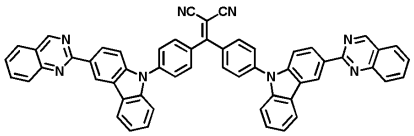
1'-18



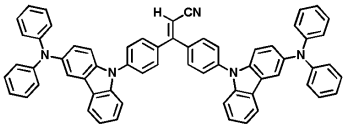
1'-19



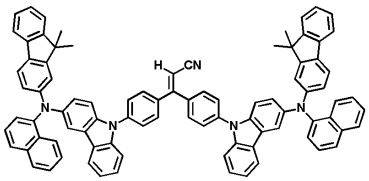
1'-20



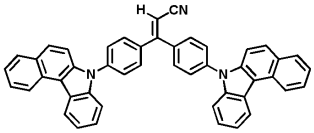
1'-21



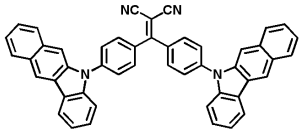
1'-22



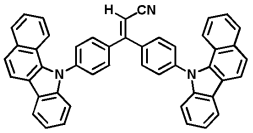
1'-23



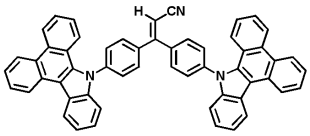
1'-24



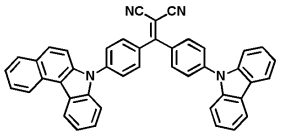
1'-25



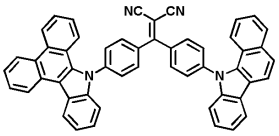
1'-26



1'-27

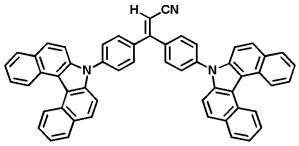


1'-28

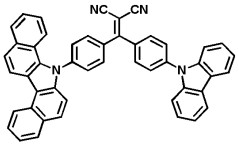


[0124]

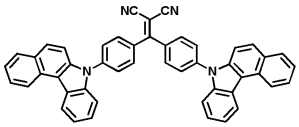
1'-29



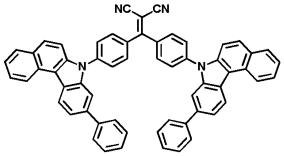
1'-30



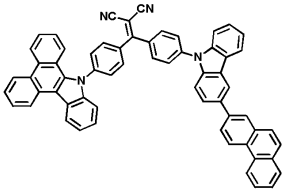
1'-31



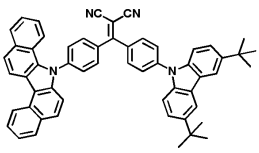
1'-32



1'-33

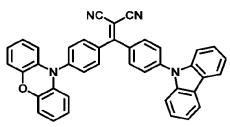


1'-34

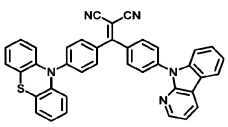


[0125]

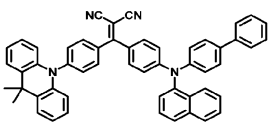
1'-35



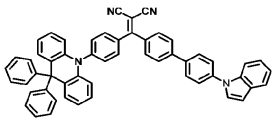
1'-36



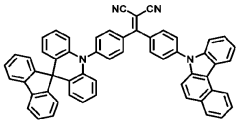
1'-37



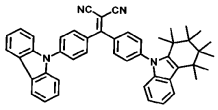
1'-38



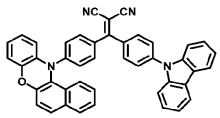
1'-39



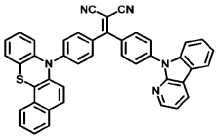
1'-40



1'-41

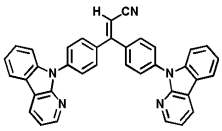


1'-42

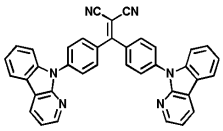


[0126]

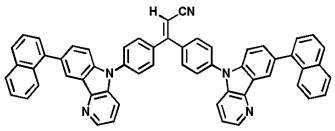
2'-1



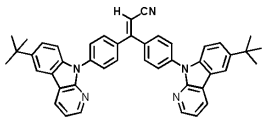
2'-2



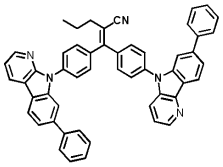
2'-3



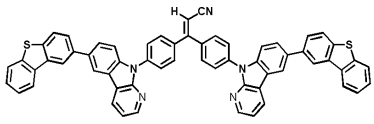
2'-4



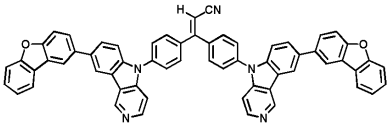
2'-5



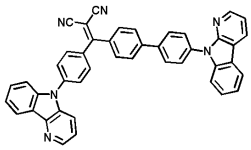
2'-6



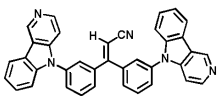
2'-7



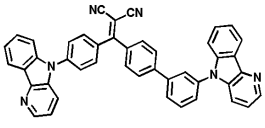
2'-8



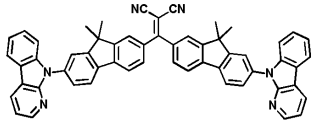
2'-9



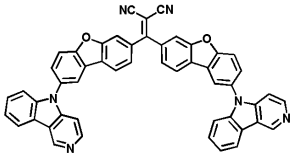
2'-10



2'-11



2'-12

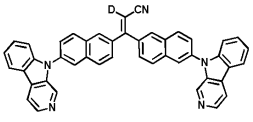


2'-13

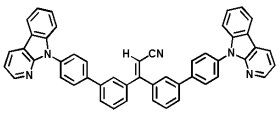
2'-14

2'-15

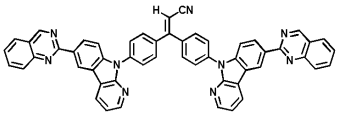
2'-16



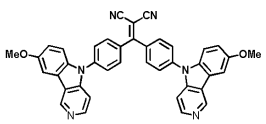
2'-17



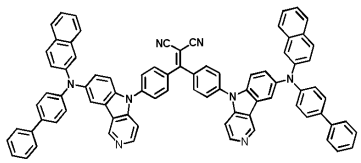
2'-18



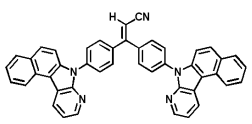
2'-19



2'-20

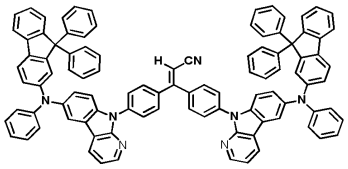


2'-21

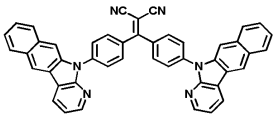


[0127]

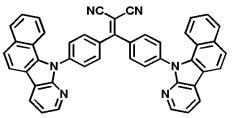
2'-19



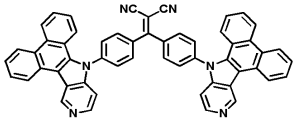
2'-20



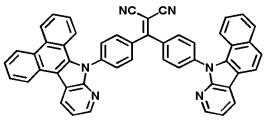
2'-21



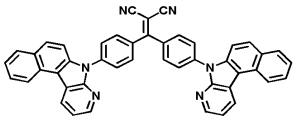
2'-22



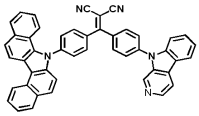
2'-23



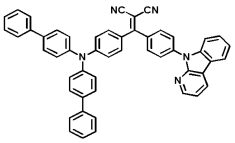
2'-24



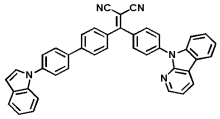
2'-25



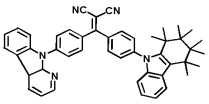
2'-26



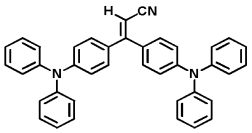
2'-27



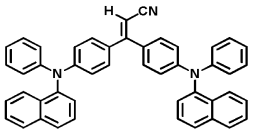
2'-28



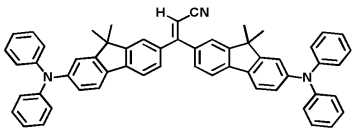
3'-1



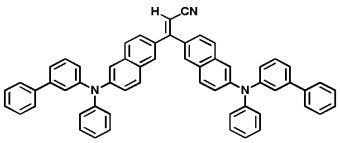
3'-2



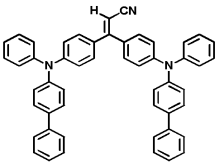
3'-3



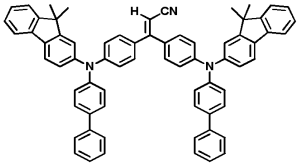
3'-4



3'-5

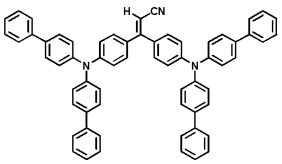


3'-6

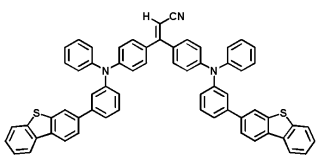


[0128]

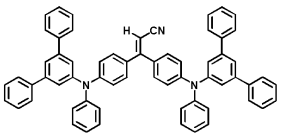
3'-7



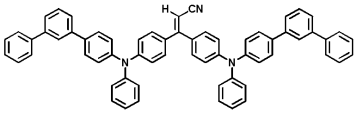
3'-8



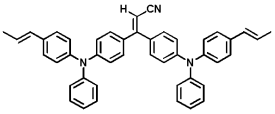
3'-9



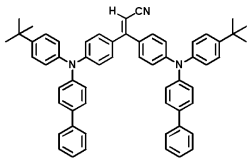
3'-10



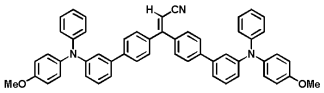
3'-11



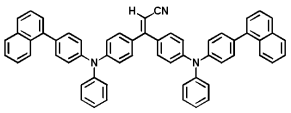
3'-12



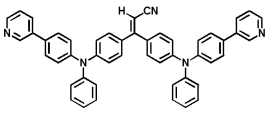
3'-13



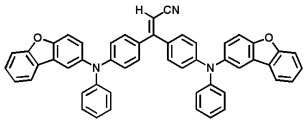
3'-14



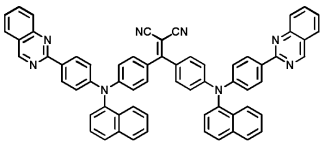
3'-15



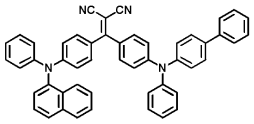
3'-16



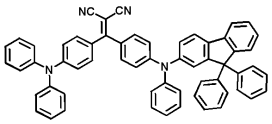
3'-17



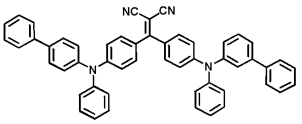
3'-18



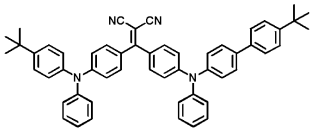
3'-19



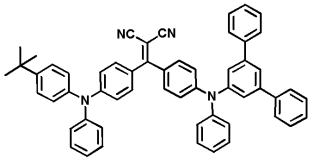
3'-20



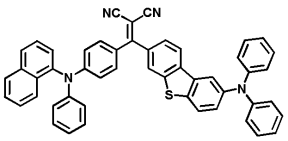
3'-21



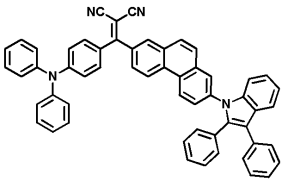
3'-22



3'-23



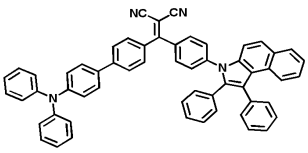
3'-24



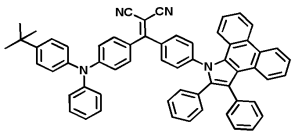
[0129]

[0130]

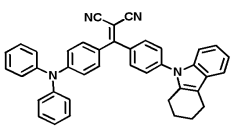
3'-25



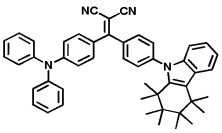
3'-26



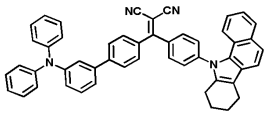
3'-27



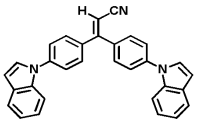
3'-28



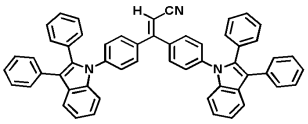
3'-29



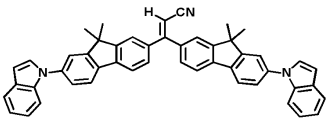
4'-1



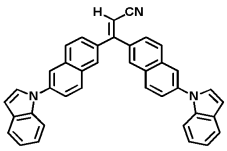
4'-2



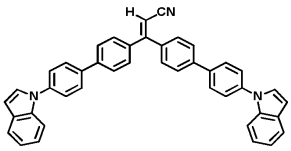
4'-3



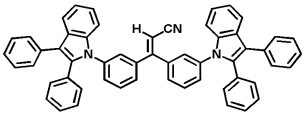
4'-4



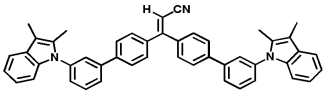
4'-5



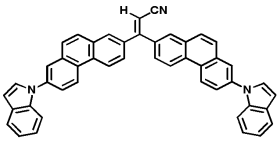
4'-6



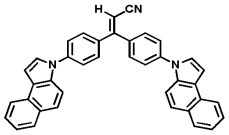
4'-7



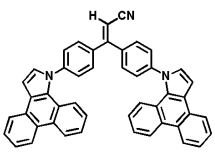
4'-8



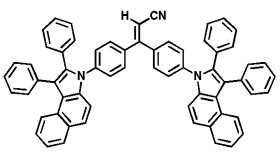
4'-9



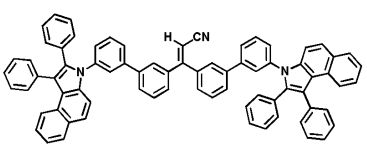
4'-10



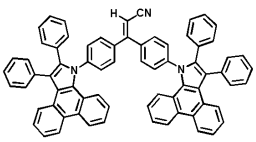
4'-11



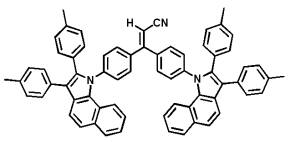
4'-12



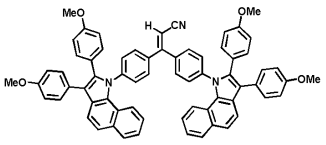
4'-13



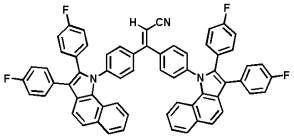
4'-14



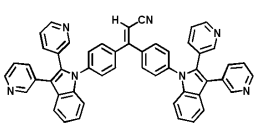
4'-15



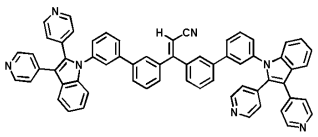
4'-16



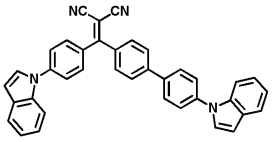
4'-17



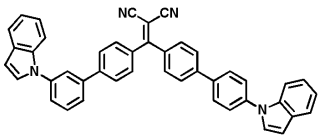
4'-18



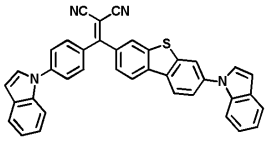
4'-19



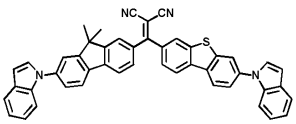
4'-20



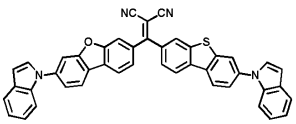
4'-21



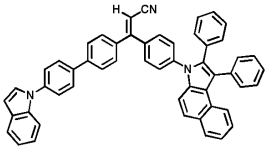
4'-22



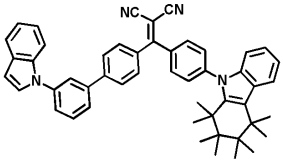
4'-23



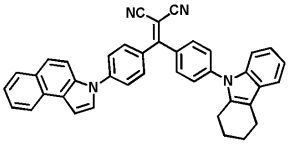
4'-24



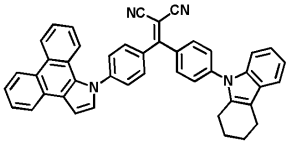
4'-25



4'-26

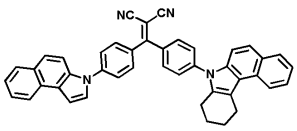


4'-27

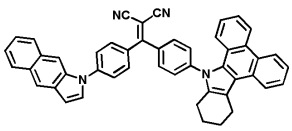


[0131]

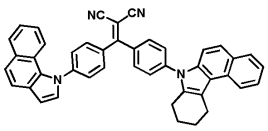
4'-28



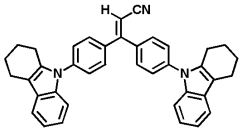
4'-29



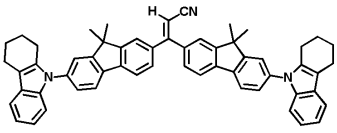
4'-30



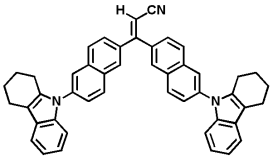
5'-1



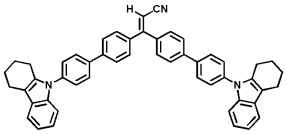
5'-2



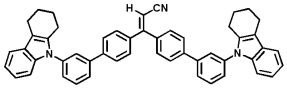
5'-3



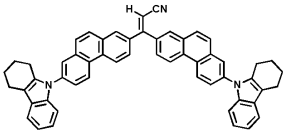
5'-4



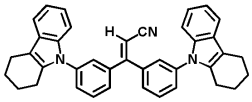
5'-5



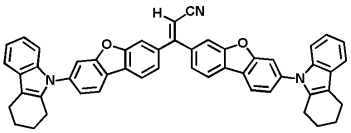
5'-6



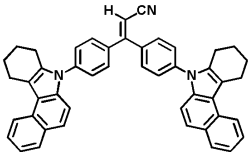
5'-7



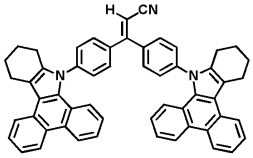
5'-8



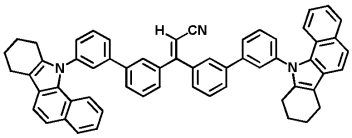
5'-9



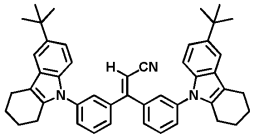
5'-10



5'-11

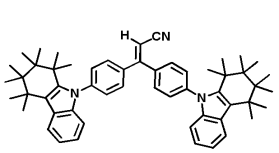
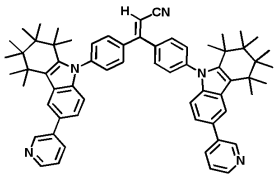
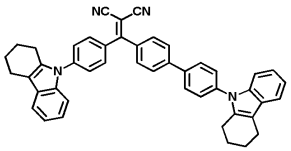


5'-12

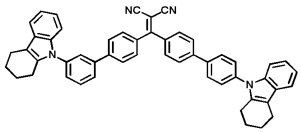
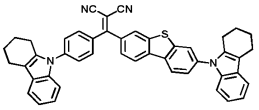
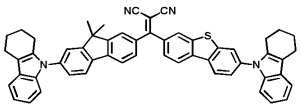


[0132]

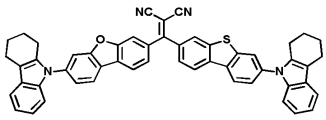
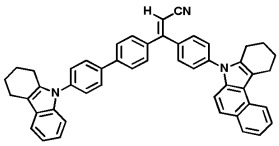
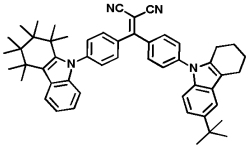
5'-13 5'-14 5'-15

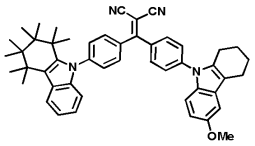
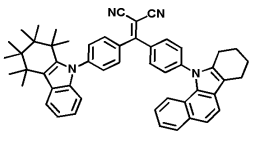
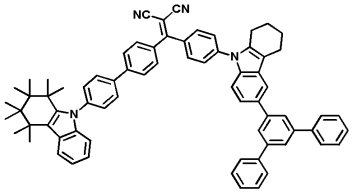
5'-16 5'-17 5'-18

5'-19 5'-20 5'-21

5'-22 5'-23 5'-24

[0133]

[0134] 다른 실시예로서, 본 발명은 상기 화학식 1로 표시되는 유기전기소자용 화합물을 제공한다.

[0135] 또 다른 실시예에서, 본 발명은 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 함유하는 유기전기소자를 제공한다.

[0136] 이때, 유기전기소자는 제 1전극; 제 2전극; 및 상기 제 1전극과 제2전극 사이에 위치하는 유기물층;을 포함할 수 있으며, 유기물층은 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함할 수 있으며, 화학식 1로 표시되는 화합물은 유기물층의 정공주입층, 정공수송층, 발광보조층, 발광층, 전자수송층 및 전자주입층 중 적어도 하나의 층에 함유될 수 있을 것이다. 특히 화학식 1로 표시되는 화합물은 발광층에 포함될 수 있다.

[0137] 즉, 화학식 1로 표시되는 화합물은 정공주입층, 정공수송층, 발광보조층, 발광층, 전자수송층 또는 전자주입층의 재료로 사용될 수 있다. 특히 화학식 1로 표시되는 화합물은 발광층의 재료로 사용될 수 있다. 구체적으로, 상기 유기물층에 상기 화학식 1로 표시되는 화합물 중 하나를 포함하는 유기전기소자를 제공하고, 보다 구체적으로, 상기 유기물층에 상기 개별 화학식(1'-1 내지 1'-42, 2'-1 내지 2'-28, 3'-1 내지 3'-29, 4'-1 내지 4'-30 및 5'-1 내지 5'-24)로 표시되는 화합물을 포함하는 유기전기소자를 제공한다.

[0138] 또 다른 실시예에서, 상기 유기물층의 상기 정공주입층, 상기 정공수송층, 상기 발광보조층, 상기 발광층, 상기 전자수송층 및 상기 전자주입층 중 적어도 하나의 층에, 상기 화합물이 단독으로 함유되거나, 상기 화합물이 서로 다른 2종 이상의 조합으로 함유되거나, 상기 화합물이 다른 화합물과 2종 이상의 조합으로 함유된 것을 특징으로 하는 유기전기소자를 제공한다. 다시 말해서, 각각의 층들에는 화학식 1에 해당하는 화합물이 단독으로 포함될 수 있고, 2종 이상의 화학식 1의 화합물들의 혼합물이 포함될 수 있으며, 청구항 1항 내지 7항의 화합물과, 본 발명에 해당하지 않는 화합물과의 혼합물이 포함될 수 있다. 여기서 본 발명에 해당하지 않는 화합물은 단일의 화합물일 수 있고, 2종 이상의 화합물들일 수도 있다. 이때 상기 화합물이 다른 화합물과 2종 이상의 조합으로 함유될 경우 다른 화합물은 각 유기물층의 이미 알려진 화합물일 수도 있고, 앞으로 개발될 화합물 등일 수 있다. 이때 상기 유기물층에 함유된 화합물은 동종의 화합물로만 이루어질 수도 있지만, 화학식 1로 표시되는 이종의 화합물이 2이상 혼합된 혼합물일 수도 있다.

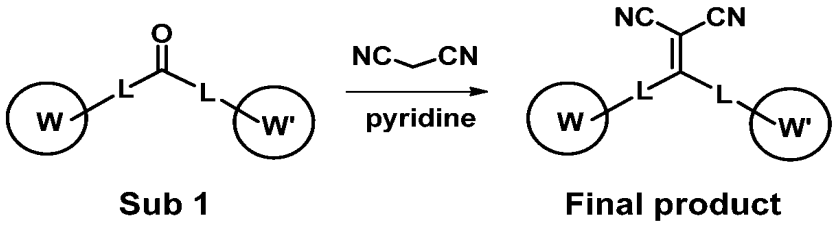
[0139] 본 발명의 또 다른 실시예에서, 본 발명은 상기 제 1전극의 일측면 중 상기 유기물층과 반대되는 일측 또는 상기 제 2전극의 일측면 중 상기 유기물층과 반대되는 일측 중 적어도 하나에 형성되는 광효율 개선층을 더 포함하는 유기전기소자를 제공한다.

[0140] 이하에서, 본 발명에 따른 화학식 1로 표시되는 화합물의 합성예 및 유기전기소자의 제조예에 관하여 실시예를 들어 구체적으로 설명하지만, 본 발명이 하기의 실시예로 한정되는 것은 아니다.

[0141] **[합성예]**

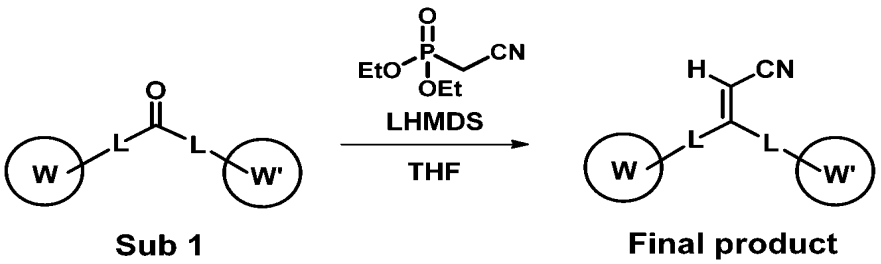
[0142] 본 발명에 따른 화학식 1로 표시되는 화합물(final products)은 하기 <반응식 1> 및 <반응식 2>로 대표되나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0143] <반응식 1> L-W 및 L-W'는 A환 또는 B환



[0144]

[0145] <반응식 2> L-W 및 L-W'는 A환 또는 B환

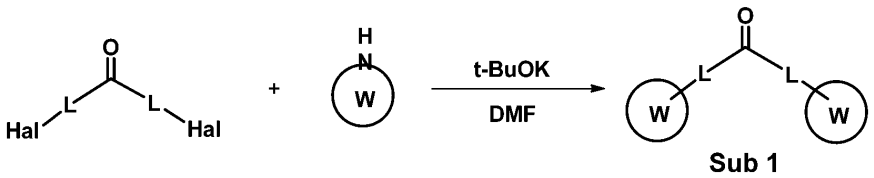


[0146]

[0147] **Ⅰ. Sub 1의 합성 예시**

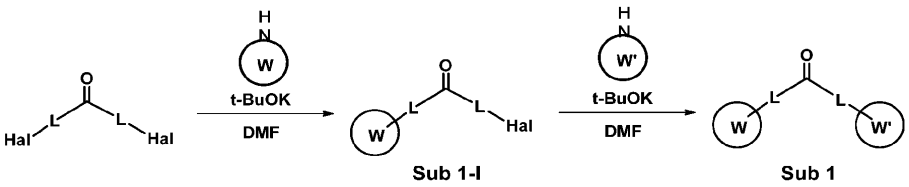
[0148] 상기 반응식 1의 Sub 1은 하기 <반응식 3> 및 <반응식 4>의 반응경로에 의해 합성될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다. 더불어 표 1은 Sub 1에 속하는 화합물의 FD-MS 값을 나타낸 것이다.

[0149] <반응식 3> Hal= F, Br, Cl, I이고, L-W는 A환 또는 B환



[0150]

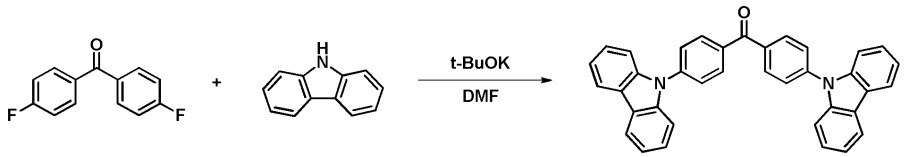
[0151] <반응식 4> Hal= F, Br, Cl, I이고, L-W 및 L-W'는 A환 또는 B환



[0152]

[0153] 1. Sub 1-1 합성

[0154] <반응식 5>



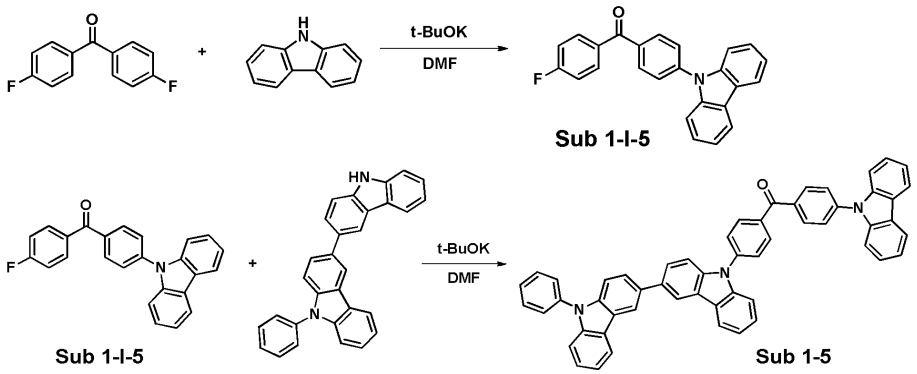
Sub 1-1

[0155]

[0156] 둥근플라스크에 9H-carbazole (9.2g, 55mmol)과 t-BuOK (6.5 g, 57.75mmol)을 넣고 DMF (84 mL)로 녹인 혼합물에 65℃에서 bis(4-fluorophenyl)methanone (6.0 g, 27.50mmol)을 첨가하고 밤새 교반하였다. 상온으로 식히고 물을 넣어 여과하고 물로 씻었다. 얻어진 고체를 CH_2Cl_2에 녹이고 유기층과 수층을 층분리하여 유기층에 $MgSO_4$을 첨가하여 건조시켰다. 혼합물을 여과하고 얻어진 여과액을 농축하였다. 얻어진 고체를 CH_2Cl_2과 methanol로 재결정하여 생성물 7.89g(수율: 56%)을 얻었다.

[0157] 2. Sub 1-5 합성

[0158] <반응식 6>



[0159]

[0160] 중간체 Sub 1-I-5 합성

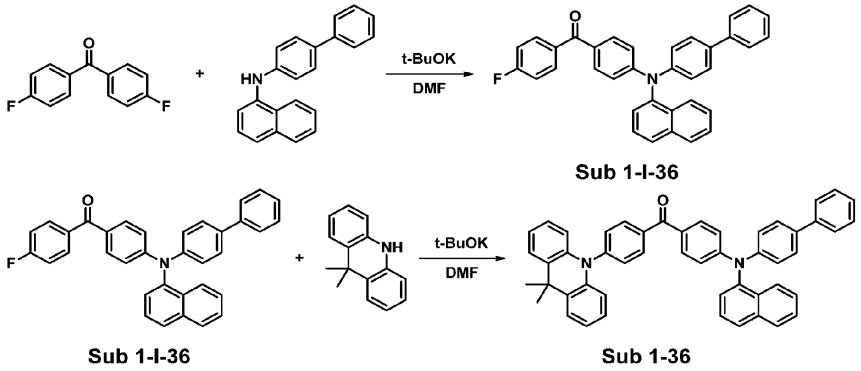
[0161] 둥근플라스크에 9H-carbazole (5.98g, 35.79mmol), t-BuOK (4.42g, 39.37mmol), DMF (109mL), bis(4-fluorophenyl)methanone (7.81g, 35.79mmol)을 상기 Sub 1-1 합성방법을 사용하여 생성물 7.71g(수율: 42%)을 얻었다.

[0162] Sub 1-5 합성

[0163] 둥근플라스크에 9-phenyl-9H,9'H-3,3'-bicarbazole (8.61g, 21.07mmol), t-BuOK (4.97g, 44.25mmol), DMF (64mL), Sub 1-I-5 (7.7g, 21.07mmol)을 상기 Sub 1-1 합성방법을 사용하여 생성물 8.1g(수율: 51%)을 얻었다.

[0164] 3. Sub 1-36 합성

[0165] <반응식 7>



Sub 1-I-36 Sub 1-36

[0166]

[0167] 중간체 Sub 1-I-36 합성

[0168] 둥근플라스크에 N-([1,1'-biphenyl]-4-yl)naphthalen-1-amine (17.33g, 58.66mmol), t-BuOK (7.24g, 64.53mmol), DMF (179 mL), bis(4-fluorophenyl)methanone (12.8g, 58.66mmol)을 상기 Sub 1-1 합성방법을 사용하여 생성물 12.16g(수율: 42%)을 얻었다.

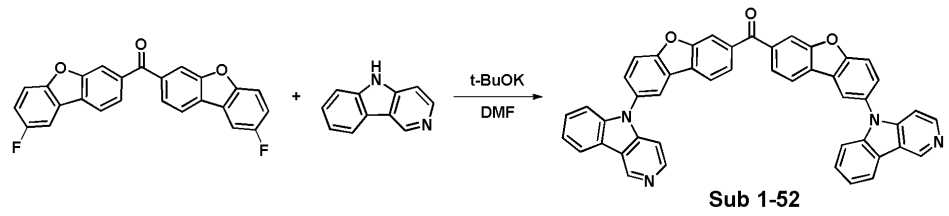
[0169] Sub 1-36 합성

[0170] 둥근플라스크에 9,9-dimethyl-9,10-dihydroacridine (5.09g, 24.31mmol),

[0171] t-BuOK (3g, 26.74mmol), DMF (74mL), Sub 1-I-36 (12g, 24.31mmol)을 상기 Sub 1-1 합성방법을 사용하여 생성물 8.13g(수율: 49%)을 얻었다.

[0172] **4. Sub 1-52 합성**

[0173] <반응식 8>



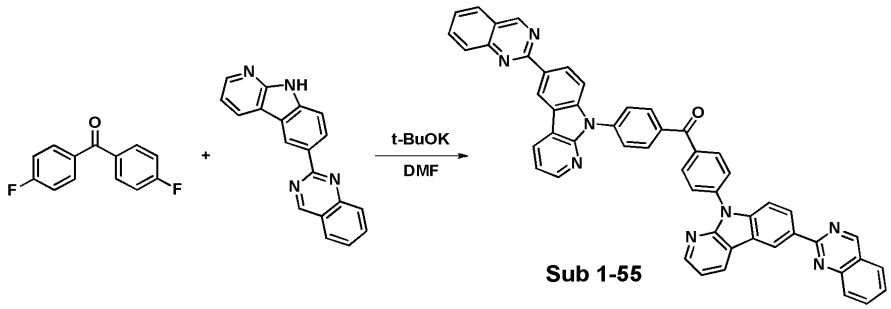
Sub 1-52

[0174]

[0175] 둥근플라스크에 5H-pyrido[4,3-b]indole (8.7g, 51.71mmol), t-BuOK (6.09g, 54.30mmol), DMF (79mL), bis(8-fluorodibenzo[b,d]furan-3-yl)methanone (10.3g, 25.86mmol)을 상기 Sub 1-1 합성방법을 사용하여 생성물 8.08g(수율: 45%)을 얻었다.

[0176] **5. Sub 1-55 합성**

[0177] <반응식 9>

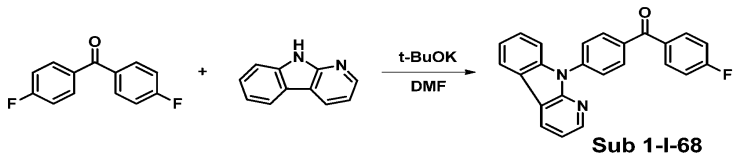


[0178]

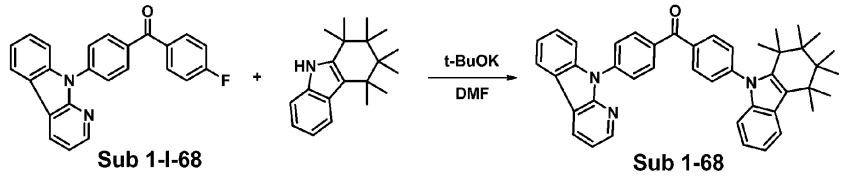
[0179] 둥근플라스크에 6-(quinazolin-2-yl)-9H-pyrido[2,3-b]indole (15.22g, 51.36mmol), t-BuOK (6.05g, 53.93mmol), DMF (78mL), bis(4-fluorophenyl)methanone (5.6g, 25.68mmol)을 상기 Sub 1-1 합성방법을 사용하여 생성물 8.12g(수율: 41%)을 얻었다.

[0180] **6. Sub 1-68 합성**

[0181] <반응식 10>



[0182]



[0183]

[0184] 중간체 Sub 1-I-68 합성

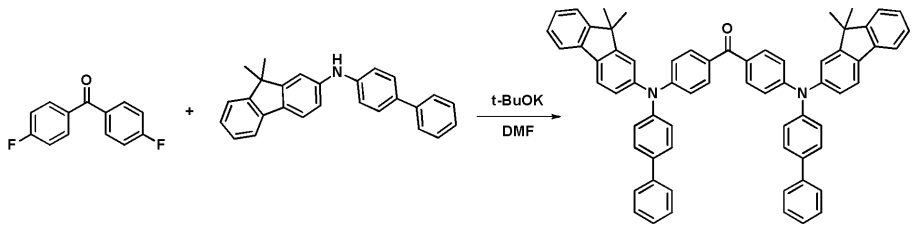
[0185] 둥근플라스크에 9H-pyrido[2,3-b]indole (6.63g, 39.41mmol), t-BuOK (4.86g, 43.35mmol), DMF (120mL), bis(4-fluorophenyl)methanone (8.6g, 39.41mmol)을 상기 Sub 1-1 합성방법을 사용하여 생성물 5.63g(수율: 39%)을 얻었다.

[0186] Sub 1-68 합성

[0187] 둥근플라스크에 1,1,2,2,3,3,4,4-octamethyl-2,3,4,9-tetrahydro-1H-carbazole (8.43g, 29.75mmol), t-BuOK (3.67g, 32.72mmol), DMF (91mL), Sub 1-I-68 (10.9g, 29.75mmol)을 상기 Sub 1-1 합성방법을 사용하여 생성물 8.06g(수율: 43%)을 얻었다.

[0188] **7. Sub 1-74 합성**

[0189] <반응식 11>



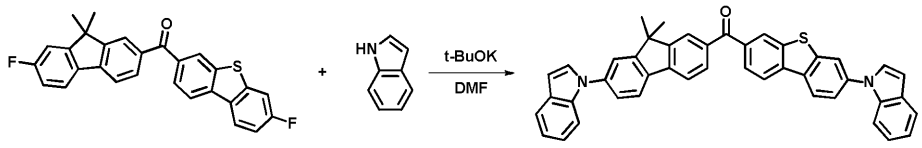
Sub 1-74

[0190]

[0191] 둥근플라스크에 N-([1,1'-biphenyl]-4-yl)-9,9-dimethyl-9H-fluoren-2-amine (12.47g, 34.49mmol), t-BuOK (4.06g, 36.21mmol), DMF (52mL), bis(4-fluorophenyl)methanone (3.76g, 17.24mmol)을 상기 Sub 1-1 합성방법을 사용하여 생성물 8.08g(수율: 43%)을 얻었다.

[0192] 8. Sub 1-119 합성

[0193] <반응식 12>



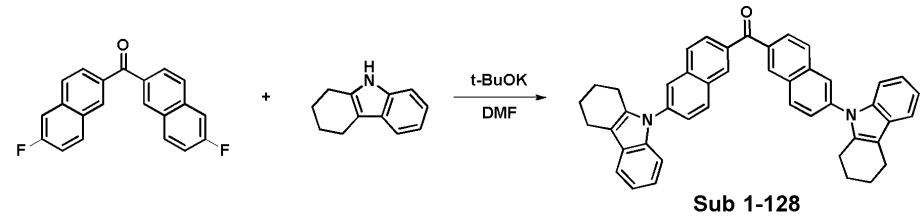
Sub 1-119

[0194]

[0195] 둥근플라스크에 1H-indole (7.07g, 60.39mmol), t-BuOK (7.11g, 63.41mmol), DMF (92mL), (7-fluoro-9,9-dimethyl-9H-fluoren-2-yl)(7-fluorodibenzo[b,d]thiophen-3-yl)methanone (13.3g, 30.19mmol)을 상기 Sub 1-1 합성방법을 사용하여 생성물 8.05g(수율: 42%)을 얻었다.

[0196] 9. Sub 1-128 합성

[0197] <반응식 13>



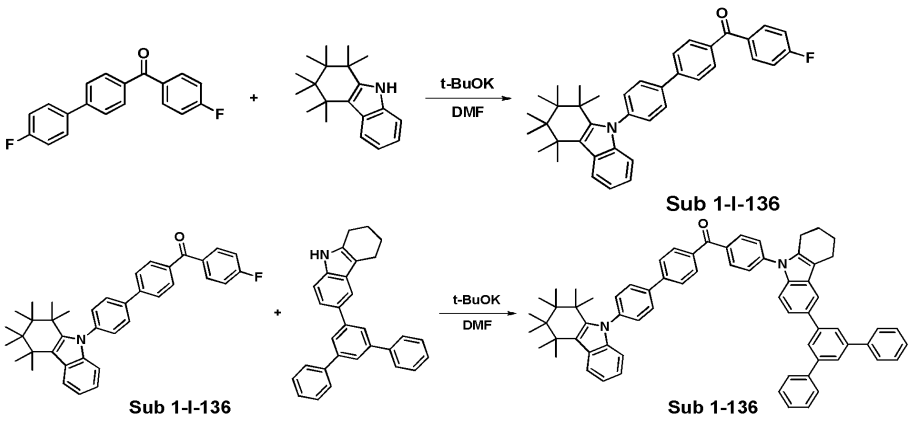
Sub 1-128

[0198]

[0199] 둥근플라스크에 2,3,4,9-tetrahydro-1H-carbazole (8.50g, 49.64mmol), t-BuOK (5.85g, 52.12mmol), DMF (76mL), bis(6-fluoronaphthalen-2-yl)methanone (7.9g, 24.82mmol)을 상기 Sub 1-1 합성방법을 사용하여 생성물 8.01g(수율: 52%)을 얻었다.

[0200] 10. Sub 1-136 합성

[0201] <반응식 14>



[0202]

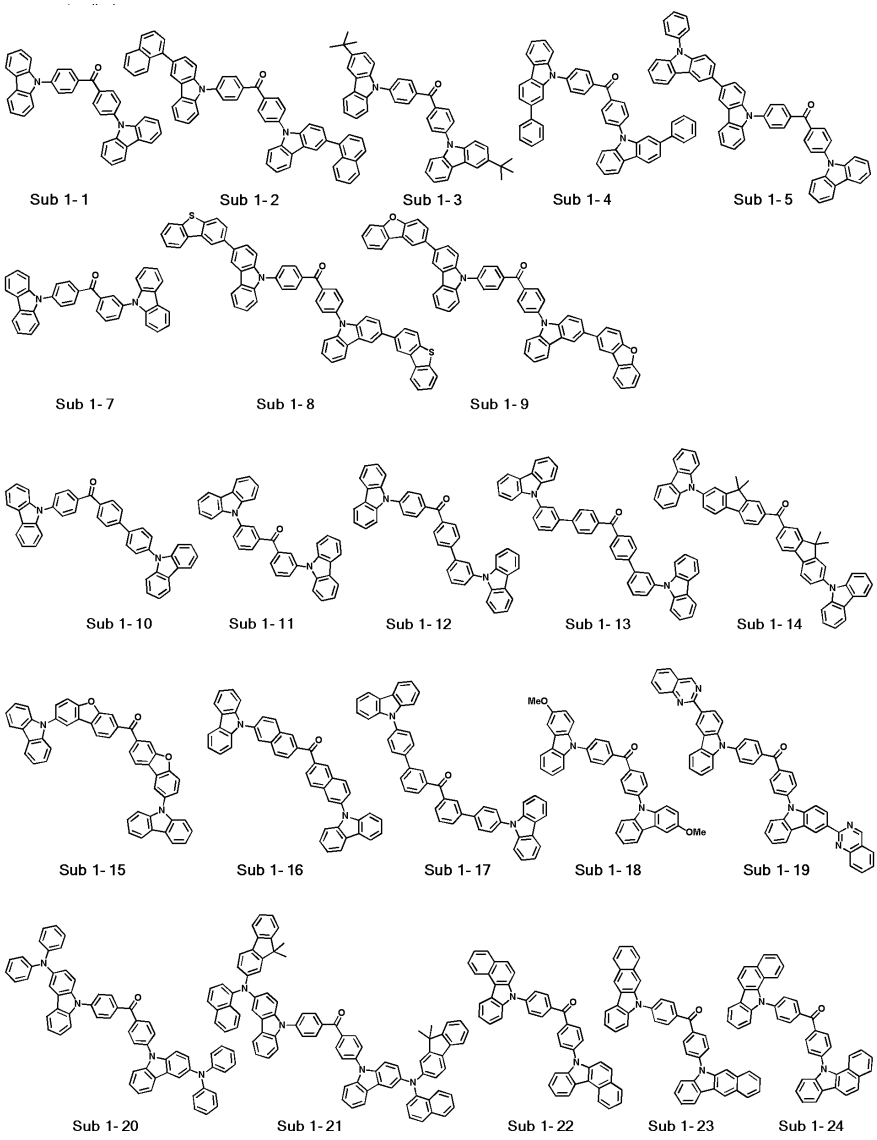
[0203] 중간체 Sub 1-I-136 합성

[0204] 둥근플라스크에 1,1,2,2,3,3,4,4-octamethyl-2,3,4,9-tetrahydro-1H-carbazole (10.11g, 35.68mmol), t-BuOK (4.4g, 39.25mmol), DMF (109 mL), (4'-fluoro-[1,1'-biphenyl]-4-yl)(4-fluorophenyl)methanone (10.5g, 35.68mmol)을 상기 Sub 1-1 합성방법을 사용하여 생성물 7.96g(수율: 40%)을 얻었다.

[0205] Sub 1-136 합성

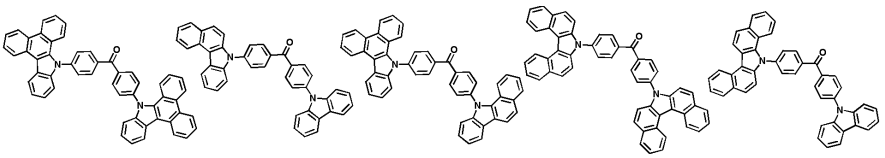
[0206] 둥근플라스크에 6-([1,1':3',1''-terphenyl]-5'-yl)-2,3,4,9-tetrahydro-1H-carbazole (6.73g, 16.85mmol), t-BuOK (2.08g, 18.54mmol), DMF (51mL), Sub 1-I-136 (9.4g, 16.85mmol)을 상기 Sub 1-1 합성방법을 사용하여 생성물 8.06g(수율: 51%)을 얻었다.

[0207] Sub 1의 예시

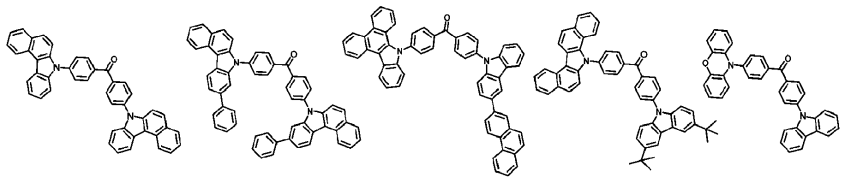


[0208]

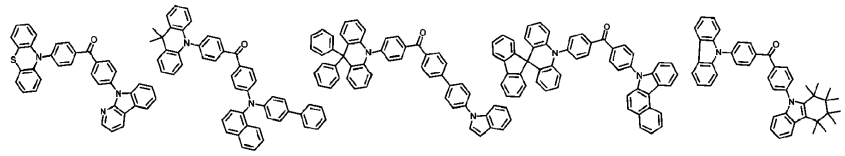
[0209]



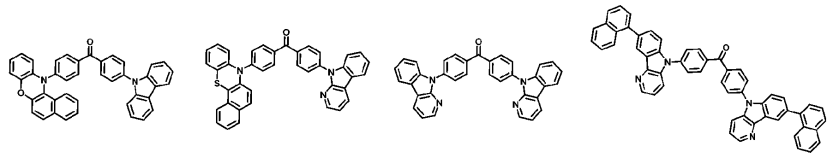
Sub 1-25 Sub 1-26 Sub 1-27 Sub 1-28 Sub 1-29



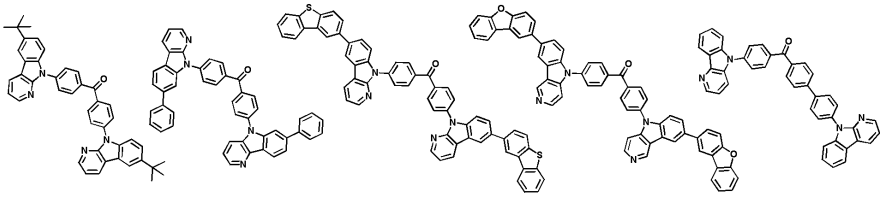
Sub 1-30 Sub 1-31 Sub 1-32 Sub 1-33 Sub 1-34



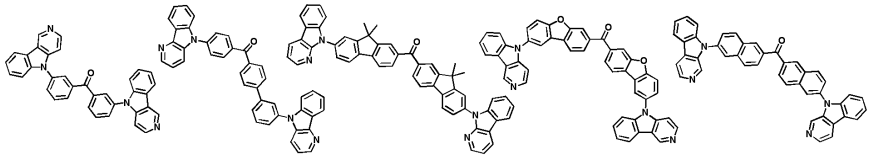
Sub 1-35 Sub 1-36 Sub 1-37 Sub 1-38 Sub 1-39



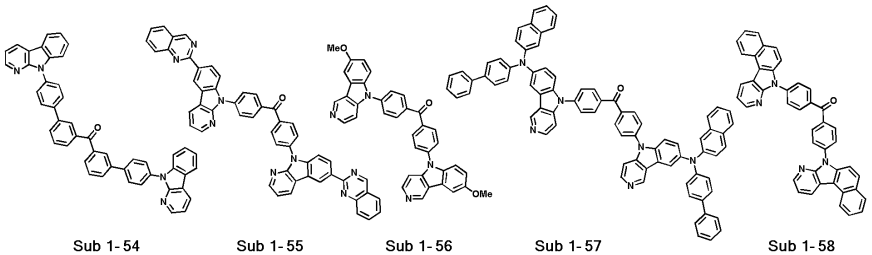
Sub 1-40 Sub 1-41 Sub 1-42 Sub 1-43



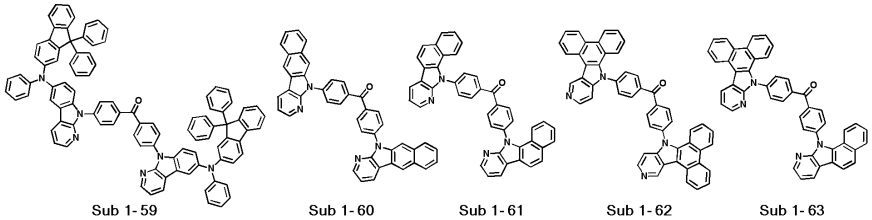
Sub 1-44 Sub 1-45 Sub 1-46 Sub 1-47 Sub 1-48



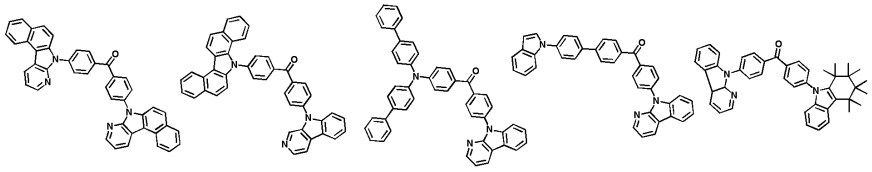
Sub 1-49 Sub 1-50 Sub 1-51 Sub 1-52 Sub 1-53



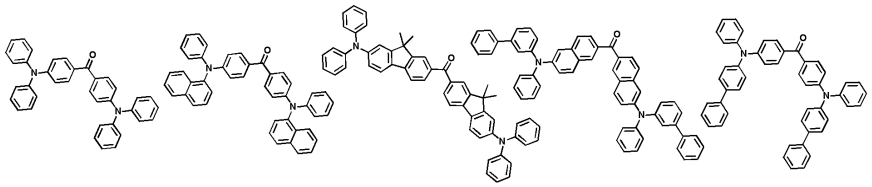
Sub 1-54 Sub 1-55 Sub 1-56 Sub 1-57 Sub 1-58



Sub 1-59 Sub 1-60 Sub 1-61 Sub 1-62 Sub 1-63



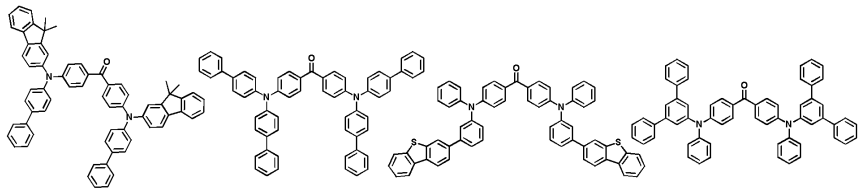
Sub 1-64 Sub 1-65 Sub 1-66 Sub 1-67 Sub 1-68



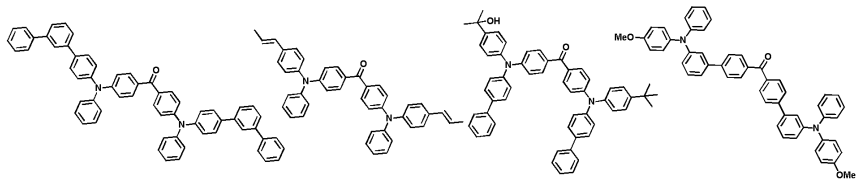
Sub 1-69 Sub 1-70 Sub 1-71 Sub 1-72 Sub 1-73

[0210]

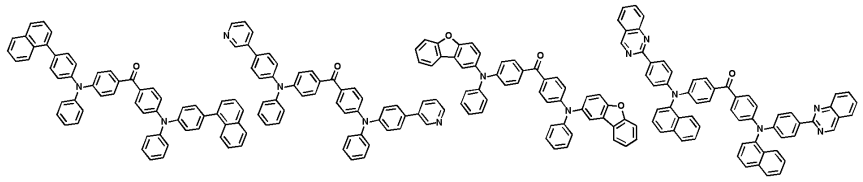
[0211]



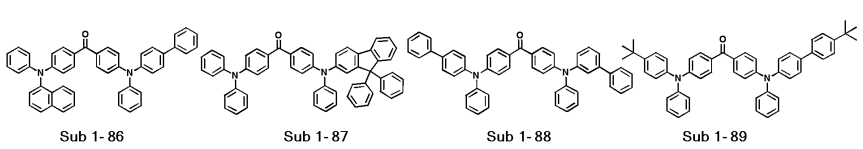
Sub 1-74 Sub 1-75 Sub 1-76 Sub 1-77



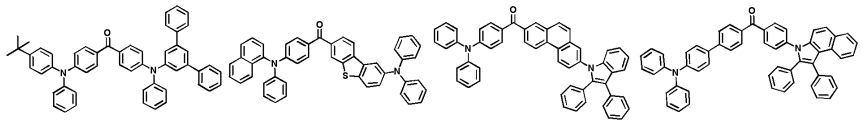
Sub 1-78 Sub 1-79 Sub 1-80 Sub 1-81



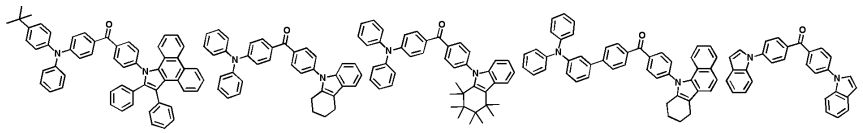
Sub 1-82 Sub 1-83 Sub 1-84 Sub 1-85



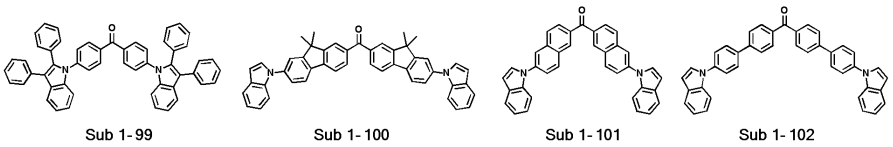
Sub 1-86 Sub 1-87 Sub 1-88 Sub 1-89

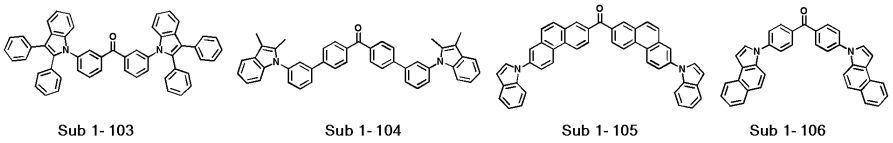


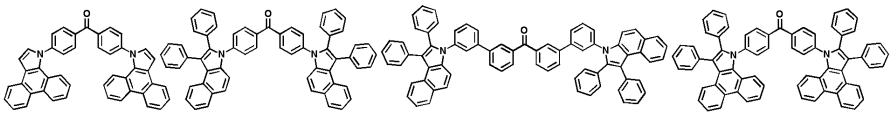
Sub 1-90 Sub 1-91 Sub 1-92 Sub 1-93

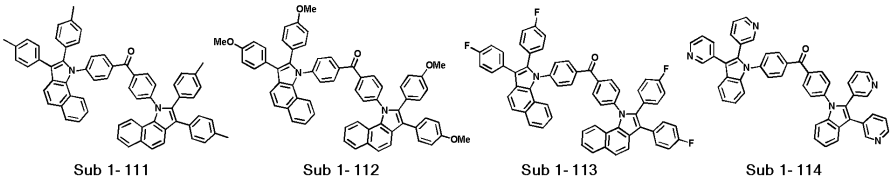


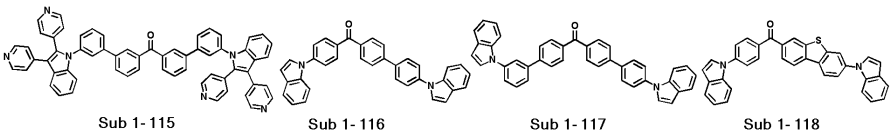
Sub 1-94 Sub 1-95 Sub 1-96 Sub 1-97 Sub 1-98

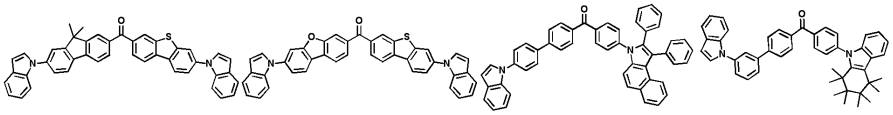

Sub 1-99 Sub 1-100 Sub 1-101 Sub 1-102

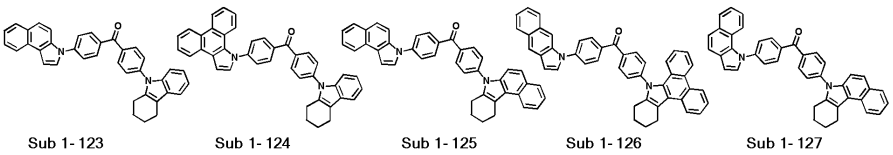

Sub 1-103 Sub 1-104 Sub 1-105 Sub 1-106


Sub 1-107 Sub 1-108 Sub 1-109 Sub 1-110


Sub 1-111 Sub 1-112 Sub 1-113 Sub 1-114

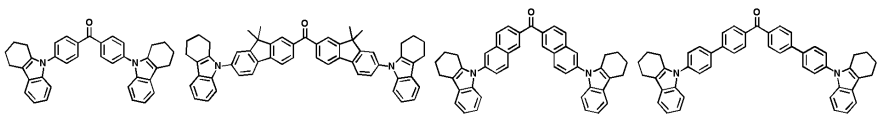

Sub 1-115 Sub 1-116 Sub 1-117 Sub 1-118


Sub 1-119 Sub 1-120 Sub 1-121 Sub 1-122

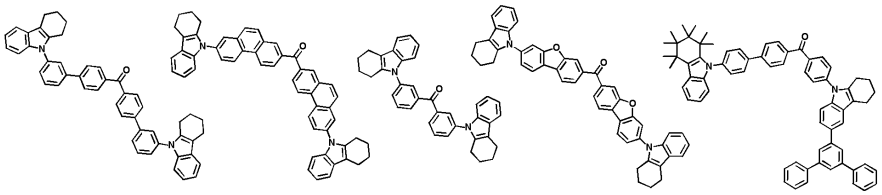

Sub 1-123 Sub 1-124 Sub 1-125 Sub 1-126 Sub 1-127

[0212]

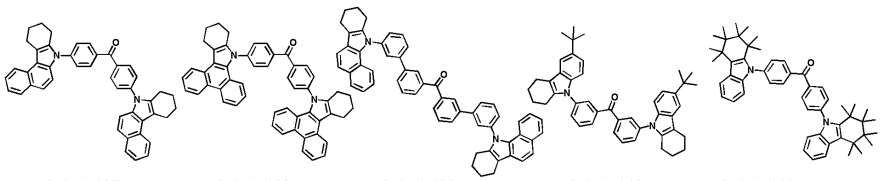
[0213]



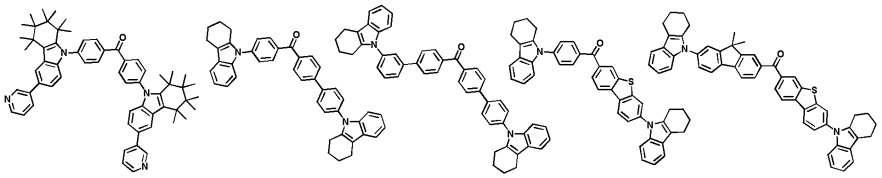
Sub 1-128 Sub 1-129 Sub 1-130 Sub 1-131



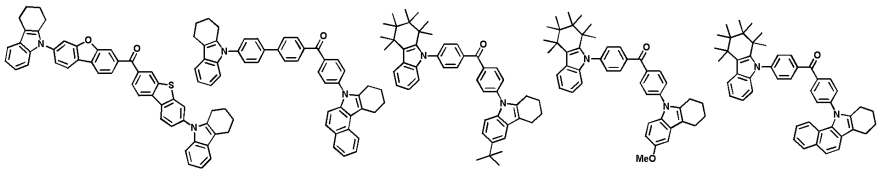
Sub 1-132 Sub 1-133 Sub 1-134 Sub 1-135 Sub 1-136



Sub 1-137 Sub 1-138 Sub 1-139 Sub 1-140 Sub 1-141



Sub 1-142 Sub 1-143 Sub 1-144 Sub 1-145 Sub 1-146



Sub 1-147 Sub 1-148 Sub 1-149 Sub 1-150 Sub 1-151

[0214] [표 1]

화합물	FD-MS	화합물	FD-MS
Sub 1-1	m/z=512.19($C_{37}H_{24}N_2O$=512.60)	Sub 1-2	m/z=764.28($C_{57}H_{36}N_2O$=764.91)
Sub 1-3	m/z=624.31($C_{45}H_{40}N_2O$=624.81)	Sub 1-4	m/z=664.25($C_{49}H_{32}N_2O$=664.79)
Sub 1-5	m/z=753.28($C_{55}H_{35}N_3O$=753.89)		
Sub 1-7	m/z=512.19($C_{37}H_{24}N_2O$=512.60)	Sub 1-8	m/z=876.23($C_{61}H_{36}N_2OS_2$=877.08)
Sub 1-9	m/z=844.27($C_{61}H_{36}N_2O_3$=844.95)	Sub 1-10	m/z=588.22($C_{43}H_{28}N_2O$=588.70)
Sub 1-11	m/z=512.19($C_{37}H_{24}N_2O$=512.60)	Sub 1-12	m/z=588.22($C_{43}H_{28}N_2O$=588.70)
Sub 1-13	m/z=664.25($C_{49}H_{32}N_2O$=664.79)	Sub 1-14	m/z=744.31($C_{55}H_{40}N_2O$=744.92)
Sub 1-15	m/z=692.21($C_{49}H_{28}N_2O_3$=692.76)	Sub 1-16	m/z=612.22($C_{45}H_{28}N_2O$=612.72)
Sub 1-17	m/z=664.25($C_{49}H_{32}N_2O$=664.79)	Sub 1-18	m/z=572.21($C_{39}H_{28}N_2O_3$=572.65)
Sub 1-19	m/z=768.26($C_{53}H_{32}N_6O$=768.86)	Sub 1-20	m/z=846.34($C_{61}H_{42}N_4O$=847.01)
Sub 1-21	m/z=1178.49($C_{87}H_{62}N_4O$=1179.45)	Sub 1-22	m/z=612.22($C_{45}H_{28}N_2O$=612.72)
Sub 1-23	m/z=612.22($C_{45}H_{28}N_2O$=612.72)	Sub 1-24	m/z=612.22($C_{45}H_{28}N_2O$=612.72)
Sub 1-25	m/z=712.25($C_{53}H_{32}N_2O$=712.83)	Sub 1-26	m/z=562.20($C_{41}H_{26}N_2O$=562.66)
Sub 1-27	m/z=662.24($C_{49}H_{30}N_2O$=662.78)	Sub 1-28	m/z=712.25($C_{53}H_{32}N_2O$=712.83)
Sub 1-29	m/z=612.22($C_{45}H_{28}N_2O$=612.72)	Sub 1-30	m/z=612.22($C_{45}H_{28}N_2O$=612.72)
Sub 1-31	m/z=764.28($C_{57}H_{36}N_2O$=764.91)	Sub 1-32	m/z=788.28($C_{59}H_{36}N_2O$=788.93)
Sub 1-33	m/z=724.35($C_{53}H_{44}N_2O$=724.93)	Sub 1-34	m/z=528.18($C_{37}H_{24}N_2O_2$=528.60)
Sub 1-35	m/z=545.16($C_{36}H_{23}N_3OS$=545.65)	Sub 1-36	m/z=682.30($C_{50}H_{38}N_2O$=682.85)
Sub 1-37	m/z=704.28($C_{52}H_{36}N_2O$=704.86)	Sub 1-38	m/z=726.27($C_{54}H_{34}N_2O$=726.86)
Sub 1-39	m/z=628.35($C_{45}H_{44}N_2O$=628.84)	Sub 1-40	m/z=578.20($C_{41}H_{26}N_2O_2$=578.66)
Sub 1-41	m/z=595.17($C_{40}H_{25}N_3OS$=595.71)	Sub 1-42	m/z=514.18($C_{35}H_{22}N_4O$=514.58)
Sub 1-43	m/z=766.27($C_{55}H_{34}N_4O$=766.88)	Sub 1-44	m/z=626.30($C_{43}H_{38}N_4O$=626.79)
Sub 1-45	m/z=666.24($C_{47}H_{30}N_4O$=666.77)	Sub 1-46	m/z=878.22($C_{59}H_{34}N_4OS_2$=879.06)
Sub 1-47	m/z=846.26($C_{59}H_{34}N_4OS_2$=879.06)	Sub 1-48	m/z=590.21($C_{41}H_{26}N_4O$=590.67)
Sub 1-49	m/z=514.18($C_{35}H_{22}N_4O$=514.58)	Sub 1-50	m/z=590.21($C_{41}H_{26}N_4O$=590.67)
Sub 1-51	m/z=746.30($C_{53}H_{38}N_4O$=746.90)	Sub 1-52	m/z=694.20($C_{47}H_{26}N_4O_3$=694.73)
Sub 1-53	m/z=614.21($C_{43}H_{26}N_4O$=614.69)	Sub 1-54	m/z=666.24($C_{47}H_{30}N_4O$=666.77)
Sub 1-55	m/z=770.25($C_{51}H_{30}N_8O$=777.84)	Sub 1-56	m/z=574.20($C_{37}H_{26}N_4O_3$=574.63)
Sub 1-57	m/z=1100.42($C_{79}H_{52}N_6O$=1101.30)	Sub 1-58	m/z=614.21($C_{43}H_{26}N_4O$=614.69)

[0215]

Sub 1-59	m/z=1328.51($C_{97}H_{64}N_6O$=1329.59)	Sub 1-60	m/z=614.21($C_{43}H_{26}N_4O$=614.69)
Sub 1-61	m/z=614.21($C_{43}H_{26}N_4O$=614.69)	Sub 1-62	m/z=714.24($C_{51}H_{30}N_4O$=714.81)
Sub 1-63	m/z=664.23($C_{47}H_{28}N_4O$=664.75)	Sub 1-64	m/z=614.21($C_{43}H_{26}N_4O$=614.69)
Sub 1-65	m/z=613.22($C_{44}H_{27}N_3O$=613.70)	Sub 1-66	m/z=667.26($C_{48}H_{33}N_3O$=667.80)
Sub 1-67	m/z=539.20($C_{38}H_{25}N_3O$=539.62)	Sub 1-68	m/z=631.36($C_{44}H_{45}N_3O$=631.85)
Sub 1-69	m/z=516.22($C_{37}H_{28}N_2O$=516.63)	Sub 1-70	m/z=616.25($C_{45}H_{32}N_2O$=616.75)
Sub 1-71	m/z=748.35($C_{55}H_{44}N_2O$=748.95)	Sub 1-72	m/z=768.31($C_{57}H_{40}N_2O$=768.94)
Sub 1-73	m/z=668.28($C_{49}H_{36}N_2O$=668.82)	Sub 1-74	m/z=900.41($C_{67}H_{52}N_2O$=901.14)
Sub 1-75	m/z=820.35($C_{61}H_{44}N_2O$=821.01)	Sub 1-76	m/z=880.26($C_{61}H_{40}N_2OS_2$=881.11)
Sub 1-77	m/z=820.35($C_{61}H_{44}N_2O$=821.01)	Sub 1-78	m/z=820.35($C_{61}H_{44}N_2O$=821.01)
Sub 1-79	m/z=596.28($C_{43}H_{36}N_2O$=596.76)	Sub 1-80	m/z=782.39($C_{56}H_{50}N_2O_2$=783.01)
Sub 1-81	m/z=728.30($C_{51}H_{40}N_2O_3$=728.87)	Sub 1-82	m/z=768.31($C_{57}H_{40}N_2O$=768.94)
Sub 1-83	m/z=670.27($C_{47}H_{34}N_4O$=670.80)	Sub 1-84	m/z=696.24($C_{49}H_{32}N_2O_3$=696.79)
Sub 1-85	m/z=872.33($C_{61}H_{40}N_6O$=873.01)	Sub 1-86	m/z=642.27($C_{47}H_{34}N_2O$=642.79)
Sub 1-87	m/z=756.31($C_{56}H_{40}N_2O$=756.93)	Sub 1-88	m/z=668.28($C_{49}H_{36}N_2O$=668.82)
Sub 1-89	m/z=704.38($C_{51}H_{48}N_2O$=704.94)	Sub 1-90	m/z=724.35($C_{53}H_{44}N_2O$=724.93)
Sub 1-91	m/z=672.22($C_{47}H_{32}N_2OS$=672.83)	Sub 1-92	m/z=716.28($C_{53}H_{36}N_2O$=716.87)
Sub 1-93	m/z=742.30($C_{55}H_{38}N_2O$=742.90)	Sub 1-94	m/z=772.35($C_{57}H_{44}N_2O$=772.97)
Sub 1-95	m/z=518.24($C_{37}H_{30}N_2O$=518.65)	Sub 1-96	m/z=630.36($C_{45}H_{46}N_2O$=630.86)
Sub 1-97	m/z=644.28($C_{47}H_{36}N_2O$=644.80)	Sub 1-98	m/z=412.16($C_{29}H_{20}N_2O$=412.48)
Sub 1-99	m/z=716.28($C_{53}H_{36}N_2O$=716.87)	Sub 1-100	m/z=644.28($C_{47}H_{36}N_2O$=644.80)
Sub 1-101	m/z=512.19($C_{37}H_{24}N_2O$=512.60)	Sub 1-102	m/z=564.22($C_{41}H_{28}N_2O$=564.67)
Sub 1-103	m/z=716.28($C_{53}H_{36}N_2O$=716.87)	Sub 1-104	m/z=620.28($C_{45}H_{36}N_2O$=620.78)
Sub 1-105	m/z=612.22($C_{45}H_{28}N_2O$=612.72)	Sub 1-106	m/z=512.19($C_{37}H_{24}N_2O$=512.60)
Sub 1-107	m/z=612.22($C_{45}H_{28}N_2O$=612.72)	Sub 1-108	m/z=816.31($C_{61}H_{40}N_2O$=816.98)
Sub 1-109	m/z=968.38($C_{73}H_{48}N_2O$=969.18)	Sub 1-110	m/z=916.35($C_{69}H_{44}N_2O$=917.10)
Sub 1-111	m/z=872.38($C_{65}H_{48}N_2O$=873.09)	Sub 1-112	m/z=936.36($C_{65}H_{48}N_2O_5$=937.09)
Sub 1-113	m/z=888.28($C_{61}H_{36}F_4N_2O$=888.94)	Sub 1-114	m/z=720.26($C_{49}H_{32}N_6O$=720.82)
Sub 1-115	m/z=872.33($C_{61}H_{40}N_6O$=873.01)	Sub 1-116	m/z=488.19($C_{35}H_{24}N_2O$=488.58)
Sub 1-117	m/z=564.22($C_{41}H_{28}N_2O$=564.67)	Sub 1-118	m/z=518.15($C_{35}H_{22}N_2OS$=518.63)
Sub 1-119	m/z=634.21($C_{44}H_{30}N_2OS$=634.79)	Sub 1-120	m/z=608.16($C_{41}H_{24}N_2O_2S$=608.71)
Sub 1-121	m/z=690.27($C_{51}H_{34}N_2O$=690.83)	Sub 1-122	m/z=654.36($C_{47}H_{46}N_2O$=654.88)

[0216]

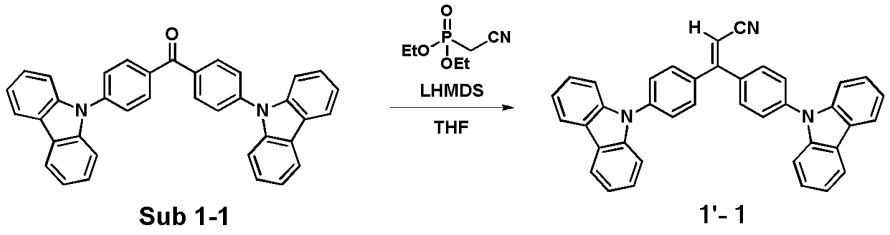
Sub 1-123	m/z=516.22($C_{37}H_{28}N_2O$=516.63)	Sub 1-124	m/z=566.24($C_{41}H_{30}N_2O$=566.69)
Sub 1-125	m/z=566.24($C_{41}H_{30}N_2O$=566.69)	Sub 1-126	m/z=616.25($C_{45}H_{32}N_2O$=616.75)
Sub 1-127	m/z=566.24($C_{41}H_{30}N_2O$=566.69)	Sub 1-128	m/z=520.25($C_{37}H_{32}N_2O$=520.66)
Sub 1-129	m/z=752.38($C_{55}H_{48}N_2O$=752.98)	Sub 1-130	m/z=620.28($C_{45}H_{36}N_2O$=620.78)
Sub 1-131	m/z=672.31($C_{49}H_{40}N_2O$=672.85)	Sub 1-132	m/z=672.31($C_{49}H_{40}N_2O$=672.85)
Sub 1-133	m/z=720.31($C_{53}H_{40}N_2O$=720.90)	Sub 1-134	m/z=520.25($C_{37}H_{32}N_2O$=520.66)
Sub 1-135	m/z=700.27($C_{49}H_{36}N_2O_3$=700.82)	Sub 1-136	m/z=936.50($C_{69}H_{64}N_2O$=937.26)
Sub 1-137	m/z=620.28($C_{45}H_{36}N_2O$=620.78)	Sub 1-138	m/z=720.31($C_{53}H_{40}N_2O$=720.90)
Sub 1-139	m/z=772.35($C_{57}H_{44}N_2O$=772.97)	Sub 1-140	m/z=632.38($C_{45}H_{48}N_2O$=632.88)
Sub 1-141	m/z=744.50($C_{53}H_{64}N_2O$=745.09)	Sub 1-142	m/z=898.55($C_{63}H_{70}N_4O$=899.16)
Sub 1-143	m/z=596.28($C_{43}H_{36}N_2O$=596.76)	Sub 1-144	m/z=672.31($C_{49}H_{40}N_2O$=672.85)
Sub 1-145	m/z=626.24($C_{43}H_{34}N_2OS$=626.81)	Sub 1-146	m/z=742.30($C_{52}H_{42}N_2OS$=742.97)
Sub 1-147	m/z=716.25($C_{49}H_{36}N_2O_2S$=716.89)	Sub 1-148	m/z=646.30($C_{47}H_{38}N_2O$=646.82)
Sub 1-149	m/z=688.44($C_{49}H_{56}N_2O$=688.98)	Sub 1-150	m/z=662.39($C_{46}H_{50}N_2O_2$=662.90)
Sub 1-151	m/z=682.39($C_{49}H_{50}N_2O$=682.93)		

[0217]

[0218] Ⅱ. Final Product 합성 예시

[0219] 1. 1'-1의 합성

[0220] <반응식 15>



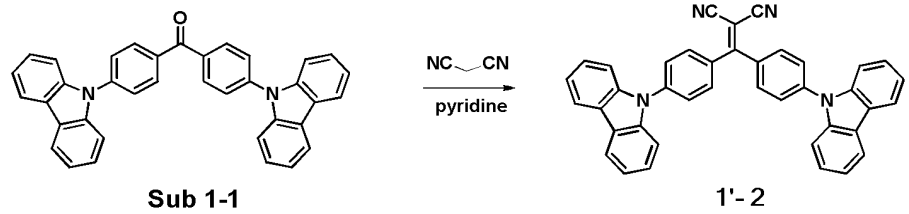
Sub 1-1 1'-1

[0221]

[0222] 둥근바닥플라스크에 THF(5mL)와 diethyl (cyanomethyl)phosphonate (2.3g, 13.27mmol)를 넣고, 0℃에서 Lithium bis(trimethylsilyl)amide (1.0 M in THF, 13.27 mL, 13.27 mmol) 용액을 천천히 첨가하였다. 40분간 교반한 후, THF (12 mL)에 Sub 1 (4g, 7.8mmol)을 녹인 용액에 상기 용액을 천천히 첨가하였다. 밤새 교반한 후, 물에 붓고 t-BuOMe로 추출하였다. 수층을 CH_2Cl_2으로 추출한 후 유기층을 $MgSO_4$로 건조시켰다. 혼합물을 여과하여 얻어진 여과액을 농축하였다. 얻어진 고체를 CH_2Cl_2과 methanol로 재결정하여 생성물 6.75g (수율: 95%)을 얻었다.

[0223] 2. 1'-2의 합성

[0224] <반응식 16>



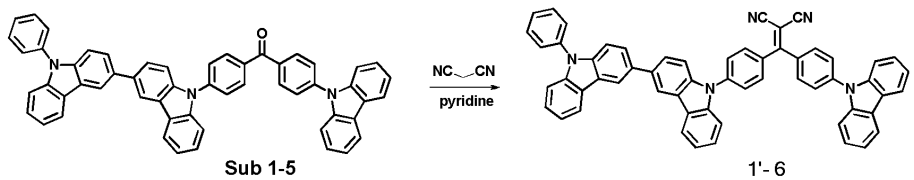
Sub 1-1 1'-2

[0225]

[0226] 둥근바닥플라스크에 Sub 1 (6g, 11.71mmol)과 malononitrile (7.7g, 117.05mmol)을 넣고 pyridine (110mL) 에 녹인 후, 90℃로 밤새 교반하였다. 반응 혼합물을 감압 농축하고 CH_2Cl_2에 녹인 후 물을 첨가하여 추출했다. 추출 후, 유기층과 수층을 분리하고, 유기층에 $MgSO_4$를 첨가하여 건조시켰다. 건조 후, 이 혼합물을 실리카 겔로 여과하고 여과액을 농축하였다. 얻어진 고체를 CH_2Cl_2과 methanol로 재결정하여 생성물 5.91g (수율: 90%)를 얻었다.

[0227] 3. 1'-6의 합성

[0228] <반응식 17>



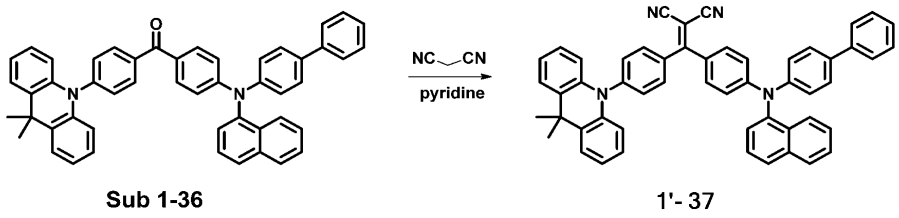
Sub 1-5 1'-6

[0229]

[0230] 둥근바닥플라스크에 Sub 1-5 (6.6g, 8.75mmol), malononitrile (5.8g, 87.55mmol), pyridine (81.8mL)을 상기 1'-2 합성방법을 사용하여 생성물 5.97g (수율: 85%)를 얻었다.

[0231] 4. 1'-37의 합성

[0232] <반응식 18>

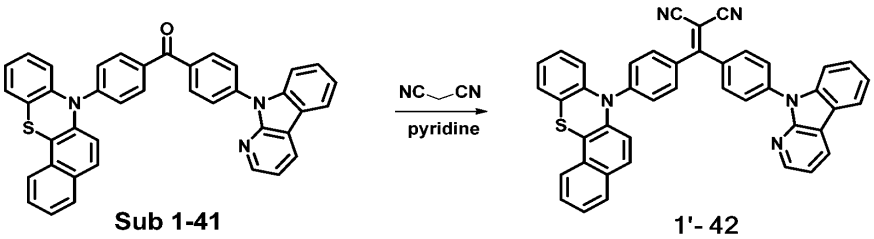


[0233]

[0234] 둥근바닥플라스크에 Sub 1-36 (6.9g, 10.10mmol), malononitrile (6.68g, 101.05mmol), pyridine (91mL)을 상기 1'-2 합성방법을 사용하여 생성물 6.06g (수율: 82%)를 얻었다.

[0235] 5. 1'-42의 합성

[0236] <반응식 19>

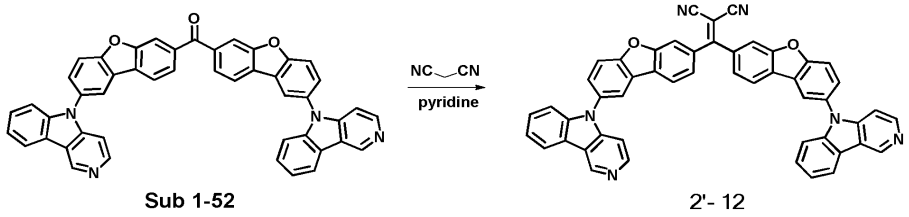


[0237]

[0238] 둥근바닥플라스크에 Sub 1-41 (7g, 11.75mmol), malononitrile (7.76g, 117.51mmol), pyridine (105mL)을 상기 1'-2 합성방법을 사용하여 생성물 6.05g (수율: 80%)를 얻었다.

[0239] 6. 2'-12의 합성

[0240] <반응식 20>

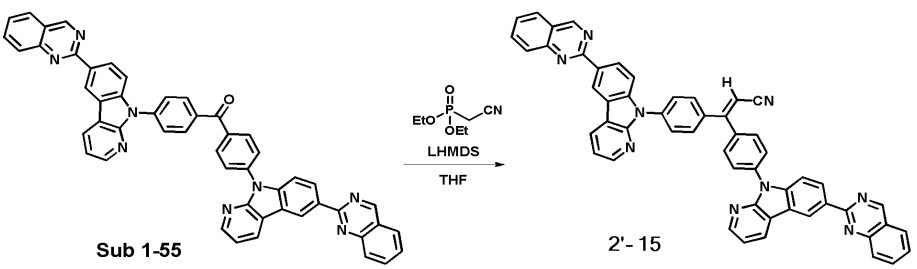


[0241]

[0242] 둥근바닥플라스크에 Sub 1-52 (7.2g, 10.38mmol), malononitrile (6.9g, 103.79mmol), pyridine (97mL)을 상기 1'-2 합성방법을 사용하여 생성물 6.01g (수율: 78%)를 얻었다.

[0243] 7. 2'-15의 합성

[0244] <반응식 21>

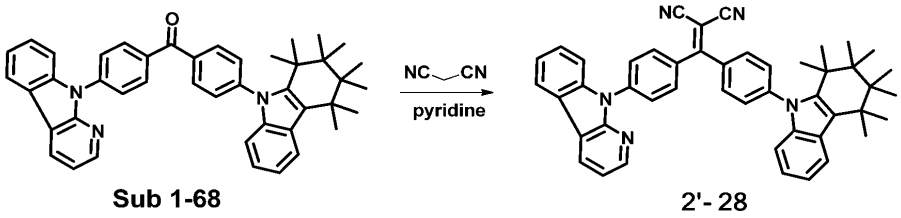


[0245]

[0246] 둥근바닥플라스크에 THF(5mL)와 diethyl (cyanomethyl)phosphonate (1.6g, 8.82mmol), Lithium bis(trimethylsilyl)amide (1.0 M in THF, 8.82mL, 8.82mmol) 용액을 첨가하여 만들고, THF (12 mL)에 Sub 1-55 (4g, 5.19mmol)을 상기 1'-1 합성방법을 이용하여 생성물 6.23g (수율: 89%)을 얻었다.

[0247] 8. 2'-28의 합성

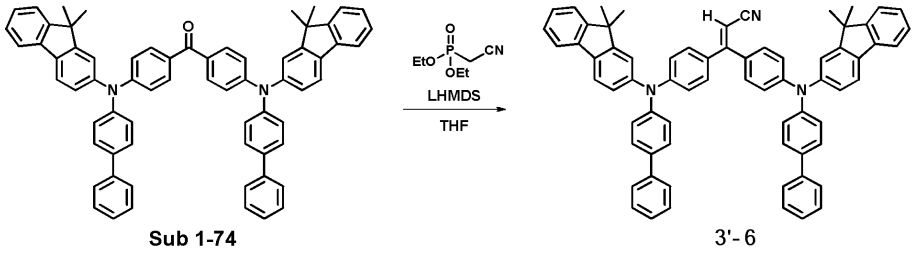
[0248] <반응식 22>

[0249] 

[0250] 둥근바닥플라스크에 Sub 1-68 (7.0g, 11.11mmol), malononitrile (7.34g, 111.14mmol), pyridine (100mL)을 상기 1'-2 합성방법을 사용하여 생성물 6.10g (수율: 81%)를 얻었다.

[0251] 9. 3'-6의 합성

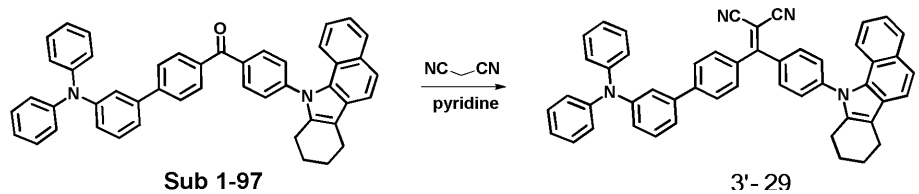
[0252] <반응식 23>

[0253] 

[0254] 둥근바닥플라스크에 THF(5mL)와 diethyl (cyanomethyl)phosphonate (1.3g, 7.55mmol), Lithium bis(trimethylsilyl)amide (1.0 M in THF, 7.55mL, 7.55mmol) 용액을 첨가하여 만들고, THF (12 mL)에 Sub 1-74 (4g, 4.44mmol)을 상기 1'-1 합성방법을 이용하여 생성물 5.85g (수율: 84%)을 얻었다

[0255] 10. 3'-29의 합성

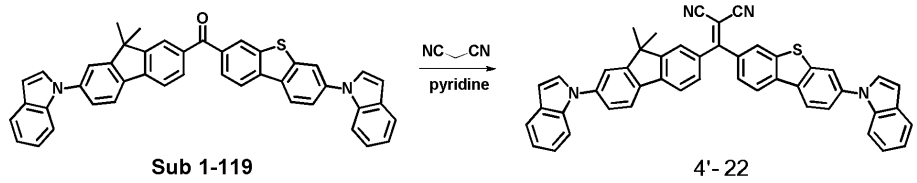
[0256] <반응식 24>

[0257] 

[0258] 둥근바닥플라스크에 Sub 1-97 (6.3g, 9.77mmol), malononitrile (6.5g, 97.7mmol), pyridine (91mL)을 상기 1'-2 합성방법을 사용하여 생성물 5.96g (수율: 88%)를 얻었다.

[0259] 11. 4'-22의 합성

[0260] <반응식 25>

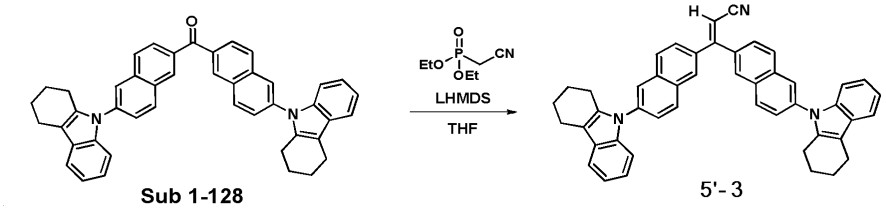


[0261]

[0262] 둥근바닥플라스크에 Sub 1-119 (7.2g, 11.34mmol), malononitrile (7.5g, 113.42mmol), pyridine (106mL)을 상기 1'-2 합성방법을 사용하여 생성물 5.96g (수율: 77%)를 얻었다.

[0263] **12. 5'-3의 합성**

[0264] <반응식 26>

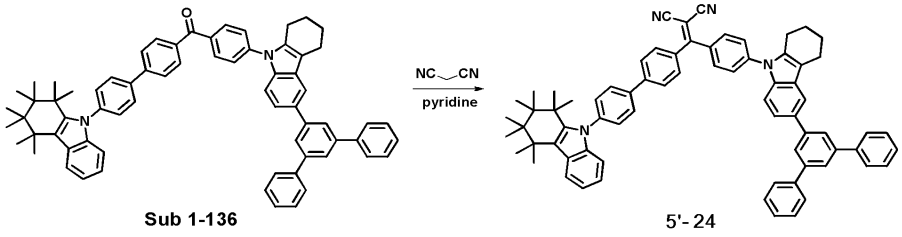


[0265]

[0266] 둥근바닥플라스크에 THF(5mL)와 diethyl (cyanomethyl)phosphonate (1.9g, 10.95mmol), Lithium bis(trimethylsilyl)amide (1.0 M in THF, 10.95mL, 10.95mmol) 용액을 첨가하여 만들고, THF (12 mL)에 Sub 1-128 (4g, 6.44mmol)을 상기 1'-1 합성방법을 이용하여 생성물 6.14g (수율: 87%)을 얻었다

[0267] **13. 5'-24의 합성**

[0268] <반응식 27>



[0269]

[0270] 둥근바닥플라스크에 Sub 1-136 (7.5g, 8mmol), malononitrile (5.3g, 80.02mmol), pyridine (75mL)을 상기 1'-2 합성방법을 사용하여 생성물 5.83g (수율: 74%)를 얻었다.

[0271] 한편, 상기와 같은 합성예에 따라 제조된 본 발명의 화합물 1'-1 내지 5'-24 의 FD-MS 값은 하기 표 2와 같다.

[0272] [표 2]

화합물	FD-MS	화합물	FD-MS
1'-1	m/z=535.20($C_{39}H_{25}N_3$=535.64)	1'-2	m/z=560.20($C_{40}H_{24}N_4$=560.65)
1'-3	m/z=787.30($C_{59}H_{37}N_3$=787.95)	1'-4	m/z=723.36($C_{53}H_{45}N_3$=723.94)
1'-5	m/z=729.31($C_{54}H_{39}N_3$=729.91)	1'-6	m/z=801.29($C_{58}H_{35}N_5$=801.93)
1'-7	m/z=801.29($C_{58}H_{35}N_5$=801.93)	1'-8	m/z=560.20($C_{40}H_{24}N_4$=560.65)
1'-9	m/z=1051.31($C_{75}H_{45}N_3S_2$=1052.31)	1'-10	m/z=994.34($C_{73}H_{43}N_3O_2$=994.14)
1'-11	m/z=636.23($C_{46}H_{28}N_4$=636.74)	1'-12	m/z=535.20($C_{39}H_{25}N_3$=535.64)
1'-13	m/z=636.23($C_{46}H_{28}N_4$=636.74)	1'-14	m/z=687.27($C_{51}H_{33}N_3$=687.83)
1'-15	m/z=767.33($C_{57}H_{41}N_3$=767.96)	1'-16	m/z=740.22($C_{52}H_{28}N_4O_2$=740.80)
1'-17	m/z=636.24($C_{47}H_{28}DN_3$=636.76)	1'-18	m/z=712.26($C_{52}H_{32}N_4$=712.84)
1'-19	m/z=620.22($C_{42}H_{28}N_4O_2$=620.70)	1'-20	m/z=816.27($C_{56}H_{32}N_8$=816.91)
1'-21	m/z=869.35($C_{63}H_{43}N_5$=870.05)	1'-22	m/z=1201.51($C_{89}H_{63}N_5$=1202.49)
1'-23	m/z=635.24($C_{47}H_{29}N_3$=635.75)	1'-24	m/z=660.23($C_{48}H_{28}N_4$=660.76)
1'-25	m/z=635.24($C_{47}H_{29}N_3$=635.75)	1'-26	m/z=735.27($C_{55}H_{33}N_3$=735.87)

[0273]

1'-27	m/z=610.22($C_{44}H_{26}N_4$=610.70)	1'-28	m/z=710.25($C_{52}H_{30}N_4$=710.82)
1'-29	m/z=735.27($C_{55}H_{33}N_3$=735.87)	1'-30	m/z=660.23($C_{48}H_{28}N_4$=660.76)
1'-31	m/z=660.23($C_{48}H_{28}N_4$=660.70)	1'-32	m/z=812.29($C_{60}H_{36}N_4$=812.95)
1'-33	m/z=836.29($C_{62}H_{36}N_4$=836.98)	1'-34	m/z=772.36($C_{56}H_{44}N_4$=772.98)
1'-35	m/z=576.20($C_{40}H_{24}N_4O$=576.64)	1'-36	m/z=593.17($C_{39}H_{23}N_5S$=593.70)
1'-37	m/z=730.31($C_{53}H_{38}N_4$=730.90)	1'-38	m/z=752.29($C_{55}H_{36}N_4$=752.90)
1'-39	m/z=774.28($C_{57}H_{34}N_4$=774.91)	1'-40	m/z=676.36($C_{48}H_{44}N_4$=676.89)
1'-41	m/z=626.21($C_{44}H_{26}N_4O$=626.70)	1'-42	m/z=643.18($C_{43}H_{25}N_5S$=643.76)
2'-1	m/z=537.20($C_{37}H_{23}N_5$=537.61)	2'-2	m/z=562.19($C_{38}H_{22}N_6$=562.62)
2'-3	m/z=789.29($C_{57}H_{35}N_5$=789.92)	2'-4	m/z=649.32($C_{45}H_{39}N_5$=649.82)
2'-5	m/z=731.30($C_{52}H_{37}N_5$=731.88)	2'-6	m/z=901.23($C_{61}H_{35}N_5S_2$=902.09)
2'-7	m/z=869.28($C_{61}H_{35}N_5O_2$=869.96)	2'-8	m/z=638.22($C_{44}H_{26}N_6$=638.72)
2'-9	m/z=537.20($C_{37}H_{23}N_5$=537.61)	2'-10	m/z=638.22($C_{44}H_{26}N_6$=638.72)
2'-11	m/z=794.32($C_{56}H_{38}N_6$=794.94)	2'-12	m/z=742.21($C_{50}H_{26}N_6O_2$=742.78)
2'-13	m/z=638.23($C_{45}H_{26}DN_5$=638.74)	2'-14	m/z=689.26($C_{49}H_{31}N_5$=689.80)
2'-15	m/z=793.27($C_{53}H_{31}N_9$=793.87)	2'-16	m/z=622.21($C_{40}H_{26}N_6O_2$=622.67)
2'-17	m/z=1148.43($C_{82}H_{52}N_8$=1149.34)	2'-18	m/z=637.23($C_{45}H_{27}N_5$=637.73)
2'-19	m/z=1351.53($C_{99}H_{65}N_7$=1352.62)	2'-20	m/z=662.22($C_{46}H_{26}N_6$=662.74)
2'-21	m/z=662.22($C_{46}H_{26}N_6$=662.74)	2'-22	m/z=762.25($C_{54}H_{30}N_6$=762.86)
2'-23	m/z=712.24($C_{50}H_{28}N_6$=712.80)	2'-24	m/z=662.22($C_{46}H_{26}N_6$=662.74)
2'-25	m/z=661.23($C_{47}H_{27}N_5$=661.75)	2'-26	m/z=715.27($C_{51}H_{33}N_5$=715.84)
2'-27	m/z=587.21($C_{41}H_{25}N_5$=587.67)	2'-28	m/z=679.37($C_{47}H_{45}N_5$=679.89)
3'-1	m/z=539.24($C_{39}H_{29}N_3$=539.67)	3'-2	m/z=639.27($C_{47}H_{33}N_3$=639.79)
3'-3	m/z=771.36($C_{57}H_{45}N_3$=771.99)	3'-4	m/z=791.33($C_{59}H_{41}N_3$=791.98)
3'-5	m/z=691.30($C_{51}H_{37}N_3$=691.86)	3'-6	m/z=923.42($C_{69}H_{53}N_3$=924.18)
3'-7	m/z=843.36($C_{63}H_{45}N_3$=844.05)	3'-8	m/z=903.27($C_{63}H_{41}N_3S_2$=904.15)
3'-9	m/z=843.36($C_{63}H_{45}N_3$=844.05)	3'-10	m/z=843.36($C_{63}H_{45}N_3$=844.05)
3'-11	m/z=619.30($C_{45}H_{37}N_3$=619.80)	3'-12	m/z=803.42($C_{59}H_{53}N_3$=804.07)
3'-13	m/z=751.32($C_{53}H_{41}N_3O_2$=751.91)	3'-14	m/z=791.33($C_{59}H_{41}N_3$=791.98)
3'-15	m/z=693.29($C_{49}H_{35}N_5$=693.84)	3'-16	m/z=719.26($C_{51}H_{33}N_3O_2$=719.83)
3'-17	m/z=920.34($C_{64}H_{40}N_8$=921.06)	3'-18	m/z=690.28($C_{50}H_{34}N_4$=690.83)
3'-19	m/z=804.33($C_{59}H_{40}N_4$=804.98)	3'-20	m/z=716.29($C_{52}H_{36}N_4$=716.87)

[0274]

3'-21	m/z=752.39($C_{54}H_{48}N_4$=752.99)	3'-22	m/z=772.36($C_{56}H_{44}N_4$=772.98)
3'-23	m/z=720.23($C_{50}H_{32}N_4S$=720.88)	3'-24	m/z=764.29($C_{56}H_{36}N_4$=764.91)
3'-25	m/z=790.31($C_{58}H_{38}N_4$=790.95)	3'-26	m/z=820.36($C_{60}H_{44}N_4$=821.02)
3'-27	m/z=566.25($C_{40}H_{30}N_4$=566.69)	3'-28	m/z=678.37($C_{48}H_{46}N_4$=678.91)
3'-29	m/z=692.29($C_{50}H_{36}N_4$=692.85)	4'-1	m/z=435.17($C_{31}H_{21}N_3$=435.52)
4'-2	m/z=739.30($C_{55}H_{37}N_3$=739.90)	4'-3	m/z=667.30($C_{49}H_{37}N_3$=667.84)
4'-4	m/z=535.20($C_{39}H_{25}N_3$=535.64)	4'-5	m/z=587.24($C_{43}H_{29}N_3$=587.71)
4'-6	m/z=739.30($C_{55}H_{37}N_3$=739.90)	4'-7	m/z=643.30($C_{47}H_{37}N_3$=643.82)
4'-8	m/z=635.24($C_{47}H_{29}N_3$=635.75)	4'-9	m/z=535.20($C_{39}H_{25}N_3$=535.64)
4'-10	m/z=635.24($C_{47}H_{29}N_3$=635.75)	4'-11	m/z=839.33($C_{63}H_{41}N_3$=840.02)
4'-12	m/z=991.39($C_{75}H_{49}N_3$=992.21)	4'-13	m/z=939.36($C_{71}H_{45}N_3$=940.14)
4'-14	m/z=895.39($C_{67}H_{49}N_3$=896.13)	4'-15	m/z=959.37($C_{67}H_{49}N_3O_4$=960.12)
4'-16	m/z=911.29($C_{63}H_{37}F_4N_3$=911.98)	4'-17	m/z=743.28($C_{51}H_{33}N_7$=743.85)
4'-18	m/z=895.34($C_{63}H_{41}N_7$=896.05)	4'-19	m/z=536.20($C_{38}H_{24}N_4$=536.62)
4'-20	m/z=612.23($C_{44}H_{28}N_4$=612.72)	4'-21	m/z=566.16($C_{38}H_{22}N_4S$=566.67)
4'-22	m/z=682.22($C_{47}H_{30}N_4S$=682.83)	4'-23	m/z=656.17($C_{44}H_{24}N_4OS$=656.75)
4'-24	m/z=713.28($C_{53}H_{35}N_3$=713.87)	4'-25	m/z=702.37($C_{50}H_{46}N_4$=702.93)
4'-26	m/z=564.23($C_{40}H_{28}N_4$=564.68)	4'-27	m/z=614.25($C_{44}H_{30}N_4$=614.74)
4'-28	m/z=614.25($C_{44}H_{30}N_4$=614.74)	4'-29	m/z=664.26($C_{48}H_{32}N_4$=664.79)
4'-30	m/z=614.25($C_{44}H_{30}N_4$=614.74)	5'-1	m/z=543.27($C_{39}H_{33}N_3$=543.70)
5'-2	m/z=775.39($C_{57}H_{49}N_3$=776.02)	5'-3	m/z=643.30($C_{47}H_{37}N_3$=643.82)
5'-4	m/z=695.33($C_{51}H_{41}N_3$=695.89)	5'-5	m/z=695.33($C_{51}H_{41}N_3$=695.89)
5'-6	m/z=743.33($C_{55}H_{41}N_3$=743.93)	5'-7	m/z=543.27($C_{39}H_{33}N_3$=543.70)
5'-8	m/z=723.29($C_{51}H_{37}N_3O_2$=723.86)	5'-9	m/z=643.30($C_{47}H_{37}N_3$=643.82)
5'-10	m/z=843.33($C_{55}H_{41}N_3$=743.93)	5'-11	m/z=795.36($C_{59}H_{45}N_3$=796.01)
5'-12	m/z=655.39($C_{47}H_{49}N_3$=655.91)	5'-13	m/z=767.52($C_{55}H_{65}N_3$=768.12)
5'-14	m/z=921.57($C_{65}H_{71}N_5$=922.29)	5'-15	m/z=644.29($C_{46}H_{36}N_4$=644.80)
5'-16	m/z=720.33($C_{52}H_{40}N_4$=720.90)	5'-17	m/z=674.25($C_{46}H_{34}N_4S$=674.85)
5'-18	m/z=790.31($C_{55}H_{42}N_4S$=791.01)	5'-19	m/z=764.26($C_{52}H_{36}N_4OS$=764.93)
5'-20	m/z=669.31($C_{49}H_{39}N_3$=669.85)	5'-21	m/z=736.45($C_{52}H_{56}N_4$=737.03)
5'-22	m/z=710.40($C_{49}H_{50}N_4O$=710.95)	5'-23	m/z=730.40($C_{52}H_{50}N_4$=730.98)
5'-24	m/z=984.51($C_{72}H_{64}N_4$=985.31)		

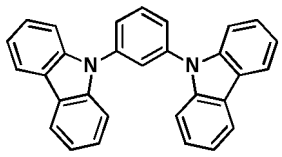
[0275]

[0276] **유기전기소자의 제조평가**

[0277] **[실시예 1] 유기전기발광소자의 제작 및 시험 (지연형광)**

[0278] 합성을 통해 얻은 화합물을 발광층의 도펀트 물질로 사용하여 통상적인 방법에 따라 유기전계 발광소자를 제작하였다. 먼저, 유리 기판에 형성된 ITO층 층(양극) 위에 우선 정공 주입층으로서 N^1-(naphthalen-2-yl)-N^4,N^4-bis(4-(naphthalen-2-yl(phenyl)amino)phenyl)-N1-phenylbenzene-1,4-diamine (2-TNATA로 약기함) 막을 진공증착하여 60 nm 두께로 형성하였다. 이어서, 이 막 상에 정공수송 화합물로서 4,4-비스[N-(1-나프틸)-N-페닐아미노]비페닐 (이하 -NPD로 약기함)을 20 nm 두께로 진공증착하여 정공수송층을 형성하였다. 정공수송층 상부에 6 중량%의 발명화합물 1'-1과 4,4-비스[N-(1-나프틸)-N-페닐아미노]비페닐(mCP)을 진공증착함으로써 상기 정공수송층 위에 30nm 두께의 발광층을 증착하였다. 정공 저지층으로 (1,1'-비스페닐)-4-올레이토)비스(2-메틸-8-퀴놀린올레이토)알루미늄(이하 BAlq로 약기함)을 10 nm 두께로 진공증착하고, 전자수송층으로 트리스(8-퀴놀리놀)알루미늄(이하 Alq3로 약칭함)을 40 nm 두께로 성막하였다. 이후, 할로젠화 알칼리 금속인 LiF를 0.2 nm 두께로 증착하고, 이어서 Al을 150 nm의 두께로 증착하여 이 Al/LiF를 음극으로 사용함으로써 유기 전계 발광소자를 제조하였다.

[0279] [mCP]

[0280] 

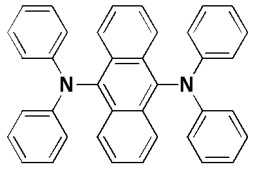
[0281] **[실시예 2] 내지 [실시예 38]**

[0282] 본 발명의 화합물 1'-1 대신 하기 표 3에 기재된 본 발명의 화합물 1'-2 내지 5'-13을 사용한 것을 제외하고는 상기 실시예 1과 동일한 방법으로 유기전기발광소자를 제작하였다.

[0283] **[비교예]**

[0284] 본 발명의 화합물 1'-1 대신에 하기 비교화합물 1을 사용한 것을 제외하고는 상기 실시예 1과 동일한 방법으로 유기전기발광소자를 제작하였다.

[0285] <비교화합물 1>

[0286] 

[0287] 이와 같이 제조된 실시예 및 비교예 유기전기발광소자들에 순바이어스 직류전압을 가하여 포토리서치(photoresearch)사의 PR-650으로 전기발광(EL) 특성을 측정하였으며, 그 측정 결과 500cd/m^2 기준 휘도에서 맥사이언스사에서 제조된 수명 측정 장비를 통해 T90 수명을 측정하였다. 하기 표 3은 소자제작 및 평가한 결과를 나타낸다.

[0288] [표 3]

	화합물	구동 전압	전류 (mA/cm2)	휘도 (cd/m2)	효율 (cd/A)	T (90)	발광색
비교예 1	비교화합물 1	5.6	9.8	500	5.1	79.2	청색
실시예(1)	화합물(1'-1)	5.0	7.3	500	6.8	102.6	청색
실시예(2)	화합물(1'-2)	5.1	7.9	500	6.3	97.1	청색
실시예(3)	화합물(1'-3)	5.0	7.0	500	7.1	102.2	청색
실시예(4)	화합물(1'-4)	5.0	7.2	500	6.9	101.6	청색
실시예(5)	화합물(1'-9)	5.1	7.4	500	6.8	99.6	청색
실시예(6)	화합물(1'-12)	5.0	7.6	500	6.6	99.6	청색
실시예(7)	화합물(1'-18)	5.0	8.3	500	6.0	95.2	청색
실시예(8)	화합물(1'-23)	5.0	7.3	500	6.9	104.5	청색
실시예(9)	화합물(1'-26)	5.1	7.3	500	6.9	105.5	청색
실시예(10)	화합물(1'-28)	5.0	8.1	500	6.2	99.2	청색
실시예(11)	화합물(1'-31)	5.0	7.9	500	6.4	98.5	청색
실시예(12)	화합물(2'-1)	5.0	6.8	500	7.3	105.5	청색
실시예(13)	화합물(2'-2)	5.1	7.2	500	7.0	97.5	청색
실시예(14)	화합물(2'-4)	5.1	6.3	500	7.9	109.4	청색
실시예(15)	화합물(2'-7)	5.1	6.6	500	7.6	107.5	청색
실시예(16)	화합물(2'-9)	5.0	7.0	500	7.2	100.3	청색
실시예(17)	화합물(2'-12)	5.0	7.6	500	6.6	96.5	청색
실시예(18)	화합물(2'-16)	5.0	7.2	500	7.0	99.6	청색
실시예(19)	화합물(2'-18)	5.0	6.8	500	7.3	104.8	청색
실시예(20)	화합물(2'-24)	5.1	7.2	500	6.9	99.8	청색
실시예(21)	화합물(3'-1)	5.0	7.5	500	6.7	100.7	청색
실시예(22)	화합물(3'-5)	5.0	7.4	500	6.8	101.4	청색
실시예(23)	화합물(3'-6)	5.0	7.7	500	6.5	99.8	청색
실시예(24)	화합물(3'-16)	5.0	7.8	500	6.4	97.5	청색
실시예(25)	화합물(3'-21)	5.1	8.1	500	6.2	95.6	청색
실시예(26)	화합물(4'-1)	5.0	7.8	500	6.5	99.3	청색
실시예(27)	화합물(4'-2)	5.1	7.6	500	6.6	100.5	청색
실시예(28)	화합물(4'-6)	5.1	8.1	500	6.2	97.9	청색
실시예(29)	화합물(4'-9)	5.1	7.7	500	6.5	100.6	청색
실시예(30)	화합물(4'-10)	5.0	7.8	500	6.4	98.4	청색
실시예(31)	화합물(4'-18)	5.1	8.1	500	6.2	96.8	청색
실시예(32)	화합물(4'-22)	5.1	8.7	500	5.7	90.1	청색
실시예(33)	화합물(5'-1)	5.0	8.1	500	6.1	96.7	청색
실시예(34)	화합물(5'-4)	5.1	8.4	500	5.9	95.5	청색
실시예(35)	화합물(5'-7)	5.0	8.4	500	6.0	93.1	청색
실시예(36)	화합물(5'-9)	5.1	8.2	500	6.1	96.3	청색
실시예(37)	화합물(5'-12)	5.0	8.1	500	6.2	94.5	청색
실시예(38)	화합물(5'-13)	5.1	8.5	500	5.9	96.4	청색

[0289]

[0290] 상기 표 3의 결과로부터 알 수 있듯이, 본 발명의 유기전기발광소자용 재료를 발광층 재료로 사용한 유기전기발광소자는 발광효율, 구동전압 및 수명을 현저히 개선시킬 수 있다.

[0291] 다시 말해, 안트라센 코어에 아민기가 두 개 치환되어있는 일반 형광 도펀트인 비교화합물 1보다 두개의 Donor unit이 파이 결합을 중심으로 cis type으로 연결되고 acceptor unit으로는 cyano group을 한 개 이상 포함하는 발명화합물이 낮은 구동전압, 높은 효율 및 장수명을 나타내는 것을 확인할 수 있다. 특히 cyano group을 두 개 포함하는 화합물보다 한 개의 cyano group과 한 개의 수소가 치환된 화합물이 blue shift 되는 양상을 보였다.

[0292] 또한 효율의 경우, 본 발명화합물의 2차 치환기로 tert-buthyl과 같은 bulky한 치환기가 치환되면서, 분자들의 서로 엉겨붙는 입체장애를 최소화시켜 호스트와 도펀트 간의 exciton의 이동을 원활하게 만들어 효율이 증가되는 것으로 판단된다.

[0293] 비교화합물 1과 같이 기존의 형광재료가 가지는 외부양자효율의 문제점을 해결할 수 있는 본 발명의 열 활성화 지연형광(Thermally Activated Delayed Fluorescence, TADF) 재료는 분자 내 electron donor unit과 electron acceptor unit이 적절하게 조합되어 exciplex를 형성시키기 때문에 고효율과 장수명 그리고 낮은 구동전압의 결

과를 나타낸다고 설명할 수 있다.

[0294] 즉 이는 동일한 코어일 지라도 치환기에 따라서 에너지 준위가 변화 되고 소자의 특성 자체가 현저히 달라질 수 있음을 시사하고 있다. 아울러, 전술한 소자 제작의 평가 결과에서는 발광층 관점에서 소자 특성을 설명하였으나, 통상적으로 발광층으로 사용되는 재료들은 전술한 전자수송층, 전자주입층, 정공주입층, 정공수송층 및 발광보조층 등 유기전기소자의 유기물층으로 단일 또는 다른 재료와 혼합으로 사용될 수 있다. 따라서 전술한 이유로 본 발명의 화합물은 발광층 이외에 다른 유기물층, 예를 들어 전자수송층, 전자주입층, 정공주입층, 정공수송층 및 발광보조층 등에 단일 또는 다른 재료와 혼합으로 사용될 수 있다.

[0295] 이상의 설명은 본 발명을 예시적으로 설명한 것에 불과한 것으로, 본 발명에 속하는 기술분야에서 통상의 지식을 가지는 자라면 본 발명의 본질적인 특성에서 벗어나지 않는 범위에서 다양한 변형이 가능할 것이다. 따라서, 본 명세서에 개시된 실시예들은 본 발명을 한정하기 위한 것이 아니라 설명하기 위한 것이고, 이러한 실시예에 의하여 본 발명의 사상과 범위가 한정되는 것은 아니다. 본 발명의 보호범위는 아래의 청구범위에 의하여 해석되어야 하며, 그와 동등한 범위 내에 모든 기술은 본 발명의 권리범위에 포함하는 것으로 해석되어야 할 것이다.

부호의 설명

[0296] 100: 유기전기소자 110: 기판

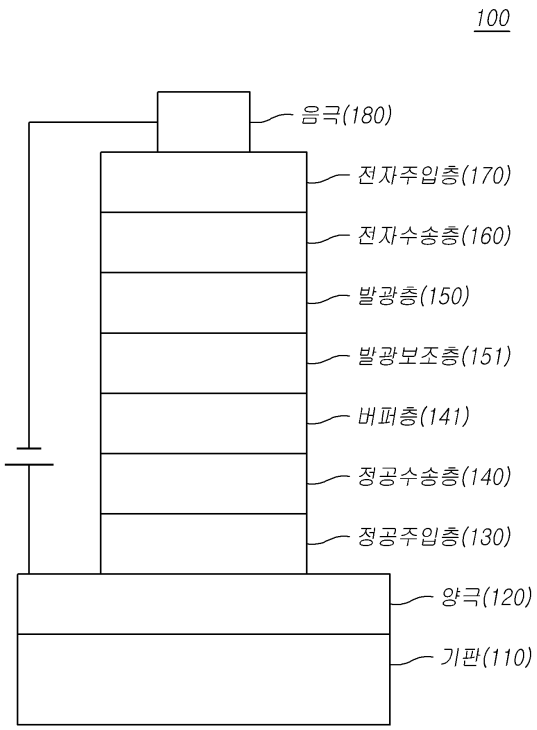
120: 제 1전극 130: 정공주입층

140: 정공수송층 141: 버퍼층

150: 발광층 151: 발광보조층

160: 전자수송층 170: 전자주입층

180: 제 2전극

도면

도면1