(12) 특허협력조약에 의하여 공개된 국제출원

(19) 세계지식재산권기구
국제사무국

(43) 국제공개일
2020 년 7 월 2 일 (02.07.2020)

WIPO | PCT

(10) 국제공개번호
WO 2020/138732 A1

(51) 국제특허분류:
C07D 411/12 (2006.01) *C07D 411/14* (2006.01)
C07D 407/12 (2006.01) *C07D 487/04* (2006.01)
C07D 409/12 (2006.01) *H01L 51/00* (2006.01)
C07D 409/14 (2006.01) *H01L 51/50* (2006.01)

(21) 국제출원번호: PCT/KR2019/016421

(22) 국제출원일: 2019 년 11 월 27 일 (27.11.2019)

(25) 출원언어: 한국어

(26) 공개언어: 한국어

(30) 우선권정보:
10-2018-0169810 2018 년 12 월 26 일 (26.12.2018) KR

(71) 출원인: 덕산네오룩스 주식회사 (**DUK SAN NEOLUX CO.,LTD.**) [KR/KR]; 31027 충청남도 천안시 서북구 입장면 쑥골길 21-32, Chungcheongnam-do (KR).

(72) 발명자: 오현지 (**OH, Hyun Ji**); 31027 충청남도 천안시 서북구 입장면 쑥골길 21-32, Chungcheongnam-do (KR). 문성윤 (**MUN, Soung Yun**); 31027 충청남도 천안시 서북구 입장면 쑥골길 21-32, Chungcheongnam-do (KR). 이선희 (**LEE, Sun Hee**); 31027 충청남도 천안시 서북구 입장면 쑥골길 21-32, Chungcheongnam-do (KR). 이형동 (**LEE, Hyung Dong**); 31027 충청남도 천안시 서북구 입장면 쑥골길 21-32, Chungcheongnam-do (KR). 강병엽 (**KANG, Byoung Yeop**); 31027 충청남도 천안시 서북구 입장면 쑥골길 21-32, Chungcheongnam-do (KR). 권의식 (**KWON, Ui Sik**); 31027 충청남도 천안시 서북구 입장면 쑥골길 21-32, Chungcheongnam-do (KR).

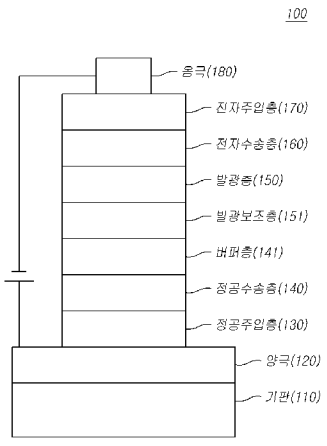
(74) 대리인: 김정은 (**KIM, Jeongeun**); 06235 서울시 강남구 테헤란로 16길 13, 동원빌딩 201호, Seoul (KR).

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

(84) 지정국 (별도의 표시가 없는 한, 가능한 모든 종류의 역내 권리의 보호를 위하여): ARIPO (BW, GH, GM, KE, LR, LS, MW, MZ, NA, RW, SD, SL, ST, SZ, TZ, UG, ZM, ZW), 유라시아 (AM, AZ, BY, KG, KZ, RU, TJ, TM), 유럽 (AL, AT, BE, BG, CH, CY, CZ, DE, DK, EE, ES, FI,

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

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



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

(57) **Abstract:** The present invention provides: a compound represented by chemical formula 1; an organic electric device comprising a first electrode, a second electrode, and an organic material layer between the first electrode and the second electrode; and an electronic apparatus comprising the organic electric device. By including the compound represented by chemical formula 1 in the organic material layer, the driving voltage of the organic electronic element can be lowered and the luminous efficiency and lifespan thereof can be improved.

(57) **요약서:** 본 발명은 화학식 1 로 표시되는 화합물과, 제 1전극, 제 2 전극 및 상기 제 1 전극과 상기 제 2 전극 사이의 유기물층을 포함하는 유기전기소자, 및 상기 유기전기소자를 포함하는 전자장치를 제공한다. 상기 유기물층에 화학식 1 로 표시되는 화합물을 포함함으로써, 유기전기소자의 구동전압을 낮출 수 있고 발광 효율 및 수명을 향상시킬 수 있다.

WO 2020/138732 A1

[다음 쪽 계속]

FR, GB, GR, HR, HU, IE, IS, IT, LT, LU, LV, MC, MK, MT, NL, NO, PL, PT, RO, RS, SE, SI, SK, SM, TR), OAPI (BF, BJ, CF, CG, CI, CM, GA, GN, GQ, GW, KM, ML, MR, NE, SN, TD, TG).

공개:

— 국제조사보고서와 함께 (조약 제21조(3))

명세서

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

기술분야

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

배경기술

[2] 일반적으로 유기 발광 현상이란 유기 물질을 이용하여 전기에너지를 빛 에너지로 전환시켜주는 현상을 말한다. 유기 발광 현상을 이용하는 유기전기소자는 통상 양극과 음극 및 이 사이에 유기물층을 포함하는 구조를 가진다. 여기서 유기물 층은 유기전기소자의 효율과 안정성을 높이기 위하여 각기 다른 물질로 구성된 다층의 구조로 이루어진 경우가 많으며, 예컨대 정공주입층, 정공수송층, 발광층, 전자수송층 및 전자주입층 등으로 이루어질 수 있다.

[3] 유기 전기 발광소자에 있어 가장 문제시되는 것은 수명과 효율인데, 디스플레이가 대면적화되면서 이러한 효율이나 수명 문제는 반드시 해결해야 되는 상황이다.

[4] 효율과 수명, 구동전압 등은 서로 연관이 있으며, 효율이 증가되면 상대적으로 구동전압이 떨어지고, 구동전압이 떨어지면서 구동시 발생되는 주울열(Joule heating)에 의한 유기물질의 결정화가 적어져 결과적으로 수명이 높아지는 경향을 나타낸다.

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

[6] 또한, 최근 유기 전기 발광소자에 있어 정공수송층에서의 발광 문제를 해결하기 위해서는 반드시 정공수송층과 발광층 사이에 발광보조층이 존재하여야 하며, 각각의 발광층(R, G, B)에 따른 서로 다른 발광보조층의 개발이 필요한 시점이다.

[7] 일반적으로 전자수송층에서 발광층으로 전자(electron)가 전달되고 정공(hole)이 정공수송층에서 발광층으로 전달되어 재조합(recombination)에 의해 엑시톤(exciton)이 생성된다.

[8] 하지만, 정공수송층에 사용되는 물질의 경우 낮은 HOMO 값을 가져야 하기 때문에 대부분 낮은 T1 값을 가지며, 이로 인해 발광층에서 생성된 엑시톤(exciton)이 정공수송층으로 넘어가게 되어 결과적으로 발광층 내 전하 불균형(charge unbalance)을 초래하여 정공수송층 계면에서 발광하게 된다.

[9] 정공수송층 계면에서 발광될 경우, 유기전기소자의 색순도 및 효율이 저하되고 수명이 짧아지는 문제점이 발생하게 된다. 따라서 높은 T1 값을 가지며, 정공 수송층 HOMO 에너지 준위와 발광층의 HOMO 에너지 준위 사이의 HOMO 준위를 갖는 발광보조층이 개발이 절실히 요구된다.

[10] 한편, 유기전기소자의 수명단축 원인 중 하나인 양극전극(ITO)으로부터 금속 산화물이 유기층으로 침투확산되는 것을 지연시키면서, 소자 구동시 발생되는 주울열(Joule heating)에 대해서도 안정된 특성, 즉 높은 유리 전이 온도를 갖는 정공 주입층 재료에 대한 개발이 필요하다. 정공수송층 재료의 낮은 유리전이 온도는 소자 구동시, 박막 표면의 균일도를 저하시키는 특성이 있는바, 이는 소자수명에 큰 영향을 미치는 것으로 보고되고 있다. 또한, OLED 소자는 주로 증착 방법에 의해 형성되는데, 증착시 오랫동안 견딜 수 있는 재료, 즉 내열특성이 강한 재료 개발이 필요한 실정이다.

[11] 즉, 유기전기소자가 갖는 우수한 특징들을 충분히 발휘하기 위해서는 소자 내 유기물층을 이루는 물질, 예컨대 정공주입 물질, 정공수송 물질, 발광 물질, 전자수송 물질, 전자주입 물질, 발광보조층 물질 등이 안정하고 효율적인 재료에 의하여 뒷받침되는 것이 선행되어야 하나, 아직까지 안정되고 효율적인 유기전기소자용 유기물층 재료의 개발이 충분히 이루어지지 않은 상태이다. 따라서, 새로운 재료의 개발이 계속 요구되고 있으며, 특히 발광보조층의 재료에 대한 개발이 절실히 요구되고 있다.

발명의 상세한 설명

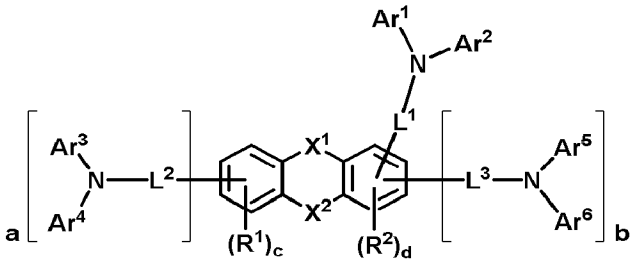
기술적 과제

[12] 본 발명은 소자의 구동전압을 낮추고, 소자의 발광효율 및 수명을 향상시킬 수 있는 화합물, 이를 이용한 유기전기소자 및 그 전자장치를 제공하는 것을 목적으로 한다.

과제 해결 수단

[13] 일 측면에서, 본 발명은 하기 화학식으로 표시되는 화합물을 제공한다.

[14]



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

발명의 효과

[16] 본 발명의 실시예에 따른 화합물을 이용함으로써 소자의 구동전압을 낮출 수 있을 뿐만 아니라, 소자의 발광효율 및 수명을 크게 향상시킬 수 있다.

도면의 간단한 설명

[17] 도 1은 본 발명에 따른 유기전기발광소자의 예시도이다.

[18] 도 2는 본 발명의 일 측면에 따른 화학식을 나타낸다.

[19] [부호의 설명]

[20] 100: 유기전기소자 110: 기판

[21] 120: 제 1전극 130: 정공주입층

[22] 140: 정공수송층 141: 버퍼층

[23] 150: 발광층 151: 발광보조층

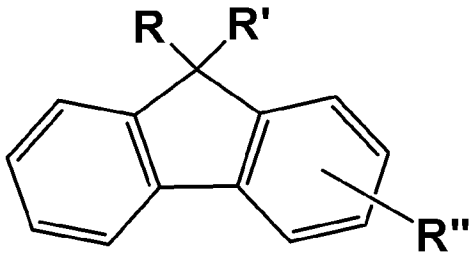
[24] 160: 전자수송층 170: 전자주입층

[25] 180: 제 2전극

발명의 실시를 위한 형태

[26] 본 발명에서 사용된 용어 "아릴기" 및 "아릴렌기"는 다른 설명이 없는 한 각각 6 내지 60의 탄소수를 가지며, 이에 제한되는 것은 아니다. 본 발명에서 아릴기 또는 아릴렌기는 단일고리형, 고리집합체, 접합된 여러 고리계, 스파이로 화합물 등을 포함할 수 있다. 또한, 본 명세서에서 다른 설명이 없는 한 아릴기에는 플루오렌일기가 포함될 수 있고 아릴렌기에는 플루오렌일렌기가 포함될 수 있다.

[27] 본 발명에서 사용된 용어 "플루오렌일기" 또는 "플루오렌일렌기"는 다른 설명이 없는 한 각각 하기 구조에서 R, R' 및 R"이 모두 수소인 1가 또는 2가 작용기를 의미하며, "치환된 플루오렌일기" 또는 "치환된 플루오렌일렌기"는 치환기 R, R', R" 중 적어도 하나가 수소 이외의 치환기인 것을 의미하며, R과 R'이 서로 결합되어 이들이 결합된 탄소와 함께 스파이로 화합물을 형성한 경우를 포함한다.

[28] 

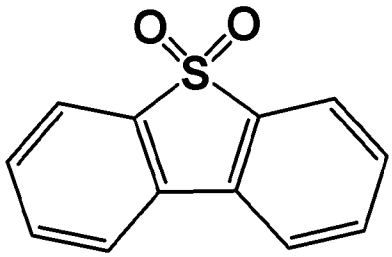
[29] 본 발명에서 사용된 용어 "스파이로 화합물"은 '스파이로 연결'을 가지며, 스파이로 연결은 2개의 고리가 오로지 1개의 원자를 공유함으로써 이루어지는 연결을 의미한다. 이때, 두 고리에 공유된 원자를 '스파이로 원자'라 하며, 한 화합물에 들어 있는 스파이로 원자의 수에 따라 이들을 각각 '모노스파이로-', '다이스파이로-', '트라이스파이로-' 화합물이라 한다.

[30] 본 발명에 사용된 용어 "헤테로고리기"는 "헤테로아릴기" 또는 "헤테로아릴렌기"와 같은 방향족 고리뿐만 아니라 비방향족 고리도 포함하며, 다른 설명이 없는 한 각각 하나 이상의 헤테로원자를 포함하는 탄소수 2 내지

60의 고리를 의미하나 여기에 제한되는 것은 아니다. 본 명세서에서 사용된 용어 "헤테로원자"는 다른 설명이 없는 한 N, O, S, P 또는 Si를 나타내며, 헤테로고리기는 헤테로원자를 포함하는 단일고리형, 고리집합체, 접합된 여러 고리계, 스파이로 화합물 등을 의미한다.

[31] 본 발명에 사용된 용어 "헤테로고리기"는 고리를 형성하는 탄소 대신 하기 화합물과 같이 SO_2, P=O 등과 같은 헤테로원자단을 포함하는 화합물도 포함될 수 있다.

[32]

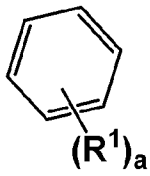


[33] 본 발명에 사용된 용어 "지방족고리기"는 방향족탄화수소를 제외한 고리형 탄화수소를 의미하며, 단일고리형, 고리집합체, 접합된 여러 고리계, 스파이로 화합물 등을 포함하며, 다른 설명이 없는 한 탄소수 3 내지 60의 고리를 의미하나 여기에 제한되는 것은 아니다. 예컨대, 방향족고리인 벤젠과 비방향족고리인 사이클로헥산이 융합된 경우에도 지방족고리에 해당한다.

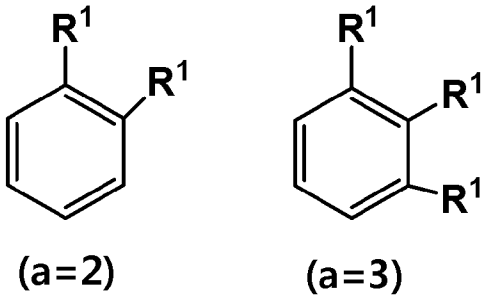
[34] 본 명세서에서 각 기호 및 그 치환기의 예로 예시되는 아릴기, 아릴렌기, 헤테로고리기 등에 해당하는 '기 이름'은 '가수를 반영한 기의 이름'을 기재할 수도 있지만, '모체화합물 명칭'으로 기재할 수도 있다. 예컨대, 아릴기의 일종인 '페난트렌'의 경우, 1가의 '기'는 '페난트릴'로 2가의 기는 '페난트릴렌' 등과 같이 가수를 구분하여 기의 이름을 기재할 수도 있지만, 가수와 상관없이 모체 화합물 명칭인 '페난트렌'으로 기재할 수도 있다. 유사하게, 피리미딘의 경우에도, 가수와 상관없이 '피리미딘'으로 기재하거나, 1가인 경우에는 피리미딘일기, 2가의 경우에는 피리미딘일렌 등과 같이 해당 가수의 '기의 이름'으로 기재할 수도 있다.

[35] 또한, 본 명세서에서는 화합물 명칭이나 치환기 명칭을 기재함에 있어 위치를 표시하는 숫자나 알파벳 등은 생략할 수도 있다. 예컨대, 피리도[4,3-d]피리미딘을 피리도피리미딘으로, 벤조퓨로[2,3-d]피리미딘을 벤조퓨로피리미딘으로, 9,9-다이메틸-9H-플루오렌을 다이메틸플루오렌 등과 같이 기재할 수 있다. 따라서, 벤조[g]퀴녹살린이나 벤조[f]퀴녹살린을 모두 벤조퀴녹살린이라고 기재할 수 있다.

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

[37] 

[38] 여기서, a가 0의 정수인 경우 치환기 R^1은 부존재하는 것을 의미하는데, 즉 a가 0인 경우는 벤젠고리를 형성하는 탄소에 모두 수소가 결합된 것을 의미하며, 이때 탄소에 결합된 수소의 표시를 생략하고 화학식이나 화합물을 기재할 수 있다. 또한, a가 1의 정수인 경우 하나의 치환기 R^1은 벤젠 고리를 형성하는 탄소 중 어느 하나의 탄소에 결합하며, a가 2 또는 3의 정수인 경우 예컨대 아래와 같이 결합할 수 있고, a가 4 내지 6의 정수인 경우에도 이와 유사한 방식으로 벤젠 고리의 탄소에 결합하며, a가 2 이상의 정수인 경우 R^1은 서로 같거나 상이할 수 있다.

[39] 

[40] 또한, 본 명세서에서 다른 설명이 없는 한, 이웃한 기끼리 서로 결합하여 형성한 고리는 C_6~C_{60}의 방향족고리기; 플루오렌일기; O, N, S, Si 및 P 중 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C_2~C_{60}의 헤테로고리기; C_3~C_{60}의 지방족고리기; C_3~C_{60}의 지방족고리와 C_6~C_{60}의 방향족고리의 융합고리기; 및 이들의 조합으로 이루어진 군에서 선택될 수 있다.

[41] 이하, 본 발명의 화합물이 포함된 유기전기소자의 적층구조에 대하여 도 1을 참조하여 설명한다.

[42] 본 발명을 설명함에 있어, 관련된 공지 구성 또는 기능에 대한 구체적인 설명이 본 발명의 요지를 흐릴 수 있다고 판단되는 경우에는 그 상세한 설명은 생략한다.

[43] 또한, 층, 막, 영역, 판 등의 구성 요소가 다른 구성 요소 "위에" 또는 "상에" 있다고 하는 경우, 이는 다른 구성 요소 "바로 위에" 있는 경우뿐만 아니라 그 중간에 또 다른 구성 요소가 있는 경우도 포함할 수 있다고 이해되어야 할 것이다. 반대로, 어떤 구성 요소가 다른 부분 "바로 위에" 있다고 하는 경우에는 중간에 또 다른 부분이 없는 것을 뜻한다고 이해되어야 할 것이다.

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

[45] 도 1을 참조하면, 본 발명의 일 실시예에 따른 유기전기소자(100)는 기판(110) 상에 형성된 제 1전극(120), 제 2전극(180), 및 제 1전극(120)과 제 2전극(180) 사이에 본 발명에 따른 화합물을 포함하는 유기물층을 포함한다. 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.

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

[47] 또한, 미도시하였지만, 본 발명의 일 실시예에 따른 유기전기소자는 보호층 또는 광효율 개선층을 더 포함할 수 있다. 이러한 광효율 개선층은 제 1전극의 양면 중 유기물층과 접하지 않는 면 또는 제 2전극의 양면 중 유기물층과 접하지 않는 면에 형성될 수 있다.

[48] 상기 유기물층에 적용되는 본 발명의 일 실시예에 따른 화합물은 정공주입층(130), 정공수송층(140), 발광보조층(151), 전자수송보조층, 전자수송층(160), 전자주입층(170), 발광층(150)의 호스트 또는 도펀트, 또는 광효율 개선층의 재료로 사용될 수 있을 것이나, 바람직하게는 본 발명의 화학식 1에 따른 화합물은 발발광보조층(151)의 재료로 사용된다.

[49] 한편, 동일유사한 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 조합에 대한 연구가 필요하며, 특히 각 유기물층 간의 에너지 준위 및 T_1 값, 물질의 고유특성(이동도, 계면특성 등) 등이 최적의 조합을 이루었을 때 긴 수명과 높은 효율을 동시에 달성할 수 있다.

[50] 따라서, 본 발명에서는 화학식 1로 표시되는 화합물을 발광보조층(151)의 재료로 사용함으로써, 각 유기물층 간의 에너지 레벨 및 T_1 값, 물질의 고유특성(이동도, 계면특성 등) 등을 최적화하여 유기전기소자의 수명 및 효율을 동시에 향상시킬 수 있다.

[51] 본 발명의 일 실시예에 따른 유기전기발광소자는 다양한 증착법(deposition)을 이용하여 제조될 수 있을 것이다. PVD나 CVD 등의 증착 방법을 사용하여 제조될 수 있는데, 예컨대, 기판 상에 금속 또는 전도성을 가지는 금속 산화물 또는 이들의 합금을 증착시켜 양극(120)을 형성하고, 그 위에 정공주입층(130), 정공수송층(140), 발광층(150), 전자수송층(160) 및 전자주입층(170)을 포함하는 유기물층을 형성한 후, 그 위에 음극(180)으로 사용할 수 있는 물질을 증착시킴으로써 제조될 수 있다. 또한, 정공수송층(140)과 발광층(150) 사이에 발광보조층(151)을, 발광층(150)과 전자수송층(160) 사이에 전자수송보조층을 추가로 더 형성할 수 있다.

[52] 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.

[53] 본 발명의 일 실시예에 따른 유기전기소자는 사용되는 재료에 따라 전면 발광형, 후면 발광형 또는 양면 발광형일 수 있다.

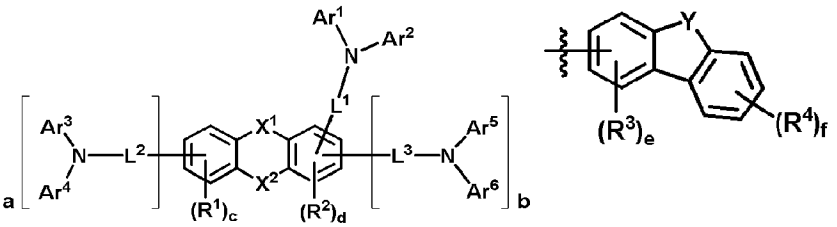
[54] 또한, 본 발명의 일 실시예에 따른 유기전기소자는 유기전기발광소자, 유기태양전지, 유기감광체, 유기트랜지스터, 단색 조명용 소자 및 퀀텀닷 디스플레이용 소자로 이루어진 군에서 선택될 수 있다.

[55] 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.

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

[57] 본 발명의 일 측면에 따른 화합물은 하기 화학식 1로 표시된다.

[58] <화학식 1> <화학식 1-1>

[59] 

[60] 상기 화학식 1에서, 각 기호는 아래와 같이 정의될 수 있다.

[61] X^1 및 X^2는 서로 독립적으로 O 또는 S이다.

[62] a 및 b는 각각 0 또는 1의 정수이고, a와 b 중 적어도 하나는 1이다.

[63] Ar^1 내지 Ar^6은 서로 독립적으로 C_6~C_{60}의 아릴기; 플루오렌일기; O, N, S, Si 및 P 중 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C_2~C_{60}의 헤테로고리기; C_3~C_{60}의 지방족고리기; C_1~C_{60}의 알킬기; C_2~C_{20}의 알켄일기; C_2~C_{20}의 알킨일기; C_1~C_{30}의 알콕실기; 및 C_6~C_{30}의 아릴옥시기로 이루어진 군에서 선택되며, 단, Ar^1 내지 Ar^6 중 적어도 하나는 상기 화학식 1-1이다. 하기에서 정의된 것과 같이, 화학식 1-1에서, Y는 C(R')(R''), N(R'), O 또는 S이므로, Ar^1 내지 Ar^6 중 적어도 하나는 플루오렌일기 또는 헤테로고리기이다. 즉, 상기 화학식 1은 적어도 하나의 플루오렌일기를 포함하거나, N, O 또는 S를 포함하는 헤테로고리기를 포함한다.

[64] Ar^1 내지 Ar^6이 아릴기인 경우, 바람직하게는 C_6~C_{30}의 아릴기, 더욱 바람직하게는 C_6~C_{18}의 아릴기, 예컨대 페닐, 바이페닐, 나프틸, 터페닐, 페난트렌, 파이렌 등일 수 있다.

[65] Ar^1 내지 Ar^6이 헤테로고리기인 경우, 바람직하게는 C_2~C_{30}의 헤테로고리기, 더욱 바람직하게는 C_2~C_{22}의 헤테로고리기, 예컨대 피리딘, 다이벤조싸이오펜, 벤조나프토싸이오펜, 다이벤조퓨란, 벤조나프토퓨란, 카바졸, 페닐카바졸,

벤조카바졸, 벤조페닐카바졸, 퀴나졸린, 인돌로피리딘, 나프틸카바졸, 싸이안트렌, 페노싸이아진 등일 수 있다.

[66] Ar^1 내지 Ar^6이 플루오렌일기인 경우, 9,9-다이메틸-9*H*-플루오렌, 9,9-다이페닐-9*H*-플루오렌일기, 9,9'-스파이로바이플루오렌 등일 수 있다.

[67] L^1 내지 L^3은 서로 독립적으로 단일결합; C_6~C_{60}의 아릴렌기; 플루오렌일렌기; C_3~C_{60}의 지방족고리기; O, N, S, Si 및 P 중 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C_2~C_{60}의 헤테로고리기; 및 이들의 조합으로 이루어진 군에서 선택되며,

[68] L^1 내지 L^3이 아릴렌기인 경우, 바람직하게는 C_6~C_{30}의 아릴렌기, 더욱 바람직하게는 C_6~C_{14}의 아릴렌기, 예컨대 페닐렌, 바이페닐, 나프탈렌, 페난트렌 등일 수 있다.

[69] L^1 내지 L^3이 헤테로고리기인 경우, 바람직하게는 C_2~C_{30}의 헤테로고리기, 더욱 바람직하게는 C_2~C_{18}의 헤테로고리기, 예컨대 피리딘, 퀴나졸린, 퀴놀린, 카바졸, 페닐카바졸, 다이벤조싸이오펜, 다이벤조퓨란 등일 수 있다.

[70] R^1 내지 R^4는 서로 독립적으로 수소; 중수소, 삼중수소; 할로겐; 시아노기; 니트로기; C_6~C_{60}의 아릴기; 플루오렌일기; O, N, S, Si 및 P 중 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C_2~C_{60}의 헤테로고리기; C_3~C_{60}의 지방족고리와 C_6~C_{60}의 방향족고리의 융합고리기; C_1~C_{50}의 알킬기; C_2~C_{20}의 알켄일기; C_2~C_{20}의 알킨일기; C_1~C_{30}의 알콕실기; C_6~C_{30}의 아릴옥시기; 및 -L'-$N(R_a)(R_b)$로 이루어진 군에서 선택되고, 이웃한 기끼리 서로 결합하여 고리를 형성할 수 있다.

[71] c는 0~4의 정수, d는 0~3의 정수, e는 0~3의 정수, f는 0~4의 정수이고, 이들 각각이 2 이상의 정수인 경우 복수의 R^1 각각, 복수의 R^2 각각, 복수의 R^3 각각, 복수의 R^4 각각은 서로 같거나 상이하다.

[72] R^1 내지 R^4가 아릴기인 경우, 바람직하게는 C_6~C_{30}의 아릴기, 더욱 바람직하게는 C_6~C_{18}의 아릴기, 예컨대 페닐, 바이페닐, 나프틸, 터페닐 등일 수 있다.

[73] 이웃한 R^1끼리, 이웃한 R^2끼리, 이웃한 R^3끼리 또는 이웃한 R^4끼리 서로 결합하여 형성된 고리는 C_6~C_{60}의 방향족고리기; 플루오렌일기; O, N, S, Si 및 P 중 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C_2~C_{60}의 헤테로고리기; C_3~C_{60}의 지방족고리기; 또는 C_3~C_{60}의 지방족고리와 C_6~C_{60}의 방향족고리의 융합고리기 등일 수 있다. 이웃한 기끼리 서로 결합하여 방향족고리를 형성할 경우, 바람직하게는 C_6~C_{30}의 방향족고리, 더욱 바람직하게는 C_6~C_{14}의 방향족고리, 예컨대 벤젠, 나프탈렌, 페난트렌 등과 같과 같은 방향족고리를 형성할 수 있다.

[74] 화학식 1-1에서, Y는 C(R')(R"), N(R'), O 또는 S이고, 여기서 R' 및 R"는 서로 독립적으로 수소; C_6~C_{60}의 아릴기; 플루오렌일기; C_3~C_{60}의 헤테로고리기; C_1~C_{50}의 알킬기; C_2~C_{60}의 알켄일기; 및 C_6~C_{60}의 아릴옥시기;로 이루어진 군에서 선택되며, R'과 R"은 서로 결합하여 고리를 형성할 수 있다. 단, a가 1이고, Y가 C(R')(R")인 경우, R' 및 R"에서 알킬기는 제외된다.

[75] 상기 L'은 단일결합; C_6~C_{60}의 아릴렌기; 플루오렌일렌기; C_3~C_{60}의

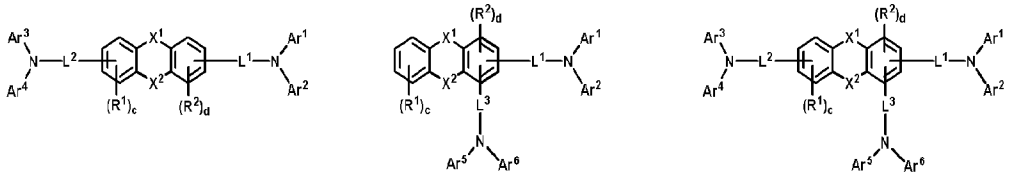
지방족고리기; O, N, S, Si 및 P 중 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C_2~C_{60}의 헤테로고리기; 및 이들의 조합으로 이루어진 군에서 선택된다.

[76] 상기 R_a 및 R_b는 서로 독립적으로 C_6~C_{60}의 아릴기; 플루오렌일기; C_3~C_{60}의 지방족고리기; 및 O, N, S, Si 및 P 중 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C_2~C_{60}의 헤테로고리기로 이루어진 군에서 선택된다.

[77] 바람직하게는, 상기 화학식 1은 하기 화학식 2 내지 화학식 13 중에서 하나로 표시될 수 있다.

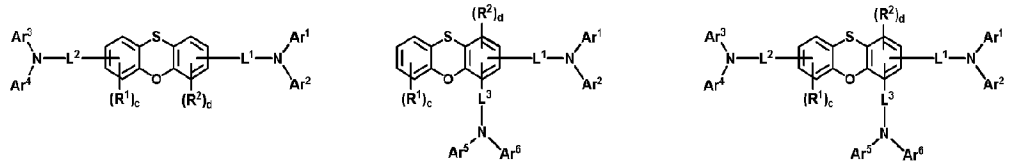
[78] <화학식 2> <화학식 3> <화학식 4>

[79]



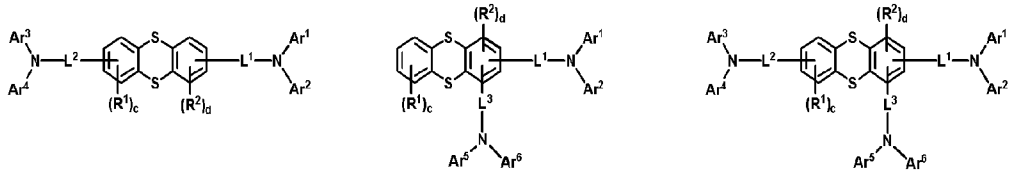
[80] <화학식 5> <화학식 6> <화학식 7>

[81]



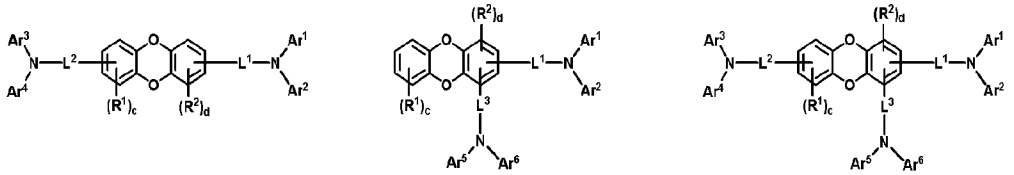
[82] <화학식 8> <화학식 9> <화학식 10>

[83]



[84] <화학식 11> <화학식 12> <화학식 13>

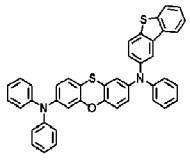
[85]



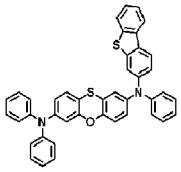
[86] 상기 화학식 2 내지 화학식 13에서, X^1, X^2, R^1, R^2, L^1 내지 L^3, Ar^1 내지 Ar^6, c, d는 화학식 1에서 정의된 것과 같다.

[87] 구체적으로, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 하기 화합물 중 하나일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

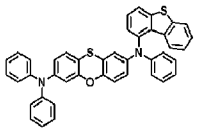
[88]



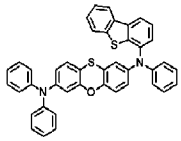
P-1



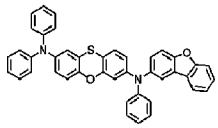
P-2



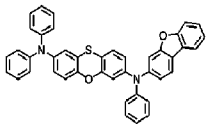
P-3



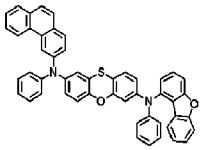
P-4



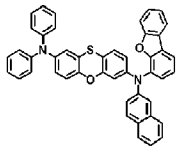
P-5



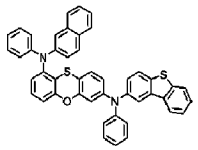
P-6



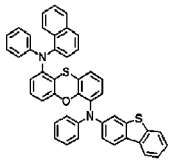
P-7



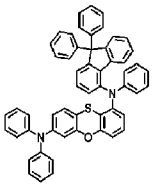
P-8



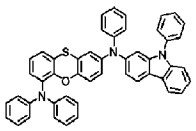
P-9



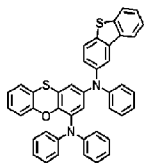
P-10



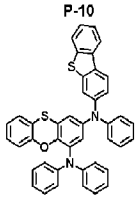
P-11



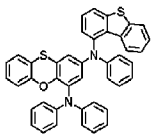
P-12



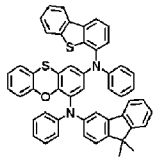
P-13



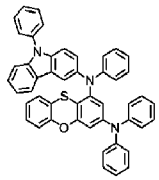
P-14



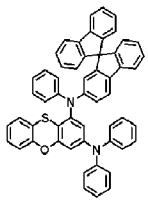
P-15



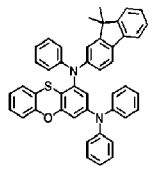
P-16



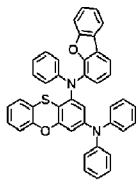
P-17



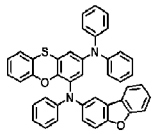
P-18



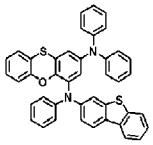
P-19



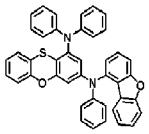
P-20



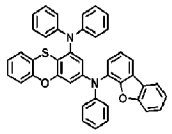
P-21



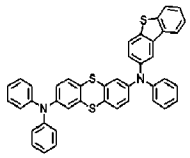
P-22



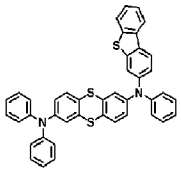
P-23



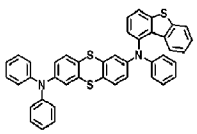
P-24



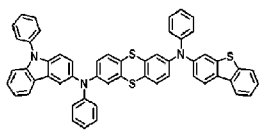
P-25



P-26

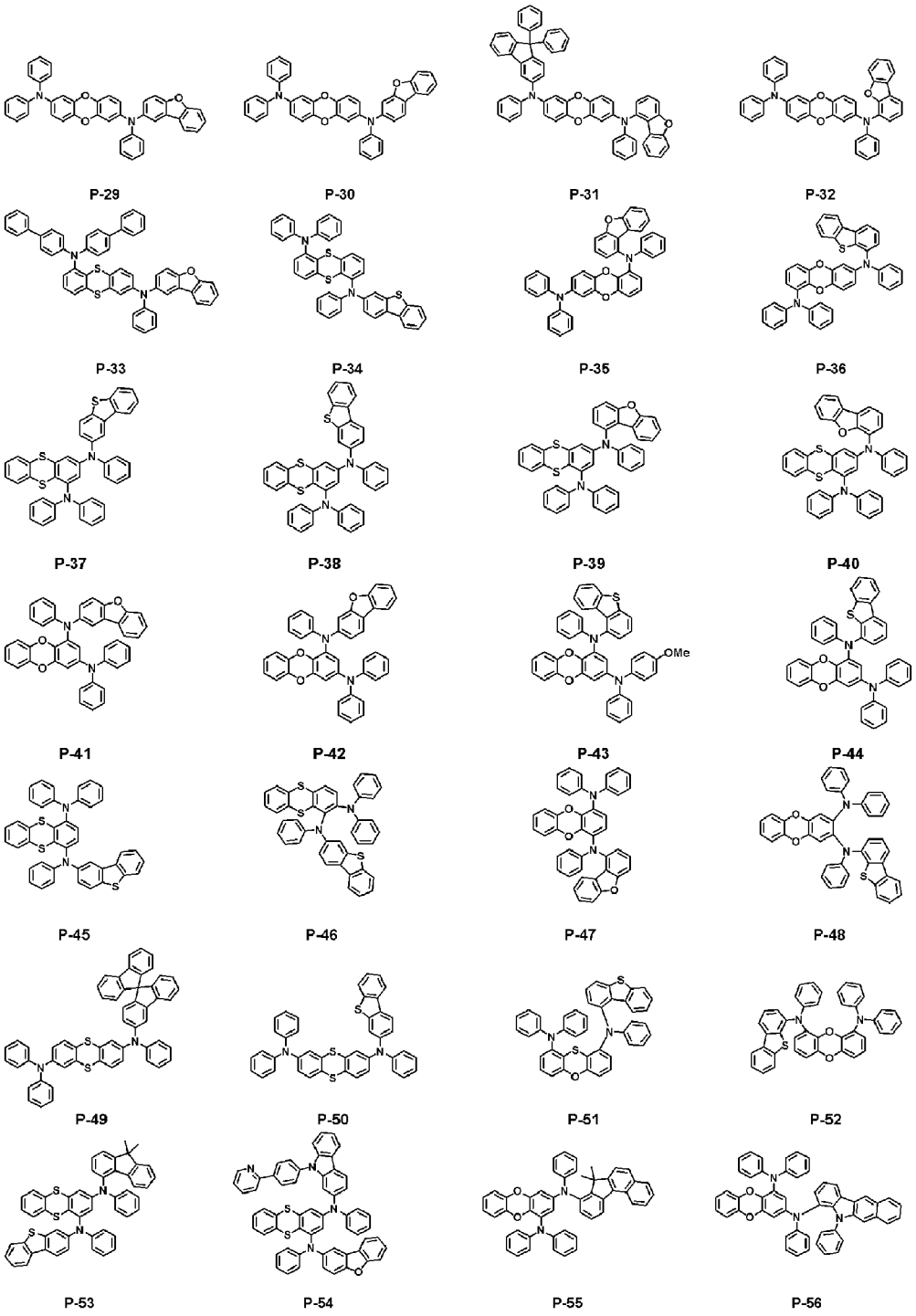


P-27

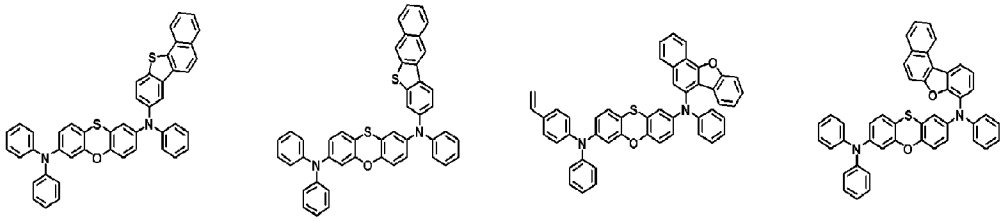


P-28

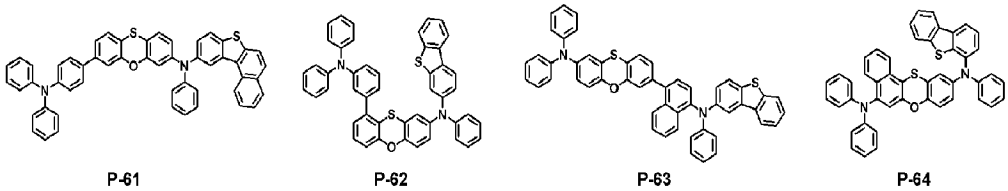
[89]


P-29
P-30
P-31
P-32
P-33
P-34
P-35
P-36
P-37
P-38
P-39
OMe
P-40
P-41
P-42
P-43
P-44
P-45
P-46
P-47
P-48
P-49
P-50
P-51
P-52
P-53
P-54
P-55
P-56

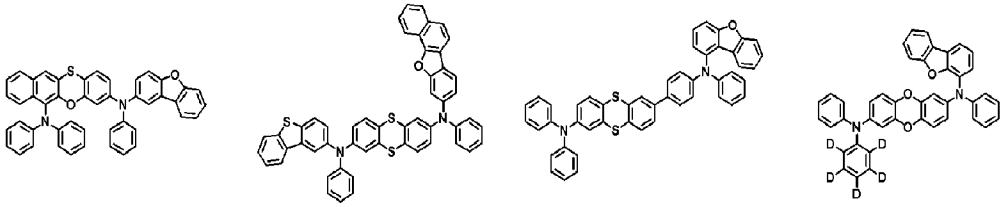
[90]



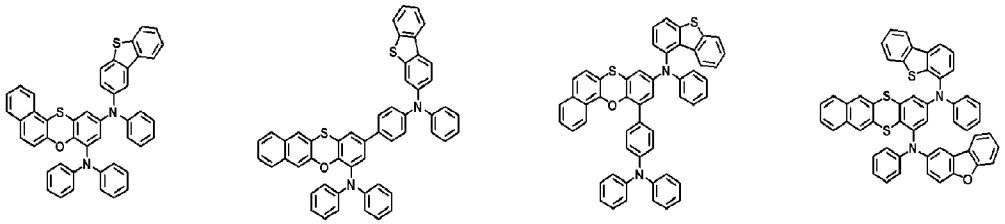
P-57 P-58 P-59 P-60



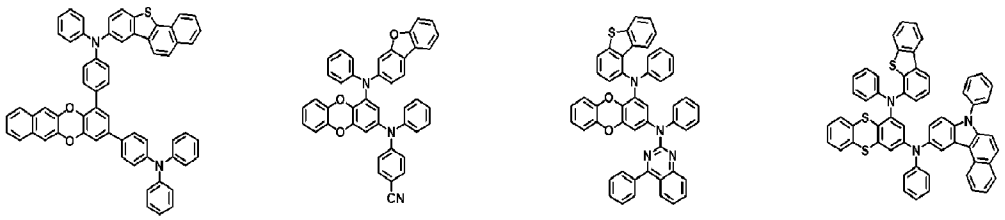
P-61 P-62 P-63 P-64



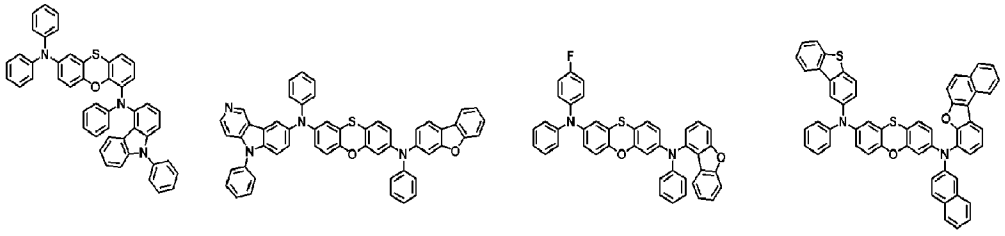
P-65 P-66 P-67 P-68



P-69 P-70 P-71 P-72

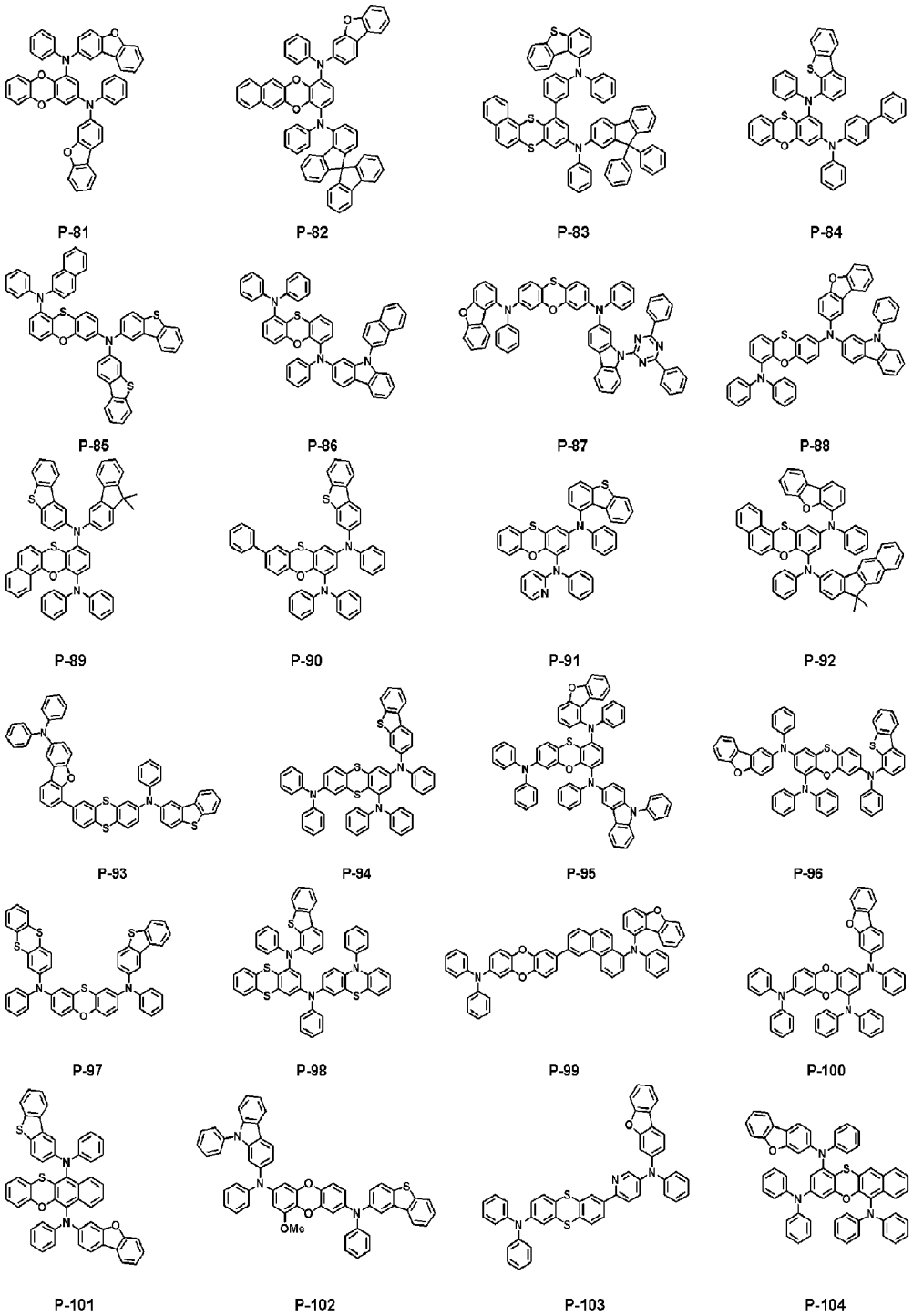


P-73 P-74 P-75 P-76



P-77 P-78 P-79 P-80

[91]



[92] 본 발명의 다른 측면에서, 본 발명은 제 1전극, 제 2 전극, 및 상기 제 1전극과 상기 제 2전극 사이에 형성된 유기물층을 포함하는 유기전기소자를 제공하고, 이때 유기물층은 상기 화학식 1로 표시되는 1종 단독 화합물 또는 2종 이상의 화합물을 포함한다.

[93] 상기 유기물층은 정공주입층, 정공수송층, 발광보조층, 발광층, 전자수송보조층, 전자수송층 및 전자주입층 중 적어도 하나의 층을 포함하고, 바람직하게는 상기 화합물은 상기 발광보조층에 포함된다.

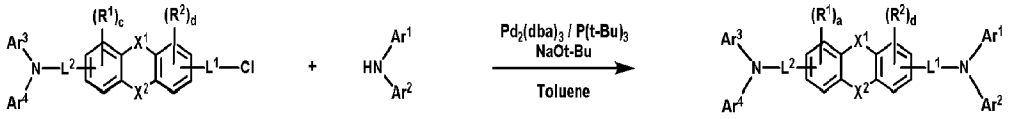
[94] 본 발명의 또 다른 측면에서, 본 발명은 상기 화학식 1로 표시되는 유기전기소자를 포함하는 디스플레이장치와, 상기 디스플레이장치를 구동하는 제어부를 포함하는 전자장치를 제공한다.

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

[96] **합성예**

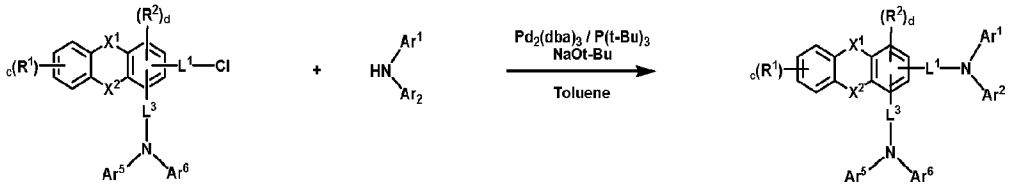
[97] 본 발명에 따른 화학식 1로 표시되는 화합물(Final product)은 하기 반응식 1 또는 반응식 2와 같이 Sub 1-A 또는 Sub 1-B를 Sub 2와 반응시켜 제조될 수 있으며 이에 한정된 것은 아니다.

[98] <반응식 1>

[99] 

Sub 1-A Sub 2 Final Product

[100] <반응식 2>

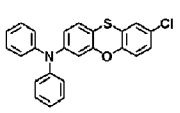
[101] 

Sub 1-B Sub 2 Final Product

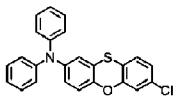
[102] **I. Sub 1-A 및 Sub 1-B의 예시 화합물 및 합성예**

[103] 상기 반응식 1의 Sub 1-A 및 Sub 1-B에 속하는 화합물은 아래와 같은 화합물일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

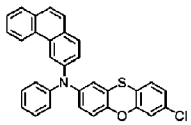
[104]



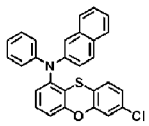
Sub 1-1



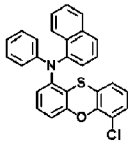
Sub 1-2



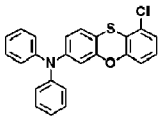
Sub 1-3



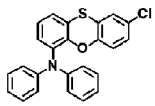
Sub 1-4



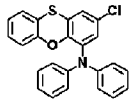
Sub 1-5



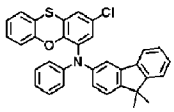
Sub 1-6



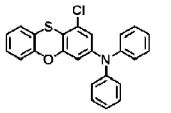
Sub 1-7



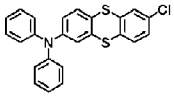
Sub 1-8



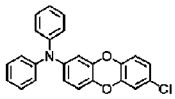
Sub 1-9



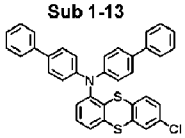
Sub 1-10



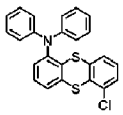
Sub 1-11



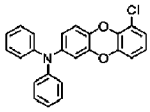
Sub 1-12



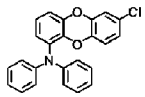
Sub 1-13



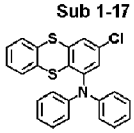
Sub 1-14



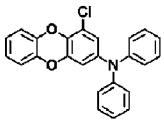
Sub 1-15



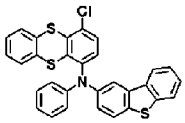
Sub 1-16



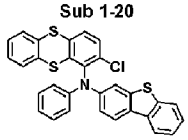
Sub 1-17



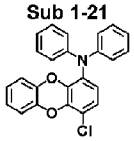
Sub 1-18



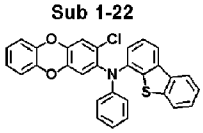
Sub 1-19



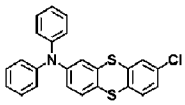
Sub 1-20



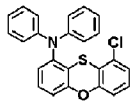
Sub 1-21



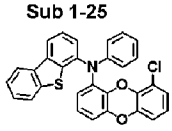
Sub 1-22



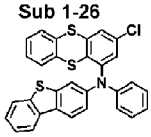
Sub 1-23



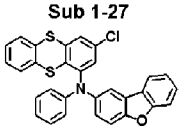
Sub 1-24



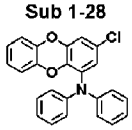
Sub 1-25



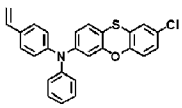
Sub 1-26



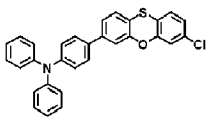
Sub 1-27



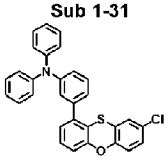
Sub 1-28



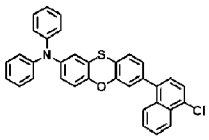
Sub 1-29



Sub 1-30



Sub 1-31



Sub 1-32

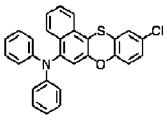
Sub 1-33

Sub 1-34

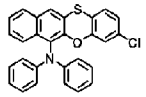
Sub 1-35

Sub 1-36

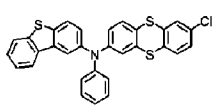
[105]



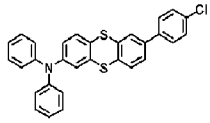
Sub 1-37



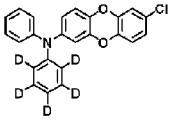
Sub 1-38



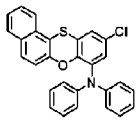
Sub 1-39



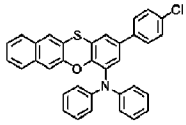
Sub 1-40



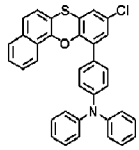
Sub 1-41



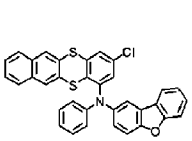
Sub 1-42



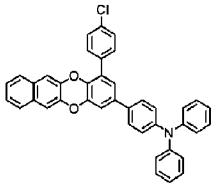
Sub 1-43



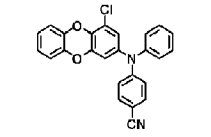
Sub 1-44



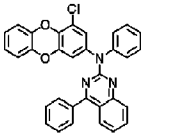
Sub 1-45



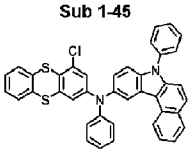
Sub 1-46



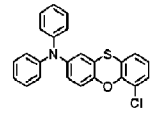
Sub 1-47



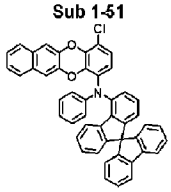
Sub 1-48



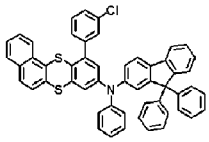
Sub 1-49



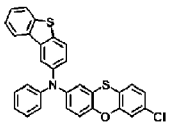
Sub 1-50



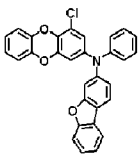
Sub 1-51



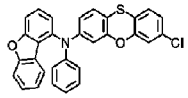
Sub 1-52



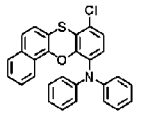
Sub 1-53



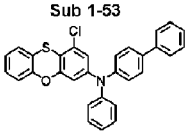
Sub 1-54



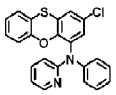
Sub 1-55



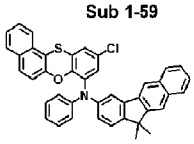
Sub 1-56



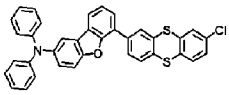
Sub 1-57



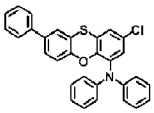
Sub 1-58



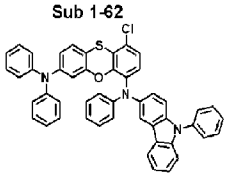
Sub 1-59



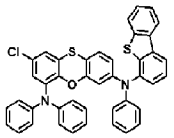
Sub 1-60



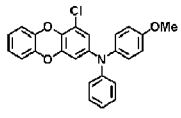
Sub 1-61



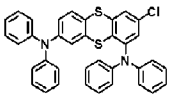
Sub 1-62



Sub 1-63



Sub 1-64



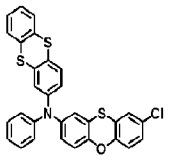
Sub 1-65

Sub 1-66

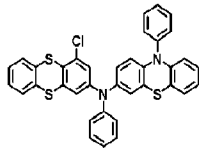
Sub 1-67

Sub 1-68

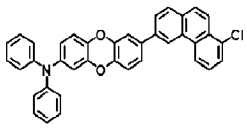
[106]



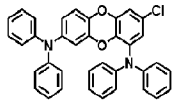
Sub 1-69



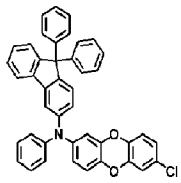
Sub 1-70



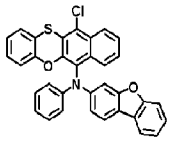
Sub 1-71



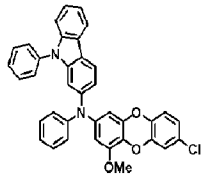
Sub 1-72



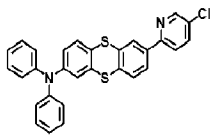
Sub 1-73



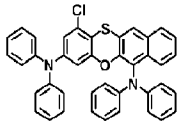
Sub 1-74



Sub 1-75



Sub 1-76



Sub 1-77

[107] Sub 1-A 및 Sub 1-B에 속하는 상기 화합물의 FD-MS(Field Desorption-Mass Spectrometry) 값은 하기 표 1과 같다.

[108] [표 1]

[109]

화합물	FD-MS	화합물	FD-MS
Sub 1-1	m/z=401.06 ($C_{24}H_{16}ClNOS$=401.91)	Sub 1-2	m/z=401.06 ($C_{24}H_{16}ClNOS$=401.91)
Sub 1-3	m/z=501.10 ($C_{32}H_{20}ClNOS$=502.03)	Sub 1-4	m/z=451.08 ($C_{28}H_{18}ClNOS$=451.97)
Sub 1-5	m/z=451.08 ($C_{28}H_{18}ClNOS$=451.97)	Sub 1-6	m/z=401.06 ($C_{24}H_{16}ClNOS$=401.91)
Sub 1-7	m/z=401.06 ($C_{24}H_{16}ClNOS$=401.91)	Sub 1-8	m/z=401.06 ($C_{24}H_{16}ClNOS$=401.91)
Sub 1-9	m/z=517.13 ($C_{33}H_{24}ClNOS$=518.07)	Sub 1-10	m/z=401.06 ($C_{24}H_{16}ClNOS$=401.91)
Sub 1-11	m/z=491.07 ($C_{30}H_{18}ClNO_2S$=491.99)	Sub 1-12	m/z=507.05 ($C_{30}H_{18}ClNOS_2$=508.05)
Sub 1-13	m/z=491.07 ($C_{30}H_{18}ClNO_2S$=491.99)	Sub 1-14	m/z=491.07 ($C_{30}H_{18}ClNO_2S$=491.99)
Sub 1-15	m/z=417.04 ($C_{24}H_{16}ClNS_2$=417.97)	Sub 1-16	m/z=385.09 ($C_{24}H_{16}ClNO_2$=385.85)
Sub 1-17	m/z=569.10 ($C_{36}H_{24}ClNS_2$=570.17)	Sub 1-18	m/z=417.04 ($C_{24}H_{16}ClNS_2$=417.97)
Sub 1-19	m/z=385.09 ($C_{24}H_{16}ClNO_2$=385.85)	Sub 1-20	m/z=385.09 ($C_{24}H_{16}ClNO_2$=385.85)
Sub 1-21	m/z=417.04 ($C_{24}H_{16}ClNS_2$=417.97)	Sub 1-22	m/z=385.09 ($C_{24}H_{16}ClNO_2$=385.85)
Sub 1-23	m/z=523.03 ($C_{30}H_{18}ClNS_3$=524.11)	Sub 1-24	m/z=523.03 ($C_{30}H_{18}ClNS_3$=524.11)
Sub 1-25	m/z=385.09 ($C_{24}H_{16}ClNO_2$=385.85)	Sub 1-26	m/z=491.07 ($C_{30}H_{18}ClNO_2S$=491.99)
Sub 1-27	m/z=417.04 ($C_{24}H_{16}ClNS_2$=417.97)	Sub 1-28	m/z=401.06 ($C_{24}H_{16}ClNOS$=401.91)
Sub 1-29	m/z=491.07 ($C_{30}H_{18}ClNO_2S$=491.99)	Sub 1-30	m/z=523.03 ($C_{30}H_{18}ClNS_3$=524.11)
Sub 1-31	m/z=507.05 ($C_{30}H_{18}ClNOS_2$=508.05)	Sub 1-32	m/z=385.09 ($C_{24}H_{16}ClNO_2$=385.85)
Sub 1-33	m/z=427.08 ($C_{26}H_{18}ClNOS$=427.95)	Sub 1-34	m/z=477.10 ($C_{30}H_{20}ClNOS$=478.01)
Sub 1-35	m/z=477.10 ($C_{30}H_{20}ClNOS$=478.01)	Sub 1-36	m/z=527.11 ($C_{34}H_{22}ClNOS$=528.07)
Sub 1-37	m/z=451.08 ($C_{28}H_{18}ClNOS$=451.97)	Sub 1-38	m/z=451.08 ($C_{28}H_{18}ClNOS$=451.97)
Sub 1-39	m/z=523.03 ($C_{30}H_{18}ClNS_3$=524.11)	Sub 1-40	m/z=493.07 ($C_{30}H_{20}ClNS_2$=494.07)
Sub 1-41	m/z=390.12 ($C_{24}H_{11}D_5ClNO_2$=390.88)	Sub 1-42	m/z=451.08 ($C_{28}H_{18}ClNOS$=451.97)
Sub 1-43	m/z=527.11 ($C_{34}H_{22}ClNOS$=528.07)	Sub 1-44	m/z=527.11 ($C_{34}H_{22}ClNOS$=528.07)
Sub 1-45	m/z=557.07 ($C_{34}H_{20}ClNOS_2$=558.11)	Sub 1-46	m/z=587.17 ($C_{40}H_{26}ClNO_2$=588.10)
Sub 1-47	m/z=410.08 ($C_{25}H_{15}ClN_2O_2$=410.86)	Sub 1-48	m/z=513.12 ($C_{32}H_{20}ClN_3O_2$=513.98)
Sub 1-49	m/z=632.11 ($C_{40}H_{25}ClN_2S_2$=633.22)	Sub 1-50	m/z=401.06 ($C_{24}H_{16}ClNOS$=401.91)
Sub 1-51	m/z=567.12 ($C_{35}H_{22}ClN_3OS$=568.09)	Sub 1-52	m/z=419.05 ($C_{24}H_{15}ClFNOS$=419.90)
Sub 1-53	m/z=507.05 ($C_{30}H_{18}ClNOS_2$=508.05)	Sub 1-54	m/z=475.10 ($C_{30}H_{18}ClNO_3$=475.93)
Sub 1-55	m/z=673.18 ($C_{47}H_{28}ClNO_2$=674.20)	Sub 1-56	m/z=783.18 ($C_{53}H_{34}ClNS_2$=784.43)
Sub 1-57	m/z=477.10 ($C_{30}H_{20}ClNOS$=478.01)	Sub 1-58	m/z=401.06 ($C_{24}H_{16}ClNOS$=401.91)
Sub 1-59	m/z=491.07 ($C_{30}H_{18}ClNO_2S$=491.99)	Sub 1-60	m/z=451.08 ($C_{28}H_{18}ClNOS$=451.97)
Sub 1-61	m/z=477.10 ($C_{30}H_{20}ClNOS$=478.01)	Sub 1-62	m/z=402.06 ($C_{23}H_{15}ClN_2OS$=402.90)

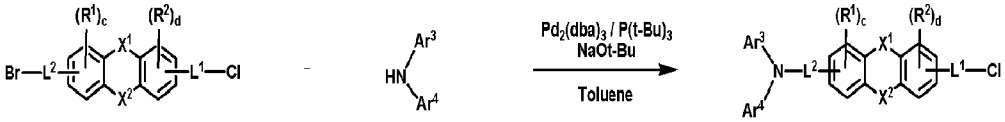
[110]

Sub 1-63	m/z=617.16 ($C_{41}H_{28}ClNOS$=618.19)	Sub 1-64	m/z=583.08 ($C_{36}H_{22}ClNOS_2$=584.15)
Sub 1-65	m/z=584.11 ($C_{36}H_{25}ClN_2S_2$=585.18)	Sub 1-66	m/z=733.20 ($C_{48}H_{32}ClN_3OS$=734.31)
Sub 1-67	m/z=674.13 ($C_{42}H_{27}ClN_2OS_2$=675.26)	Sub 1-68	m/z=415.10 ($C_{25}H_{18}ClNO_3$=415.87)
Sub 1-69	m/z=539.02 ($C_{30}H_{18}ClNOS_3$=540.11)	Sub 1-70	m/z=614.07 ($C_{36}H_{23}ClN_2S_3$=615.22)
Sub 1-71	m/z=561.15 ($C_{38}H_{24}ClNO_2$=562.07)	Sub 1-72	m/z=552.16 ($C_{36}H_{25}ClN_2O_2$=553.06)
Sub 1-73	m/z=625.18 ($C_{43}H_{28}ClNO_2$=626.15)	Sub 1-74	m/z=541.09 ($C_{34}H_{20}ClNO_2S$=542.05)
Sub 1-75	m/z=580.16 ($C_{37}H_{25}ClN_2O_3$=581.07)	Sub 1-76	m/z=494.07 ($C_{29}H_{19}ClN_2S_2$=495.06)
Sub 1-77	m/z=618.15 ($C_{40}H_{27}ClN_2OS$=619.18)		

[111] 상기 반응식 1의 Sub 1-A 또는 Sub 1-B는 하기 반응식 3 또는 반응식 4의 반응경로에 의해 합성될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[112] <반응식 3>

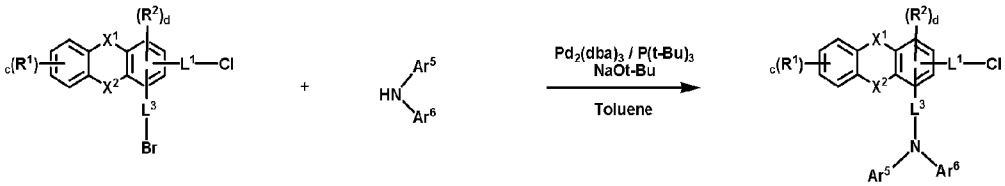
[113]



Sub 1-I Sub 1-A

[114] <반응식 4>

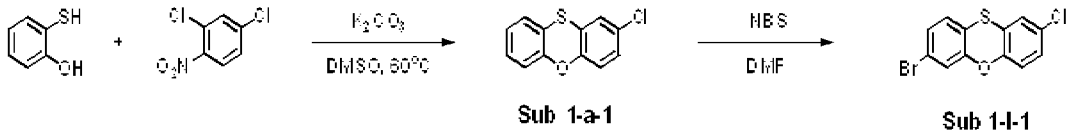
[115]



Sub 1-II Sub 1-B

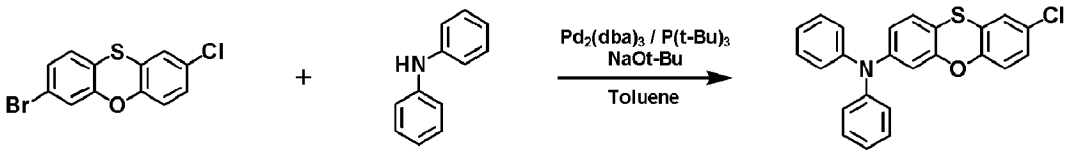
[116] Sub 1-1의 합성예

[117]



Sub 1-a-1 Sub 1-I-1

[118]



Sub 1-I-1 Sub 1-1

[119] (1) Sub 1-a-1의 합성

[120] 질소 기류 하에서 2,4-dichloro-1-nitrobenzene (15.80g, 82.29mmol), 2-sulfanylphenol (12.46g, 98.75 mmol), K_2CO_3 (28.43g, 205.73mmol)의 혼합물에 DMSO 320mL을 첨가하고, 60°C에서 3시간 동안 교반하였다. 반응이 완료되면 상온으로 식힌 후, 에틸아세테이트와 포화된 NaCl 수용액으로 추출한다. 추출한 유기층을 $MgSO_4$로 건조하고 농축한 후 생성된 화합물을 실리카겔 칼럼으로 분리 후 재결정하여 Sub 1-a-1을 13.52g (수율: 70%) 얻었다.

[121] (2) Sub 1-I-1의 합성

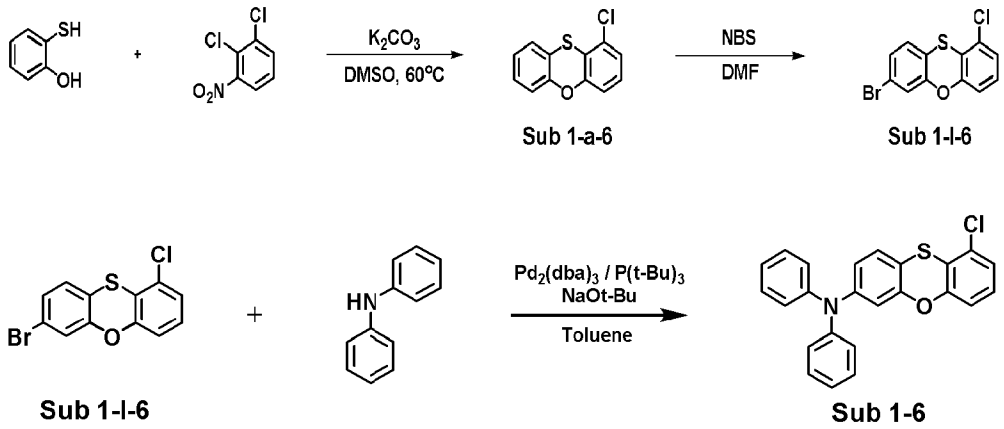
[122] Sub 1-a-1 (13.52g, 57.61mmol)을 DMF 250mL에 용해시킨 용액에, NBS(10.77g, 60.49mmol)를 DMF에 녹인 용액을 portionwise한 후, 60℃에서 5시간 가열 교반한다. 반응이 완료되면 상온으로 식힌 후, 물로 세척하여 에틸아세테이트로 추출하여 농축한다. 농축하여 생성된 화합물을 실리카겔 칼럼으로 분리 후 재결정하여 Sub 1-I-1을 12.10g (수율: 67%) 얻었다.

[123] (3) Sub 1-1의 합성

[124] Sub 1-I-1 (12.10g, 38.59mmol)을 둥근 바닥 플라스크에서 toluene 200mL로 녹인 후에, diphenylamine (6.53g, 38.59mmol), $Pd_2(dba)_3$ (1.06g, 1.16mmol), P(*t*-Bu)$_3$ (50wt% Sol.) (1.56mL, 3.86mmol), NaO*t*-Bu (11.12g, 115.76mmol)을 첨가하고 65℃에서 교반하였다. 반응이 완료되면 CH_2Cl_2와 물로 추출한 후 유기층을 $MgSO_4$로 건조하고 농축하였다. 농축하여 생성된 화합물을 실리카겔 칼럼으로 분리 후 재결정하여 생성물 Sub 1-1을 11.48g (수율: 74%) 얻었다.

[125] Sub 1-6 합성예

[126]



[127] (1) Sub 1-a-6의 합성

[128] 질소 기류 하에서 1,2-dichloro-3-nitrobenzene (10.00g, 52.08mmol), 2-sulfanylphenol (7.89g, 62.50mmol), K_2CO_3 (18.0g, 130.21mmol)의 혼합물에 DMSO 200mL을 첨가하고, 60℃에서 3시간 동안 교반하였다. 반응이 완료되면 상온으로 식힌 후, 에틸아세테이트와 포화된 NaCl 수용액으로 추출한다. 추출한 유기층을 $MgSO_4$로 건조하고 농축한 후 생성된 화합물을 실리카겔 칼럼으로 분리 후 재결정하여 Sub 1-a-6을 6.48g (수율: 53%) 얻었다.

[129] (2) Sub 1-I-6의 합성

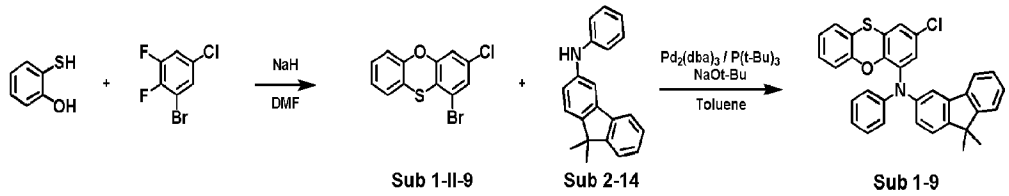
[130] Sub 1-a-6 (6.40g, 27.61mmol)을 DMF 130mL에 용해시키고, NBS(5.16g, 28.99mmol)를 DMF에 녹여 portionwise한 후, 60℃에서 5시간 가열 교반한다. 반응이 완료되면 상온으로 식힌 후, 물로 세척하여 에틸아세테이트로 추출하여 농축한다. 농축 후 생성된 화합물을 실리카겔 칼럼으로 분리 후 재결정하여 Sub 1-I-6을 6.15g (수율: 71%) 얻었다.

[131] **(3) Sub 1-6**

[132] Sub 1-I-6 (6.15g, 19.61mmol)을 둥근 바닥 플라스크에서 Toluene 150mL로 녹인 후에, diphenylamine (3.32g, 19.61mmol), $Pd_2(dba)_3$ (0.54g, 0.59mmol), P(*t*-Bu)$_3$ (50wt% Sol.) (0.79mL, 1.96mmol), NaO*t*-Bu (5.65g, 58.83mmol)을 첨가하고 65℃에서 교반하였다. 반응이 완료되면 CH_2Cl_2와 물로 추출한 후 유기층을 $MgSO_4$로 건조하고 농축한 후 생성된 화합물을 실리카겔 칼럼으로 분리 후 재결정하여 생성물 Sub 1-6을 4.97g (수율: 63%) 얻었다.

[133] Sub 1-9 합성예

[134]



Sub 1-II-9 Sub 2-14 Sub 1-9

[135] (1) Sub 1-II-9 합성

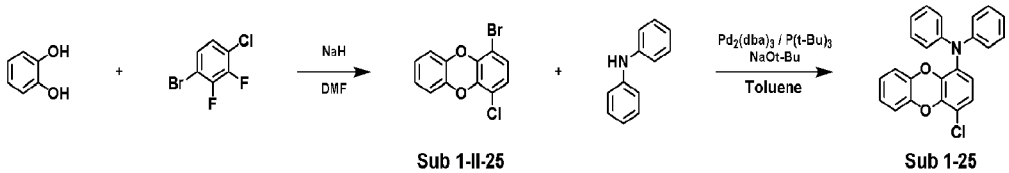
[136] 질소 기류 하에서 2-sulfanylphenol (12.50g, 99.07mmol), 2-sulfanylphenol (12.46g, 98.75 mmol), 1-bromo-5-chloro-2,3-difluorobenzene (22.53g, 99.07mmol), NaH (0.12g, 4.95mmol), DMF 230mL를 혼합하고 100℃에서 12시간 동안 교반하였다. 반응이 완료되면 에틸아세테이트와 물로 추출한 후, 유기층을 $MgSO_4$로 건조한다. 농축하여 생성된 화합물을 실리카겔 칼럼으로 정제하여 Sub 1-II-9를 15.84g (수율: 51%) 얻었다.

[137] (2) Sub 1-9 합성

[138] Sub 1-II-9 (15.8g, 50.38mmol)를 둥근 바닥 플라스크에서 Toluene 250mL로 녹인 후에, Sub 2-14 (14.38g, 50.38mmol), $Pd_2(dba)_3$ (1.38g, 1.51mmol), P(*t*-Bu)$_3$ (50wt% Sol.) (2.04mL, 5.04mmol), NaO*t*-Bu (14.53g, 151.15mmol)을 첨가하고 65℃에서 교반하였다. 반응이 완료되면 CH_2Cl_2와 물로 추출한 후 유기층을 $MgSO_4$로 건조하고 농축한 후 생성된 화합물을 실리카겔 칼럼으로 분리 후 재결정하여 생성물 Sub 1-9를 17.23g (수율: 66%) 얻었다.

[139] Sub 1-25 합성예

[140]



Sub 1-II-25 Sub 1-25

[141] (1) Sub 1-II-25 합성

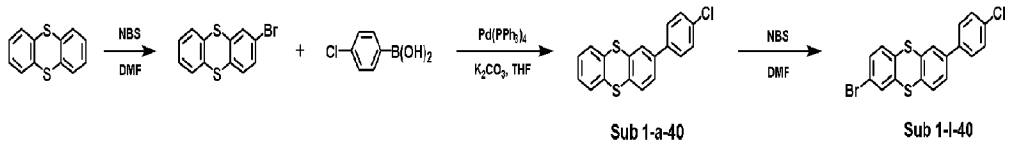
[142] 질소 기류 하에서 1,2-Benzenediol (13.34g, 121.15mmol), 1-bromo-4-chloro-2,3-difluorobenzene (27.55g, 121.15mmol), NaH (0.15 g, 6.06mmol), DMF 240mL를 혼합하고 100℃에서 12시간 동안 교반하였다. 반응이 완료되면 에틸아세테이트와 물로 추출한 후, 유기층을 $MgSO_4$로 건조한다. 농축하여 생성된 화합물을 silicagel column으로 정제하여 Sub 1-II-25를 18.74g (수율: 52%) 얻었다.

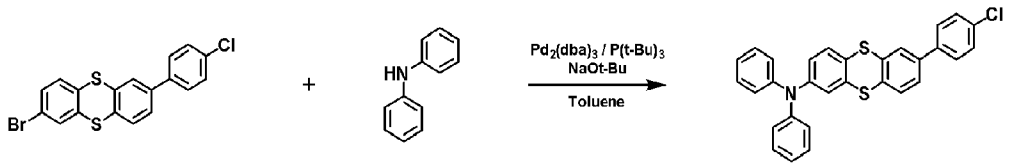
[143] (2) Sub 1-25 합성

[144] Sub 1-II-25 (18.74g, 62.99mmol)을 둥근 바닥 플라스크에 Toluene 300mL로 녹인 후에, Diphenylamine (10.66g, 62.99mmol), $Pd_2(dba)_3$ (1.73g, 1.89mmol), P(*t*-Bu)$_3$ (50wt% Sol.) (2.55mL, 6.30mmol), NaO*t*-Bu (18.16g, 188.96mmol)을 첨가하고 65℃에서 교반하였다. 반응이 완료되면 CH_2Cl_2와 물로 추출한 후 유기층을 $MgSO_4$로 건조하고 농축한 후 생성된 화합물을 실리카겔 칼럼으로 분리 후 재결정하여 생성물 Sub 1-25를 19.20g (수율: 79%) 얻었다.

[145] Sub 1-40 합성예

[146]





[147] (1) Sub 1-a-40의 합성

[148] 싸이안트렌 (11.0g, 50.85mmol)을 DMF 200mL에 용해시키고, NBS(9.96g, 55.94mmol)를 DMF에 녹여 portionwise한 후, 60℃에서 5시간 가열 교반한다. 반응이 완료되면 상온으로 식힌 후, 물로 세척하여 에틸아세테이트로 추출하여 농축한다. 생성된 화합물을 실리카겔 칼럼으로 분리 후 재결정하여 2-bromothianthrene을 10.51g (수율: 70%) 얻었다.

[149] 이후, 질소 기류 하에서 2-bromothianthrene (10.51g, 35.60mmol)에 4-Chlorophenylboronic acid (5.57g, 35.60mmol)을 첨가한 후 THF 120mL에 녹인다. 이후, 상기 용액에 $Pd(PPh_3)_4$ (2.26g, 1.78mmol)과 K_2CO_3 (14.76g, 106.81mmol)를 첨가한 후 24시간 동안 환류시켰다. 반응이 완료되면 상온으로 식힌 후, CH_2Cl_2와 물로 추출하여 유기층을 $MgSO_4$로 건조한다. 농축한 후 생성된 화합물을 실리카겔 칼럼으로 분리 후 재결정하여 생성물 Sub 1-a-40을 8.73g (수율: 75%) 얻었다.

[150] (2) Sub 1-I-40의 합성

[151] Sub 1-a-40 (8.73, 26.71mmol)을 DMF 150mL에 용해시키고, NBS (4.99g, 28.04mmol)를 DMF에 녹여 portionwise한 후, 60℃에서 5시간 가열 교반한다. 반응이 완료되면 상온으로 식힌 후, 물로 세척하여 에틸아세테이트로 추출하여 농축한다. 생성된 화합물을 실리카겔 칼럼으로 분리 후 재결정하여 Sub 1-I-40을 6.72g (수율: 62%) 얻었다.

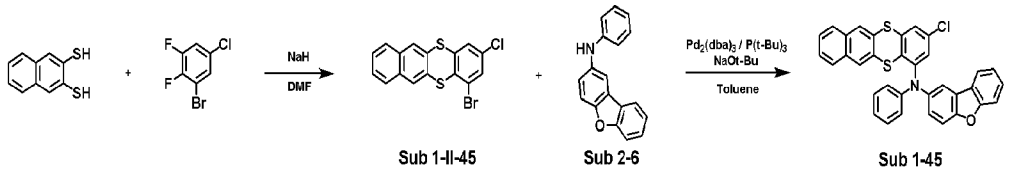
[152] (3) Sub 1-40의 합성

[153] Sub 1-I-40 (6.72 g, 16.56mmol)을 둥근 바닥 플라스크에서 Toluene 150mL로

녹인 후, diphenylamine (2.80g, 16.56mmol), $Pd_2(dba)_3$ (0.45g, 0.50mmol), P(*t*-Bu)$_3$ (50wt% Sol.) (0.67mL, 1.66mmol), NaO*t*-Bu (4.77g, 49.69mmol)을 첨가하고 65℃에서 교반하였다. 반응이 완료되면 CH_2Cl_2와 물로 추출한 후 유기층을 $MgSO_4$로 건조하고 농축한 후 생성된 화합물을 실리카겔 칼럼으로 분리 후 재결정하여 생성물 Sub 1-40을 4.75g (수율: 58%) 얻었다.

[154] Sub 1-45의 합성예

[155]



Sub 1-II-45 Sub 2-6 Sub 1-45

[156] (1) Sub 1-II-45의 합성

[157] 질소 기류 하에서 2,3-Naphthalenedithiol (9.65g, 50.18mmol), 1-bromo-5-chloro-2,3-difluorobenzene (11.41g, 50.18mmol), NaH (0.06g, 2.51mmol), DMF 120mL를 혼합하고 100℃에서 12시간 동안 교반하였다. 반응이 완료되면 에틸아세테이트와 물로 추출한 후, 유기층을 $MgSO_4$로 건조한다. 농축하여 생성된 화합물을 실리카겔 칼럼으로 정제하여 Sub 1-II-45를 11.05g (수율: 58%) 얻었다.

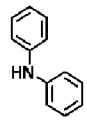
[158] (2) Sub 1-45의 합성

[159] Sub 1-II-45 (11.05g, 29.10mmol)을 둥근 바닥 플라스크에서 Toluene 200mL로 녹인 후에, Sub 2-6 (7.55g, 29.10mmol), $Pd_2(dba)_3$ (0.80g, 0.87mmol), P(*t*-Bu)$_3$ (50wt% Sol.) (1.18mL, 2.91mmol), NaO*t*-Bu (8.39g, 87.30mmol)을 첨가하고 65℃에서 교반하였다. 반응이 완료되면 CH_2Cl_2와 물로 추출한 후 유기층을 $MgSO_4$로 건조하고 농축한 후 생성된 화합물을 실리카겔 칼럼으로 분리 후 재결정하여 생성물 Sub 1-45를 11.37g (수율: 70%) 얻었다.

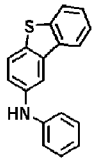
[160] **2. Sub 2의 예시 화합물 및 합성예**

[161] 상기 반응식 1의 Sub 2에 속하는 화합물은 아래와 같은 화합물일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

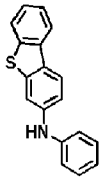
[162]



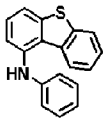
Sub 2-1



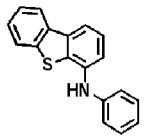
Sub 2-2



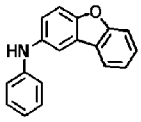
Sub 2-3



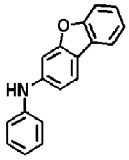
Sub 2-4



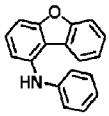
Sub 2-5



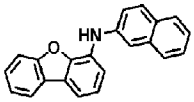
Sub 2-6



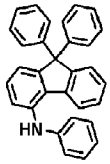
Sub 2-7



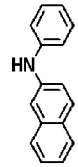
Sub 2-8



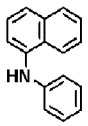
Sub 2-9



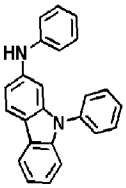
Sub 2-10



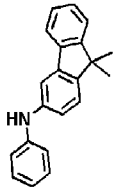
Sub 2-11



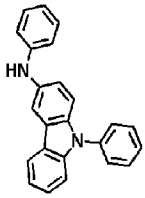
Sub 2-12



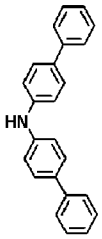
Sub 2-13



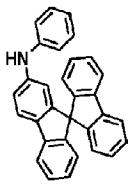
Sub 2-14



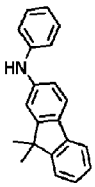
Sub 2-15



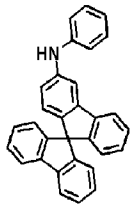
Sub 2-16



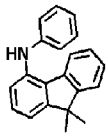
Sub 2-17



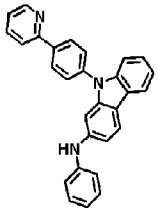
Sub 2-18



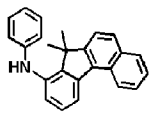
Sub 2-19



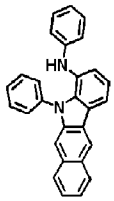
Sub 2-20



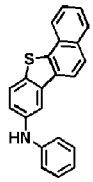
Sub 2-21



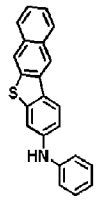
Sub 2-22



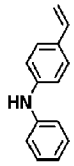
Sub 2-23



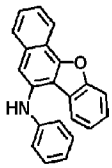
Sub 2-24



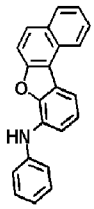
Sub 2-25



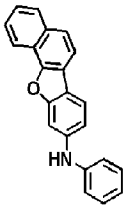
Sub 2-26



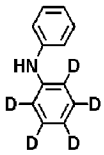
Sub 2-27



Sub 2-28

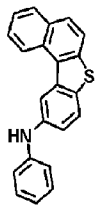


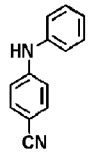
Sub 2-29

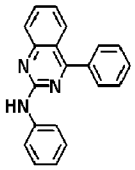


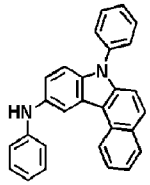
Sub 2-30

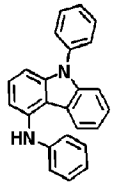
[163]

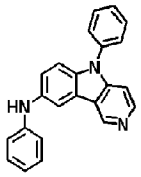

Sub 2-31

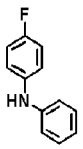

Sub 2-32

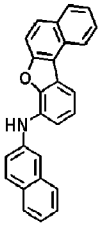

Sub 2-33

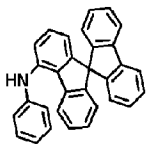

Sub 2-34

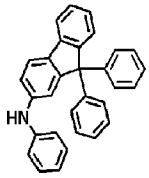

Sub 2-35

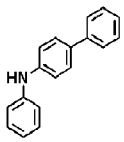

Sub 2-36

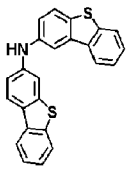

Sub 2-37

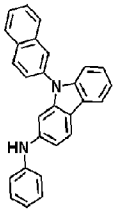

Sub 2-38

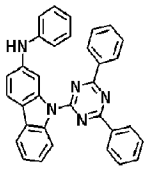

Sub 2-39

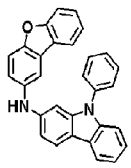

Sub 2-40

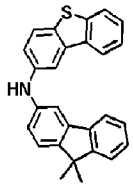

Sub 2-41

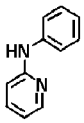

Sub 2-42

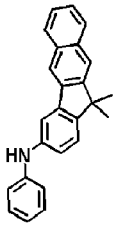

Sub 2-43

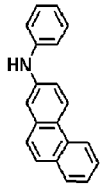

Sub 2-44

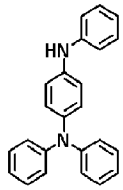

Sub 2-45

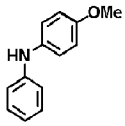

Sub 2-46

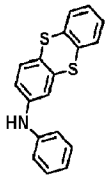

Sub 2-47

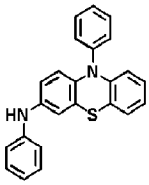

Sub 2-48

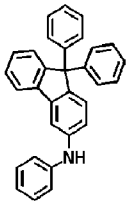

Sub 2-49


Sub 2-50


Sub 2-51


Sub 2-52


Sub 2-53


Sub 2-54

[164] Sub 2에 속하는 상기 화합물의 FD-MS 값은 하기 표 2와 같다.

[165] [표 2]

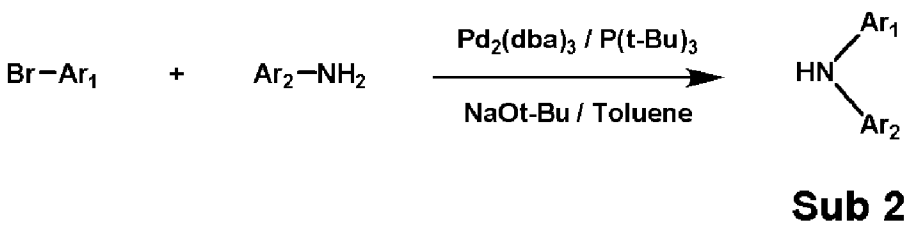
[166]

화합물	FD-MS	화합물	FD-MS
Sub 2-1	m/z=169.09 ($C_{12}H_{11}N$=169.23)	Sub 2-2	m/z=275.08 ($C_{18}H_{13}NS$=275.37)
Sub 2-3	m/z=275.08 ($C_{18}H_{13}NS$=275.37)	Sub 2-4	m/z=275.08 ($C_{18}H_{13}NS$=275.37)
Sub 2-5	m/z=275.08 ($C_{18}H_{13}NS$=275.37)	Sub 2-6	m/z=259.10 ($C_{18}H_{13}NO$=259.31)
Sub 2-7	m/z=259.10 ($C_{18}H_{13}NO$=259.31)	Sub 2-8	m/z=259.10 ($C_{18}H_{13}NO$=259.31)
Sub 2-9	m/z=309.12 ($C_{22}H_{15}NO$=309.37)	Sub 2-10	m/z=409.18 ($C_{31}H_{23}N$=409.53)
Sub 2-11	m/z=219.10 ($C_{16}H_{13}N$=219.29)	Sub 2-12	m/z=219.10 ($C_{16}H_{13}N$=219.29)
Sub 2-13	m/z=334.15 ($C_{24}H_{18}N_2$=334.42)	Sub 2-14	m/z=285.15 ($C_{21}H_{19}N$=285.39)
Sub 2-15	m/z=334.15 ($C_{24}H_{18}N_2$=334.42)	Sub 2-16	m/z=321.15 ($C_{24}H_{19}N$=321.42)
Sub 2-17	m/z=407.17 ($C_{31}H_{21}N$=407.52)	Sub 2-18	m/z=285.15 ($C_{21}H_{19}N$=285.39)
Sub 2-19	m/z=407.17 ($C_{31}H_{21}N$=407.52)	Sub 2-20	m/z=285.15 ($C_{21}H_{19}N$=285.39)
Sub 2-21	m/z=411.17 ($C_{29}H_{21}N_3$=411.51)	Sub 2-22	m/z=335.17 ($C_{25}H_{21}N$=335.45)
Sub 2-23	m/z=384.16 ($C_{28}H_{20}N_2$=384.48)	Sub 2-24	m/z=325.09 ($C_{22}H_{15}NS$=325.43)
Sub 2-25	m/z=325.09 ($C_{22}H_{15}NS$=325.43)	Sub 2-26	m/z=195.10 ($C_{14}H_{13}N$=195.27)
Sub 2-27	m/z=309.12 ($C_{22}H_{15}NO$=309.37)	Sub 2-28	m/z=309.12 ($C_{22}H_{15}NO$=309.37)
Sub 2-29	m/z=309.12 ($C_{22}H_{15}NO$=309.37)	Sub 2-30	m/z=174.12 ($C_{12}H_6D_5N$=174.26)
Sub 2-31	m/z=325.09 ($C_{22}H_{15}NS$=325.43)	Sub 2-32	m/z=194.08 ($C_{13}H_{10}N_2$=194.24)
Sub 2-33	m/z=297.13 ($C_{20}H_{15}N_3$=297.36)	Sub 2-34	m/z=384.16 ($C_{28}H_{20}N_2$=384.48)
Sub 2-35	m/z=334.15 ($C_{24}H_{18}N_2$=334.42)	Sub 2-36	m/z=335.14 ($C_{23}H_{17}N_3$=335.41)
Sub 2-37	m/z=187.08 ($C_{12}H_{10}FN$=187.22)	Sub 2-38	m/z=359.13 ($C_{26}H_{17}NO$=359.43)
Sub 2-39	m/z=407.17 ($C_{31}H_{21}N$=407.52)	Sub 2-40	m/z=409.18 ($C_{31}H_{23}N$=409.53)
Sub 2-41	m/z=245.12 ($C_{18}H_{15}N$=245.33)	Sub 2-42	m/z=381.06 ($C_{24}H_{15}NS_2$=381.51)
Sub 2-43	m/z=384.16 ($C_{28}H_{20}N_2$=384.48)	Sub 2-44	m/z=489.20 ($C_{33}H_{23}N_5$=489.58)
Sub 2-45	m/z=424.16 ($C_{30}H_{20}N_2O$=424.50)	Sub 2-46	m/z=391.14 ($C_{27}H_{21}NS$=391.53)
Sub 2-47	m/z=170.08 ($C_{11}H_{10}N_2$=170.22)	Sub 2-48	m/z=335.17 ($C_{25}H_{21}N$=335.45)
Sub 2-49	m/z=269.12 ($C_{20}H_{15}N$=269.35)	Sub 2-50	m/z=336.16 ($C_{24}H_{20}N_2$=336.44)
Sub 2-51	m/z=199.10 ($C_{13}H_{13}NO$=199.25)	Sub 2-52	m/z=307.05 ($C_{18}H_{13}NS_2$=307.43)
Sub 2-53	m/z=366.12 ($C_{24}H_{18}N_2S$=366.48)	Sub 2-54	m/z=409.18 ($C_{31}H_{23}N$=409.53)

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

[168] <반응식 5>

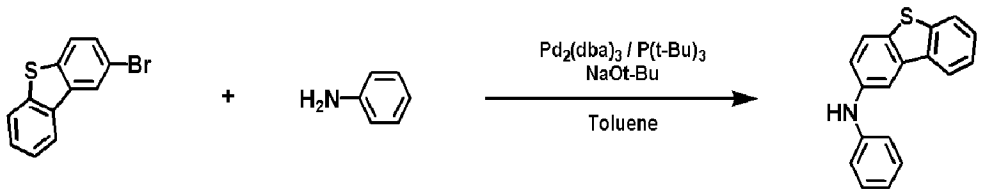
[169]



Sub 2

[170] Sub 2-2 합성예

[171]

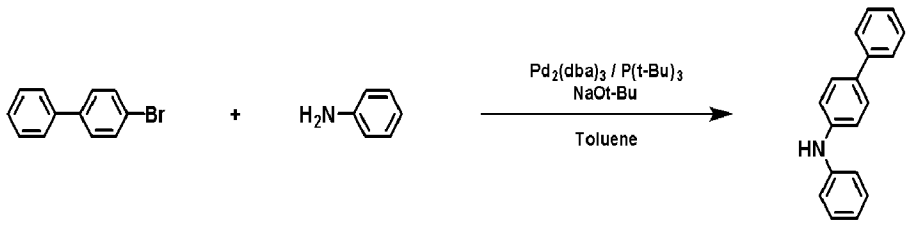


Sub 2-2

[172] 둥근바닥플라스크에 2-bromodibenzo[*b,d*]thiophene (32.50g, 123.50mmol), Aniline (12.65g, 135.85mmol), $Pd_2(dba)_3$ (3.39g, 3.71mmol), P(*t*-Bu)$_3$ (50wt% Sol.) (5.0mL, 12.35mmol), NaO*t*-Bu (35.61g, 370.51mmol), Toluene 700mL를 첨가하고 80℃에서 교반하였다. 반응이 완료되면 CH_2Cl_2와 물로 추출한 후 유기층을 $MgSO_4$로 건조하고 농축한 후 생성된 화합물을 실리카겔 칼럼으로 분리 후 재결정하여 생성물 Sub 2-2를 26.53g (수율: 78%) 얻었다.

[173] Sub 2-41 합성예

[174]



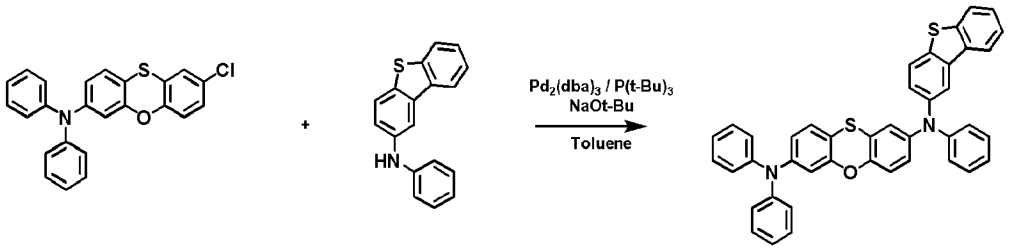
Sub 2-41

[175] 둥근바닥플라스크에 4-bromo-1,1'-biphenyl (25.70g, 110.25mmol), Aniline (11.29g, 121.27mmol), $Pd_2(dba)_3$ (3.03g, 3.31mmol), P(*t*-Bu)$_3$ (50wt% Sol.) (4.46mL, 11.02mmol), NaO*t*-Bu (31.78g, 330.75mmol), Toluene 500mL를 첨가하고 80℃에서 교반하였다. 반응이 완료되면 CH_2Cl_2와 물로 추출한 후 유기층을 $MgSO_4$로 건조하고 농축한 후 생성된 화합물을 실리카겔 칼럼으로 분리 후 재결정하여 생성물 Sub 2-41을 22.45g (수율: 83%) 얻었다.

[176] **3. 최종 화합물의 합성예**

[177] P-1 합성예

[178]



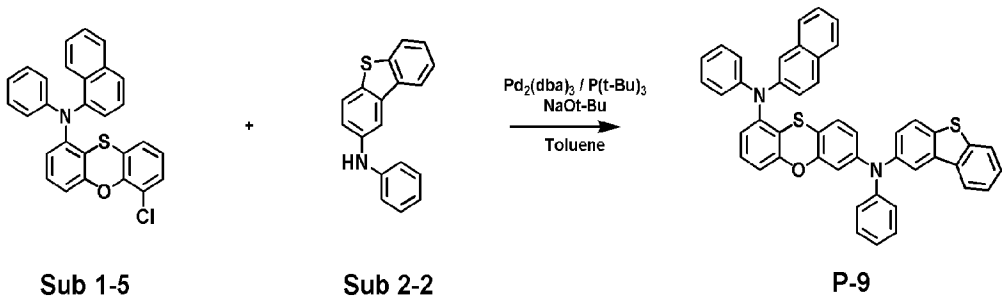
Sub 1-1 **Sub 2-2** **P-1**

[179] 둥근바닥플라스크에 Sub 1-1 (7.50g, 18.66mmol)을 넣고 Toluene 120mL로 녹인 후, Sub 2-2 (5.15g, 18.66mmol), $Pd_2(dba)_3$ (0.51g, 0.56mmol), P(*t*-Bu)$_3$ (50wt% Sol.) (0.76mL, 1.87mmol), NaO*t*-Bu (5.38g, 55.98mmol)을 첨가하고 110℃에서

교반하였다. 반응이 완료되면 CH_2Cl_2와 물로 추출한 후 유기층을 $MgSO_4$로 건조하고 농축한 후 생성된 화합물을 실리카겔 칼럼으로 분리 후 승화정제하여 생성물 P-1을 8.61g (수율: 72%) 얻었다.

[180] P-9 합성예

[181]

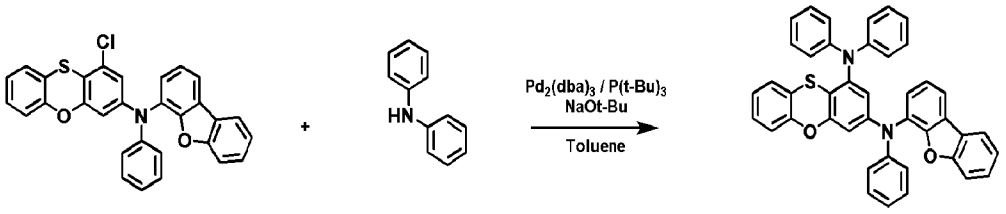


Sub 1-5 Sub 2-2 P-9

[182] Sub 1-5 (5.83g, 12.90mmol)을 Toluene 100mL에 녹이고, Sub 2-2 (3.56g, 12.90mmol), $Pd_2(dba)_3$ (0.35g, 0.39mmol), P(*t*-Bu)$_3$ (50wt% Sol.) (0.52mL, 1.29mmol), NaO*t*-Bu (3.72g, 38.71mmol)을 첨가한 후, 상기 P-1의 합성법과 같은 방법으로 진행시켜서 생성물 P-9를 6.15g (수율: 69%) 얻었다.

[183] P-24 합성예

[184]

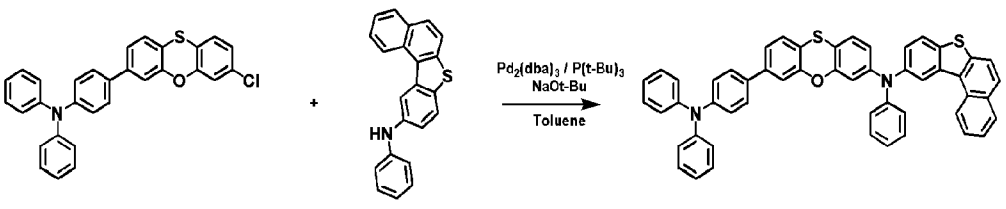


Sub 1-14 Sub 2-1 P-24

[185] Sub 1-14 (6.95g, 14.13mmol)을 Toluene 110mL에 녹이고, Sub 2-1 (2.39g, 14.13mmol), $Pd_2(dba)_3$ (0.39g, 0.42mmol), P(*t*-Bu)$_3$ (50wt% Sol.) (0.57mL, 1.41mmol), NaO*t*-Bu (4.07g, 42.38mmol)을 첨가한 후, 상기 P-1의 합성법과 같은 방법으로 진행시켜서 생성물 P-24를 7.06g (수율: 80%) 얻었다.

[186] P-61 합성예

[187]

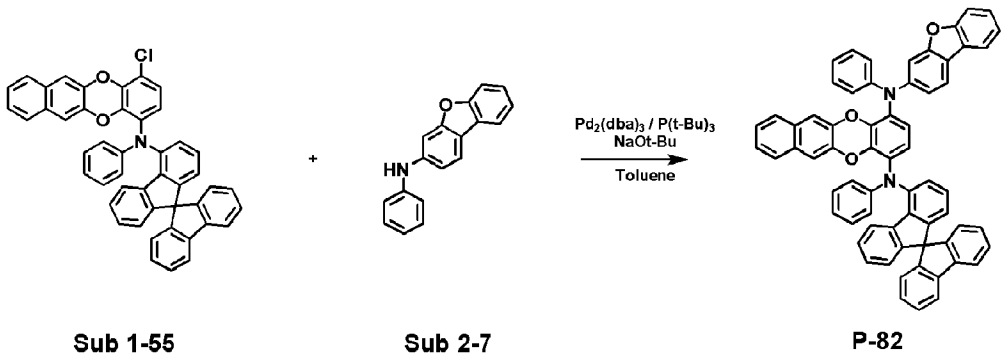


Sub 1-34 Sub 2-31 P-61

[188] Sub 1-34 (5.70g, 11.92mmol)을 Toluene 100mL에 녹이고, Sub 2-31 (3.88g, 11.92mmol), $Pd_2(dba)_3$ (0.33g, 0.36mmol), P(*t*-Bu)$_3$ (50wt% Sol.) (0.48mL, 1.19mmol), NaO*t*-Bu (3.44g, 35.77mmol)을 첨가한 후, 상기 P-1의 합성법과 같은 방법으로 진행시켜서 생성물 P-61을 5.58g (수율: 61%) 얻었다.

[189] P-82 합성예

[190]

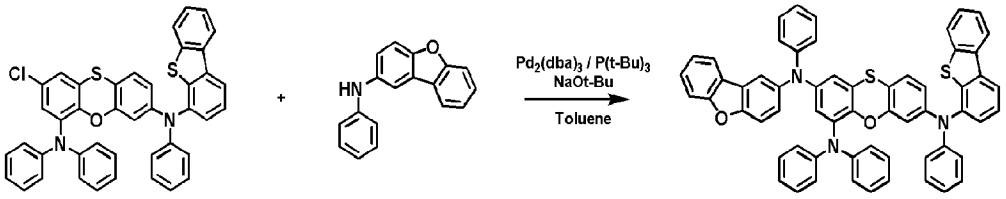


Sub 1-55 Sub 2-7 P-82

[191] Sub 1-55 (8.25g, 12.24mmol)을 Toluene 120mL에 녹이고, Sub 2-7 (3.17g, 12.24mmol), $Pd_2(dba)_3$ (0.34g, 0.37mmol), P(*t*-Bu)$_3$ (50wt% Sol.) (0.50mL, 1.22mmol), NaO*t*-Bu (3.53g, 36.71mmol)을 첨가한 후, 상기 P-1의 합성법과 같은 방법으로 진행시켜서 생성물 P-82를 8.34g (수율: 76%) 얻었다.

[192] P-96 합성예

[193]



Sub 1-67 Sub 2-6 P-96

[194] Sub 1-67 (7.63g, 11.30mmol)을 Toluene 120mL에 녹이고, Sub 2-6 (2.93g, 11.30mmol), $Pd_2(dba)_3$ (0.31g, 0.34mmol), P(*t*-Bu)$_3$ (50wt% Sol.) (0.46mL, 1.13mmol), NaO*t*-Bu (3.26g, 33.90mmol)을 첨가한 후, 상기 P-1의 합성법과 같은 방법으로 진행시켜서 생성물 P-96을 8.02g (수율: 79%) 얻었다.

[195] 상기와 같은 합성예에 따라 제조된 본 발명의 화합물 P-1 내지 P-104의 FD-MS 값은 하기 표 3과 같다.

[196] [표 3]

[197]

화합물	FD-MS	화합물	FD-MS
P-1	m/z=640.16 ($C_{42}H_{28}N_2OS_2$=640.82)	P-2	m/z=640.16 ($C_{42}H_{28}N_2OS_2$=640.82)
P-3	m/z=640.16 ($C_{42}H_{28}N_2OS_2$=640.82)	P-4	m/z=640.16 ($C_{42}H_{28}N_2OS_2$=640.82)
P-5	m/z=624.19 ($C_{42}H_{28}N_2O_2S$=624.76)	P-6	m/z=624.19 ($C_{42}H_{28}N_2O_2S$=624.76)
P-7	m/z=724.22 ($C_{50}H_{32}N_2O_2S$=724.88)	P-8	m/z=674.20 ($C_{46}H_{30}N_2O_2S$=674.82)
P-9	m/z=690.18 ($C_{46}H_{30}N_2OS_2$=690.88)	P-10	m/z=690.18 ($C_{46}H_{30}N_2OS_2$=690.88)
P-11	m/z=774.27 ($C_{55}H_{38}N_2OS$=774.98)	P-12	m/z=699.23 ($C_{48}H_{33}N_3OS$=699.87)
P-13	m/z=640.16 ($C_{42}H_{28}N_2OS_2$=640.82)	P-14	m/z=640.16 ($C_{42}H_{28}N_2OS_2$=640.82)
P-15	m/z=640.16 ($C_{42}H_{28}N_2OS_2$=640.82)	P-16	m/z=756.23 ($C_{51}H_{36}N_2OS_2$=756.98)
P-17	m/z=699.23 ($C_{48}H_{33}N_3OS$=699.87)	P-18	m/z=772.25 ($C_{55}H_{36}N_2OS$=772.97)
P-19	m/z=650.24 ($C_{45}H_{34}N_2OS$=650.84)	P-20	m/z=624.19 ($C_{42}H_{28}N_2O_2S$=624.76)
P-21	m/z=624.19 ($C_{42}H_{28}N_2O_2S$=624.76)	P-22	m/z=640.16 ($C_{42}H_{28}N_2OS_2$=640.82)
P-23	m/z=624.19 ($C_{42}H_{28}N_2O_2S$=624.76)	P-24	m/z=624.19 ($C_{42}H_{28}N_2O_2S$=624.76)
P-25	m/z=656.14 ($C_{42}H_{28}N_2S_3$=656.88)	P-26	m/z=656.14 ($C_{42}H_{28}N_2S_3$=656.88)
P-27	m/z=656.14 ($C_{42}H_{28}N_2S_3$=656.88)	P-28	m/z=821.20 ($C_{54}H_{35}N_3S_3$=822.08)
P-29	m/z=608.21 ($C_{42}H_{28}N_2O_3$=608.70)	P-30	m/z=608.21 ($C_{42}H_{28}N_2O_3$=608.70)
P-31	m/z=848.30 ($C_{61}H_{40}N_2O_3$=849.00)	P-32	m/z=608.21 ($C_{42}H_{28}N_2O_3$=608.70)
P-33	m/z=792.23 ($C_{54}H_{36}N_2OS_2$=793.02)	P-34	m/z=656.14 ($C_{42}H_{28}N_2S_3$=656.88)
P-35	m/z=608.21 ($C_{42}H_{28}N_2O_3$=608.70)	P-36	m/z=624.19 ($C_{42}H_{28}N_2O_2S$=624.76)
P-37	m/z=656.14 ($C_{42}H_{28}N_2S_3$=656.88)	P-38	m/z=656.14 ($C_{42}H_{28}N_2S_3$=656.88)
P-39	m/z=640.16 ($C_{42}H_{28}N_2OS_2$=640.82)	P-40	m/z=640.16 ($C_{42}H_{28}N_2OS_2$=640.82)
P-41	m/z=608.21 ($C_{42}H_{28}N_2O_3$=608.70)	P-42	m/z=608.21 ($C_{42}H_{28}N_2O_3$=608.70)
P-43	m/z=654.20 ($C_{43}H_{30}N_2O_3S$=654.78)	P-44	m/z=624.19 ($C_{42}H_{28}N_2O_2S$=624.76)
P-45	m/z=656.14 ($C_{42}H_{28}N_2S_3$=656.88)	P-46	m/z=656.14 ($C_{42}H_{28}N_2S_3$=656.88)
P-47	m/z=608.21 ($C_{42}H_{28}N_2O_3$=608.70)	P-48	m/z=624.19 ($C_{42}H_{28}N_2O_2S$=624.76)
P-49	m/z=788.23 ($C_{55}H_{36}N_2S_2$=789.03)	P-50	m/z=656.14 ($C_{42}H_{28}N_2S_3$=656.88)
P-51	m/z=640.16 ($C_{42}H_{28}N_2OS_2$=640.82)	P-52	m/z=624.19 ($C_{42}H_{28}N_2O_2S$=624.76)
P-53	m/z=772.20 ($C_{51}H_{36}N_2S_3$=773.04)	P-54	m/z=882.25 ($C_{59}H_{38}N_4OS_2$=883.10)
P-55	m/z=684.28 ($C_{49}H_{36}N_2O_2$=684.84)	P-56	m/z=733.27 ($C_{52}H_{35}N_3O_2$=733.87)
P-57	m/z=690.18 ($C_{46}H_{30}N_2OS_2$=690.88)	P-58	m/z=690.18 ($C_{46}H_{30}N_2OS_2$=690.88)
P-59	m/z=700.22 ($C_{48}H_{32}N_2O_2S$=700.86)	P-60	m/z=674.20 ($C_{46}H_{30}N_2O_2S$=674.82)
P-61	m/z=766.21 ($C_{52}H_{34}N_2OS_2$=766.98)	P-62	m/z=716.20 ($C_{48}H_{32}N_2OS_2$=716.92)

[198]

P-63	m/z=766.21 ($C_{52}H_{34}N_2OS_2$=766.98)	P-64	m/z=690.18($C_{46}H_{30}N_2OS_2$=690.88)
P-65	m/z=674.20 ($C_{46}H_{30}N_2O_2S$=674.82)	P-66	m/z=796.17($C_{52}H_{32}N_2OS_3$=797.02)
P-67	m/z=716.20 ($C_{48}H_{32}N_2OS_2$=716.92)	P-68	m/z=613.24($C_{42}H_{23}D_5N_2O_3$=613.73)
P-69	m/z=690.18 ($C_{46}H_{30}N_2OS_2$=690.88)	P-70	m/z=766.21 ($C_{52}H_{34}N_2OS_2$=766.98)
P-71	m/z=766.21 ($C_{52}H_{34}N_2OS_2$=766.98)	P-72	m/z=796.17 ($C_{52}H_{32}N_2OS_3$=797.02)
P-73	m/z=876.28 ($C_{62}H_{40}N_2O_2S$=877.07)	P-74	m/z=633.21 ($C_{43}H_{27}N_3O_3$=633.71)
P-75	m/z=752.22 ($C_{50}H_{32}N_4O_2S$=752.89)	P-76	m/z=871.21 ($C_{58}H_{37}N_3S_3$=872.14)
P-77	m/z=699.23 ($C_{48}H_{33}N_3OS$=699.87)	P-78	m/z=790.24 ($C_{53}H_{34}N_4O_2S$=790.94)
P-79	m/z=642.18 ($C_{42}H_{27}FN_2O_2S$=642.75)	P-80	m/z=830.21 ($C_{56}H_{34}N_2O_2S_2$=831.02)
P-81	m/z=698.22 ($C_{48}H_{30}N_2O_4$=698.78)	P-82	m/z=896.30 ($C_{65}H_{40}N_2O_3$=897.05)
P-83	m/z=1022.28 ($C_{71}H_{46}N_2S_3$=1023.34)	P-84	m/z=716.20 ($C_{48}H_{32}N_2OS_2$=716.92)
P-85	m/z=796.17 ($C_{52}H_{32}N_2OS_3$=797.02)	P-86	m/z=749.25 ($C_{52}H_{35}N_3OS$=749.93)
P-87	m/z=944.29 ($C_{63}H_{40}N_6O_2S$=945.11)	P-88	m/z=789.24 ($C_{54}H_{35}N_3O_2S$=789.95)
P-89	m/z=806.24 ($C_{55}H_{38}N_2OS_2$=807.04)	P-90	m/z=716.20 ($C_{48}H_{32}N_2OS_2$=716.92)
P-91	m/z=641.16 ($C_{41}H_{27}N_3OS_2$=641.81)	P-92	m/z=840.28 ($C_{59}H_{40}N_2O_2S$=841.04)
P-93	m/z=822.18 ($C_{54}H_{34}N_2OS_3$=823.06)	P-94	m/z=823.21 ($C_{54}H_{37}N_3S_3$=824.09)
P-95	m/z=956.32 ($C_{66}H_{44}N_4O_2S$=957.16)	P-96	m/z=897.25 ($C_{60}H_{39}N_3O_2S_2$=898.11)
P-97	m/z=778.12 ($C_{48}H_{30}N_2OS_4$=779.02)	P-98	m/z=853.17 ($C_{54}H_{35}N_3S_4$=854.14)
P-99	m/z=784.27 ($C_{56}H_{36}N_2O_3$=784.92)	P-100	m/z=775.28 ($C_{54}H_{37}N_3O_3$=775.91)
P-101	m/z=780.19 ($C_{52}H_{32}N_2O_2S_2$=780.96)	P-103	m/z=819.26 ($C_{55}H_{37}N_3O_3S$=819.98)
P-102	m/z=717.19 ($C_{47}H_{31}N_3OS_2$=717.91)	P-104	m/z=841.28 ($C_{58}H_{39}N_3O_2S$=842.03)

[199] 유기전기소자의 제조평가

[200] **[실시예 1]** 적색유기전기발광소자 (발광보조층)

[201] 유리 기판에 형성된 ITO층(양극) 상에 4,4',4''-Tris[2-naphthyl(phenyl)amino]triphenylamine (이하, 2-TNATA로 약기함)을 60nm 두께로 진공증착하여 정공주입층을 형성한 후, 상기 정공주입층 상에 N,N'-bis(1-naphthalenyl)-N,N'-bis-phenyl-(1,1'-biphenyl)-4,4'-diamine (이하, NPB로 약기함)를 60 nm 두께로 진공증착하여 정공수송층을 형성하였다.

[202] 이어서, 상기 정공수송층 상에 본 발명의 화합물 P-1을 20nm의 두께로 진공증착하여 발광보조층을 형성한 후, 상기 발광보조층 상에 4,4'-N,N'-dicarbazole-biphenyl (이하, CBP로 약기함)를 호스트 물질로, bis-(1-phenylisoquinolyl)iridium(III)acetylacetonate (이하, $(piq)_2Ir(acac)$로 약기함)을 도판트 물질로 사용하고 95:5 중량비로 도핑하여 30 nm 두께로 진공증착하여 발광층을 형성하였다.

[203] 이어서, 상기 발광층 상에

(1,1'-biphenyl-4-olato)bis(2-methyl-8-quinolinolato)aluminum (이하, BAlq로 약기함)를 10 nm 두께로 진공증착하여 정공저지층을 형성하고, 상기 정공저지층 상에 tris-(8-hydroxyquinoline)aluminum (이하 "Alq_3"로 약기함) 을 40 nm 두께로 진공증착하여 전자수송층을 형성하였다.

[204] 이후, 할로젠화 알칼리 금속인LiF를 0.2 nm 두께로 증착하여 전자주입층을 형성하고, 이어서 Al을 150 nm의 두께로 증착하여 음극을 형성함으로써 유기전기발광소자를 제조하였다.

[205] **[실시예 2] 내지 [실시예 19] 적색유기전기발광소자 (발광보조층)**

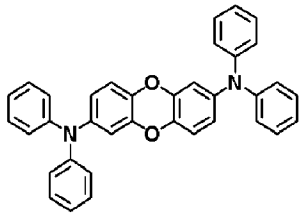
[206] 발광보조층 물질로 본 발명의 화합물 P-1 대신 하기 표 5에 기재된 본 발명의 화합물을 사용한 점을 제외하고는 실시예 1과 동일한 방법으로 유기전기발광소자를 제작하였다.

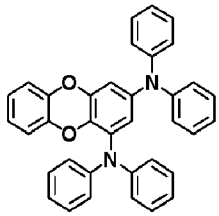
[207] **[비교예 1] 내지 [비교예 3]**

[208] 발광보조층 물질로 본 발명의 화합물 P-1 대신 하기 비교화합물 1 또는 비교화합물 2를 사용한 점을 제외하고는 상기 실시예1과 동일한 방법으로 유기전기발광소자를 제작하였다.

[209] <비교화합물 1> <비교화합물 2>

[210]





[211] 본 발명의 실시예 1 내지 실시예 19, 및 비교예 1 및 비교예 2에 의해 제조된 유기전기발광소자에 순바이어스 직류전압을 가하여 포토리서치(photoresearch)사의 PR-650으로 전기발광(EL) 특성을 측정하였으며, 2500cd/m^2기준 휘도에서 맥사이언스사에서 제조된 수명 측정 장비를 통해 T95 수명을 측정하였다. 측정 결과는 하기 표 4와 같다.

[212] [표 4]

[213]

	화합물	구동전압 (V)	전류 (mA/cm²)	휘도 (cd/m²)	효율 (cd/A)	T(95)	CIE	
							x	y
비교예 (1)	비교화합물1	6.6	26.0	2500.0	9.6	110.3	0.63	0.30
비교예 (2)	비교화합물2	6.4	24.8	2500.0	10.1	109.7	0.63	0.32
실시예(1)	P-1	6.1	10.1	2500.0	22.8	165.7	0.63	0.30
실시예(2)	P-6	6.2	12.4	2500.0	22.3	167.1	0.64	0.33
실시예(3)	P-10	6.3	13.5	2500.0	21.9	159.8	0.62	0.33
실시예(4)	P-13	5.9	9.2	2500.0	27.6	153.2	0.64	0.31
실시예(5)	P-16	6.0	9.7	2500.0	25.7	146.4	0.65	0.34
실시예(6)	P-24	6.1	10.3	2500.0	23.5	140.8	0.64	0.31
실시예(7)	P-25	5.9	9.3	2500.0	22.6	164.9	0.61	0.33
실시예(8)	P-28	6.1	10.6	2500.0	21.7	160.1	0.60	0.32
실시예(9)	P-31	6.3	13.1	2500.0	18.9	161.7	0.64	0.34
실시예(10)	P-33	6.2	12.1	2500.0	20.8	158.4	0.64	0.34
실시예(11)	P-37	5.9	9.3	2500.0	26.3	143.7	0.63	0.32
실시예(12)	P-41	6.1	9.9	2500.0	24.6	148.6	0.60	0.35
실시예(13)	P-49	6.2	10.0	2500.0	20.5	157.8	0.61	0.34
실시예(14)	P-53	6.0	9.7	2500.0	25.1	145.1	0.62	0.33
실시예(15)	P-55	6.0	10.2	2500.0	24.0	142.0	0.60	0.32
실시예(16)	P-57	6.2	10.8	2500.0	21.4	159.5	0.63	0.34
실시예(17)	P-66	6.3	13.0	2500.0	19.9	155.3	0.61	0.32
실시예(18)	P-92	6.3	11.0	2500.0	23.1	138.9	0.63	0.33
실시예(19)	P-94	6.0	11.4	2500.0	21.1	158.9	0.60	0.34

[214] 상기 표 4의 결과로부터 알 수 있듯이, 본 발명의 유기전기발광소자용 재료를 발광보조층 재료로 사용하여 적색유기발광소자를 제작한 경우, 비교화합물 1 또는 비교화합물 2를 사용한 비교예보다 유기전기발광소자의 구동전압을 낮출 수 있을 뿐만아니라 발광 효율과 수명을 현저히 개선시킬 수 있음을 알 수 있다.

[215] 비교화합물 1과 2를 비교해보면, 다이벤조다이옥신(dibenzodioxin) 코어의 양쪽 벤젠링에 아민 그룹이 각각 결합된 비교화합물 1보다 dibenzodioxin 코어의 동일 벤젠고리에 아민 그룹이 2개 결합된 비교화합물 2를 발광보조층 재료로 사용할 경우 소자의 구동전압 및 효율이 더 우수하였다.

[216] 본 발명의 화합물과 비교화합물을 비교해보면 코어의 기본 골격이 서로 유사하지만, 본 발명의 화합물은 아민기에 다이벤조싸이오펜, 다이벤조퓨란, 카바졸, 플루오렌 등과 같은 특정 치환기가 반드시 치환된다는 점에서 비교화합물과 차이가 있다. 이러한 구조적 차이로 인해 본 발명의 화합물을 발광보조층 재료로 사용할 경우 비교화합물에 비해 구동전압, 효율 및 수명이 현저히 개선되었는데, 이는 일반 아릴기 치환기가 치환됐을 때보다

다이벤조싸이오펜, 다이벤조퓨란 등과 같은 3환 이상의 고리 화합물이 치환기로 도입되었을 때 굴절율이 현저히 높아지고, T_g 또한 상승하고 열적안정성이 우수해지기 때문인 것으로 보인다.

[217] 특히, 비교화합물 중 동일 벤젠고리에 아민 그룹이 2개 치환된 화합물의 소자결과가 발광 효율 면에서 더 향상된 소자 결과를 나타내는데 이러한 결과는 코어가 유사한 화합물일지라도 치환기의 결합 위치에 따라서 hole 특성, 광효율 특성, 에너지 레벨 (LUMO, HOMO레벨, T1레벨), 홀주입성(hole injection), 홀 이동 특성, 전자 저지 특성 등과 같은 화합물의 물성이 달라지게 되고 이로 인해 전혀 다른 소자 결과가 도출될 수 있음을 시사하고 있다.

[218] 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 내의 모든 기술은 본 발명의 권리범위에 포함하는 것으로 해석되어야 할 것이다.

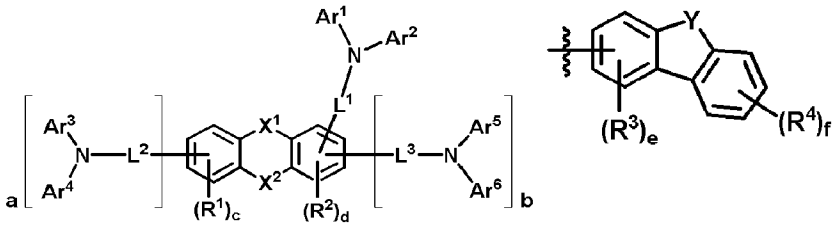
[219] **CROSS-REFERENCE TO RELATED APPLICATION**

[220] 본 특허출원은 2018년 12월 26일 한국에 출원한 특허출원번호 제10-2018-0169810호에 대해 미국 특허법 119조 내지 121조, 365조 (35 U.S.C §19조 내지 §121조, §365조)에 따라 우선권을 주장하며, 그 모든 내용은 참고문헌으로 본 특허출원에 병합된다. 아울러, 본 특허출원은 미국 이외에 국가에 대해서도 위와 동일한 이유로 우선권을 주장하면 그 모든 내용은 참고문헌으로 본 특허출원에 병합된다.

청구범위

[청구항 1] 하기 화학식 1로 표시되는 화합물:

<화학식 1> <화학식 1-1>



상기 화학식 1에서,

X^1 및 X^2는 서로 독립적으로 O 또는 S이며,

Ar^1 내지 Ar^6은 서로 독립적으로 C_6~C_{60}의 아릴기; 플루오렌일기; O, N, S, Si 및 P 중 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C_2~C_{60}의 헤테로고리기; C_3~C_{60}의 지방족고리기; C_1~C_{60}의 알킬기; C_2~C_{20}의 알켄일기; C_2~C_{20}의 알킨일기; 및 C_1~C_{30}의 알콕실기; C_6~C_{30}의 아릴옥시기로 이루어진 군에서 선택되며, 단, Ar^1 내지 Ar^6 중 적어도 하나는 상기 화학식 1-1이며,

L^1 내지 L^3은 서로 독립적으로 단일결합; C_6~C_{60}의 아릴렌기; 플루오렌일렌기; C_3~C_{60}의 지방족고리기; O, N, S, Si 및 P 중 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C_2~C_{60}의 헤테로고리기; 및 이들의 조합으로 이루어진 군에서 선택되며,

a 및 b는 각각 0 또는 1의 정수이고, a와 b 중 적어도 하나는 1이며,

R^1 및 R^2는 서로 독립적으로 수소; 중수소, 삼중수소; 할로겐; 시아노기; 니트로기; C_6~C_{60}의 아릴기; 플루오렌일기; O, N, S, Si 및 P 중 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C_2~C_{60}의 헤테로고리기; C_3~C_{60}의 지방족고리와 C_6~C_{60}의 방향족고리의 융합고리기; C_1~C_{50}의 알킬기; C_2~C_{20}의 알켄일기; C_2~C_{20}의 알킨일기; C_1~C_{30}의 알콕실기; C_6~C_{30}의 아릴옥시기; 및 -L'-$N(R_a)(R_b)$; 로 이루어진 군에서 선택되고, 이웃한 기끼리 서로 결합하여 고리를 형성할 수 있고,

c는 0~4의 정수, d는 0~3의 정수이고, 이들 각각이 2 이상의 정수인 경우 복수의 R^1 각각, 복수의 R^2 각각은 서로 같거나 상이하며,

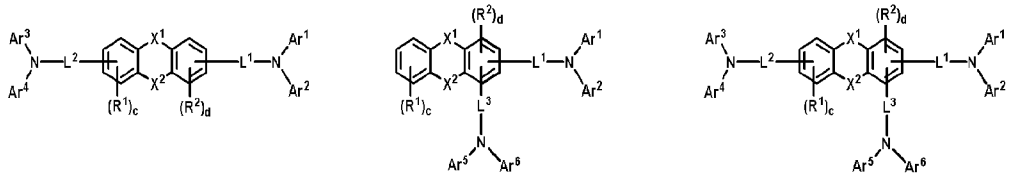
상기 화학식 1-1에서,

Y는 C(R')(R''), N(R'), O 또는 S이고,

R^3 및 R^4는 서로 독립적으로 수소; 중수소, 삼중수소; 할로겐; 시아노기; 니트로기; C_6~C_{60}의 아릴기; 플루오렌일기; O, N, S, Si 및 P 중 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C_2~C_{60}의 헤테로고리기; C_3~C_{60}의 지방족고리와 C_6~C_{60}의 방향족고리의 융합고리기; C_1~C_{50}의 알킬기; C_2~C_{20}의 알켄일기; C_2~C_{20}의 알킨일기; C_1~C_{30}의 알콕실기; C_6~C_{30}의 아릴옥시기; 및 -L'-$N(R_a)(R_b)$; 로 이루어진 군에서 선택되고, 이웃한

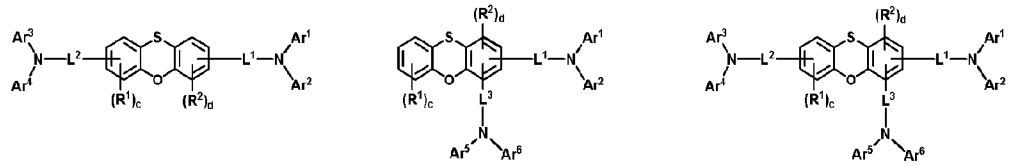
기끼리 서로 결합하여 고리를 형성할 수 있고,
e는 0~3의 정수, f는 0~4의 정수이고, 이들 각각이 2 이상의 정수인 경우 복수의 R^3 각각, 복수의 R^4 각각은 서로 같거나 상이하며,
상기 R' 및 R"는 서로 독립적으로 수소; C_6~C_{60}의 아릴기; 플루오렌일기; C_3~C_{60}의 헤테로고리기; C_1~C_{50}의 알킬기; C_2~C_{60}의 알켄일기; 및 C_6~C_{60}의 아릴옥시기;로 이루어진 군에서 선택되며, R'과 R"은 서로 결합하여 고리를 형성할 수 있고, 단, a가 1이고, Y가 C(R')(R")인 경우, R' 및 R"에서 알킬기는 제외되며,
상기 L'은 단일결합; C_6~C_{60}의 아릴렌기; 플루오렌일렌기; C_3~C_{60}의 지방족고리기; O, N, S, Si 및 P 중 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C_2~C_{60}의 헤테로고리기; 및 이들의 조합으로 이루어진 군에서 선택되며,
상기 R_a 및 R_b는 서로 독립적으로 C_6~C_{60}의 아릴기; 플루오렌일기; C_3~C_{60}의 지방족고리기; 및 O, N, S, Si 및 P 중 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C_2~C_{60}의 헤테로고리기로 이루어진 군에서 선택된다.

[청구항 2] 제 1항에 있어서,
상기 화학식 1은 하기 화학식 2 내지 화학식4 중에서 하나로 표시되는 것을 특징으로 하는 화합물:
<화학식 2> <화학식 3> <화학식 4>

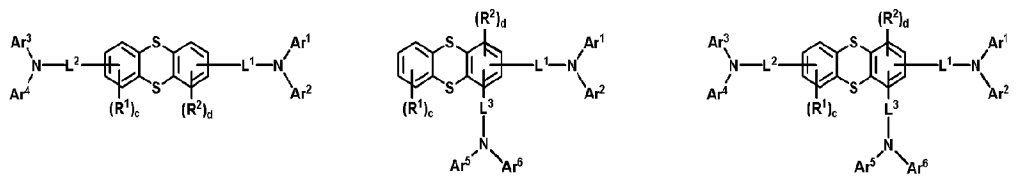


상기 화학식 2 내지 화학식 4에서, X^1, X^2, R^1, R^2, L^1 내지 L^3, Ar^1 내지 Ar^6, c, d는 제1항에서 정의된 것과 같다.

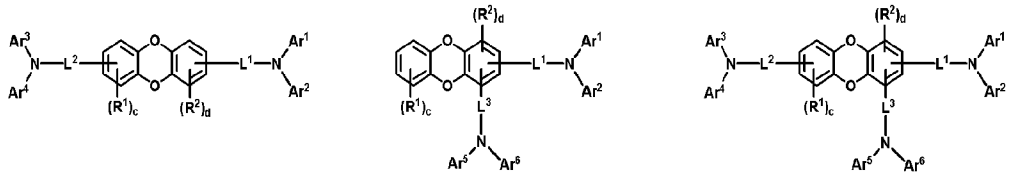
[청구항 3] 제 1항에 있어서,
상기 화학식 1은 하기 화학식 5 내지 화학식 13 중에서 하나로 표시되는 것을 특징으로 하는 화합물:
<화학식 5> <화학식 6> <화학식 7>



<화학식 8> <화학식 9> <화학식 10>



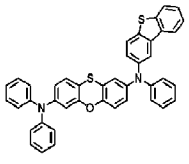
<화학식 11> <화학식 12> <화학식 13>



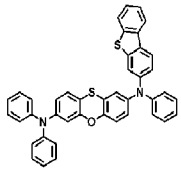
상기 화학식 5 내지 화학식 13에서, R^1, R^2, L^1 내지 L^3, Ar^1 내지 Ar^6, c, d는 제1항에서 정의된 것과 같다.

[청구항 4] 제 1항에 있어서,

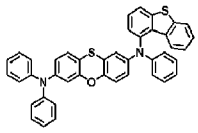
상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 하기 화합물 중 하나인 것을 특징으로 하는 화합물:



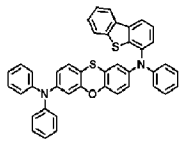
P-1



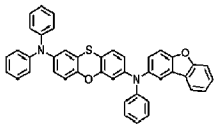
P-2



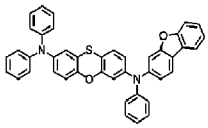
P-3



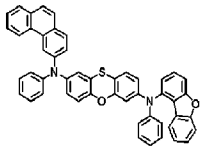
P-4



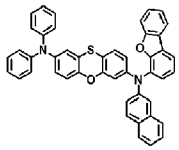
P-5



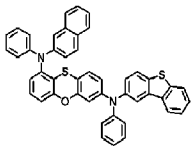
P-6



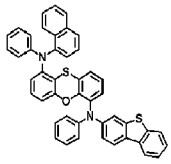
P-7



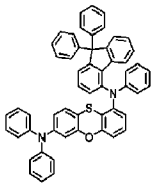
P-8



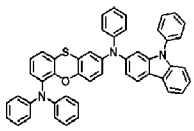
P-9



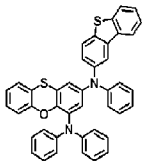
P-10



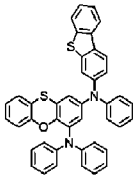
P-11



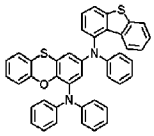
P-12



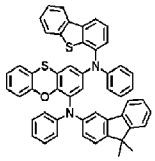
P-13



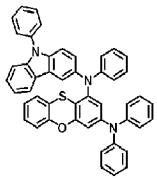
P-14



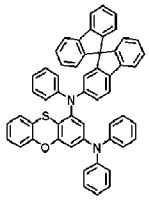
P-15



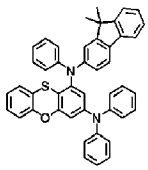
P-16



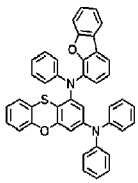
P-17



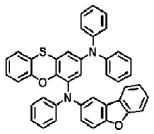
P-18



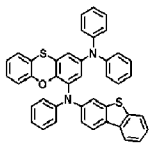
P-19



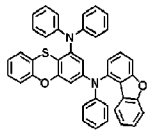
P-20



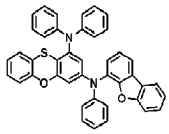
P-21



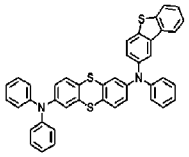
P-22



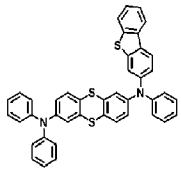
P-23



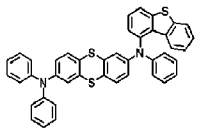
P-24



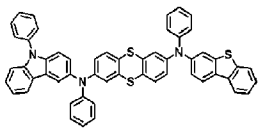
P-25



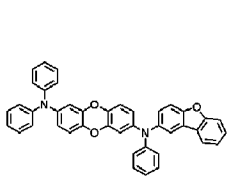
P-26



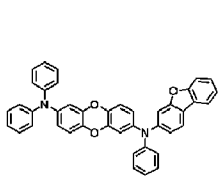
P-27



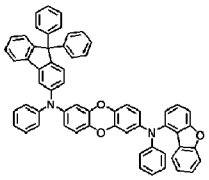
P-28



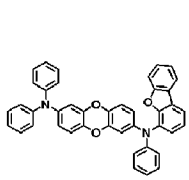
P-29



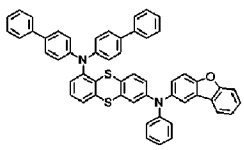
P-30



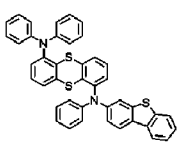
P-31



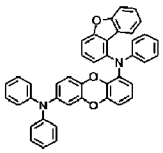
P-32



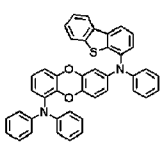
P-33



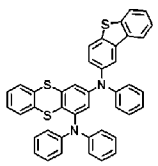
P-34



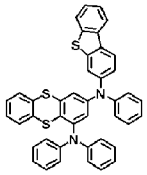
P-35



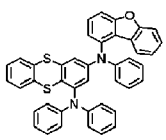
P-36



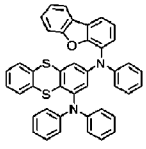
P-37



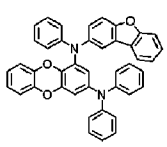
P-38



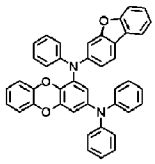
P-39



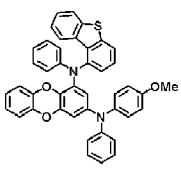
P-40



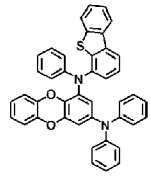
P-41



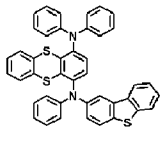
P-42



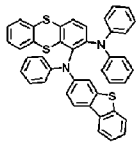
P-43



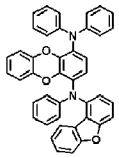
P-44



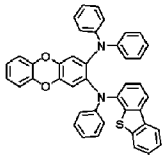
P-45



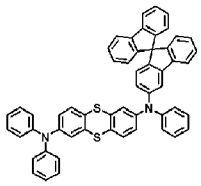
P-46



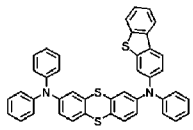
P-47



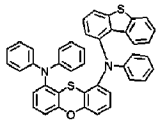
P-48



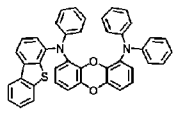
P-49



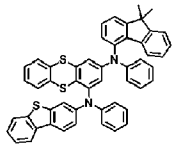
P-50



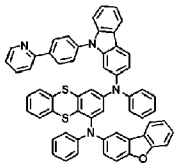
P-51



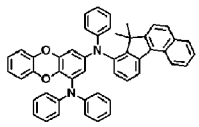
P-52



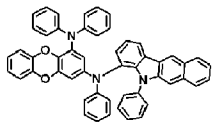
P-53



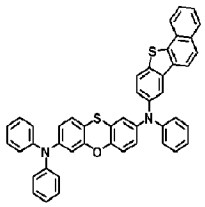
P-54



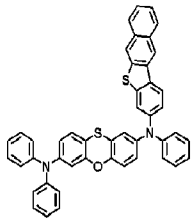
P-55



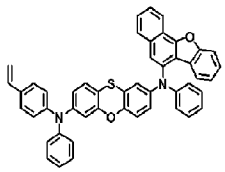
P-56



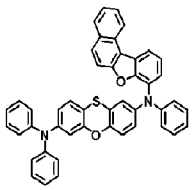
P-57



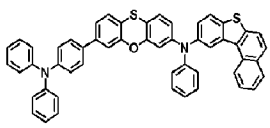
P-58



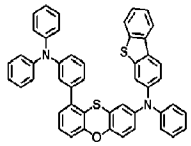
P-59



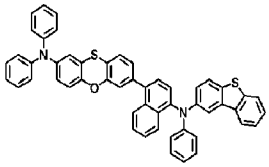
P-60



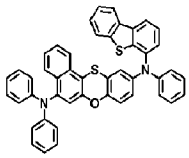
P-61



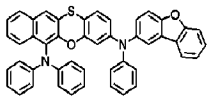
P-62



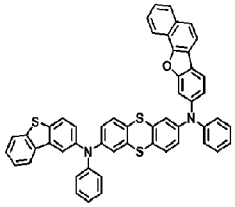
P-63



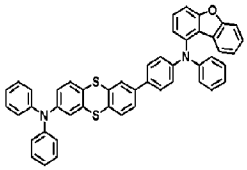
P-64



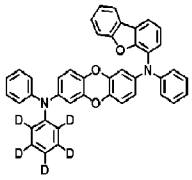
P-65



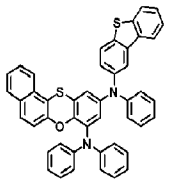
P-66



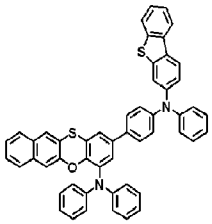
P-67



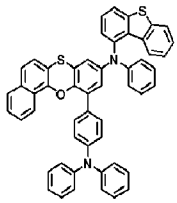
P-68



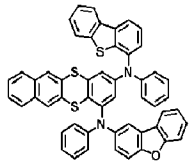
P-69



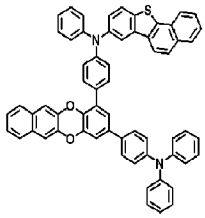
P-70



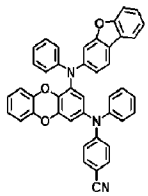
P-71



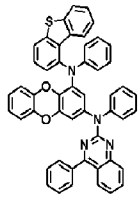
P-72



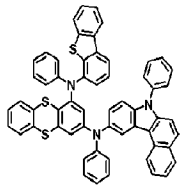
P-73



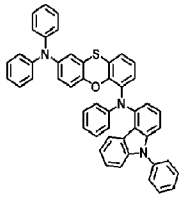
P-74



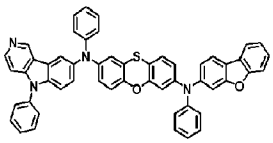
P-75



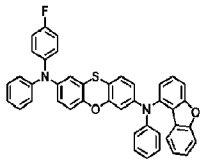
P-76



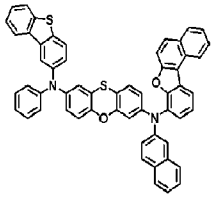
P-77



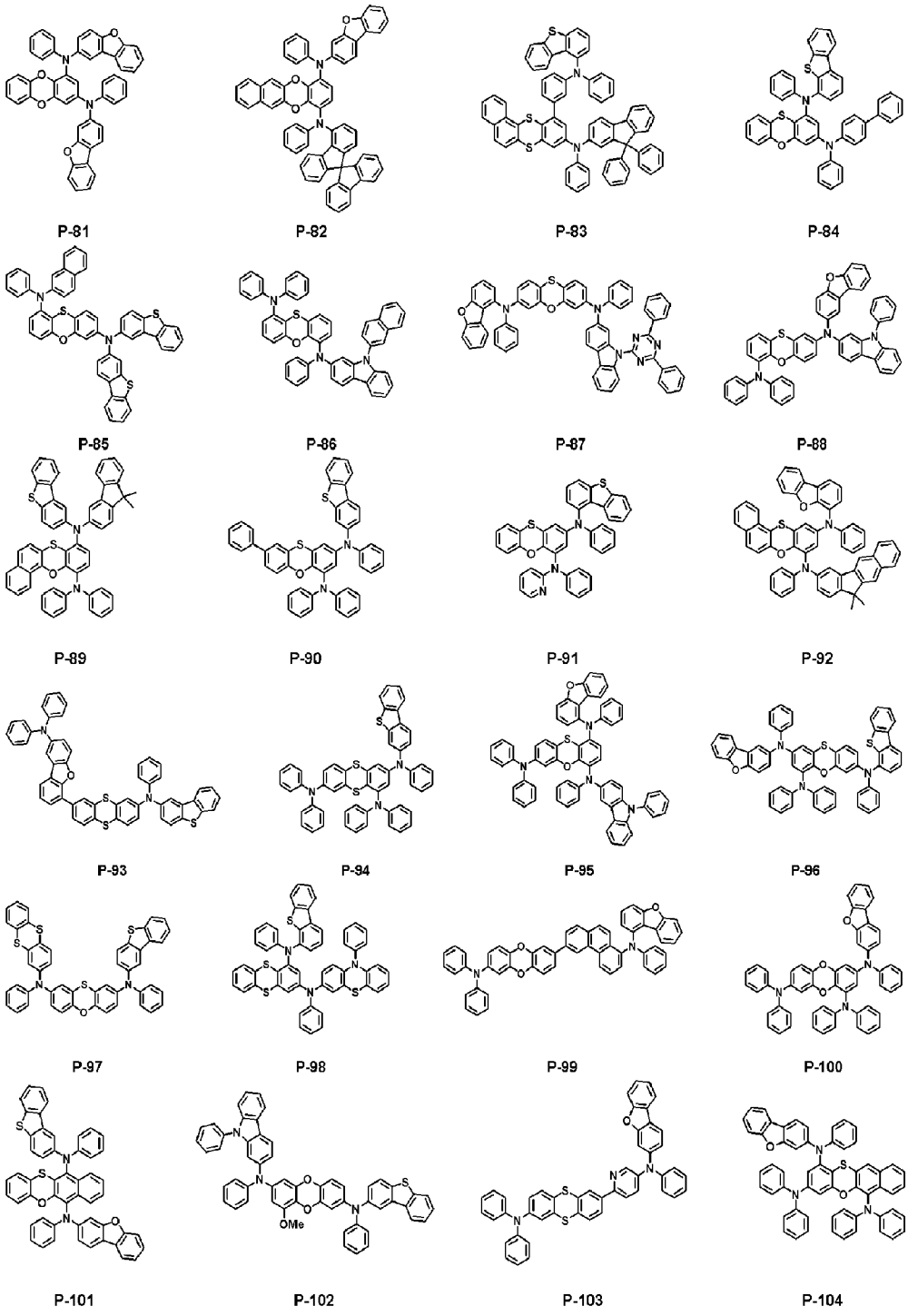
P-78



P-79



P-80



.

[청구항 5] 제 1전극, 제 2전극, 및 상기 제 1전극과 제 2전극 사이에 형성된 유기물층을 포함하는 유기전기소자에 있어서,
상기 유기물층은 제1항의 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하는 것을 특징으로 하는 유기전기소자.

[청구항 6] 제 5항에 있어서,
상기 유기물층은 정공주입층, 정공 수송층, 발광보조층, 발광층,

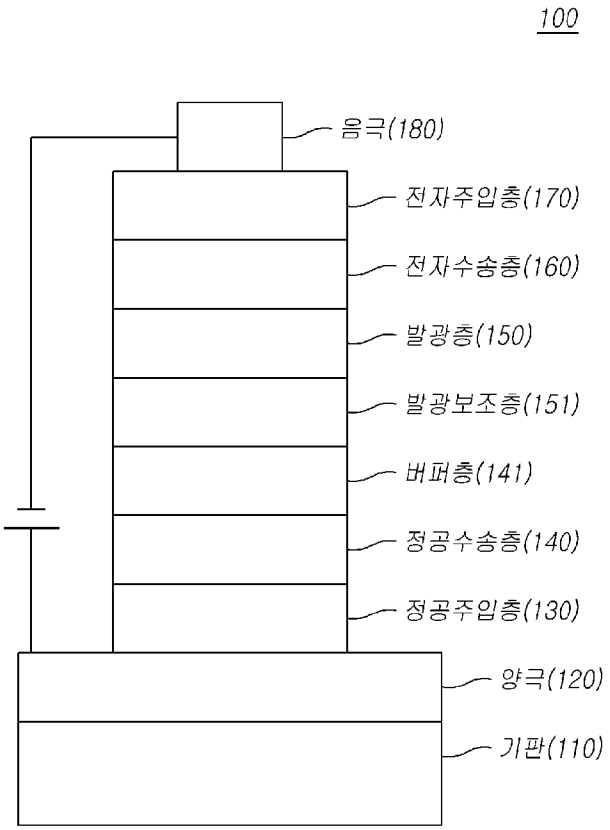
전자수송보조층, 전자수송층 및 전자주입층 중 적어도 하나를 포함하는 것을 특징으로 하는 유기전기소자.

[청구항 7] 제 6항에 있어서,
상기 화합물은 상기 발광발광보조층에 포함된 것을 특징으로 하는 유기전기소자.

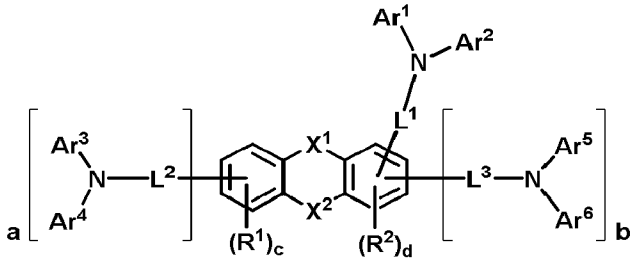
[청구항 8] 제5항의 유기전기소자를 포함하는 디스플레이장치; 및
상기 디스플레이장치를 구동하는 제어부;를 포함하는 전자장치.

[청구항 9] 제 8항에 있어서,
상기 유기전기소자는 유기전기발광소자, 유기태양전지, 유기감광체, 유기트랜지스터, 단색 조명용 소자 및 퀀텀닷 디스플레이용 소자로 이루어진 군에서 선택되는 것을 특징으로 하는 전자장치.

[도1]


100
음극(180)
전자주입층(170)
전자수송층(160)
발광층(150)
발광보조층(151)
버퍼층(141)
정공수송층(140)
정공주입층(130)
양극(120)
기판(110)

[도2]


Ar1
N
Ar2
L1
Ar3
N
L2
X1
X2
L3
N
Ar5
Ar4
Ar6
a
b
(R1)c
(R2)d

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.
PCT/KR2019/016421

A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER

C07D 411/12(2006.01)i, C07D 407/12(2006.01)i, C07D 409/12(2006.01)i, C07D 409/14(2006.01)i, C07D 411/14(2006.01)i, C07D 487/04(2006.01)i, H01L 51/00(2006.01)i, H01L 51/50(2006.01)i

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

B. FIELDS SEARCHED

Minimum documentation searched (classification system followed by classification symbols)

C07D 411/12; C07C 211/00; C07D 209/82; C07D 219/02; C07D 219/04; C07D 339/08; C07D 405/04; C07D 407/12; C09K 11/06; H05B 33/20; C07D 409/12; C07D 409/14; C07D 411/14; C07D 487/04; H01L 51/00; H01L 51/50

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

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

eKOMPASS (KIPO internal), STN (Registry, Caplus) & Keywords: organic light emitting device, dibenzofuran, dibenzothiophene, carbazole, amine

C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
X	KR 10-2015-0077263 A (DOOSAN CORPORATION) 07 July 2015 See claims 1, 11-13; page 14.	1-9
X	KR 10-2015-0079911 A (MERCK PATENT GMBH.) 08 July 2015 See claims 1, 12-14; paragraph [0243], compound 7r.	1-9
A	KR 10-2009-0041040 A (LG DISPLAY CO., LTD.) 28 April 2009 See claims 1, 4; paragraphs [0039]-[0041], compound 1.	1-9
A	KR 10-2014-0134884 A (SFC CO., LTD.) 25 November 2014 See claims 1-9.	1-9
A	KR 10-1120892 B1 (DOOSAN CORPORATION) 27 February 2012 See the entire document.	1-9
A	KR 10-2018-0006763 A (DOOSAN CORPORATION) 19 January 2018 See the entire document.	1-9

☐ Further documents are listed in the continuation of Box C. ☒ See patent family annex.

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

Date of the actual completion of the international search	Date of mailing of the international search report
20 MARCH 2020 (20.03.2020)	**20 MARCH 2020 (20.03.2020)**

Name and mailing address of the ISA/KR
Korean Intellectual Property Office
Government Complex Daejeon Building 4, 189, Cheongsa-ro, Seo-gu, Daejeon, 35208, Republic of Korea
Facsimile No. +82-42-481-8578

Authorized officer

Telephone No.

Form PCT/ISA/210 (second sheet) (January 2015)

INTERNATIONAL SEARCH REPORT
Information on patent family members

International application No.
PCT/KR2019/016421

Patent document cited in search report	Publication date	Patent family member	Publication date
KR 10-2015-0077263 A	07/07/2015	KR 10-1641417 B1	20/07/2016
		WO 2015-099438 A1	02/07/2015
KR 10-2015-0079911 A	08/07/2015	CN 104756275 A	01/07/2015
		CN 104756275 B	08/03/2017
		EP 2915199 A1	09/09/2015
		JP 2015-536567 A	21/12/2015
		JP 6469579 B2	13/02/2019
		KR 10-1963104 B1	28/03/2019
		US 2015-0280133 A1	01/10/2015
		US 9831441 B2	28/11/2017
		WO 2014-067614 A1	08/05/2014
KR 10-2009-0041040 A	28/04/2009	KR 10-1424266 B1	31/07/2014
KR 10-2014-0134884 A	25/11/2014	None	
KR 10-1120892 B1	27/02/2012	JP 2012-530696 A	06/12/2012
		JP 5690336 B2	25/03/2015
		KR 10-2010-0136681 A	29/12/2010
		US 2012-0168730 A1	05/07/2012
		US 8597802 B2	03/12/2013
		WO 2010-147319 A2	23/12/2010
		WO 2010-147319 A3	14/04/2011
KR 10-2018-0006763 A	19/01/2018	WO 2018-012762 A1	18/01/2018

국 제 조 사 보 고 서

국제출원번호
PCT/KR2019/016421

A. 발명이 속하는 기술분류(국제특허분류(IPC))

C07D 411/12(2006.01)i, C07D 407/12(2006.01)i, C07D 409/12(2006.01)i, C07D 409/14(2006.01)i, C07D 411/14(2006.01)i, C07D 487/04(2006.01)i, H01L 51/00(2006.01)i, H01L 51/50(2006.01)i

B. 조사된 분야

조사된 최소문헌(국제특허분류를 기재)
C07D 411/12; C07C 211/00; C07D 209/82; C07D 219/02; C07D 219/04; C07D 339/08; C07D 405/04; C07D 407/12; C09K 11/06; H05B 33/20; C07D 409/12; C07D 409/14; C07D 411/14; C07D 487/04; H01L 51/00; H01L 51/50

조사된 기술분야에 속하는 최소문헌 이외의 문헌
한국등록실용신안공보 및 한국공개실용신안공보: 조사된 최소문헌란에 기재된 IPC
일본등록실용신안공보 및 일본공개실용신안공보: 조사된 최소문헌란에 기재된 IPC

국제조사에 이용된 전산 데이터베이스(데이터베이스의 명칭 및 검색어(해당하는 경우))
eKOMPASS(특허청 내부 검색시스템), STN(Registry, Caplus) & 키워드: 유기발광소자(organic light emitting device), 디벤조퓨란(dibenzofuran), 디벤조티오펜(dibenzothiophene), 카바졸(carbazole), 아민(amine)

C. 관련 문헌

카테고리*	인용문헌명 및 관련 구절(해당하는 경우)의 기재	관련 청구항
X	KR 10-2015-0077263 A (주식회사 두산) 2015.07.07 청구항 1, 11-13; 페이지 14	1-9
X	KR 10-2015-0079911 A (메르크 파텐트 게엠베하) 2015.07.08 청구항 1, 12-14; 단락 [0243], 화합물 7r	1-9
A	KR 10-2009-0041040 A (엘지디스플레이 주식회사) 2009.04.28 청구항 1, 4; 단락 [0039]-[0041], 화합물 1	1-9
A	KR 10-2014-0134884 A (에스에프씨 주식회사) 2014.11.25 청구항 1-9	1-9
A	KR 10-1120892 B1 (주식회사 두산) 2012.02.27 전문	1-9
A	KR 10-2018-0006763 A (주식회사 두산) 2018.01.19 전문	1-9

☐ 추가 문헌이 C(계속)에 기재되어 있습니다.

☒ 대응특허에 관한 별지를 참조하십시오.

* 인용된 문헌의 특별 카테고리:

"A" 특별히 관련이 없는 것으로 보이는 일반적인 기술수준을 정의한 문헌

"D" 본 국제출원에서 출원인이 인용한 문헌

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

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

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

"P" 우선일 이후에 공개되었으나 국제출원일 이전에 공개된 문헌

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

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

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

"&" 동일한 대응특허문헌에 속하는 문헌

국제조사의 실제 완료일	국제조사보고서 발송일
2020년 03월 20일 (20.03.2020)	2020년 03월 20일 (20.03.2020)

ISA/KR의 명칭 및 우편주소
대한민국 특허청
(35208) 대전광역시 서구 청사로 189, 4동 (둔산동, 정부대전청사)
팩스 번호 +82-42-481-8578

심사관
허주형
전화번호 +82-42-481-8150

국제조사보고서
대응특허에 관한 정보

국제출원번호
PCT/KR2019/016421

국제조사보고서에서 인용된 특허문헌	공개일	대응특허문헌	공개일
KR 10-2015-0077263 A	2015/07/07	KR 10-1641417 B1	2016/07/20
		WO 2015-099438 A1	2015/07/02
KR 10-2015-0079911 A	2015/07/08	CN 104756275 A	2015/07/01
		CN 104756275 B	2017/03/08
		EP 2915199 A1	2015/09/09
		JP 2015-536567 A	2015/12/21
		JP 6469579 B2	2019/02/13
		KR 10-1963104 B1	2019/03/28
		US 2015-0280133 A1	2015/10/01
		US 9831441 B2	2017/11/28
		WO 2014-067614 A1	2014/05/08
KR 10-2009-0041040 A	2009/04/28	KR 10-1424266 B1	2014/07/31
KR 10-2014-0134884 A	2014/11/25	없음	
KR 10-1120892 B1	2012/02/27	JP 2012-530696 A	2012/12/06
		JP 5690336 B2	2015/03/25
		KR 10-2010-0136681 A	2010/12/29
		US 2012-0168730 A1	2012/07/05
		US 8597802 B2	2013/12/03
		WO 2010-147319 A2	2010/12/23
		WO 2010-147319 A3	2011/04/14
KR 10-2018-0006763 A	2018/01/19	WO 2018-012762 A1	2018/01/18