

(12) 특허협력조약에 의하여 공개된 국제출원

(19) 세계지식재산권기구  
국제사무국

(43) 국제공개일  
2016년 5월 6일 (06.05.2016)



(10) 국제공개번호  
**WO 2016/068451 A1**

- (51) 국제특허분류:  
*C09K 11/06* (2006.01) *H01L 27/32* (2006.01)  
*H01L 51/50* (2006.01)
- (21) 국제출원번호: PCT/KR2015/007572
- (22) 국제출원일: 2015년 7월 21일 (21.07.2015)
- (25) 출원언어: 한국어
- (26) 공개언어: 한국어
- (30) 우선권정보:  
10-2014-0147558 2014년 10월 28일 (28.10.2014) KR
- (71) 출원인: 삼성에스디아이 주식회사 (SAMSUNG SDI CO., LTD.) [KR/KR]; 446-902 경기도 용인시 기흥구 공세로 150-20, Gyeonggi-do (KR).
- (72) 발명자: 박재한 (PARK, Jae-Han); 443-803 경기도 수원시 영통구 삼성로 130, Gyeonggi-do (KR). 김영권 (KIM, Young-Kwon); 443-803 경기도 수원시 영통구 삼성로 130, Gyeonggi-do (KR). 류진현 (LUI, Jin-Hyun); 443-803 경기도 수원시 영통구 삼성로 130, Gyeonggi-do (KR). 유은선 (YU, Eun-Sun); 443-803 경기도 수원시 영통구 삼성로 130, Gyeonggi-do (KR). 이한일 (LEE, Han-Il); 443-803 경기도 수원시 영통구 삼성로 130, Gyeonggi-do (KR). 정호국 (JUNG, Ho-Kuk);

443-803 경기도 수원시 영통구 삼성로 130, Gyeonggi-do (KR).

(74) 대리인: 팬코리아특허법인 (PANKOREA PATENT AND LAW FIRM); 135-933 서울시 강남구 논현로 85길 70, 13층, Seoul (KR).

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

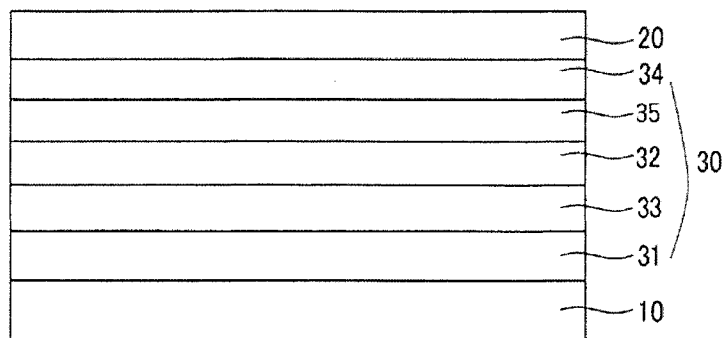
(84) 지정국 (별도의 표시가 없는 한, 가능한 모든 종류의 역내 권리의 보호를 위하여): ARIPO (BW, GH, GM, KE, LR, LS, MW, MZ, NA, RW, SD, SL, ST, SZ, TZ, UG, ZM, ZW), 유라시아 (AM, AZ, BY, KG, KZ, RU, TJ, TM), 유럽 (AL, AT, BE, BG, CH, CY, CZ, DE, DK, EE, ES, FI, FR, GB, GR, HR, HU, IE, IS, IT, LT, LU, LV, MC, MK, MT, NL, NO, PL, PT, RO, RS,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

[다음 쪽 계속]

(54) Title: ORGANIC OPTOELECTRONIC DEVICE AND DISPLAY APPARATUS

(54) 발명의 명칭 : 유기 광전자 소자 및 표시 장치

[Fig. 1]



(57) Abstract: The present invention relates to an organic optoelectronic device and a display apparatus comprising same, the organic optoelectronic device comprising: an anode and a cathode facing each other; a light-emitting layer located between the anode and cathode; a hole transport layer located between the anode and light-emitting layer; an auxiliary hole transport layer located between the hole transport layer and light-emitting layer; an electron transport layer located between the cathode and light-emitting layer; and an auxiliary electron transport layer between the electron transport layer and light-emitting layer, wherein the auxiliary electron transport layer comprises at least one type of a first compound expressed by a particular chemical formula, and the auxiliary hole transport layer comprises at least one type of a second compound expressed by a particular chemical formula.

(57) 요약서: 서로 마주하는 애노드와 캐소드, 상기 애노드와 상기 캐소드 사이에 위치하는 발광층, 상기 애노드와 상기 발광층 사이에 위치하는 정공수송층, 상기 정공수송층과 상기 발광층 사이에 위치하는 정공수송보조층, 상기 캐소드와 상기 발광층 사이에 위치하는 전자수송층, 그리고 상기 전자수송층과 상기 발광층 사이에 위치하는 전자수송보조층을 포함하고, 상기 전자수송보조층은 특정 화학식으로 표현되는 적어도 1종의 제 1 화합물을 포함하고, 상기 정공수송보조층은 특정 화학식으로 표현되는 적어도 1종의 제 2 화합물을 포함하는 유기 광전자 소자 및 상기 유기 광전자 소자를 포함하는 표시 장치에 관한 것이다.



WO 2016/068451 A1



OAPI (BF, BJ, CF, CG, CI, CM, GA, GN, GQ, GW, KM, **공개:**  
ML, MR, NE, SN, TD, TG).

— 국제조사보고서와 함께 (조약 제 21 조(3))

**【명세서】****【발명의 명칭】**

유기 광전자 소자 및 표시 장치

**【기술분야】**

5            유기 광전자 소자 및 표시 장치에 관한 것이다.

**【배경기술】**

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

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

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

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

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

             장수명 풀 칼라 디스플레이의 가장 큰 문제가 되고 있는 요소 중의 하나는 청색유기발광소자의 수명이다. 따라서 장수명 청색유기발광소자의 개발을 위해 많은 연구가 진행되고 있는 중이다. 본 발명에서는 이러한 문제점을 해결하기 위해 장수명 청색유기발광소자를 제공하고자 한다.

25           **【발명의 상세한 설명】**

**【기술적 과제】**

             일 구현예는 고효율 특성을 구현할 수 있는 유기 광전자 소자를 제공한다.

             다른 구현예는 상기 유기 광전자 소자를 포함하는 표시 장치를 제공한다.

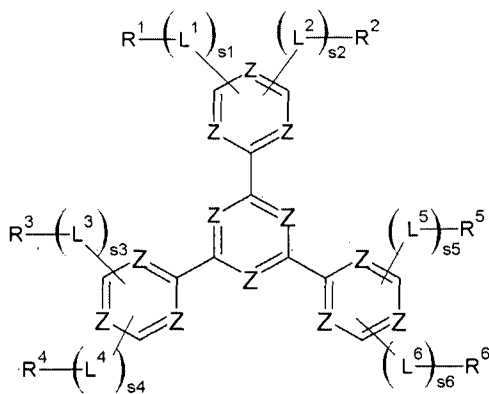
**【기술적 해결방법】**

30           일 구현예에 따르면, 서로 마주하는 애노드와 캐소드, 상기 애노드와 상기

캐소드 사이에 위치하는 발광층, 상기 애노드와 상기 발광층 사이에 위치하는 정공수송층, 상기 정공수송층과 상기 발광층 사이에 위치하는 정공수송보조층, 상기 캐소드와 상기 발광층 사이에 위치하는 전자수송층, 그리고 상기 전자수송층과 상기 발광층 사이에 위치하는 전자수송보조층을 포함하고, 상기 전자수송보조층은 하기

5 화학식 1로 표현되는 적어도 1종의 제1 화합물을 포함하고, 상기 정공수송보조층은 하기 화학식 2로 표현되는 적어도 1종의 제2 화합물을 포함하는 유기 광전자 소자를 제공한다.

[화학식 1]



상기 화학식 1에서,

Z는 각각 독립적으로 N, C 또는 CR<sup>a</sup>이고,

Z 중 적어도 하나는 N 이고,

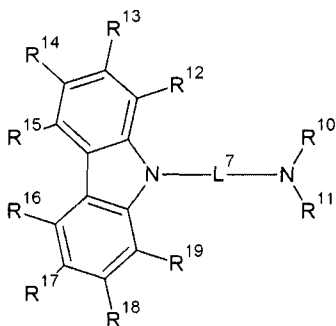
R<sup>1</sup> 내지 R<sup>6</sup> 및 R<sup>a</sup>는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C10 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된

15 C3내지 C30 헤테로아릴기 또는 이들의 조합이고,

L<sup>1</sup> 내지 L<sup>6</sup>은 각각 독립적으로 단일결합, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴렌기, 치환 또는 비치환된 헤테로아릴렌기 또는 이들의 조합이고,

s1 내지 s6는 각각 독립적으로 0 내지 5의 정수이고,

[화학식 2]



상기 화학식 2에서,

$R^{10}$  내지  $R^{19}$ 는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴렌기 또는 이들의 조합이고,

5  $L^7$ 은 치환 또는 비치환된 C2 내지 C10 알케닐렌기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴렌기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴렌기 또는 이들의 조합이다.

상기 "치환"은 적어도 하나의 수소가 중수소, 할로젠기, 히드록시기, 아미노기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 아민기, 니트로기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C40 실릴기, C1 내지 C30 알킬기, C3 내지 C30 시클로알킬기, C2 내지 C30 헤테로시클로알킬기, C6 내지 C30 아릴기, C2 내지 C30 헤테로아릴기, C1 내지 C20 알콕시기, 플루오로기, C1 내지 C10 트리플루오로알킬기, 플루오레닐기 또는 시아노기로 치환된 것을 의미한다.

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

#### 【유리한 효과】

고효율 유기 광전자 소자를 구현할 수 있다.

#### 【도면의 간단한 설명】

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

#### 【발명의 실시를 위한 최선의 형태】

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

25 본 명세서에서 "치환"이란 별도의 정의가 없는 한, 치환기 또는 화합물 중의 적어도 하나의 수소가 중수소, 할로젠기, 히드록시기, 아미노기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 아민기, 니트로기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C40 실릴기, C1 내지 C30 알킬기, C1 내지 C10 알킬실릴기, C3 내지 C30 시클로알킬기, C2 내지 C30 헤테로시클로알킬기, C6 내지 C30 아릴기, C2 내지 C30 헤테로아릴기, C1 내지 C20 알콕시기, 플루오로기, 트리플루오로메틸기 등의 C1 내지 C10 트리플루오로알킬기

30

또는 시아노기로 치환된 것을 의미한다.

또한 상기 치환된 할로젠기, 히드록시기, 아미노기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 아민기, 니트로기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C40 실릴기, C1 내지 C30 알킬기, C1 내지 C10 알킬실릴기, C3 내지 C30 시클로알킬기, C2 내지 C30

- 5 헤테로시클로알킬기, C6 내지 C30 아릴기, C2 내지 C30 헤테로아릴기, C1 내지 C20 알콕시기, 플루오로기, 트리플루오로메틸기 등의 C1 내지 C10 트리플루오로알킬기 또는 시아노기 중 인접한 두 개의 치환기가 융합되어 고리를 형성할 수도 있다. 예를 들어, 상기 치환된 C6 내지 C30 아릴기는 인접한 또다른 치환된 C6 내지 C30 아릴기와 융합되어 치환 또는 비치환된 플루오렌 고리를 형성할 수 있다.

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

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

- 상기 알킬기는 C1 내지 C30 알킬기일 수 있다. 보다 구체적으로 알킬기는 C1 내지 C20 알킬기 또는 C1 내지 C10 알킬기일 수도 있다. 예를 들어, C1 내지 C4 알킬기는 알킬쇄에 1개 내지 4 개의 탄소원자가 포함되는 것을 의미하며, 메틸, 에틸, 프로필, 이소-프로필, n-부틸, 이소-부틸, sec-부틸 및 t-부틸로 이루어진 군에서  
20 선택됨을 나타낸다.

상기 알킬기는 구체적인 예를 들어 메틸기, 에틸기, 프로필기, 이소프로필기, 부틸기, 이소부틸기, t-부틸기, 펜틸기, 헥실기, 시클로프로필기, 시클로부틸기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기 등을 의미한다.

- 본 명세서에서 "아릴(aryl)기"는 환형인 치환기의 모든 원소가 p-오비탈을  
25 가지고 있으며, 이들 p-오비탈이 공액(conjugation)을 형성하고 있는 치환기를 의미하고, 모노시클릭, 폴리시클릭 또는 융합 고리 폴리시클릭(즉, 탄소원자들의 인접한 쌍들을 나눠 가지는 고리) 작용기를 포함한다.

- 본 명세서에서 "헤테로아릴(heteroaryl)기"는 아릴기 내에 N, O, S, P 및 Si로 이루어진 군에서 선택되는 헤테로 원자를 1 내지 3개 함유하고, 나머지는 탄소인  
30 것을 의미한다. 상기 헤테로아릴기가 융합고리인 경우, 각각의 고리마다 상기

헤테로 원자를 1개 내지 3개 포함할 수 있다.

보다 구체적으로, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기 및/또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴기는, 치환 또는 비치환된 페닐기, 치환 또는 비치환된 나프틸기, 치환 또는 비치환된 안트라세닐기, 치환 또는 비치환된 페난트릴기, 치환 또는 비치환된 나프타세닐기, 치환 또는 비치환된 피레닐기, 치환 또는 비치환된 바이페닐기, 치환 또는 비치환된 p-터페닐기, 치환 또는 비치환된 m-터페닐기, 치환 또는 비치환된 크리스세닐기, 치환 또는 비치환된 트리페닐레닐기, 치환 또는 비치환된 페틸레닐기, 치환 또는 비치환된 인데닐기, 치환 또는 비치환된 퓨라닐기, 치환 또는 비치환된 티오펜기, 치환 또는 비치환된 피롤릴기, 치환 또는 비치환된 피라졸릴기, 치환 또는 비치환된 이미다졸릴기, 치환 또는 비치환된 트리아졸릴기, 치환 또는 비치환된 옥사졸릴기, 치환 또는 비치환된 티아졸릴기, 치환 또는 비치환된 옥사디아졸릴기, 치환 또는 비치환된 티아디아졸릴기, 치환 또는 비치환된 피리딜기, 치환 또는 비치환된 피리미디닐기, 치환 또는 비치환된 피라지닐기, 치환 또는 비치환된 트리아지닐기, 치환 또는 비치환된 벤조퓨라닐기, 치환 또는 비치환된 벤조티오펜기, 치환 또는 비치환된 벤즈이미다졸릴기, 치환 또는 비치환된 인돌릴기, 치환 또는 비치환된 퀴놀리닐기, 치환 또는 비치환된 이소퀴놀리닐기, 치환 또는 비치환된 퀴나졸리닐기, 치환 또는 비치환된 퀴녹살리닐기, 치환 또는 비치환된 나프티리디닐기, 치환 또는 비치환된 벤즈옥사진릴기, 치환 또는 비치환된 벤즈티아진릴기, 치환 또는 비치환된 아크리디닐기, 치환 또는 비치환된 페나진릴기, 치환 또는 비치환된 페노티아진릴기, 치환 또는 비치환된 페녹사진릴기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐기, 치환 또는 비치환된 디벤조퓨란릴기, 치환 또는 비치환된 디벤조티오펜기, 치환 또는 비치환된 카바졸릴기 또는 이들의 조합일 수 있으나, 이에 제한되지는 않는다.

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

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

이동을 용이하게 하는 특성을 의미한다.

이하 일 구현예에 따른 유기 광전자 소자에 대하여 설명한다.

상기 유기 광전자 소자는 전기 에너지와 광 에너지를 상호 전환할 수 있는 소자이면 특별히 한정되지 않으며, 예컨대 유기 광전 소자, 유기 발광 소자, 유기 태양 전지 및 유기 감광체 드럼 등을 들 수 있다.

여기서는 유기 광전자 소자의 일 예인 유기 발광 소자를 예시적으로 설명하지만, 이에 한정되지 않고 다른 유기 광전자 소자에도 동일하게 적용될 수 있다.

도면에서 여러 층 및 영역을 명확하게 표현하기 위하여 두께를 확대하여 나타내었다. 명세서 전체를 통하여 유사한 부분에 대해서는 동일한 도면 부호를 붙였다. 층, 막, 영역, 판 등의 부분이 다른 부분 "위에" 있다고 할 때, 이는 다른 부분 "바로 위에" 있는 경우 뿐만 아니라 그 중간에 또 다른 부분이 있는 경우도 포함한다. 반대로 어떤 부분이 다른 부분 "바로 위에" 있다고 할 때에는 중간에 다른 부분이 없는 것을 뜻한다.

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

도 1을 참고하면, 일 구현예에 따른 유기 광전자 소자는 서로 마주하는 애노드(10)와 캐소드(20), 그리고 애노드(10)와 캐소드(20) 사이에 위치하는 유기층(30)을 포함한다.

애노드(10)는 예컨대 정공 주입이 원활하도록 일 함수가 높은 도전체로 만들어질 수 있으며, 예컨대 금속, 금속 산화물 및/또는 도전성 고분자로 만들어질 수 있다. 애노드(10)는 예컨대 니켈, 백금, 바나듐, 크롬, 구리, 아연, 금과 같은 금속 또는 이들의 합금; 아연산화물, 인듐산화물, 인듐주석산화물(ITO), 인듐아연산화물(IZO)과 같은 금속 산화물; ZnO와 Al 또는 SnO<sub>2</sub>와 Sb와 같은 금속과 산화물의 조합; 폴리(3-메틸티오펜), 폴리(3,4-(에틸렌-1,2-디옥시)티오펜)(polyethylenedioxythiophene: PEDT), 폴리피롤 및 폴리아닐린과 같은 도전성 고분자 등을 들 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

캐소드(20)는 예컨대 전자 주입이 원활하도록 일 함수가 낮은 도전체로 만들어질 수 있으며, 예컨대 금속, 금속 산화물 및/또는 도전성 고분자로 만들어질 수 있다. 캐소드(20)는 예컨대 마그네슘, 칼슘, 나트륨, 칼륨, 타이타늄, 인듐, 이트륨,

리튬, 가돌리늄, 알루미늄, 은, 주석, 납, 세슘, 바륨 등과 같은 금속 또는 이들의 합금; LiF/Al, LiO<sub>2</sub>/Al, LiF/Ca, LiF/Al 및 BaF<sub>2</sub>/Ca와 같은 다층 구조 물질을 들 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

유기층(30)은 정공수송층(31), 발광층(32), 그리고 정공수송층(31)과 발광층(32) 사이에 위치하는 정공수송보조층(33)을 포함한다.

또한, 유기층(30)은 전자수송층(34), 그리고 전자수송층(34)과 발광층(32) 사이에 위치한 전자수송보조층(35)을 포함한다.

또한, 유기층(30)은 정공수송층(31)과 애노드(10) 사이에 정공주입층(37)을 더 포함할 수 있으며, 전자수송층(34)와 캐소드(20) 사이에 전자주입층(36)을 추가로 더 포함할 수 있다.

정공수송층(31)과 애노드(10)사이에 적층되는 정공주입층(37)은 애노드로 사용되는 ITO와, 정공수송층(31)으로 사용되는 유기물질 사이의 계면 특성을 개선할 뿐만 아니라 그 표면이 평탄하지 않은 ITO의 상부에 도포되어 ITO의 표면을 부드럽게 만들어주는 기능을 한다. 예를 들어 정공주입층(37)은 애노드로 사용될 수 있는 ITO의 일함수 수준과 정공수송층(31)의 HOMO 수준의 차이를 조절하기 위하여 ITO의 일함수 수준과 정공수송층(31)의 HOMO 수준의 중간값을 가지는 물질로서, 특히 적절한 전도성을 갖는 물질을 선택한다. 본 발명과 관련하여 정공주입층(37)을 구성하는 물질로서 N<sub>4</sub>,N<sub>4</sub>'-디페닐-N<sub>4</sub>,N<sub>4</sub>'-비스(9-페닐-9H-카바졸-3-일)바이페닐-4,4'-디아민(N<sub>4</sub>,N<sub>4</sub>'-diphenyl-N<sub>4</sub>,N<sub>4</sub>'-bis(9-phenyl-9H-carbazol-3-yl)biphenyl-4,4'-diamine)이 사용될 수 있으나, 이에 제한되는 것은 아니다. 그 외에도 정공주입층(37)을 구성하는 종래의 물질과 함께 사용될 수 있는데, 예를 들어, copper phthalocyanine(CuPc), N,N'-dinaphthyl-N,N'-phenyl-(1,1'-biphenyl)-4,4'-diamine, NPD), 4,4',4''-tris[methylphenyl(phenyl)amino] triphenyl amine(m-MTDATA), 4,4',4''-tris[1-naphthyl(phenyl)amino] triphenyl amine(1-TNATA), 4,4',4''-tris[2-naphthyl(phenyl)amino]triphenyl amine(2-TNATA), 1,3,5-tris[N-(4-diphenylaminophenyl)phenylamino] benzene(p-DPA-TDAB) 등과 같은 방향족 아민류는 물론이고, 4,4'-bis[N-[4-{N,N-bis(3-methylphenyl)amino}phenyl]-N-phenylamino]biphenyl(DNTPD), hexaazatriphenylene-hexacarbonitrile (HAT-CN) 등의 화합물, 전도성 고분자로서의 폴리티오펜 유도체인 poly(3,4-ethylenedioxythiophene)-poly(styrenesulfonate)(PEDOT)를 사용할 수 있다. 정공주입층(37)는 예를 들어 10 내지

300 Å의 두께로 애노드로 사용되는 ITO의 상부에 코팅될 수 있다.

전자주입층(36)은 전자수송층의 상부에 적층되어 캐소드로부터의 전자 주입을 용이하게 해주어 궁극적으로 전력효율을 개선시키는 기능을 수행하는 층으로, 당 기술분야에서 통상적으로 사용되는 것이면 특별한 제한없이 사용할 수

5 있으며, 예컨대, LiF, Liq, NaCl, CsF, Li<sub>2</sub>O, BaO 등의 물질을 이용할 수 있다.

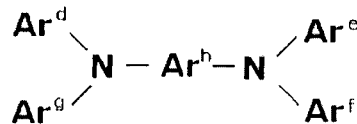
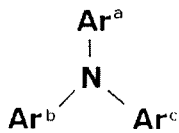
정공수송층(31)은 애노드(10)로부터 발광층(32)으로 정공 전달을 용이하게 하기 위한 층으로, 예컨대 아민 화합물일 수 있으나 이에 한정되는 것은 아니다.

상기 아민 화합물은 예컨대 적어도 하나의 아릴기 및/또는 헤테로아릴기를 포함할 수 있다. 상기 아민 화합물은 예컨대 하기 화학식 a 또는 화학식 b로

10 표현될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[화학식 a]

[화학식 b]



상기 화학식 a 또는 화학식 b에서,

Ar<sup>a</sup> 내지 Ar<sup>g</sup>는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴기 또는 이들의 조합이고,

Ar<sup>a</sup> 내지 Ar<sup>e</sup> 중 적어도 하나 및 Ar<sup>d</sup> 내지 Ar<sup>g</sup> 중 적어도 하나는 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴기 또는 이들의 조합이고,

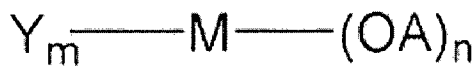
Ar<sup>h</sup>는 단일결합, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 알킬렌기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴렌기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴렌기 또는 이들의 조합이다.

전자수송층(34)은 캐소드(20)로부터 발광층(32)으로 전자 전달을 용이하게 하기 위한 층으로, 전자 받개 작용기 (electron withdrawing group)를 보유하고 있는 유기화합물, 전자를 잘 수용할 수 있는 금속화합물, 또는 이들의 혼합물이 사용될 수 있다. 예컨대 전자수송층 재료로서 알루미늄 트리하이드록시퀴놀린(aluminum trihydroxyquinoline, Alq<sub>3</sub>), 1,3,4-옥사디아졸 유도체인 2-(4-바이페닐일)-5-페닐-1,3,4-옥사디아졸(2-(4-biphenyl)-5-phenyl-1,3,4-oxadiazole, PBD), 퀴녹살린 유도체인 1,3,4-

트리스[(3-페닐-6-트리플루오로메틸)퀴놀살린-2-일]벤젠(1,3,4-tris[(3-phenyl-6-trifluoromethyl)quino-xaline-2-yl] benzene, TPQ), 트리아졸 유도체 및 트리아진 유도체인 8-(4-(4-(나프탈렌-2-일)-6-(나프탈렌-3-일)-1,3,5-트리아진-2-일)페닐)퀴놀린 (8-(4-(4-(naphthalen-2-yl)-6-(naphthalen-3-yl)-1,3,5-triazin-2-yl)phenyl)quinoline) 등이 사용될 수  
5 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

또한, 전자수송층은 하기 화학식 c로 표시되는 유기 금속 화합물이 단독 또는 상기 전자수송층 재료와 혼합으로 사용될 수 있다.

[화학식 c]



10 상기 화학식 c에서,

Y는 C, N, O 및 S에서 선택되는 어느 하나가 상기 M에 직접 결합되어 단일결합을 이루는 부분과, C, N, O 및 S에서 선택되는 어느 하나가 상기 M에 배위결합을 이루는 부분을 포함하며, 상기 단일결합과 배위결합에 의해 킬레이트된 리간드이고,

15 상기 M은 알칼리 금속, 알칼리 토금속, 알루미늄(Al) 또는 붕소(B)원자이고, 상기 OA는 상기 M과 단일결합 또는 배위결합 가능한 1가의 리간드로서,

상기 O는 산소이며,

A는 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 50의 아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 30의 알케닐기,  
20 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 20의 알키닐기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 30의 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 30의 시클로알케닐기 및 치환 또는 비치환된 이중 원자로 O, N 또는 S를 갖는 탄소수 2 내지 50의 헤테로아릴기 중에서 선택되는 어느 하나이고,

상기 M이 알칼리 금속에서 선택되는 하나의 금속인 경우에는  $m=1, n=0$ 이고,

25 상기 M이 알칼리 토금속에서 선택되는 하나의 금속인 경우에는  $m=1, n=1$ 이거나, 또는  $m=2, n=0$ 이고,

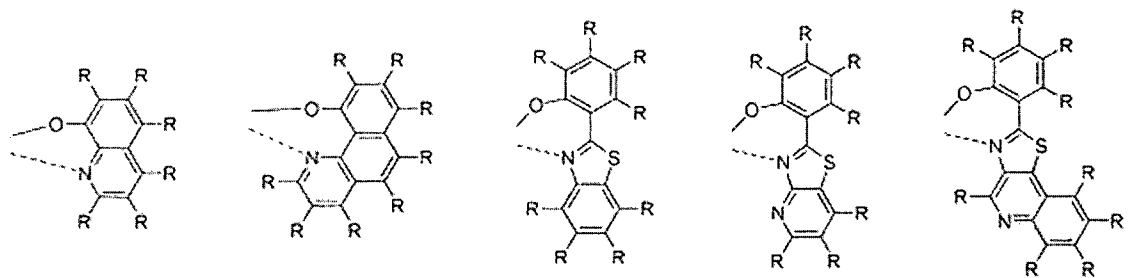
상기 M이 붕소 또는 알루미늄인 경우에는  $m=1$  내지 3 중 어느 하나의 정수이며,  $n$ 은 0 내지 2 중 어느 하나의 정수로서,  $m+n=3$ 을 만족하며,

상기 '치환 또는 비치환된'에서의 '치환'은 중수소, 시아노기, 할로젠기,

히드록시기, 니트로기, 알킬기, 알콕시기, 알킬아미노기, 아릴아미노기, 헤테로아릴아미노기, 알킬실릴기, 아릴실릴기, 아릴옥시기, 아릴기, 헤테로아릴기, 게르마늄, 인 및 보론으로 이루어진 군에서 선택된 1개 이상의 치환기로 치환되는 것을 의미한다.

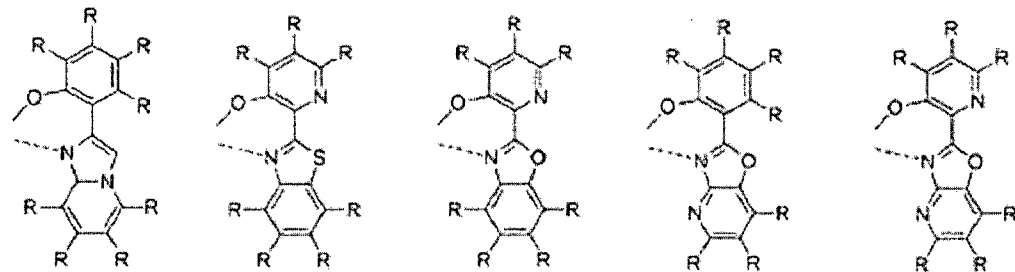
- 5        본 발명에서 Y는 각각 동일하거나 상이하며, 서로 독립적으로 하기 화학식 c1 내지 화학식 c39로부터 선택되는 어느 하나일 수 있으나, 이에 한정된 것은 아니다.

[화학식 c1] [화학식 c2] [화학식 c3] [화학식 c4] [화학식 c5]

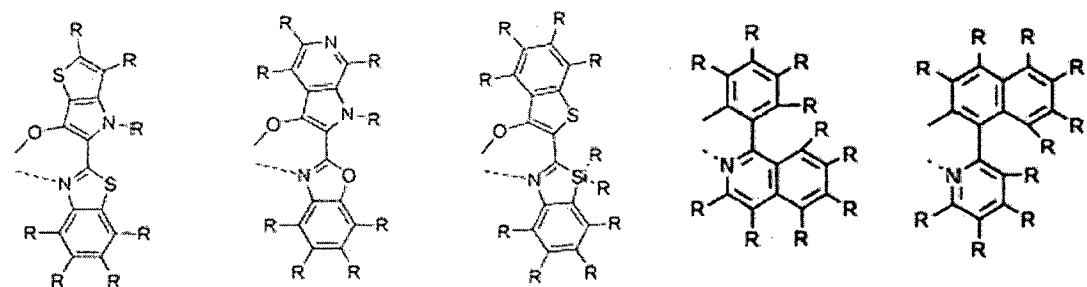


10

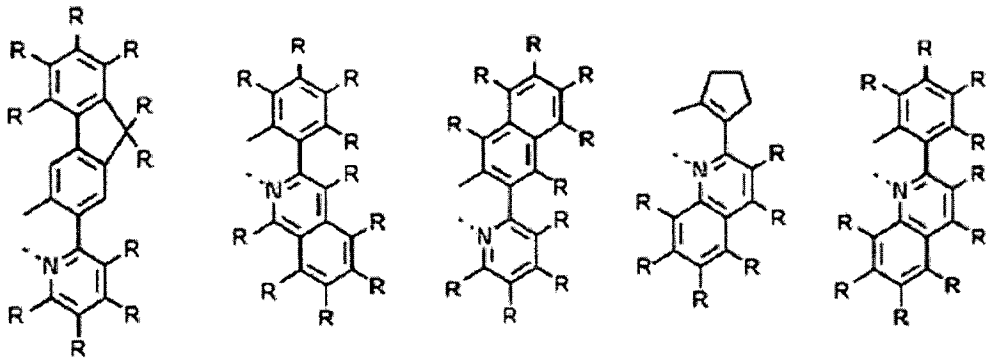
[화학식 c6] [화학식 c7] [화학식 c8] [화학식 c9] [화학식 c10]



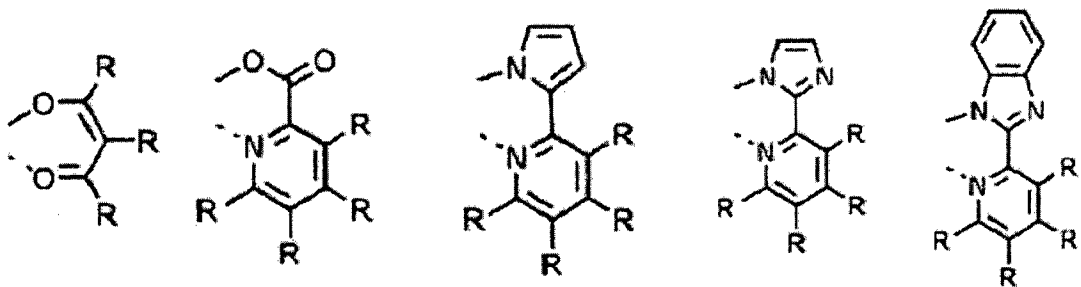
[화학식 c11] [화학식 c12] [화학식 c13] [화학식 c14] [화학식 c15]



[화학식 c16] [화학식 c17] [화학식 c18] [화학식 c19] [화학식 c20]

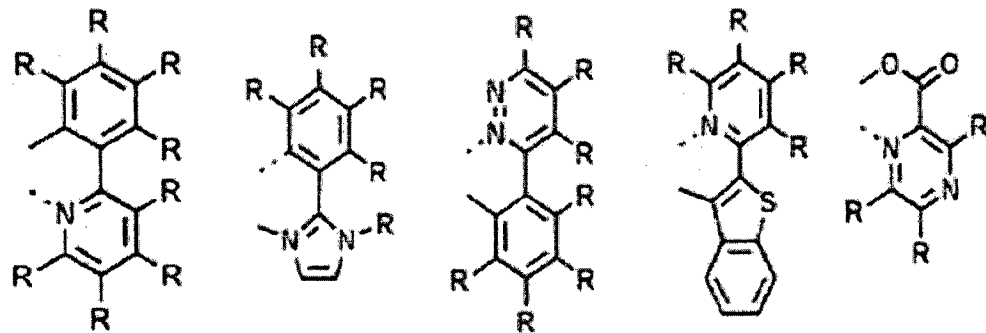


[화학식 c21] [화학식 c22] [화학식 c23] [화학식 c24] [화학식 c25]

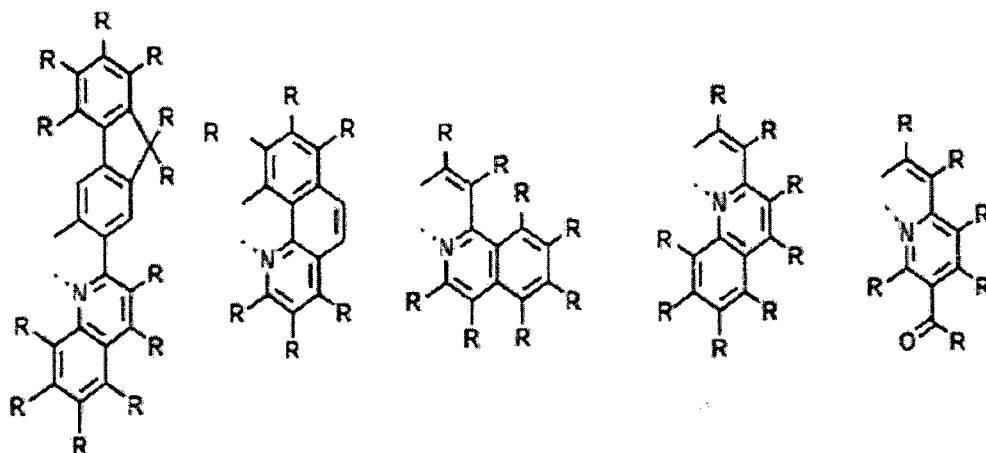


5

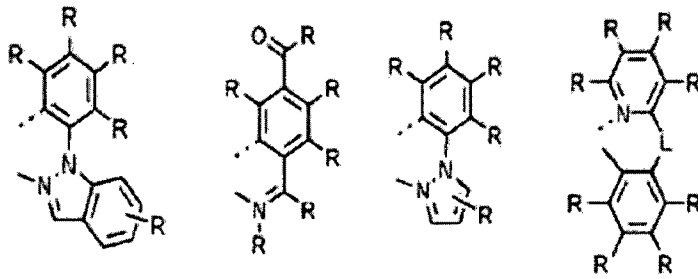
[화학식 c26] [화학식 c27] [화학식 c28] [화학식 c29] [화학식 c30]



[화학식 c31] [화학식 c32] [화학식 c33] [화학식 c34] [화학식 c35]



[화학식 c36] [화학식 c37] [화학식 c38] [화학식 c39]



상기 화학식 c1 내지 화학식 c39에서,

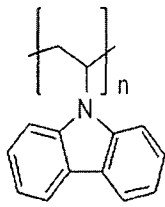
R은 서로 동일하거나 상이하며, 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠,

- 5 시아노기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 알케닐기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬아미노기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬실릴기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30
- 10 아릴아미노기 및 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴실릴기 중에서 선택되고, 인접한 치환체와 알킬렌 또는 알케닐렌으로 연결되어 스피로고리 또는 융합고리를 형성할 수 있다.

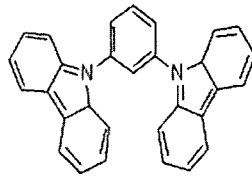
- 발광층(32)은 발광 기능을 갖는 유기층으로서, 도핑 시스템을 채용하는 경우, 호스트와 도펀트를 포함하고 있다. 이때, 호스트는, 주로 전자와 정공의 재결합을
- 15 촉진하고, 여기자를 발광층 내에 가두는 기능을 가지며, 도펀트는, 재결합으로 얻어진 여기자를 효율적으로 발광시키는 기능을 갖는다.

발광층은 공지의 호스트 및 도펀트를 포함할 수 있다.

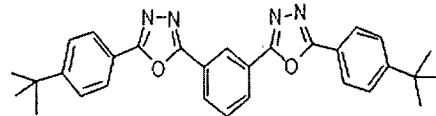
- 공지의 호스트로는 예컨대, Alq3, CBP(4,4'-N,N'-디카바졸-비페닐), PVK(폴리(n-비닐카바졸)), 9,10-디(나프탈렌-2-일)안트라센(ADN), TCTA, TPBI(1,3,5-트리스(N-
- 20 페닐벤즈이미다졸-2-일)벤젠(1,3,5-tris(N-phenylbenzimidazole-2-yl)benzene)), TBADN(3-tert-부틸-9,10-디(나프탈렌-2-일)안트라센), mCP, OXD-7 등을 사용할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.



PVK



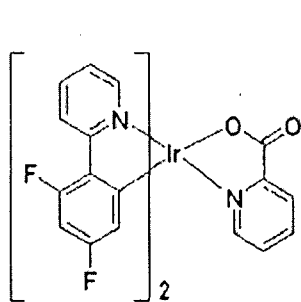
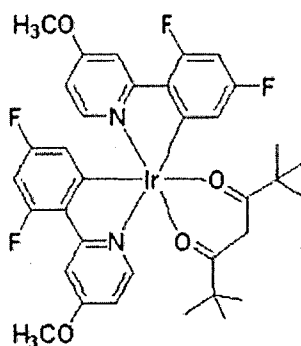
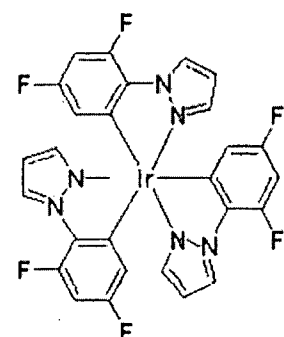
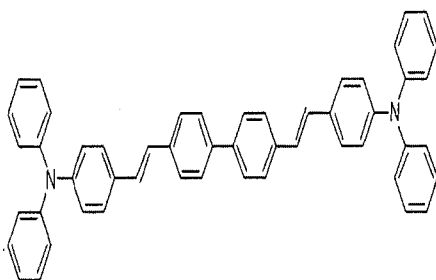
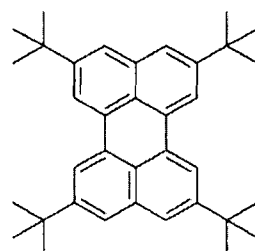
mCP



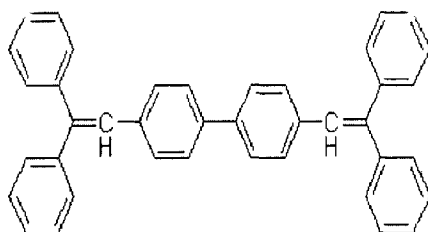
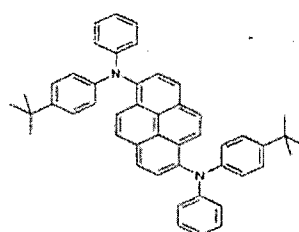
OXD-7

상기 도펀트는 형광 도펀트 및 인광 도펀트 중 적어도 하나일 수 있다. 상기 인광 도펀트는, Ir, Pt, Os, Re, Ti, Zr, Hf 또는 이들 중 2 이상의 조합을 포함한 유기 금속 착체일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

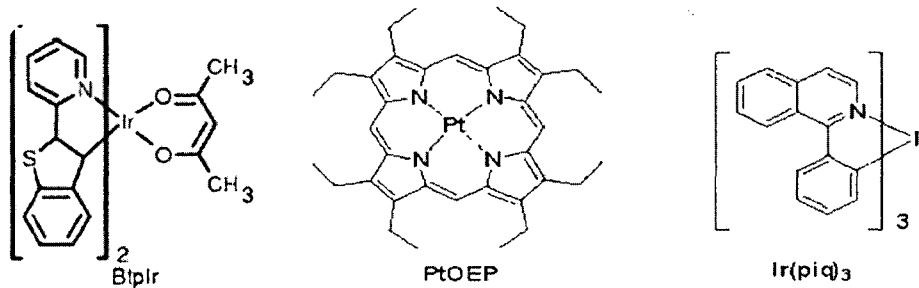
- 5 공지된 청색 도펀트의 예로는,  $F_2Irpic$ ,  $(F_2ppy)_2Ir(tmd)$ ,  $Ir(dfppz)_3$ , *ter*-플루오렌(flourene), 4,4'-비스(4-디페닐아미노스티릴) 비페닐 (DPAVB<sub>i</sub>), 2,5,8,11-테트라-*tert*-부틸 페릴렌 (TBPe), DPVB<sub>i</sub>, 피렌 유도체(KR0525408, 엘지전자 주식회사) 등을 들 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

 $F_2Irpic$  $(F_2ppy)_2Ir(tmd)$  $Ir(dfppz)_3$ DPAVB<sub>i</sub>

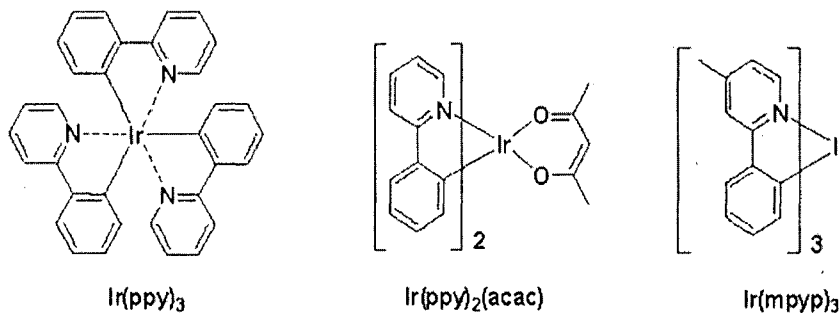
TBPe

DPVB<sub>i</sub>

공지된 적색 도펀트의 예로는, PtOEP, Ir(ppy)<sub>3</sub>, BtpIr 등을 들 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.



공지된 녹색 도펀트의 예로는, Ir(ppy)<sub>3</sub> (ppy = 페닐피리딘), Ir(ppy)<sub>2</sub>(acac),  
 5 Ir(mppy)<sub>3</sub> 등을 들 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.



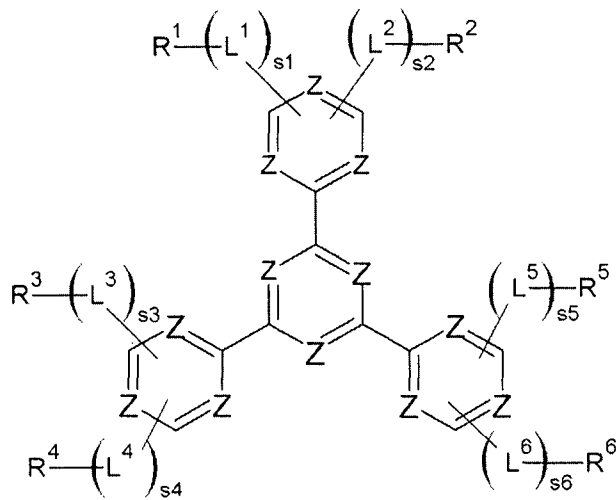
상기 발광층이 호스트 및 도펀트를 포함하는 경우, 도펀트의 함량은 통상적으로 발광층 100중량% 당 약 0.01 내지 약 15 중량%의 범위에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

10 상기 발광층의 두께는 약 200Å 내지 약 700Å이다.

전자수송보조층(35)은 전자 특성이 상대적으로 강한 특성을 가지는 제1 화합물과 정공 특성이 상대적으로 강한 특성을 가지는 제2 화합물을 포함한다.

상기 제1 화합물은 전자 특성이 상대적으로 강한 특성을 가지는 화합물로, 하기 화학식 1로 표현될 수 있다.

[화학식 1]



상기 화학식 1에서,

Z는 각각 독립적으로 N, C 또는 CR<sup>a</sup>이고,

5 Z 중 적어도 하나는 N 이고,

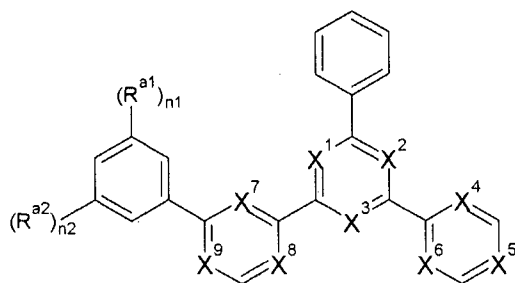
R<sup>1</sup> 내지 R<sup>6</sup> 및 R<sup>a</sup>는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C10 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C3내지 C30 헤테로아릴기 또는 이들의 조합이고,

10 L<sup>1</sup> 내지 L<sup>6</sup>는 각각 독립적으로 단일결합, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴렌기, 치환 또는 비치환된 헤테로아릴렌기 또는 이들의 조합이고,

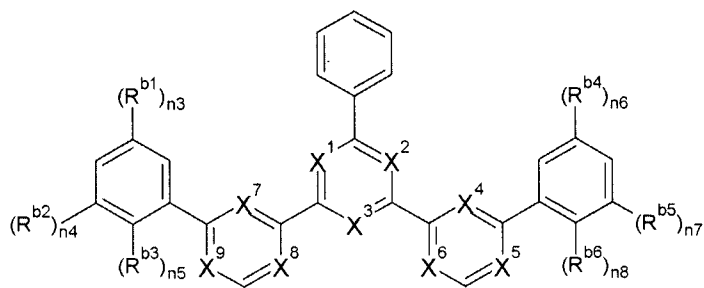
s1 내지 s6는 각각 독립적으로 0 내지 5의 정수이고,

상기 제1 화합물은 치환기의 유무 및 결합 위치에 따라, 예컨대 하기 화학식 1-i 내지 화학식 1-ix 중 어느 하나로 표현될 수 있다.

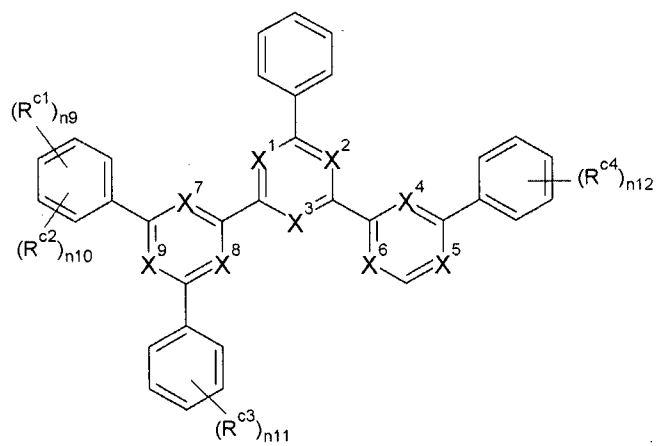
[화학식 1-i]



[화학식 1-ii]

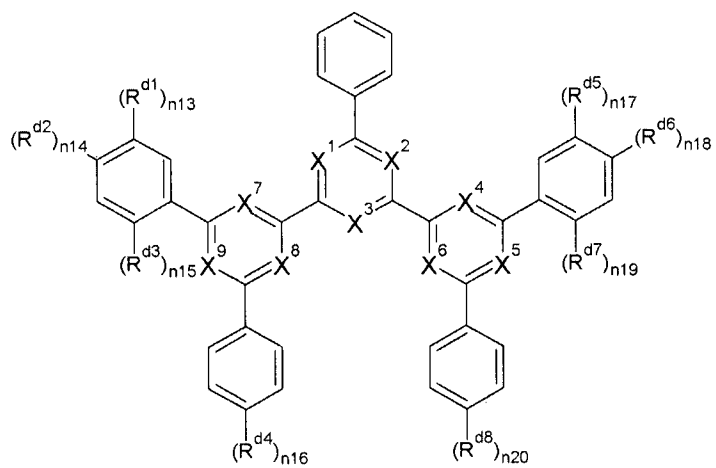


[화학식 1-iii]

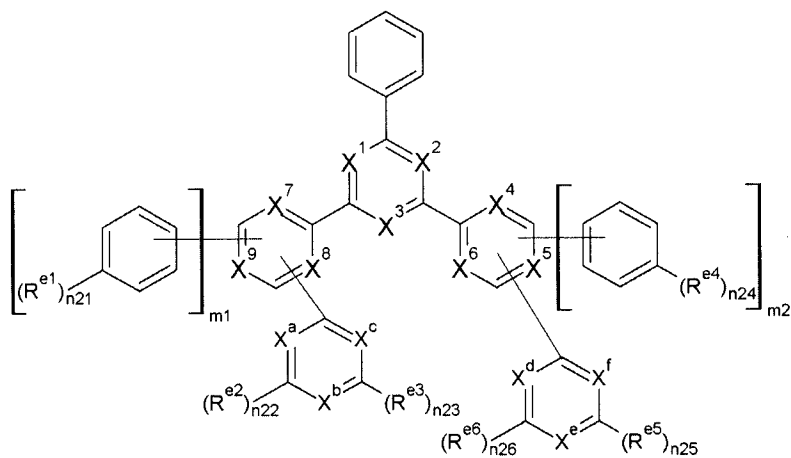


5

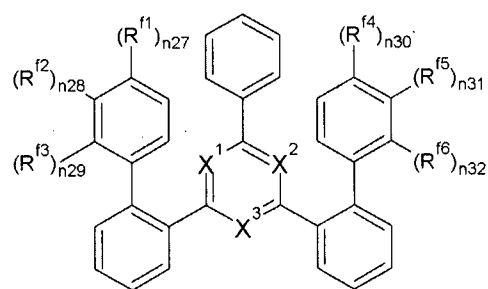
[화학식 1-iv]



[화학식 1-v]

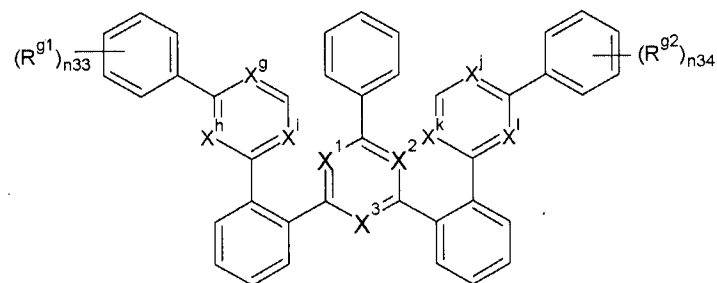


[화학식 1-vi]

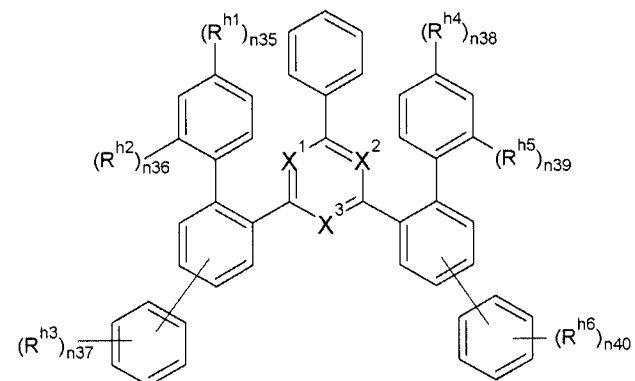


5

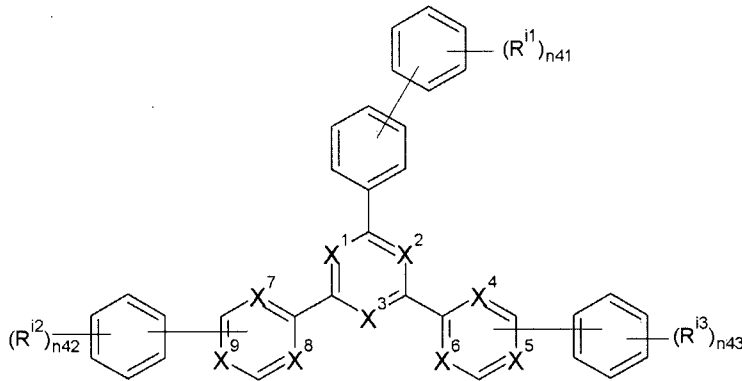
[화학식 1-vii]



[화학식 1-viii]



[화학식 1-ix]



상기 화학식 1-i에서,

- $R^{a1}$  및  $R^{a2}$ 는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 C1 내지 C10 알킬기,  
 5 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30  
 헤테로아릴기 또는 이들의 조합일 수 있고,

$n1$  및  $n2$ 는 각각 독립적으로 0 또는 1의 정수일 수 있으나, 단,  $n1$  및  $n2$ 는  
 동시에 0이 아니다.

상기 화학식 1-ii에서,

- $R^{b1}$  내지  $R^{b6}$ 은 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 C1 내지 C10 알킬기,  
 10 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30  
 헤테로아릴기 또는 이들의 조합일 수 있고,

$n3$  내지  $n8$ 은 각각 독립적으로 0 또는 1의 정수일 수 있으나, 단,  $n3$  내지  
 $n5$ 는 동시에 0이 아니고,  $n6$  내지  $n8$ 은 동시에 0이 아니다.

- 15 상기 화학식 1-iii에서,

$R^{c1}$  내지  $R^{c4}$ 는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 C1 내지 C10 알킬기,  
 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30  
 헤테로아릴기 또는 이들의 조합일 수 있고,

$n9$  내지  $n12$ 는 각각 독립적으로 0 또는 1의 정수일 수 있다.

- 20 상기 화학식 1-iv에서,

$R^{d1}$  내지  $R^{d8}$ 은 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 C1 내지 C10 알킬기,  
 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기 또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30  
 헤테로아릴기 또는 이들의 조합일 수 있고,

$n13$  내지  $n20$ 은 각각 독립적으로 0 또는 1의 정수일 수 있다.

상기 화학식 1-v에서,

$X^a$  내지  $X^f$ 는 각각 독립적으로 N 또는 CH일 수 있고,

$X^a$  내지  $X^e$  중 적어도 하나는 N일 수 있고,

$X^d$  내지  $X^f$  중 적어도 하나는 N일 수 있고,

- 5  $R^{e1}$  내지  $R^{e6}$ 은 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 C1 내지 C10 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기 또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴기 또는 이들의 조합일 수 있고,

$n_{21}$  내지  $n_{26}$ ,  $m_1$  및  $m_2$ 는 각각 독립적으로 0 또는 1의 정수일 수 있다.

상기 화학식 1-vi에서,

- 10  $R^{f1}$  내지  $R^{f6}$ 은 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 C1 내지 C10 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴기 또는 이들의 조합일 수 있고,

$n_{27}$  내지  $n_{32}$ 는 각각 독립적으로 0 또는 1의 정수일 수 있으나, 단,  $n_{27}$  내지  $n_{29}$ 는 동시에 0이 아니고,  $n_{30}$  내지  $n_{32}$ 는 동시에 0이 아니다.

- 15 상기 화학식 1-vii에서,

$X^g$  내지  $X^l$ 은 각각 독립적으로 N 또는 CH일 수 있고,

$X^g$  내지  $X^i$  중 적어도 하나는 N일 수 있고,

$X^j$  내지  $X^l$  중 적어도 하나는 N일 수 있고,

- 20  $R^{g1}$  및  $R^{g2}$ 는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 C1 내지 C10 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴기 또는 이들의 조합일 수 있고,

$n_{33}$  및  $n_{34}$ 는 각각 독립적으로 0 또는 1의 정수일 수 있다.

상기 화학식 1-viii에서,

- 25  $R^{h1}$  내지  $R^{h6}$ 는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 C1 내지 C10 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴기 또는 이들의 조합일 수 있고,

$n_{35}$  내지  $n_{40}$ 은 각각 독립적으로 0 또는 1의 정수일 수 있다.

상기 화학식 1-ix에서,

- 30  $R^{i1}$  내지  $R^{i3}$ 은 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 C1 내지 C10 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30

헤테로아릴기 또는 이들의 조합일 수 있고,

$n_{41}$  내지  $n_{43}$ 은 각각 독립적으로 0 또는 1의 정수일 수 있다.

상기 화학식 1-i 내지 1-ix에서,  $X^1$  내지  $X^9$ 는 전술한 바와 같다. 예컨대, 상기 화학식 1-i 내지 1-v, 및 1-ix에서,  $X^1$  내지  $X^9$ 은 CH 또는 N이며, 상기  $X^1$  내지  $X^9$  중 적어도 하나는 N 일 수 있고,

상기 화학식 1-vi, 1-vii 및 1-viii에서,  $X^1$  내지  $X^3$ 은 CH 또는 N이며, 상기  $X^1$  내지  $X^3$  중 적어도 하나는 N 일 수 있다.

본 발명의 일 예에서, 상기 화학식 1-i 내지 1-ix에서,  $X^1$  내지  $X^3$ 은 중 적어도 2개 이상은 N 일 수 있다. 본 발명의 일 예에서, 상기 화학식 1-i 내지 1-ix에서, 상기  $X^1$  내지  $X^3$ 은 모두 N 일 수 있다.

상기 제1 화합물은 적어도 하나의 질소원자를 함유하는 헤테로 육각고리 화합물(육각함질소환)를 코어 화합물로 포함한다. 상기 제1 화합물은 적어도 하나의 질소를 함유하는 헤테로 육각고리 화합물(육각함질소환)을 코어 화합물로 포함함으로써 전기장 인가 시 전자를 받기 쉬운 구조가 되어 전자 주입량이 증가될 수 있고, 이에 따라 상기 제1 화합물을 적용한 유기 광전자 소자의 구동 전압을 낮출 수 있고, 또한 효율을 개선할 수 있다.

상기 화학식 1로 표현되는 제1 화합물은 아릴렌기 및/또는 헤테로아릴렌기를 중심으로 적어도 하나의 꺾임(kink) 구조를 가진다.

상기 꺾임 구조는 아릴렌기 및/또는 헤테로아릴렌기의 두 개의 연결 부분들이 직선 구조를 이루지 않는 구조를 말한다. 예컨대 페닐렌의 경우 연결 부분들이 직선 구조를 이루지 않는 올쏘 페닐렌(o-phenylene)과 메타 페닐렌(m-phenylene)이 상기 꺾임 구조를 가지며, 연결 부분들이 직선 구조를 이루는 파라 페닐렌(p-phenylene)은 상기 꺾임 구조를 가지지 않는다.

상기 화학식 1에서, 상기 꺾임 구조는 연결기, 즉 아릴렌기/헤테로아릴렌기를 중심으로 형성될 수 있다.

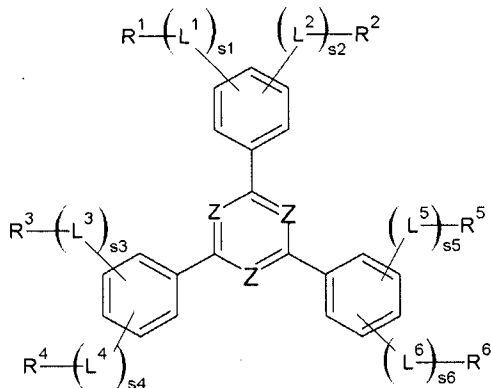
예컨대 상기 화학식 1-i의  $n_1$ 이 0인 경우, 즉  $(R^{a1})_{n1}$ 은 수소일 수 있고, 이는  $(R^{a2})_{n2}$ 의  $n_2$ 가 0인 경우에도 마찬가지이다. 이와 동일하게 화학식 1-ii의  $(R^{b1})_{n3}$ 의  $n_3$ 이 0인 경우, 화학식 1-iii의  $(R^{c1})_{n9}$ 의  $n_9$ 가 0인 경우도 마찬가지이다.

또한 상기 화학식 1에서 가운데 6각 고리 내 3개의 Z가 모두 질소원자일 경우, 상기 육각함질소환은 트리아진 구조가 되며, 상기 화학식 1은 트리아진에 세

개의 육각고리가 연결된 구조가 되고, 상기 세 개의 육각고리는 모두 아릴렌기 또는 헤테로아릴렌기를 이루게 된다. 이는 한 평면을 이루는 구조로서, 박막 형성시 동종의 다른 분자와 접촉하는 면을 최대화할 수 있어서 전자 수송에 특히 효율적이다.

5 예컨대, 상기 제1 화합물은 하기 화학식 Y로 표시될 수 있다.

[화학식 Y]



상기 화학식 Y에서,

Z는 각각 독립적으로 N 또는 CH이고,

10 Z 중 적어도 하나는 N 이고,

R¹ 내지 R⁶은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C10 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C3내지 C30 헤테로아릴기 또는 이들의 조합이고,

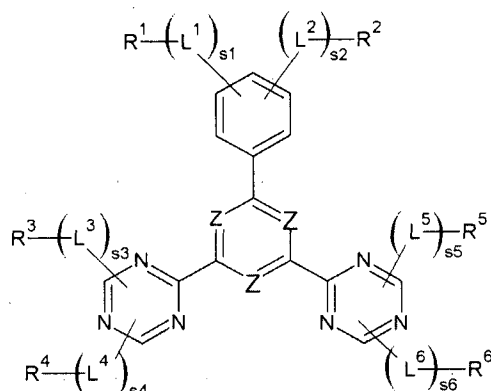
L¹ 내지 L⁶는 각각 독립적으로 단일결합, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30

15 아릴렌기, 치환 또는 비치환된 헤테로아릴렌기 또는 이들의 조합이고,

s1 내지 s6는 각각 독립적으로 0 내지 5의 정수이다.

예컨대, 상기 제1 화합물은 하기 화학식 Z로 표시될 수 있다.

[화학식 Z]



상기 화학식 Z에서,

Z는 각각 독립적으로 N 또는 CH이고,

Z 중 적어도 하나는 N 이고,

R<sup>1</sup> 내지 R<sup>6</sup>은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지

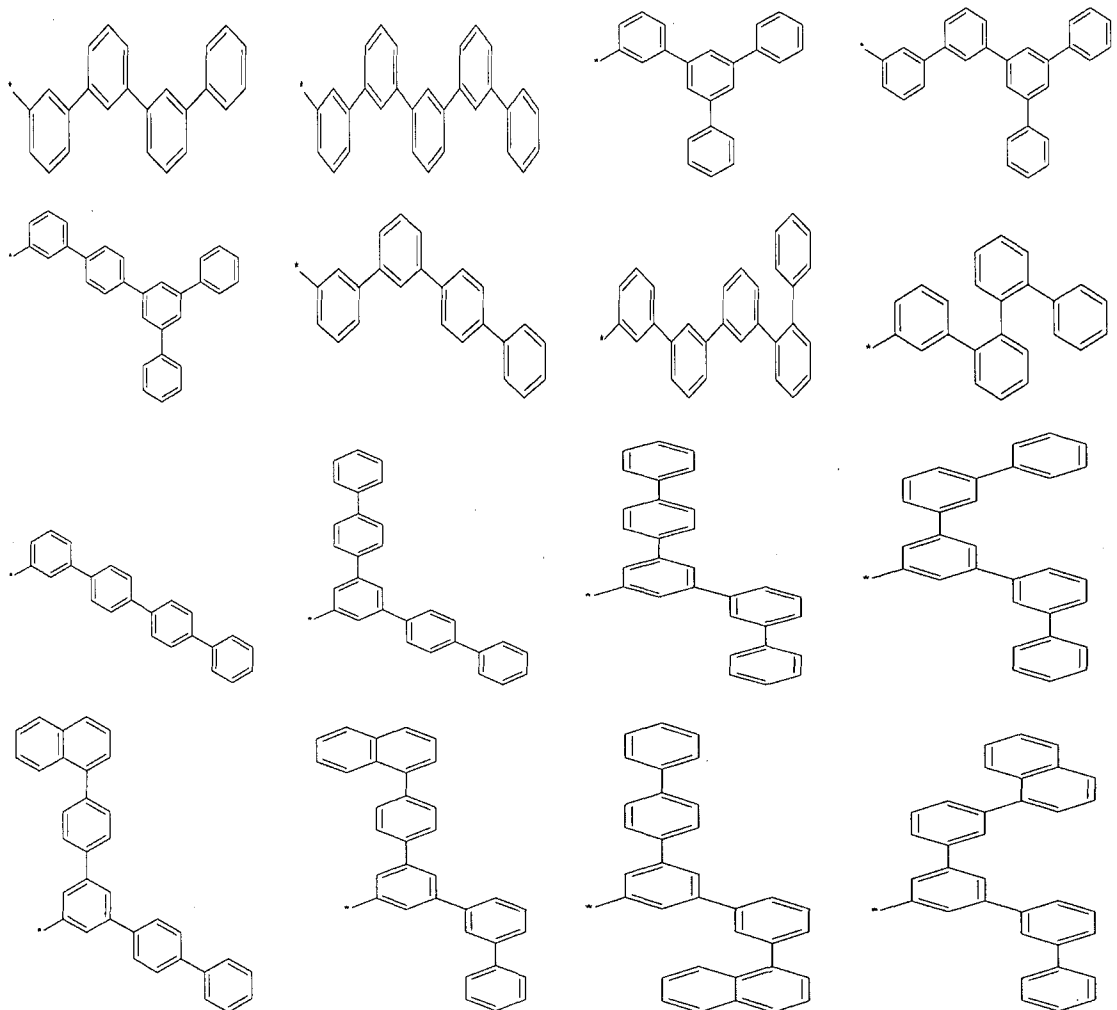
- 5 C10 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C3내지 C30 헤테로아릴기 또는 이들의 조합이고,

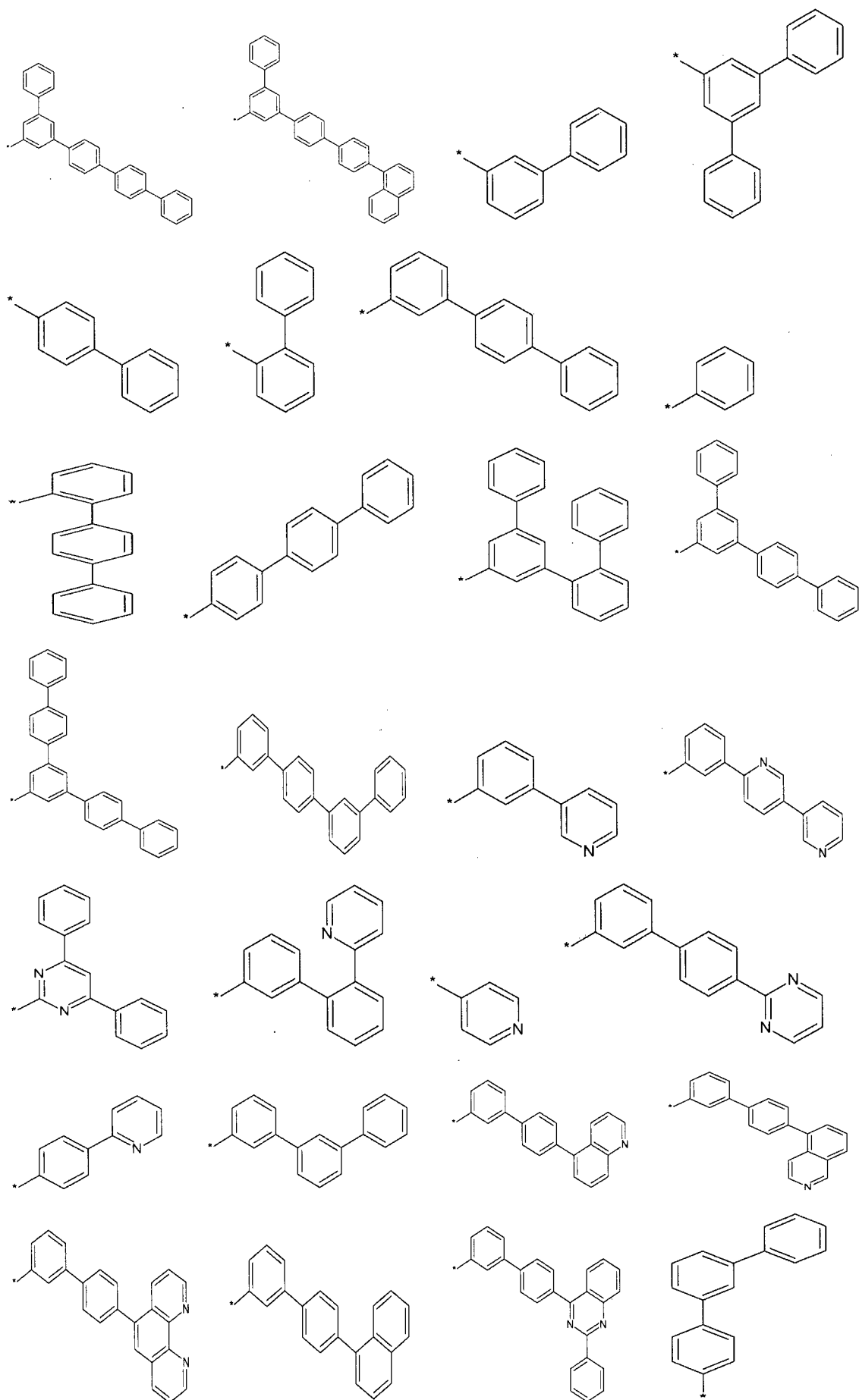
L<sup>1</sup> 내지 L<sup>6</sup>는 각각 독립적으로 단일결합, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴렌기, 치환 또는 비치환된 헤테로아릴렌기 또는 이들의 조합이고,

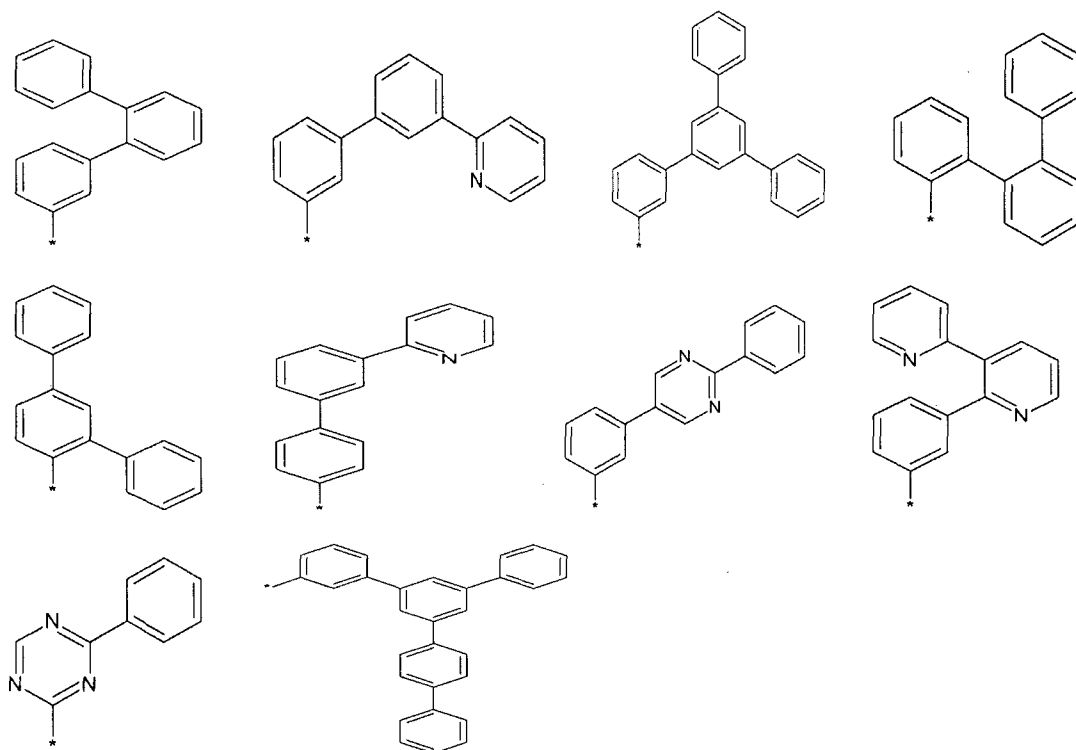
s1 내지 s6는 각각 독립적으로 0 내지 5의 정수이다.

- 10 예컨대, 상기 R<sup>1</sup> 내지 R<sup>6</sup>은 각각 독립적으로 수소 및 하기 그룹 B에 나열된 기로 이루어진 군에서 선택된 어느 하나일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[그룹 B]







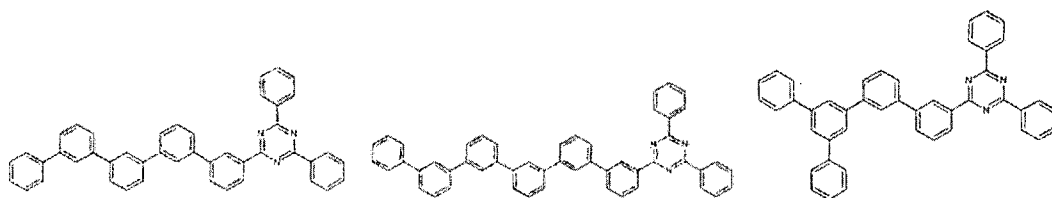
또한, 상기 제1 화합물은 하기 그룹 1에 나열된 화합물 중 어느 하나일 수  
5 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[그룹 1]

[A-1]

[A-2]

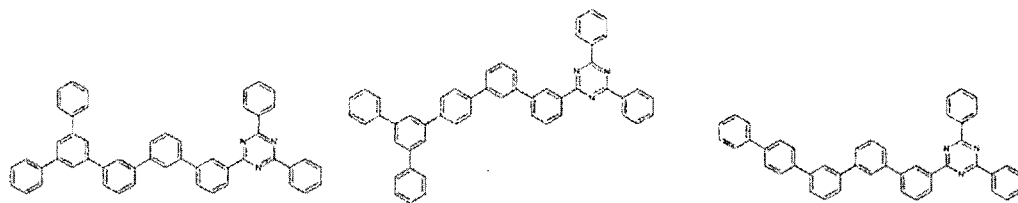
[A-3]



[A-4]

[A-5]

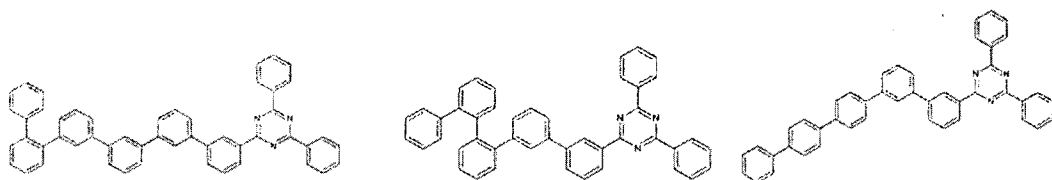
[A-6]



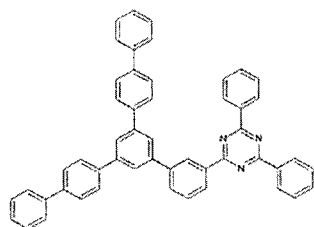
[A-7]

[A-8]

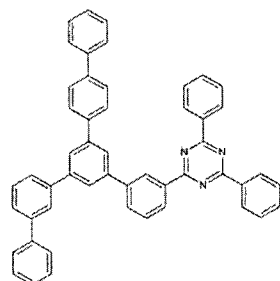
[A-9]



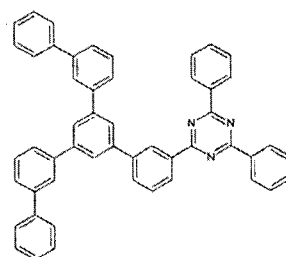
[A-10]



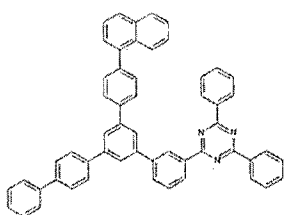
[A-11]



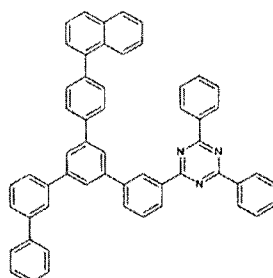
[A-12]



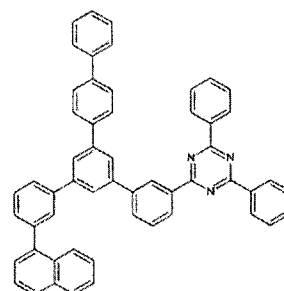
[A-13]



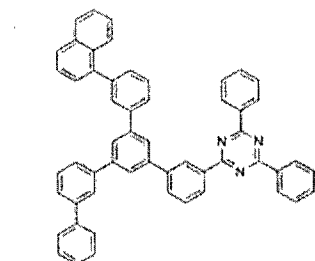
[A-14]



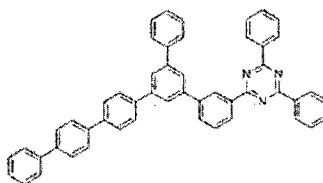
[A-15]



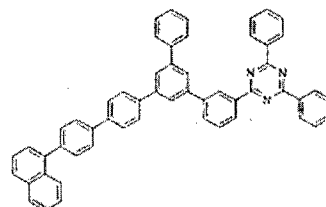
[A-16]



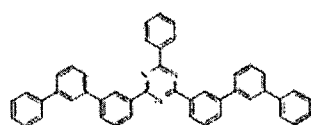
[A-17]



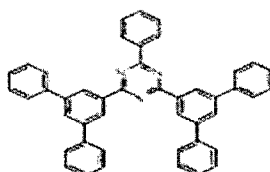
[A-18]



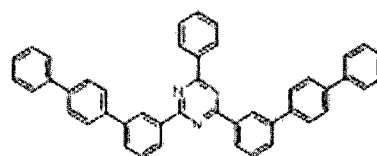
[A-19]



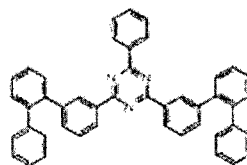
[A-20]



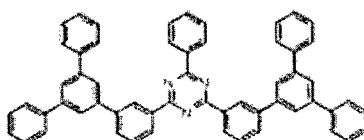
[A-21]



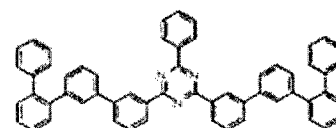
[A-22]



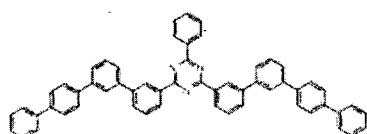
[A-23]



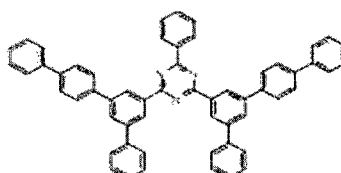
[A-24]



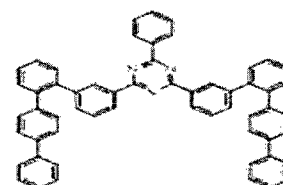
[A-25]



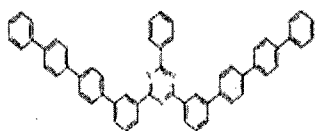
[A-26]



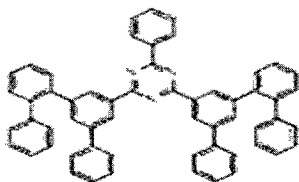
[A-27]



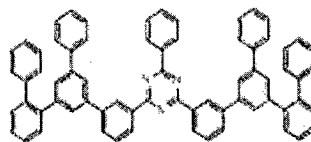
[A-28]



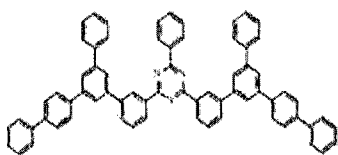
[A-29]



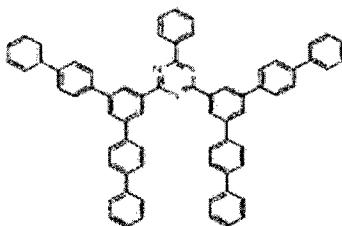
[A-30]



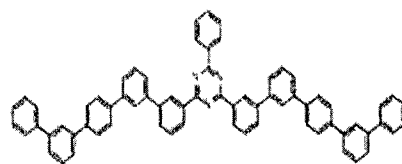
[A-31]



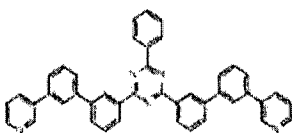
[A-32]



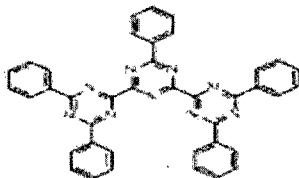
[A-33]



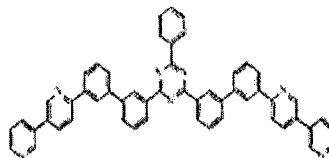
[A-34]



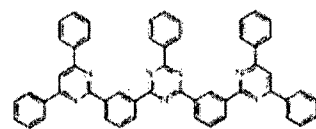
[A-35]



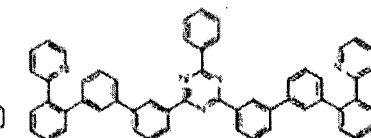
[A-36]



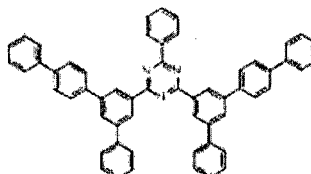
[A-37]



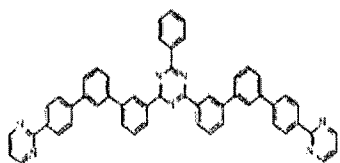
[A-38]



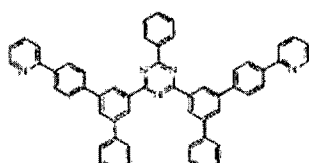
[A-39]



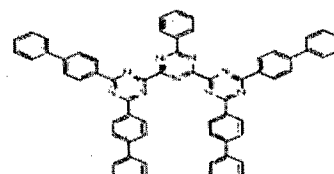
[A-40]



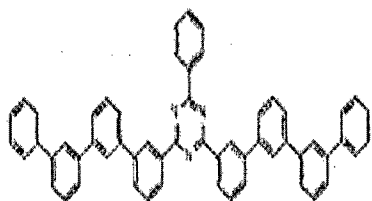
[A-41]



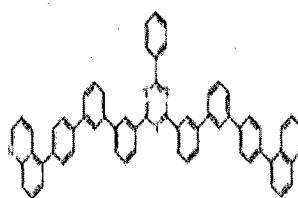
[A-42]



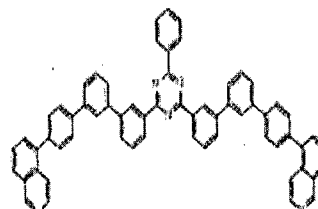
[A-43]



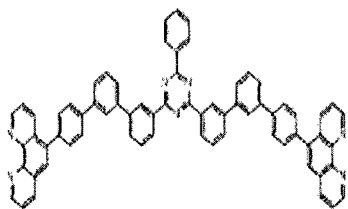
[A-44]



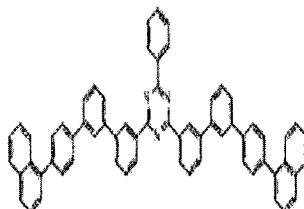
[A-45]



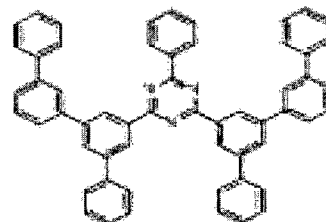
[A-46]



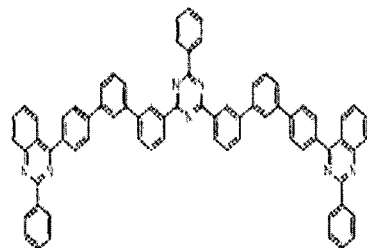
[A-47]



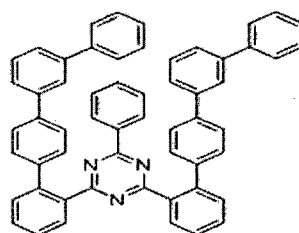
[A-48]



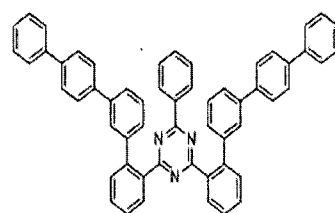
[A-49]



[A-50]

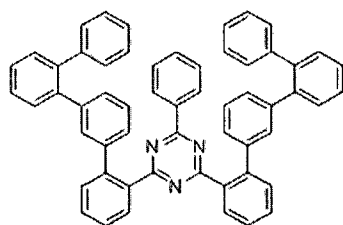


[A-51]

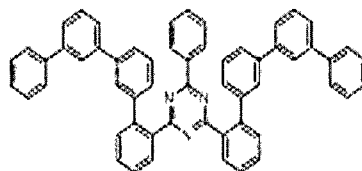


5

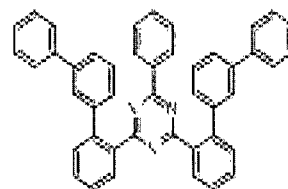
[A-52]



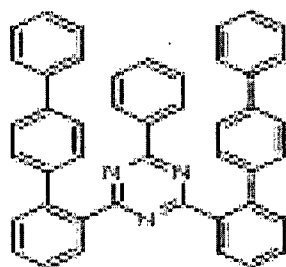
[A-53]



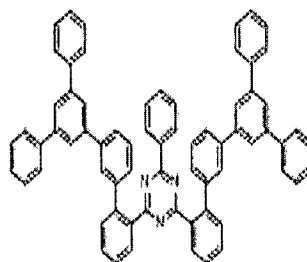
[A-54]



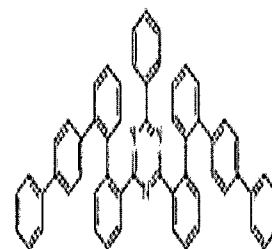
[A-55]



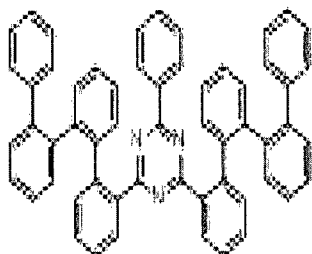
[A-56]



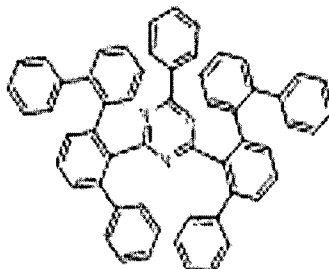
[A-57]



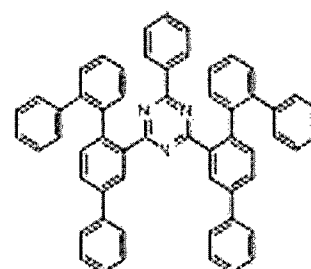
[A-58]



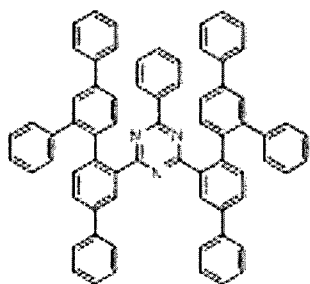
[A-59]



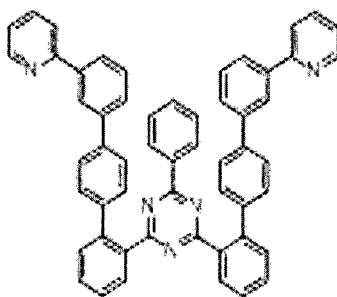
[A-60]



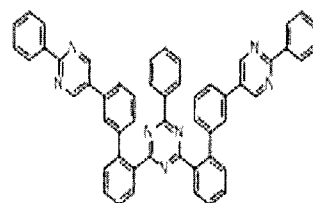
[A-61]



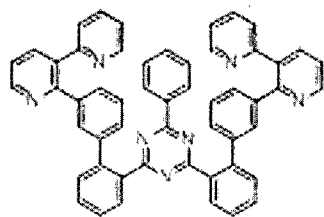
[A-62]



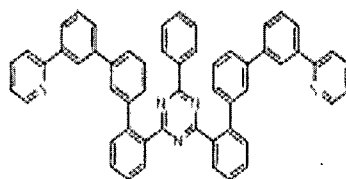
[A-63]



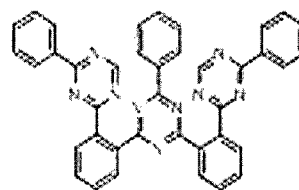
[A-64]



[A-65]

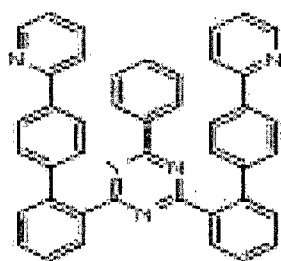


[A-66]

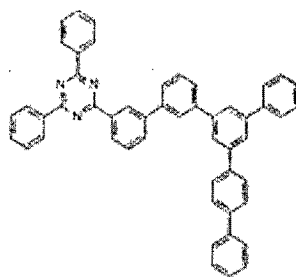


5

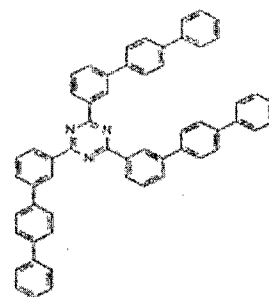
[A-67]



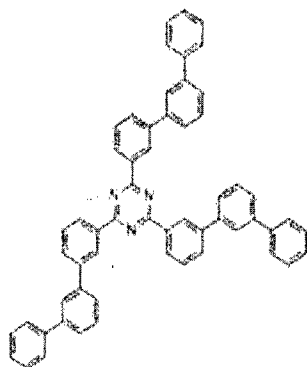
[A-68]



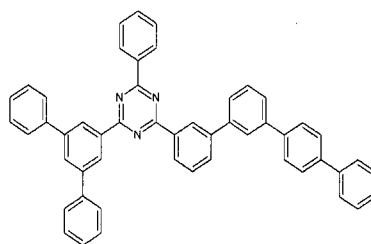
[A-69]



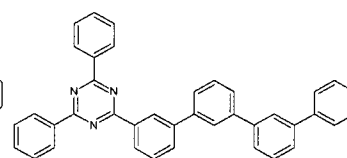
[A-70]



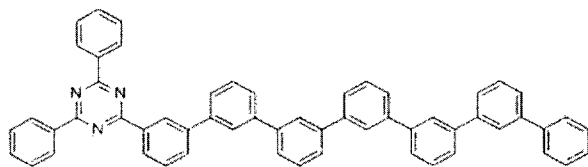
[A-71]



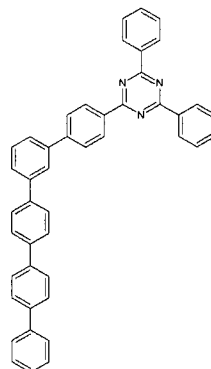
[A-72]



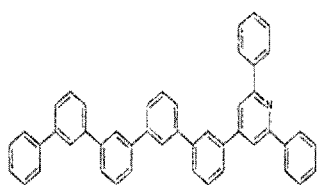
[A-73]



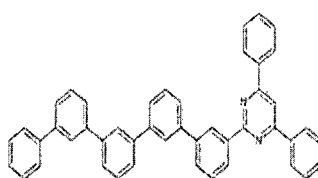
[A-74]



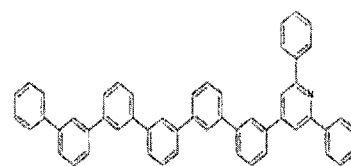
[B-1]



[B-2]

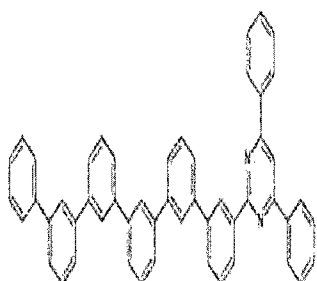


[B-3]

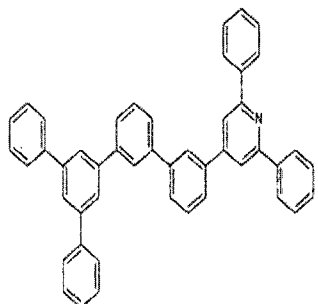


5

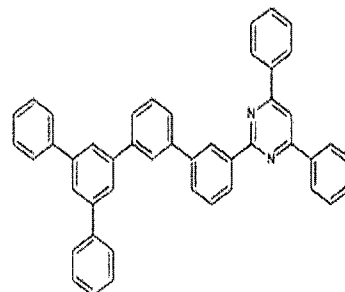
[B-4]



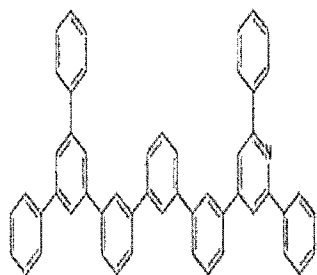
[B-5]



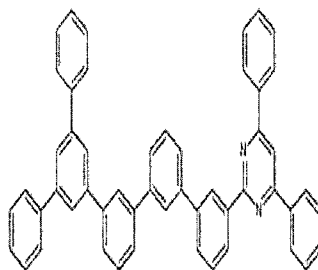
[B-6]



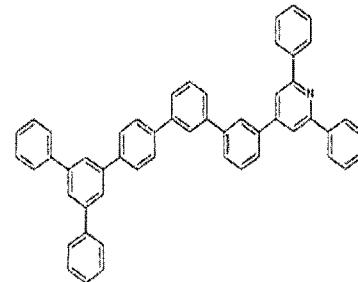
[B-7]



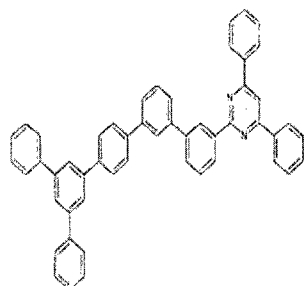
[B-8]



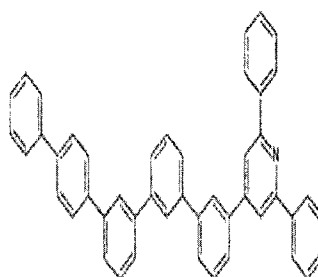
[B-9]



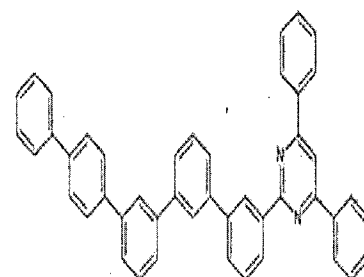
[B-10]



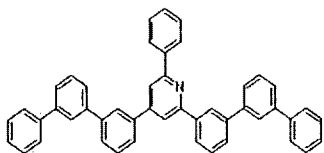
[B-11]



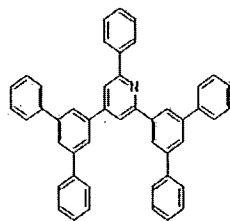
[B-12]



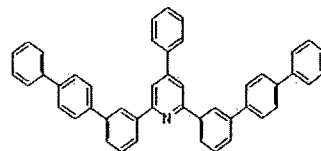
[B-13]



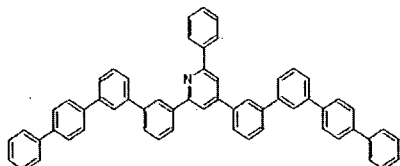
[B-14]



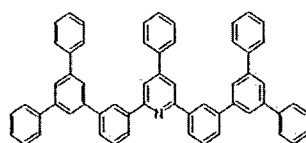
[B-15]



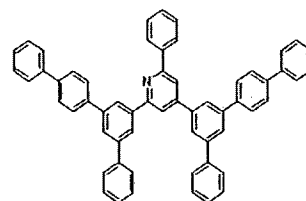
[B-16]



[B-17]

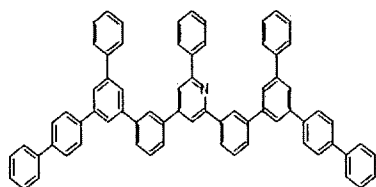


[B-18]

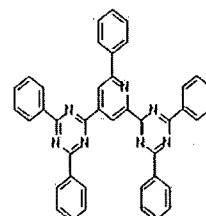


5

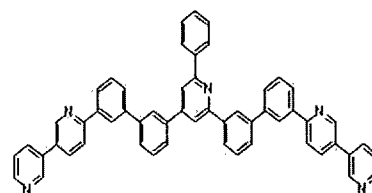
[B-19]



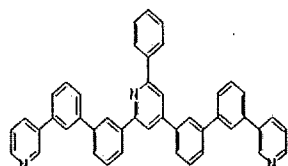
[B-20]



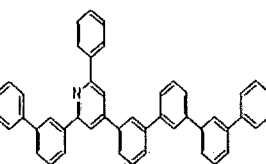
[B-21]



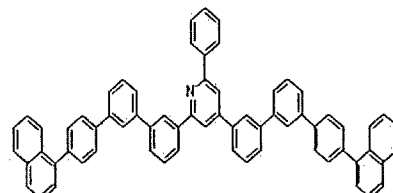
[B-22]



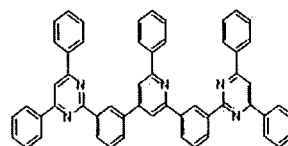
[B-23]



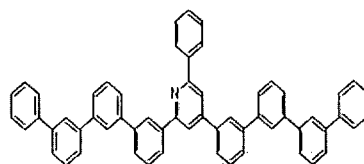
[B-24]



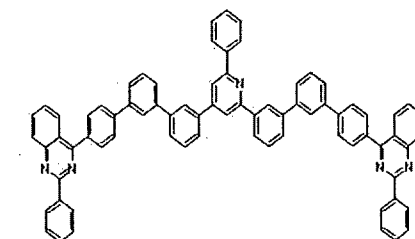
[B-25]



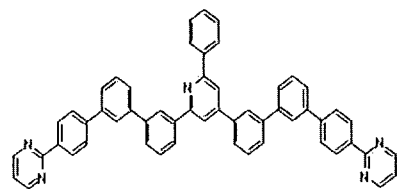
[B-26]



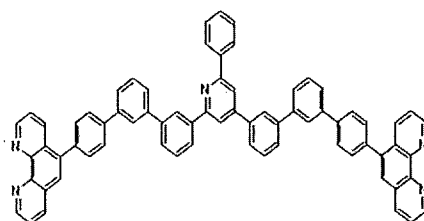
[B-27]



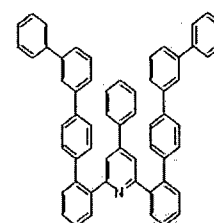
[B-28]



[B-29]

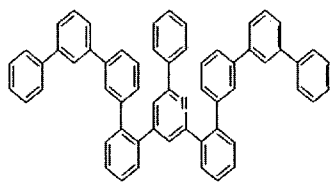


[B-30]

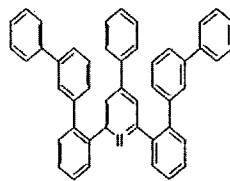


10

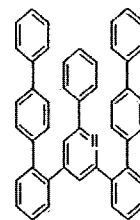
[B-31]



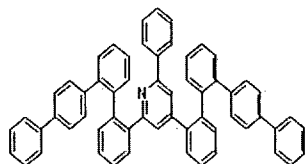
[B-32]



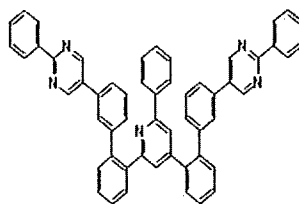
[B-33]



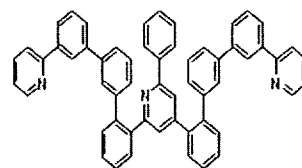
[B-34]



[B-35]

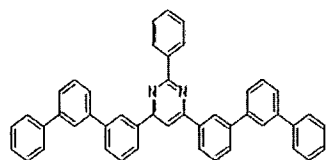


[B-36]

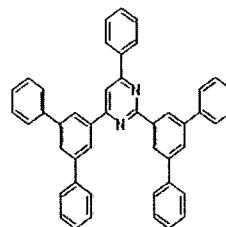


5

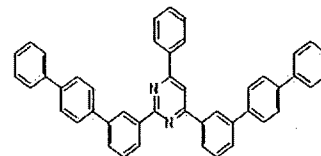
[B-37]



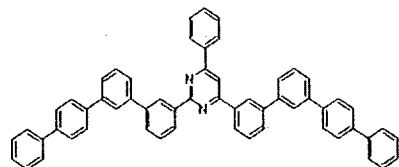
[B-38]



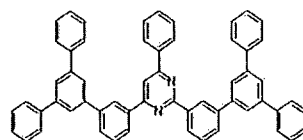
[B-39]



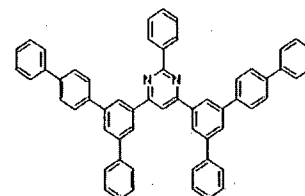
[B-40]



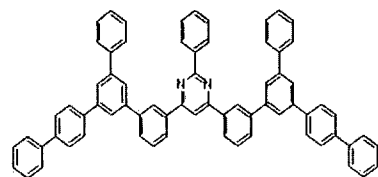
[B-41]



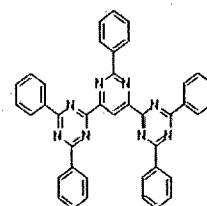
[B-42]



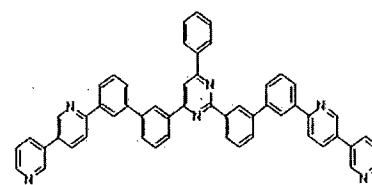
[B-43]



[B-44]

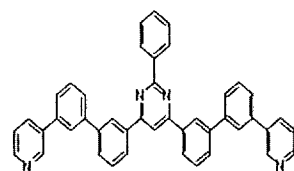


[B-45]

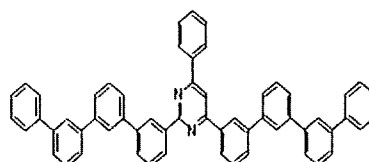


10

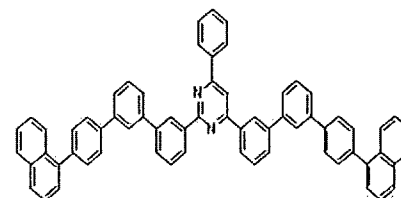
[B-46]



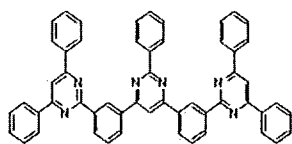
[B-47]



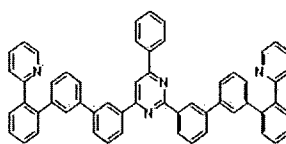
[B-48]



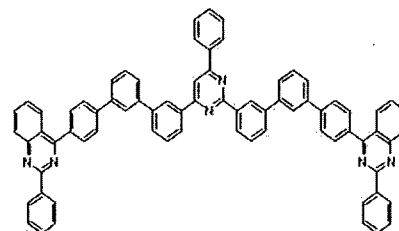
[B-49]



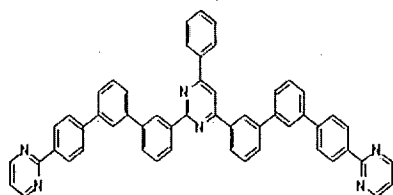
[B-50]



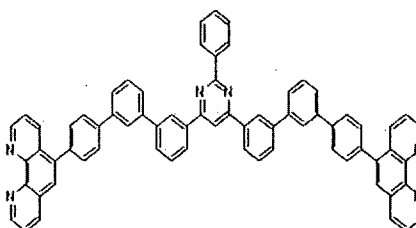
[B-51]



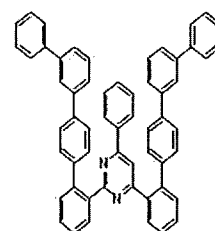
[B-52]



[B-53]

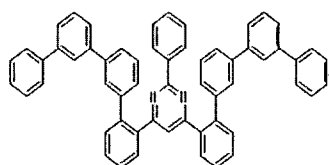


[B-54]

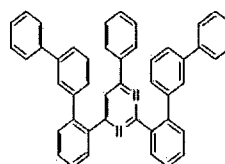


5

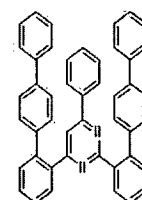
[B-55]



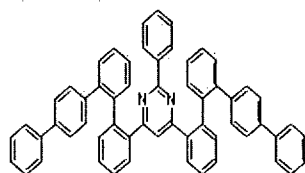
[B-56]



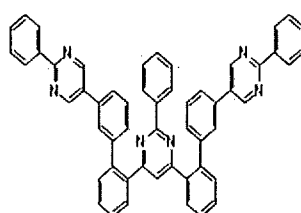
[B-57]



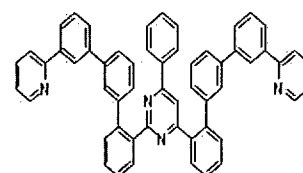
[B-58]



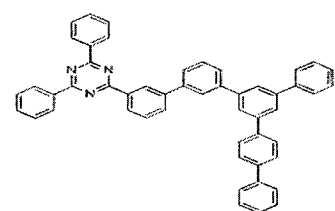
[B-59]



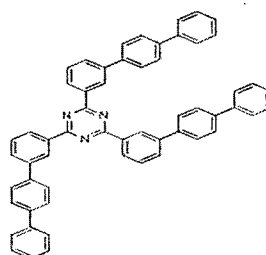
[B-60]



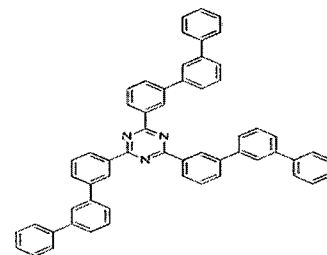
[B-61]



[B-62]

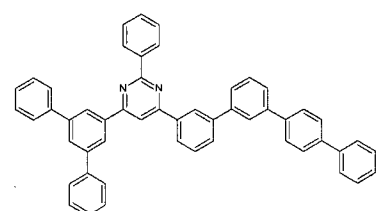


[B-63]

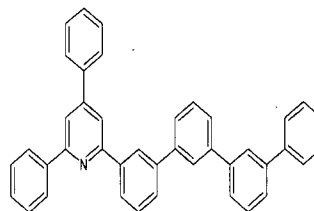


10

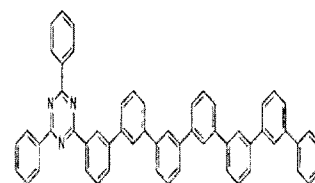
[B-64]



[B-65]



[B-66]

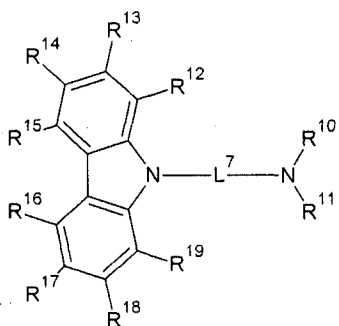


상기 제1 화합물은 전술한 꺾임 구조를 가짐으로써 전하를 적절히 구역화(localization)하고 공액계의 흐름을 효과적으로 제어함으로써 상기 조성물을 적용한 유기 광전자 소자의 효율을 개선할 수 있다.

정공수송보조층(33)은 정공 수송 특성이 좋은 제2 화합물을 포함하고,  
 5 정공수송층(31)과 발광층(32) 사이의 HOMO 에너지 레벨 차이를 줄임으로써 정공의 주입 특성을 조절하여 정공수송보조층(33)과 발광층(32)의 계면에서 정공이 축적되는 것을 감소시켜 계면에서 폴라론(polaron)에 의한 엑시톤이 소멸되는 소광 현상(quenching)을 줄일 수 있다. 이에 따라 소자의 열화현상이 감소하고 소자가 안정화되어 효율 및 수명을 개선할 수 있다.

10 상기 제2 화합물은 하기 화학식 2로 표현되는 화합물일 수 있다.

[화학식 2]



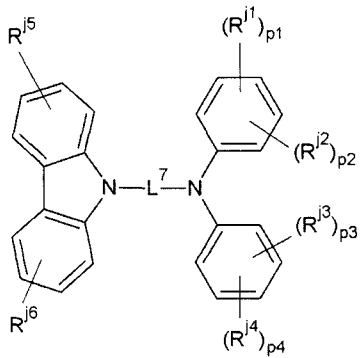
상기 화학식 2에서,

$R^{10}$  내지  $R^{19}$ 는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C6 내지  
 15 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐기 또는 이들의 조합이고,

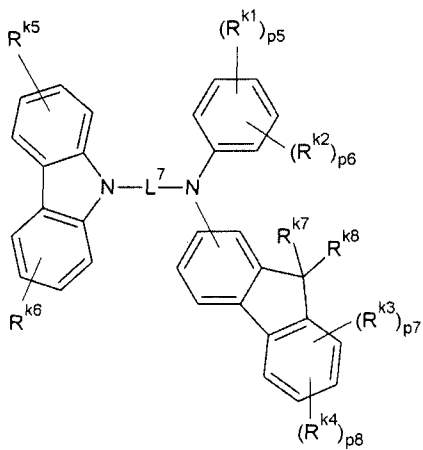
$L^1$ 은 치환 또는 비치환된 C2 내지 C10 알케닐렌기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴렌기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴렌기 또는 이들의 조합이다.

상기 제2 화합물은 예컨대 하기 2-i 내지 화학식 2-iii 중 어느 하나로 표현될  
 20 수 있다.

[화학식 2-i]

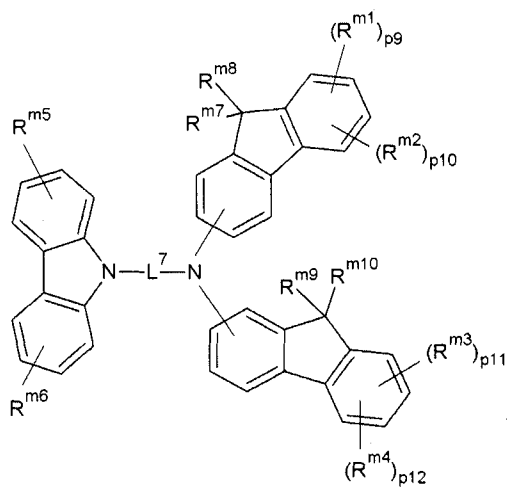


[화학식 2-ii]



5

[화학식 2-iii]



상기 화학식 2-i에서,

$L^7$ 은 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴렌기, 치환 또는 비치환된 C2  
10 내지 C30 헤테로아릴렌기 또는 이들의 조합일 수 있고,

$R^{j1}$  내지  $R^{j6}$ 은 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 C1 내지 C10 알킬기,

치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 아릴기, C2 내지 C30 헤테로아릴렌기 또는 이들의 조합일 수 있고,

$p_1$  내지  $p_4$ 는 각각 독립적으로 0 내지 5의 정수일 수 있으나, 단,  $0 \leq p_1 + p_2 \leq 5$  이고,  $0 \leq p_3 + p_4 \leq 5$  이다.

5       상기 화학식 2-ii에서,

$L^7$ 은 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴렌기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴렌기 또는 이들의 조합일 수 있고,

$R^{k1}$  내지  $R^{k6}$ 은 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 C1 내지 C10 알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30

10 헤테로아릴렌기 또는 이들의 조합일 수 있고,

$R^{k7}$  및  $R^{k8}$ 은 각각 독립적으로 수소 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C10 알킬기 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴렌기 또는 이들의 조합일 수 있고,

$p_5$  및  $p_6$ 은 각각 독립적으로 0 내지 5의 정수일 수 있으나, 단,  $0 \leq p_5 + p_6 \leq 5$  이고,

$p_7$  및  $p_8$ 은 각각 독립적으로 0 내지 4의 정수일 수 있으나, 단,  $0 \leq p_7 + p_8 \leq 4$  이다.

상기 화학식 2-iii에서,

$L^7$ 은 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴렌기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴렌기 또는 이들의 조합일 수 있고,

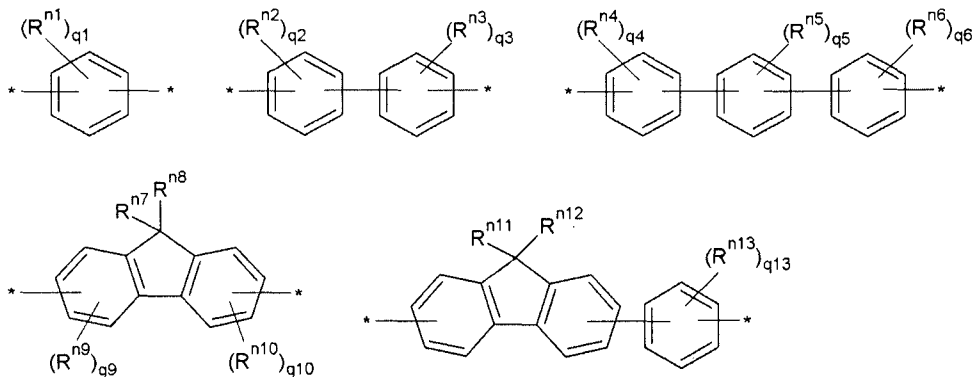
$R^{m1}$  내지  $R^{m6}$ 은 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 C1 내지 C10 알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 아릴기 또는 또는 이들의 조합일 수 있고

$R^{m7}$  내지  $R^{m10}$ 은 각각 독립적으로 수소 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C10 알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴렌기 또는 이들의 조합일 수 있고,

$p_9$  내지  $p_{12}$ 는 각각 독립적으로 0 내지 4의 정수일 수 있으나, 단,  $0 \leq p_9 + p_{10} \leq 4$  이고,  $0 \leq p_{11} + p_{12} \leq 4$  이다.

예컨대, 상기  $L^7$ 은 하기 그룹 A에 나열된 연결기 중 어느 하나일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

## [그룹 A]



상기 그룹 A에서,

- 5         $R^{n1}$  내지  $R^{n13}$ 은 각각 독립적으로 수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C10 알킬기 또는 치환 또는 비치환된 C6 내지 C20 아릴기일 수 있고,  
         $q1$  내지  $q6$  및  $q13$ 은 각각 독립적으로 0 내지 4의 정수일 수 있고,  
         $q9$  및  $q10$ 은 각각 독립적으로 0 내지 3의 정수일 수 있다.

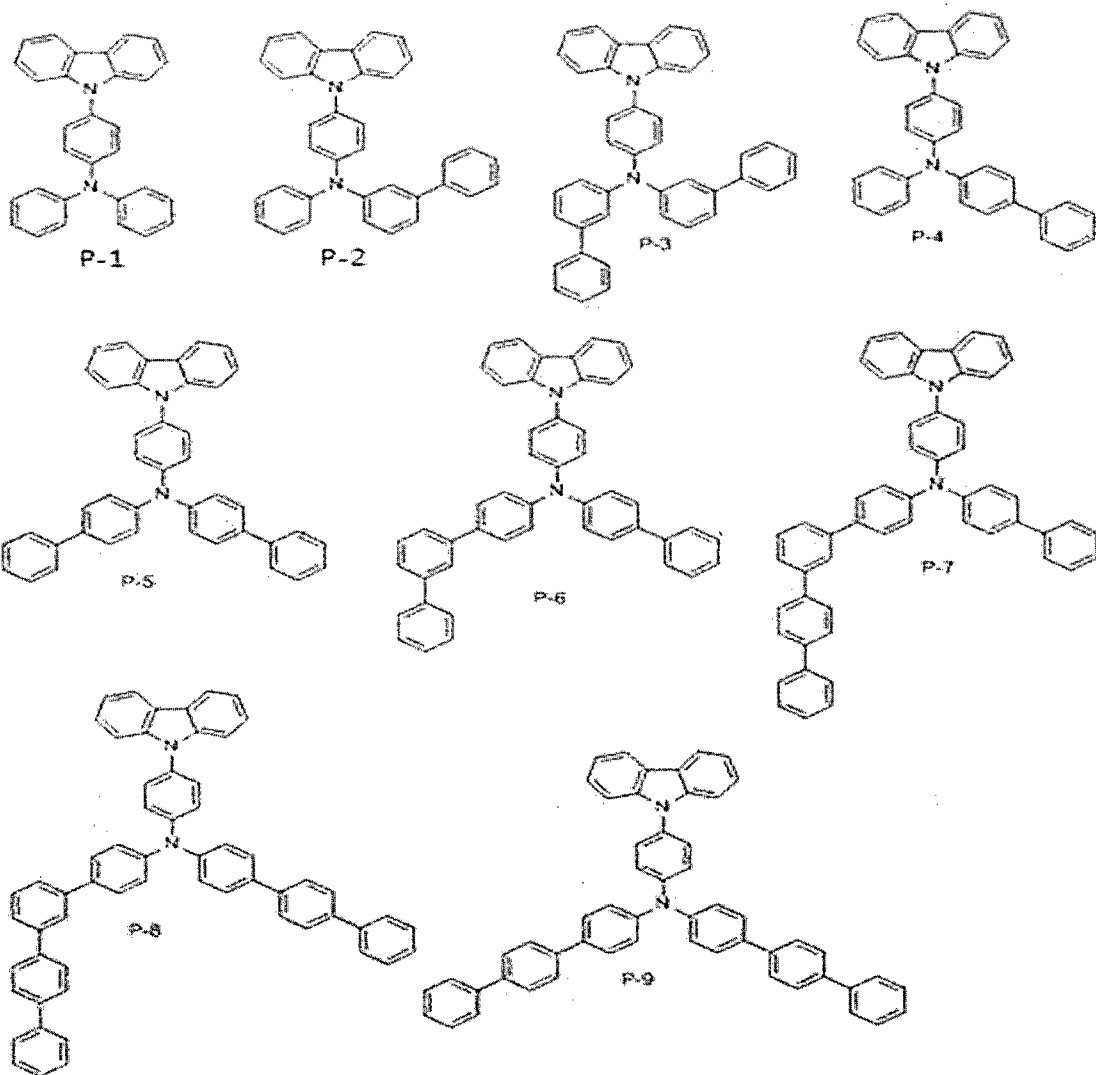
       예컨대, 상기  $R^{n1}$  내지  $R^{n6}$ ,  $R^{n9}$ ,  $R^{n10}$  및  $R^{n13}$ 은 각각 독립적으로 수소 또는  
 10        치환 또는 비치환된 C6 내지 C20 아릴기일 수 있다.

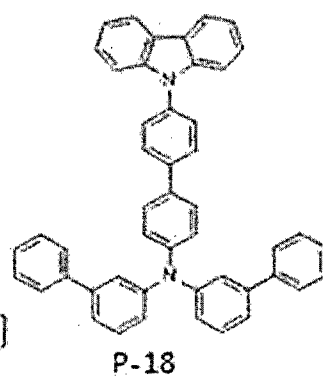
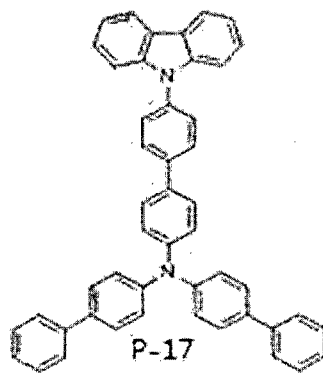
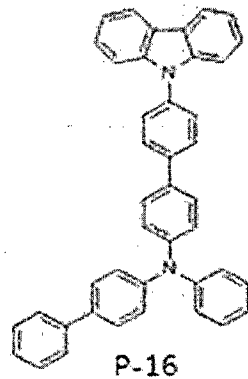
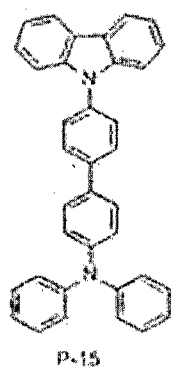
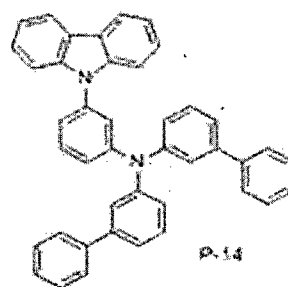
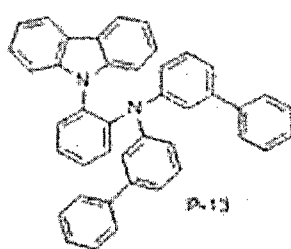
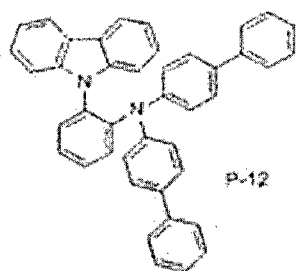
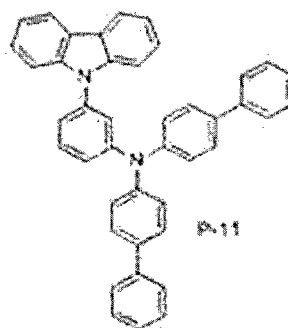
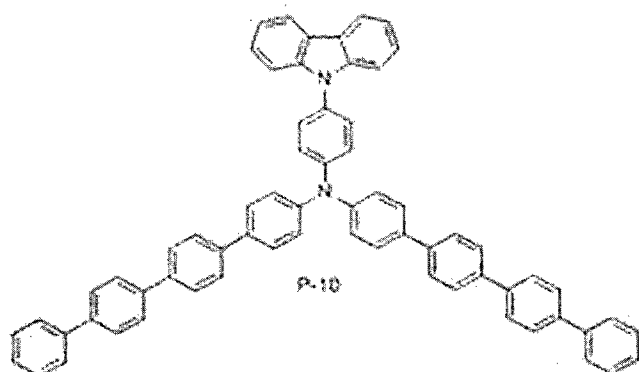
       예컨대, 상기  $R^{n7}$ ,  $R^{n8}$ ,  $R^{n11}$  및  $R^{n12}$ 는 각각 독립적으로 수소 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C10 알킬기일 수 있다.

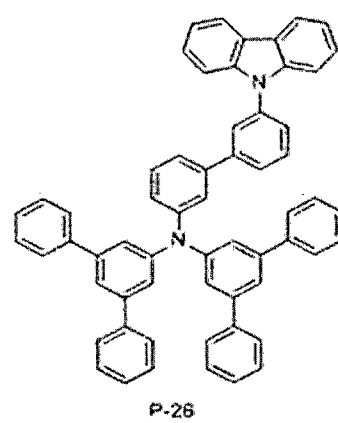
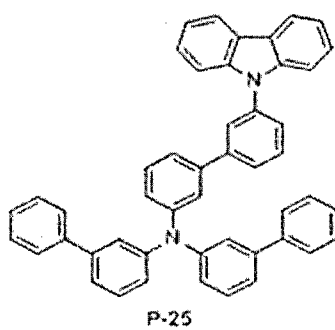
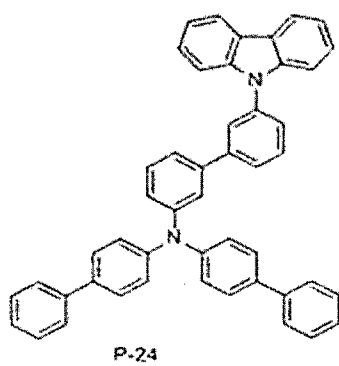
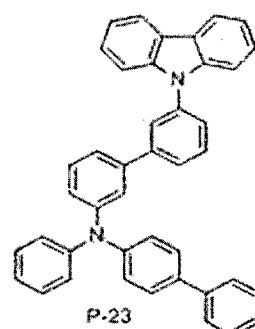
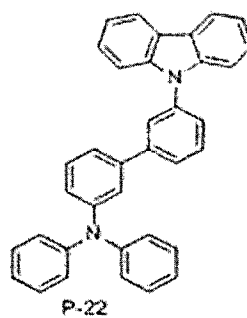
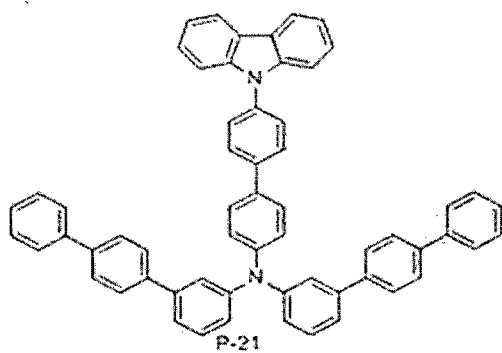
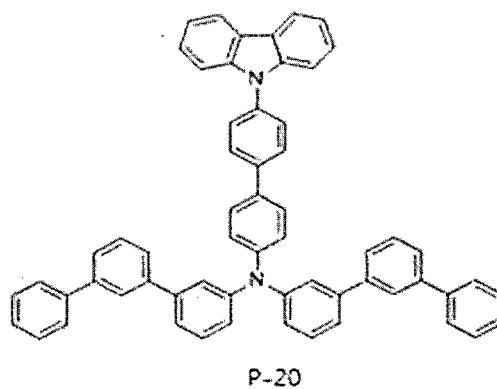
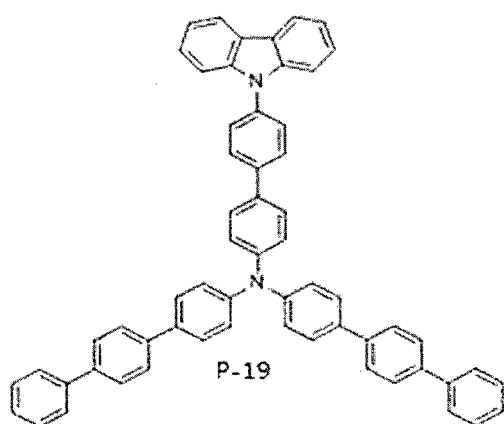
       본 발명의 일 예로, [화학식 2]에서,  $R^{10}$  내지  $R^{19}$ 는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기 또는 이들의 조합이고,  $L^7$ 은 치환  
 15        또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴렌기일 수 있다.

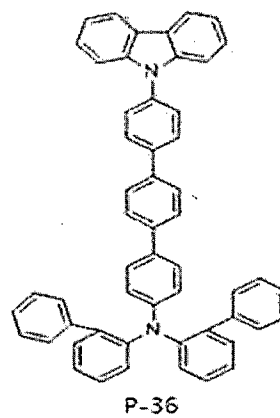
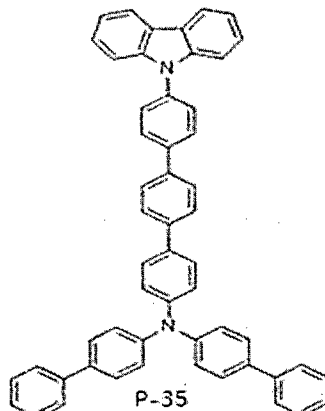
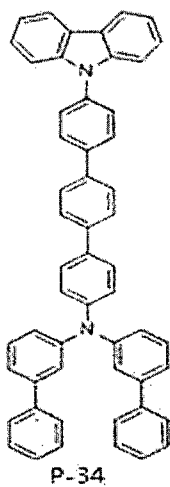
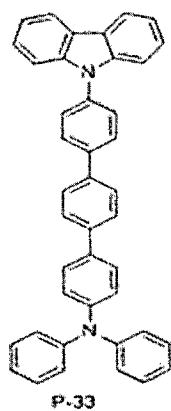
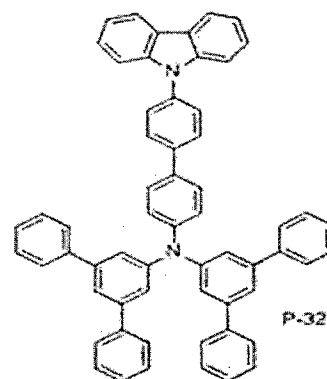
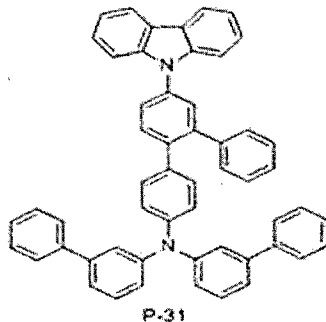
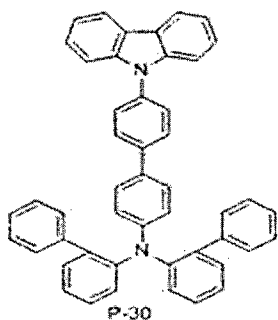
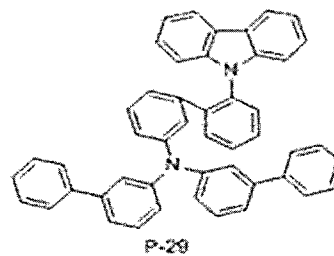
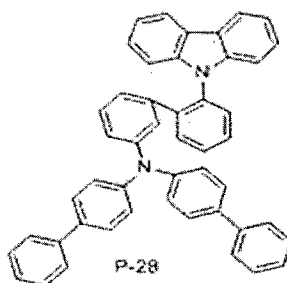
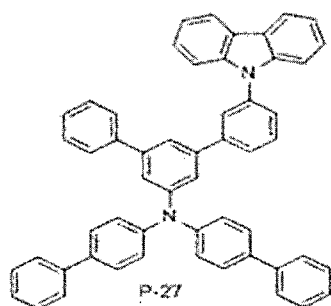
       또한, 본 발명의 일 예로 [화학식 2], [화학식 2-i], [화학식 2-ii] 및 [화학식 2-iii]에서, C6 내지 C30 아릴렌기는 페닐렌기, 비페닐렌기, 터페닐렌기, 테트라페닐렌기, 플루오레닐렌기 또는 이들의 조합이고, C6 내지 C30 아릴기는 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 테트라페닐기, 플루오렌일기 또는 이들의 조합일 수 있다.

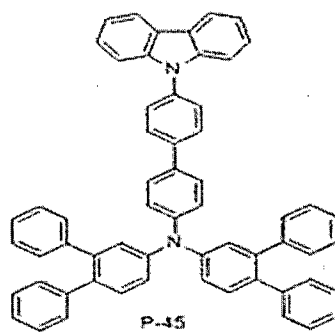
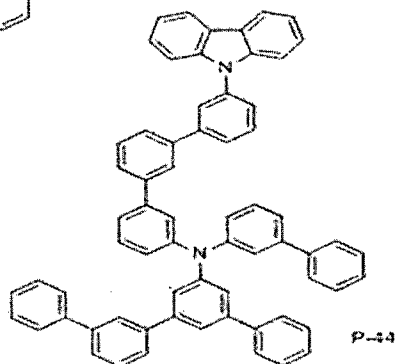
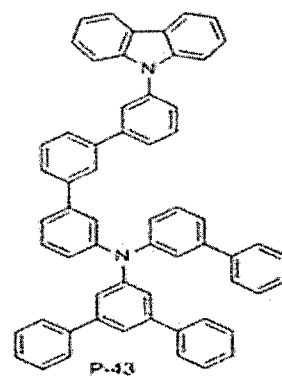
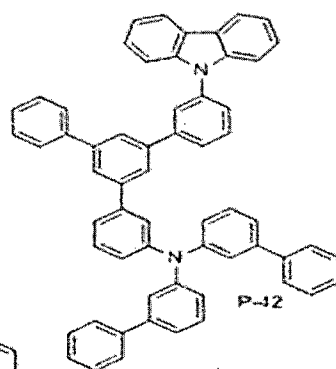
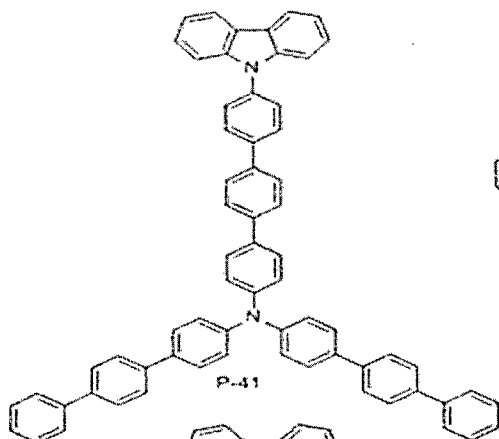
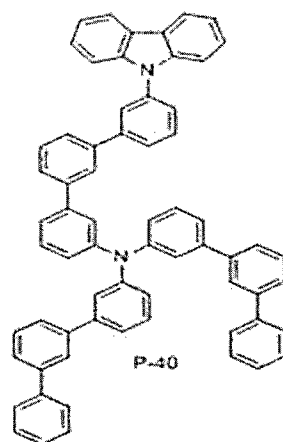
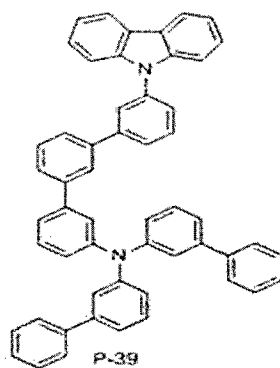
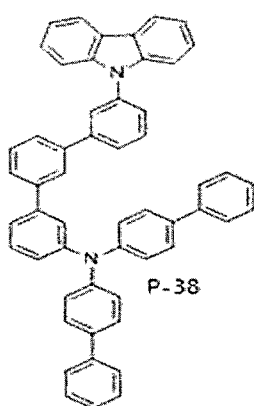
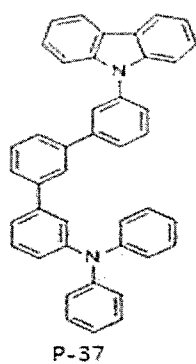
20        상기 제2 화합물은 예컨대 하기 화학식 P-1 내지 화학식 P-117 중 어느 하나로 표현될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

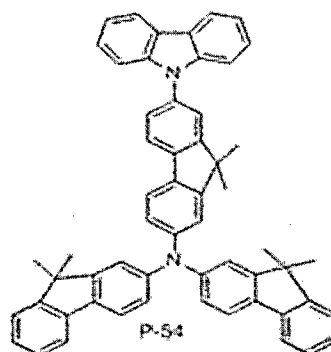
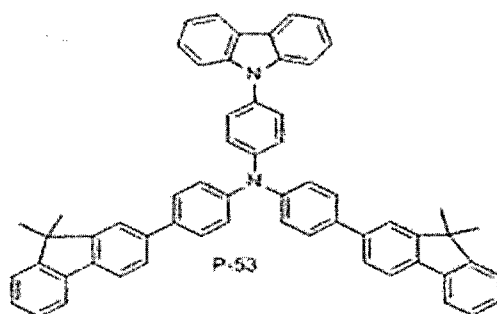
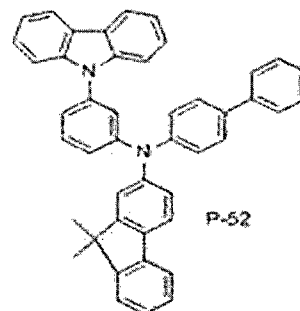
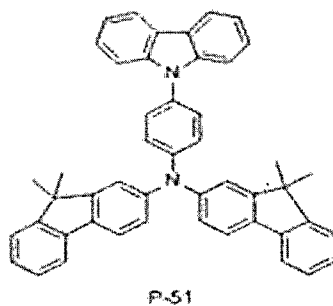
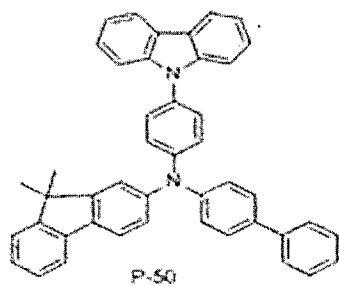
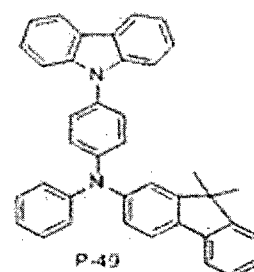
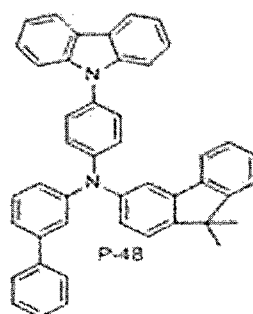
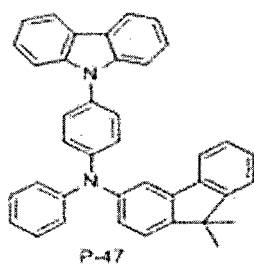
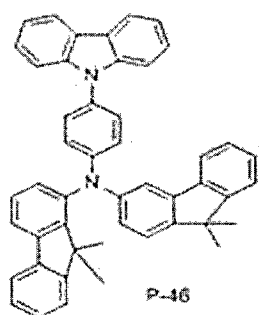


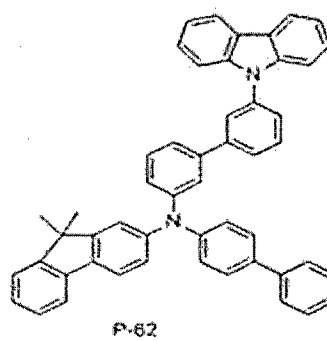
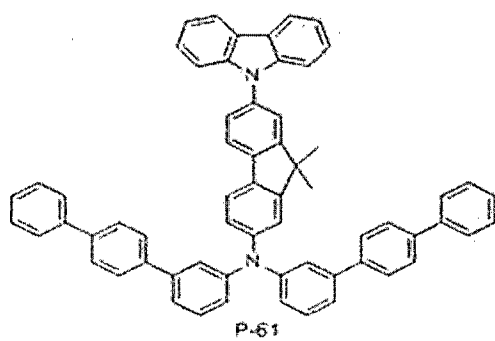
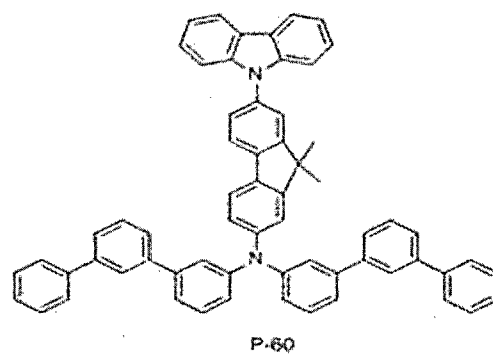
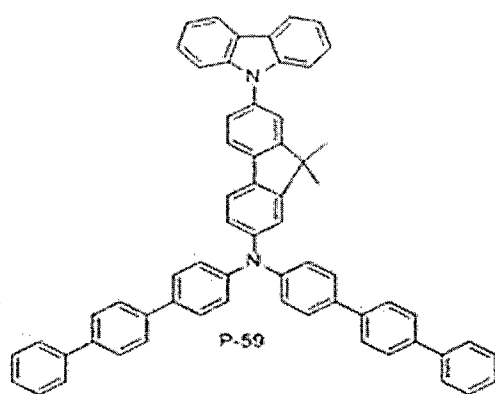
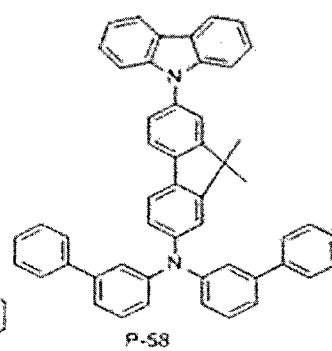
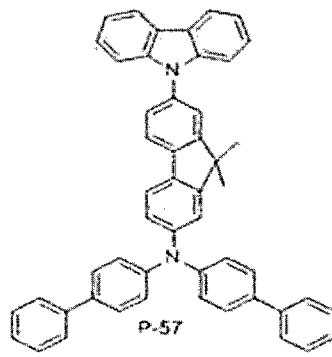
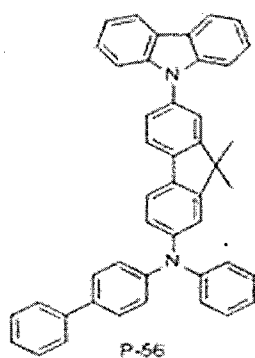
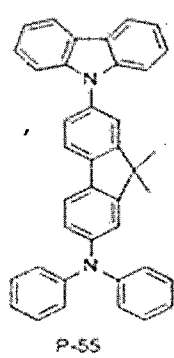


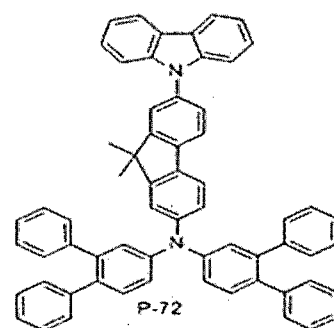
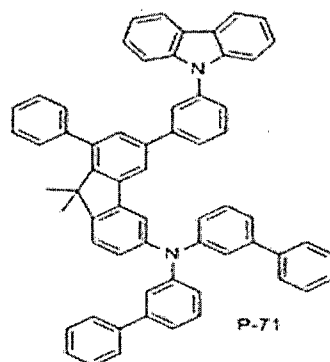
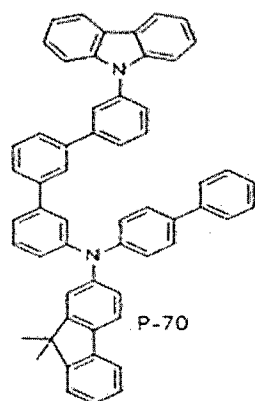
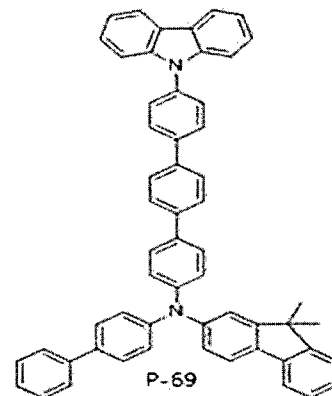
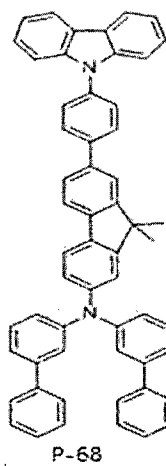
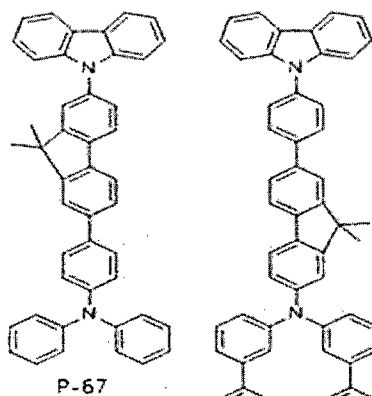
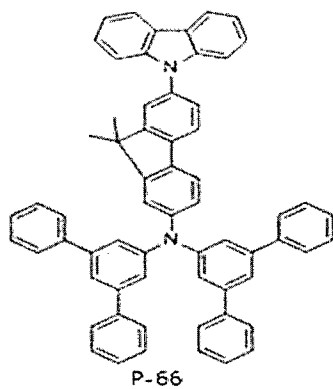
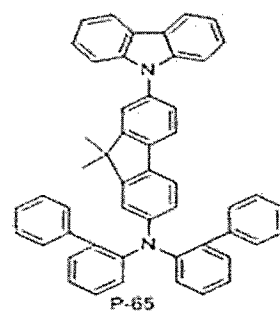
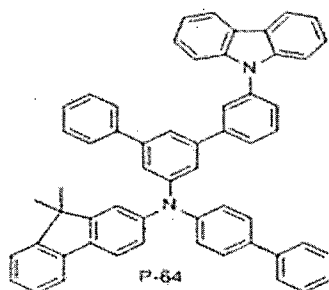
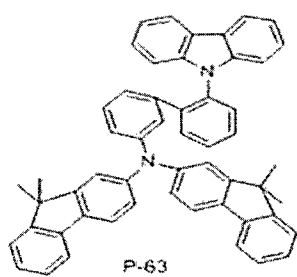


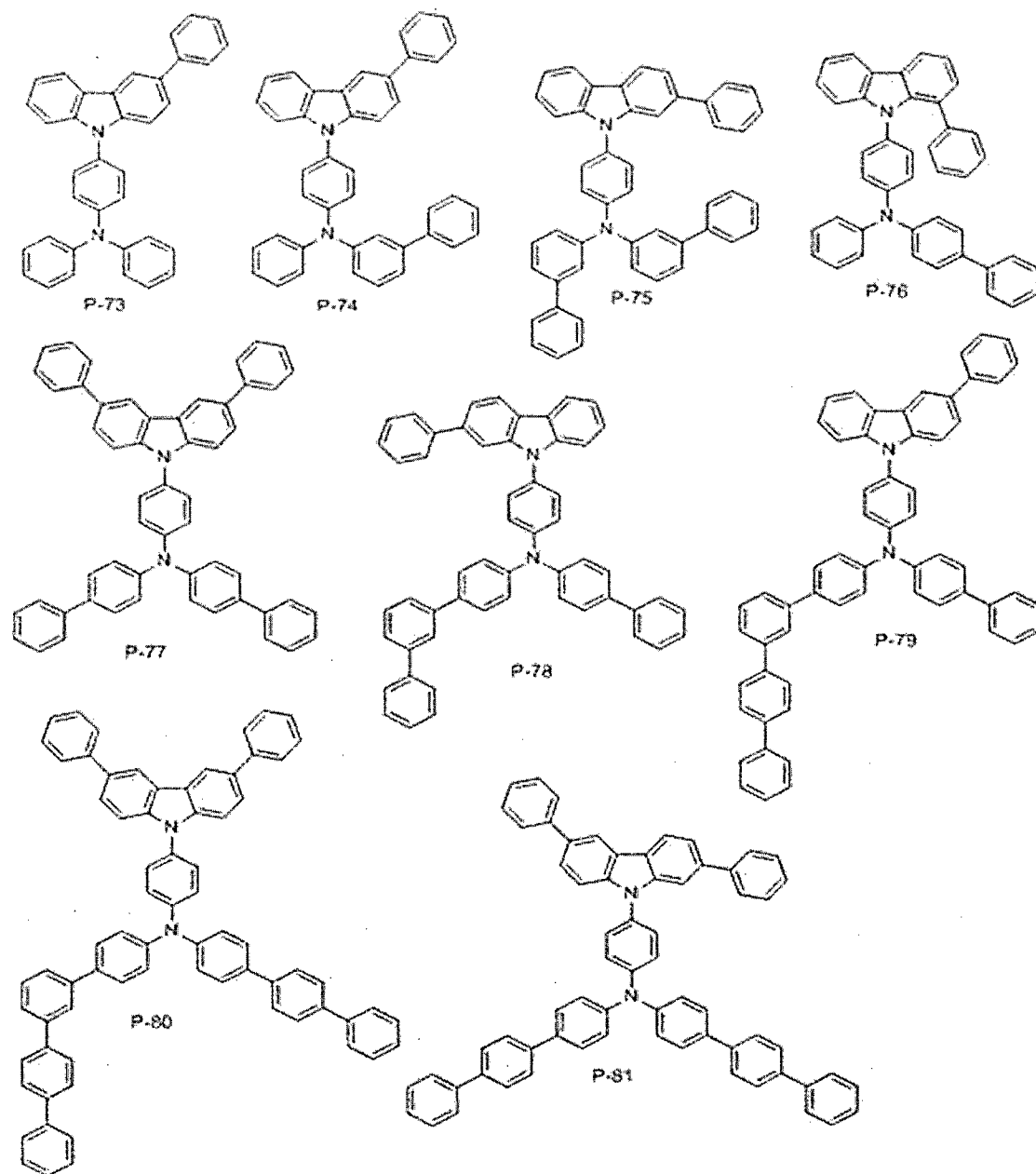


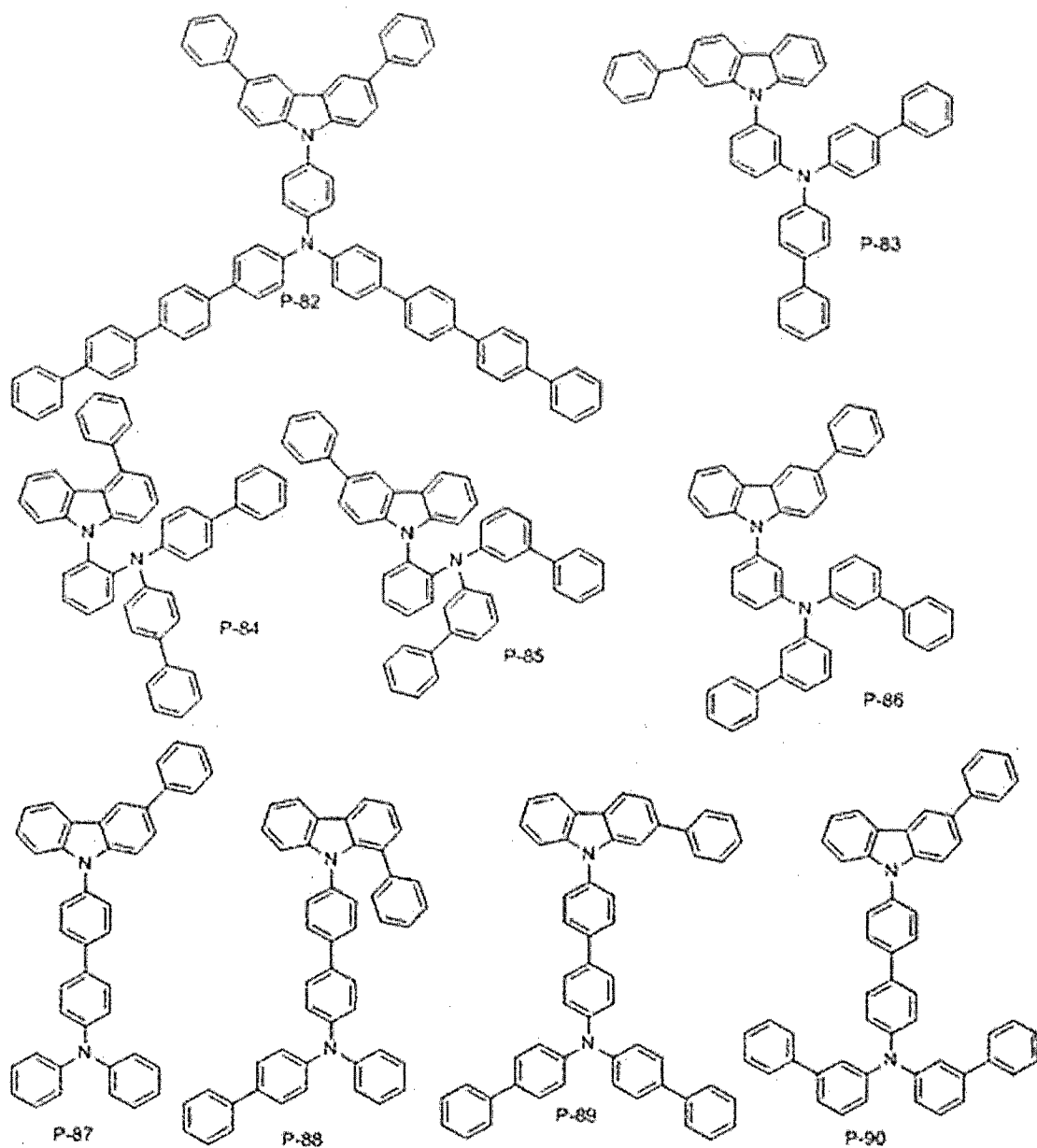


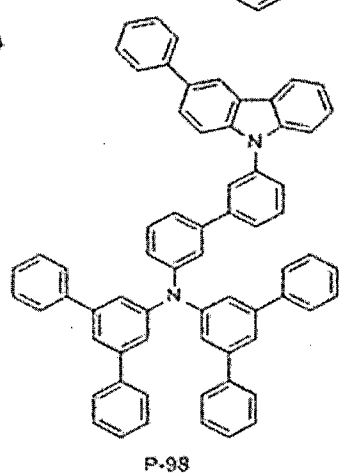
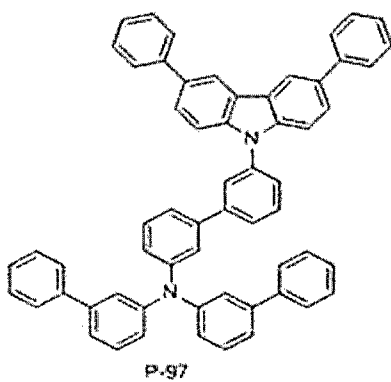
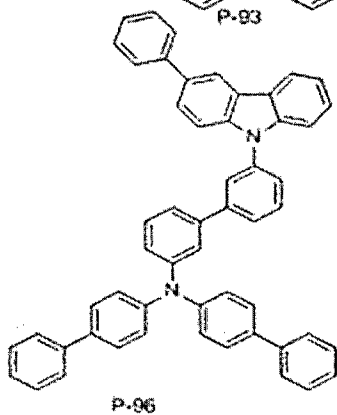
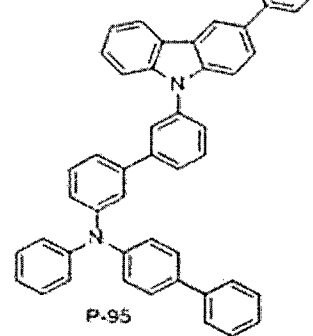
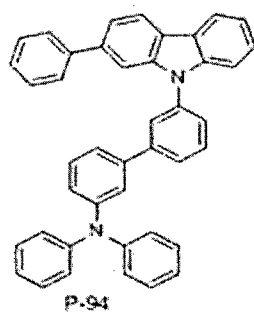
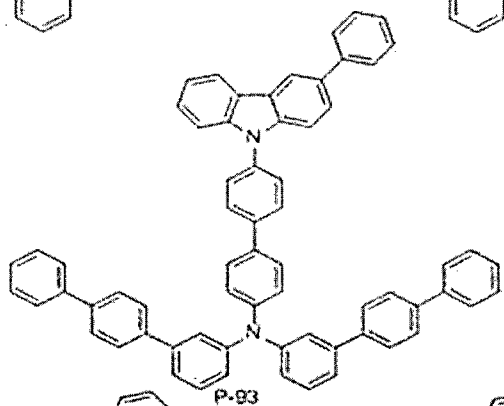
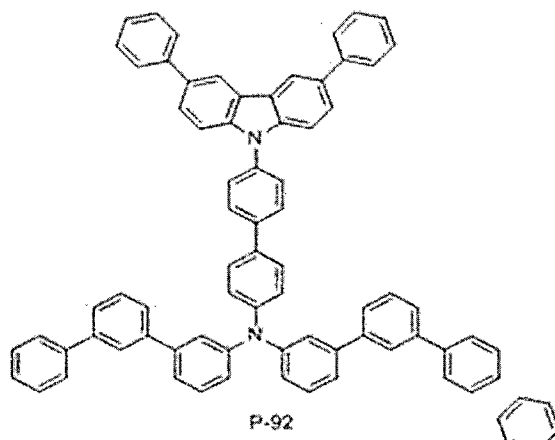
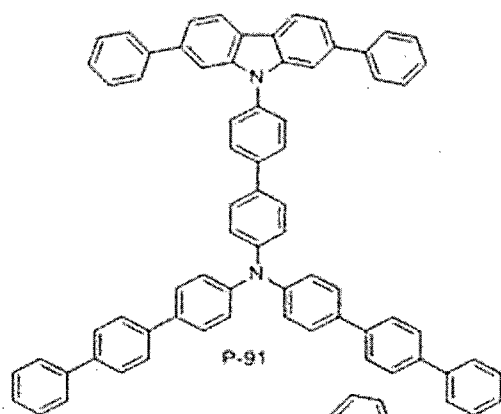


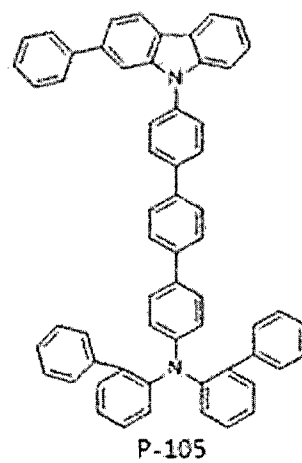
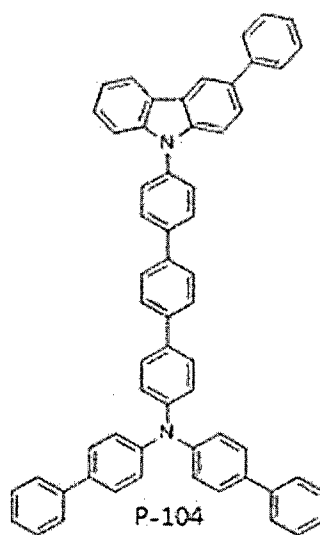
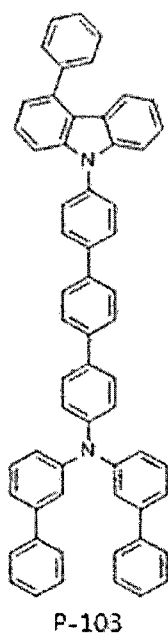
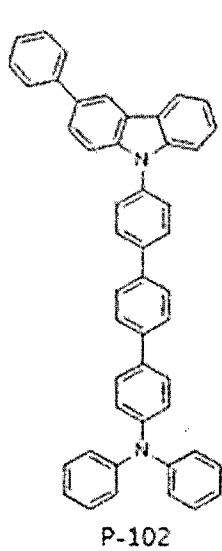
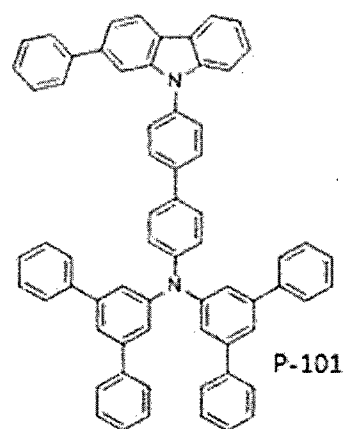
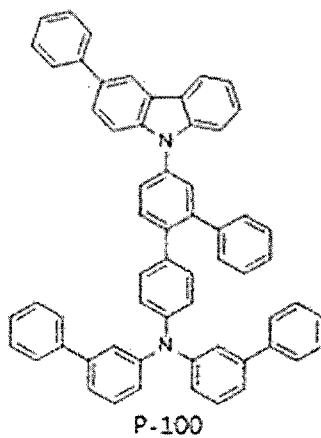
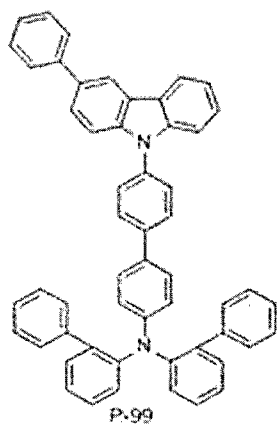


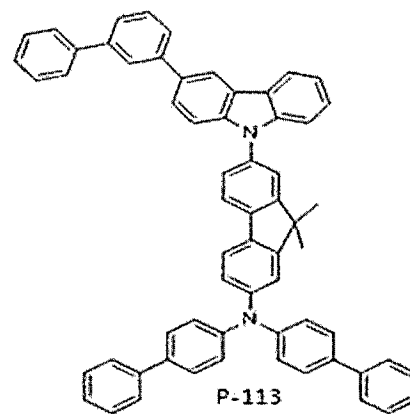
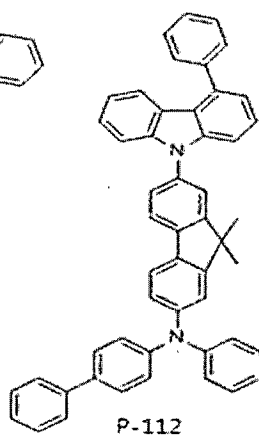
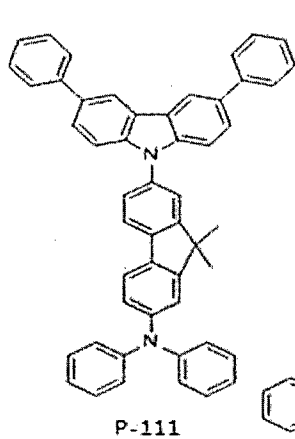
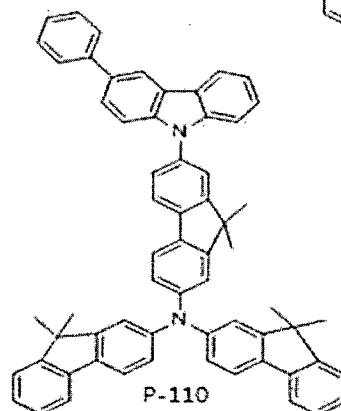
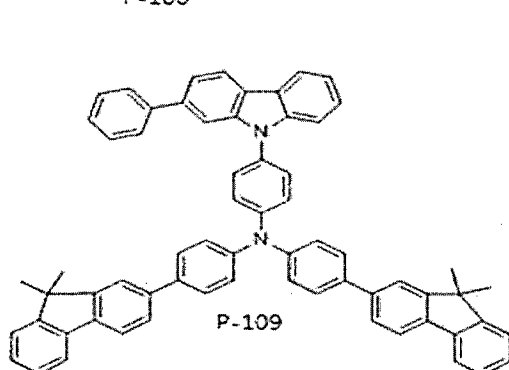
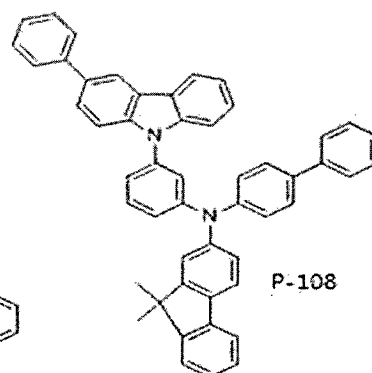
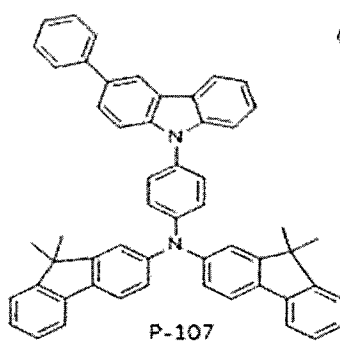
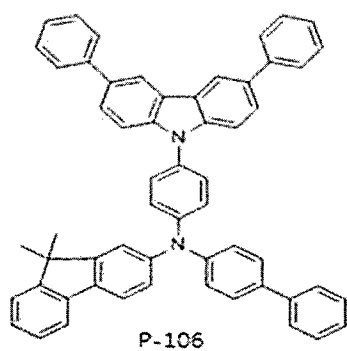


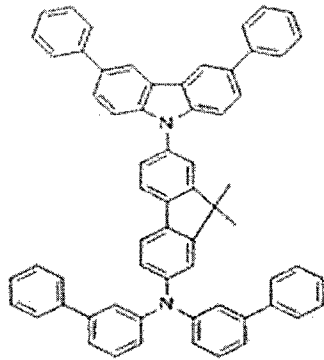




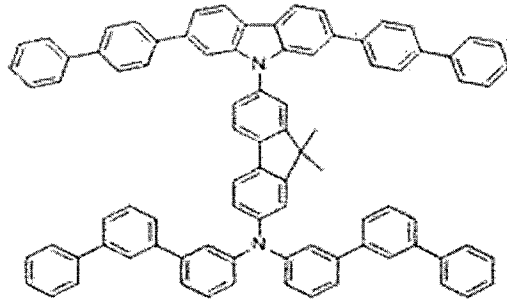




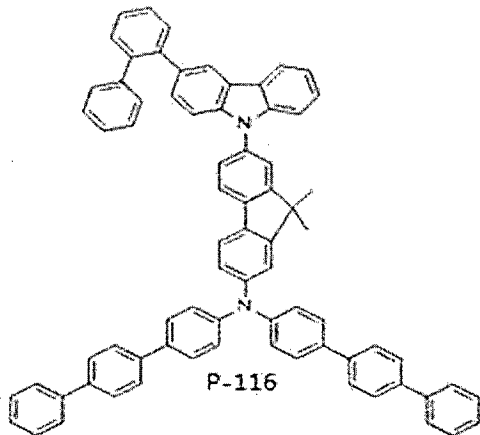




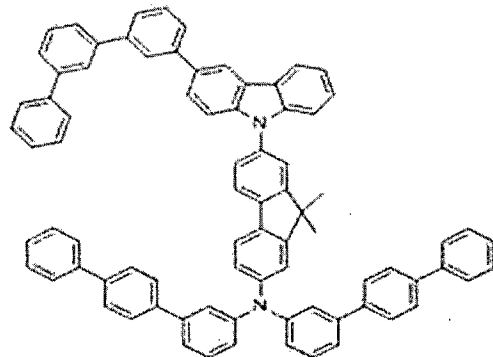
P-114



P-115



P-116



P-117

본 발명의 일 구현예에 따른 유기 광전자 소자는 전자 특성이 강한 제1 화합물을 포함하는 전자수송보조층(35)과, 정공수송층(31)과 발광층(32) 사이의 HOMO 에너지 레벨 차이를 줄임으로써 정공의 주입 특성을 조절할 수 있는 정공 수송 특성이 좋은 제2 화합물을 포함하는 정공수송보조층(33)을 동시에 포함하는데, 이들을 함께 사용함으로써, 정공수송보조층(33)의 정공 주입 조절 능력과 전자수송보조층(35)의 전자 주입 조절 능력을 통해 전하 밸런스를 조정하여 효율을 개선시킬 수 있으며, 정공수송보조층(33)과 전자수송보조층(35)을 적용해 유기층의 각 계면에서 전하가 축적되는 것을 방지하여 소자의 열화현상이 감소하고, 소자가 안정화되어 수명을 개선시킬 수 있다.

구체적으로, 화학식 1-i 내지 화학식 1-ix 중 어느 하나로 표현되는 제1 화합물과 화학식 2-i 내지 화학식 2-iii 중 어느 하나로 표현되는 제2 화합물을 함께 사용할 수 있다.

더욱 구체적으로, 그룹 1에 나열된 화합물 중 어느 하나로 표현되는 제1 화합물 및 화학식 2-i 내지 화학식 2-iii 중 어느 하나로 표현되는 제2 화합물을 함께 사용할 수 있다.

정공수송보조층(33) 및 전자수송보조층(35)은 증착 또는 잉크젯 공정으로 0.1 nm 내지 20.0 nm의 두께로 정공수송층 위에 도포 가능하며, 예컨대 0.2 nm 내지 10.0 nm, 0.3 nm 내지 5 nm, 0.3 nm 내지 2 nm, 0.4 nm 내지 1.0 nm의 두께 등으로 도포 가능하다.

5        유기층(30)은 선택적으로 애노드(10)와 정공수송층(31) 사이에 위치하는 정공주입층(37) 및/또는 캐소드(20)와 전자수송층(34) 사이에 위치하는 전자주입층(36)을 더 포함할 수 있다.

상술한 유기 발광 소자는 유기 발광 표시 장치에 적용될 수 있다.

10        본 발명에서, 유기 광전자 소자는 유기발광소자, 유기광전소자, 유기태양전지, 유기트랜지스터, 유기 감광체 드럼 및 유기메모리소자로 이루어진 군에서 선택된 것일 수 있다.

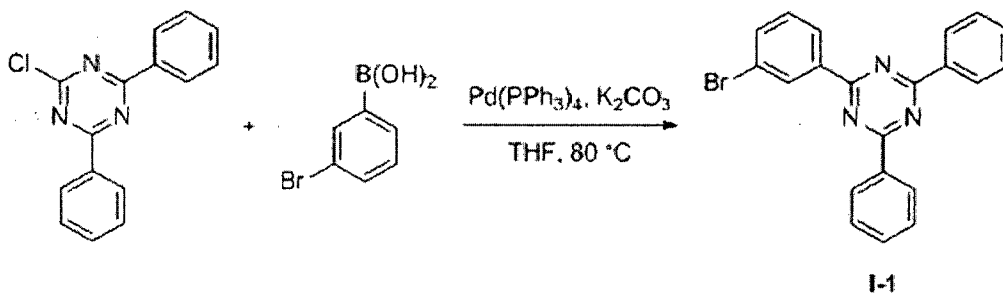
#### 【발명의 실시를 위한 형태】

15        이하에서는 본 발명의 구체적인 실시예들을 제시한다. 다만, 하기에 기재된 실시예들은 본 발명을 구체적으로 예시하거나 설명하기 위한 것에 불과하며, 이로서 본 발명이 제한되어서는 아니된다.

#### 제1 화합물의 합성

##### 합성예 1: 중간체 I-1의 합성

[반응식 1]



20        질소 환경에서 상기 화합물 2-chloro-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine (50 g, 187 mmol, 구입처: TCI社)을 THF 1L에 녹인 후, 여기에 (3-bromophenyl)boronic acid (45 g, 224.12 mmol)와 tetrakis(triphenylphosphine)palladium (2.1 g, 1.87 mmol)을 넣고 교반시켰다. 물에 포화된 potassium carbonate(64 g, 467 mmol)을 넣고 80 °C에서 12시간 동안 가열하여 환류시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 dichloromethane(DCM)으로 추출한 다음 무수 MgSO<sub>4</sub>로 수분을 제거한 후, 필터하고 감압 농축하였다. 이렇게

25

얻어진 잔사를 컬럼 크로마토그래피(column chromatography)로 분리 정제하여 상기 화합물 I-1(69 g, 95 %)를 얻었다.

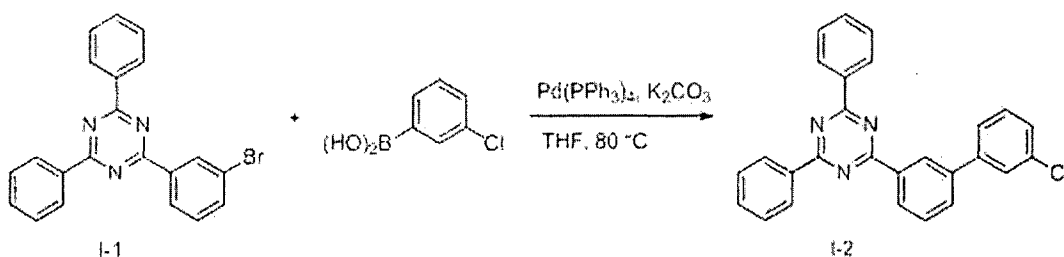
HRMS (70 eV, EI<sup>+</sup>): m/z calcd for C<sub>21</sub>H<sub>14</sub>BrN<sub>3</sub>: 387.0371, found: 387

Elemental Analysis: C, 65 %; H, 4 %

5

## 합성예 2: 중간체 I-2의 합성

[반응식 2]



중간체 I-1과 3-chlorophenyl boronic acid (TCI)을 상기 중간체 I-1의 합성방법과  
10 동일한 방법으로 합성, 정제하여 중간체 I-2 51 g (95 %)을 수득하였다.

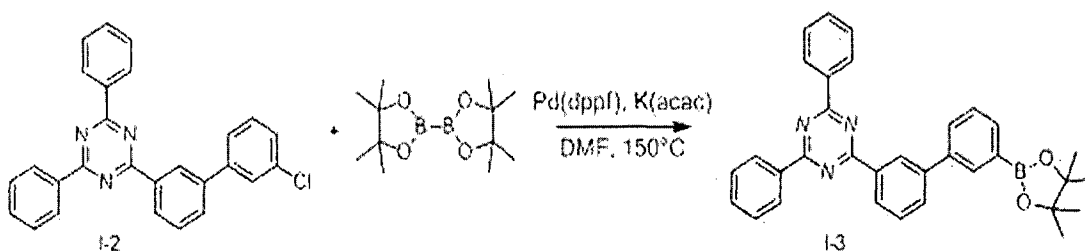
HRMS (70 eV, EI<sup>+</sup>): m/z calcd for C<sub>27</sub>H<sub>18</sub>ClN<sub>3</sub>: 419.1189, found: 419

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

## 합성예 3: 중간체 I-3의 합성

15

[반응식 3]



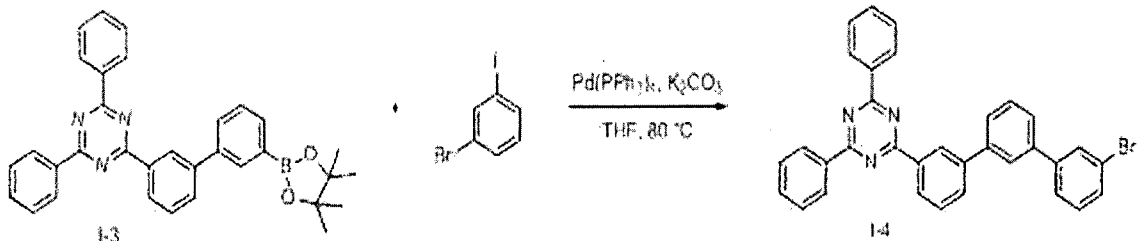
질소 환경에서 I-2 (100 g, 238 mmol)을 dimethylformamide(DMF) 1L에 녹인 후,  
여기에 bis(pinacolato)diboron (72.5 g, 285 mmol)과 (1,1-  
bis(diphenylphosphine)ferrocene)dichloropalladium(II) (2 g, 2.38 mmol), 그리고 potassium  
20 acetate(58 g, 595 mmol)을 넣고 150 °C에서 48시간 동안 가열하여 환류시켰다. 반응  
완료 후 반응액에 물을 넣고 혼합물을 필터한 후, 진공오븐에서 건조하였다. 이렇게  
얻어진 잔사를 컬럼 크로마토그래피로 분리 정제하여 상기 화합물 I-3(107 g, 88 %)을  
얻었다.

HRMS (70 eV, EI<sup>+</sup>): m/z calcd for C<sub>33</sub>H<sub>30</sub>BN<sub>3</sub>O<sub>2</sub>: 511.2431, found: 511

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

#### 합성예 4: 중간체 I-4의 합성

[반응식 4]



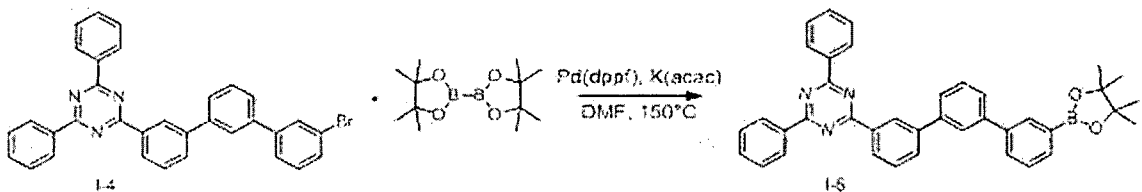
질소 환경에서 상기 화합물 I-3 (50 g, 98 mmol)을 THF 1L에 녹인 후, 여기에 1-bromo-3-iodobenzene (33 g, 117 mmol, Aldrich社)와 tetrakis(triphenylphosphine)palladium (1 g, 0.98 mmol)을 넣고 교반시켰다. 물에 포화된 potassium carbonate(34 g, 245 mmol)을 넣고 80 °C에서 12시간 동안 가열하여 환류시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 dichloromethane(DCM)로 추출한 다음 무수 MgSO<sub>4</sub>로 수분을 제거한 후, 필터하고 감압 농축하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 컬럼 크로마토그래피로 분리 정제하여 상기 화합물 I-4(50 g, 95 %)를 얻었다.

HRMS (70 eV, EI<sup>+</sup>): m/z calcd for C<sub>30</sub>H<sub>27</sub>BO<sub>2</sub>: 539.0997, found: 539

Elemental Analysis: C, 73.34; H, 4.10

#### 합성예 5: 중간체 I-5의 합성

[반응식 5]



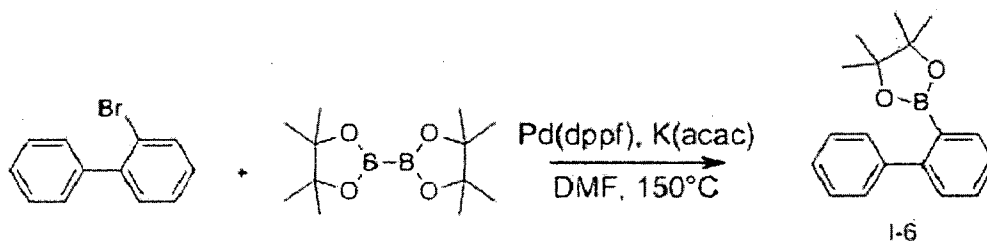
중간체 I-3의 합성방법과 동일한 방법으로 합성, 정제하여 중간체 I-5 95 g (88 %)을 수득하였다.

HRMS (70 eV, EI<sup>+</sup>): m/z calcd for C<sub>39</sub>H<sub>34</sub>BN<sub>3</sub>O<sub>2</sub>: 587.2744, found: 587

Elemental Analysis: C, 80 %; H, 6 %

#### 합성예 6: 중간체 I-6의 합성

## [반응식 6]



질소 환경에서 2-bromo-1,1'-biphenyl (20 g, 85.8 mmol)을 dimethylformamide(DMF) 1L에 녹인 후, 여기에 bis(pinacolato)diboron (26 g, 103 mmol)와 (1,1'-

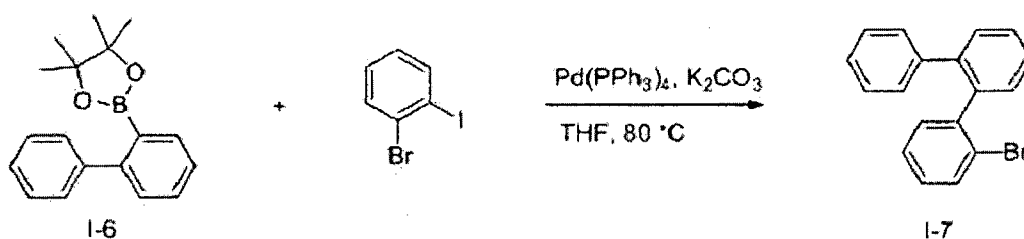
- 5 bis(diphenylphosphine)ferrocene)dichloropalladium(II)(0.7 g, 0.85 mmol) 그리고 potassium acetate(58 g, 595 mmol)을 넣고 150°C에서 5시간 동안 가열하여 환류시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 혼합물을 필터한 후, 진공오븐에서 건조하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 플래시 컬럼 크로마토그래피로 분리 정제하여 상기 화합물 I-6(19 g, 83 %)을 얻었다.

10 HRMS (70 eV, EI+): m/z calcd for C<sub>18</sub>H<sub>21</sub>BO<sub>2</sub>: 280.1635, found: 280

Elemental Analysis: C, 77 %; H, 7 %

## 합성예 7: 중간체 I-7의 합성

## [반응식 7]

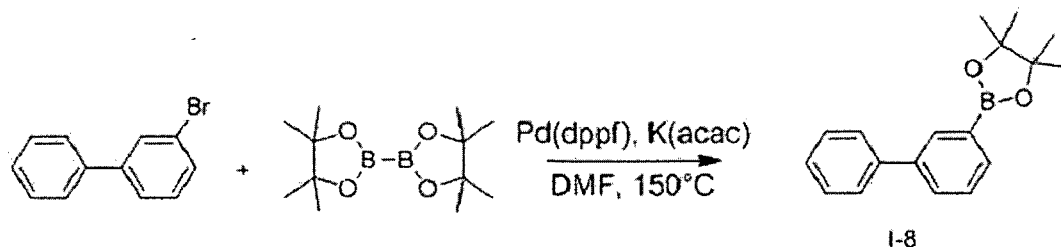


- 15 질소 환경에서 상기 화합물 I-6 (20 g, 71 mmol)을 THF 1L에 녹인 후, 여기에 1-bromo-2-iodobenzene (22 g, 78 mmol)와 tetrakis(triphenylphosphine)palladium (0.8 g, 0.71 mmol)을 넣고 교반시켰다. 물에 포화된 potassium carbonate(25 g, 177 mmol)을 넣고 80°C에서 12시간 동안 가열하여 환류시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고
- 20 dichloromethane(DCM)로 추출한 다음 무수 MgSO<sub>4</sub>로 수분을 제거한 후, 필터하고 감압 농축하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 플래시 컬럼 크로마토그래피로 분리 정제하여 상기 화합물 I-7 (19 g, 87 %)를 얻었다.

HRMS (70 eV, EI+): m/z calcd for C<sub>18</sub>H<sub>13</sub>Br: 308.0201, found: 308 Elemental Analysis: C, 70 %; H, 4 %

## 합성예 8: 중간체 I-8의 합성

[반응식 8]



5 질소 환경에서 3-bromo-1,1'-biphenyl (20 g, 85.8 mmol)을 dimethylforamide(DMF) 1L에 녹인 후, 여기에 bis(pinacolato)diboron (26 g, 103 mmol)과 (1,1'-bis(diphenylphosphine)ferrocene)dichloropalladium(II) (0.7 g, 0.85 mmol), 그리고 potassium acetate(58 g, 595 mmol)을 넣고 150°C에서 5시간 동안 가열하여 환류시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 혼합물을 필터한 후, 진공오븐에서 건조하였다. 이렇게

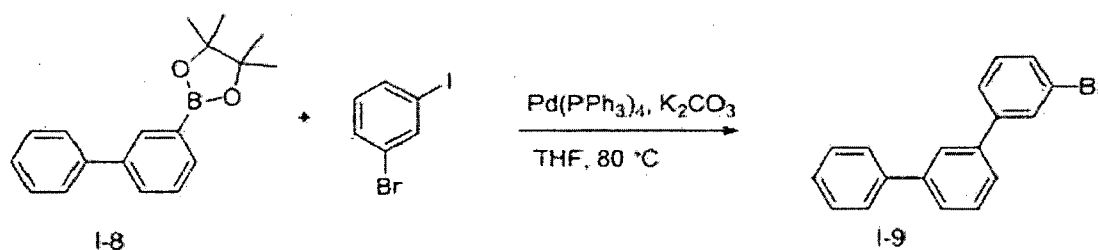
10 얻어진 잔사를 플래시 컬럼 크로마토그래피로 분리 정제하여 상기 화합물 I-8 (20 g, 85 %)을 얻었다.

HRMS (70 eV, EI<sup>+</sup>): m/z calcd for C<sub>18</sub>H<sub>21</sub>BO<sub>2</sub>: 280.1635, found: 280.

Elemental Analysis: C, 77 %; H, 7 %

## 15 합성예 9: 중간체 I-9의 합성

[반응식 9]



질소 환경에서 상기 화합물 I-8 (20 g, 71 mmol)을 THF 1 L에 녹인 후, 여기에 1-bromo-3-iodobenzene (22 g, 78 mmol, TCI社)과 tetrakis(triphenylphosphine)palladium (0.8 g, 0.71 mmol)을 넣고 교반시켰다. 물에 포화된 potassium carbonate(25 g, 177 mmol)을 넣고 80°C에서 12시간 동안 가열하여 환류시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 dichloromethane(DCM)로 추출한 다음 무수 MgSO<sub>4</sub>로 수분을 제거한 후, 필터하고 감압 농축하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 플래시 컬럼 크로마토그래피로 분리

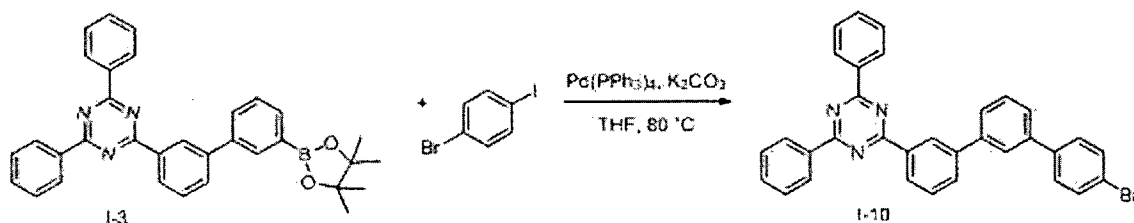
20

정제하여 상기 화합물 I-9 (20 g, 91 %)를 얻었다.

HRMS (70 eV, EI+): m/z calcd for C<sub>18</sub>H<sub>13</sub>Br: 308.0201, found: 308 Elemental Analysis: C, 70 %; H, 4 %

5            **합성예 10: 중간체 I-10의 합성**

[반응식 10]

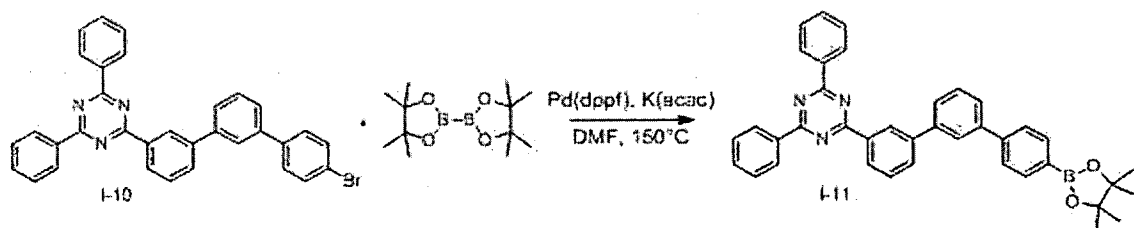


질소 환경에서 상기 화합물 I-3 (50 g, 98 mmol)을 THF 1L에 녹인 후, 여기에 1-bromo-4-iodobenzene (33 g, 117 mmol)과 tetrakis(triphenylphosphine)palladium (1 g, 0.98 mmol)을 넣고 교반시켰다. 물에 포화된 potassium carbonate(34 g, 245 mmol)을 넣고 80℃에서 12시간 동안 가열하여 환류시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 dichloromethane(DCM)로 추출한 다음 무수  $MgSO_4$ 로 수분을 제거한 후, 필터하고 감압 농축하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 플래시 컬럼 크로마토그래피로 분리 정제하여 상기 화합물 I-10(50 g, 95 %)를 얻었다.

15 HRMS (70 eV, EI+): m/z calcd for C<sub>30</sub>H<sub>27</sub>BO<sub>2</sub>: 539.0997, found: 539 540.  
Elemental Analysis: C, 73.34; H, 4.10

합성예 11: 중간체 I-11의 합성

[반응식 11]



질소 환경에서 I-10 (100 g, 185 mmol)을 dimethylformamide(DMF) 1L에 녹인 후, 여기에 bis(pinacolato)diboron (56 g, 222 mmol)과 (1,1'-bis(diphenylphosphine)ferrocene)dichloropalladium(II) (1.5 g, 1.85 mmol) 그리고 potassium acetate(45 g, 595 mmol)을 넣고 150℃에서 5시간 동안 가열하여 환류 시켰다. 반응

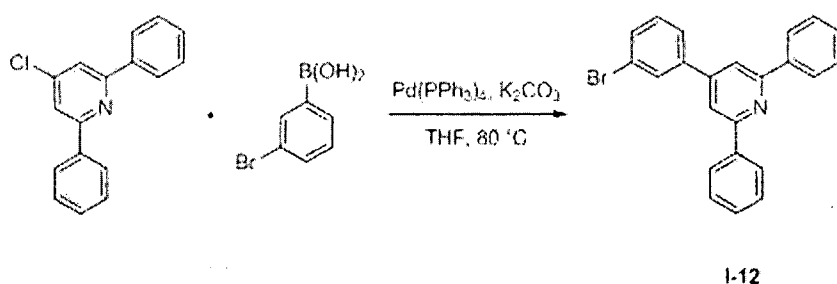
완료 후 반응액에 물을 넣고 혼합물을 필터한 후, 진공오븐에서 건조하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 플래시 컬럼 크로마토그래피로 분리 정제하여 상기 화합물 I-11 (95 g, 88 %)을 얻었다.

HRMS (70 eV, EI<sup>+</sup>): m/z calcd for C<sub>39</sub>H<sub>34</sub>BN<sub>3</sub>O<sub>2</sub>: 587.2744, found: 587

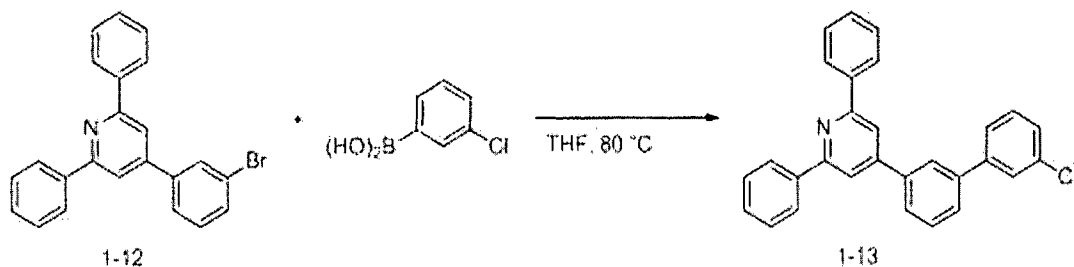
Elemental Analysis: C, 80 %; H, 6%

합성예 12 내지 16: 중간체 I-12의 합성(피리딘 코어를 갖는 중간체의 합성)

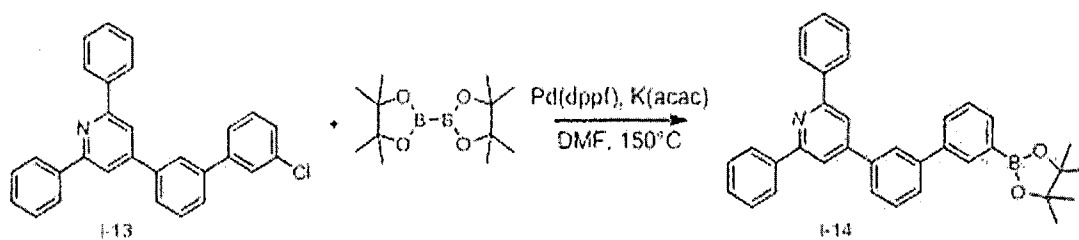
[반응식 12]



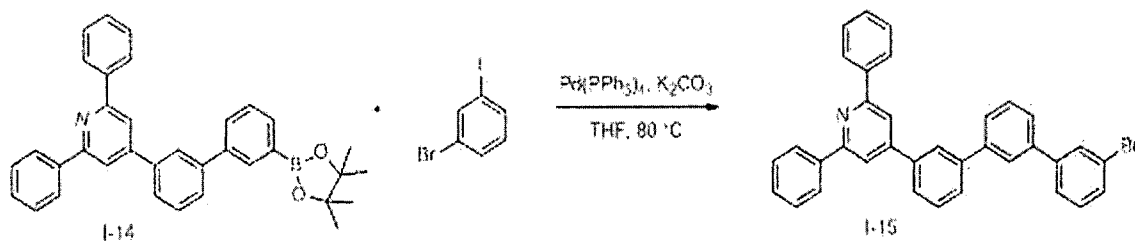
[반응식 13]



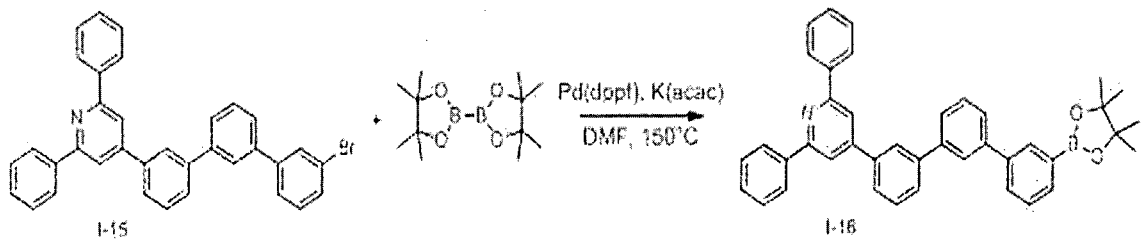
[반응식 14]



[반응식 15]



## [반응식 16]



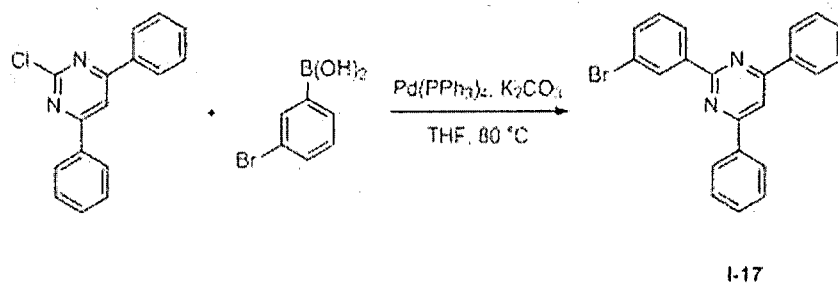
2-chloro-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine 대신 4-chloro-2,6-diphenylpyridine(TCI社)을  
 사용한 것을 제외하고는, 중간체 I-1 내지 중간체 I-5, 중간체 I-10, 중간체 I-11의  
 5 합성방법과 동일한 방법으로 합성, 정제하여 중간체 I-12 내지 중간체 I-16을  
 수득하였다.

HRMS (70 eV, EI+): m/z calcd for  $C_{41}H_{36}BNO_2$ : 585.2839, found: 585

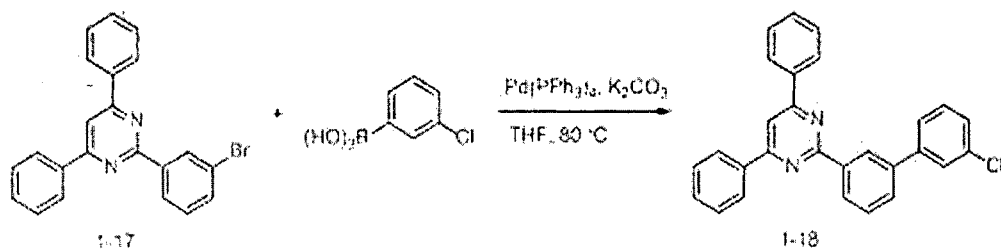
Elemental Analysis: C, 84 %; H, 6 %

10 합성예 17 내지 21: 중간체 I-17의 합성(피리미딘 코어를 갖는 중간체의 합성)

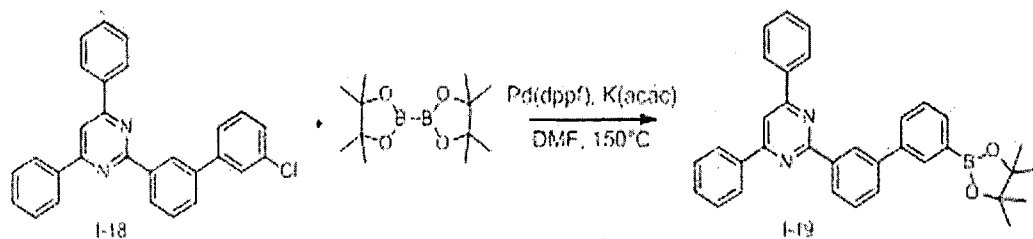
## [반응식 17]



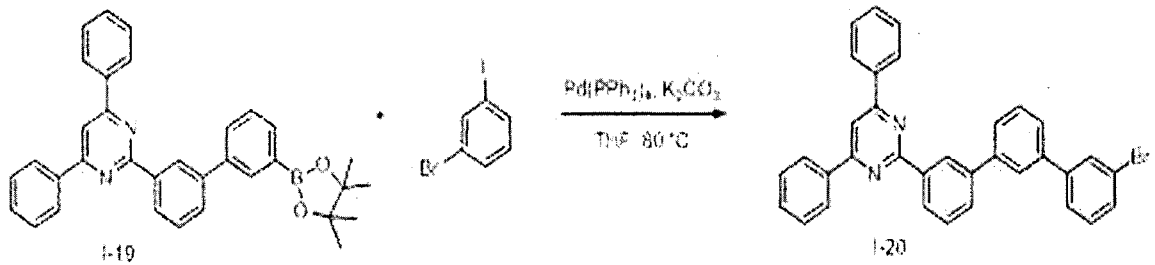
## [반응식 18]



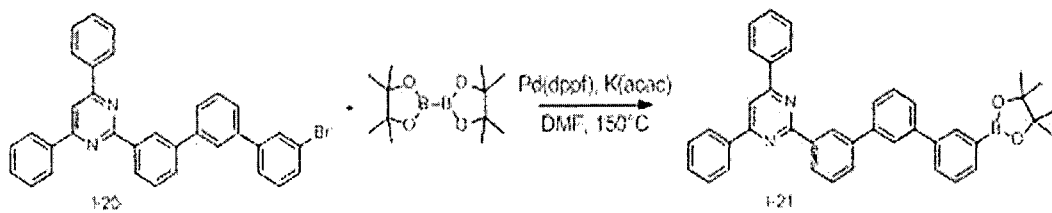
15 [반응식 19]



[반응식 20]



[반응식 21]



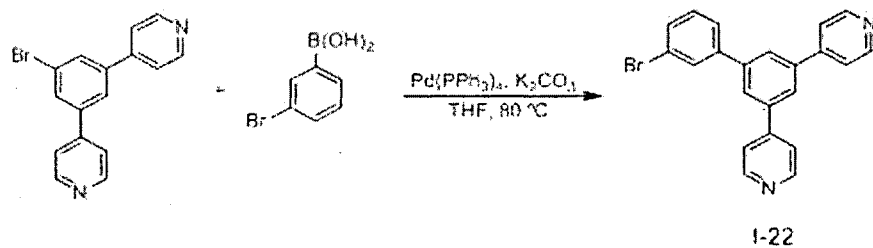
- 5 2-chloro-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine 대신 2-chloro-4,6-diphenyl-1,3-pyrimidine(TCI社)을 사용한 것을 제외하고는, 중간체 I-1 내지 중간체 I-5, 중간체 I-10, 중간체 I-11의 합성방법과 동일한 방법으로 합성, 정제하여 중간체 I-17 내지 중간체 I-21을 수득하였다.

HRMS (70 eV, EI+): m/z calcd for  $\text{C}_{40}\text{H}_{35}\text{BN}_2\text{O}_2$ : 586.2792, found: 586

10 Elemental Analysis: C, 82 %; H, 6 %

합성예 22 내지 26: 중간체 I-22의 합성(페닐렌 코어를 갖는 중간체의 합성)

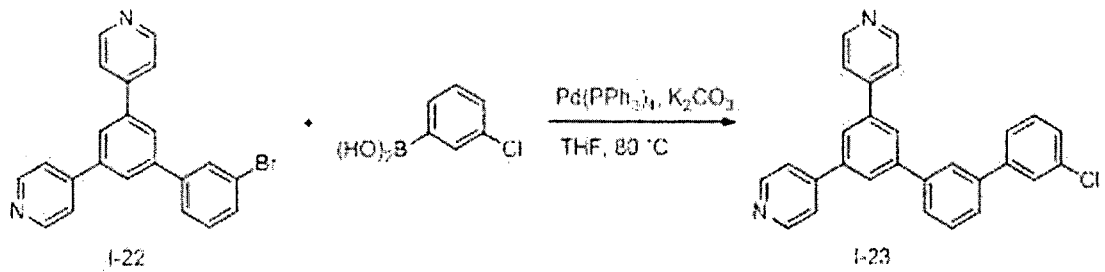
[반응식 22]



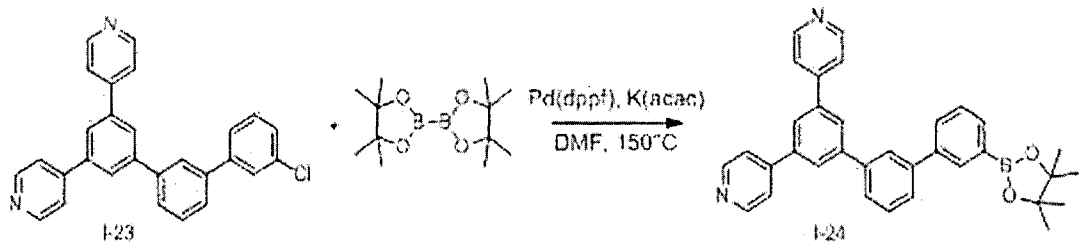
15 HRMS (70 eV, EI+): m/z calcd for  $\text{C}_{40}\text{H}_{35}\text{BN}_2\text{O}_2$ : 586.2792, found: 586

Elemental Analysis: C, 82 %; H, 6 %

## [반응식 23]

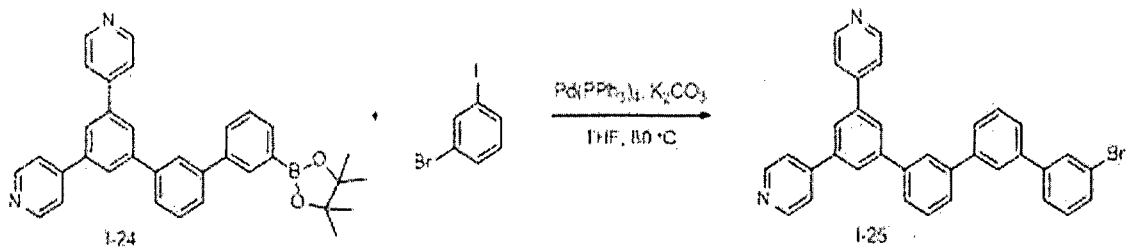


## [반응식 24]

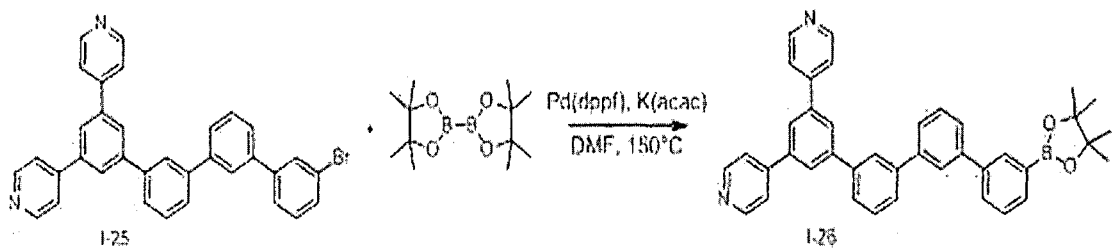


5

## [반응식 25]



## [반응식 26]

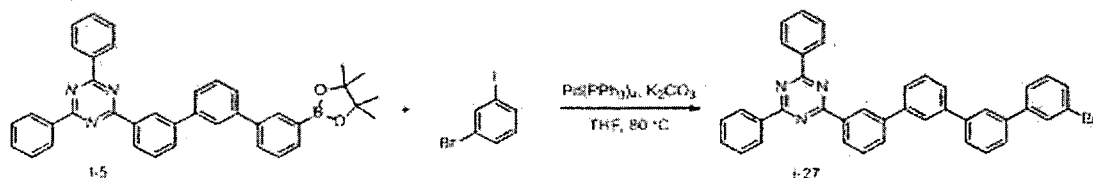


2-chloro-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine 대신 4,4'-(5-Bromo-1,3-

- 10 phenylene)dipyridine(일본 공개특허공보 제2008-127326호의 합성에 2 참조)을 사용한 것을 제외하고는, 중간체 I-1 내지 중간체 I-5, 중간체 I-10, 중간체 I-11의 합성방법과 동일한 방법으로 합성, 정제하여 중간체 I-22 내지 중간체 I-26을 수득하였다.

합성에 27: 중간체 I-27의 합성

## [반응식 27]



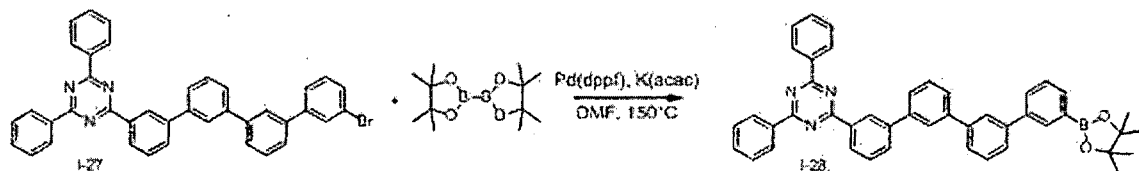
질소 환경에서 상기 화합물 I-5 (50 g, 85 mmol)을 THF 1L에 녹인 후, 여기에 1-bromo-3-iodobenzene (29 g, 102 mmol)과 tetrakis(triphenylphosphine)palladium (1 g, 0.85 mmol)을 넣고 교반시켰다. 물에 포화된 potassium carbonate (30 g, 212 mmol)을 넣고 80 °C에서 12시간 동안 가열하여 환류시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 dichloromethane(DCM)로 추출한 다음 무수 MgSO<sub>4</sub>로 수분을 제거한 후, 필터하고 감압 농축하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 플래시 컬럼 크로마토그래피로 분리 정제하여 상기 화합물 I-27 (50 g, 95 %)를 얻었다.

HRMS (70 eV, EI<sup>+</sup>): m/z calcd for C<sub>39</sub>H<sub>26</sub>BrN<sub>3</sub>: 615.1310, found 616

Elemental Analysis: C, 76 %; H, 4 %

## 합성예 28: 중간체 I-28의 합성

## [반응식 28]



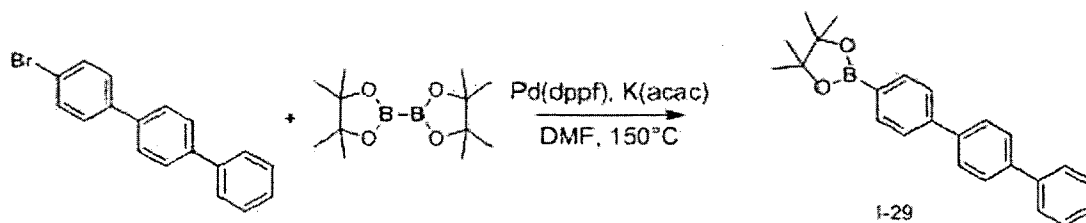
질소 환경에서 I-27 (100 g, 162 mmol)을 dimethylformamide(DMF) 1L에 녹인 후, 여기에 bis(pinacolato)diboron (49 g, 194 mmol)과 (1,1'-bis(diphenylphosphine)ferrocene)dichloropalladium(II) (1.3 g, 1.62 mmol) 그리고 potassium acetate (40 g, 405 mmol)을 넣고 150 °C에서 12시간 동안 가열하여 환류시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 혼합물을 필터한 후, 진공오븐에서 건조하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 플래시 컬럼 크로마토그래피로 분리 정제하여 상기 화합물 I-28 (86 g, 80 %)을 얻었다.

HRMS (70 eV, EI<sup>+</sup>): m/z calcd for C<sub>45</sub>H<sub>38</sub>BN<sub>3</sub>O<sub>2</sub>: 663.3057, found: 663

Elemental Analysis: C, 81 %; H, 6 %

## 합성예 29: 중간체 I-29의 합성

## [반응식 29]



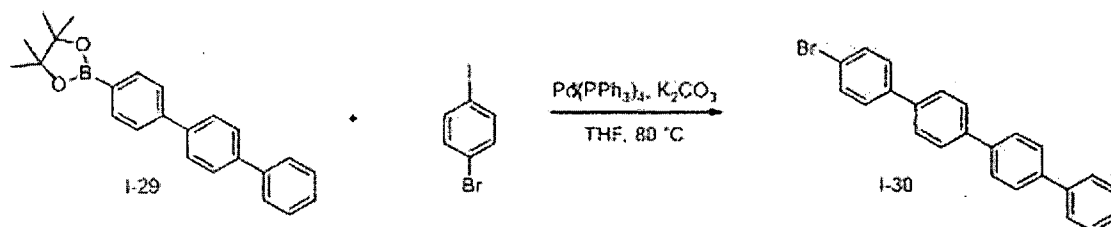
질소 환경에서 4-bromo-p-terphenyl (50 g, 162 mmol TCI社)을 dimethylformamide(DMF) 1L에 녹인 후, 여기에 bis(pinacolato)diboron (49 g, 194 mmol)과 (1,1'-bis(diphenylphosphine)ferrocene)dichloropalladium(II)(1.3 g, 1.62 mmol) 그리고 potassium acetate(40 g, 405 mmol)을 넣고 150℃에서 12시간 동안 가열하여 환류시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 혼합물을 필터한 후, 진공오븐에서 건조하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 플래시 컬럼 크로마토그래피로 분리 정제하여 상기 화합물 I-29 (47 g, 82 %)을 얻었다.

HRMS (70 eV, EI<sup>+</sup>): m/z calcd for C<sub>24</sub>H<sub>25</sub>BO<sub>2</sub>: 356.1948, found: 356

Elemental Analysis: C, 81 %; H, 7 %

## 합성예 30: 중간체 I-30의 합성

## [반응식 30]



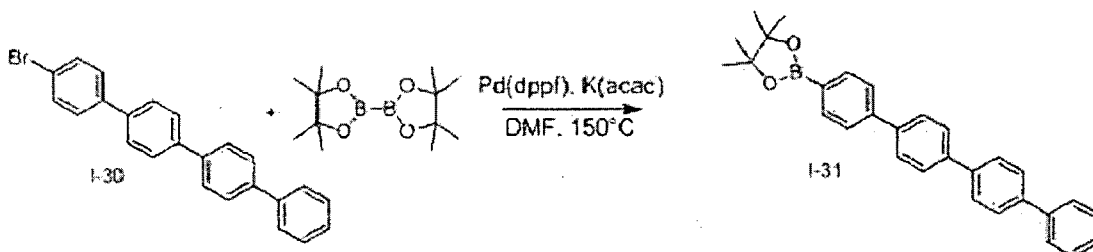
질소 환경에서 상기 화합물 I-29 (50 g, 140 mmol)을 THF 1L에 녹인 후, 여기에 1-bromo-4-iodobenzene (47 g, 168 mmol)과 tetrakis(triphenylphosphine)palladium (1.6 g, 1.4 mmol)을 넣고 교반시켰다. 물에 포화된 potassium carbonate(48 g, 350 mmol)을 넣고 80℃에서 12시간 동안 가열하여 환류시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 dichloromethane(DCM)로 추출한 다음 무수 MgSO<sub>4</sub>로 수분을 제거한 후, 필터하고 감압 농축하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 플래시 컬럼 크로마토그래피로 분리 정제하여 상기 화합물 I-30 (44 g, 89 %)를 얻었다.

HRMS (70 eV, EI<sup>+</sup>): m/z calcd for C<sub>24</sub>H<sub>17</sub>Br: 384.0514, found 384 Elemental Analysis:

C, 75 %; H, 4 %

## 합성예 31: 중간체 I-31의 합성

[반응식 31]



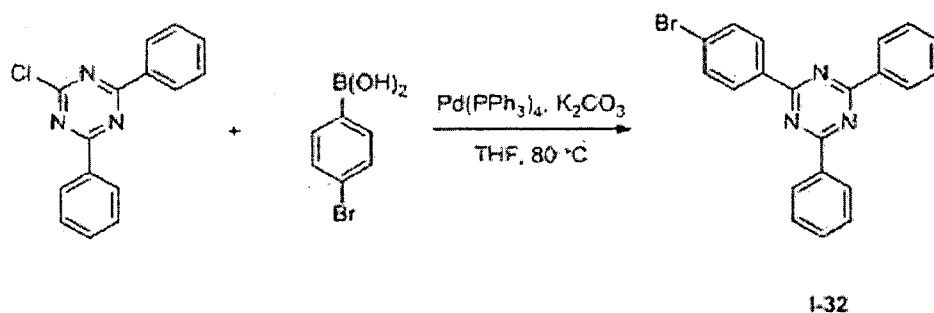
- 5 질소 환경에서 I-30 (20 g, 52 mmol)을 dimethylformamide(DMF) 1L에 녹인 후, 여기에 bis(pinacolato)diboron (16 g, 62.5 mmol)과 (1,1'-bis(diphenylphosphine)ferrocene)dichloropalladium(II)(0.4 g, 0.52 mmol) 그리고 potassium acetate(13 g, 130 mmol)을 넣고 150°C에서 5시간 동안 가열하여 환류시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 혼합물을 필터한 후, 진공오븐에서 건조하였다. 이렇게
- 10 얻어진 잔사를 플래시 컬럼 크로마토그래피로 분리 정제하여 상기 화합물 I-31 (19 g, 85%)을 얻었다.

HRMS (70 eV, EI+): m/z calcd for  $C_{30}H_{29}BO_2$ : 432.2261, found: 432

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

## 15 합성예 32: 중간체 I-32의 합성

[반응식 32]



- 질소 환경에서 상기 화합물 2-chloro-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine (50 g, 187 mmol)을 THF 1L에 녹인 후, 여기에 (4-bromophenyl)boronic acid (45 g, 224.12 mmol, Aldrich社)와 tetrakis(triphenylphosphine)palladium (2.1 g, 1.87 mmol)을 넣고 교반시켰다. 물에 포화된 potassium carbonate(64 g, 467 mmol)을 넣고 80°C에서 12시간 동안 가열하여 환류시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 dichloromethane(DCM)로

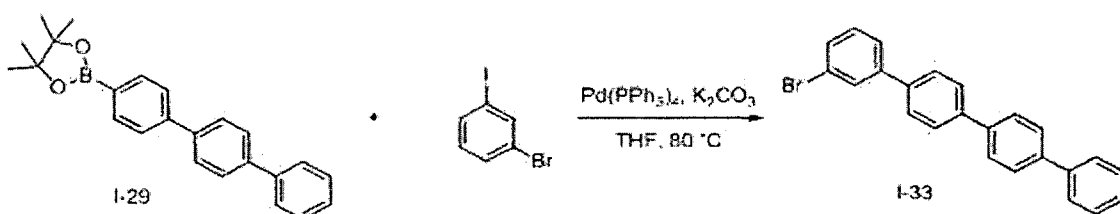
추출한 다음 무수  $\text{MgSO}_4$ 로 수분을 제거한 후, 필터하고 감압 농축하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 플래시 컬럼 크로마토그래피로 분리 정제하여 상기 화합물 I-32 (70 g, 96 %)를 얻었다.

HRMS (70 eV, EI<sup>+</sup>): m/z calcd for  $\text{C}_{21}\text{H}_{14}\text{BrN}_3$ : 387.0371, found: 387.

Elemental Analysis: C, 65%; H, 4%

### 합성예 33: 중간체 I-33의 합성

[반응식 33]



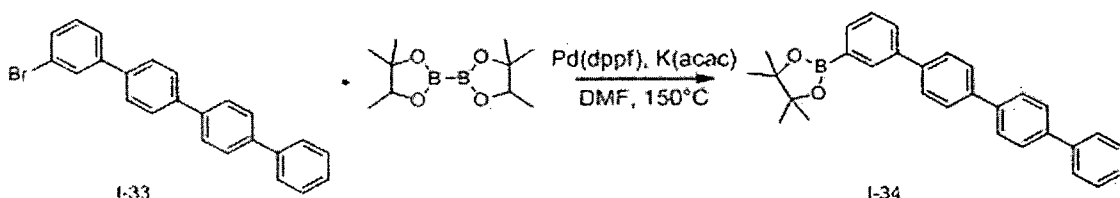
질소 환경에서 상기 화합물 I-29 (50 g, 140 mmol)을 THF 1L에 녹인 후, 여기에 1-bromo-3-iodobenzene (47 g, 168 mmol)과 tetrakis(triphenylphosphine)palladium (1.6 g, 1.4 mmol)을 넣고 교반시켰다. 물에 포화된 potassium carbonate(48 g, 350 mmol)을 넣고 80 °C에서 12시간 동안 가열하여 환류시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 dichloromethane(DCM)로 추출한 다음 무수  $\text{MgSO}_4$ 로 수분을 제거한 후, 필터하고 감압 농축하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 플래시 컬럼 크로마토그래피로 분리 정제하여 상기 화합물 I-33 (46 g, 90 %)를 얻었다.

HRMS (70 eV, EI<sup>+</sup>): m/z calcd for  $\text{C}_{24}\text{H}_{17}\text{Br}$ : 384.0514, found 384

Elemental Analysis: C, 75 %; H, 4 %

### 합성예 34: 중간체 I-34의 합성

\*522[반응식 34]



질소 환경에서 I-33 (20 g, 52 mmol)을 dimethylformamide(DMF) 1L에 녹인 후, 여기에 bis(pinacolato)diboron (16 g, 62.5 mmol)과 (1,1'-

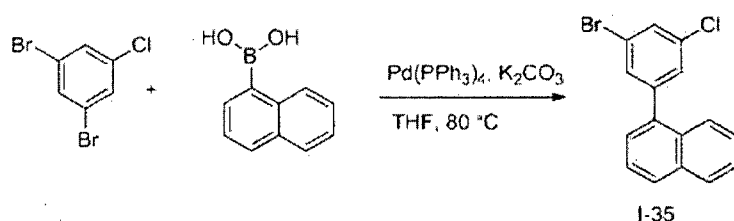
bis(diphenylphosphine)ferrocene)dichloropalladium(II)(0.4 g, 0.52 mmol) 그리고 potassium acetate(13 g, 130 mmol)을 넣고 150℃에서 5시간 동안 가열하여 환류 시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 혼합물을 필터한 후, 진공오븐에서 건조하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 플래시 컬럼 크로마토그래피로 분리 정제하여 상기 화합물 I-34 (21 g, 83 %)을 얻었다.

HRMS (70 eV, EI+): m/z calcd for C<sub>30</sub>H<sub>29</sub>BO<sub>2</sub>: 432.2261, found: 432

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

### 합성예 35: 중간체 I-35의 합성

[반응식 35]



질소 환경에서 상기 화합물 1,3-dibromo-5-chlorobenzene (50 g, 185 mmol, TCI社)을 THF 1 L에 녹인 후, 여기에 naphthalene-1-boronic acid (32 g, 185 mmol, Aldrich社)와 tetrakis(triphenylphosphine)palladium (2 g, 1.8 mmol)을 넣고 교반시켰다.

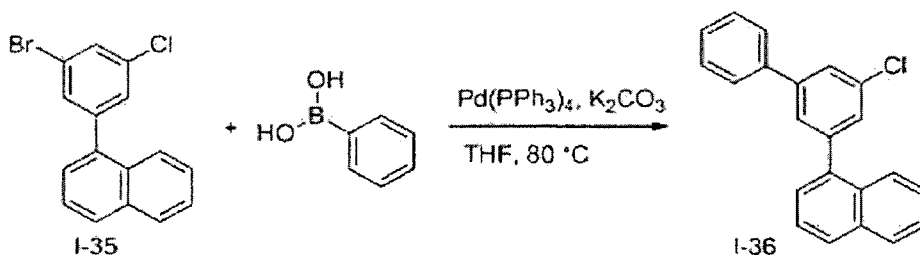
물에 포화된 potassium carbonate(64 g, 462 mmol)을 넣고 80℃에서 12시간 동안 가열하여 환류시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 dichloromethane(DCM)로 추출한 다음 무수 MgSO<sub>4</sub>로 수분을 제거한 후, 필터하고 감압 농축하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 플래시 컬럼 크로마토그래피로 분리 정제하여 상기 화합물 I-35 (32 g, 56 %)를 얻었다.

HRMS (70 eV, EI+): m/z calcd for C<sub>16</sub>H<sub>10</sub>BrCl: 315.9654, found 316

Elemental Analysis: C, 61 %; H, 3 %

### 합성예 36: 중간체 I-36의 합성

[반응식 36]



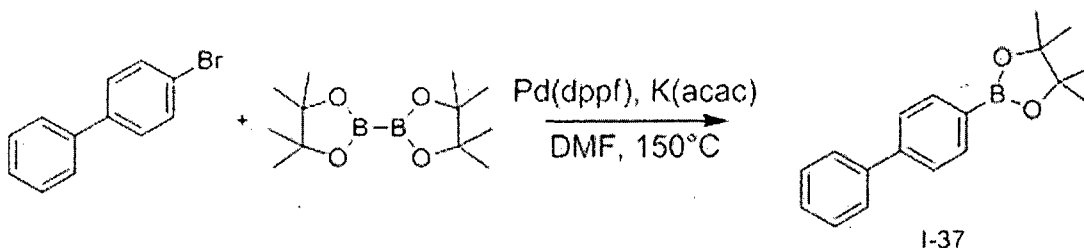
질소 환경에서 상기 화합물 1-35 (30 g, 95 mmol)을 THF 1L에 녹인 후, 여기에 phenylboronic acid (14 g, 114 mmol, Aldrich社)와 tetrakis(triphenylphosphine)palladium (1 g, 0.95 mmol)을 넣고 교반시켰다. 물에 포화된 potassuim carbonate(33 g, 237 mmol)을 넣고 80℃에서 12시간 동안 가열하여 환류시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 dichloromethane(DCM)로 추출한 다음 무수 MgSO<sub>4</sub>로 수분을 제거한 후, 필터하고 감압 농축하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 플래시 컬럼 크로마토그래피로 분리 정제하여 상기 화합물 1-36 (32 g, 75 %)를 얻었다.

HRMS (70 eV, EI+):  $m/z$  calcd for  $C_{22}H_{15}Cl$ : 314.0862, found 314

Elemental Analysis: C, 84 %; H, 5 %

합성예 37: 중간체 I-37의 합성

## [반응식 37]



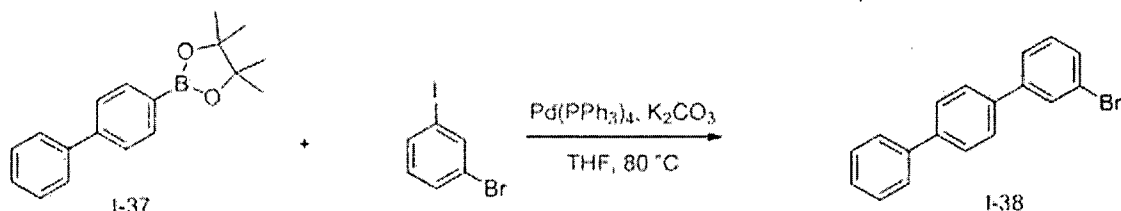
질소 환경에서 4-bromo-1,1'-biphenyl(20 g, 86 mmol, TCI社)을 dimethylformamide(DMF) 1L에 녹인 후, 여기에 bis(pinacolato)diboron (26 g, 103 mmol)과 (1,1'-bis(diphenylphosphine)ferrocene)dichloropalladium(II)(0.7 g, 0.86 mmol) 그리고 potassium acetate(21 g, 215 mmol)을 넣고 150℃에서 5시간 동안 가열하여 환류시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 혼합물을 필터한 후, 진공오븐에서 건조하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 플래시 컬럼 크로마토그래피로 분리 정제하여 상기 화합물 I-37 (20 g, 85 %)을 얻었다.

HRMS (70 eV, EI<sup>+</sup>): m/z calcd for C<sub>18</sub>H<sub>21</sub>BO<sub>2</sub>:280.1635, found: 280

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

### 합성예 38: 중간체 I-38의 합성

[반응식 38]

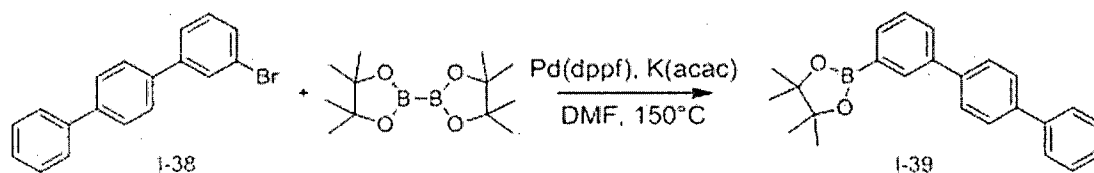


질소 환경에서 상기 화합물 I-37(20 g, 71 mmol)을 THF 1L에 녹인 후, 여기에 1-bromo-3-iodobenzene(24 g, 85 mmol)과 tetrakis(triphenylphosphine)palladium (0.8 mg, 0.7 mmol)을 넣고 교반시켰다. 물에 포화된 potassium carbonate(24.5 g, 177 mmol)을 넣고 80℃에서 12시간 동안 가열하여 환류시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 dichloromethane(DCM)로 추출한 다음 무수 MgSO<sub>4</sub>로 수분을 제거한 후, 필터하고 감압 농축하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 플래시 컬럼 크로마토그래피로 분리 정제하여 상기 화합물 I-38 (30 g, 90 %)를 얻었다.

HRMS (70 eV, EI<sup>+</sup>): m/z calcd for C<sub>18</sub>H<sub>13</sub>Br:309.1998, found 309 Elemental Analysis: C, 70 %; H, 4 %

### 합성예 39: 중간체 I-39의 합성

[반응식 39]



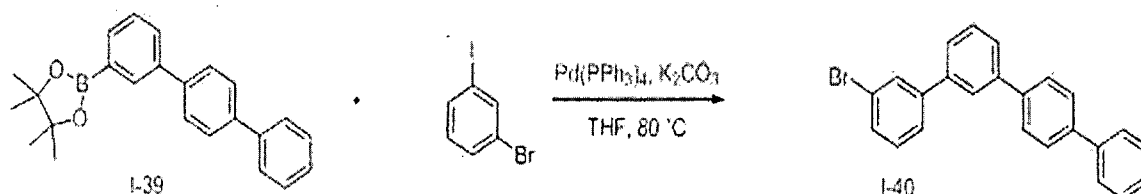
질소 환경에서 I-38(25 g, 81 mmol)을 dimethylformamide(DMF) 1L에 녹인 후, 여기에 bis(pinacolato)diboron (25 g, 97 mmol)과 (1,1'-bis(diphenylphosphine)ferrocene)dichloropalladium(II)(0.7 g, 0.81 mmol) 그리고 potassium acetate(20 g, 203 mmol)을 넣고 150℃에서 5시간 동안 가열하여 환류시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 혼합물을 필터한 후, 진공오븐에서 건조하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 플래시 컬럼 크로마토그래피로 분리 정제하여 상기 화합물 I-39 (27 g, 93 %)을 얻었다.

HRMS (70 eV, EI<sup>+</sup>): m/z calcd for C<sub>24</sub>H<sub>25</sub>BO<sub>2</sub>:356.1948, found: 356

Elemental Analysis: C, 81 %; H, 7 %

#### 합성예 40: 중간체 I-40의 합성

[반응식 40]



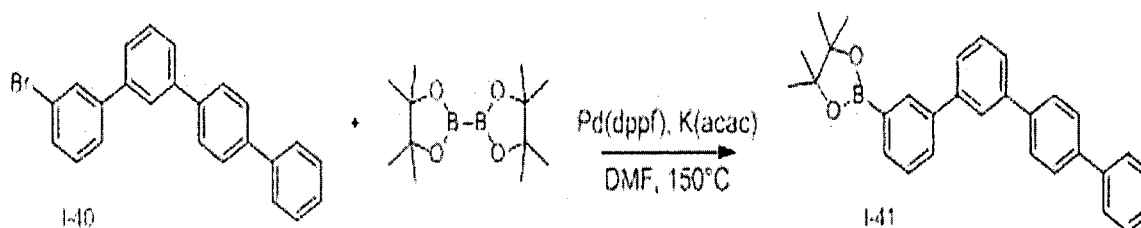
질소 환경에서 상기 화합물 I-39(50 g, 140 mmol)을 THF 1L에 녹인 후, 여기에 1-bromo-3-iodobenzene(47 g, 168 mmol)과 tetrakis(triphenylphosphine)palladium (1.6 g, 1.4 mmol)을 넣고 교반시켰다. 물에 포화된 potassium carbonate(48 g, 350 mmol)을 넣고 80 °C에서 12시간 동안 가열하여 환류시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 dichloromethane(DCM)로 추출한 다음 무수 MgSO<sub>4</sub>로 수분을 제거한 후, 필터하고 감압 농축하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 플래시 컬럼 크로마토그래피로 분리 정제하여 상기 화합물 I-40 (44 g, 89 %)를 얻었다.

HRMS (70 eV, EI<sup>+</sup>): m/z calcd for C<sub>24</sub>H<sub>17</sub>Br:384.0514, found 384 Elemental Analysis:

C, 75 %; H, 4 %

#### 합성예 41: 중간체 I-41의 합성

[반응식 41]



질소 환경에서 I-40 (20 g, 52 mmol)을 dimethylformamide(DMF) 1L에 녹인 후, 여기에 bis(pinacolato)diboron (16 g, 62.5 mmol)과 (1,1'-bis(diphenylphosphine)ferrocene)dichloropalladium(II)(0.4 g, 0.52 mmol) 그리고 potassium acetate(13 g, 130 mmol)을 넣고 150 °C에서 5시간 동안 가열하여 환류시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 혼합물을 필터한 후, 진공오븐에서 건조하였다. 이렇게

얻어진 잔사를 플래시 컬럼 크로마토그래피로 분리 정제하여 상기 화합물 I-41 (19 g, 85 %)을 얻었다.

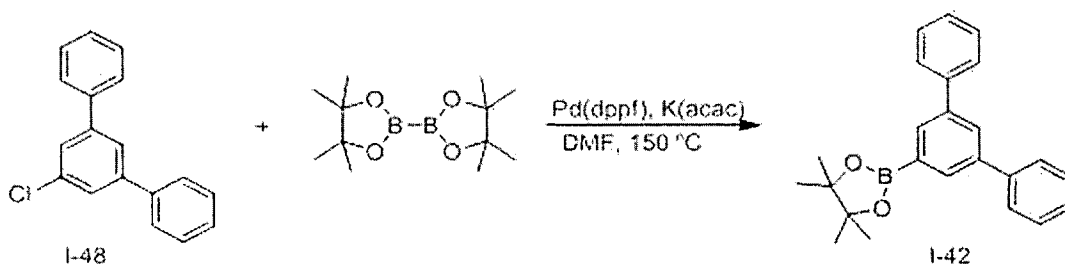
HRMS (70 eV, EI+): m/z calcd for  $C_{30}H_{29}BO_2$ :432.2261, found: 432

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

5

#### 합성예 42: 중간체 I-42의 합성

[반응식 42]



질소 환경에서 I-48 (27.8 g, 105.00 mmol)을 dimethylformamide(DMF) 1L에 녹인 후, 여기에 bis(pinacolato)diboron (32.0 g, 126.01 mmol)과 (1,1'-bis(diphenylphosphine)ferrocene)dichloropalladium(II) (0.86 g, 1.05 mmol) 그리고 potassium acetate (25.8 g, 262.51 mmol)을 넣고 150 °C에서 5시간 동안 가열하여 환류시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 혼합물을 필터한 후, 진공오븐에서 건조하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 플래시 컬럼 크로마토그래피로 분리 정제하여 상기 화합물 I-42 (33 g, 88 %)을 얻었다.

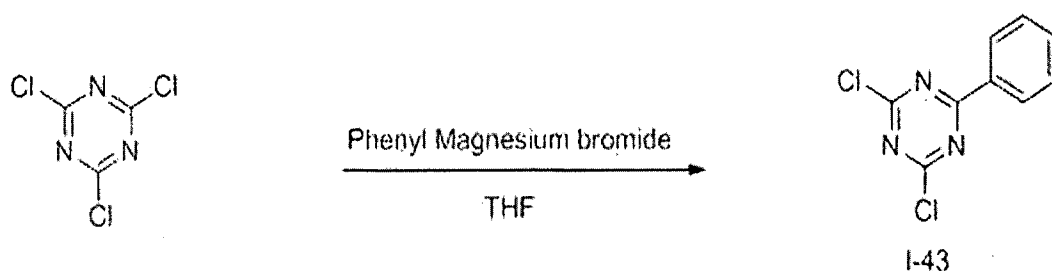
15

HRMS (70 eV, EI+): m/z calcd for  $C_{24}H_{25}BO_2$ :356.1948, found: 356

Elemental Analysis: C, 81 %; H, 7 %

#### 합성예 43: 중간체 I-43의 합성

[반응식 43]



20

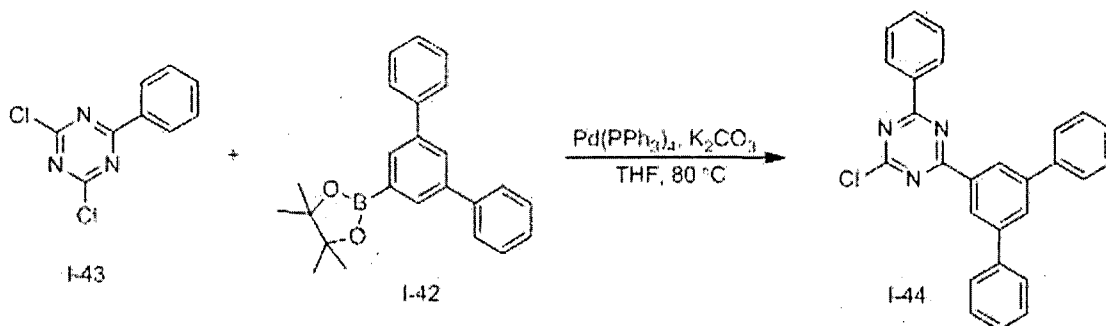
질소 환경에서 Cyanuric chloride (50 g, 271.13 mmol, TCI社)을 THF 1L에 녹인 후 1L에 녹인 후, -10 °C까지 낮춘다. 여기에 Phenyl Magnesium bromide 3.0 M (90 ml,

271.13 mmol)을 천천히 적가한 뒤 천천히 상온으로 온도를 올려준다. 30분 동안 교반시켰다. 반응 종료 후 HCl 용액으로 반응액을 씻어준 후, 유기층의 용매를 제거한다. 이렇게 얻어진 잔사를 플래시 컬럼 크로마토그래피로 분리 정제하여 상기 화합물 I-43 (33 g, 85 %)을 얻었다.

HRMS (70 eV, EI<sup>+</sup>): m/z calcd for C<sub>9</sub>H<sub>5</sub>Cl<sub>2</sub>N<sub>3</sub>:224.9861, found: 225  
Elemental Analysis: C, 48 %; H, 2 %

합성예 44: 중간체 I-44의 합성

[반응식 44]



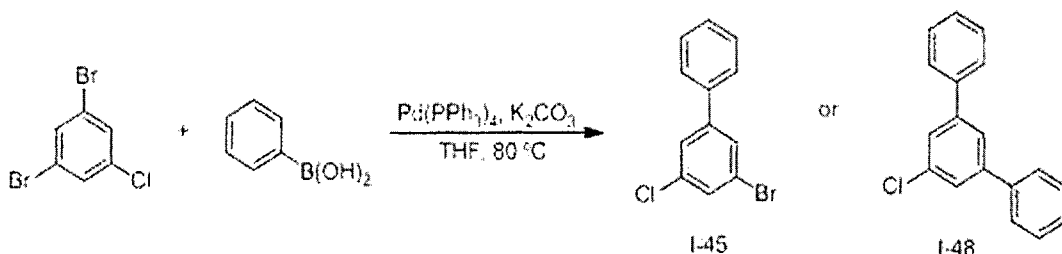
질소 환경에서 상기 화합물 I-42(50 g, 140 mmol)을 THF 1L에 녹인 후, 여기에 I-43 (31 g, 140 mmol)과 tetrakis(triphenylphosphine)palladium (1.6 g, 1.4 mmol)을 넣고 교반시켰다. 물에 포화된 potassuim carbonate(48 g, 350 mmol)을 넣고 80℃에서 12시간 동안 가열하여 환류시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고

15 dichloromethane(DCM)로 추출한 다음 무수  $MgSO_4$ 로 수분을 제거한 후, 필터하고  
감압 농축하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 플래시 컬럼 크로마토그래피로 분리  
정제하여 상기 화합물 I-44 (32 g, 70 %) 얻었다.

HRMS (70 eV, EI<sup>+</sup>): m/z calcd for C<sub>27</sub>H<sub>18</sub>ClN<sub>3</sub>:419.1189, found 419 Elemental Analysis: C, 77 %; H, 4 %

합성예 45: 중간체 I-45 및 I-48의 합성

[반응식 45]



질소 환경에서 상기 화합물 1,3-dibromo-5-chlorobenzene (100 g, 370 mmol, TCI社)을 THF 2L에 녹인 후, 여기에 phenylboronic acid (47.3 g, 388 mmol, Aldrich社)와 tetrakis(triphenylphosphine)palladium (1.5 g, 1.36 mmol)을 넣고 교반시켰다. 물에 포화된 potassuim carbonate(127 g, 925 mmol)을 넣고 80℃에서 12시간 동안 가열하여 환류시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 dichloromethane(DCM)로 추출한 다음 무수 MgSO<sub>4</sub>로 수분을 제거한 후, 필터하고 감압 농축하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 플래시 컬럼 크로마토그래피로 분리 정제하여 상기 화합물 I-45 (49 g, 50 %)를 얻었다.

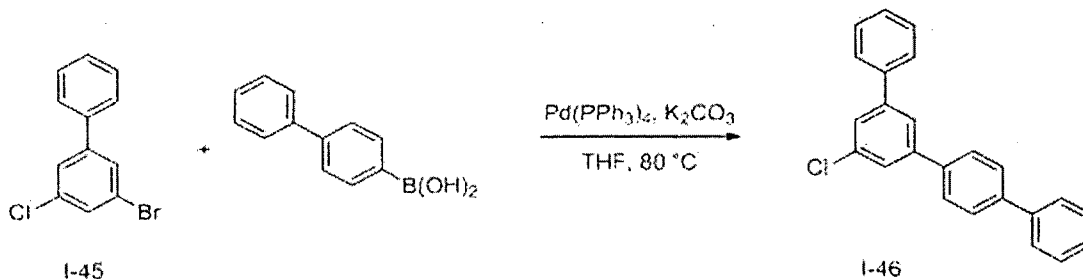
HRMS (70 eV, EI<sup>+</sup>): m/z calcd for C<sub>12</sub>H<sub>8</sub>BrCl: 265.9498, found 266 Elemental Analysis: C, 54 %; H, 3 %

phenyl boronic acid 의 당량을 2배 증가하여 첨가한 것 외에는 같은 방법으로 합성하여 상기 화합물 I-48을 얻었다.

HRMS (70 eV, EI<sup>+</sup>): m/z calcd for C<sub>18</sub>H<sub>13</sub>Cl: 264.0706, found 264 Elemental Analysis: C, 82 %; H, 5 %

합성예 46: 중간체 I-46의 합성

[반응식 46]



질소 환경에서 상기 화합물 I-45 (20 g, 75 mmol)을 THF 1L에 녹인 후, 여기에 4-Biphenylboronic acid (17.7 g, 90 mmol, TCI社)와 tetrakis(triphenylphosphine)palladium (863 mg, 0.74 mmol)을 넣고 교반시켰다. 물에 포화된 potassuim carbonate(26 g, 186.87 mmol)을 넣고 80℃에서 12시간 동안 가열하여 환류시켰다. 반응 완료 후 반응액에

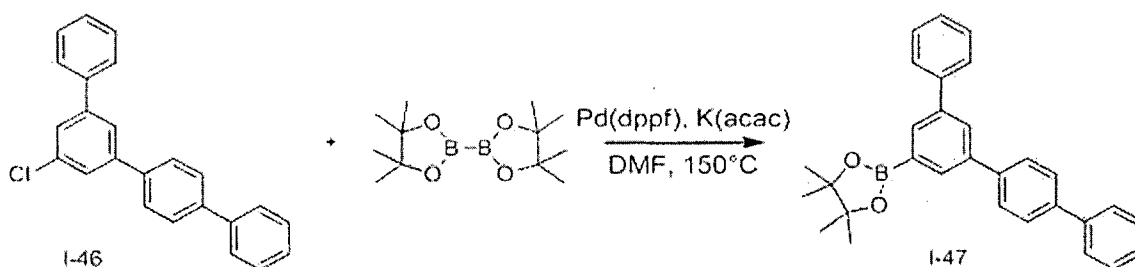
물을 넣고 dichloromethane(DCM)로 추출한 다음 무수  $\text{MgSO}_4$ 로 수분을 제거한 후, 필터하고 감압 농축하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 플래시 컬럼 크로마토그래피로 분리 정제하여 상기 화합물 I-46 (49 g, 80 %)를 얻었다.

HRMS (70 eV, EI<sup>+</sup>): m/z calcd for  $\text{C}_{24}\text{H}_{17}\text{Cl}$ : 340.1019, found 340 Elemental Analysis:

5 C, 85 %; H, 5 %

#### 합성예 47: 중간체 I-47의 합성

[반응식 47]



10 질소 환경에서 I-46 (17.5 g, 51 mmol)을 dimethylformamide(DMF) 1L에 녹인 후, 여기에 bis(pinacolato)diboron (15.6 g, 61.6 mmol)과 (1,1'-bis(diphenylphosphine)ferrocene)dichloropalladium(II) (2.5 g, 3.06 mmol) 그리고 potassium acetate (15 g, 153 mmol)을 넣고 150°C에서 5시간 동안 가열하여 환류시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 혼합물을 필터한 후, 진공오븐에서 건조하였다. 이렇게  
15 얻어진 잔사를 플래시 컬럼 크로마토그래피로 분리 정제하여 상기 화합물 I-47 (20 g, 90 %)을 얻었다.

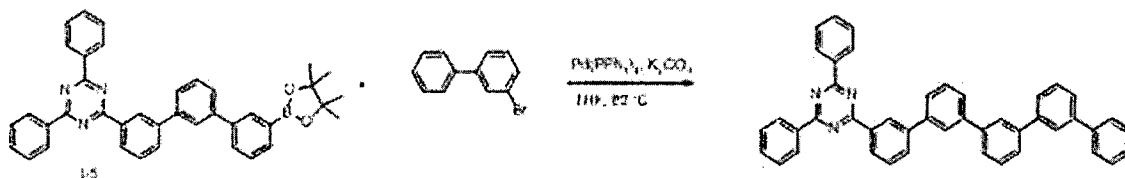
HRMS (70 eV, EI<sup>+</sup>): m/z calcd for  $\text{C}_{30}\text{H}_{29}\text{BO}_2$ : 432.2261, found: 432

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

#### 20 최종 화합물의 합성

##### 합성예 49: 화합물 A-1의 합성

[반응식 49]



질소 환경에서 상기 화합물 I-5 (20 g, 34 mmol)을 tetrahydrofuran(THF) 0.2L에

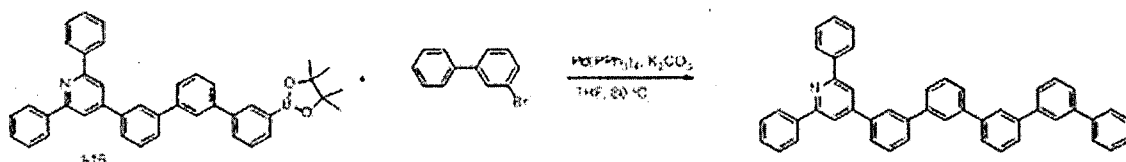
녹인 후, 여기에 3-Biphenylboronic acid (9.5 g, 40 mmol, TCI社)와 tetrakis(triphenylphosphine)palladium(0.39 g, 0.34 mmol)을 넣고 교반시켰다. 물에 포화된 potassium carbonate(12 g, 85 mmol)을 넣고 80℃에서 20시간 동안 가열하여 환류시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 dichloromethane(DCM)로 추출한 다음 무수 MgSO<sub>4</sub>로 수분을 제거한 후, 필터하고 감압 농축하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 플래시 컬럼 크로마토그래피로 분리 정제하여 상기 화합물 A-1(24 g, 70 %)을 얻었다. 화합물 A-1의 분자량은 613.2518이다.

HRMS (70 eV, EI<sup>+</sup>): m/z calcd for C<sub>45</sub>H<sub>31</sub>N<sub>3</sub>: 613.2518, found: 613 Elemental Analysis: C, 88 %; H, 5 %

10

### 합성예 50: 화합물 B-1의 합성

[반응식 50]



질소 환경에서 상기 화합물 I-16(20 g, 34 mmol)을 tetrahydrofuran(THF) 0.2L에 녹인 후, 여기에 3-bromo-1,1'-biphenyl (9.5 g, 40 mmol)과 tetrakis(triphenylphosphine)palladium(0.39 g, 0.34 mmol)을 넣고 교반시켰다. 물에 포화된 potassium carbonate(12 g, 85 mmol)을 넣고 80℃에서 20시간 동안 가열하여 환류시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 dichloromethane(DCM)로 추출한 다음 무수 MgSO<sub>4</sub>로 수분을 제거한 후, 필터하고 감압 농축하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 플래시 컬럼 크로마토그래피로 분리 정제하여 상기 화합물 B-1(15 g, 72 %)을 얻었다. 화합물 B-1의 분자량은 611.2613 이다.

20

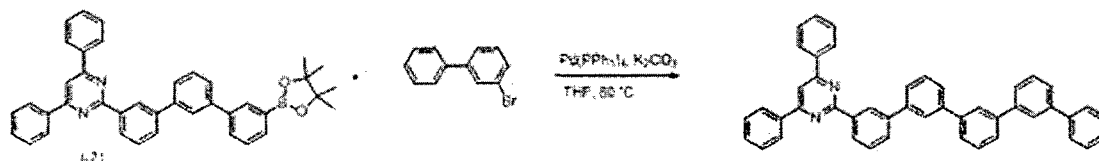
HRMS (70 eV, EI<sup>+</sup>): m/z calcd for C<sub>47</sub>H<sub>33</sub>N: 611.2613, found: 611

Elemental Analysis: C, 92 %; H, 5 %

25

### 합성예 51: 화합물 B-2의 합성

## [반응식 51]



질소 환경에서 상기 화합물 I-21(20 g, 34 mmol)을 tetrahydrofuran(THF) 0.2L에 녹인 후, 여기에 3-bromo-1,1'-biphenyl (9.5 g, 40 mmol)과

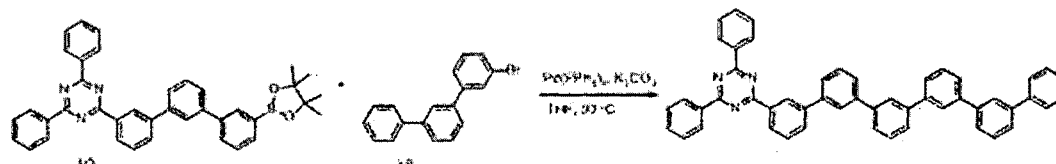
- 5 tetrakis(triphenylphosphine)palladium(0.39 g, 0.34 mmol)을 넣고 교반시켰다. 물에 포화된 potassium carbonate(12 g, 85 mmol)을 넣고  $80^\circ\text{C}$ 에서 20시간 동안 가열하여 환류시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 dichloromethane(DCM)로 추출한 다음 무수  $\text{MgSO}_4$ 로 수분을 제거한 후, 필터하고 감압 농축하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 플래시 컬럼 크로마토그래피로 분리 정제하여 상기 화합물 B-2(16 g, 75 %)을 얻었다.
- 10 화합물 B-2의 분자량은 612.2565이다.

HRMS (70 eV, EI<sup>+</sup>): m/z calcd for  $\text{C}_{46}\text{H}_{32}\text{N}_2$ : 612.2565, found: 612

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

## 합성예 52: 화합물 A-2의 합성

## [반응식 52]



질소 환경에서 상기 화합물 I-5(20 g, 34 mmol)을 tetrahydrofuran(THF) 0.2L에 녹인 후, 여기에 I-9 (13 g, 41 mmol)와 tetrakis(triphenylphosphine)palladium(0.39 g, 0.34 mmol)을 넣고 교반시켰다. 물에 포화된 potassium carbonate(12 g, 85 mmol)을 넣고

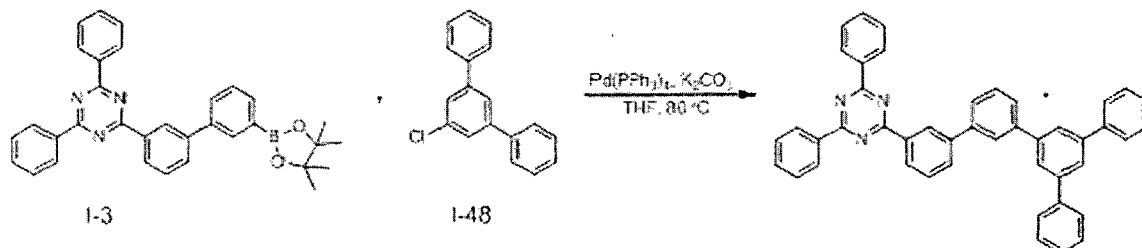
20  $80^\circ\text{C}$ 에서 20시간 동안 가열하여 환류시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 dichloromethane(DCM)로 추출한 다음 무수  $\text{MgSO}_4$ 로 수분을 제거한 후, 필터하고 감압 농축하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 플래시 컬럼 크로마토그래피로 분리 정제하여 상기 화합물 A-2 (19 g, 75 %)을 얻었다. 화합물 A-2의 분자량은 689.2831이다.

HRMS (70 eV, EI<sup>+</sup>): m/z calcd for  $\text{C}_{51}\text{H}_{35}\text{N}_3$ : 689.2831, found: 689

Elemental Analysis: C, 89 %; H, 5 %

## 합성예 53: 화합물 A-3의 합성

[반응식 53]



5 질소 환경에서 상기 화합물 I-3(20 g, 39.1 mmol)을 tetrahydrofuran(THF) 0.2L에 녹인 후, 여기에 I-48 (12.45 g, 47 mmol)과 tetrakis(triphenylphosphine)palladium(0.45 g, 0.39 mmol)을 넣고 교반시켰다. 물에 포화된 potassium carbonate(13.5 g, 98 mmol)을 넣고 80 °C에서 20시간 동안 가열하여 환류시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 dichloromethane(DCM)로 추출한 다음 무수 MgSO<sub>4</sub>로 수분을 제거한 후, 필터하고

10 감압 농축하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 플래시 컬럼 크로마토그래피로 분리 정제하여 상기 화합물 A-3 (20 g, 83 %)을 얻었다. 화합물 A-3의 분자량은 613.2518이다.

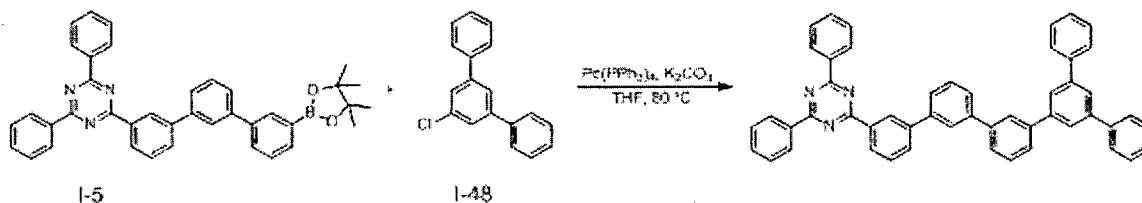
HRMS (70 eV, EI<sup>+</sup>): m/z calcd for C<sub>45</sub>H<sub>31</sub>N<sub>3</sub>: 613.2518, found: 613

Elemental Analysis: C, 88 %; H, 5 %

15

## 합성예 54: 화합물 A-4의 합성

[반응식 54]



20 질소 환경에서 상기 화합물 I-5 (20 g, 34 mmol)을 tetrahydrofuran(THF) 0.2L에 녹인 후, 여기에 I-48 (10.8 g, 41 mmol)과 tetrakis(triphenylphosphine)palladium(0.40 g, 0.34 mmol)을 넣고 교반시켰다. 물에 포화된 potassium carbonate(12 g, 85 mmol)을 넣고 80 °C에서 20시간 동안 가열하여 환류시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 dichloromethane(DCM)로 추출한 다음 무수 MgSO<sub>4</sub>로 수분을 제거한 후, 필터하고

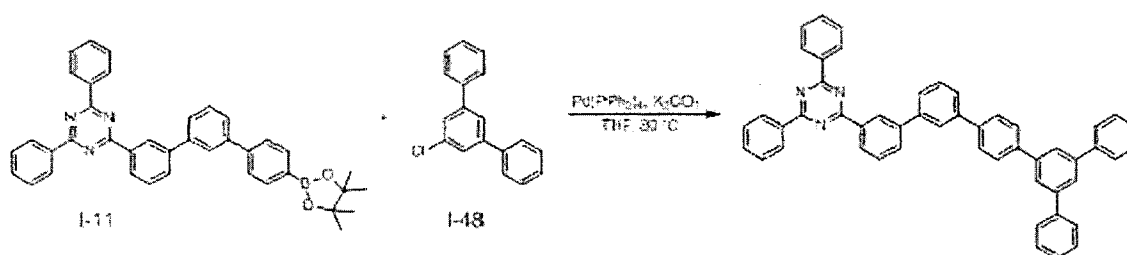
감압 농축하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 플래시 컬럼 크로마토그래피로 분리 정제하여 상기 화합물 A-4 (19 g, 80 %)을 얻었다. 화합물 A-4의 분자량은 689.2831이다.

HRMS (70 eV, EI<sup>+</sup>): m/z calcd for C<sub>51</sub>H<sub>35</sub>N<sub>3</sub>: 689.2831, found: 689.

5 Elemental Analysis: C, 89 %; H, 5 %

### 합성예 55: 화합물 A-5의 합성

[반응식 55]



10 질소 환경에서 상기 화합물 I-11 (20 g, 34 mmol)을 tetrahydrofuran(THF) 0.2L에 녹인 후, 여기에 I-48 (10.8 g, 41 mmol)과 tetrakis(triphenylphosphine)palladium(0.40 g, 0.34 mmol)을 넣고 교반시켰다. 물에 포화된 potassium carbonate(12 g, 85 mmol)을 넣고 80 °C에서 20시간 동안 가열하여 환류시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 dichloromethane(DCM)로 추출한 다음 무수 MgSO<sub>4</sub>로 수분을 제거한 후, 필터하고

15 감압 농축하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 플래시 컬럼 크로마토그래피로 분리 정제하여 상기 화합물 A-5 (20 g, 85 %)을 얻었다. 화합물 A-5의 분자량은 689.2831이다.

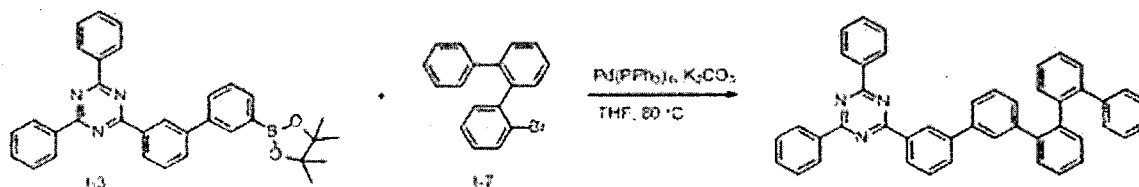
HRMS (70 eV, EI<sup>+</sup>): m/z calcd for C<sub>51</sub>H<sub>35</sub>N<sub>3</sub>: 689.2831, found: 689.

Elemental Analysis: C, 89 %; H, 5 %

20

### 합성예 56: 화합물 A-8의 합성

[반응식 56]



질소 환경에서 상기 화합물 I-3(20 g, 39 mmol)을 tetrahydrofuran(THF) 0.2L에

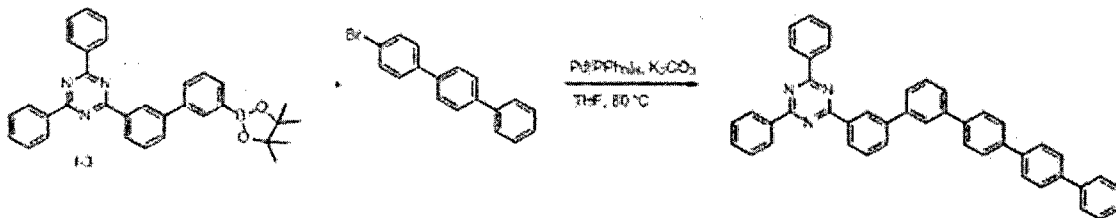
녹인 후, 여기에 I-7 (14.5 g, 47 mmol)과 tetrakis(triphenylphosphine)palladium(0.45 g, 0.39 mmol)을 넣고 교반시켰다. 물에 포화된 potassium carbonate(13.5 g, 97 mmol)을 넣고 80℃에서 20시간 동안 가열하여 환류시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 dichloromethane(DCM)로 추출한 다음 무수 MgSO<sub>4</sub>로 수분을 제거한 후, 필터하고 감압 농축하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 플래시 컬럼 크로마토그래피로 분리 정제하여 상기 화합물 A-8 (17 g, 70 %)을 얻었다. 화합물 A-8의 분자량은 613.2518 이다.

HRMS (70 eV, EI<sup>+</sup>): m/z calcd for C<sub>45</sub>H<sub>31</sub>N<sub>3</sub>: 613.2518, found: 613

Elemental Analysis: C, 88 %; H, 5 %

#### 합성예 57: 화합물 A-9의 합성

[반응식 57]



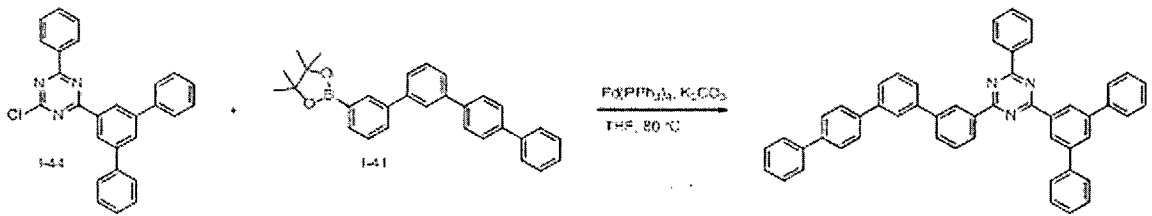
질소 환경에서 상기 화합물 I-3(20 g, 39 mmol)을 tetrahydrofuran(THF) 0.2L에 녹인 후, 여기에 4-bromo-p-terphenyl (14.5 g, 47 mmol, TCI社)과 tetrakis(triphenylphosphine)palladium(0.45 g, 0.39 mmol)을 넣고 교반시켰다. 물에 포화된 potassium carbonate(13.5 g, 97 mmol)을 넣고 80℃에서 20시간 동안 가열하여 환류시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 dichloromethane(DCM)로 추출한 다음 무수 MgSO<sub>4</sub>로 수분을 제거한 후, 필터하고 감압 농축하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 플래시 컬럼 크로마토그래피로 분리 정제하여 상기 화합물 A-9 (19 g, 79 %)을 얻었다. 화합물 A-9의 분자량은 613.2518 이다.

HRMS (70 eV, EI<sup>+</sup>): m/z calcd for C<sub>45</sub>H<sub>31</sub>N<sub>3</sub>: 613.2518, found: 613

Elemental Analysis: C, 88 %; H, 5 %

#### 합성예 58: 화합물 A-6의 합성

## [반응식 58]

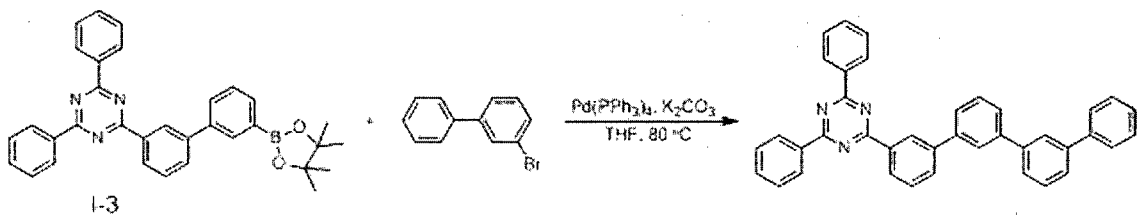


질소 환경에서 상기 화합물 I-44(32 g, 76 mmol)을 THF 1L에 녹인 후, 여기에 I-41 (33 g, 76 mmol)과 tetrakis(triphenylphosphine)palladium (0.88 g, 0.76 mmol)을 넣고 교반시켰다. 물에 포화된 potassium carbonate(26 g, 190 mmol)을 넣고 80 °C에서 12시간 동안 가열하여 환류시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 dichloromethane(DCM)로 추출한 다음 무수  $\text{MgSO}_4$ 로 수분을 제거한 후, 필터하고 감압 농축하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 플래시 컬럼 크로마토그래피로 분리 정제하여 상기 화합물 A-6(32 g, 80 %)를 얻었다. 화합물 A-6의 분자량은 689.2831이다.

HRMS (70 eV, EI<sup>+</sup>): m/z calcd for  $\text{C}_{51}\text{H}_{35}\text{N}_3$ :689.2831, found 689 Elemental Analysis: C, 89 %; H, 5 %

## 합성예 59: 화합물 A-72의 합성

## [반응식 59]



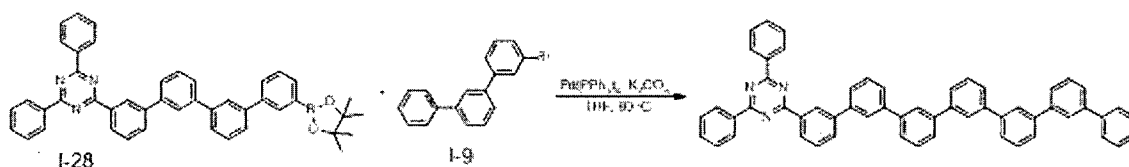
질소 환경에서 상기 화합물 I-3(20 g, 39 mmol)을 tetrahydrofuran(THF) 0.2L에 녹인 후, 여기에 3-bromo-1,1'-biphenyl (11 g, 47 mmol)과 tetrakis(triphenylphosphine)palladium(0.45 g, 0.39 mmol)을 넣고 교반시켰다. 물에 포화된 potassium carbonate(13.5 g, 97 mmol)을 넣고 80 °C에서 20시간 동안 가열하여 환류시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 dichloromethane(DCM)로 추출한 다음 무수  $\text{MgSO}_4$ 로 수분을 제거한 후, 필터하고 감압 농축하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 플래시 컬럼 크로마토그래피로 분리 정제하여 상기 화합물 A-72 (16 g, 78 %)을 얻었다. 화합물 A-72의 분자량은 537.2205 이다.

HRMS (70 eV, EI<sup>+</sup>): m/z calcd for C<sub>39</sub>H<sub>27</sub>N<sub>3</sub>: 537.2205, found: 537

Elemental Analysis: C, 87 %; H, 5 %

### 합성예 60: 화합물 A-73의 합성

[반응식 60]



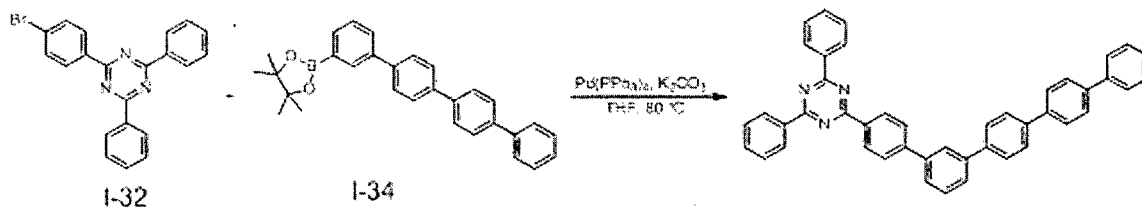
질소 환경에서 상기 화합물 I-28 (20 g, 30 mmol)을 tetrahydrofuran(THF) 0.2L에 녹인 후, 여기에 I-9 (11 g, 36 mmol)와 tetrakis(triphenylphosphine)palladium(0.35 g, 0.30 mmol)을 넣고 교반시켰다. 물에 포화된 potassium carbonate(10 g, 75 mmol)을 넣고 80℃에서 20시간 동안 가열하여 환류시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 dichloromethane(DCM)로 추출한 다음 무수 MgSO<sub>4</sub>로 수분을 제거한 후, 필터하고 감압 농축하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 플래시 컬럼 크로마토그래피로 분리 정제하여 상기 화합물 A-73 (14.5 g, 70 %)을 얻었다. 화합물 A-73의 분자량은 765.3144 이다.

HRMS (70 eV, EI<sup>+</sup>): *m/z* calcd for C<sub>51</sub>H<sub>35</sub>N<sub>3</sub>: 765.3144, found: 765

Elemental Analysis: C, 89 %; H, 5 %

합성예 61: 화합물 A-74의 합성

[반응식 61]



질소 환경에서 상기 화합물 I-32 (20 g, 51 mmol)을 tetrahydrofuran(THF) 0.2L에 녹인 후, 여기에 I-34 (26.5 g, 61.2 mmol)와 tetrakis(triphenylphosphine)palladium(0.6 g, 0.51 mmol)을 넣고 교반시켰다. 물에 포화된 potassium carbonate(17.5 g, 127 mmol)을 넣고 80℃에서 20시간 동안 가열하여 환류시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 dichloromethane(DCM)로 추출한 다음 무수 MgSO<sub>4</sub>로 수분을 제거한 후, 필터하고

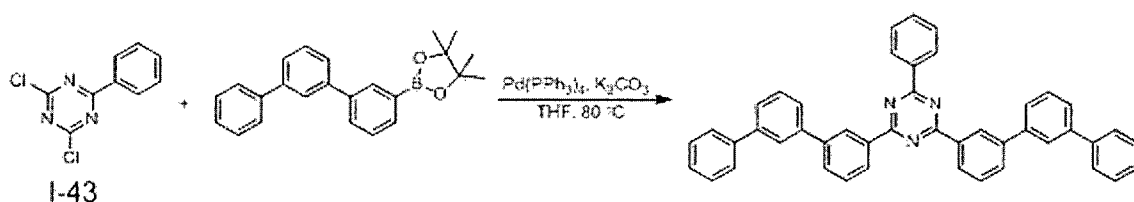
감압 농축하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 플래시 컬럼 크로마토그래피로 분리 정제하여 상기 화합물 A-74 (22.5 g, 75 %)을 얻었다. 화합물 A-74의 분자량은 613.2518 이다.

HRMS (70 eV, EI<sup>+</sup>): m/z calcd for C<sub>45</sub>H<sub>31</sub>N<sub>3</sub>: 613.2518, found: 613.

5 Elemental Analysis: C, 88 %; H, 5 %

### 합성예 62: 화합물 A-19의 합성

[반응식 62]



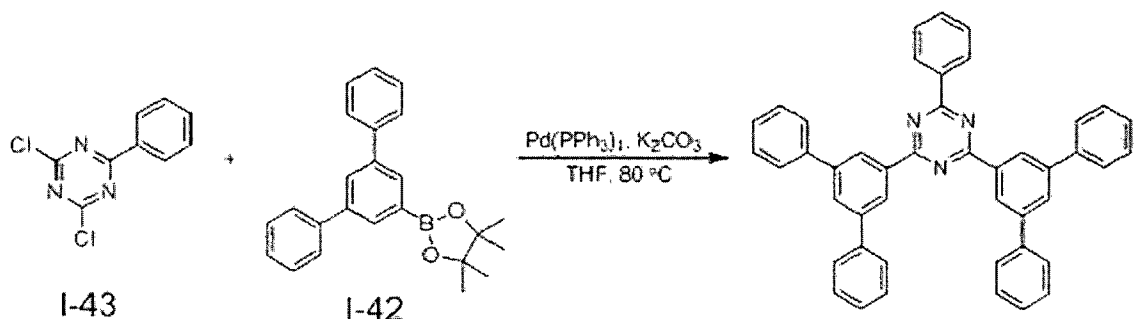
10 250mL 플라스크에 중간체 I-43 5.0g (22.12 mmol), 2-([1,1':3',1''-terphenyl]-3-yl)-4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolane 18.12g (50.87 mmol), potassium carbonate 7.64g (55.30 mmol), Tetrakis(triphenyl phosphine) palladium(0) 1.28g (1.11 mmol)을 tetrahydrofuran(THF) 100mL, 물 30 mL에 넣어준 후, 질소 기류 하에서 10시간 동안 가열하여 환류하였다. 이로부터 수득한 혼합물을 메탄올 500mL에 가하여 결정화된

15 고형분을 여과한 후, 모노클로로벤젠에 녹여 실리카겔/셀라이트로 여과하고, 유기 용매를 적당량 제거한 후, 메탄올로 재결정하여 화합물 A-19 (11.3g, 83%의 수율)을 수득하였다. 생성된 화합물 A-19의 원소 분석 결과는 하기와 같다.

calcd C<sub>45</sub>H<sub>31</sub>N<sub>3</sub>: C, 88.06; H, 5.09; N, 6.85; found : C, 87.94; H, 5.12; N, 6.76;

### 20 합성예 63: 화합물 A-20의 합성

[반응식 63]



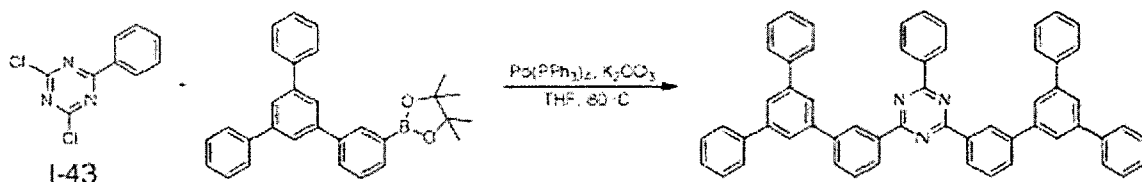
250mL 플라스크에 중간체 I-43 5.0g (22.12 mmol), I-42 18.12g (50.87 mmol),

potassium carbonate 7.64g (55.30 mmol), Tetrakis(triphenyl phosphine) palladium(0) 1.28g (1.11 mmol)을 tetrahydrofuran(THF) 100mL, 물 30 mL에 넣어준 후, 질소 기류 하에서 10시간 동안 가열하여 환류하였다. 이로부터 수득한 혼합물을 메탄올 500mL에 가하여 결정화된 고형분을 여과한 후, 모노클로로벤젠에 녹여 실리카겔/셀라이트로 여과하고, 유기 용매를 적당량 제거한 후, 메탄올로 재결정하여 화합물 A-20 (8.5g, 63%의 수율)을 수득하였다. 생성된 화합물 A-20의 원소 분석 결과는 하기와 같다.

calcd.  $C_{45}H_{31}N_3$ : C, 88.06; H, 5.09; N, 6.85; found : C, 88.16; H, 5.23; N, 6.63;

#### 합성예 64: 화합물 A-23의 합성

[반응식 64]

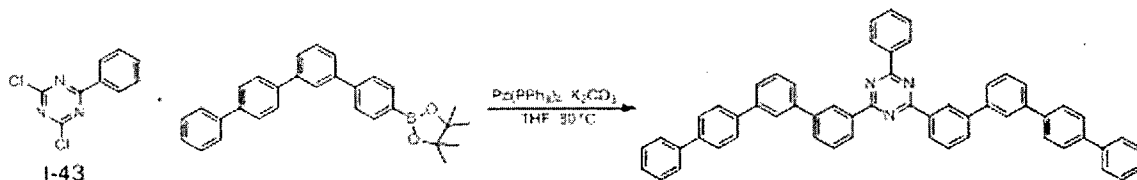


250mL 플라스크에 중간체 I-46 5.0g (22.12 mmol), 4,4',5,5'-tetramethyl-2-(5'-phenyl-[1,1':3',1''-terphenyl]-3-yl)-1,3,2-dioxaborolane 21.99g (46.60 mmol), potassium carbonate 7.64g (55.30 mmol), Tetrakis(triphenyl phosphine) palladium(0) 1.28g (1.11 mmol)을 tetrahydrofuran(THF) 100mL, 물 30 mL에 넣어준 후, 질소 기류 하에서 10시간 동안 가열하여 환류하였다. 이로부터 수득한 혼합물을 메탄올 500mL에 가하여 결정화된 고형분을 여과한 후, 모노클로로벤젠에 녹여 실리카겔/셀라이트로 여과하고, 유기 용매를 적당량 제거한 후, 메탄올로 재결정하여 화합물 A-23 (13.0g, 77%의 수율)을 수득하였다. 생성된 화합물 A-23의 원소 분석 결과는 하기와 같다.

calcd.  $C_{57}H_{39}N_3$ : C, 89.38; H, 5.13; N, 5.49; found : C, 89.21; H, 5.04; N, 5.53;

#### 합성예 65: 화합물 A-25의 합성

[반응식 65]



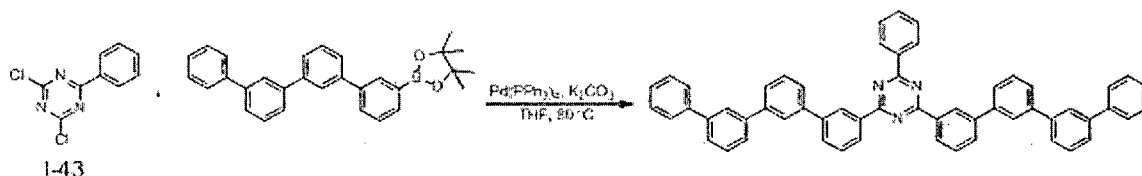
250mL 플라스크에 중간체 I-43 5.0g (22.12 mmol), 2-([1,1':3',1''-4',1'''-terphenyl]-3-yl)-1,3,2-dioxaborolane 21.99g (46.60 mmol), potassium carbonate 7.64g (55.30 mmol), Tetrakis(triphenyl phosphine) palladium(0) 1.28g (1.11 mmol)을 tetrahydrofuran(THF) 100mL, 물 30 mL에 넣어준 후, 질소 기류 하에서 10시간 동안 가열하여 환류하였다. 이로부터 수득한 혼합물을 메탄올 500mL에 가하여 결정화된 고형분을 여과한 후, 모노클로로벤젠에 녹여 실리카겔/셀라이트로 여과하고, 유기 용매를 적당량 제거한 후, 메탄올로 재결정하여 화합물 A-25 (13.0g, 77%의 수율)을 수득하였다. 생성된 화합물 A-25의 원소 분석 결과는 하기와 같다.

quaterphenyl]-4-yl)-4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolane 21.99g (46.60 mmol), potassium carbonate 7.64g (55.30 mmol), Tetrakis(triphenyl phosphine) palladium(0) 1.28g (1.11 mmol)을 tetrahydrofuran(THF) 100mL, 물 30 mL에 넣어준 후, 질소 기류 하에서 10시간 동안 가열하여 환류하였다. 이로부터 수득한 혼합물을 메탄올 500mL에 가하여 결정화된 고형분을 여과한 후, 모노클로로벤젠에 녹여 실리카겔/셀라이트로 여과하고, 유기 용매를 적당량 제거한 후, 메탄올로 재결정하여 화합물 A-25 (14.2g, 84%의 수율)을 수득하였다. 생성된 화합물 A-25의 원소 분석 결과는 하기와 같다.

calcd.  $C_{57}H_{39}N_3$ : C, 89.38; H, 5.13; N, 5.49; found : C, 89.48; H, 5.33; N, 5.41;

#### 10 합성예 66: 화합물 A-43의 합성

[반응식 66]

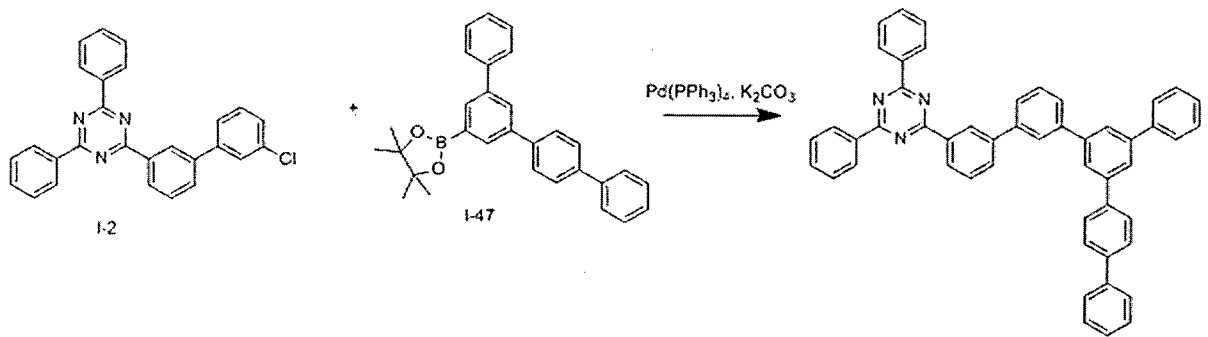


250mL 플라스크에 중간체 I-43 5.0g (22.12 mmol), 2-([1,1':3',1'':3'',1'''-quaterphenyl]-3-yl)-4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolane 21.99g (46.60 mmol), potassium carbonate 7.64g (55.30 mmol), Tetrakis(triphenyl phosphine) palladium(0) 1.28g (1.11 mmol)을 tetrahydrofuran(THF) 100mL, 물 30 mL에 넣어준 후, 질소 기류 하에서 10시간 동안 가열하여 환류하였다. 이로부터 수득한 혼합물을 메탄올 500mL에 가하여 결정화된 고형분을 여과한 후, 모노클로로벤젠에 녹여 실리카겔/셀라이트로 여과하고, 유기 용매를 적당량 제거한 후, 메탄올로 재결정하여 화합물 A-43 (12.2g, 72%의 수율)을 수득하였다. 생성된 화합물 A-43의 원소 분석 결과는 하기와 같다.

calcd.  $C_{57}H_{39}N_3$ : C, 89.38; H, 5.13; N, 5.49; found : C, 89.71; H, 5.46; N, 5.24;

#### 합성예 67: 화합물 A-68의 합성

[반응식 67]



질소 환경에서 상기 화합물 I-2 (20 g, 47.63 mmol)을 tetrahydrofuran(THF) 0.2 L에 녹인 후, 여기에 화합물 I-47 (24.71 g, 57.16 mmol)과 tetrakis(triphenylphosphine)palladium(0.55 g, 0.48 mmol)을 넣고 교반시켰다. 물에 포화된 potassium carbonate(13 g, 97 mmol)을 넣고 80℃에서 20시간 동안 가열하여 환류시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 dichloromethane(DCM)로 추출한 다음 무수 MgSO<sub>4</sub>로 수분을 제거한 후, 필터하고 감압 농축하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 플래시 컬럼 크로마토그래피로 분리 정제하여 상기 화합물 A-68 (23.66 g, 72 %)을 얻었다. 화합물 A-68의 분자량은 689.86 이다.

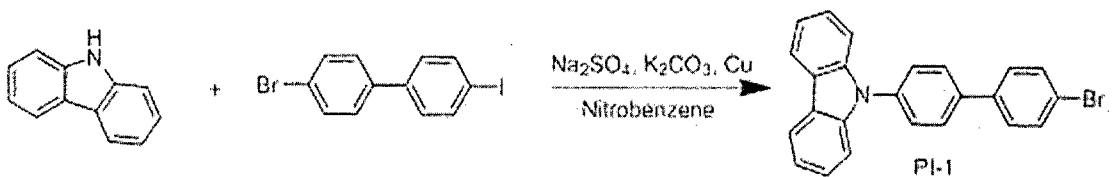
HRMS (70 eV, EI<sup>+</sup>): m/z calcd for C<sub>51</sub>H<sub>35</sub>N<sub>3</sub>: 689.28, found: 689

Elemental Analysis: C, 89 %; H, 5 %

## 제2 화합물의 합성

합성에 68: 중간체 PI-1의 합성

[반응식 68]



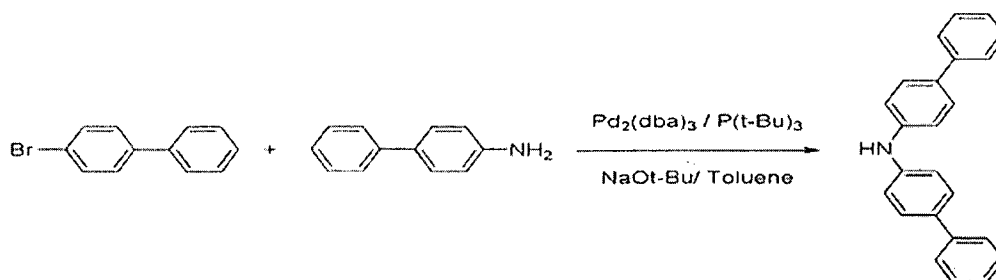
출발 물질인 9H-carbazole (60.00g, 358.83mmol)을 둥근바닥플라스크에 nitrobenzene으로 녹인 후, 4-bromo-4'-iodo-1,1'-biphenyl (154.58g, 430.60mmol), Na<sub>2</sub>SO<sub>4</sub> (50.95g, 358.83mmol), K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> (49.52g, 358.83mmol), Cu (6.84g, 107.65mmol) 를 첨가하고 200℃에서 교반하였다. 반응이 완료된 것을 TLC로 확인 후, 감압증류를 통해 nitrobenzene을 제거하고 CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>와 물로 추출하였다. 유기층을 MgSO<sub>4</sub>로 건조하고 농축한 후 생성된 화합물을 silica gel column 및 재결정하여 PI-1 104.33g (261.95mmol, 수율: 73%) 를 얻었다.

HRMS (70 eV, EI<sup>+</sup>): m/z calcd for C<sub>24</sub>H<sub>16</sub>BrN: 397.05, found: 397

Elemental Analysis: C, 72 %; H, 4 %

### 합성예 69: 중간체 PI-2의 합성

[반응식 69]



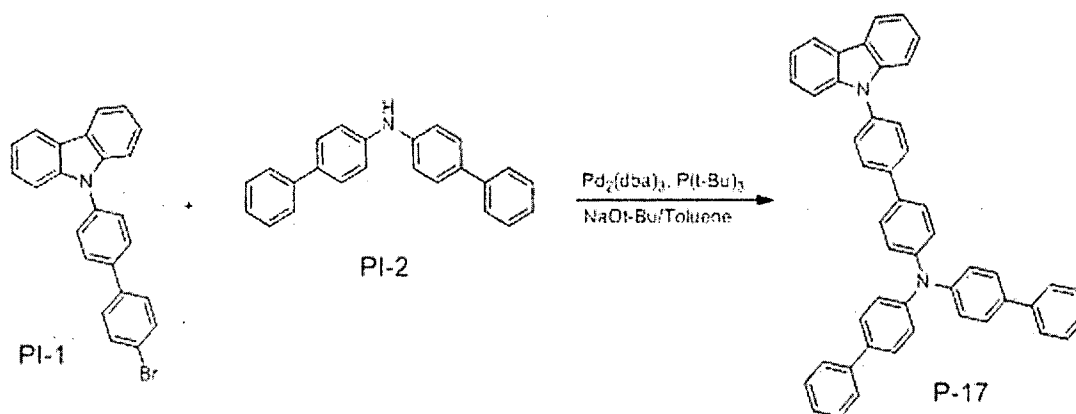
출발물질인 4-bromo-1,1'-biphenyl (50.00g, 214.49mmol)을 둥근플라스크에 toluene으로 녹인 후에, [1,1'-biphenyl]-4-amine (72.60g, 428.98mmol), Pd<sub>2</sub>(dba)<sub>3</sub> (4.59g, 5.0mmol), 50% P(t-Bu)<sub>3</sub> (4.92ml, 10.0mmol), NaOt-Bu (61.84g, 643.47mmol)을 첨가하고 40℃에서 교반하였다. 반응이 완료된 것을 TLC로 확인 후 CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>와 물로 추출한 후 유기층을 MgSO<sub>4</sub>로 건조 및 농축한 후 생성된 화합물을 silica-gel column 및 재결정하여 생성물인 PI-2 51.71g (160.87mmol, 수율: 75%) 를 얻었다.

HRMS (70 eV, EI<sup>+</sup>): m/z calcd for C<sub>24</sub>H<sub>19</sub>N: 321.15, found: 321

Elemental Analysis: C, 90 %; H, 6 %

### 합성예 70: 화합물 P-17의 합성

[반응식 70]



상기 합성에서 얻어진 PI-1(53.59g, 134.06mmol)을 둥근바닥플라스크에 toluene으로 녹인 후에, PI-2(51.71g, 160.87mmol), Pd<sub>2</sub>(dba)<sub>3</sub> (4.59g, 5.0mmol), 50% P(t-Bu)<sub>3</sub>

(4.92ml, 10.0mmol), NaOt-Bu (61.84g, 643.47mmol)을 첨가하고 100℃에서 교반하였다. 반응이 완료된 것을 TLC로 확인후 CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>와 물로 추출한 후 유기층을 MgSO<sub>4</sub>로 건조하고 농축한 후 생성된 화합물을 silica-gel column 및 재결정하여 생성물인 P-17 71.08g (111.27mmol, 수율: 83%)을 얻었다.

- 5 HRMS (70 eV, EI+): m/z calcd for C<sub>48</sub>H<sub>34</sub>N<sub>2</sub>: 638.27, found: 638  
Elemental Analysis: C, 90 %; H, 5 %

### 유기 발광 소자의 제작

#### 실시예 1

- 10 ITO (Indium tin oxide)가 1500 Å의 두께로 박막 코팅된 유리 기판을 증류수 초음파로 세척하였다. 증류수 세척이 끝나면 이소프로필 알코올, 아세톤, 메탄올 등의 용제로 초음파 세척을 하고 건조시킨 후 플라즈마 세정기로 이송시킨 다음 산소 플라즈마를 이용하여 상기 기판을 10분간 세정 한 후 진공 증착기로 기판을 이송하였다. 이렇게 준비된 ITO 투명 전극을 양극으로 사용하여 ITO 기판 상부에
- 15 N<sub>4</sub>,N<sub>4</sub>'-디페닐-N<sub>4</sub>,N<sub>4</sub>'-비스(9-페닐-9H-카바졸-3-일)바이페닐-4,4'-디아민(N<sub>4</sub>,N<sub>4</sub>'-diphenyl-N<sub>4</sub>,N<sub>4</sub>'-bis(9-phenyl-9H-carbazol-3-yl)biphenyl-4,4'-diamine)(화합물 A)를 진공 증착하여 700 Å 두께의 정공 주입층을 형성하고 상기 정공 주입층 상부에 1,4,5,8,9,11-헥사아자트리페닐렌-헥사카보니트릴(1,4,5,8,9,11-hexaazatriphenylene-hexacarbonitrile, HAT-CN)(화합물 B)를 50 Å의 두께로 증착한 후, N-(바이페닐-4-일)-9,9-디메틸-N-(4-(9-페닐-9H-카바졸-3-일)페닐)-9H-플루오렌-2-아민(N-(biphenyl-4-yl)-9,9-dimethyl-N-(4-(9-phenyl-9H-carbazol-3-yl)phenyl)-9H-fluoren-2-amine)(화합물 C)를 700 Å의 두께로
- 20 증착하여 정공수송층을 형성하였다. 정공수송층 상부에 합성예 70에서 얻어진 화합물 P-17을 진공 증착으로 50 Å 두께의 정공수송보조층을 형성하였다. 이어서 상기 정공수송보조층 상부에 청색형광 발광 호스트 및 도펀트로 SFC社에서
- 25 판매하고 있는 BH113 과 BD370을 5wt%로 도핑하여 200 Å의 두께로 증착하여 발광층을 형성하였다.. 이어서 상기 발광층 상부에 합성예 65에서 얻어진 화합물 61을 진공 증착으로 50 Å 두께의 전자수송보조층을 형성하였다.

- 이어서 상기 전자수송보조층 상부에 8-(4-(4-(나프탈렌-2-일)-6-(나프탈렌-3-일)-1,3,5-트리아진-2-일)페닐)퀴놀린 (8-(4-(4-(naphthalen-2-yl)-6-(naphthalen-3-yl)-1,3,5-triazin-2-yl)phenyl)quinoline) (화합물E)와 Liq(8-hydroxyquinolatolithium)를 동시에 1:1 비율로
- 30

진공 증착하여 310 Å 두께의 전자수송층을 형성하고 상기 전자수송층 상부에 Liq 15 Å과 Al 1200 Å을 순차적으로 진공 증착하여 음극을 형성함으로써 유기발광소자를 제작하였다.

상기 유기발광소자는 6층의 유기 박막층을 가지는 구조로 되어 있으며,

- 5 구체적으로 ITO/A(700 Å)/B(50 Å)/C(700 Å)/정공수송보조층[P-17(50 Å)]  
/EML[BH113:BD370(95:5wt%)](200 Å)/전자수송보조층[화합물 61 (50 Å)]  
E:Liq=1:1(310 Å)/ Liq(15 Å)/Al(1200 Å)의 구조로 제작하였다.

## 실시예 2

- 10 전자수송보조층에 화합물 61 대신 합성예 67에서 얻어진 화합물 152를  
사용한 것을 제외하고는 실시예 1과 동일한 방법으로 유기발광소자를 제작하였다.

## 참고예 1

- 15 정공수송보조층을 형성하지 않고, 화합물 C를 750 Å의 두께로 증착하여  
정공수송층을 형성한 것을 제외하고는 실시예 1과 동일한 방법으로 유기발광소자를  
제작하였다.

## 비교예 1

- 20 정공수송보조층을 형성하지 않고, 화합물 C를 750 Å의 두께로 증착하여  
형성하고, 전자수송보조층을 형성하지 않고, 전자수송층에 화합물 E:Liq=1:1(310 Å)  
대신 화합물 E:Liq=1:1(360 Å) 증착한 것을 제외하고는 실시예 1과 동일한 방법으로  
유기발광소자를 제작하였다.

## 비교예 2

- 25 전자수송보조층을 형성하지 않고, 전자수송층에 화합물 E:Liq=1:1(310 Å) 대신  
화합물 E:Liq=1:1(360 Å) 증착한 것을 제외하고는 실시예 1과 동일한 방법으로  
유기발광소자를 제작하였다.

## 평가

- 30 실시예 1, 실시예 2, 참고예 1, 비교예 1 및 비교예 2에 따른 유기발광소자의

발광효율 등을 평가하였다.

구체적인 측정방법은 하기와 같고, 그 결과는 표 1과 같다.

(1) 전압변화에 따른 전류밀도의 변화 측정

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

(2) 전압변화에 따른 휘도변화 측정

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

10 (3) 발광효율 측정

상기 (1) 및 (2)로부터 측정된 휘도와 전류밀도 및 전압을 이용하여 동일 전류밀도( $10 \text{ mA/cm}^2$ )의 전류 효율( $\text{cd/A}$ ) 을 계산하였다.

(4) Roll-off 측정

15 상기 (3)의 특성수치 중 (Max 수치 -  $6000 \text{ cd/m}^2$  일 때의 수치 / Max 수치)로 계산하여 효율의 하락폭을 %로 계산하였다

【표 1】

|       | 정공 수송<br>보조층 | 전자수송<br>보조층 | 구동 전압<br>(V) | 발광 효율<br>( $\text{cd/A}$ ) | 외부 양자<br>효율 |
|-------|--------------|-------------|--------------|----------------------------|-------------|
| 실시예 1 | P-17         | 화합물 61      | 4.16         | 7.4                        | 50.3        |
| 실시예 2 | P-17         | 화합물 152     | 3.99         | 7.7                        | 52.7        |
| 참고예 1 | 화합물C         | 화합물 61      | 4.23         | 6.2                        | 41.4        |
| 비교예 1 | 화합물C         | -           | 4.38         | 5.9                        | 39.5        |
| 비교예 2 | P-17         | -           | 4.30         | 7.0                        | 46.7        |

20 표 1을 참고하면, 실시예 1 및 2에 따른 유기발광소자는 참고예 1, 비교예 1 및 2에 따른 유기발광소자와 각각 비교하여 구동 전압이 낮고, 동시에 발광 효율 및 외부 양자 효율 특성이 현저하게 개선된 것을 확인할 수 있다.

본 발명은 상기 실시예들에 한정되는 것이 아니라 서로 다른 다양한 형태로

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

5

## [부호의 설명]

10: 애노드

20: 캐소드

30: 유기층

31: 정공수송층

32: 발광층

33: 정공수송보조층

10

34: 전자수송층

35: 전자수송보조층

36: 전자주입층

37: 정공주입층

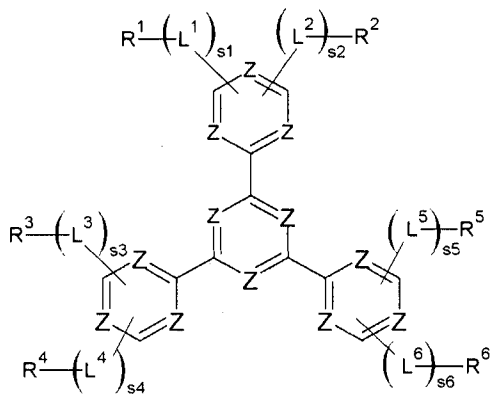
## 【청구의 범위】

## 【청구항 1】

서로 마주하는 애노드와 캐소드,  
 상기 애노드와 상기 캐소드 사이에 위치하는 발광층,  
 상기 애노드와 상기 발광층 사이에 위치하는 정공수송층,  
 상기 정공수송층과 상기 발광층 사이에 위치하는 정공수송보조층,  
 상기 캐소드와 상기 발광층 사이에 위치하는 전자수송층, 그리고  
 상기 전자수송층과 상기 발광층 사이에 위치하는 전자수송보조층을 포함하고,  
 상기 전자수송보조층은 하기 화학식 1로 표현되는 적어도 1종의 제1  
 화합물을 포함하고,

상기 정공수송보조층은 하기 화학식 2로 표현되는 적어도 1종의 제2  
 화합물을 포함하는 유기 광전자 소자:

## [화학식 1]



상기 화학식 1에서,

Z는 각각 독립적으로 N, C 또는 CR<sup>a</sup>이고,

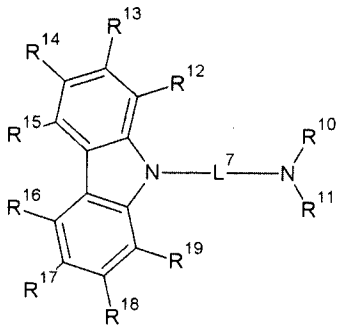
Z 중 적어도 하나는 N 이고,

R<sup>1</sup> 내지 R<sup>6</sup> 및 R<sup>a</sup>는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1  
 내지 C10 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된  
 C3내지 C30 헤테로아릴기 또는 이들의 조합이고,

L<sup>1</sup> 내지 L<sup>6</sup>은 각각 독립적으로 단일결합, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30  
 아릴렌기, 치환 또는 비치환된 헤테로아릴렌기 또는 이들의 조합이고,

s1 내지 s6는 각각 독립적으로 0 내지 5의 정수이고,

## [화학식 2]



상기 화학식 2에서,

$R^{10}$  내지  $R^{19}$ 는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴기 또는 이들의 조합이고,

$L^7$ 은 치환 또는 비치환된 C2 내지 C10 알케닐렌기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴렌기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴기 또는 이들의 조합이다.

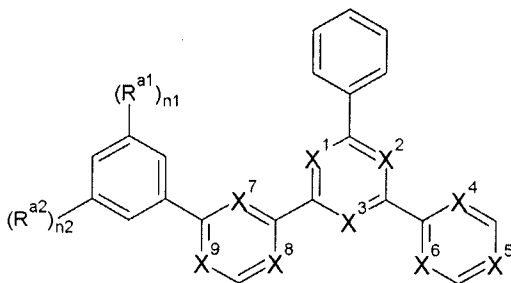
(상기 "치환"은 적어도 하나의 수소가 중수소, 할로젠기, 히드록시기, 아미노기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 아민기, 니트로기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C40 실릴기, C1 내지 C30 알킬기, C3 내지 C30 시클로알킬기, C2 내지 C30 헤테로시클로알킬기, C6 내지 C30 아릴기, C2 내지 C30 헤테로아릴기, C1 내지 C20 알콕시기, 플루오로기, C1 내지 C10 트리플루오로알킬기, 플루오레닐기 또는 시아노기로 치환된 것을 의미한다)

## 【청구항 2】

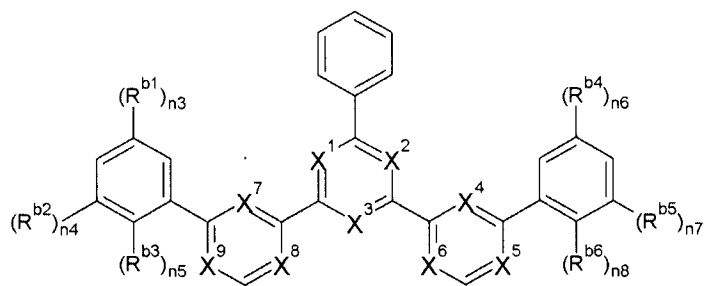
제1항에서,

상기 제1 화합물은 하기 화학식 1-i 내지 화학식 1-ix 중 어느 하나로 표현되는 유기 광전자 소자:

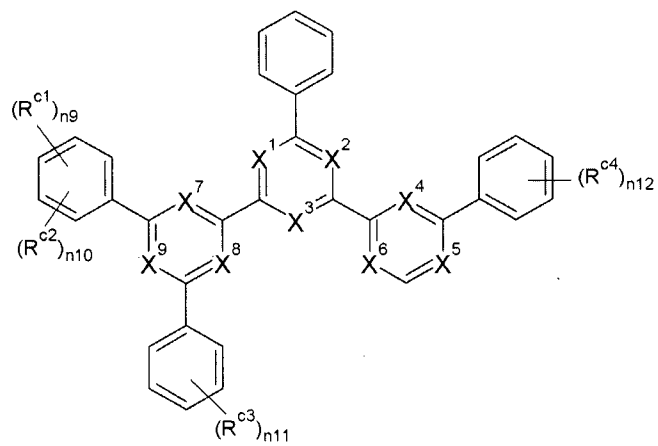
## [화학식 1-i]



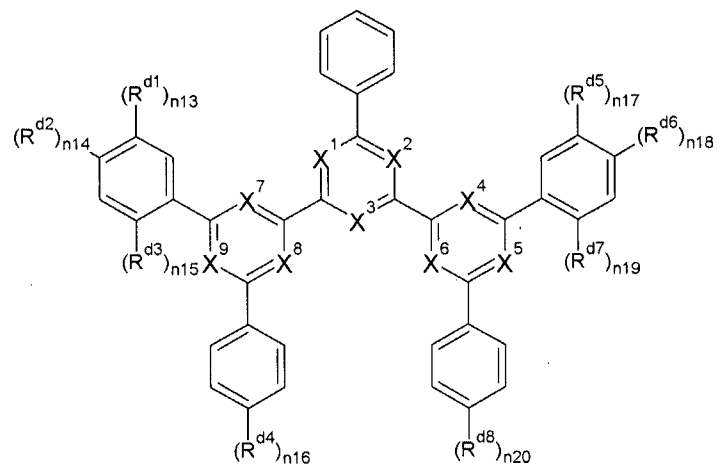
[화학식 1-ii]



[화학식 1-iii]

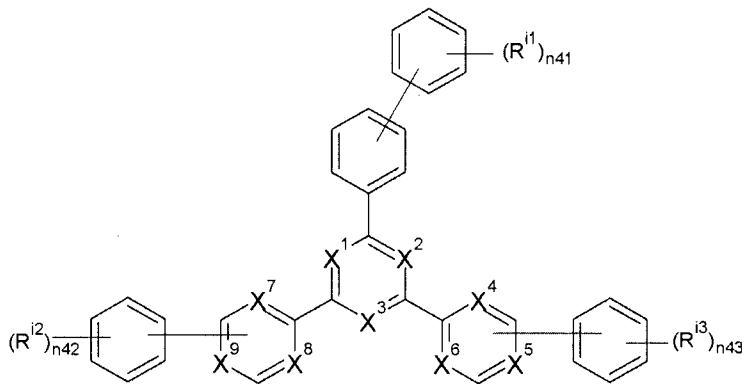


[화학식 1-iv]





[화학식 1-ix]



상기 화학식 1-i에서,

$R^{a1}$  및  $R^{a2}$ 는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 C1 내지 C10 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴기 또는 이들의 조합이고,

$n1$  및  $n2$ 는 각각 독립적으로 0 또는 1의 정수이고, 단,  $n1$  및  $n2$ 는 동시에 0이 아니고,

상기 화학식 1-ii에서,

$R^{b1}$  내지  $R^{b6}$ 은 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 C1 내지 C10 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴기 또는 이들의 조합이고,

$n3$  내지  $n8$ 은 각각 독립적으로 0 또는 1의 정수이고, 단,  $n3$  내지  $n5$ 는 동시에 0이 아니고,  $n6$  내지  $n8$ 은 동시에 0이 아니고,

상기 화학식 1-iii에서,

$R^{c1}$  내지  $R^{c4}$ 는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 C1 내지 C10 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴기 또는 이들의 조합이고,

$n9$  내지  $n12$ 는 각각 독립적으로 0 또는 1의 정수이고,

상기 화학식 1-iv에서,

$R^{d1}$  내지  $R^{d8}$ 은 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 C1 내지 C10 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴기 또는 이들의 조합이고,

$n13$  내지  $n20$ 은 각각 독립적으로 0 또는 1의 정수이고,

상기 화학식 1-v에서,

$X^a$  내지  $X^f$ 는 각각 독립적으로 N 또는 CH이고,

$X^a$  내지  $X^c$  중 적어도 하나는 N이고,

$X^d$  내지  $X^f$  중 적어도 하나는 N이고,

$R^{e1}$  내지  $R^{e6}$ 은 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 C1 내지 C10 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴기 또는 이들의 조합이고,

$n_{21}$  내지  $n_{26}$ ,  $m_1$  및  $m_2$ 는 각각 독립적으로 0 또는 1의 정수이고,

상기 화학식 1-vi에서,

$R^{f1}$  내지  $R^{f6}$ 은 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 C1 내지 C10 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴기 또는 이들의 조합이고,

$n_{27}$  내지  $n_{32}$ 는 각각 독립적으로 0 또는 1의 정수이고, 단,  $n_{27}$  내지  $n_{29}$ 는 동시에 0이 아니고,  $n_{30}$  내지  $n_{32}$ 는 동시에 0이 아니고,

상기 화학식 1-vii에서,

$X^g$  내지  $X^i$ 는 각각 독립적으로 N 또는 CH이고,

$X^g$  내지  $X^i$  중 적어도 하나는 N이고,

$X^j$  내지  $X^l$  중 적어도 하나는 N이고,

$R^{g1}$  및  $R^{g2}$ 는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 C1 내지 C10 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴기 또는 이들의 조합이고,

$n_{33}$  및  $n_{34}$ 는 각각 독립적으로 0 또는 1의 정수이고,

상기 화학식 1-viii에서,

$R^{h1}$  내지  $R^{h6}$ 는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 C1 내지 C10 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴기 또는 이들의 조합이고,

$n_{35}$  내지  $n_{40}$ 은 각각 독립적으로 0 또는 1의 정수이고,

상기 화학식 1-ix에서,

$R^{i1}$  내지  $R^{i3}$ 은 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 C1 내지 C10 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30

헤테로아릴기 또는 이들의 조합이고,

$n_{41}$  내지  $n_{43}$ 은 각각 독립적으로 0 또는 1의 정수이며,

상기 화학식 1-i 내지 1-v, 및 1-ix 에서,  $X^1$  내지  $X^9$  은 CH 또는 N 이며,  
상기  $X^1$  내지  $X^9$  중 적어도 하나는 N 이며,

상기 화학식 1-vi, 1-vii 및 1-viii 에서,  $X^1$  내지  $X^3$ 은 CH 또는 N이며, 상기  $X^1$  내지  $X^3$  중 적어도 하나는 N 이다.

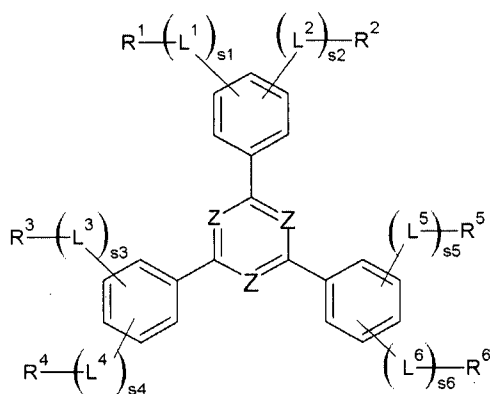
(상기 "치환"은 적어도 하나의 수소가 중수소, 할로젠기, 히드록시기, 아미노기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 아민기, 니트로기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C40 실릴기, C1 내지 C30 알킬기, C3 내지 C30 시클로알킬기, C2 내지 C30 헤테로시클로알킬기, C6 내지 C30 아릴기, C2 내지 C30 헤테로아릴기, C1 내지 C20 알콕시기, 플루오로기, C1 내지 C10 트리플루오로알킬기, 플루오레닐기 또는 시아노기로 치환된 것을 의미한다)

### 【청구항 3】

제1항에서,

상기 제1 화합물은 하기 화학식 Y로 표현되는 유기 광전자 소자:

[화학식 Y]



상기 화학식 Y에서,

Z는 각각 독립적으로 N 또는 CH이고,

Z 중 적어도 하나는 N 이고,

$R^1$  내지  $R^6$ 은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C10 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 헤테로아릴기 또는 이들의 조합이고,

$L^1$  내지  $L^6$ 는 각각 독립적으로 단일결합, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30



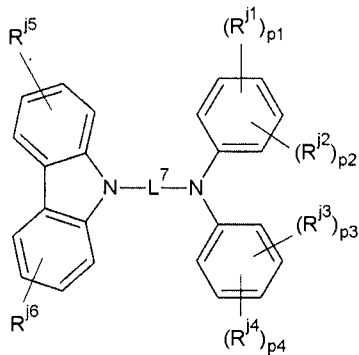
C1 내지 C40 실릴기, C1 내지 C30 알킬기, C3 내지 C30 시클로알킬기, C2 내지 C30 헤테로시클로알킬기, C6 내지 C30 아릴기, C2 내지 C30 헤테로아릴기, C1 내지 C20 알콕시기, 플루오로기, C1 내지 C10 트리플루오로알킬기, 플루오레닐기 또는 시아노기로 치환된 것을 의미한다)

【청구항 5】

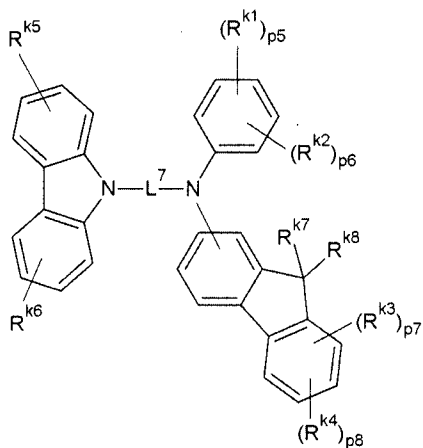
제1항에서,

상기 제2 화합물은 하기 화학식 2-i 내지 화학식 2-iii 중 어느 하나로 표현되는 유기 광전자 소자:

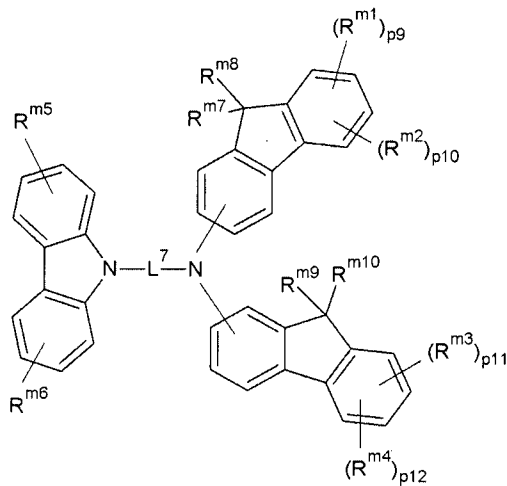
[화학식 2-i]



[화학식 2-ii]



[화학식 2-iii]



상기 화학식 2-i에서,

$L^7$ 은 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴렌기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로 아릴렌기 또는 이들의 조합이고,

$R^{j1}$  내지  $R^{j6}$ 은 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 C1 내지 C10 알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로 아릴렌기 또는 이들의 조합 이고,

$p1$  내지  $p4$ 는 각각 독립적으로 0 내지 5의 정수이고, 단,  $0 \leq p1 + p2 \leq 5$  이고,  $0 \leq p3 + p4 \leq 5$  이고,

상기 화학식 2-ii에서,

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

$R^{k1}$  내지  $R^{k6}$ 은 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 C1 내지 C10 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로 아릴렌기 또는 이들의 조합이고,

$R^{k7}$  및  $R^{k8}$ 은 각각 독립적으로 수소 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C10 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로 아릴렌기 또는 이들의 조합이고,

$p5$  및  $p6$ 은 각각 독립적으로 0 내지 5의 정수이고, 단,  $0 \leq p5 + p6 \leq 5$  이고,

$p7$  및  $p8$ 은 각각 독립적으로 0 내지 4의 정수이고, 단,  $0 \leq p7 + p8 \leq 4$  이고,

상기 화학식 2-iii에서,

$L^7$ 은 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴렌기, 치환 또는 비치환된 C2

내지 C30 헤테로 아릴렌기 또는 이들의 조합이고,

$R^{m1}$  내지  $R^{m6}$ 은 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 C1 내지 C10 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로 아릴렌기 또는 이들의 조합이고,

$R^{m7}$  내지  $R^{m10}$ 은 각각 독립적으로 수소 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C10 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로 아릴렌기 또는 이들의 조합이고,

$p_9$  내지  $p_{12}$ 는 각각 독립적으로 0 내지 4의 정수이고, 단,  $0 \leq p_9 + p_{10} \leq 4$  이고,  $0 \leq p_{11} + p_{12} \leq 4$  이다.

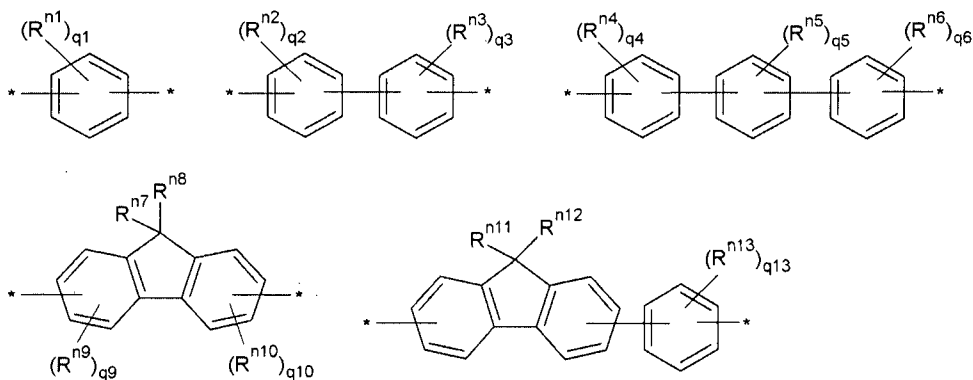
(상기 "치환"은 적어도 하나의 수소가 중수소, 할로젠기, 히드록시기, 아미노기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 아민기, 니트로기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C40 실릴기, C1 내지 C30 알킬기, C3 내지 C30 시클로알킬기, C2 내지 C30 헤테로시클로알킬기, C6 내지 C30 아릴기, C2 내지 C30 헤테로아릴기, C1 내지 C20 알콕시기, 플루오로기, C1 내지 C10 트리플루오로알킬기, 플루오레닐기 또는 시아노기로 치환된 것을 의미한다)

#### 【청구항 6】

제5항에서,

상기  $L^7$ 은 하기 그룹 A에 나열된 연결기 중 어느 하나인 유기 광전자 소자:

[그룹 A]



상기 그룹 A에서,

$R^{n1}$  내지  $R^{n13}$ 은 각각 독립적으로 수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C10 알킬기 또는 치환 또는 비치환된 C6 내지 C20 아릴기이고,

$q_1$  내지  $q_6$  및  $q_{13}$ 은 각각 독립적으로 0 내지 4의 정수이고,

q9 및 q10은 각각 독립적으로 0 내지 3의 정수이다.

(상기 "치환"은 적어도 하나의 수소가 중수소, 할로젠기, 히드록시기, 아미노기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 아민기, 니트로기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C40 실릴기, C1 내지 C30 알킬기, C3 내지 C30 시클로알킬기, C2 내지 C30 헤테로시클로알킬기, C6 내지 C30 아릴기, C2 내지 C30 헤테로아릴기, C1 내지 C20 알콕시기, 플루오로기, C1 내지 C10 트리플루오로알킬기, 플루오레닐기 또는 시아노기로 치환된 것을 의미한다)

### 【청구항 7】

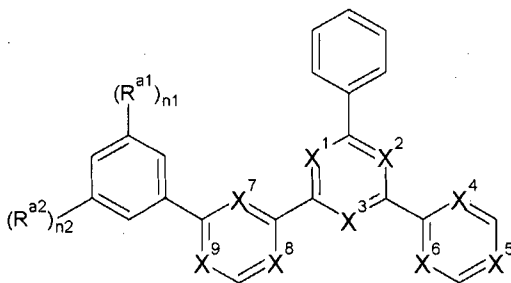
제1항에서,

상기 전자수송보조층은,

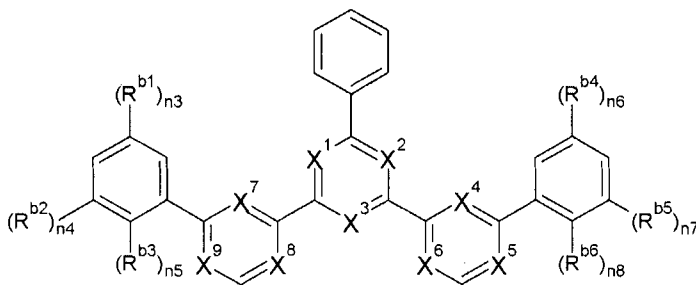
하기 화학식 1-i 또는 1-ii로 표현되는 제1 화합물이고,

상기 정공수송보조층은 하기 화학식 2-i로 표현되는 제2화합물을 포함하는 유기 광전자 소자:

[화학식 1-i]



[화학식 1-ii]



상기 화학식 1-i에서,

$R^{a1}$  및  $R^{a2}$ 는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 C1 내지 C10 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴기 또는 이들의 조합이고,

$n1$  및  $n2$ 는 각각 독립적으로 0 또는 1의 정수이고, 단,  $n1$  및  $n2$ 는 동시에

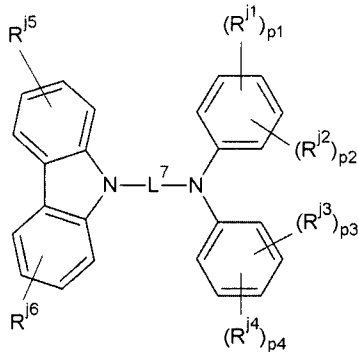
0이 아니고,

$X^1$  내지  $X^9$ 은 CH 또는 N 이며, 상기  $X^1$  내지  $X^9$  중 적어도 하나는 N 이며,  
상기 화학식 1-ii에서,

$R^{b1}$  내지  $R^{b6}$ 은 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 C1 내지 C10 알킬기,  
치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30  
헤테로아릴기 또는 이들의 조합이고,

$n3$  내지  $n8$ 은 각각 독립적으로 0 또는 1의 정수이고, 단,  $n3$  내지  $n5$ 는  
동시에 0이 아니고,  $n6$  내지  $n8$ 은 동시에 0이 아니고,

$X^1$  내지  $X^9$ 은 CH 또는 N 이며, 상기  $X^1$  내지  $X^9$  중 적어도 하나는 N 이며,  
[화학식 2-i]



상기 화학식 2-i에서,

$L^7$ 은 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴렌기 이고,

$R^{j1}$  내지  $R^{j6}$ 은 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 C1 내지 C10 알킬기,  
치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30  
헤테로아릴기 또는 이들의 조합이고,

$p1$  내지  $p4$ 는 각각 독립적으로 0 내지 5의 정수이고, 단,  $0 \leq p1+p2 \leq 5$  이고,  
 $0 \leq p3+p4 \leq 5$  이다.

(상기 "치환"은 적어도 하나의 수소가 중수소, 할로젠기, 히드록시기,  
아미노기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 아민기, 니트로기, 치환 또는 비치환된  
C1 내지 C40 실릴기, C1 내지 C30 알킬기, C3 내지 C30 시클로알킬기, C2 내지 C30  
헤테로시클로알킬기, C6 내지 C30 아릴기, C2 내지 C30 헤테로아릴기, C1 내지 C20  
알콕시기, 플루오로기, C1 내지 C10 트리플루오로알킬기, 플루오레닐기 또는  
시아노기로 치환된 것을 의미한다)

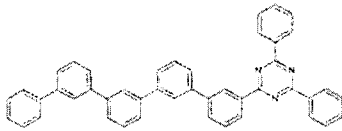
#### 【청구항 8】

제1항에서,

상기 제1 화합물은 하기 그룹 1에 나열된 화합물 중 어느 하나인 유기  
광전자 소자.

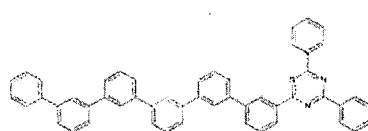
[그룹 1]

[A-1]



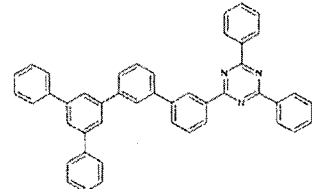
[A-4]

[A-2]

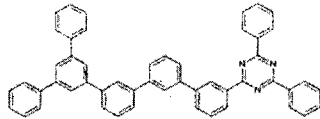


[A-5]

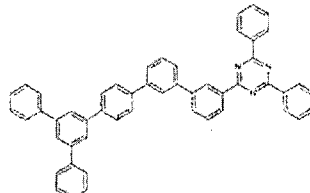
[A-3]



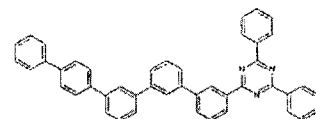
[A-6]



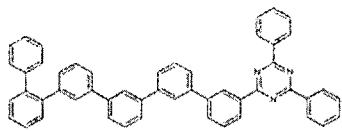
[A-7]



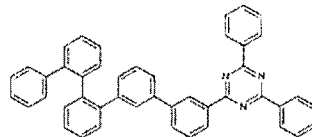
[A-8]



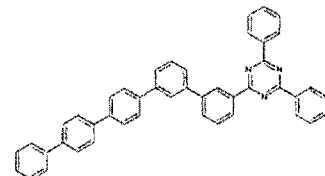
[A-9]



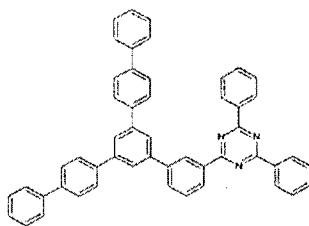
[A-10]



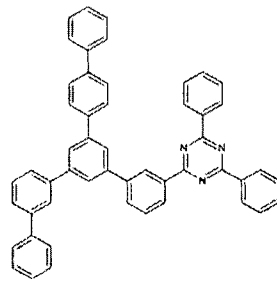
[A-11]



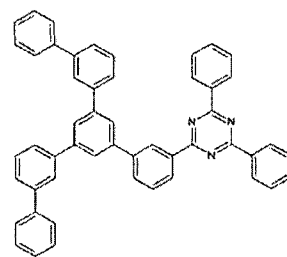
[A-12]



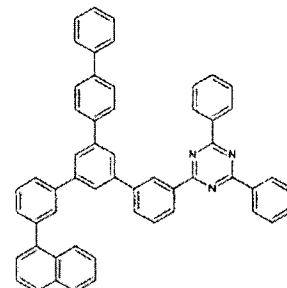
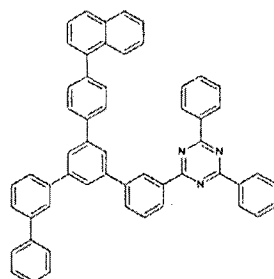
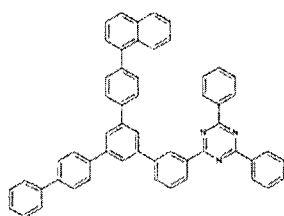
[A-13]



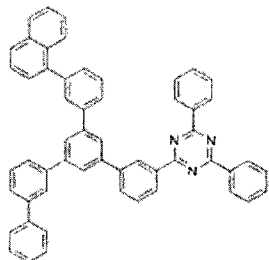
[A-14]



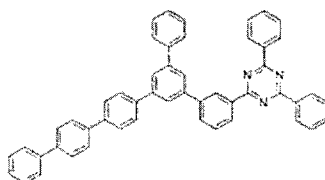
[A-15]



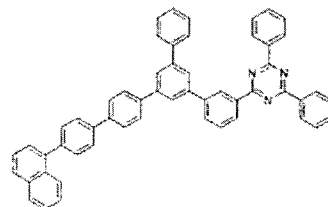
[A-16]



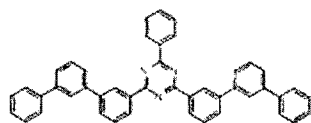
[A-17]



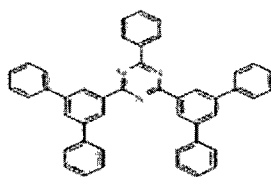
[A-18]



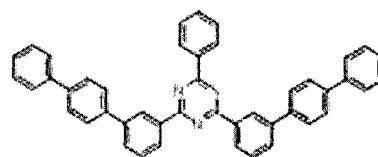
[A-19]



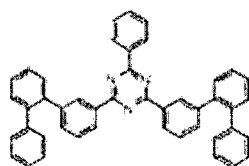
[A-20]



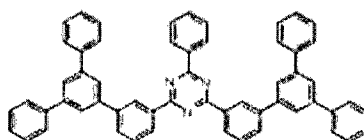
[A-21]



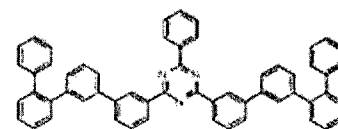
[A-22]



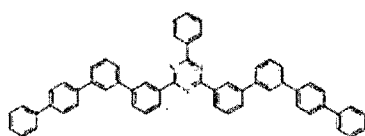
[A-23]



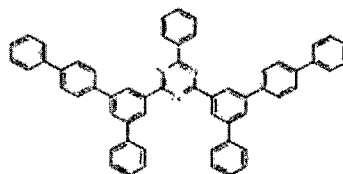
[A-24]



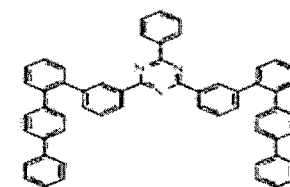
[A-25]



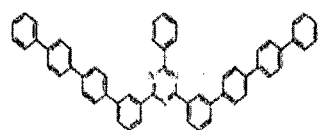
[A-26]



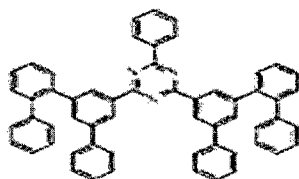
[A-27]



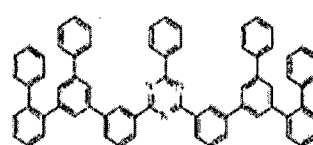
[A-28]



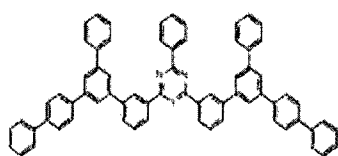
[A-29]



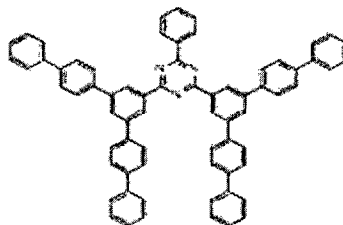
[A-30]



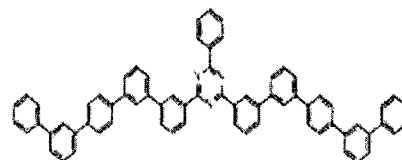
[A-31]



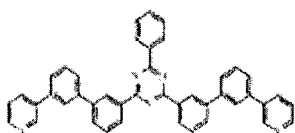
[A-32]



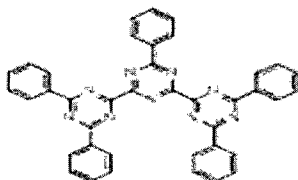
[A-33]



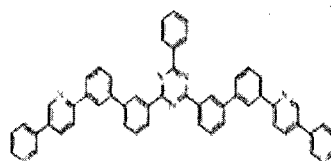
[A-34]



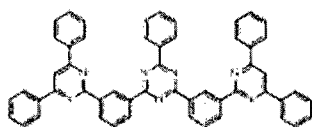
[A-35]



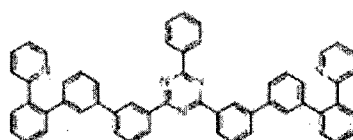
[A-36]



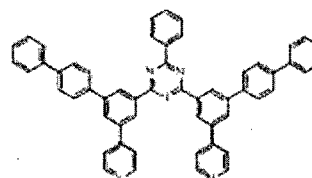
[A-37]



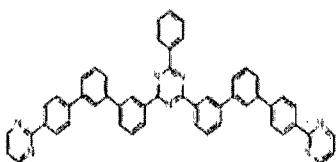
[A-38]



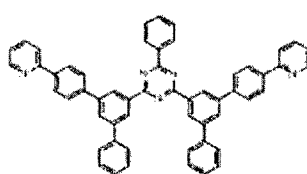
[A-39]



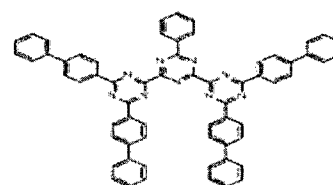
[A-40]



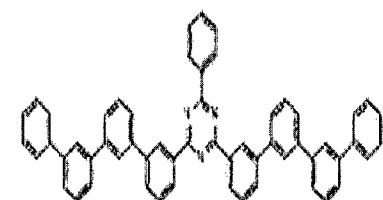
[A-41]



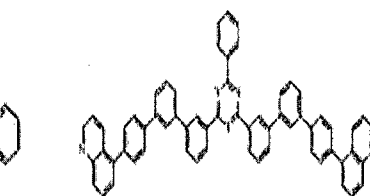
[A-42]



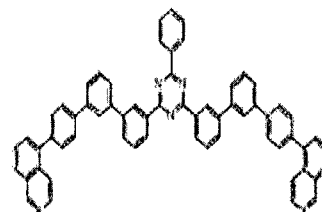
[A-43]



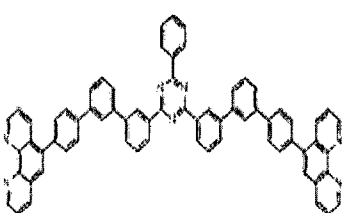
[A-44]



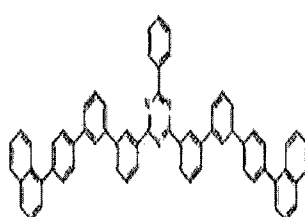
[A-45]



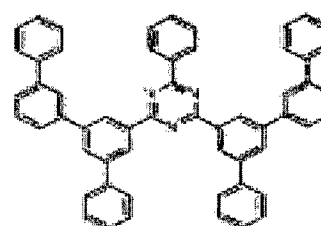
[A-46]



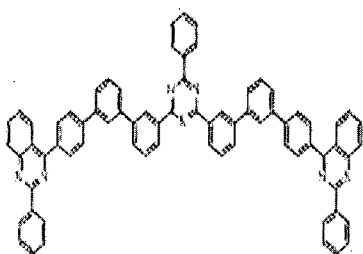
[A-47]



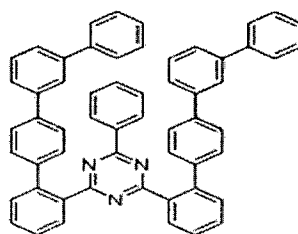
[A-48]



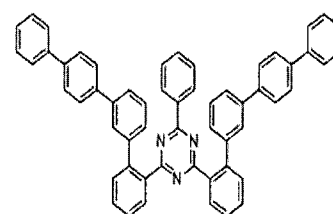
[A-49]



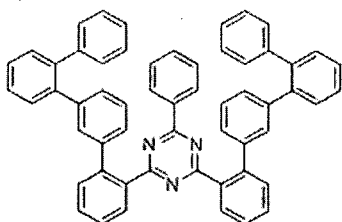
[A-50]



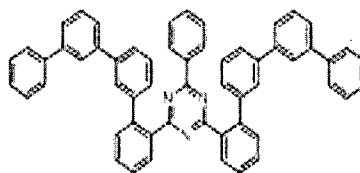
[A-51]



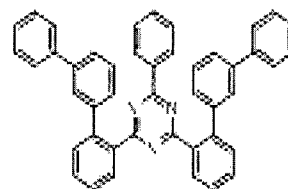
[A-52]



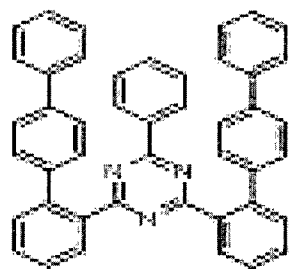
[A-53]



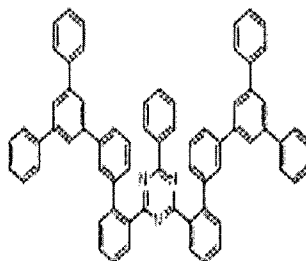
[A-54]



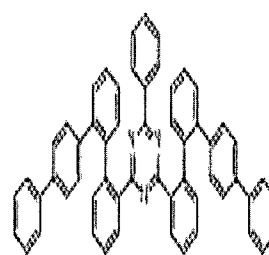
[A-55]



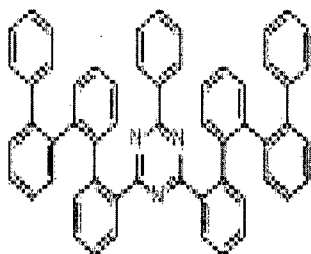
[A-56]



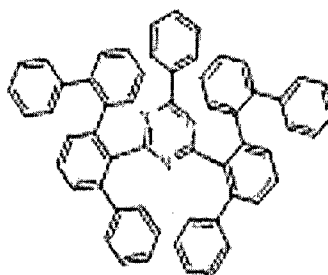
[A-57]



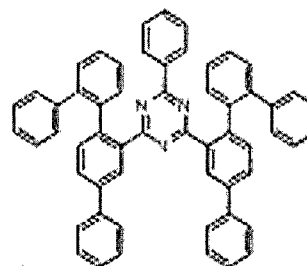
[A-58]



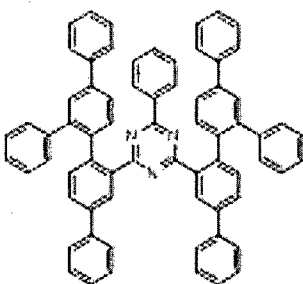
[A-59]



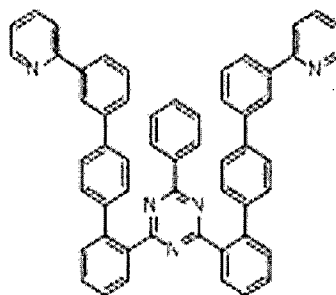
[A-60]



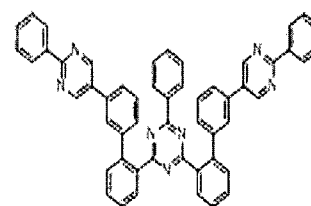
[A-61]



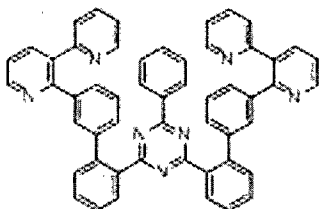
[A-62]



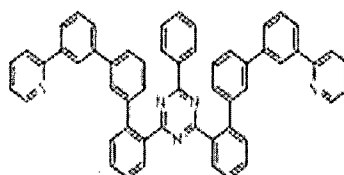
[A-63]



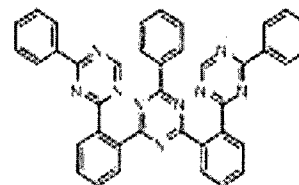
[A-64]



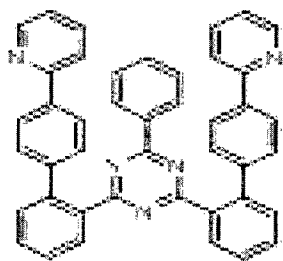
[A-65]



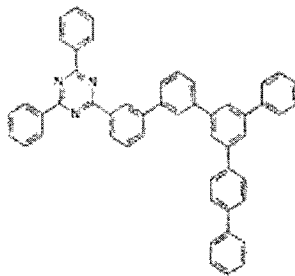
[A-66]



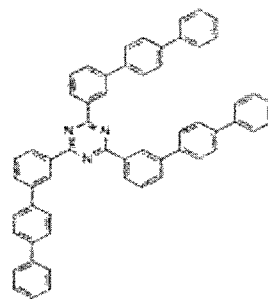
[A-67]



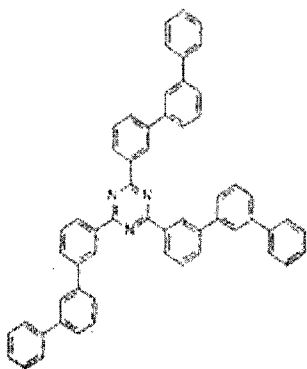
[A-68]



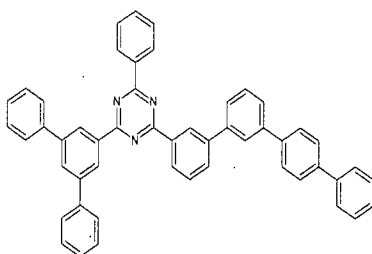
[A-69]



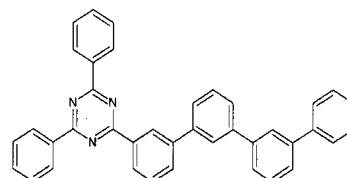
[A-70]



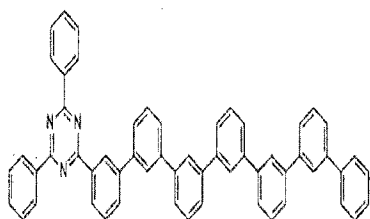
[A-71]



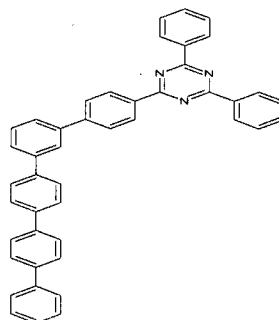
[A-72]



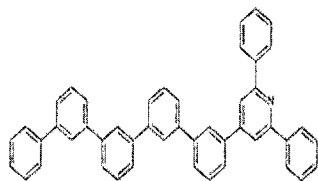
[A-73]



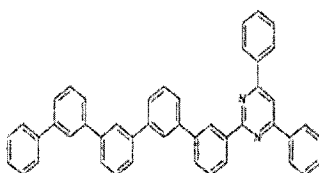
[A-74]



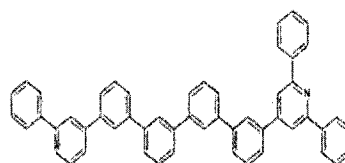
[B-1]



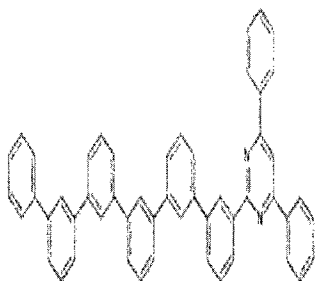
[B-2]



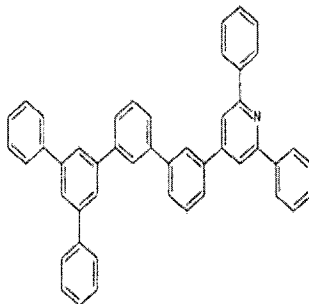
[B-3]



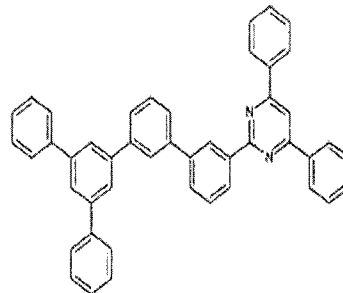
[B-4]



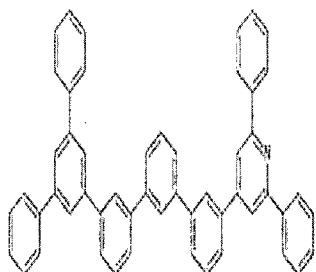
[B-5]



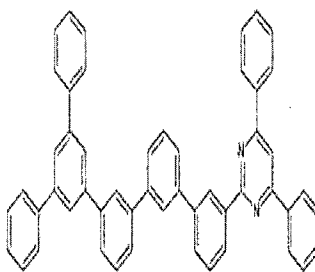
[B-6]



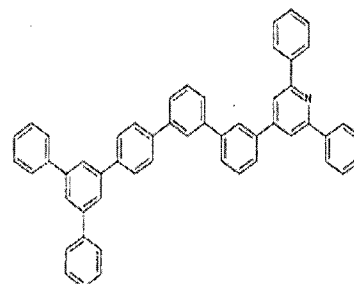
[B-7]



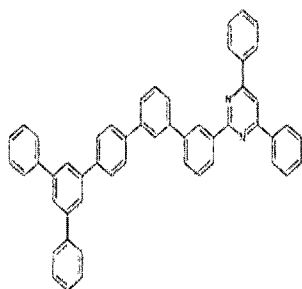
[B-8]



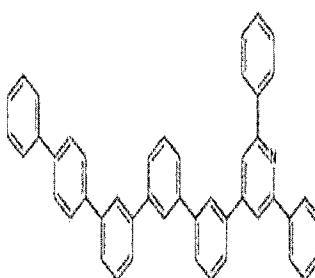
[B-9]



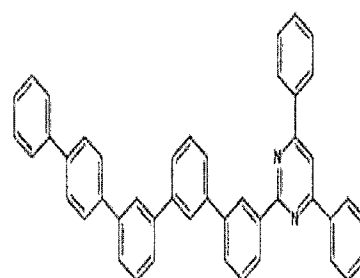
[B-10]



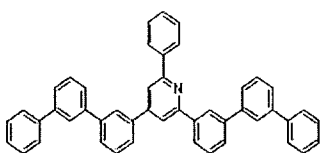
[B-11]



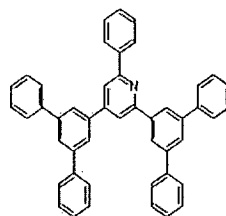
[B-12]



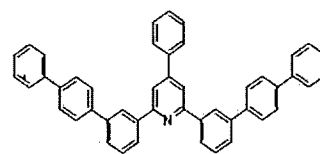
[B-13]



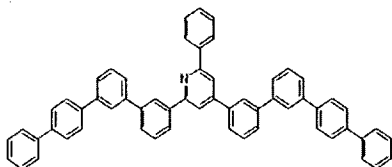
[B-14]



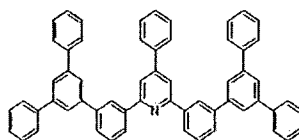
[B-15]



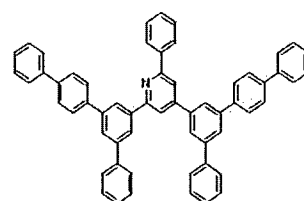
[B-16]



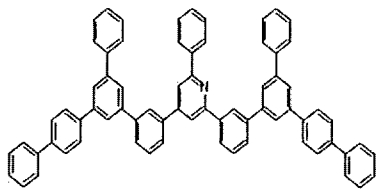
[B-17]



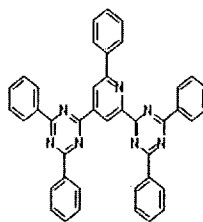
[B-18]



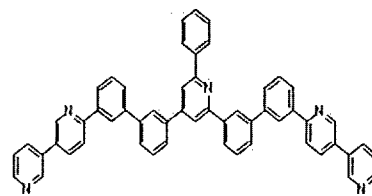
[B-19]



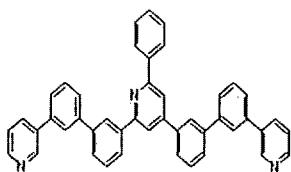
[B-20]



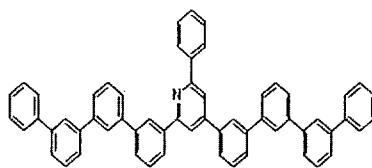
[B-21]



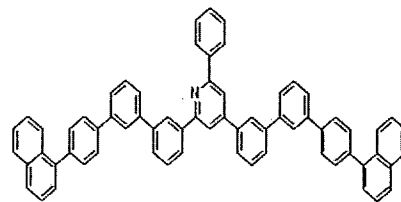
[B-22]



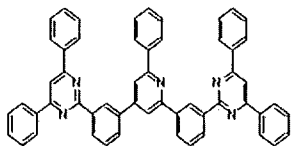
[B-23]



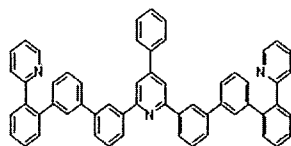
[B-24]



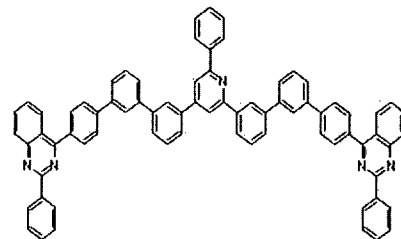
[B-25]



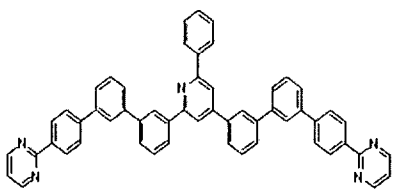
[B-26]



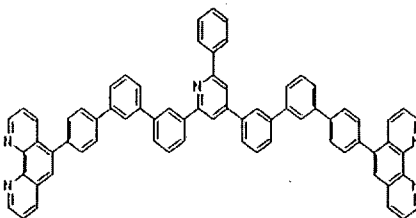
[B-27]



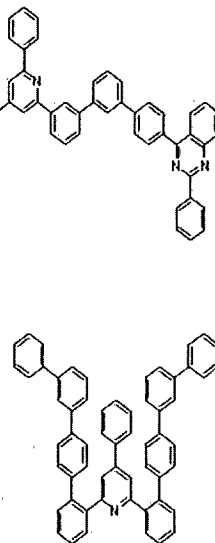
[B-28]



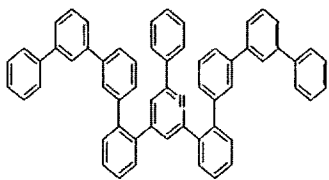
[B-29]



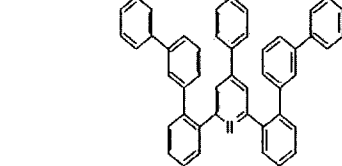
[B-30]



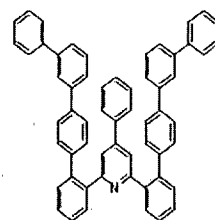
[B-31]



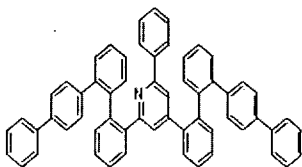
[B-32]



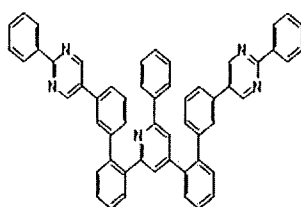
[B-33]



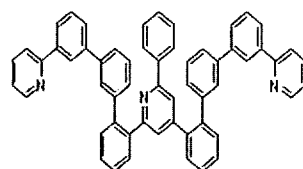
[B-34]



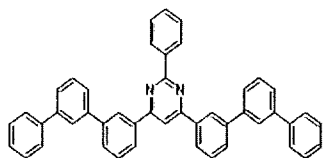
[B-35]



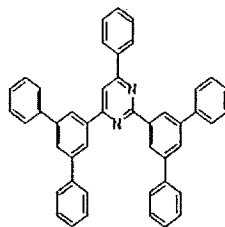
[B-36]



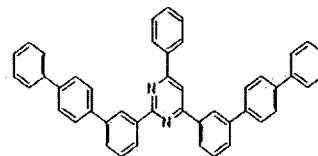
[B-37]



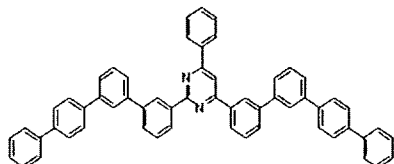
[B-38]



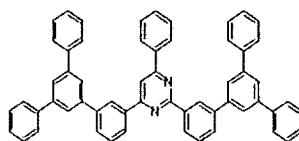
[B-39]



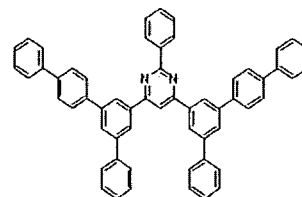
[B-40]



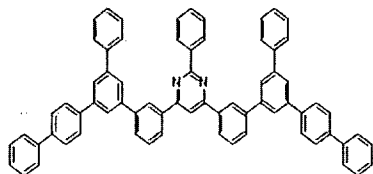
[B-41]



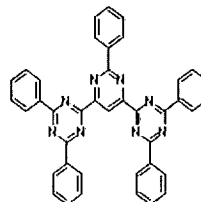
[B-42]



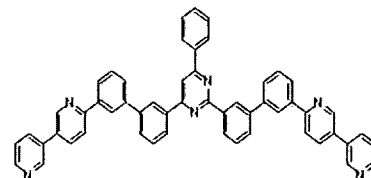
[B-43]



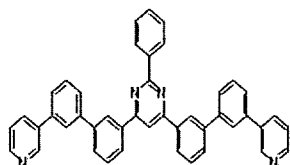
[B-44]



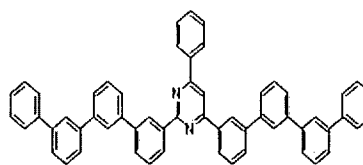
[B-45]



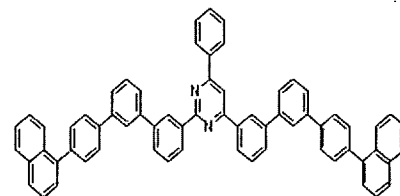
[B-46]



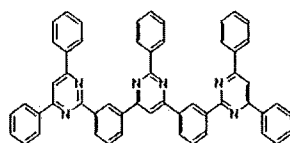
[B-47]



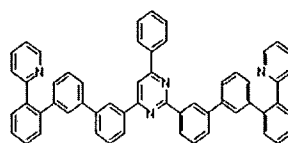
[B-48]



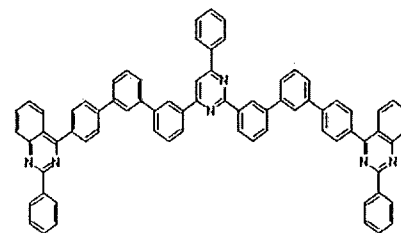
[B-49]



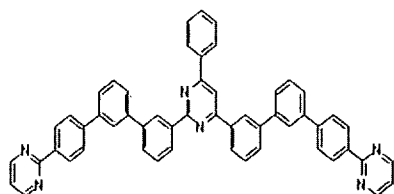
[B-50]



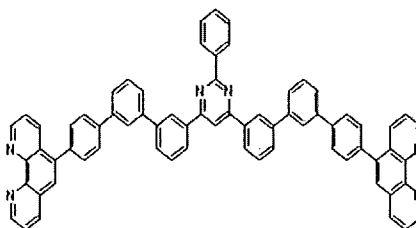
[B-51]



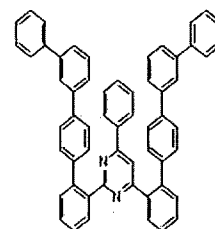
[B-52]



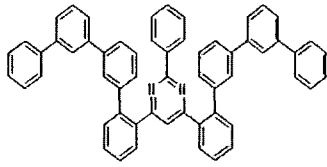
[B-53]



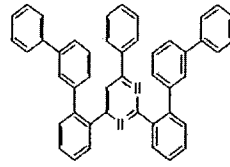
[B-54]



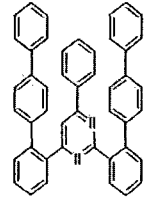
[B-55]



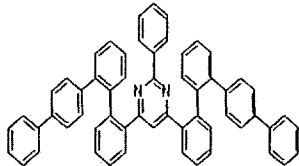
[B-56]



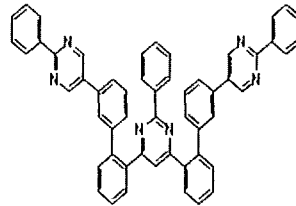
[B-57]



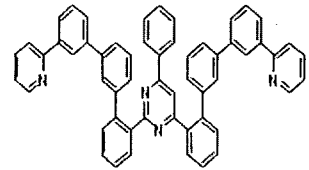
[B-58]



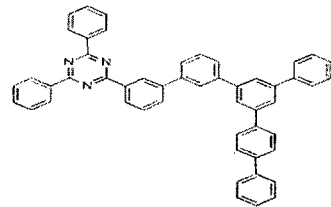
[B-59]



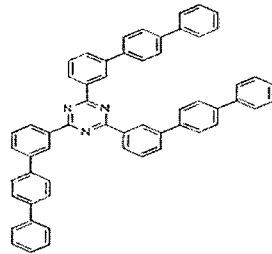
[B-60]



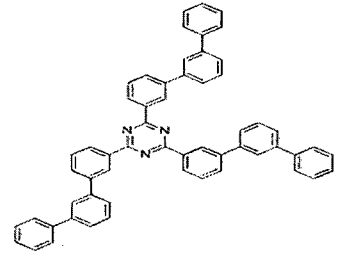
[B-61]



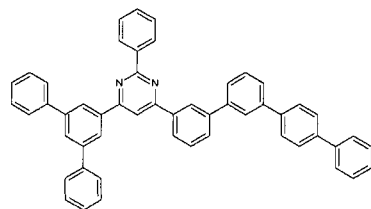
[B-62]



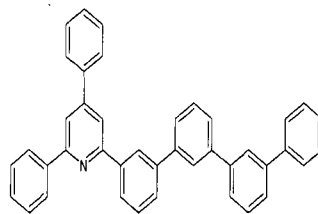
[B-63]



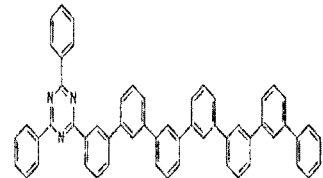
[B-64]



[B-65]



[B-66]



## 【청구항 9】

제1항에서,

상기 정공수송보조층은 상기 정공수송층과 상기 발광층에 각각 접해있고,

상기 전자수송보조층은 상기 전자수송층과 상기 발광층에 각각 접해있는

유기 광전자 소자.

## 【청구항 10】

제1항에서,

상기 발광층은 형광 도펀트를 더 포함하는 유기 광전자 소자.

## 【청구항 11】

제1항, 제5항 또는 제7항 중 어느 한 항에서,

상기 [화학식 2], [화학식 2-i], [화학식 2-ii] 및 [화학식 2-iii]에서,

C6 내지 C30 아릴렌기는 페닐렌기, 비페닐렌기, 터페닐렌기, 테트라페닐렌기, 플루오레닐렌기 또는 이들의 조합이고,

C6 내지 C30 아릴기는 페닐기, 비페닐기, 터페닐기, 테트라페닐기, 플루오렌일기 또는 이들의 조합인 유기 광전자 소자.

**【청구항 12】**

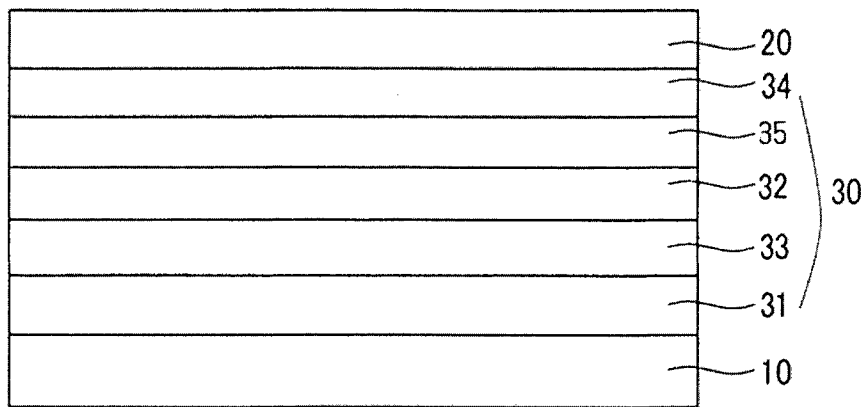
제1항 내지 제10항 중 어느 한 항에 따른 유기 광전자 소자를 포함하는 표시 장치.

**【청구항 13】**

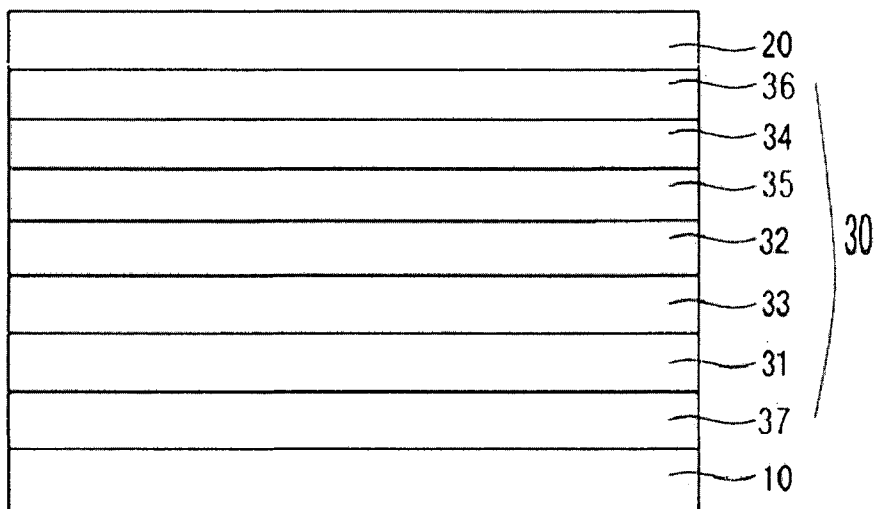
제1항 내지 제10항 중 어느 한 항에서,

상기 유기 광전자 소자는 유기발광소자, 유기광전소자, 유기태양전지, 유기트랜지스터, 유기 감광체 드럼 및 유기메모리소자로 이루어진 군에서 선택된 어느 하나인 유기광전자 소자.

[Fig. 1]



[Fig. 2]



## INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/KR2015/007572

## A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER

*C09K 11/06(2006.01)i, H01L 51/50(2006.01)i, H01L 27/32(2006.01)i*

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

## B. FIELDS SEARCHED

Minimum documentation searched (classification system followed by classification symbols)

C09K 11/06; C07D 409/10; C07D 209/82; C07D 251/24; H01L 51/50; H01L 27/32

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) &amp; Keywords: organic optoelectric diode, electron transport auxiliary layer, hole transport auxiliary layer

## C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

| Category* | Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages                                                                       | Relevant to claim No. |
|-----------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------------------|
| A         | KR 10-2014-0010133 A (MITSUBISHI CHEMICAL CORPORATION) 23 January 2014<br>See abstract, claims 1-13, chemical formula 1.                                 | 1-13                  |
| A         | KR 10-2010-0021908 A (SAMSUNG MOBILE DISPLAY CO., LTD.) 26 February 2010<br>See abstract, claims 1-21, chemical formulas 1, 1a to 1c, compounds 1 to 31. | 1-13                  |
| A         | KR 10-2007-0030759 A (IDEMITSU KOSAN CO., LTD.) 16 March 2007<br>See abstract, claims 1-11, chemical formula 1, paragraphs [0118] to [0130].             | 1-13                  |
| A         | KR 10-2013-0106255 A (DUKSAN HIGH METAL CO., LTD.) 27 September 2013<br>See abstract, claims 1-15, chemical formula 1.                                   | 1-13                  |



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

"&amp;" document member of the same patent family

Date of the actual completion of the international search

04 NOVEMBER 2015 (04.11.2015)

Date of mailing of the international search report

05 NOVEMBER 2015 (05.11.2015)

Name and mailing address of the ISA/KR

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

Facsimile No. 82-42-472-7140

Authorized officer

Telephone No.

**INTERNATIONAL SEARCH REPORT**  
Information on patent family members

International application No.

**PCT/KR2015/007572**

| Patent document<br>cited in search report | Publication<br>date | Patent family<br>member | Publication<br>date |
|-------------------------------------------|---------------------|-------------------------|---------------------|
| KR 10-2014-0010133 A                      | 23/01/2014          | CN 103459375 A          | 18/12/2013          |
|                                           |                     | EP 2695882 A1           | 12/02/2014          |
|                                           |                     | JP 5206907 B2           | 12/06/2013          |
|                                           |                     | US 2014-0034938 A1      | 06/02/2014          |
|                                           |                     | US 2015-0076479 A1      | 19/03/2015          |
|                                           |                     | US 8945728 B2           | 03/02/2015          |
|                                           |                     | WO 2012-137958 A1       | 11/10/2012          |
| KR 10-2010-0021908 A                      | 26/02/2010          | CN 101656301 A          | 24/02/2010          |
|                                           |                     | CN 101656301 B          | 17/09/2014          |
|                                           |                     | JP 2010-045034 A        | 25/02/2010          |
|                                           |                     | JP 5258702 B2           | 07/08/2013          |
|                                           |                     | TW 1421325 B            | 01/01/2014          |
|                                           |                     | US 2010-0039026 A1      | 18/02/2010          |
|                                           |                     | US 8420230 B2           | 16/04/2013          |
| KR 10-2007-0030759 A                      | 16/03/2007          | CN 1934213 A            | 21/03/2007          |
|                                           |                     | EP 1724323 A1           | 22/11/2006          |
|                                           |                     | US 2007-0190355 A1      | 16/08/2007          |
|                                           |                     | WO 2005-085387 A1       | 15/09/2005          |
| KR 10-2013-0106255 A                      | 27/09/2013          | NONE                    |                     |

| <b>A. 발명이 속하는 기술분류(국제특허분류(IPC))</b><br>C09K 11/06(2006.01)i, H01L 51/50(2006.01)i, H01L 27/32(2006.01)i                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                           |                                                                                                      |                                                                                                                             |       |                            |        |   |                                                                                |      |   |                                                                                                    |      |   |                                                                                                      |      |   |                                                                        |      |
|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-------|----------------------------|--------|---|--------------------------------------------------------------------------------|------|---|----------------------------------------------------------------------------------------------------|------|---|------------------------------------------------------------------------------------------------------|------|---|------------------------------------------------------------------------|------|
| <b>B. 조사된 분야</b><br>조사된 최소문헌(국제특허분류를 기재)<br>C09K 11/06; C07D 409/10; C07D 209/82; C07D 251/24; H01L 51/50; H01L 27/32<br>조사된 기술분야에 속하는 최소문헌 이외의 문헌<br>한국등록실용신안공보 및 한국공개실용신안공보: 조사된 최소문헌란에 기재된 IPC<br>일본등록실용신안공보 및 일본공개실용신안공보: 조사된 최소문헌란에 기재된 IPC<br>국제조사에 이용된 전산 데이터베이스(데이터베이스의 명칭 및 검색어(해당하는 경우))<br>eKOMPASS(특허청 내부 검색시스템) & 키워드: 유기 광전자 소자, 전자수송보조층, 정공수송보조층                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                   |                                                                                                      |                                                                                                                             |       |                            |        |   |                                                                                |      |   |                                                                                                    |      |   |                                                                                                      |      |   |                                                                        |      |
| <b>C. 관련 문헌</b> <table border="1"> <thead> <tr> <th>카테고리*</th> <th>인용문헌명 및 관련 구절(해당하는 경우)의 기재</th> <th>관련 청구항</th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>A</td> <td>KR 10-2014-0010133 A (미쓰비시 가가꾸 가부시키키가이샤) 2014.01.23<br/>요약, 청구항 1-13, 화학식 1 참조.</td> <td>1-13</td> </tr> <tr> <td>A</td> <td>KR 10-2010-0021908 A (삼성모바일디스플레이주식회사) 2010.02.26<br/>요약, 청구항 1-21, 화학식 1, 1a 내지 1e, 화합물 1 내지 31 참조.</td> <td>1-13</td> </tr> <tr> <td>A</td> <td>KR 10-2007-0030759 A (이데미쓰 고산 가부시키키가이샤) 2007.03.16<br/>요약, 청구항 1-11, 화학식 1, 식별번호 [0118] 내지 [0130] 참조.</td> <td>1-13</td> </tr> <tr> <td>A</td> <td>KR 10-2013-0106255 A (덕산하이메탈(주)) 2013.09.27<br/>요약, 청구항 1-15, 화학식 1 참조.</td> <td>1-13</td> </tr> </tbody> </table> |                                                                                                      |                                                                                                                             | 카테고리* | 인용문헌명 및 관련 구절(해당하는 경우)의 기재 | 관련 청구항 | A | KR 10-2014-0010133 A (미쓰비시 가가꾸 가부시키키가이샤) 2014.01.23<br>요약, 청구항 1-13, 화학식 1 참조. | 1-13 | A | KR 10-2010-0021908 A (삼성모바일디스플레이주식회사) 2010.02.26<br>요약, 청구항 1-21, 화학식 1, 1a 내지 1e, 화합물 1 내지 31 참조. | 1-13 | A | KR 10-2007-0030759 A (이데미쓰 고산 가부시키키가이샤) 2007.03.16<br>요약, 청구항 1-11, 화학식 1, 식별번호 [0118] 내지 [0130] 참조. | 1-13 | A | KR 10-2013-0106255 A (덕산하이메탈(주)) 2013.09.27<br>요약, 청구항 1-15, 화학식 1 참조. | 1-13 |
| 카테고리*                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                             | 인용문헌명 및 관련 구절(해당하는 경우)의 기재                                                                           | 관련 청구항                                                                                                                      |       |                            |        |   |                                                                                |      |   |                                                                                                    |      |   |                                                                                                      |      |   |                                                                        |      |
| A                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                 | KR 10-2014-0010133 A (미쓰비시 가가꾸 가부시키키가이샤) 2014.01.23<br>요약, 청구항 1-13, 화학식 1 참조.                       | 1-13                                                                                                                        |       |                            |        |   |                                                                                |      |   |                                                                                                    |      |   |                                                                                                      |      |   |                                                                        |      |
| A                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                 | KR 10-2010-0021908 A (삼성모바일디스플레이주식회사) 2010.02.26<br>요약, 청구항 1-21, 화학식 1, 1a 내지 1e, 화합물 1 내지 31 참조.   | 1-13                                                                                                                        |       |                            |        |   |                                                                                |      |   |                                                                                                    |      |   |                                                                                                      |      |   |                                                                        |      |
| A                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                 | KR 10-2007-0030759 A (이데미쓰 고산 가부시키키가이샤) 2007.03.16<br>요약, 청구항 1-11, 화학식 1, 식별번호 [0118] 내지 [0130] 참조. | 1-13                                                                                                                        |       |                            |        |   |                                                                                |      |   |                                                                                                    |      |   |                                                                                                      |      |   |                                                                        |      |
| A                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                 | KR 10-2013-0106255 A (덕산하이메탈(주)) 2013.09.27<br>요약, 청구항 1-15, 화학식 1 참조.                               | 1-13                                                                                                                        |       |                            |        |   |                                                                                |      |   |                                                                                                    |      |   |                                                                                                      |      |   |                                                                        |      |
| <input type="checkbox"/> 추가 문헌이 C(계속)에 기재되어 있습니다. <input checked="" type="checkbox"/> 대응특허에 관한 별지를 참조하십시오.                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                        |                                                                                                      |                                                                                                                             |       |                            |        |   |                                                                                |      |   |                                                                                                    |      |   |                                                                                                      |      |   |                                                                        |      |
| * 인용된 문헌의 특별 카테고리:<br>“A” 특별히 관련이 없는 것으로 보이는 일반적인 기술수준을 정의한 문헌<br>“E” 국제출원일보다 빠른 출원일 또는 우선일을 가지나 국제출원일 이후에 공개된 선출원 또는 특허 문헌<br>“L” 우선권 주장에 의문을 제기하는 문헌 또는 다른 인용문헌의 공개일 또는 다른 특별한 이유(이유를 명시)를 밝히기 위하여 인용된 문헌<br>“O” 구두 개시, 사용, 전시 또는 기타 수단을 언급하고 있는 문헌<br>“P” 우선일 이후에 공개되었으나 국제출원일 이전에 공개된 문헌<br>“T” 국제출원일 또는 우선일 후에 공개된 문헌으로, 출원과 상충하지 않으며 발명의 기초가 되는 원리나 이론을 이해하기 위해 인용된 문헌<br>“X” 특별한 관련이 있는 문헌. 해당 문헌 하나만으로 청구된 발명의 신규성 또는 진보성이 없는 것으로 본다.<br>“Y” 특별한 관련이 있는 문헌. 해당 문헌이 하나 이상의 다른 문헌과 조합하는 경우로 그 조합이 당업자에게 자명한 경우 청구된 발명은 진보성이 없는 것으로 본다.<br>“&” 동일한 대응특허문헌에 속하는 문헌                                                                                                                                            |                                                                                                      |                                                                                                                             |       |                            |        |   |                                                                                |      |   |                                                                                                    |      |   |                                                                                                      |      |   |                                                                        |      |
| 국제조사의 실제 완료일<br>2015년 11월 04일 (04.11.2015)                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                        |                                                                                                      | 국제조사보고서 발송일<br>2015년 11월 05일 (05.11.2015)                                                                                   |       |                            |        |   |                                                                                |      |   |                                                                                                    |      |   |                                                                                                      |      |   |                                                                        |      |
| ISA/KR의 명칭 및 우편주소<br> 대한민국 특허청<br>(35208) 대전광역시 서구 청사로 189,<br>4동 (둔산동, 정부대전청사)<br>팩스 번호 +82-42-472-7140                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                       |                                                                                                      | 심사관<br>오세주<br>전화번호 +82-42-481-5596<br> |       |                            |        |   |                                                                                |      |   |                                                                                                    |      |   |                                                                                                      |      |   |                                                                        |      |

국제조사보고서  
대응특허에 관한 정보

국제출원번호

PCT/KR2015/007572

| 국제조사보고서에서<br>인용된 특허문헌 | 공개일        | 대응특허문헌                                                                                                                             | 공개일                                                                                            |
|-----------------------|------------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|------------------------------------------------------------------------------------------------|
| KR 10-2014-0010133 A  | 2014/01/23 | CN 103459375 A<br>EP 2695882 A1<br>JP 5206907 B2<br>US 2014-0034938 A1<br>US 2015-0076479 A1<br>US 8945728 B2<br>WO 2012-137958 A1 | 2013/12/18<br>2014/02/12<br>2013/06/12<br>2014/02/06<br>2015/03/19<br>2015/02/03<br>2012/10/11 |
| KR 10-2010-0021908 A  | 2010/02/26 | CN 101656301 A<br>CN 101656301 B<br>JP 2010-045034 A<br>JP 5258702 B2<br>TW I421325 B<br>US 2010-0039026 A1<br>US 8420230 B2       | 2010/02/24<br>2014/09/17<br>2010/02/25<br>2013/08/07<br>2014/01/01<br>2010/02/18<br>2013/04/16 |
| KR 10-2007-0030759 A  | 2007/03/16 | CN 1934213 A<br>EP 1724323 A1<br>US 2007-0190355 A1<br>WO 2005-085387 A1                                                           | 2007/03/21<br>2006/11/22<br>2007/08/16<br>2005/09/15                                           |
| KR 10-2013-0106255 A  | 2013/09/27 | 없음                                                                                                                                 |                                                                                                |