

(12) 특허협력조약에 의하여 공개된 국제출원

(19) 세계지식재산권기구  
국제사무국

(43) 국제공개일  
2014년 12월 4일 (04.12.2014)



(10) 국제공개번호  
WO 2014/193033 A1

- (51) 국제특허분류:  
C07D 307/91 (2006.01) C09K 11/06 (2006.01)  
C07D 333/76 (2006.01) H01L 51/50 (2006.01)
- (21) 국제출원번호: PCT/KR2013/007135
- (22) 국제출원일: 2013년 8월 7일 (07.08.2013)
- (25) 출원언어: 한국어
- (26) 공개언어: 한국어
- (30) 우선권정보:  
10-2013-0059800 2013년 5월 27일 (27.05.2013) KR
- (71) 출원인: 제일모직 주식회사 (CHEIL INDUSTRIES INC.) [KR/KR]; 730-030 경상북도 구미시 공단동 290번지, Gyeongsangbuk-do (KR).
- (72) 발명자: 류동완 (RYU, Dong-Wan); 437-711 경기도 의왕시 고천동 332-2 제일모직 주식회사, Gyeonggi-do (KR). 허달호 (HUH, Dal-Ho); 437-711 경기도 의왕시 고천동 332-2 제일모직 주식회사, Gyeonggi-do (KR). 정성현 (JUNG, Sung-Hyun); 437-711 경기도 의왕시 고천동 332-2 제일모직 주식회사, Gyeonggi-do (KR). 홍진석 (HONG, Jin-Seok); 437-711 경기도 의왕시 고천동 332-2 제일모직 주식회사, Gyeonggi-do (KR). 김준석 (KIM, Jun-Seok); 437-711 경기도 의왕시 고천동 332-2 제일모직 주식회사, Gyeonggi-do (KR). 유동규 (RYU, Dong-Kyu); 437-711 경기도 의왕시 고천동 332-2 제일모직 주식회사, Gyeonggi-do (KR). 이승재 (LEE, Seung-Jae); 437-711 경기도 의왕시 고천동 332-2 제일모직 주식회사, Gyeonggi-do (KR). 이한일 (LEE, Han-Il); 437-711 경기도 의왕시 고천동 332-2 제일모직 주

식회사, Gyeonggi-do (KR). 장유나 (JANG, Yu-Na); 437-711 경기도 의왕시 고천동 332-2 제일모직 주식회사, Gyeonggi-do (KR). 조영경 (JO, Young-Kyoung); 437-711 경기도 의왕시 고천동 332-2 제일모직 주식회사, Gyeonggi-do (KR). 채미영 (CHAE, Mi-Young); 437-711 경기도 의왕시 고천동 332-2 제일모직 주식회사, Gyeonggi-do (KR).

(74) 대리인: 팬코리아특허법인 (PANKOREA PATENT AND LAW FIRM); 135-080 서울시 강남구 역삼동 823-16 13층, Seoul (KR).

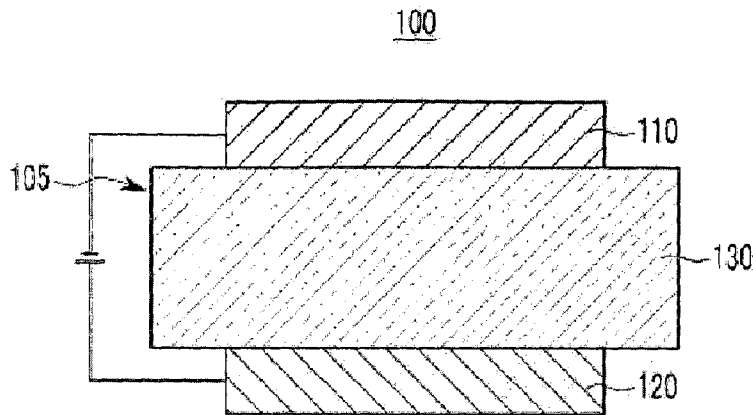
(81) 지정국 (별도의 표시가 없는 한, 가능한 모든 종류의 국내 권리의 보호를 위하여): AE, AG, AL, AM, AO, AT, AU, AZ, BA, BB, BG, BH, BN, BR, BW, BY, BZ, CA, CH, CL, CN, CO, CR, CU, CZ, DE, DK, DM, DO, DZ, EC, EE, EG, ES, FI, GB, GD, GE, GH, GM, GT, HN, HR, HU, ID, IL, IN, IS, JP, KE, KG, KN, KP, KZ, LA, LC, LK, LR, LS, LT, LU, LY, MA, MD, ME, MG, MK, MN, MW, MX, MY, MZ, NA, NG, NI, NO, NZ, OM, PA, PE, PG, PH, PL, PT, QA, RO, RS, RU, RW, 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, 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: COMPOUND, ORGANIC LIGHT EMITTING ELEMENT COMPRISING SAME, AND DISPLAY DEVICE COMPRISING ORGANIC LIGHT EMITTING ELEMENT

(54) 발명의 명칭 : 화합물, 이를 포함하는 유기발광소자 및 상기 유기발광소자를 포함하는 표시장치



(57) Abstract: The present invention relates to a compound, an organic light emitting element comprising the same, and a display device comprising the organic light emitting element. The present invention provides a compound for an organic optoelectronic element, represented by formula 1.

(57) 요약서: 화합물, 이를 포함하는 유기발광소자 및 상기 유기발광소자를 포함하는 표시장치에 관한 것으로, 화학식 1로 표시되는 유기광전자소자용 화합물을 제공한다.

WO 2014/193033 A1

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

— 국제조사보고서와 함께 (조약 제 21 조(3))

## 【명세서】

## 【발명의 명칭】

화합물, 이를 포함하는 유기발광소자 및 상기 유기발광소자를 포함하는 표시장치

## 5 【기술분야】

화합물, 이를 포함하는 유기발광소자 및 상기 유기발광소자를 포함하는 표시장치에 관한 것이다.

## 【배경 기술】

유기광전자소자(organic optoelectric device)라 함은 정공 또는 전자를 이용한  
10 전극과 유기물 사이에서의 전하 교류를 필요로 하는 소자를 의미한다.

유기광전자소자는 동작 원리에 따라 하기와 같이 크게 두 가지로 나눌 수 있다. 첫째는 외부의 광원으로부터 소자로 유입된 광자에 의하여 유기물층에서 엑시톤(exciton)이 형성되고 이 엑시톤이 전자와 정공으로 분리되고, 이 전자와 정공이 각각 다른 전극으로 전달되어

15 전류원(전압원)으로 사용되는 형태의 전자소자이다.

둘째는 2 개 이상의 전극에 전압 또는 전류를 가하여 전극과 계면을 이루는 유기물 반도체에 정공 또는 전자를 주입하고, 주입된 전자와 정공에 의하여 동작하는 형태의 전자소자이다.

유기광전자소자의 예로는 유기 광전 소자, 유기발광소자, 유기태양전지,  
20 유기감광체 드럼(organic photo conductor drum), 유기트랜지스터 등이 있으며, 이들은 모두 소자의 구동을 위하여 정공의 주입 또는 수송 물질, 전자의 주입 또는 수송 물질, 또는 발광 물질을 필요로 한다.

특히, 유기발광소자(organic light emitting diode, OLED)는 최근 평판 디스플레이(flat panel display)의 수요가 증가함에 따라 주목받고 있다.  
25 일반적으로 유기 발광 현상이란 유기 물질을 이용하여 전기에너지를 빛에너지로 전환시켜주는 현상을 말한다.

이러한 유기발광소자는 유기발광재료에 전류를 가하여 전기에너지를 빛으로 전환시키는 소자로서 통상 양극(anode)과 음극(cathode) 사이에 기능성 유기물 층이 삽입된 구조로 이루어져 있다. 여기서 유기물층은

유기발광소자의 효율과 안정성을 높이기 위하여 각기 다른 물질로 구성된 다층의 구조로 이루어진 경우가 많으며, 예컨대 정공주입층, 정공수송층, 발광층, 전자수송층, 전자주입층 등으로 이루어질 수 있다.

- 5 이러한 유기발광소자의 구조에서 두 전극 사이에 전압을 걸어주게 되면 양극에서는 정공(hole)이, 음극에서는 전자(electron)가 유기물층에 주입되게 되고, 주입된 정공과 전자가 만나 재결합(recombination)에 의해 에너지가 높은 여기자를 형성하게 된다. 이때 형성된 여기자가 다시 바닥상태(ground state)로 이동하면서 특정한 파장을 갖는 빛이 발생하게 된다.

- 10 최근에는, 형광 발광물질뿐 아니라 인광 발광물질도 유기발광소자의 발광물질로 사용될 수 있음이 알려졌으며, 이러한 인광 발광은 바닥상태에서 여기상태(excited state)로 전자가 전이한 후, 계간 전이(intersystem crossing)를 통해 단일항 여기자가 삼중항 여기자로 비발광 전이된 다음, 삼중항 여기자가 바닥상태로 전이하면서 발광하는 메카니즘으로 이루어진다.

- 15 상기한 바와 같이 유기발광소자에서 유기물층으로 사용되는 재료는 기능에 따라, 발광 재료와 전하 수송 재료, 예컨대 정공주입 재료, 정공수송 재료, 전자수송 재료, 전자주입 재료 등으로 분류될 수 있다.

또한, 발광 재료는 발광색에 따라 청색, 녹색, 적색 발광재료와 보다 나은 천연색을 구현하기 위해 필요한 노란색 및 주황색 발광 재료로 구분될 수 있다.

- 20 한편, 발광 재료로서 하나의 물질만 사용하는 경우 분자간 상호 작용에 의하여 최대 발광 파장이 장파장으로 이동하고 색순도가 떨어지거나 발광 감쇄 효과로 소자의 효율이 감소되는 문제가 발생하므로, 색순도의 증가와 에너지 전이를 통한 발광 효율과 안정성을 증가시키기 위하여 발광 재료로서 호스트/도펀트 계를 사용할 수 있다.

- 25 유기발광소자가 전술한 우수한 특징들을 충분히 발휘하기 위해서는 소자 내 유기물층을 이루는 물질, 예컨대 정공주입 물질, 정공수송 물질, 발광 물질, 전자수송 물질, 전자주입 물질, 발광 재료 중 호스트 및/또는 도펀트 등이 안정하고 효율적인 재료에 의하여 뒷받침되는 것이 선행되어야 하며, 아직까지 안정하고 효율적인 유기발광소자용 유기물층 재료의 개발이

충분히 이루어지지 않은 상태이며, 따라서 새로운 재료의 개발이 계속 요구되고 있다. 이와 같은 재료 개발의 필요성은 전술한 다른 유기발광소자에서도 마찬가지이다.

또한, 저분자 유기발광소자는 진공 증착법에 의해 박막의 형태로 소자를  
5 제조하므로 효율 및 수명성능이 좋으며, 고분자 유기발광소자는 잉크젯(inkjet) 또는 스핀코팅(spin coating)법을 사용하여 초기 투자비가 적고 대면적화가 유리한 장점이 있다.

저분자 유기발광소자 및 고분자 유기발광소자는 모두 자체발광, 고속응답,  
광시야각, 초박형, 고화질, 내구성, 넓은 구동온도범위 등의 장점을 가지고  
10 있어 차세대 디스플레이로 주목을 받고 있다. 특히 기존의 LCD(liquid crystal display)와 비교하여 자체발광형으로서 어두운 곳이나 외부의 빛이 들어와도 시안성이 좋으며, 백라이트가 필요 없어 LCD의 1/3수준으로 두께 및 무게를 줄일 수 있다.

또한, 응답속도가 LCD에 비해 1000배 이상 빠른 마이크로 초 단위여서  
15 잔상이 없는 완벽한 동영상 구현할 수 있다. 따라서, 최근 본격적인 멀티미디어 시대에 맞춰 최적의 디스플레이로 각광받을 것으로 기대되며, 이러한 장점을 바탕으로 1980년대 후반 최초 개발 이후 효율 80배, 수명 100배 이상에 이르는 급격한 기술발전을 이루어 왔고, 최근에는 40인치 유기발광소자 패널이 발표되는 등 대형화가 급속히 진행되고 있다.

20 대형화를 위해서는 발광 효율의 증대 및 소자의 수명 향상이 수반되어야 한다. 이를 위해 안정하고 효율적인 유기발광소자용 유기물층 재료의 개발이 필요하다.

#### 【발명의 상세한 설명】

#### 【기술적 과제】

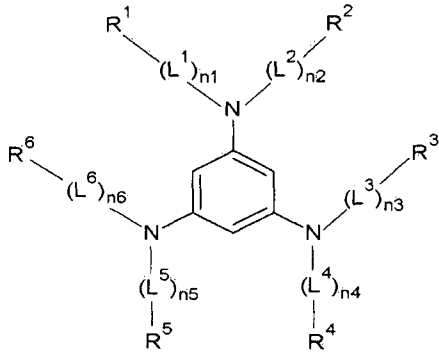
25 고효율, 장수명 등의 특성을 가지는 유기발광소자를 제공할 수 있는 화합물을 제공하는 것이다.

상기 화합물을 포함하는 유기발광소자 및 상기 유기발광소자를 포함하는 표시장치를 제공하는 것이다.

【기술적 해결방법】

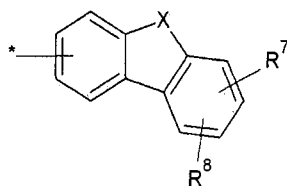
본 발명의 일 구현예에서는, 하기 화학식 1로 표시되는 화합물을 제공한다.

[화학식 1]



- 5    상기 화학식 1에서, L<sup>1</sup> 내지 L<sup>6</sup>는 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴렌기, 또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴렌기이나 치환 또는 비치환된 플루오레닐렌기는 아니며, n<sub>1</sub> 내지 n<sub>6</sub>는 서로 독립적으로, 0 내지 3 중 어느 하나의 정수이고, R<sup>1</sup> 내지 R<sup>6</sup>는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴기 또는 치환 또는 비치환된 실릴기이며, 상기 R<sup>1</sup> 내지 R<sup>6</sup> 중 적어도 하나는 하기 화학식 2로 표시되는 치환기이다.

[화학식 2]



- 15    상기 화학식 2에서, X는 O 또는 S이고, R<sup>7</sup> 또는 R<sup>8</sup>은 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 및 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴기로 이루어진 군에서 선택되고, \*는 탄소 원자 또는 탄소 이외의 원자와 연결되는 부분을 의미한다.

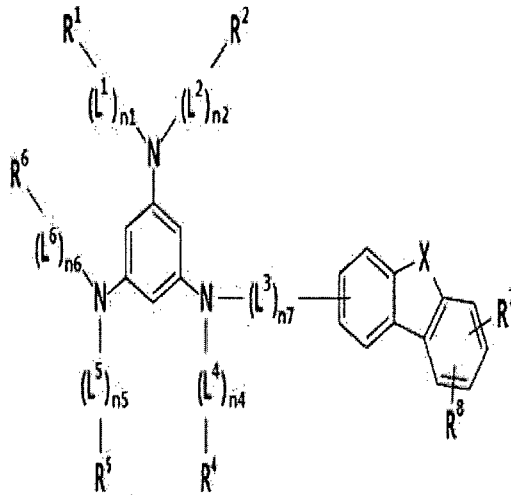
20    상기 화학식 1에서, R<sup>1</sup> 및 R<sup>2</sup>는 서로 독립적으로 존재하거나 서로 축합되어

축합 고리를 형성하고, R<sup>3</sup> 및 R<sup>4</sup>는 서로 독립적으로 존재하거나 서로 축합되어 축합 고리를 형성하고, R<sup>5</sup> 및 R<sup>6</sup>는 서로 독립적으로 존재하거나 서로 축합되어 축합 고리를 형성하나, R<sup>1</sup> 내지 R<sup>6</sup> 중 어느 하나가 치환 또는 비치환된 플루오레닐기인 경우, 상기 치환 또는 비치환된 플루오레닐기는

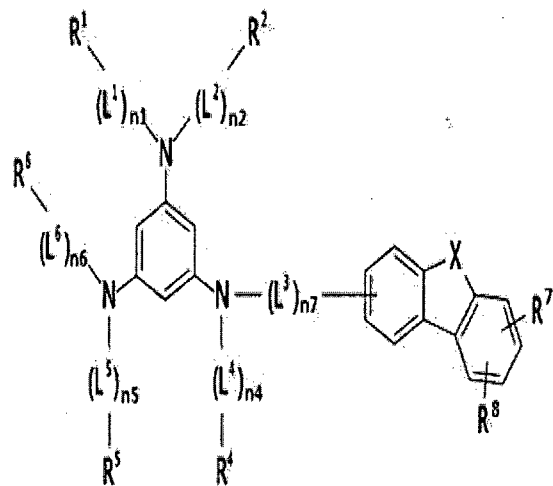
5 상기 화학식 1의 "N"에 직접 결합되지 않는다.

상기 화학식 1은 하기 화학식 3 내지 화학식 29 중 어느 하나로 표시될 수 있다.

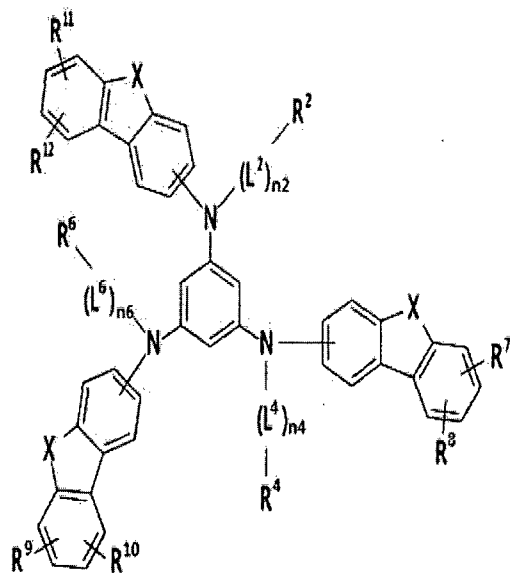
[화학식 3]



[화학식 4]

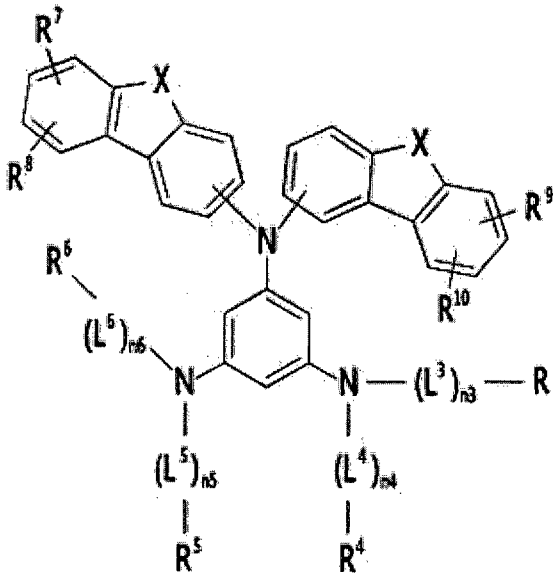


10 [화학식 5]

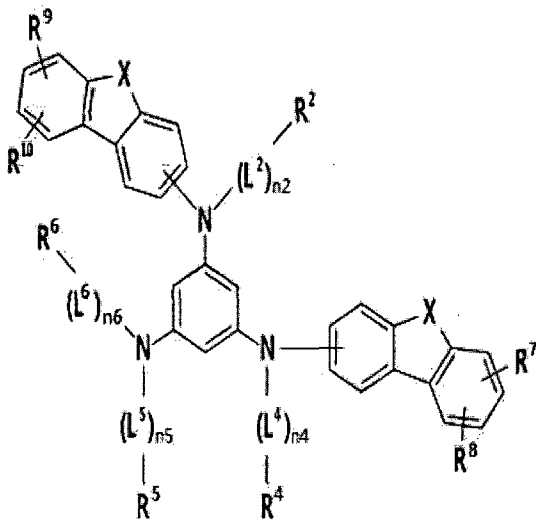


[화학식 7]

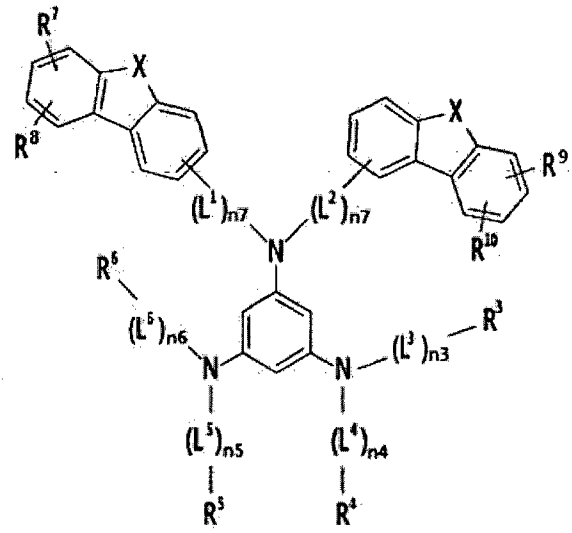
[화학식 6]



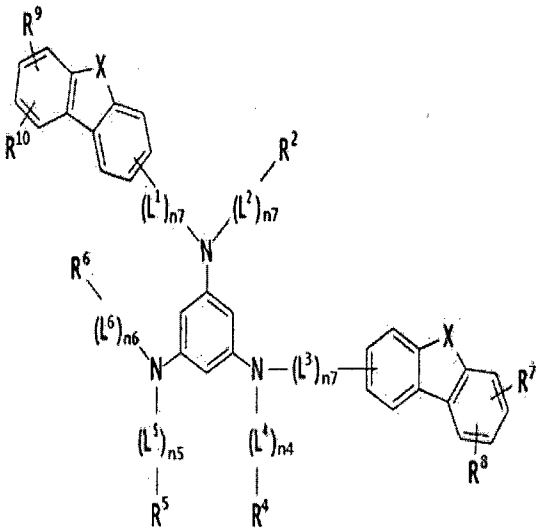
[화학식 8]



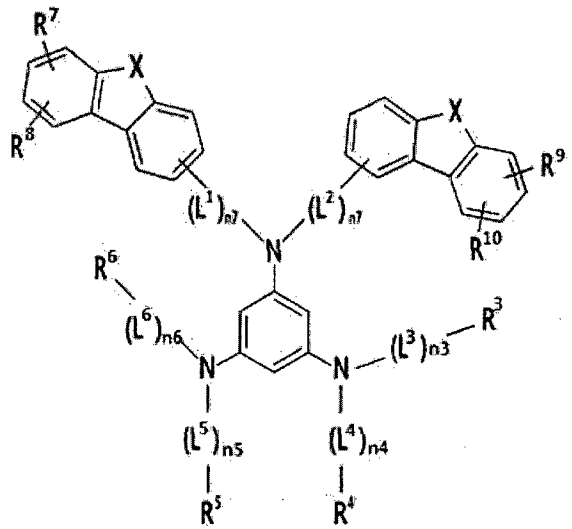
[화학식 9]



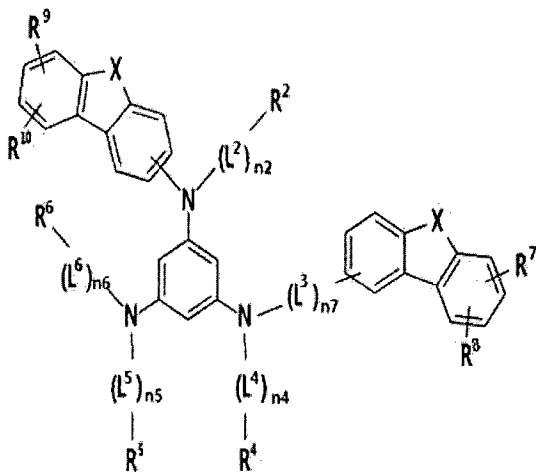
[화학식 10]



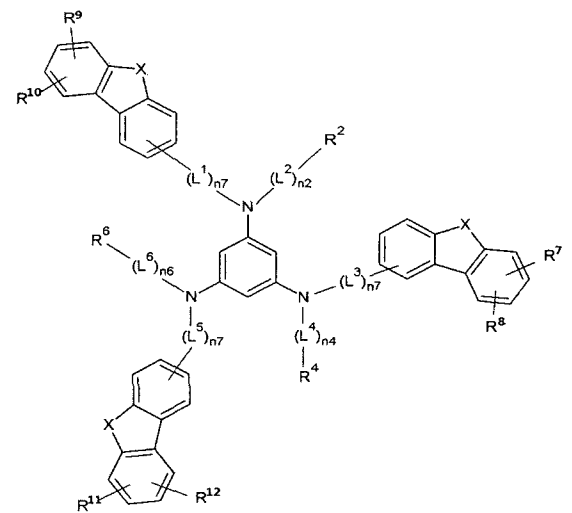
[화학식 11]



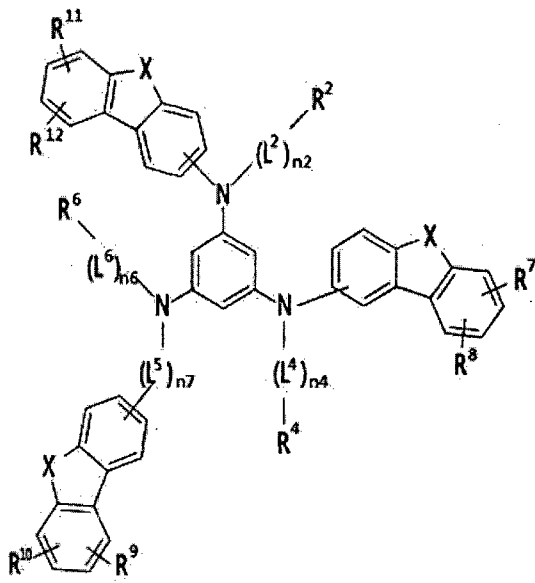
[화학식 12]



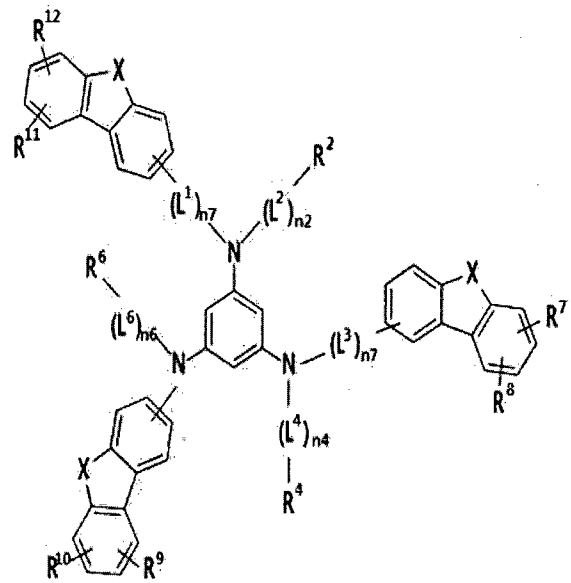
[화학식 13]



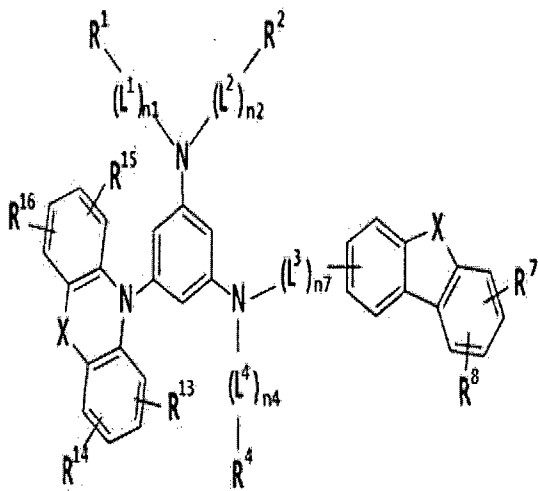
[화학식 14]



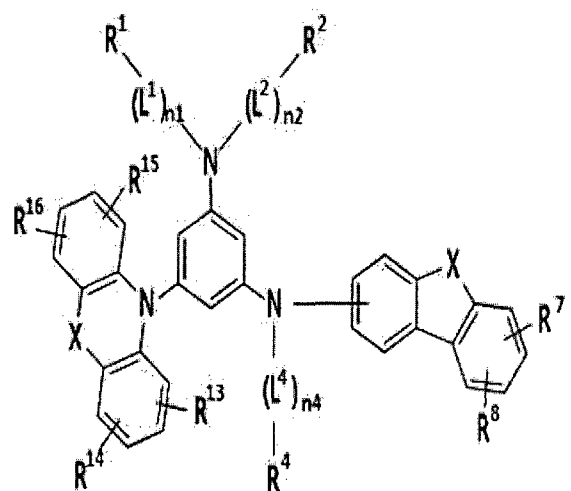
[화학식 15]



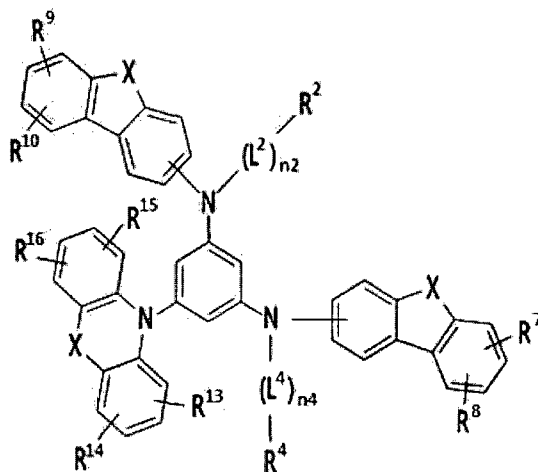
[화학식 16]



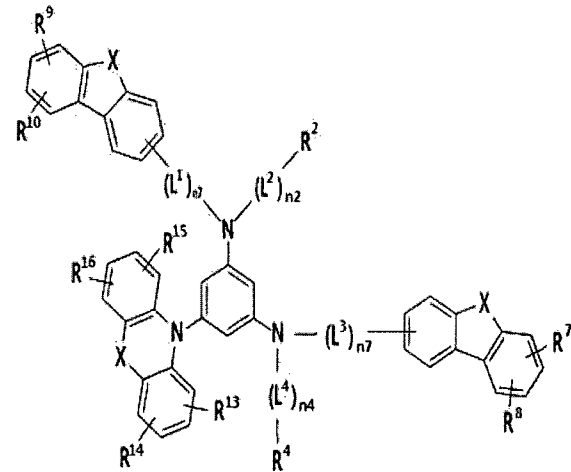
[화학식 17]



[화학식 18]

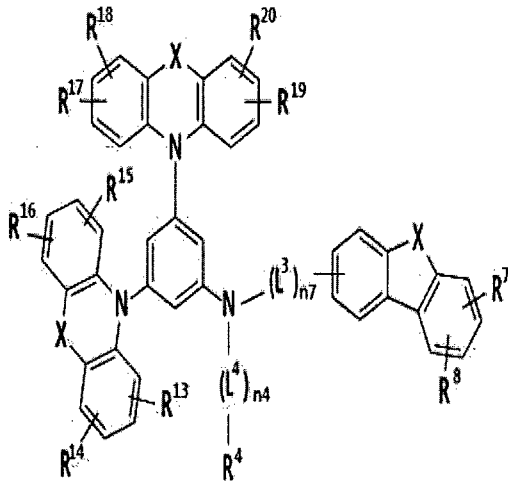


[화학식 19]

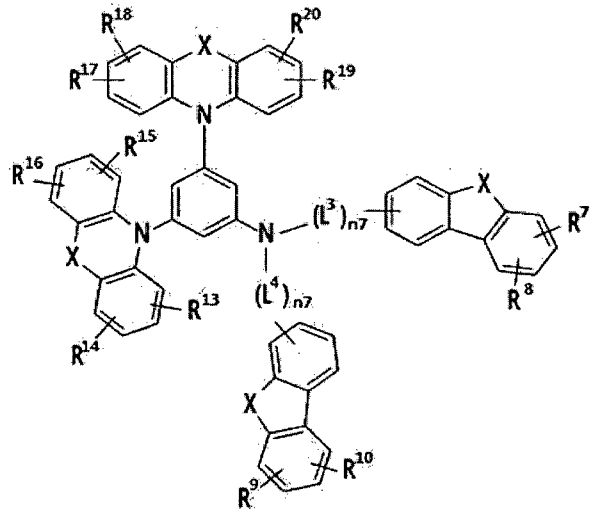


[화학식 20]

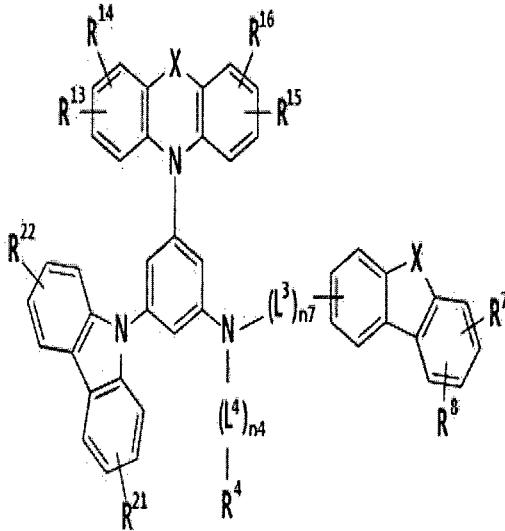
5



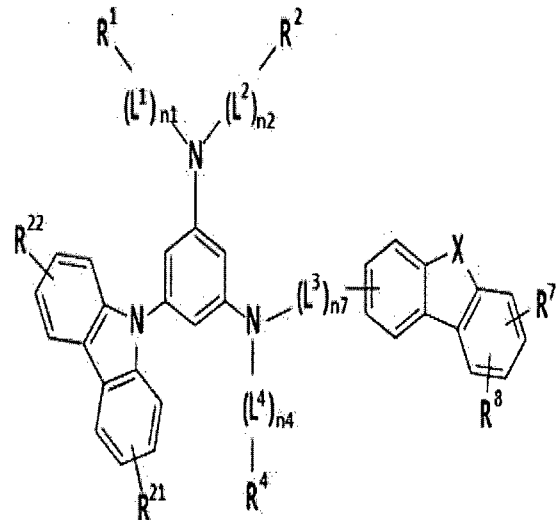
[화학식 21]



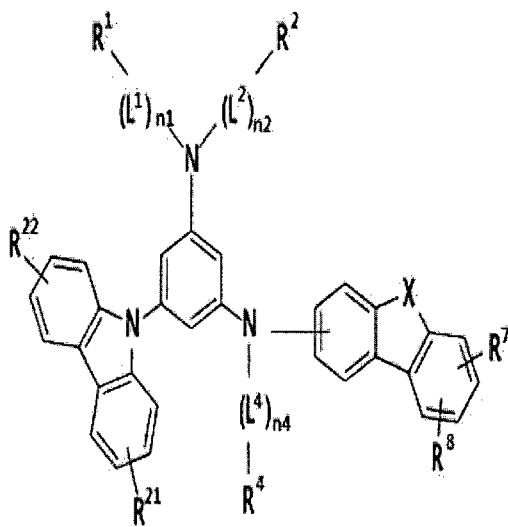
[화학식 22]



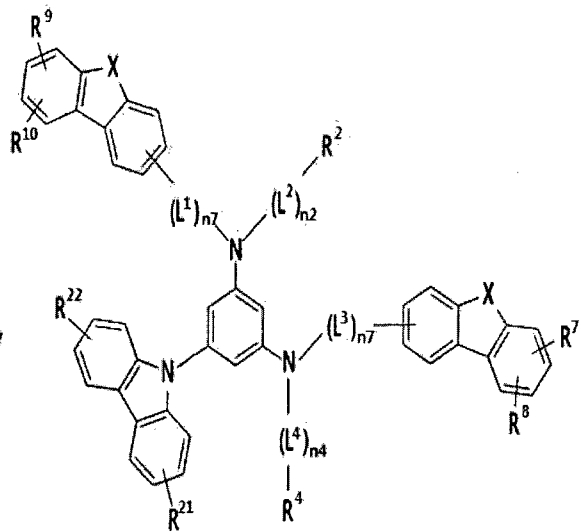
[화학식 23]



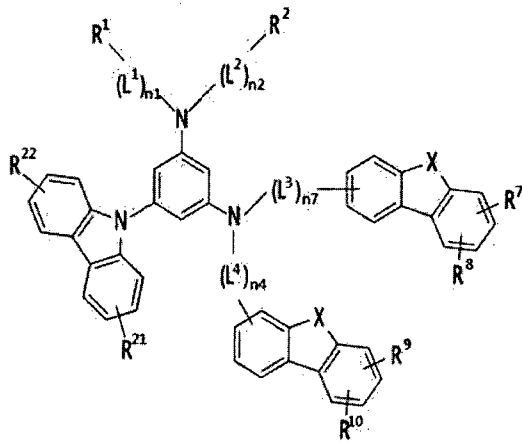
[화학식 24]



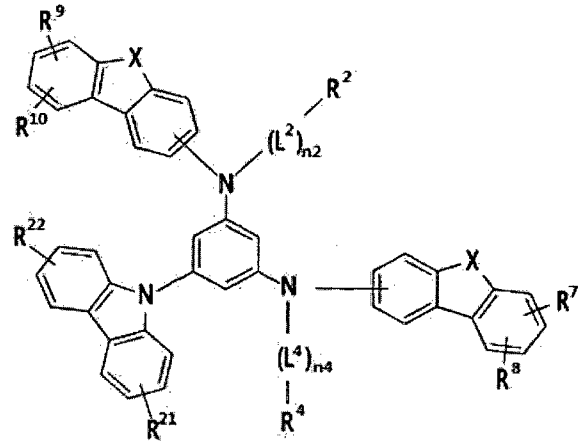
[화학식 25]



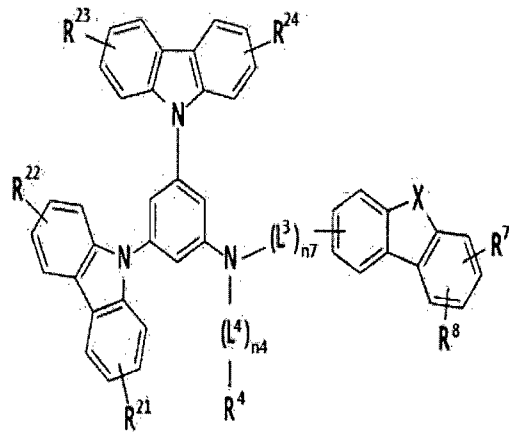
[화학식 26]



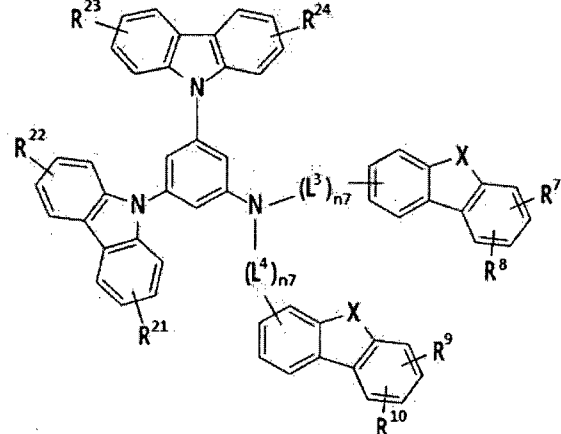
[화학식 27]



[화학식 28]



[화학식 29]



5

상기 화학식 3 내지 화학식 29에서, L<sup>1</sup> 내지 L<sup>6</sup>는 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C<sub>6</sub> 내지 C<sub>30</sub> 아릴렌기, 또는 치환 또는 비치환된 C<sub>2</sub> 내지 C<sub>30</sub> 헤테로아릴렌기일 수 있으나, 치환 또는 비치환된 플루오레닐렌기는  
10 아니고, n<sub>1</sub> 내지 n<sub>6</sub>는 서로 독립적으로, 0 내지 3 중 어느 하나의 정수일 수

있고, n7은 1 내지 3 중 어느 하나의 정수일 수 있고, R<sup>1</sup> 내지 R<sup>6</sup>는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴기, 및 치환 또는 비치환된 실릴기로 이루어진 군에서 선택될 수 있고, R<sup>1</sup> 내지 R<sup>6</sup> 중 어느 하나가 치환 또는 비치환된 플루오레닐기인 경우, 상기 치환 또는 비치환된 플루오레닐기는 상기 화학식 1의 "N"에 직접 결합되지 않으며, X는 O 또는 S일 수 있고, R<sup>7</sup> 내지 R<sup>24</sup>는 서로 독립적으로, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 및 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴기로 이루어진 군에서 선택될 수 있다.

상기 화학식 3의 L<sup>3</sup>, 상기 화학식 8의 L<sup>1</sup> 및 L<sup>2</sup>, 상기 화학식 9의 L<sup>1</sup> 및 L<sup>3</sup>, 상기 화학식 10의 L<sup>2</sup>, 상기 화학식 11의 L<sup>3</sup>, 상기 화학식 12의 L<sup>1</sup>, L<sup>3</sup>, 및 L<sup>5</sup>, 상기 화학식 13의 L<sup>5</sup>, 상기 화학식 14의 L<sup>1</sup> 및 L<sup>3</sup>, 상기 화학식 15의 L<sup>3</sup>, 상기 화학식 18의 L<sup>1</sup> 및 L<sup>3</sup>, 상기 화학식 19의 L<sup>3</sup>, 상기 화학식 20의 L<sup>3</sup> 및 L<sup>4</sup>, 상기 화학식 21의 L<sup>3</sup>, 상기 화학식 22의 L<sup>3</sup>, 상기 화학식 24의 L<sup>1</sup> 및 L<sup>3</sup>, 상기 화학식 25의 L<sup>3</sup> 및 L<sup>4</sup>, 상기 화학식 27의 L<sup>3</sup>, 및 상기 화학식 28의 L<sup>3</sup> 및 L<sup>4</sup>는 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴렌기, 또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴렌기일 수 있고, 치환 또는 비치환된 플루오레닐렌기는 아니다.

상기 L<sup>1</sup> 내지 L<sup>6</sup>는 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴렌기일 수 있고, 치환 또는 비치환된 플루오레닐렌기는 아니다.

본 발명의 다른 일 구현예에서는, 양극, 음극 및 상기 양극과 음극 사이에 개재되는 한 층 이상의 유기박막층을 포함하고, 상기 유기박막층 중 적어도 어느 한 층은 전술한 본 발명의 일 구현예에 따른 화합물을 포함하는 것인 유기발광소자를 제공한다.

상기 유기박막층은 전자주입층, 전자수송층, 정공주입층, 정공수송층, 보조 정공수송층, 또는 발광층일 수 있다.

상기 유기박막층은 정공주입층 또는 정공수송층일 수 있다.

상기 유기박막층은 보조 정공수송층일 수 있다.

상기 유기박막층은 발광층일 수 있다.

상기 화합물은 발광층 내 호스트로 이용될 수 있다.

본 발명의 또 다른 일 구현예에서는, 전술한 본 발명의 일 구현예인

5 유기발광소자를 포함하는 표시장치를 제공한다.

**【유리한 효과】**

본 발명의 일 구현예에 따른 화합물을 포함하는 유기광전자소자는 우수한 전기화학적 및 열적 안정성을 가지고 수명 특성이 우수하며, 낮은 구동전압에서도 높은 발광효율을 가질 수 있다. 또한, 상기 화합물은 용액  
10 공정에 적합할 수 있다.

**【도면의 간단한 설명】**

도 1 및 도 2는 본 발명의 일 구현예에 따른 유기발광소자에 대한 다양한 구현예들을 나타내는 단면도이다.

도 3은 실시예 1에 따른 화합물인 A-34에 대한 1H-NMR 결과이다.

15 도 4는 실시예 1에 따른 화합물인 A-34에 대한 PL(photoluminescence) 파장 측정 결과이다.

**<도면의 주요 부분에 대한 부호의 설명>**

- 100, 200 : 유기발광소자    110 : 음극
- 120 : 양극                    105 : 유기박막층
- 20 130 : 발광층                140 : 정공 수송층
- 230 : 발광층 + 전자 수송층

**【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  
25 청구범위의 범주에 의해 정의될 뿐이다.

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, C6 내지 C30 아릴기, C1 내지 C20 알콕시기, 플루오로기, 트리플루오로메틸기 등의 C1 내지 C10 트리플루오로알킬기 또는 시아노기로 치환된 것을 의미한다.

또한 상기 치환된 할로젠기, 히드록시기, 아미노기, 치환 또는 비치환된 C1  
 5 내지 C20 아민기, 니트로기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C40 실릴기, C1 내지 C30 알킬기, C1 내지 C10 알킬실릴기, C3 내지 C30 시클로알킬기, C6 내지 C30 아릴기, C1 내지 C20 알콕시기, 플루오로기, 트리플루오로메틸기 등의 C1 내지 C10 트리플루오로알킬기 또는 시아노기 중 인접한 두 개의 치환기가 융합되어 고리를 형성할 수도 있다. 구체적으로, 상기 치환된 C6  
 10 내지 C30 아릴기는 인접한 또다른 치환된 C6 내지 C30 아릴기와 융합되어 치환 또는 비치환된 플루오렌 고리를 형성할 수 있다.

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

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

상기 알킬기는 C1 내지 C20인 알킬기일 수 있다. 보다 구체적으로 알킬기는 C1 내지 C10 알킬기 또는 C1 내지 C6 알킬기일 수도 있다. 예를  
 20 들어, C1 내지 C4 알킬기는 알킬쇄에 1 내지 4 개의 탄소원자가 포함되는 것을 의미하며, 메틸, 에틸, 프로필, 이소-프로필, n-부틸, 이소-부틸, sec-부틸 및 t-부틸로 이루어진 군에서 선택됨을 나타낸다.

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

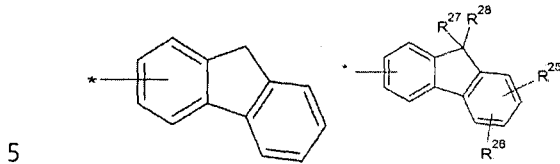
본 명세서에서 "아릴(aryl)기"는 환형인 치환기의 모든 원소가 p-오비탈을 가지고 있으며, 이들 p-오비탈이 공액(conjugation)을 형성하고 있는 치환기를 의미하고, 모노시클릭 또는 융합 고리 폴리시클릭(즉, 탄소원자들의 인접한 쌍들을 나눠 가지는 고리) 작용기를 포함한다.

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

- 5 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 바이페닐일기, 치환 또는 비치환된
- 10 p-터페닐기, 치환 또는 비치환된 m-터페닐기, 치환 또는 비치환된 크리세닐기, 치환 또는 비치환된 트리페닐레닐기, 치환 또는 비치환된 페릴레닐기, 치환 또는 비치환된 인데닐기, 치환 또는 비치환된 퓨라닐기, 치환 또는 비치환된 티오펜일기, 치환 또는 비치환된 피롤릴기, 치환 또는 비치환된 피라졸릴기, 치환 또는 비치환된 이미다졸일기, 치환 또는 비치환된
- 15 트리아졸일기, 치환 또는 비치환된 옥사졸일기, 치환 또는 비치환된 티아졸일기, 치환 또는 비치환된 옥사디아졸일기, 치환 또는 비치환된 티아디아졸일기, 치환 또는 비치환된 피리딜기, 치환 또는 비치환된 피리미디닐기, 치환 또는 비치환된 피라지닐기, 치환 또는 비치환된 트리아지닐기, 치환 또는 비치환된 벤조퓨라닐기, 치환 또는
- 20 비치환된 벤조티오펜일기, 치환 또는 비치환된 벤즈이미다졸일기, 치환 또는 비치환된 인돌일기, 치환 또는 비치환된 퀴놀리닐기, 치환 또는 비치환된 이소퀴놀리닐기, 치환 또는 비치환된 퀴나졸리닐기, 치환 또는 비치환된 퀴녹살리닐기, 치환 또는 비치환된 나프티리디닐기, 치환 또는 비치환된 벤즈옥사진일기, 치환 또는 비치환된 벤즈티아진일기, 치환 또는 비치환된
- 25 아크리디닐기, 치환 또는 비치환된 페나진일기, 치환 또는 비치환된 페노티아진일기, 치환 또는 비치환된 페녹사진일기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐기, 치환 또는 비치환된 카바졸일기, 치환 또는 비치환된 디벤조퓨라닐기, 치환 또는 비치환된 디벤조티오펜일기, 또는 이들의 조합일 수 있으나, 이에 제한되지는 않는다.

보다 구체적인 예를 들어, 상기 치환된 C6 내지 C30 아릴기에 포함되는 치환 또는 비치환된 플루오레닐기는 하기 화학식 30 또는 화학식 31일 수 있다.

[화학식 30]      [화학식 31]



상기 화학식 30 및 화학식 31에서, R<sup>25</sup> 내지 R<sup>28</sup>은 서로 독립적으로, 수소, 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, C6 내지 C30 아릴기, C1 내지 C20 알콕시기, 플루오로기, 트리플루오로메틸기 등의 C1 내지 C10 트리플루오로알킬기 또는 시아노기이며, \*는 탄소 원자 또는 탄소 이외의 원자와 연결되는 부분을 의미한다.

10

본 명세서에서, 정공 특성이란, HOMO 준위를 따라 전도 특성을 가져 양극에서 형성된 정공의 발광층으로의 주입 및 발광층에서의 이동을 용이하게 하는 특성을 의미한다. 보다 구체적으로, 전자를 밀어내는 특성과도 유사할 수 있다.

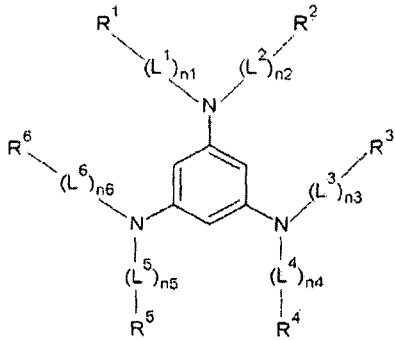
15

또한 전자 특성이란, LUMO 준위를 따라 전도 특성을 가져 음극에서 형성된 전자의 발광층으로의 주입 및 발광층에서의 이동을 용이하게 하는 특성을 의미한다. 보다 구체적으로 전자를 당기는 특성과도 유사할 수 있다.

20

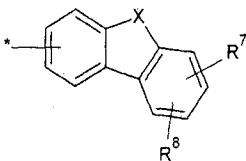
본 발명의 일 구현예에서는, 하기 화학식 1로 표시되는 화합물을 제공할 수 있다.

[화학식 1]



상기 화학식 1에서, L<sup>1</sup> 내지 L<sup>6</sup>는 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴렌기, 또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴렌기이나, 치환 또는 비치환된 플루오레닐렌기는 아니며,  
 5 n1 내지 n6는 서로 독립적으로, 0 내지 3 중 어느 하나의 정수이고,  
 R<sup>1</sup> 내지 R<sup>6</sup>는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 실릴기이며, 상기 R<sup>1</sup> 내지 R<sup>6</sup> 중  
 10 적어도 하나는 하기 화학식 2로 표시되는 치환기이다.

[화학식 2]



상기 화학식 2에서, X는 O 또는 S이고, R<sup>7</sup> 또는 R<sup>8</sup>은 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴기이고, \*는 탄소 원자 또는 탄소 이외의 원자와 연결되는 부분을 의미한다.  
 15

상기 화학식 1에서, R<sup>1</sup> 및 R<sup>2</sup>는 서로 독립적으로 존재하거나 서로 축합되어 축합 고리를 형성하고, R<sup>3</sup> 및 R<sup>4</sup>는 서로 독립적으로 존재하거나 서로 축합되어 축합 고리를 형성하고, R<sup>5</sup> 및 R<sup>6</sup>는 서로 독립적으로 존재하거나  
 20 서로 축합되어 축합 고리를 형성한다. 단, R<sup>1</sup> 내지 R<sup>6</sup> 중 어느 하나가 치환 또는 비치환된 플루오레닐기인 경우, 상기 치환 또는 비치환된

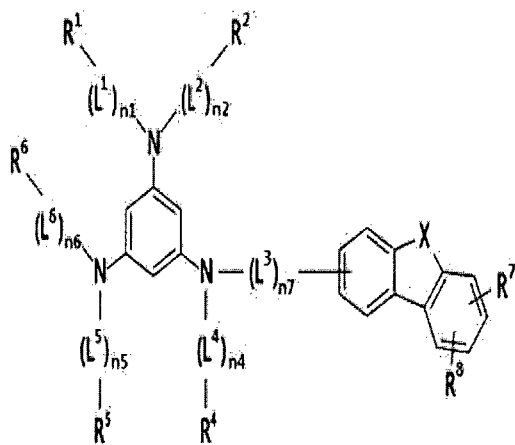
플루오레닐기는 상기 화학식 1의 "N"에 직접 결합되지 않는다.

상기 본 발명의 일 구현예에 따른 화합물은 R<sup>1</sup> 내지 R<sup>6</sup> 중 적어도 하나가 상기 화학식 2로 표시되는 치환기를 가짐으로써 재료의 유리 전이 온도가 상승하여 열안정성이 향상될 수 있으며, 정공 수송 능력이 향상되어 유기 발광 소자의 정공 주입 및 수송층으로 사용할 경우 구동 전압, 효율 및 수명을 향상시킬 수 있다.

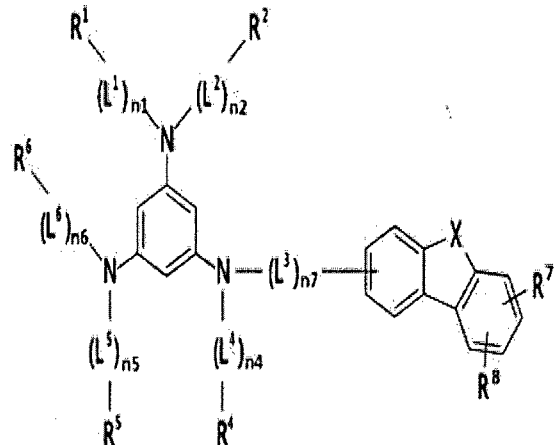
또한, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 다양한 치환기를 도입함으로써 다양한 에너지 밴드 갭을 갖는 화합물이 될 수 있다.

보다 구체적으로, 상기 화학식 1은 하기 화학식 3 내지 화학식 29 중 어느 하나로 표시될 수 있다.

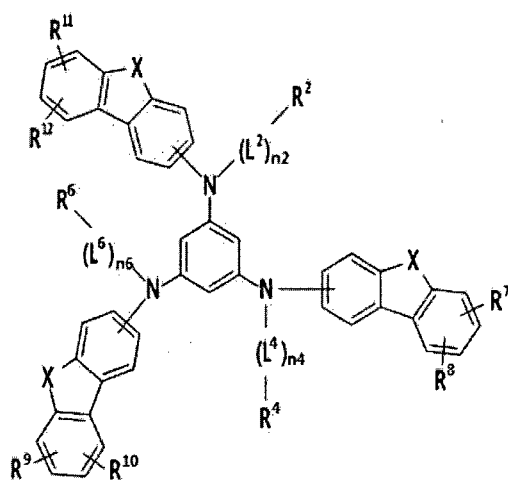
[화학식 3]



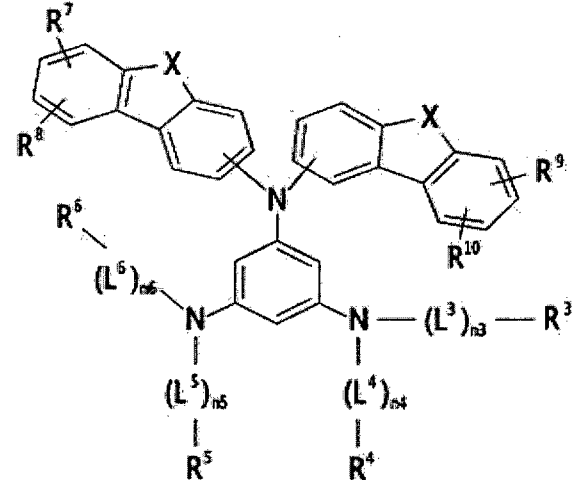
[화학식 4]



[화학식 5]

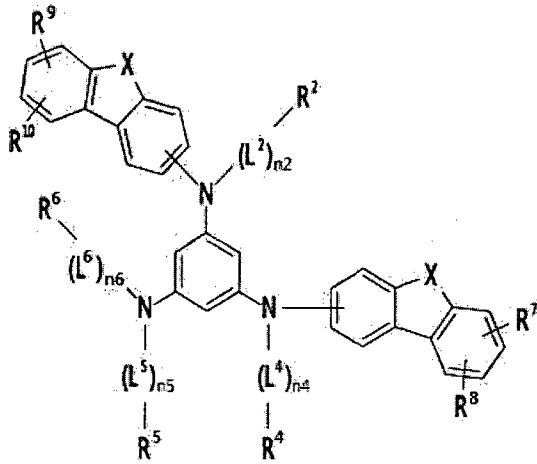


[화학식 6]

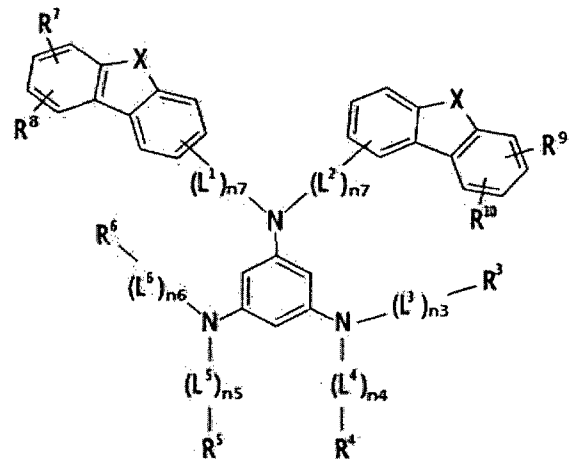


15 [화학식 7]

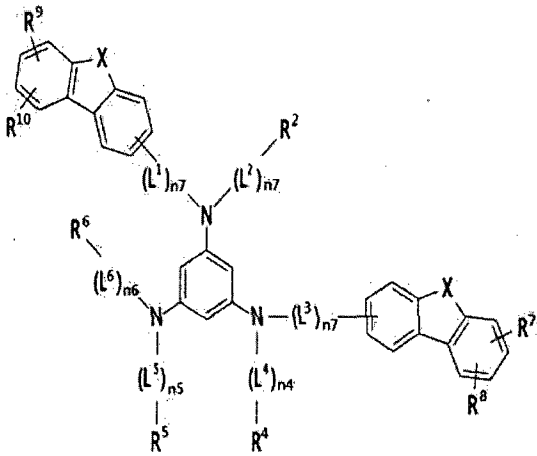
[화학식 8]



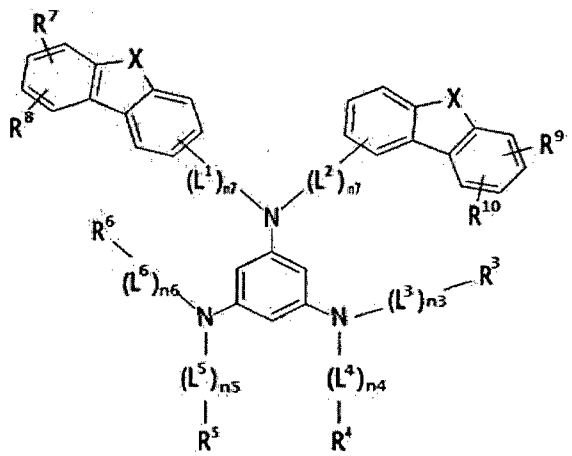
[화학식 9]



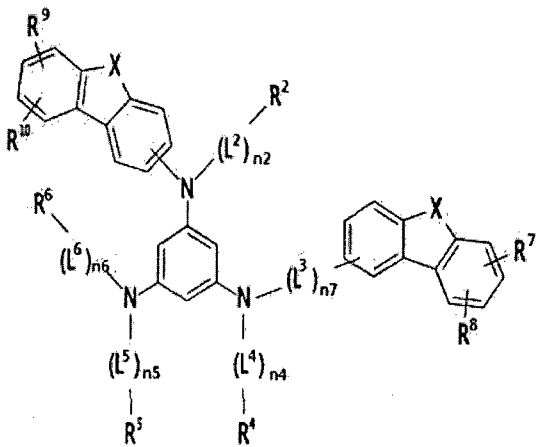
[화학식 10]



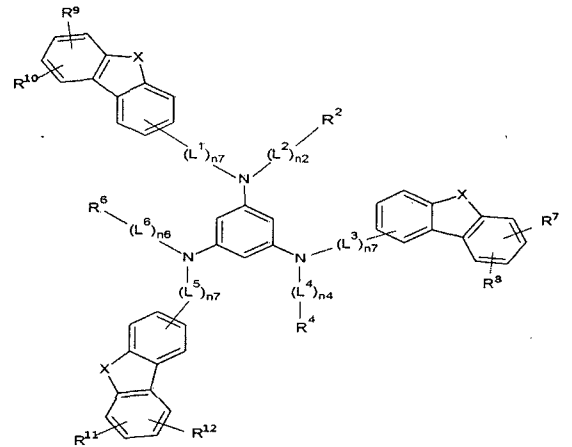
[화학식 11]



[화학식 12]

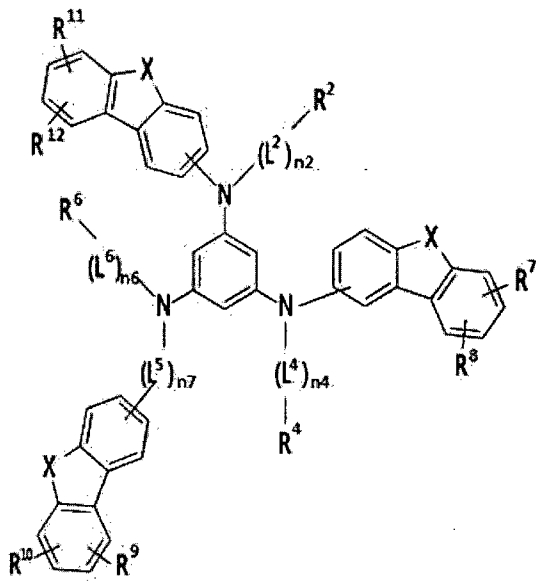


[화학식 13]

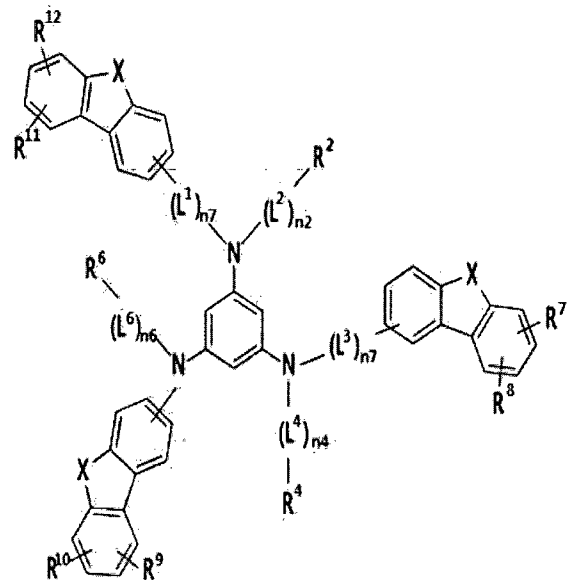


[화학식 14]

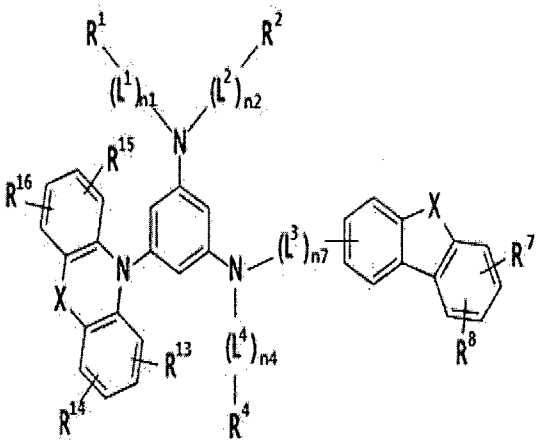
5



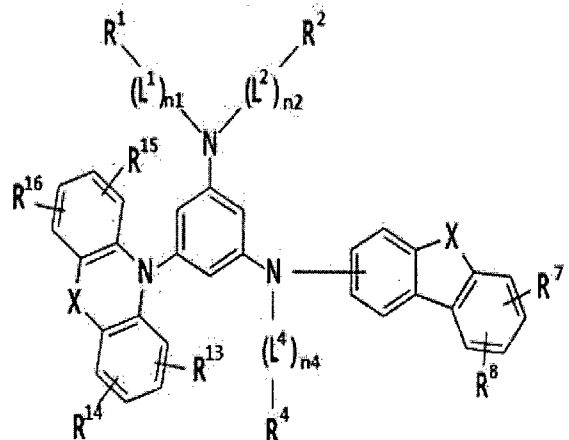
[화학식 15]



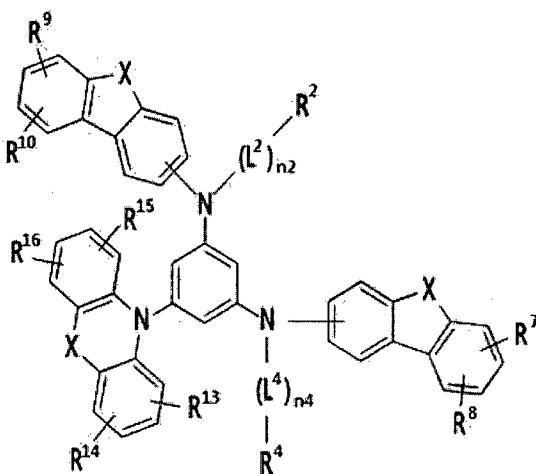
[화학식 16]



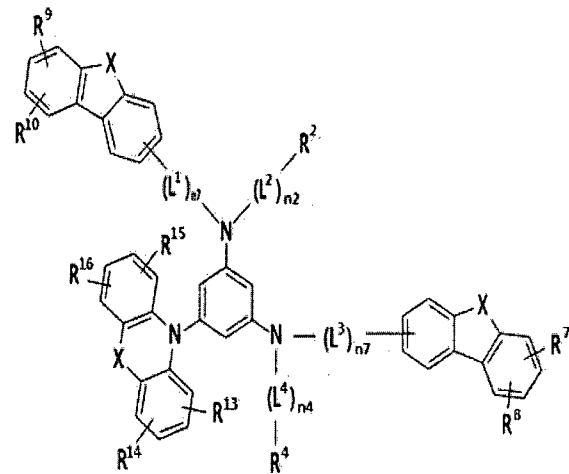
[화학식 17]



[화학식 18]

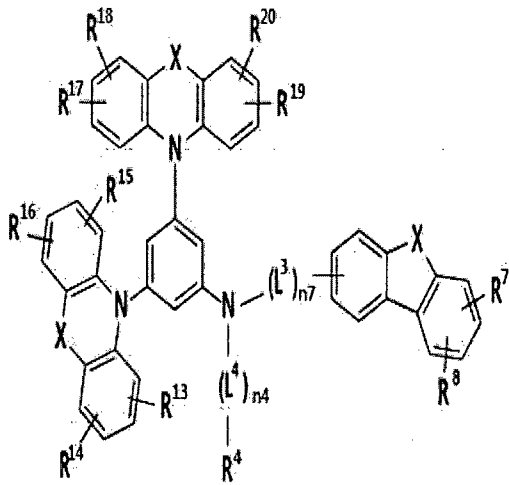


[화학식 19]

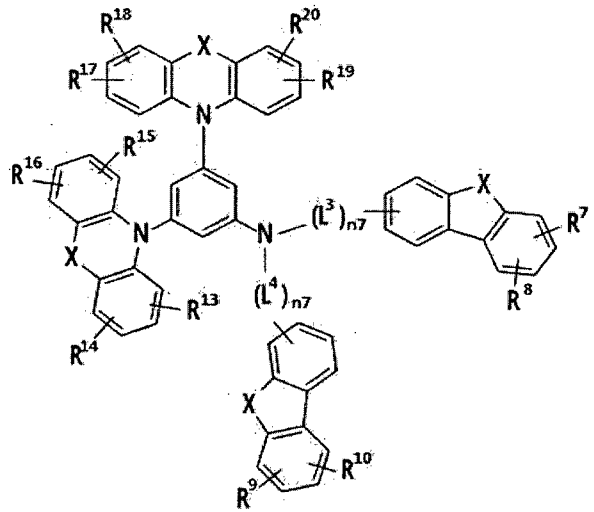


[화학식 20]

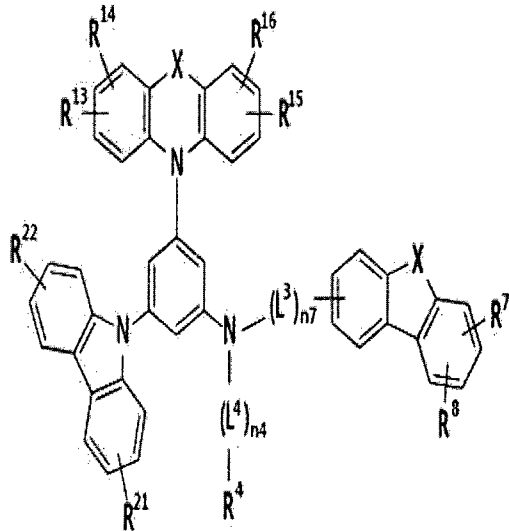
5



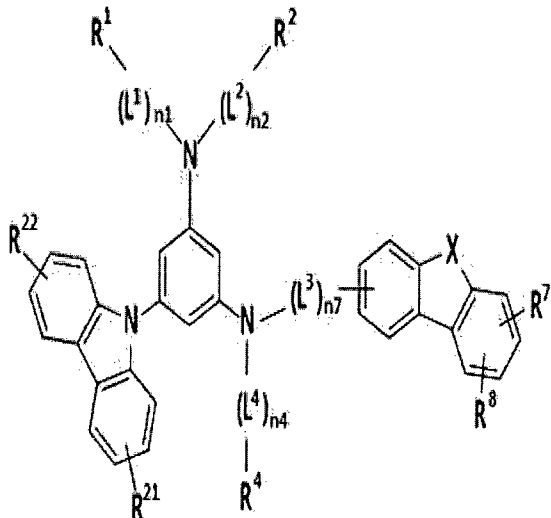
[화학식 21]



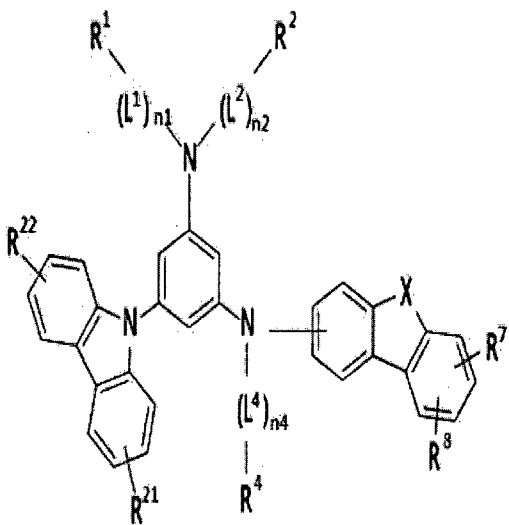
[화학식 22]



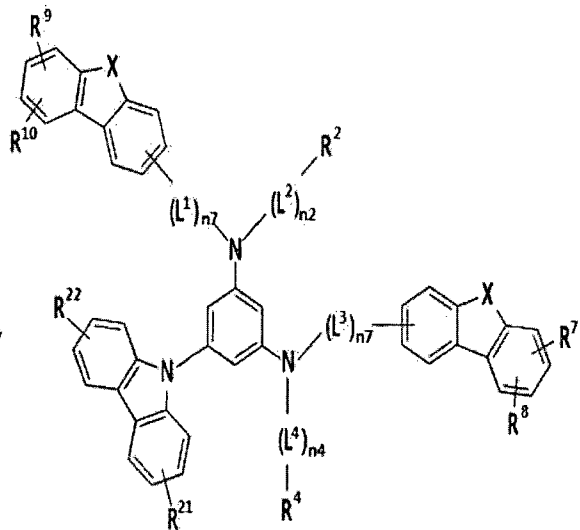
[화학식 23]



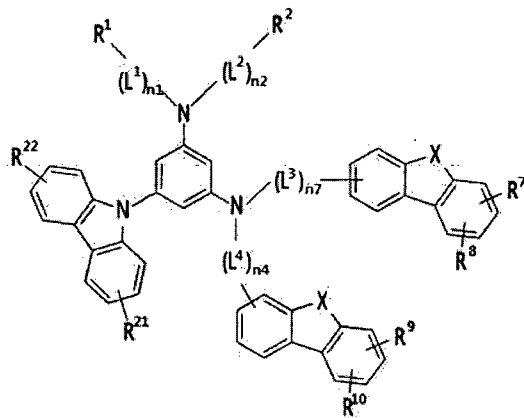
[화학식 24]



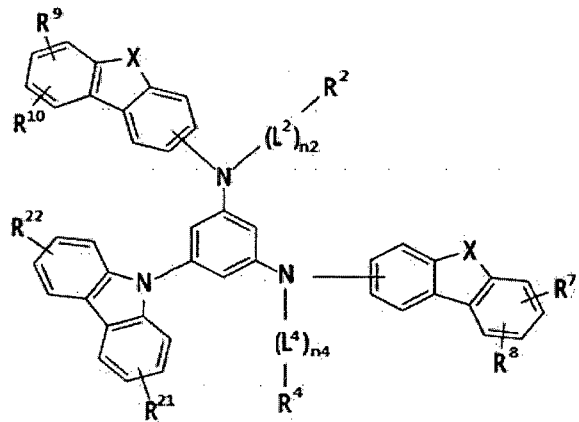
[화학식 25]



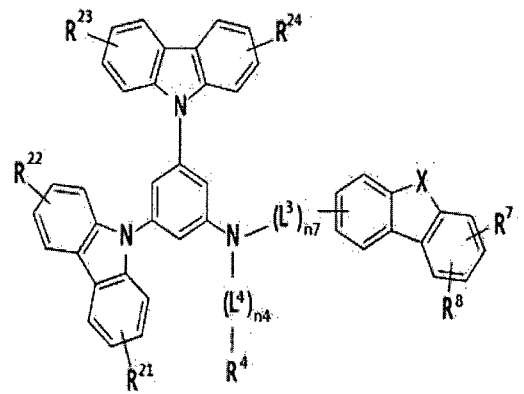
[화학식 26]



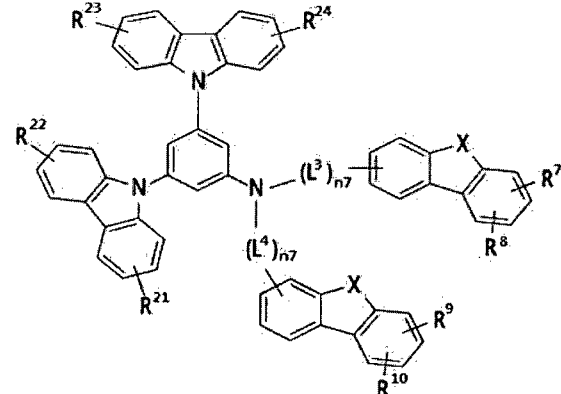
[화학식 27]



[화학식 28]



[화학식 29]



5

상기 화학식 3 내지 화학식 29에서,  $L^1$  내지  $L^6$ 는 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴렌기, 또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴렌기일 수 있고, 치환 또는 비치환된 플루오레닐렌기는 아니며,  $n1$  내지  $n6$ 는 서로 독립적으로, 0 내지 3 중 어느 하나의 정수일 수 있고,  $n7$ 은 1 내지 3 중 어느 하나의 정수일 수 있고,  $R^1$  내지  $R^6$ 는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30

10

아릴기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴기, 및 치환 또는 비치환된 실릴기로 이루어진 군에서 선택될 수 있고, R<sup>1</sup> 내지 R<sup>6</sup> 중 어느 하나가 치환 또는 비치환된 플루오레닐기인 경우, 상기 치환 또는 비치환된 플루오레닐기는 상기 화학식 1의 "N"에 직접 결합되지 않는다.

- 5 X는 O 또는 S일 수 있고, R<sup>7</sup> 내지 R<sup>24</sup>는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 및 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴기로 이루어진 군에서 선택될 수 있다.

상기 화학식 3 내지 화학식 29의 경우, 상기 화학식 2로 표시되는 치환기를  
10 적어도 하나 가짐으로써 재료의 유리 전이 온도가 상승하여 열안정성이 향상될 수 있으며, 정공 수송 능력이 향상되어 유기 발광 소자의 정공 주입 및 수송층으로 사용할 경우 효율 및 수명을 향상시킬 수 있다.

또한, 상기 화학식 15 내지 화학식 21의 경우, 상기 화학식 2로 표시되는  
15 치환기 외에 카바졸이 아닌 아민 화합물을 추가로 포함함으로써 HOMO 에너지 준위의 상승으로 정공 주입 장벽이 낮아져 정공 주입 특성이 향상되어, 정공 주입층으로 사용할 경우 구동 전압을 낮출 수 있다.

또한, 상기 화학식 22 내지 화학식 29의 경우, 상기 화학식 2로 표시되는  
20 치환기 외에 아민 화합물 및/또는 카바졸릴기를 추가로 포함함으로써 내열 안정성이 향상되어 수명 특성을 향상시킬 수 있고, 높은 삼중항 에너지 준위(T1)를 가지기 때문에 인광 발광층 호스트 또는 인광 유기 발광 소자용 정공 수송 재료로 적합한 특성을 가질 수 있다.

상기 화학식 3의 L<sup>3</sup>, 상기 화학식 8의 L<sup>1</sup> 및 L<sup>2</sup>, 상기 화학식 9의 L<sup>1</sup> 및 L<sup>3</sup>,  
상기 화학식 10의 L<sup>2</sup>, 상기 화학식 11의 L<sup>3</sup>, 상기 화학식 12의 L<sup>1</sup>, L<sup>3</sup>, 및 L<sup>5</sup>,  
상기 화학식 13의 L<sup>5</sup>, 상기 화학식 14의 L<sup>1</sup> 및 L<sup>3</sup>, 상기 화학식 15의 L<sup>3</sup>,  
25 상기 화학식 18의 L<sup>1</sup> 및 L<sup>3</sup>, 상기 화학식 19의 L<sup>3</sup>, 상기 화학식 20의 L<sup>3</sup> 및 L<sup>4</sup>,  
상기 화학식 21의 L<sup>3</sup>, 상기 화학식 22의 L<sup>3</sup>, 상기 화학식 24의 L<sup>1</sup> 및 L<sup>3</sup>,  
상기 화학식 25의 L<sup>3</sup> 및 L<sup>4</sup>, 상기 화학식 27의 L<sup>3</sup>, 및 상기 화학식 28의 L<sup>3</sup>  
및 L<sup>4</sup>는 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴렌기, 또는  
치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴렌기일 수 있고, 치환 또는

비치환된 플루오레닐렌기는 아니다. 보다 구체적으로 상기 L<sup>1</sup> 내지 L<sup>6</sup>는 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴렌기이고, 치환 또는 비치환된 플루오레닐렌기는 제외된다. 이러한 경우, 상기 화합물은 적절한 정공 수송 특성을 가질 수 있으며, 분자량의 증가 및 재료의 packing 특성의

5 향상으로 인해 보다 안정한 박막을 형성할 수 있다.

또한, 상기 L<sup>1</sup> 내지 L<sup>6</sup>를 선택적으로 조절하여 화합물 전체의 공액(conjugation) 길이를 결정할 수 있으며, 이로부터 삼중항(triplet) 에너지 밴드갭을 조절할 수 있다. 이를 통해 유기광전자소자에서 필요로 하는 재료의 특성을 구현해 낼 수 있다. 또한, 올소(ortho), 파라(para), 메타(meta)의

10 결합위치 변경을 통해서도 삼중항 에너지 밴드갭을 조절할 수 있다.

상기 L<sup>1</sup> 내지 L<sup>6</sup>의 구체적인 예로는 치환 또는 비치환된 페닐렌기, 치환 또는 비치환된 바이페닐렌기, 치환 또는 비치환된 p-터페닐렌기, 치환 또는 비치환된 m-터페닐렌기, 치환 또는 비치환된 o-터페닐렌기, 치환 또는 비치환된 나프틸렌기, 치환 또는 비치환된 안트라세닐렌기, 치환 또는

15 비치환된 페난트릴렌기, 치환 또는 비치환된 피레닐렌기 등이 있으나, 이에 제한되는 것은 아니다.

상기 R<sup>1</sup> 내지 R<sup>6</sup>는 서로 독립적으로, 수소, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기일 수 있다. 이러한 경우, 화합물의 정공 및/또는 전자 특성을 적절하게 조절할 수 있으며, 밴드갭 및 발광 파장을 조절하여 정공 수송

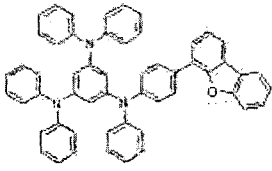
20 재료뿐만 아니라 발광층 재료로 사용할 수 있다.

상기 R<sup>1</sup> 내지 R<sup>6</sup>의 구체적인 예로는 수소, 치환 또는 비치환된 페닐기, 치환 또는 비치환된 바이페닐기, 치환 또는 비치환된 나프틸기, 치환 또는 비치환된 안트라세닐기, 치환 또는 비치환된 페난트레닐기, 치환 또는 비치환된 트리페닐기, 또는 치환 또는 비치환된 플루오레닐기 등이 있으나,

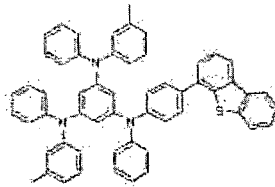
25 상기 R1 내지 R6가 치환 또는 비치환된 플루오레닐기인 경우, 상기 화학식 1, 및 화학식 3 내지 화학식 29에서 치환 또는 비치환된 플루오레닐기는 "N"에 직접 결합되지 않는다.

본 발명의 일 구현예에 따른 화합물의 구체적인 예는 다음과 같으나, 이에 제한되는 것은 아니다.

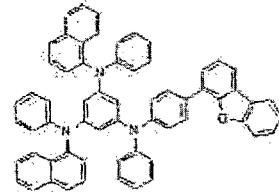
[A-1]



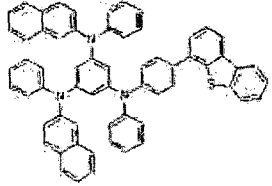
[A-2]



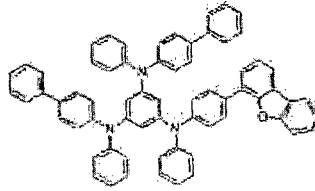
[A-3]



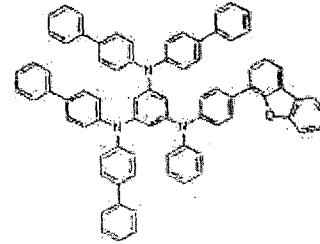
[A-4]



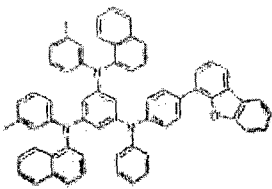
[A-5]



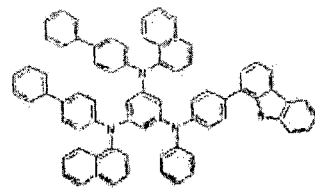
[A-6]



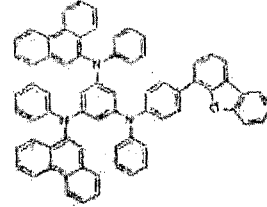
[A-7]



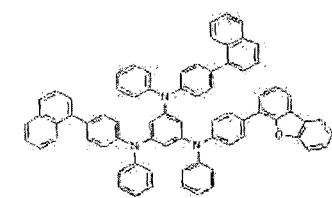
[A-8]



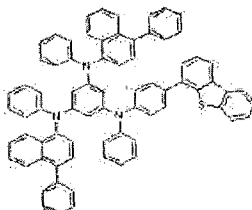
[A-9]



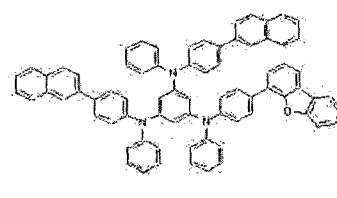
[A-10]



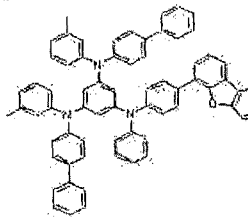
[A-11]



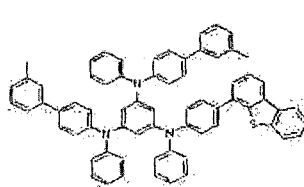
[A-12]



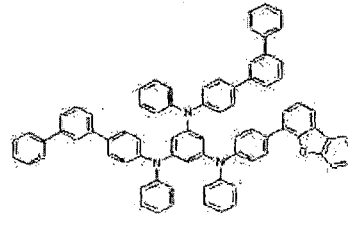
[A-13]



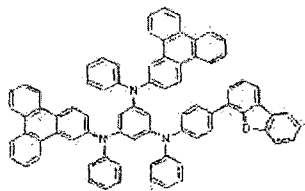
[A-14]



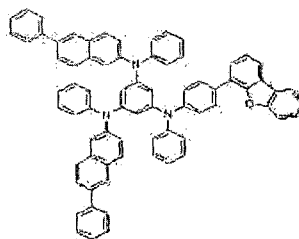
[A-15]



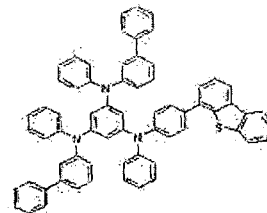
[A-16]



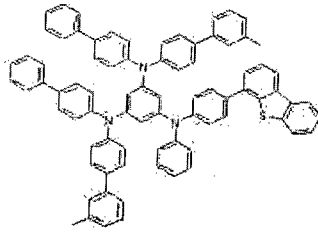
[A-17]



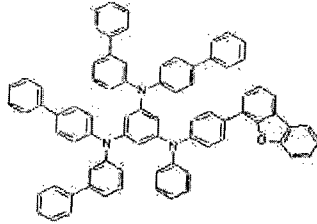
[A-18]



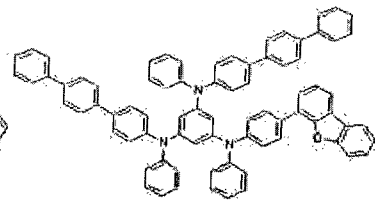
[A-19]



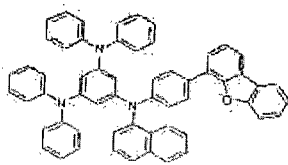
[A-20]



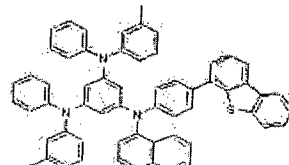
[A-21]



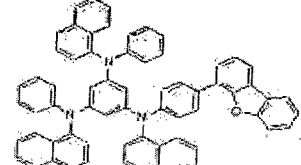
[A-22]



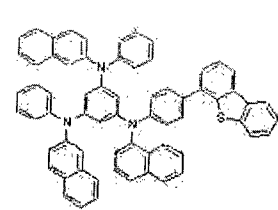
[A-23]



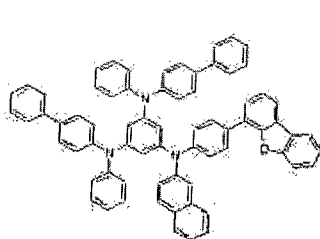
[A-24]



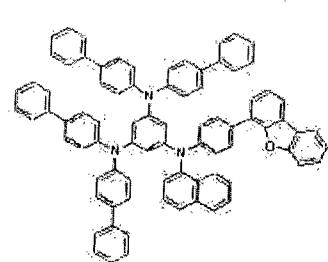
[A-25]



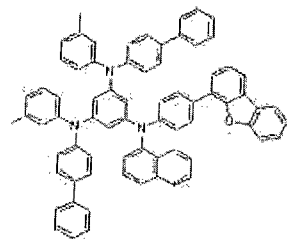
[A-26]



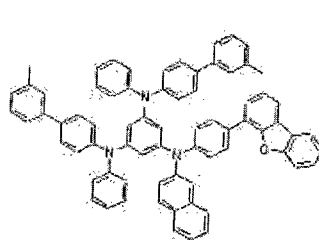
[A-27]



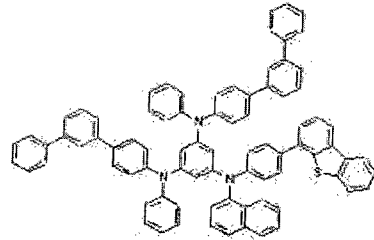
[A-28]



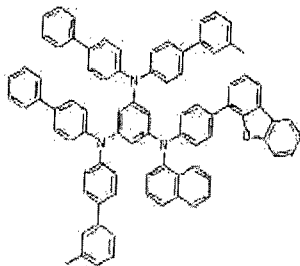
[A-29]



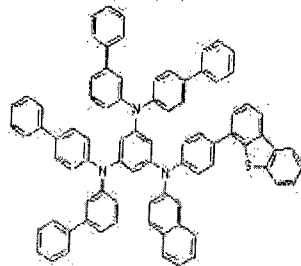
[A-30]



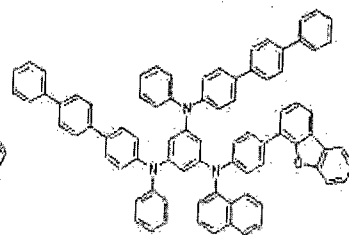
[A-31]



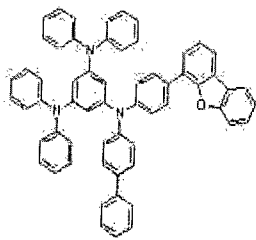
[A-32]



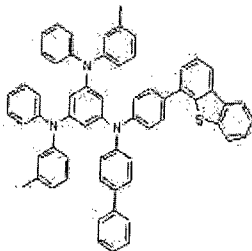
[A-33]



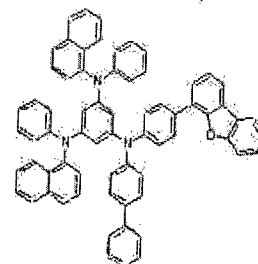
[A-34]



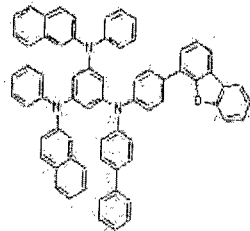
[A-35]



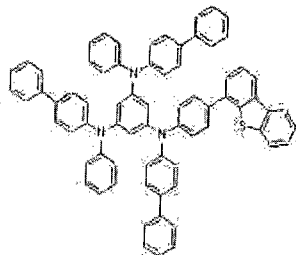
[A-36]



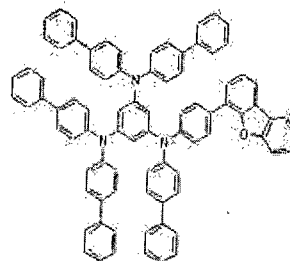
[A-37]



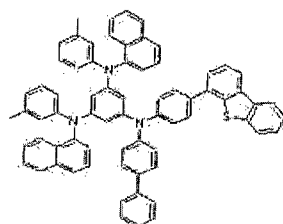
[A-38]



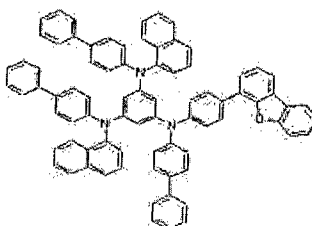
[A-39]



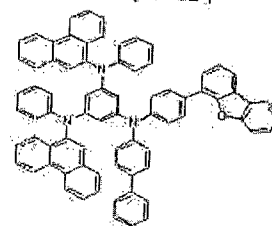
[A-40]



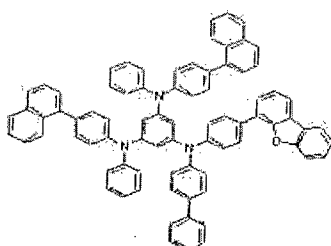
[A-41]



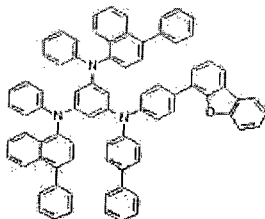
[A-42]



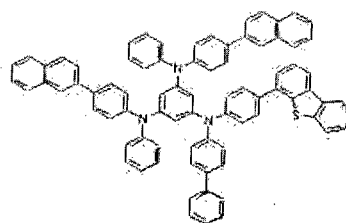
[A-43]



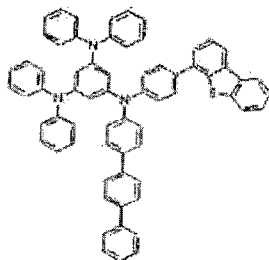
[A-44]



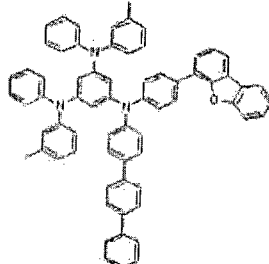
[A-45]



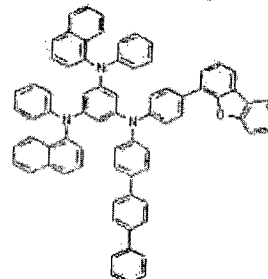
[A-46]



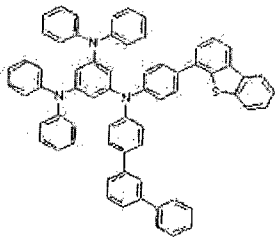
[A-47]



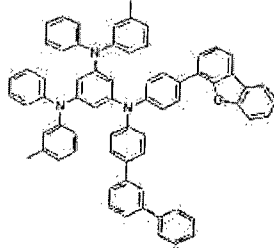
[A-48]



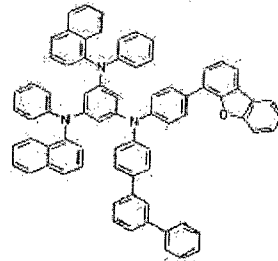
[A-49]



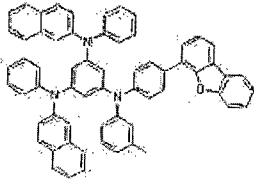
[A-50]



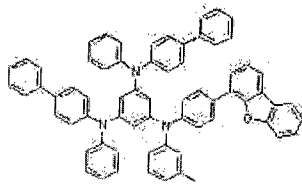
[A-51]



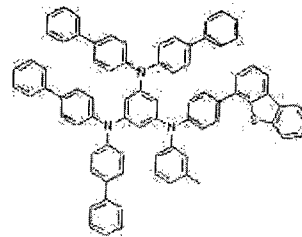
[A-52]



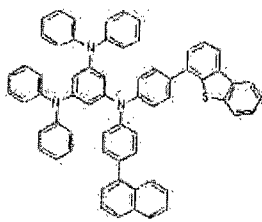
[A-53]



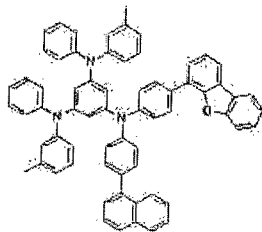
[A-54]



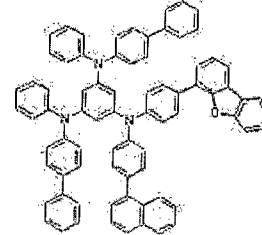
[A-55]



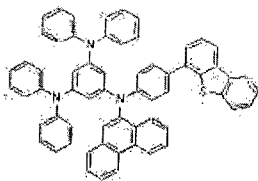
[A-56]



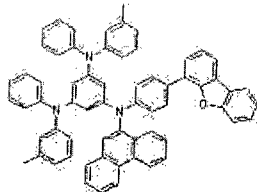
[A-57]



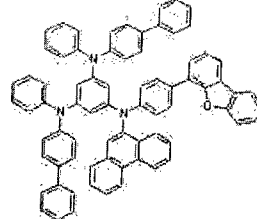
[A-58]



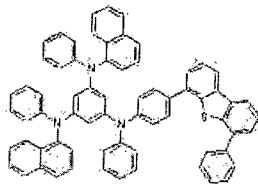
[A-59]



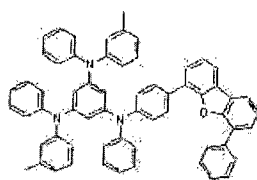
[A-60]



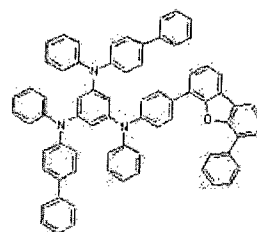
[A-61]



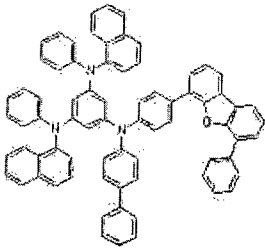
[A-62]



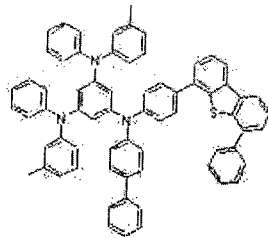
[A-63]



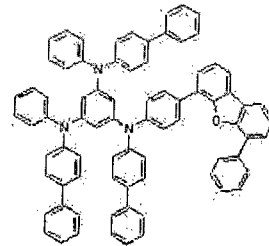
[A-64]



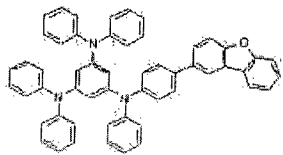
[A-65]



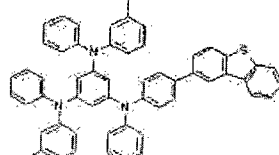
[A-66]



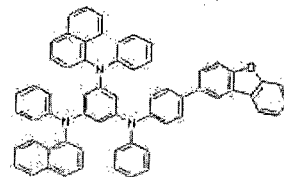
[A-67]



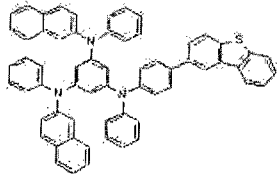
[A-68]



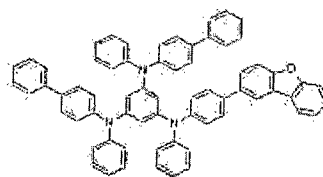
[A-69]



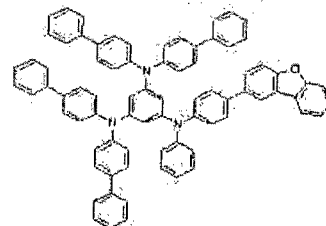
[A-70]



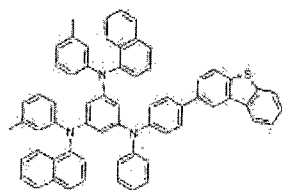
[A-71]



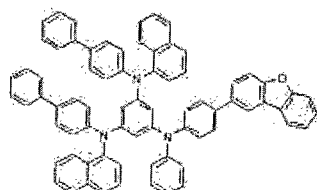
[A-72]



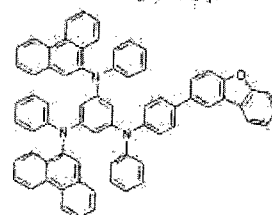
[A-73]



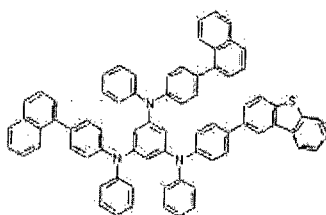
[A-74]



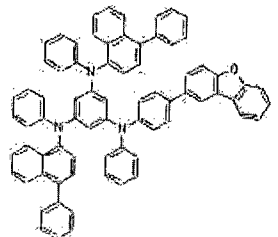
[A-75]



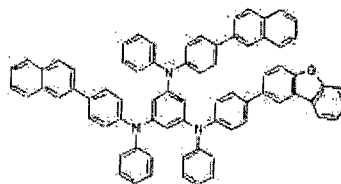
[A-76]



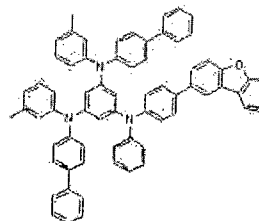
[A-77]



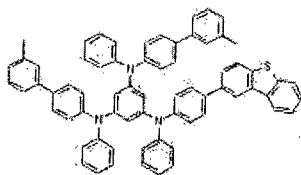
[A-78]



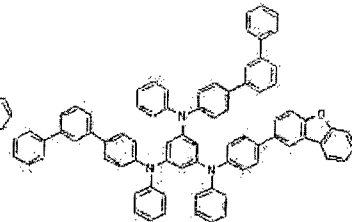
[A-79]



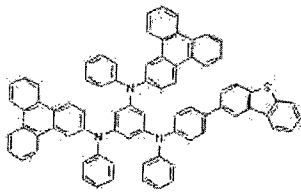
[A-80]



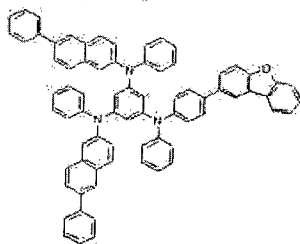
[A-81]



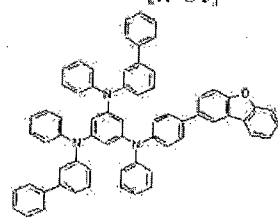
[A-82]



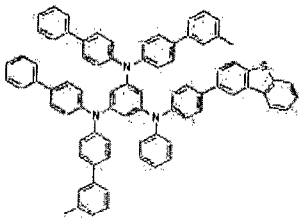
[A-83]



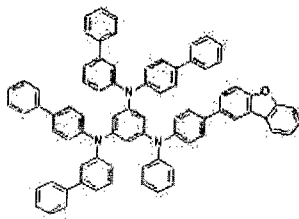
[A-84]



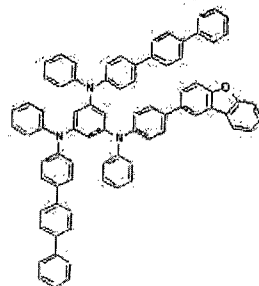
[A-85]



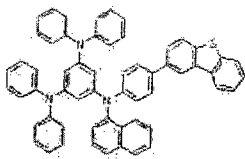
[A-86]



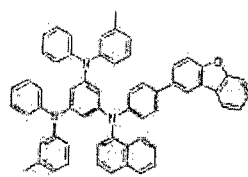
[A-87]



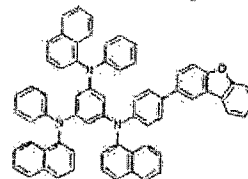
[A-88]



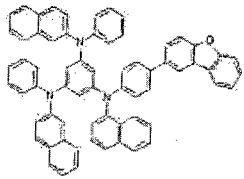
[A-89]



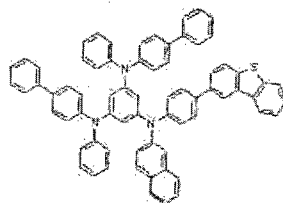
[A-90]



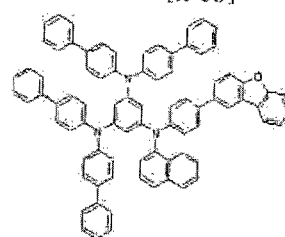
[A-91]



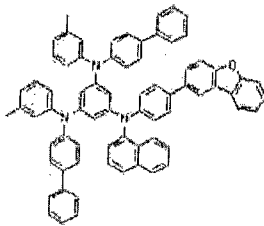
[A-92]



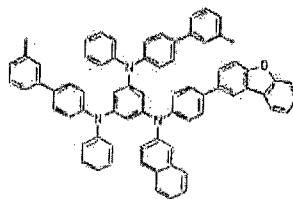
[A-93]



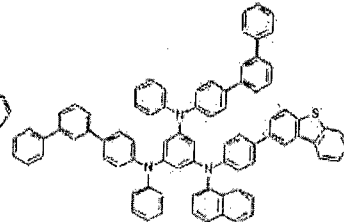
[A-94]



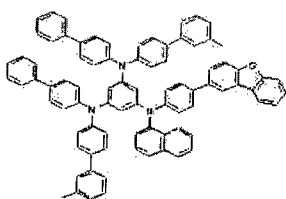
[A-95]



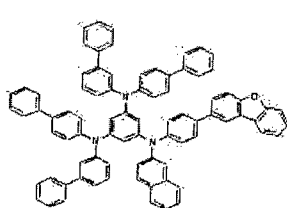
[A-96]



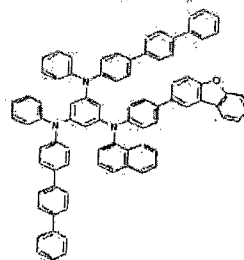
[A-97]



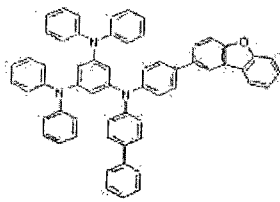
[A-98]



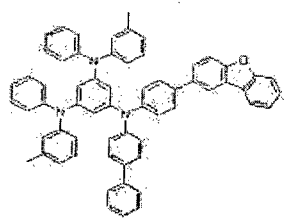
[A-99]



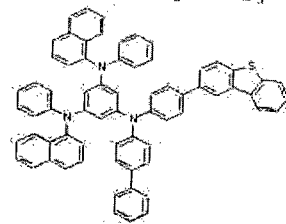
[A-100]



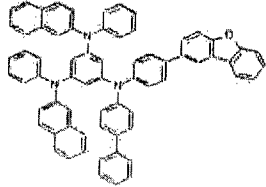
[A-101]



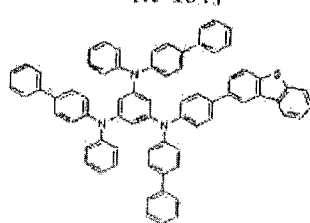
[A-102]



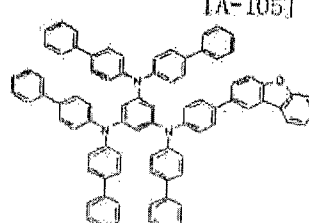
[A-103]



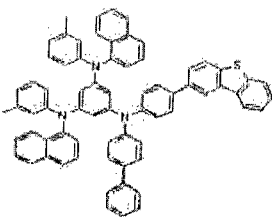
[A-104]



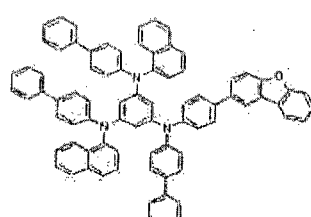
[A-105]



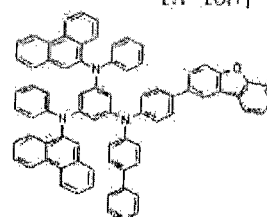
[A-106]



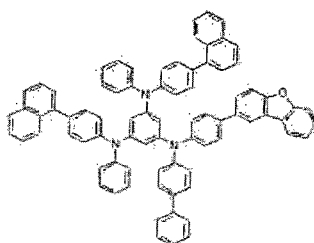
[A-107]



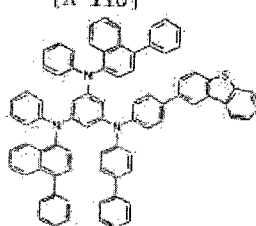
[A-108]



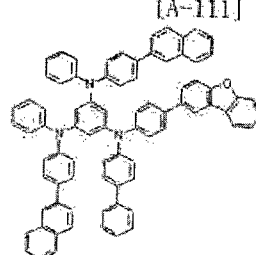
[A-109]



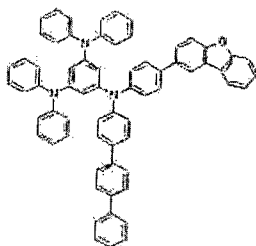
[A-110]



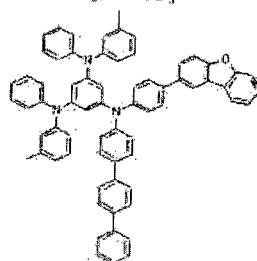
[A-111]



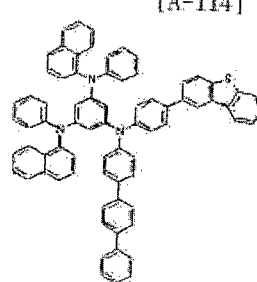
[A-112]



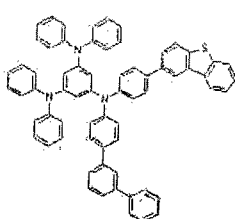
[A-113]



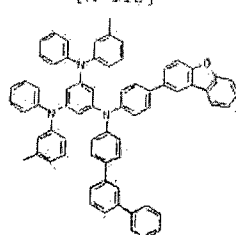
[A-114]



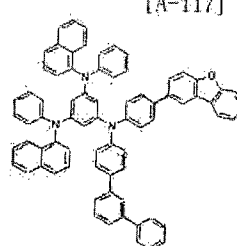
[A-115]



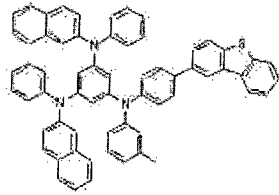
[A-116]



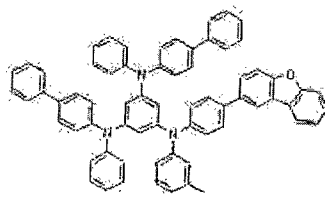
[A-117]



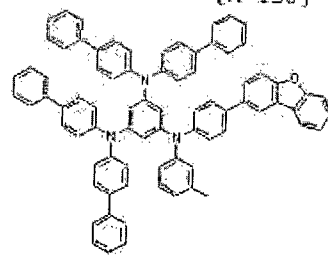
[A-118]



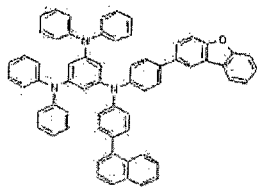
[A-119]



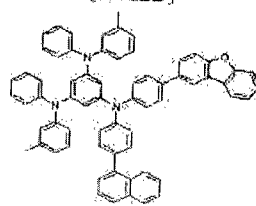
[A-120]



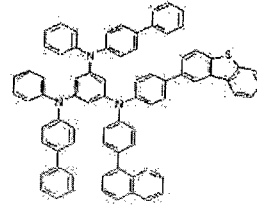
[A-121]



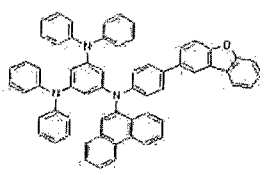
[A-122]



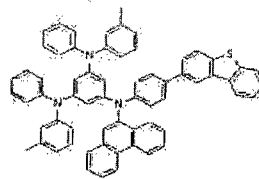
[A-123]



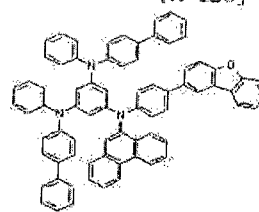
[A-124]



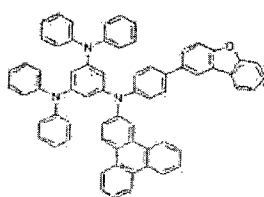
[A-125]



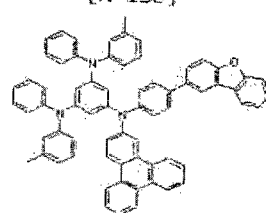
[A-126]



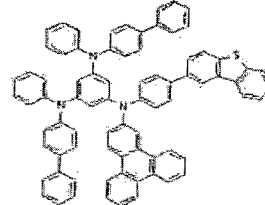
[A-127]



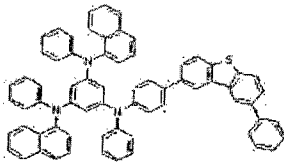
[A-128]



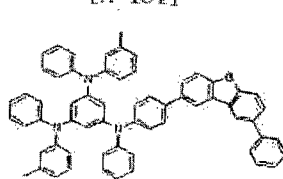
[A-129]



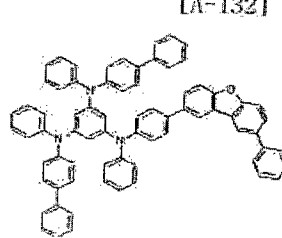
[A-130]



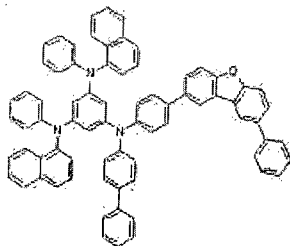
[A-131]



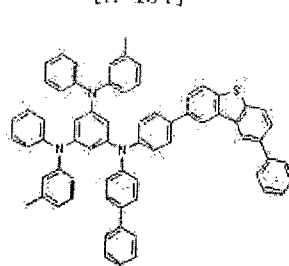
[A-132]



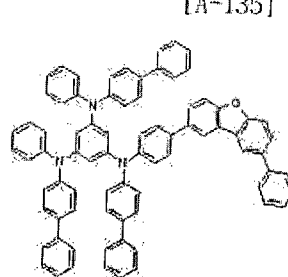
[A-133]



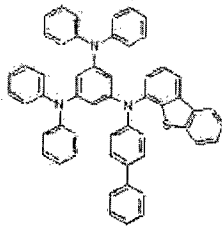
[A-134]



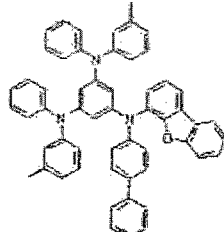
[A-135]



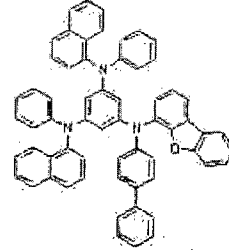
[A-136]



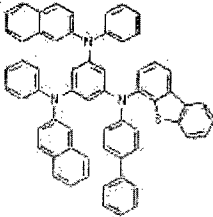
[A-137]



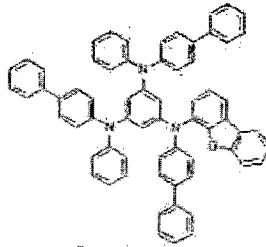
[A-138]



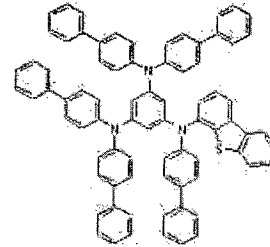
[A-139]



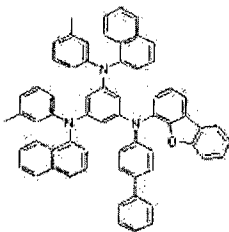
[A-140]



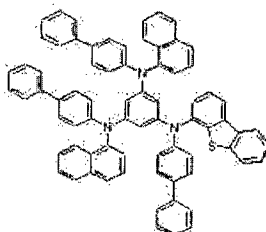
[A-141]



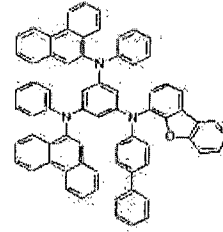
[A-142]



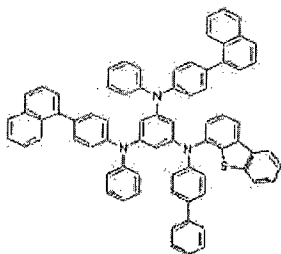
[A-143]



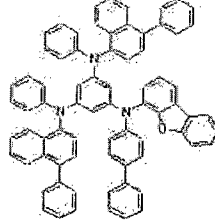
[A-144]



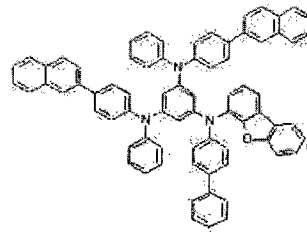
[A-145]



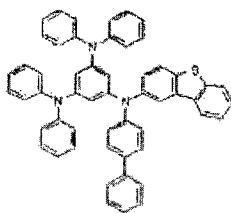
[A-146]



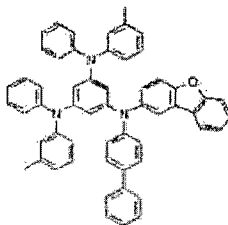
[A-147]



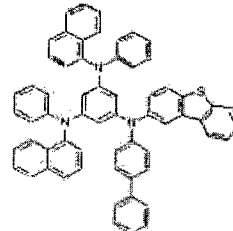
[A-148]



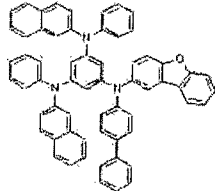
[A-149]



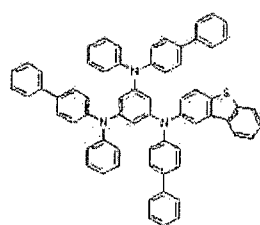
[A-150]



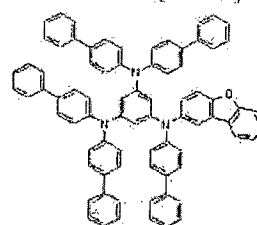
[A-151]



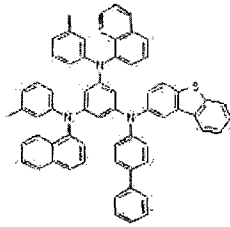
[A-152]



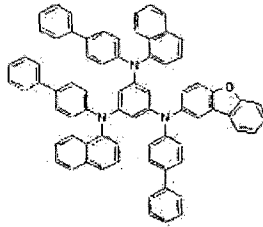
[A-153]



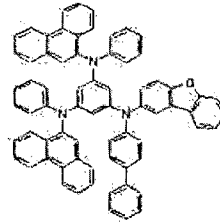
[A-154]



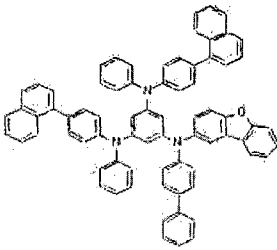
[A-155]



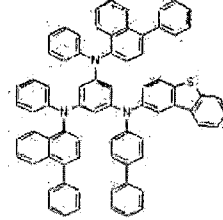
[A-156]



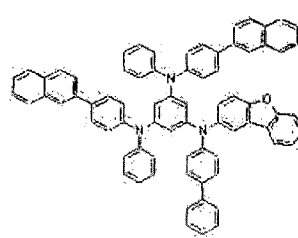
[A-157]



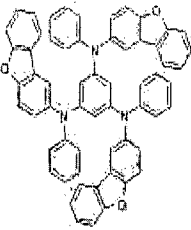
[A-158]



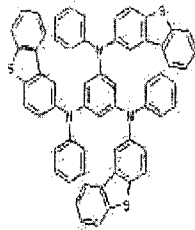
[A-159]



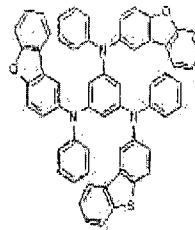
[A-160]



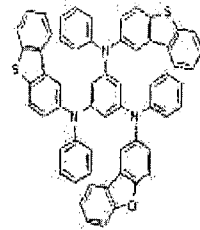
[A-161]



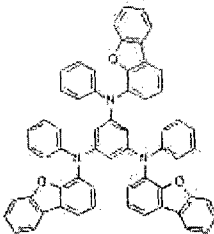
[A-162]



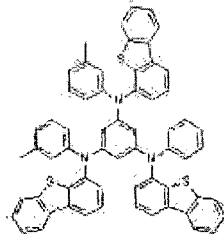
[A-163]



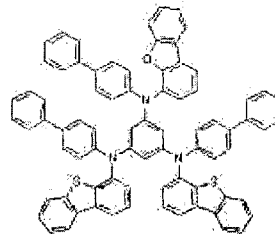
[A-164]



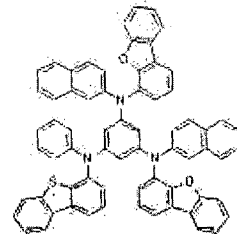
[A-165]



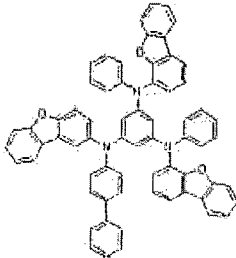
[A-166]



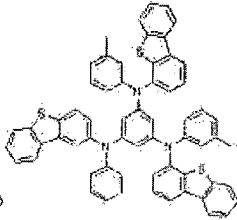
[A-167]



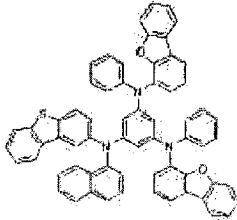
[A-168]



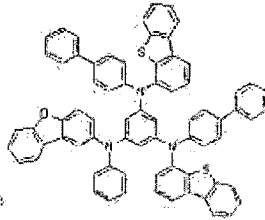
[A-169]



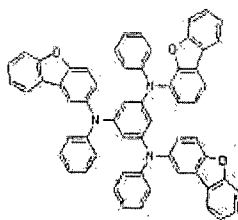
[A-170]



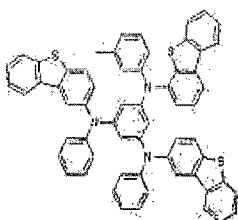
[A-171]



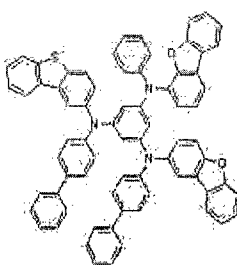
[A-172]



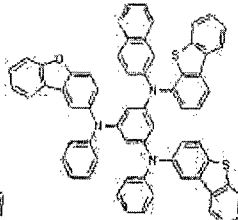
[A-173]



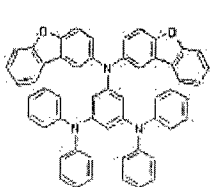
[A-174]



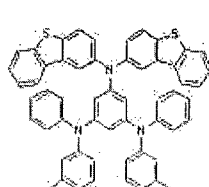
[A-175]



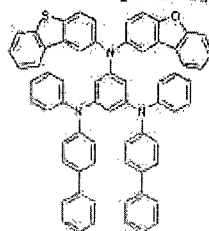
[A-176]



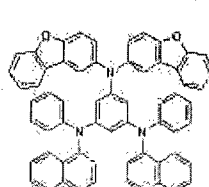
[A-177]



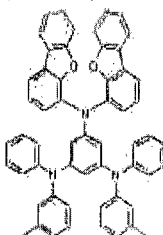
[A-178]



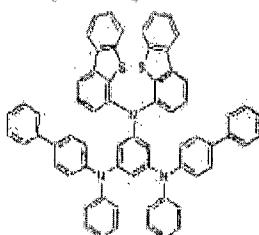
[A-179]



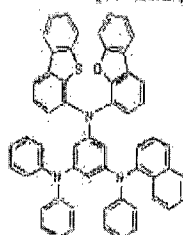
[A-180]



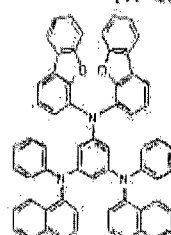
[A-181]



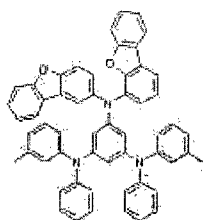
[A-182]



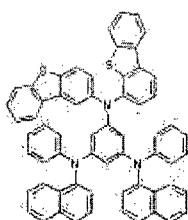
[A-183]



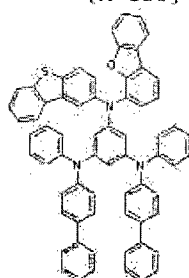
[A-184]



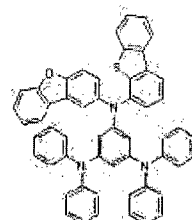
[A-185]



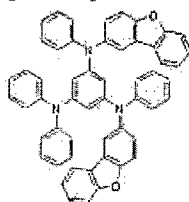
[A-186]



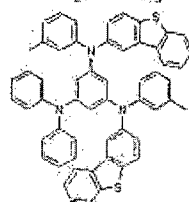
[A-187]



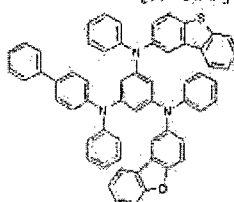
[A-188]



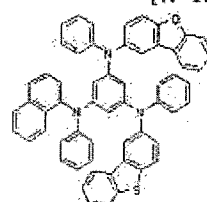
[A-189]



[A-190]

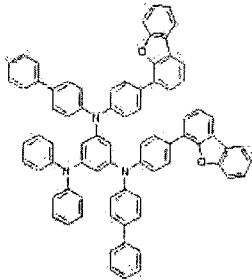


[A-191]

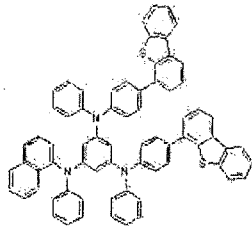




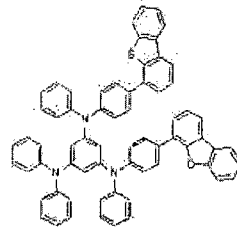
[A-209]



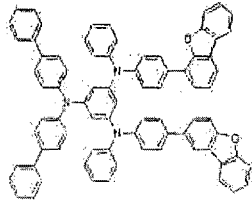
[A-210]



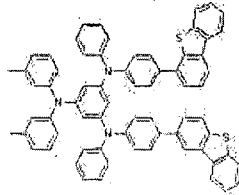
[A-211]



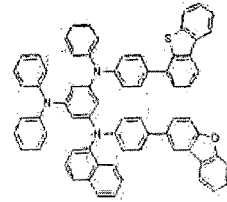
[A-212]



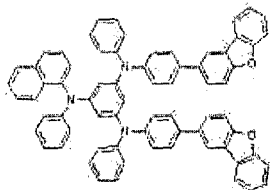
[A-213]



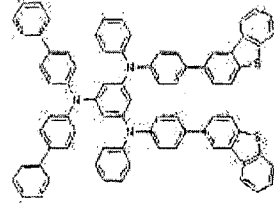
[A-214]



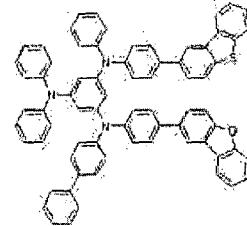
[A-215]



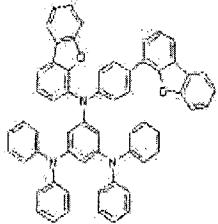
[A-216]



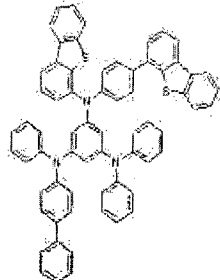
[A-217]



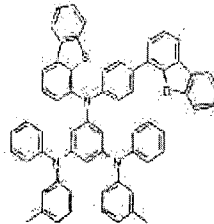
[A-218]



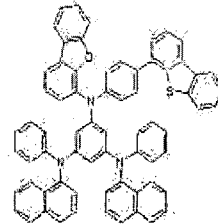
[A-219]



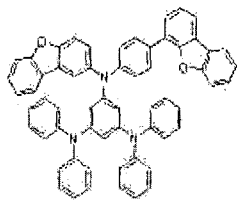
[A-220]



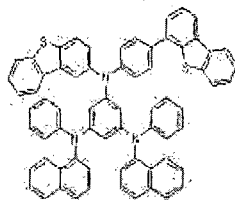
[A-221]



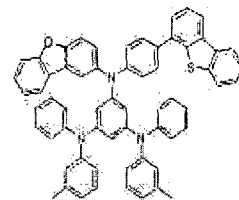
[A-222]



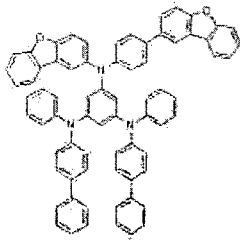
[A-223]



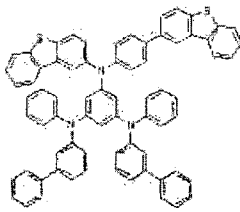
[A-224]



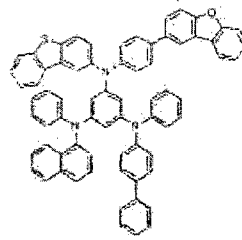
[A-225]



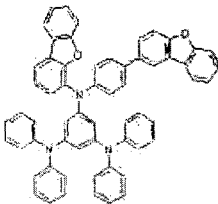
[A-226]



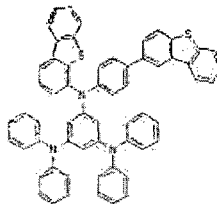
[A-227]



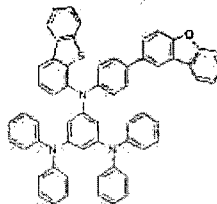
[A-228]



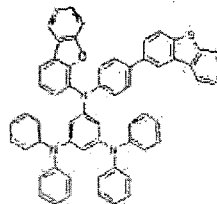
[A-229]



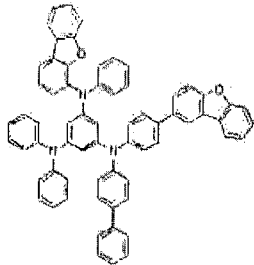
[A-230]



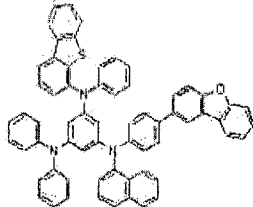
[A-231]



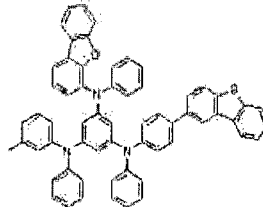
[A-232]



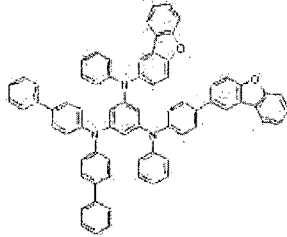
[A-233]



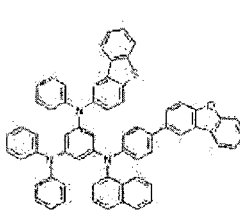
[A-234]



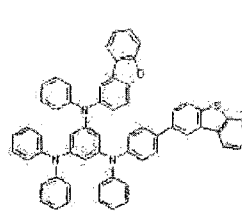
[A-235]



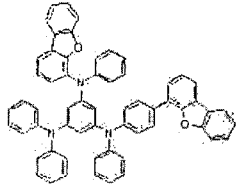
[A-236]



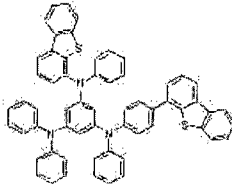
[A-237]



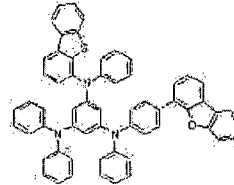
[A-238]



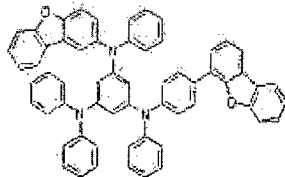
[A-239]



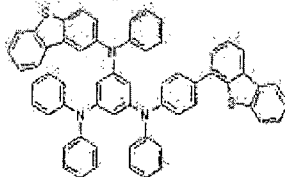
[A-240]



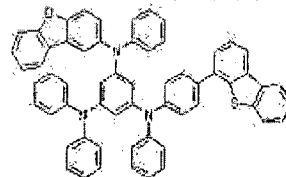
[A-241]



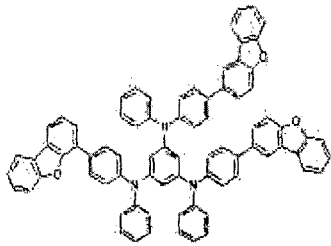
[A-242]



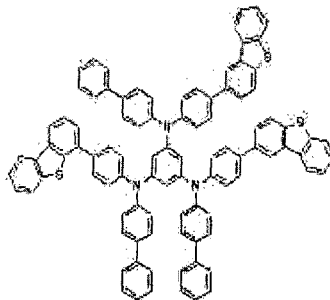
[A-243]



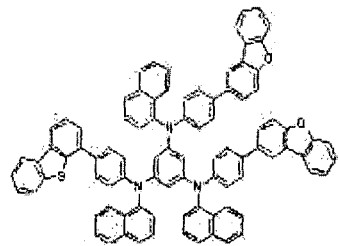
[A-244]



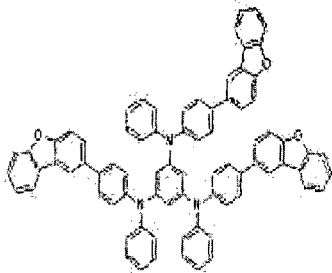
[A-245]



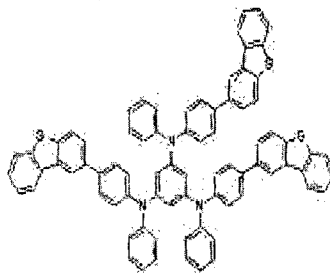
[A-246]



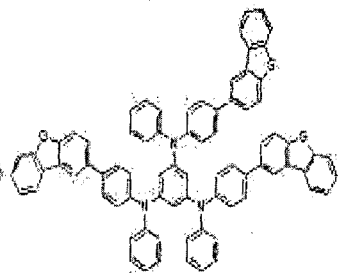
[A-247]



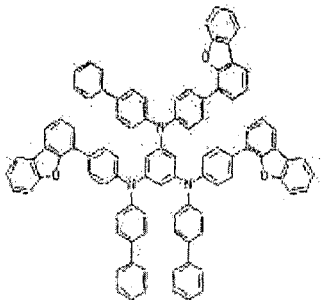
[A-248]



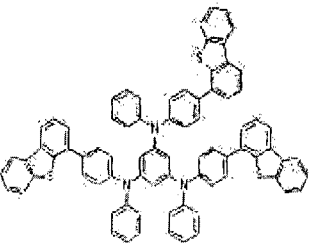
[A-249]



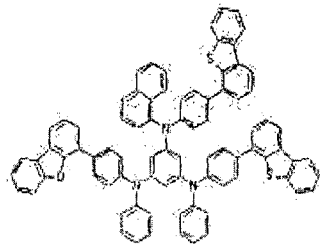
[A-250]



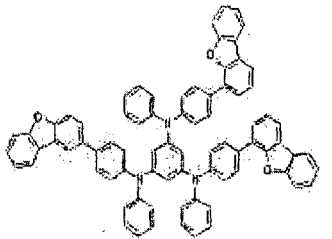
[A-251]



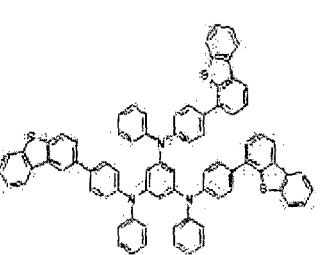
[A-252]



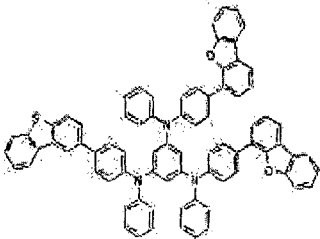
[A-253]



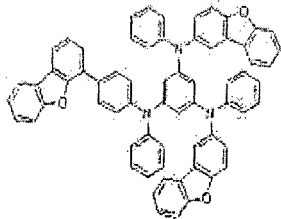
[A-254]



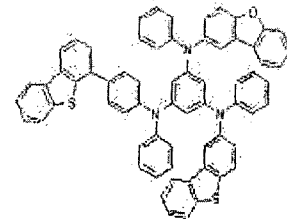
[A-255]



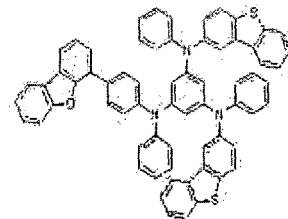
[A-256]



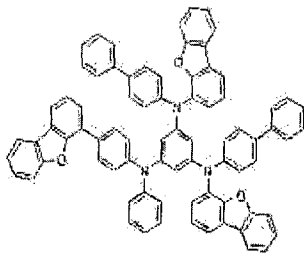
[A-257]



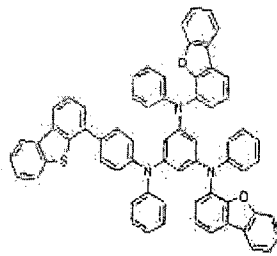
[A-258]



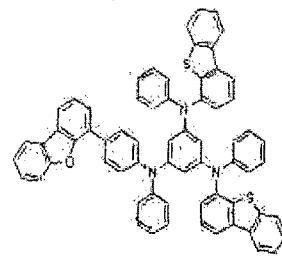
[A-259]



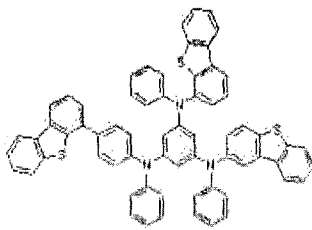
[A-260]



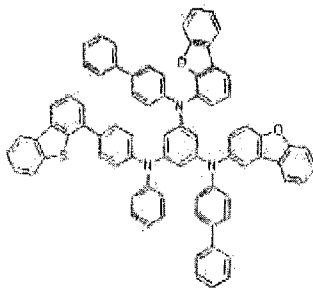
[A-261]



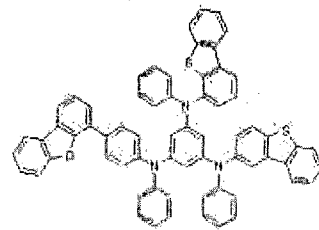
[A-262]



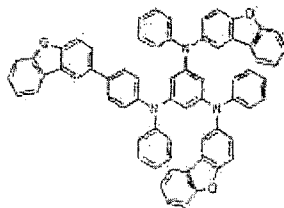
[A-263]



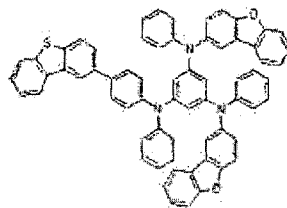
[A-264]



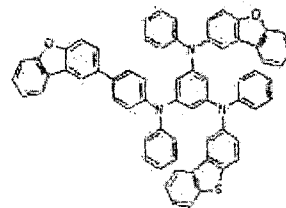
[A-265]



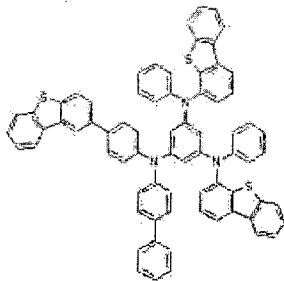
[A-266]



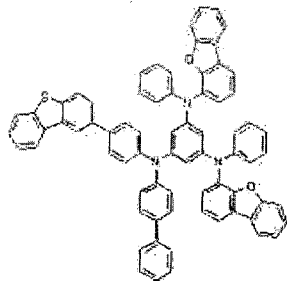
[A-267]



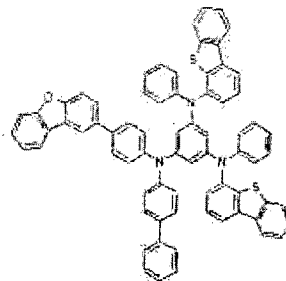
[A-268]



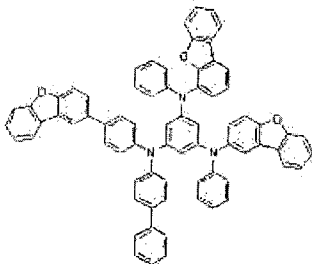
[A-269]



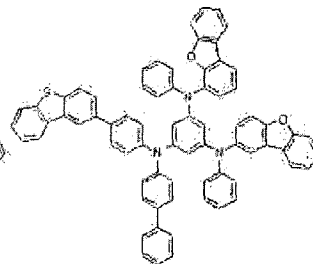
[A-270]



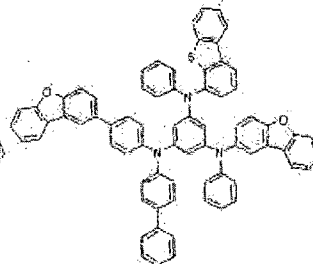
[A-271]



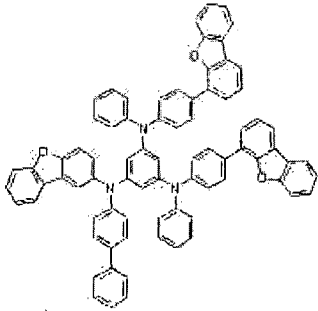
[A-272]



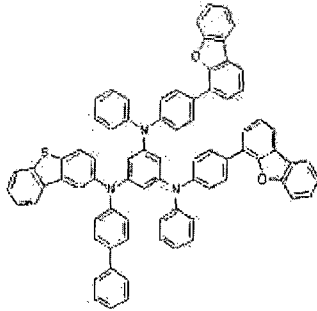
[A-273]



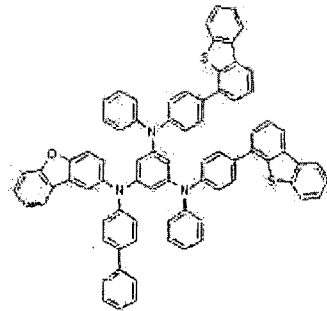
[A-274]



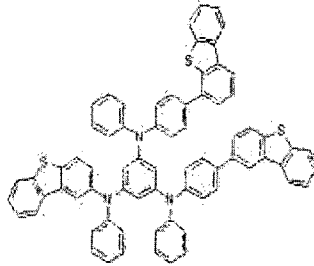
[A-275]



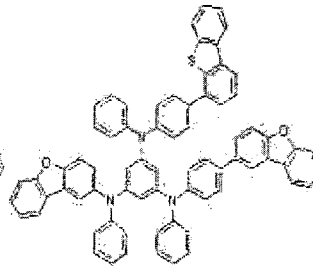
[A-276]



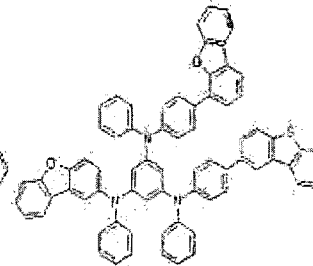
[A-277]



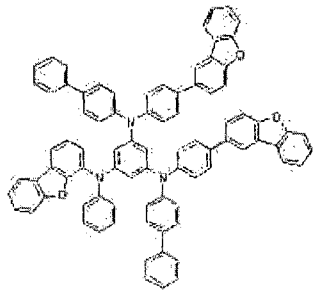
[A-278]



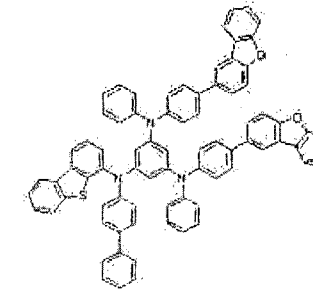
[A-279]



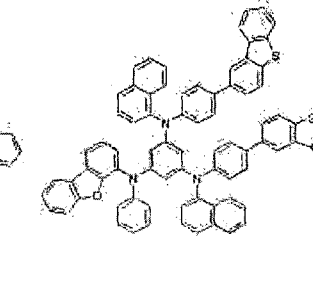
[A-280]



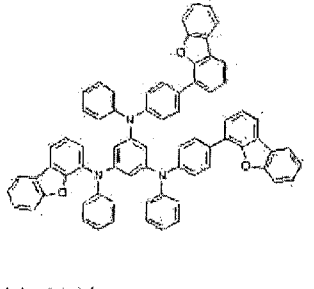
[A-281]



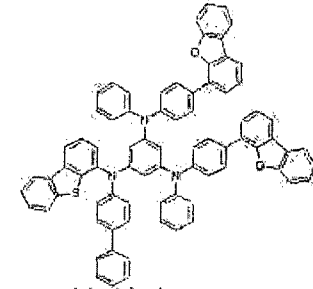
[A-282]



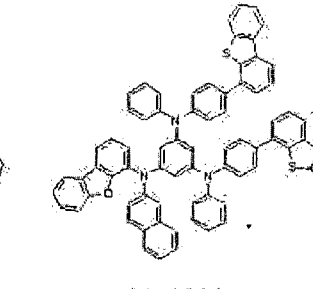
[A-283]



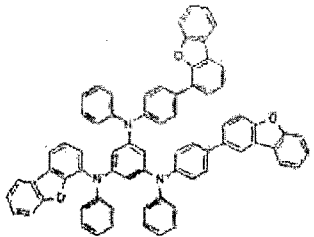
[A-284]



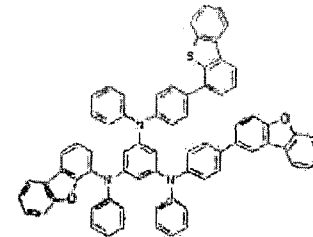
[A-285]



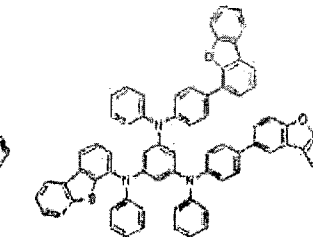
[A-286]



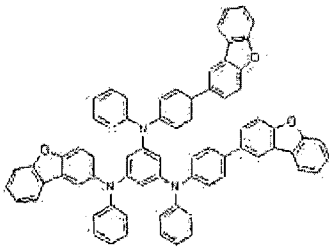
[A-287]



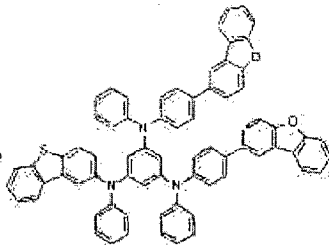
[A-288]



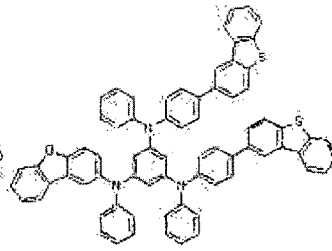
[A-289]



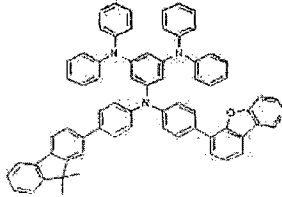
[A-290]



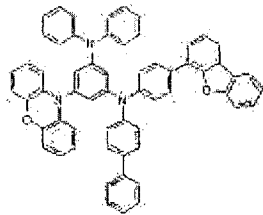
[A-291]



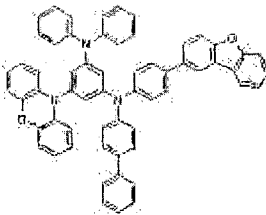
[A-300]



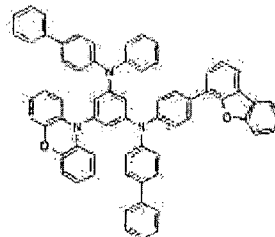
[B-1]



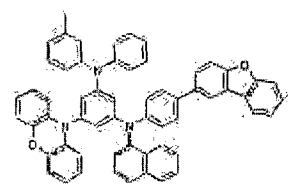
[B-2]



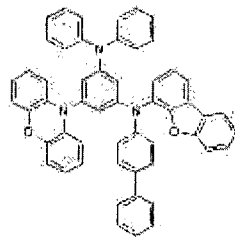
[B-3]



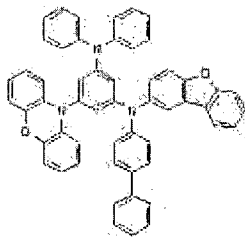
[B-4]



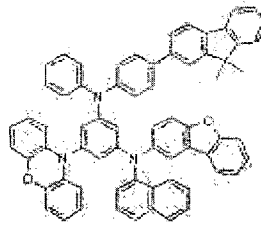
[B-5]



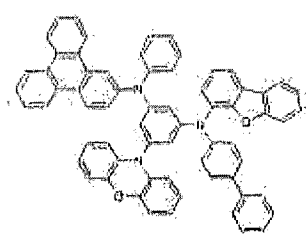
[B-6]



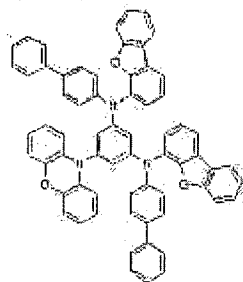
[B-7]



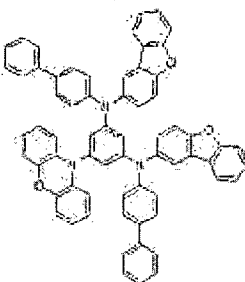
[B-8]



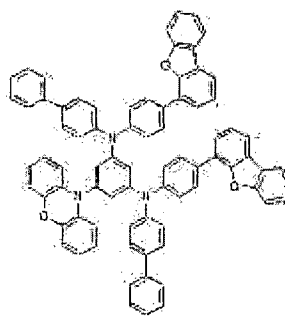
[B-9]



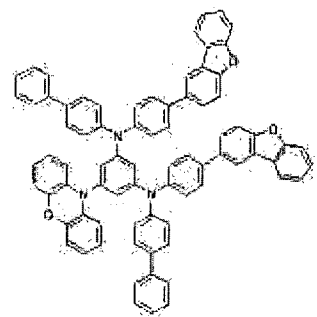
[B-10]

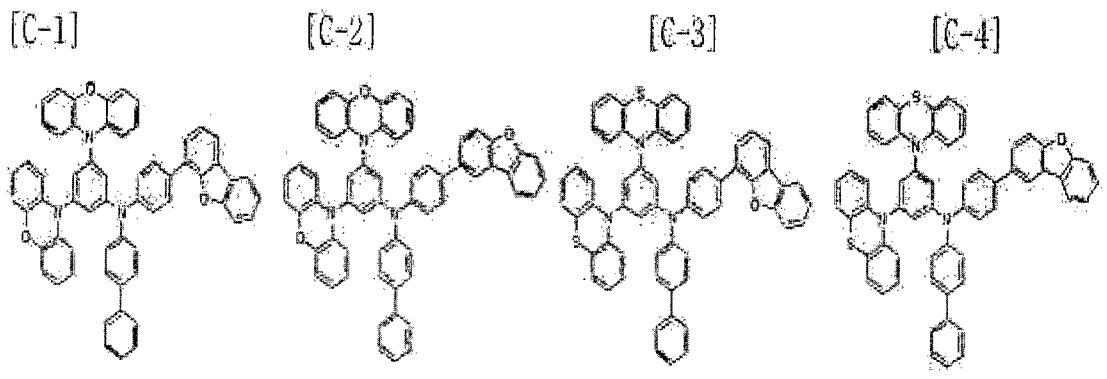
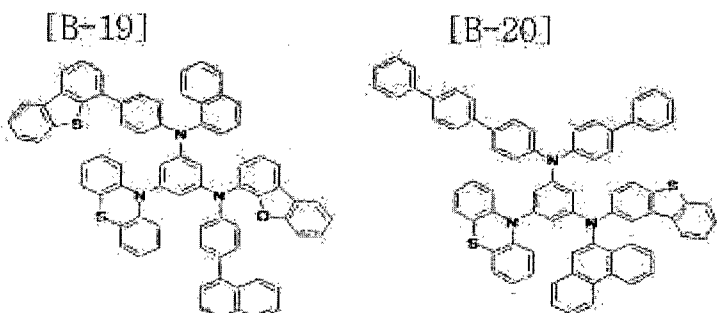
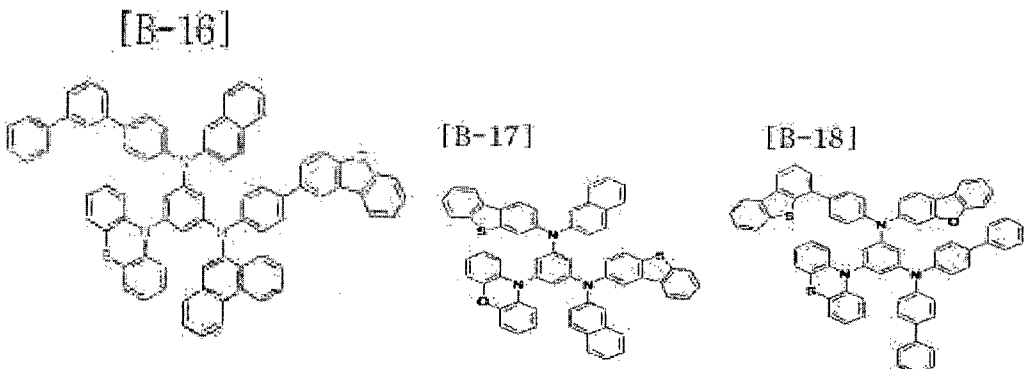
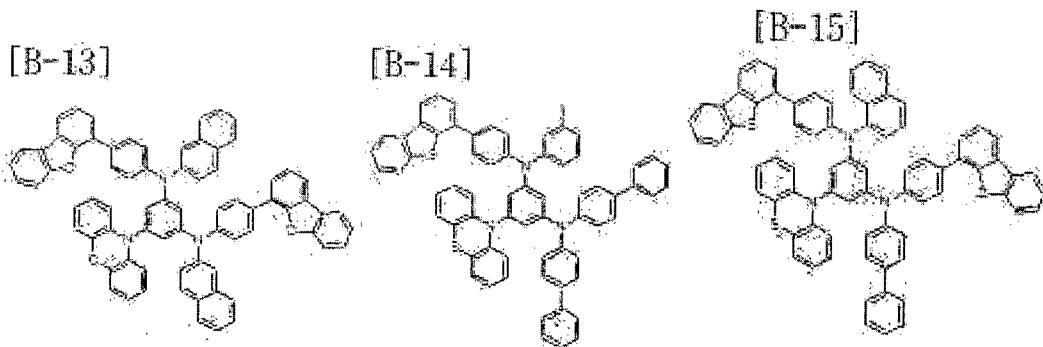


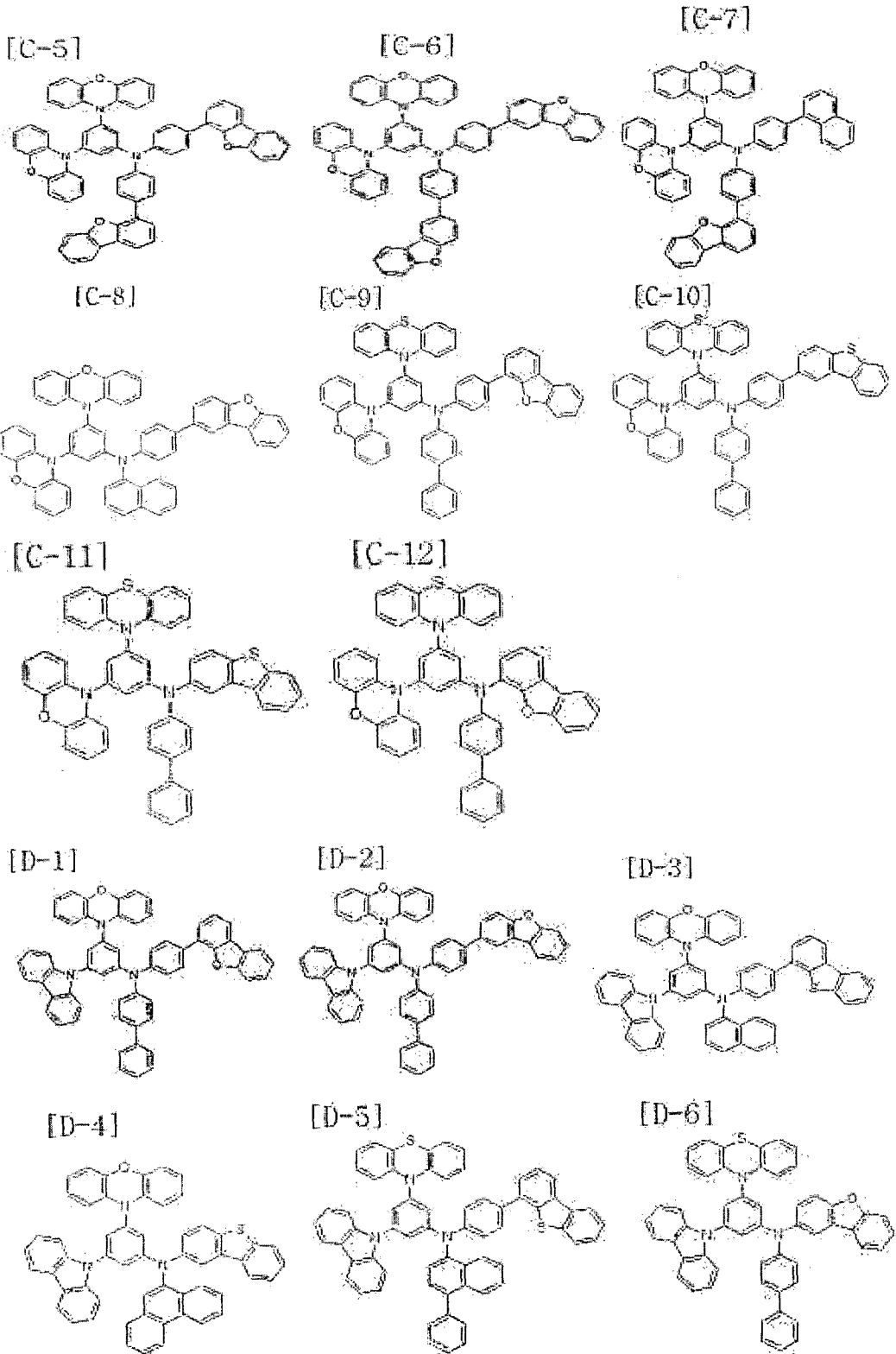
[B-11]

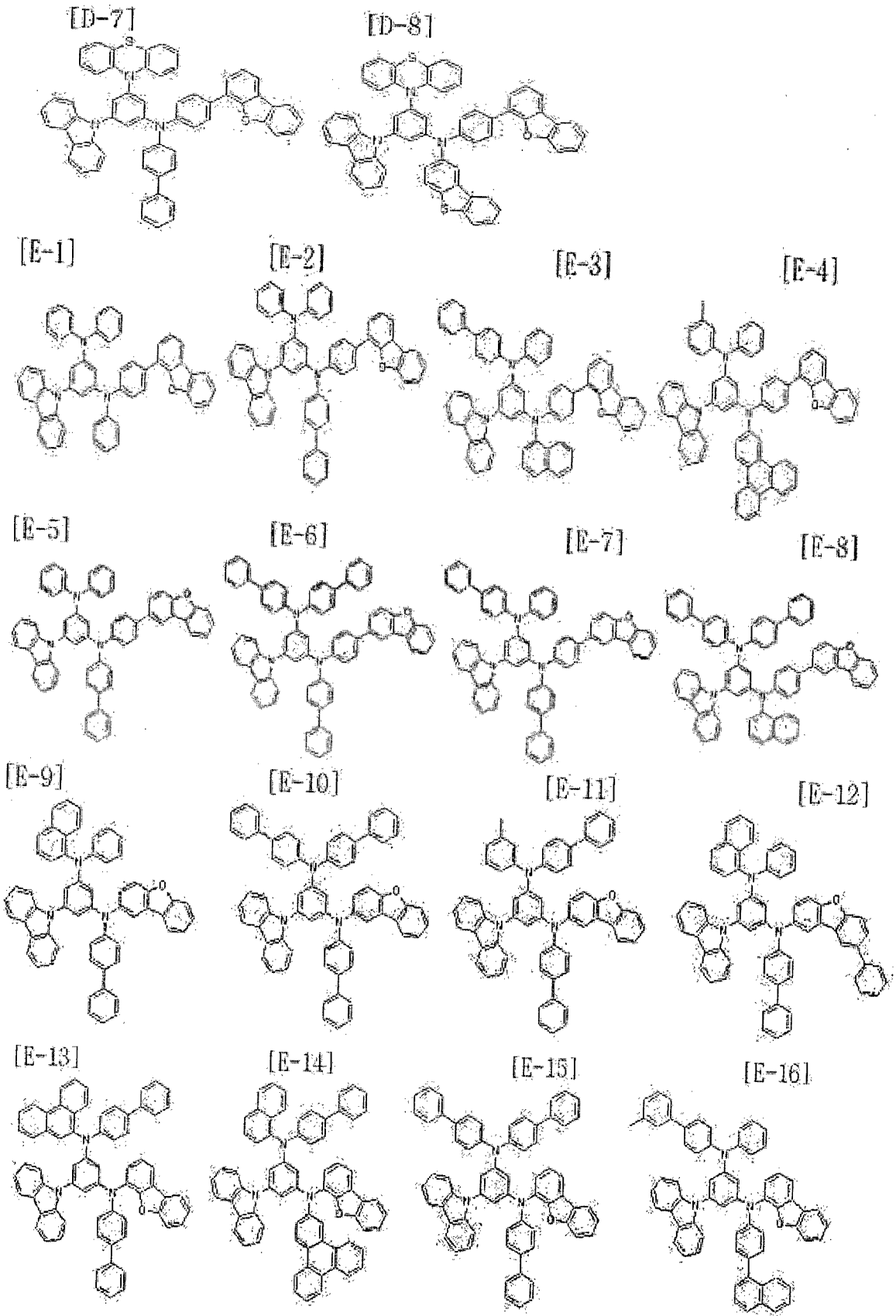


[B-12]

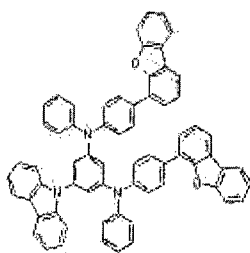




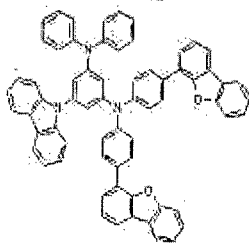




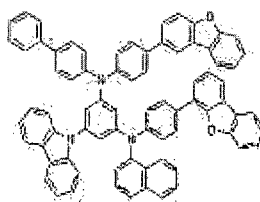
[E-17]



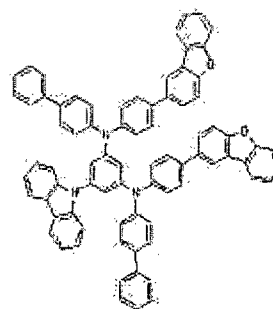
[E-18]



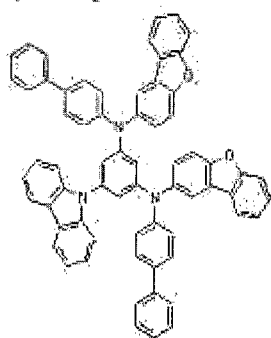
[E-19]



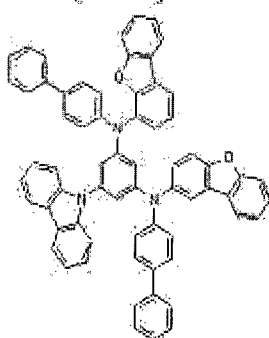
[E-20]



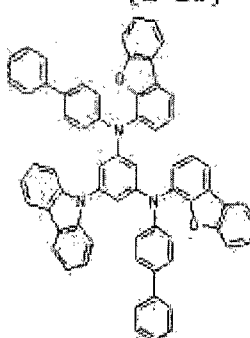
[E-21]



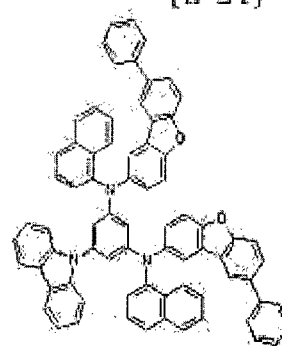
[E-22]



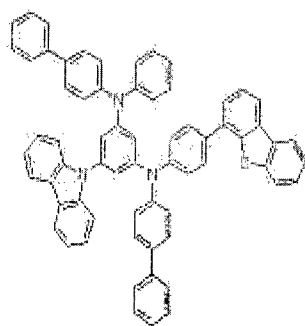
[E-23]



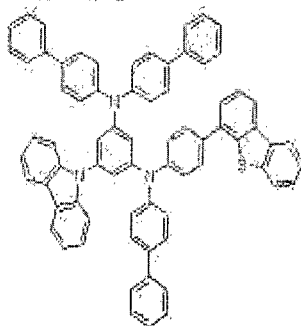
[E-24]



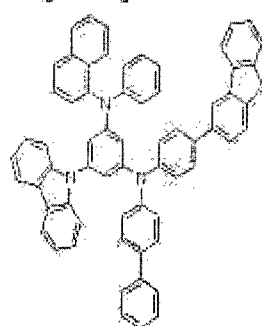
[E-25]



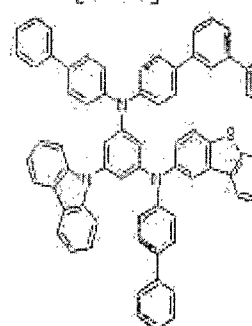
[E-26]



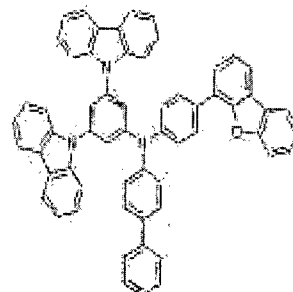
[E-27]



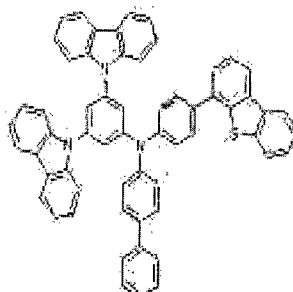
[E-28]



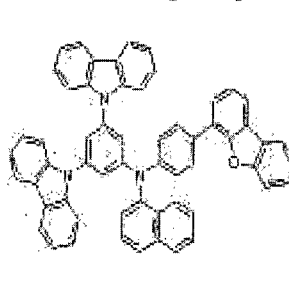
[F-1]



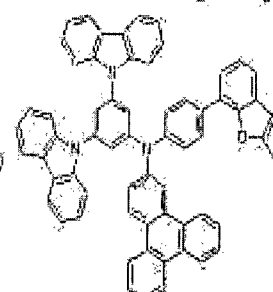
[F-2]

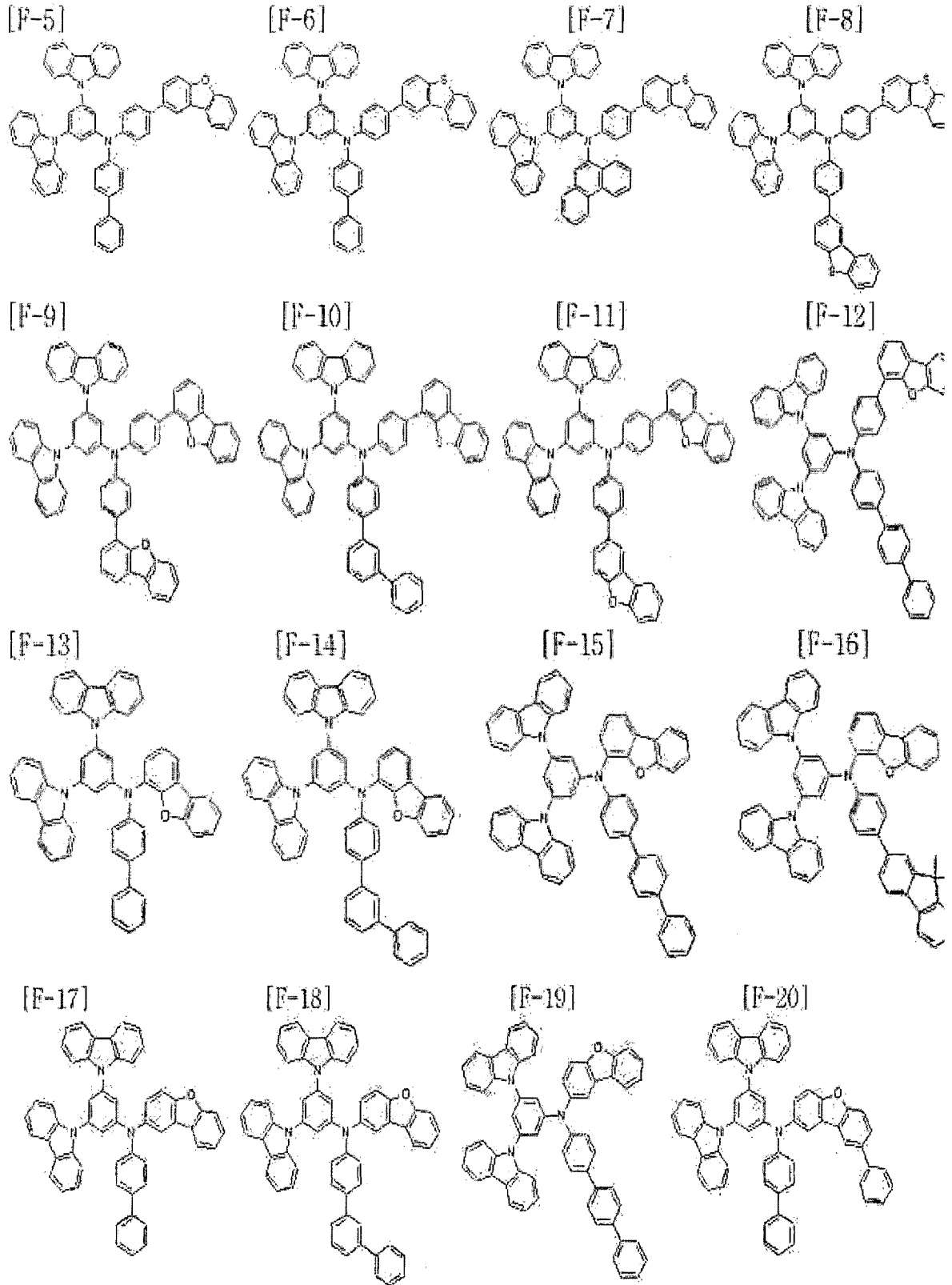


[F-3]



[F-4]





5 본 발명의 다른 일 구현예에서는, 양극, 음극 및 상기 양극과 음극 사이에

개재되는 한 층 이상의 유기박막층을 포함하고, 상기 유기박막층 중 적어도 어느 한 층은 상기 본 발명의 일 구현예에 따른 화합물을 포함하는 것인 유기광전자소자를 제공한다.

상기 유기광전자소자용 화합물은 유기박막층에 사용되어 유기광전자소자의 수명 특성, 효율 특성, 전기화학적 안정성 및 열적 안정성을 향상시키며, 구동전압을 낮출 수 있다.

상기 유기박막층은 구체적으로, 정공주입층, 정공수송층, 보조 정공수송층, 또는 발광층일 수 있다.

상기 유기광전자소자는 유기발광소자, 유기 광전 소자, 유기태양전지, 유기트랜지스터, 유기 감광체 드럼 또는 유기메모리소자일 수 있다.

보다 구체적으로, 상기 유기광전자소자는 유기발광소자일 수 있다. 도 1 또는 도 2는 본 발명의 일 구현예에 따른 화합물을 포함하는 유기발광소자의 단면도이다.

도 1 또는 도 2를 참조하면, 본 발명의 일 구현예에 따른 유기발광소자(100 및 200)는 양극(120), 음극(110) 및 이 양극과 음극 사이에 개재된 적어도 1층의 유기박막층(105)을 포함하는 구조를 갖는다.

상기 양극(120)은 양극 물질을 포함하며, 이 양극 물질로는 통상 유기박막층으로 정공주입이 원활할 수 있도록 일 함수가 큰 물질이 바람직하다. 상기 양극 물질의 구체적인 예로는 니켈, 백금, 바나듐, 크롬, 구리, 아연, 금과 같은 금속 또는 이들의 합금을 들 수 있고, 아연산화물, 인듐산화물, 인듐주석산화물(ITO), 인듐아연산화물(IZO)과 같은 금속 산화물을 들 수 있고, ZnO와 Al 또는 SnO<sub>2</sub>와 Sb와 같은 금속과 산화물의 조합을 들 수 있고, 폴리(3-메틸티오펜), 폴리(3,4-(에틸렌-1,2-디옥시)티오펜)(polyethylenedioxythiophene: PEDT), 폴리피롤 및 폴리아닐린과 같은 전도성 고분자 등을 들 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다. 바람직하게는 상기 양극으로 ITO(indium tin oxide)를 포함하는 투명전극을 사용할 수 있다.

상기 음극(110)은 음극 물질을 포함하여, 이 음극 물질로는 통상 유기박막층으로 전자주입이 용이하도록 일 함수가 작은 물질인 것이

바람직하다. 음극 물질의 구체적인 예로는 마그네슘, 칼슘, 나트륨, 칼륨, 타이타늄, 인듐, 이트륨, 리튬, 가돌리늄, 알루미늄, 은, 주석, 납, 세슘, 바륨 등과 같은 금속 또는 이들의 합금을 들 수 있고, LiF/Al, LiO<sub>2</sub>/Al, LiF/Ca, LiF/Al 및 BaF<sub>2</sub>/Ca과 같은 다층 구조 물질 등을 들 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다. 바람직하게는 상기 음극으로 알루미늄 등과 같은 금속전극을 사용할 수 있다.

먼저 도 1을 참조하면, 도 1은 유기박막층(105)으로서 발광층(130)만이 존재하는 유기발광소자(100)를 나타낸 것으로, 상기 유기박막층(105)은 발광층(130)만으로 존재할 수 있다.

도 2를 참조하면, 도 2는 유기박막층(105)으로서 전자수송층을 포함하는 발광층(230)과 정공 수송층(140)이 존재하는 2층형 유기발광소자(200)를 나타낸 것으로, 도 2에 나타난 바와 같이, 유기박막층(105)은 발광층(230) 및 정공수송층(140)을 포함하는 2층형일 수 있다. 이 경우 발광층(130)은 전자수송층의 기능을 하며, 정공수송층(140)은 ITO와 같은 투명전극과의 접합성 및 정공수송성을 향상시키는 기능을 한다. 또한, 도 1 또는 도 2에서 유기박막층(105)은 도시하지는 않았지만 전자주입층, 전자수송층, 보조 전자수송층, 보조 정공수송층, 또는 정공주입층 등을 추가로 포함할 수 있다. 상기 도 1 또는 도 2에서 상기 유기박막층(105)을 이루는 발광층(130, 230), 정공수송층(140), 도시하지는 않았지만 추가될 수 있는 보조 정공수송층, 전자수송층, 보조 전자수송층, 및 이들의 조합으로 이루어진 군에서 선택되는 어느 하나는 상기 화합물을 포함한다.

특히 상기 화합물은 상기 정공수송층(140), 보조 정공수송층, 또는 발광층(130, 230)에 사용될 수 있고, 발광층(130, 230)에 사용되는 경우 발광층 내에서 호스트 재료로 사용될 수 있다.

상기에서 설명한 유기발광소자는, 기판에 양극을 형성한 후, 진공증착법(evaporation), 스퍼터링(sputtering), 플라즈마 도금 및 이온도금과 같은 건식성막법; 또는 스핀코팅(spin coating), 침지법(dipping), 유동코팅법(flow coating)과 같은 습식성막법 등으로 유기박막층을 형성한 후, 그 위에 음극을 형성하여 제조할 수 있다.

본 발명의 또 다른 일 구현예에서는, 상기 유기발광소자를 포함하는 표시장치를 제공한다.

**【발명의 실시를 위한 형태】**

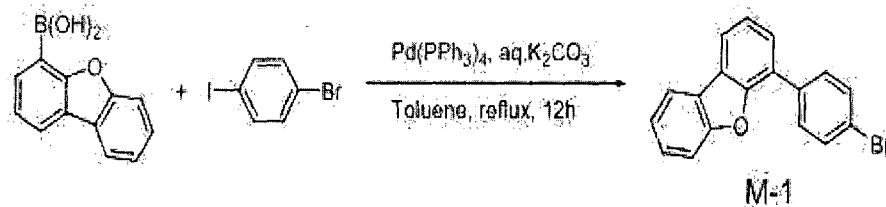
이하에서는 본 발명의 구체적인 실시예들을 제시한다. 다만, 하기에

- 5 기재된 실시예들은 본 발명을 구체적으로 예시하거나 설명하기 위한 것에 불과하며, 이로써 본 발명이 제한되어서는 아니된다.

**(유기광전자소자용 화합물의 제조)**

**중간체의 합성**

**합성예 1: 중간체 M-1의 합성**



10

등근바닥 플라스크에 4-디벤조퓨란보론산 20g(94.3mmol), 1-브로모-4-아이오도벤젠 26.7g (94.3mmol)을 넣고 톨루엔(313ml)을 가하여 용해시킨 후 탄산칼륨 19.5g (141.5mmol)을 녹인 수용액 117ml를 첨가시키고 교반하였다. 여기에 테트라키스트리페닐포스핀팔라듐 1.09g(0.94mmol)을 가한 후

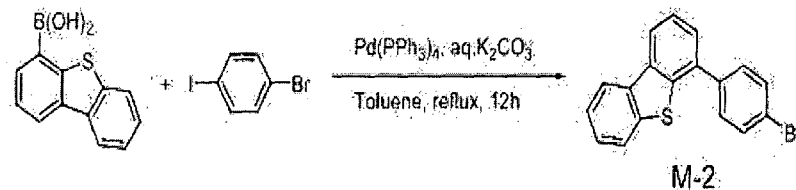
15

질소분위기하에서 12시간 동안 환류 교반 하였다. 반응 종료 후 에틸아세테이트로 추출 후 추출액을 마그네슘 설페이트로 건조 및 여과하고 여과액을 감압 농축하였다. 생성물을 n-헥산/디클로로메탄 (9:1 부피비)으로 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 중간체 M-1을

20

흰색 고체로 27g (수율 89%)을 수득하였다. (계산값: 322.00g/mol, 측정값: M+ = 322.09g/mol, M+2 = 324.04g/mol)

**합성예 2: 중간체 M-2의 합성**

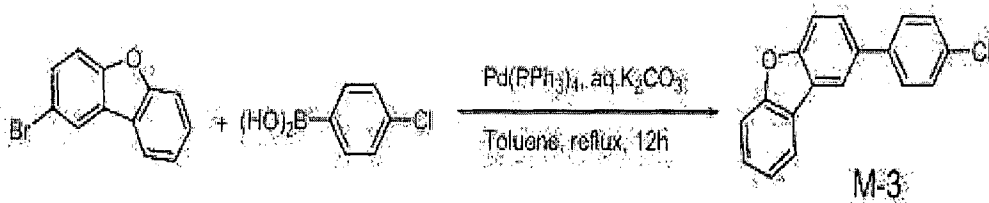


등근바닥 플라스크에 4-디벤조티오펜보론산 21.5g(94.3mmol), 1-브로모-4-

아이오도벤젠 26.7g (94.3mmol)을 넣고 톨루엔(313ml)을 가하여 용해시킨 후 탄산칼륨 19.5g (141.5mmol)을 녹인 수용액 117ml를 첨가시키고 교반하였다. 여기에 테트라키스트리페닐포스핀팔라듐 1.09g(0.94mmol)을 가한 후 질소분위기하에서 12시간 동안 환류 교반 하였다. 반응 종료 후

- 5 에틸아세테이트로 추출 후 추출액을 마그네슘 설페이트로 건조 및 여과하고 여과액을 감압 농축하였다. 생성물을 n-헥산/디클로로메탄 (9:1 부피비)으로 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 중간체 M-2를 흰색 고체로 29g (수율 91%)을 수득하였다. (계산값: 337.98g/mol, 측정값: M+ = 338.04g/mol, M+2 = 340.11g/mol)

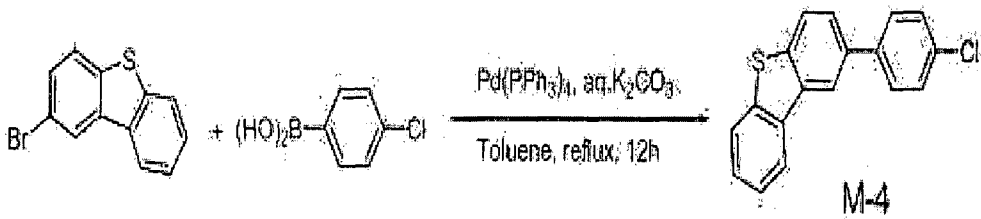
10 **합성예 3: 중간체 M-3의 합성**



동근바닥 플라스크에 4-클로로페닐보론산 14.7g(94.3mmol), 2-브로모디벤조퓨란 23.3g (94.3mmol)을 넣고 톨루엔(313ml)을 가하여 용해시킨 후 탄산칼륨 19.5g (141.5mmol)을 녹인 수용액 117ml를 첨가시키고

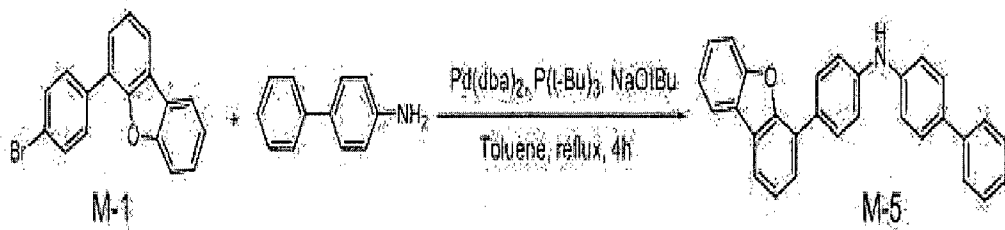
- 15 교반하였다. 여기에 테트라키스트리페닐포스핀팔라듐 1.09g(0.94mmol)을 가한 후 질소분위기하에서 12시간 동안 환류 교반하였다. 반응 종료 후 에틸아세테이트로 추출 후 추출액을 마그네슘 설페이트로 건조 및 여과하고 여과액을 감압 농축하였다. 생성물을 n-헥산/디클로로메탄 (9:1 부피비)으로 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 중간체 M-3를
- 20 흰색 고체로 23.9g (수율 91%)을 수득하였다. (계산값: 278.05g/mol, 측정값: M+ = 278.12g/mol, M+2 = 280.13g/mol)

**합성예 4: 중간체 M-4의 합성**



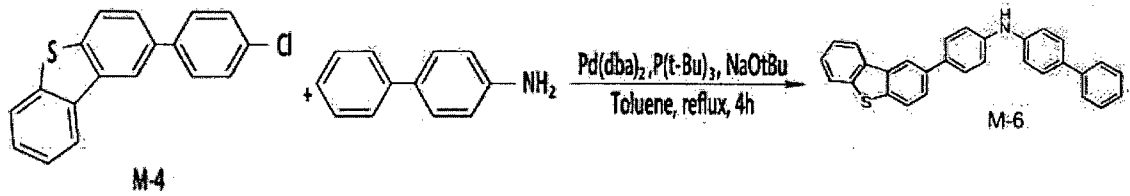
둥근바닥 플라스크에 4-클로로페닐보론산 14.7g(94.3mmol), 2-  
 브로모디벤조티오펜 24.8g (94.3mmol)을 넣고 톨루엔(313ml)을 가하여  
 용해시킨 후 탄산칼륨 19.5g (141.5mmol)을 녹인 수용액 117ml를 첨가시키고  
 교반하였다. 여기에 테트라키스트리페닐포스핀팔라듐 1.09g(0.94mmol)을 가한  
 5 후 질소분위기하에서 12시간 동안 환류 교반 하였다. 반응 종료 후  
 에틸아세테이트로 추출 후 추출액을 마그네슘 설페이트로 건조 및 여과하고  
 여과액을 감압 농축하였다. 생성물을 n-헥산/디클로로메탄 (9:1 부피비)으로  
 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 중간체 M-4를  
 흰색 고체로 25.6g (수율 92%)을 수득하였다. (계산값: 294.03g/mol, 측정값: M+  
 10 = 294.16g/mol, M+2 = 296.13g/mol)

**합성예 5: 중간체 M-5의 합성**



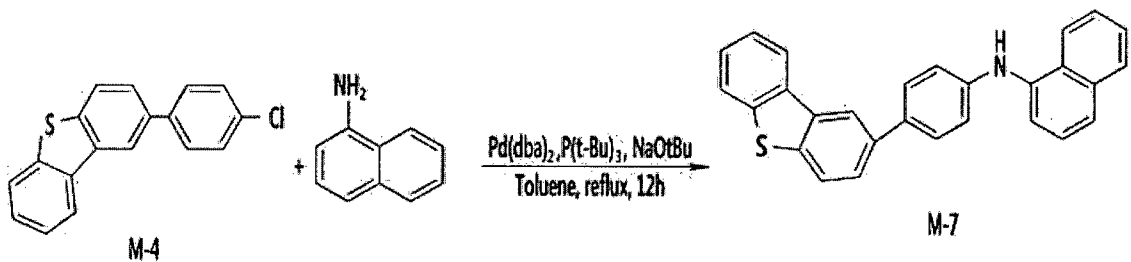
둥근바닥 플라스크에 중간체 M-1 10g(30.9mmol)과 4-아미노바이페닐  
 6.3g(37.08mmol), 소듐 t-부톡사이드 5.35g(55.6mmol)을 넣고 톨루엔 155ml을  
 15 가하여 용해시켰다. 여기에 Pd(dba)<sub>2</sub> 0.178g (0.31mmol)과 트리-터셔리-  
 부틸포스핀 0.125g(0.62mmol)을 차례로 넣은 후 질소 분위기 하에서 4시간  
 동안 환류 교반 시킨다. 반응 종료 후 에틸아세테이트와 증류수로 추출 후  
 유기층을 마그네슘 설페이트로 건조, 여과하고 여과액을 감압 농축하였다.  
 생성물을 n-헥산/디클로로메탄(7:3 부피비) 으로 실리카 겔 컬럼  
 20 크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 중간체 M-5를 흰색 고체로  
 9.92g(수율 78%)을 수득하였다. (계산값: 411.16g/mol, 측정값: M+ = 411.21g/mol)

**합성예 6: 중간체 M-6의 합성**



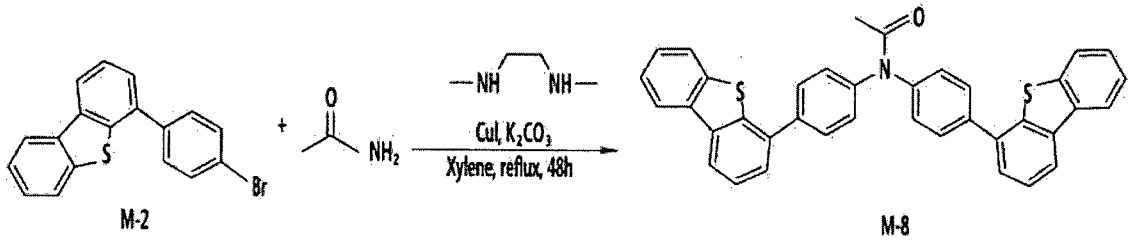
- 동근바닥 플라스크에 중간체 M-4 9.1g(30.9mmol)과 4-아미노바이페닐 6.3g(37.08mmol), 소듐 t-부톡사이드 5.35g(55.6mmol)을 넣고 톨루엔 155ml을 가하여 용해 시켰다. 여기에 Pd(dba)<sub>2</sub> 0.178g (0.31mmol)과 트리-터셔리-부틸포스핀 0.125g(0.62mmol)을 차례로 넣은 후 질소 분위기 하에서 4시간 동안 환류 교반 시킨다. 반응 종료 후 에틸아세테이트과 증류수로 추출 후 유기층을 마그네슘 설페이트로 건조, 여과하고 여과액을 감압 농축하였다. 생성물을 n-헥산/디클로로메탄(7:3 부피비) 으로 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 중간체 M-6을 흰색 고체로 10 10.6g(수율 80%)을 수득하였다. (계산값: 427.14g/mol, 측정값: M+ = 427.19g/mol)

합성예 7: 중간체 M-7의 합성



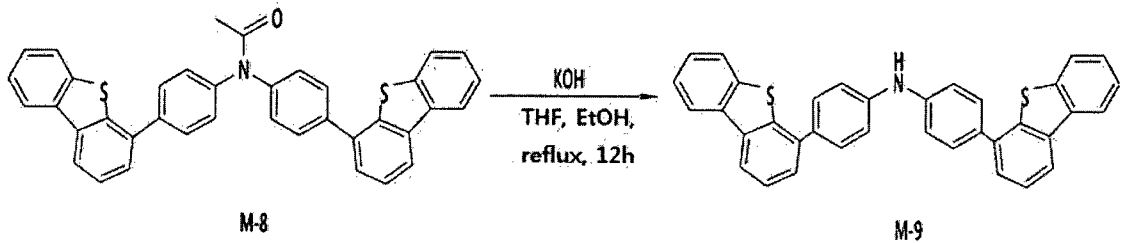
- 동근바닥 플라스크에 중간체 M-4 9.1g(30.9mmol)과 1-아미노나프탈렌 5.3g(37.08mmol), 소듐 t-부톡사이드 5.35g(55.6mmol)을 넣고 톨루엔 155ml을 15 가하여 용해시켰다. 여기에 Pd(dba)<sub>2</sub> 0.178g (0.31mmol)과 트리-터셔리-부틸포스핀 0.125g(0.62mmol)을 차례로 넣은 후 질소 분위기 하에서 12시간 동안 환류 교반 시킨다. 반응 종료 후 에틸아세테이트과 증류수로 추출 후 유기층을 마그네슘 설페이트로 건조, 여과하고 여과액을 감압 농축하였다. 생성물을 n-헥산/디클로로메탄(7:3 부피비) 으로 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 중간체 M-7을 흰색 고체로 20 10g(수율 81%)을 수득하였다. (계산값: 401.12g/mol, 측정값: M+ = 401.15g/mol)

합성예 8: 중간체 M-8의 합성



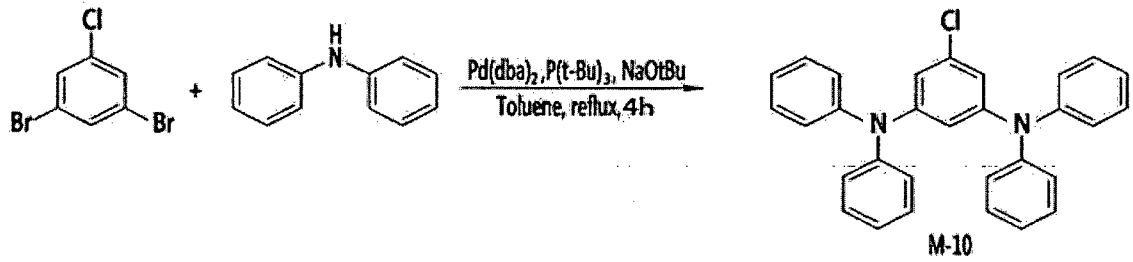
5 둥근바닥 플라스크에 중간체 M-2 31.9g(64.7mmol)과 아세트아미드 1.74g(29.4mmol), 탄산칼륨 17.3g(117.6mmol)을 넣고 자일렌 130ml을 가하여 용해 시켰다. 여기에 요오드화구리(I) 1.12g (5.88mmol)과 N,N-디메틸에틸렌디아민 1.04g(11.8mmol)을 차례로 넣은 후 질소 분위기 하에서 48시간 동안 환류 교반 시킨다. 반응 종료 톨루엔과 증류수로 추출 후 유기층을 마그네슘 설페이트로 건조, 여과하고 여과액을 감압 농축하였다. 생성물을 n-헥산/에틸아세테이트(7:3 부피비)으로 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 M-8을 14g(수율 93%)을 10 수득하였다. (계산값: 575.14g/mol, 측정값: M+ = 575.31g/mol)

**합성예 9: 중간체 M-9의 합성**



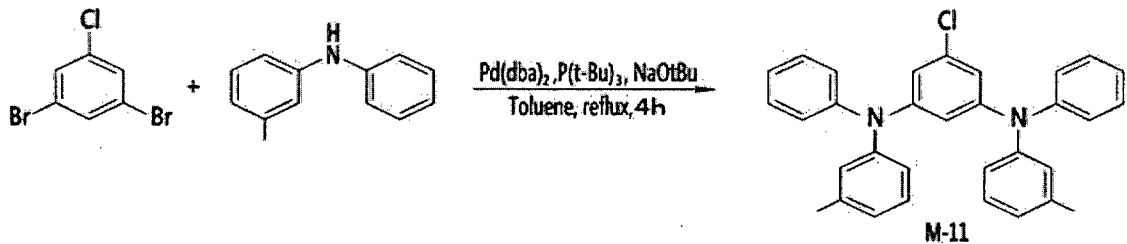
15 둥근바닥 플라스크에 중간체 M-8 13g(25.2mmol)과 수산화칼륨 4.2g(75.6mmol)을 넣고 테트라하이드로퓨란 80ml와 에탄올 80mL을 가하여 용해 시켰다. 질소 분위기 하에서 12시간 동안 환류 교반 시킨다. 반응 종료 반응액을 감압 농축한 후 디클로로메탄과 증류수로 추출 후 유기층을 마그네슘 설페이트로 건조, 여과하고 여과액을 감압 농축하였다. 생성물을 n-헥산/디클로로메탄(7:3 부피비)으로 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 M-9를 12.1g(수율 90%)을 20 수득하였다. (계산값: 533.13g/mol, 측정값: M+ = 533.26g/mol)

**합성예 10: 중간체 M-10의 합성**



둥근바닥 플라스크에 1,3-디브로모-5-클로로벤젠 25g(92.47mmol)과  
 디페닐아민 31.3g(184.9mmol), 소듐 t-부톡사이드 26.7g(277.41mmol)을 넣고  
 톨루엔 463ml을 가하여 용해시켰다. 여기에 Pd(dba)<sub>2</sub> 0.266g (0.462mmol)과  
 5 트리-터셔리-부틸포스핀 0.187g(0.924mmol)을 차례로 넣은 후 질소 분위기  
 하에서 4시간 동안 환류 교반 시킨다. 반응 종료 후 에틸아세테이트과  
 증류수로 추출 후 유기층을 마그네슘 설페이트로 건조, 여과하고 여과액을  
 감압 농축하였다. 생성물을 n-헥산/디클로로메탄(9:1 부피비) 으로 실리카 겔  
 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 중간체 M-10을 흰색 고체로  
 10 34.7g(수율 84%)을 수득하였다. (계산값: 446.15g/mol, 측정값: M+ =  
 446.23g/mol)

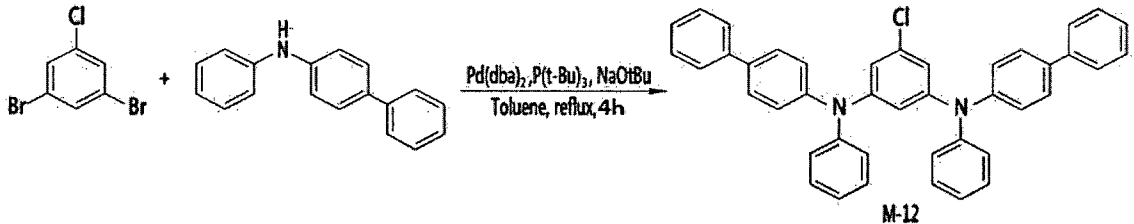
**합성예 11: 중간체 M-11의 합성**



둥근바닥 플라스크에 1,3-디브로모-5-클로로벤젠 25g(92.47mmol)과 3-  
 15 메틸디페닐아민 33.9g(184.9mmol), 소듐 t-부톡사이드 26.7g(277.41mmol)을  
 넣고 톨루엔 463ml을 가하여 용해시켰다. 여기에 Pd(dba)<sub>2</sub> 0.266g  
 (0.462mmol)과 트리-터셔리-부틸포스핀 0.187g(0.924mmol)을 차례로 넣은 후  
 질소 분위기 하에서 4시간 동안 환류 교반 시킨다. 반응 종료 후  
 에틸아세테이트과 증류수로 추출 후 유기층을 마그네슘 설페이트로 건조,  
 20 여과하고 여과액을 감압 농축하였다. 생성물을 n-헥산/디클로로메탄(9:1  
 부피비) 으로 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인  
 중간체 M-11을 흰색 고체로 37.3g(수율 85%)을 수득하였다. (계산값:

474.19g/mol, 측정값: M+ = 474.28g/mol)

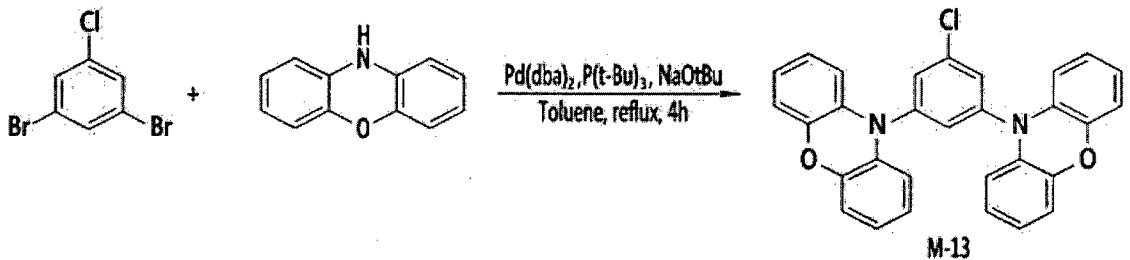
**합성예 12: 중간체 M-12의 합성**



5  
10  
15  
20

동근바닥 플라스크에 1,3-디브로모-5-클로로벤젠 25g(92.47mmol)과 바이페닐-4-일-페닐 아민 45.4g(184.9mmol), 소디움 t-부톡사이드 26.7g(277.41mmol)을 넣고 톨루엔 463ml을 가하여 용해시켰다. 여기에 Pd(dba)<sub>2</sub> 0.266g (0.462mmol)과 트리-터셔리-부틸포스핀 0.187g(0.924mmol)을 차례로 넣은 후 질소 분위기 하에서 4시간 동안 환류 교반 시킨다. 반응 종료 후 에틸아세테이트과 증류수로 추출 후 유기층을 마그네슘 설페이트로 건조, 여과하고 여과액을 감압 농축하였다. 생성물을 n-헥산/디클로로메탄(8:2 부피비) 으로 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 중간체 M-12를 흰색 고체로 44.9g(수율 81%)을 수득하였다. (계산값: 598.22g/mol, 측정값: M+ = 598.37g/mol)

**합성예 13: 중간체 M-13의 합성**

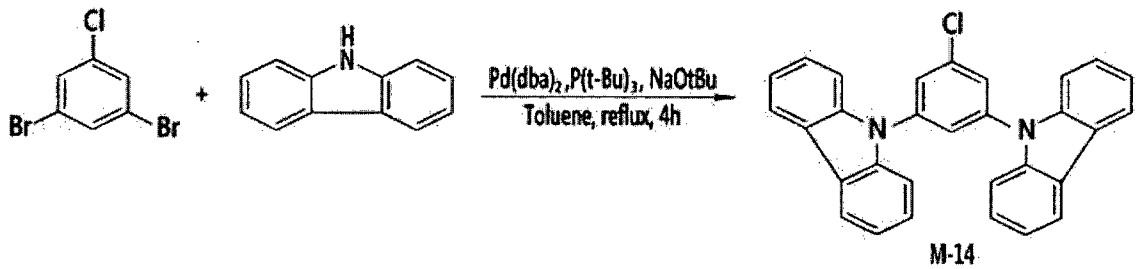


15  
20

동근바닥 플라스크에 1,3-디브로모-5-클로로벤젠 25g(92.47mmol)과 페녹사진 33.9g(184.9mmol), 소디움 t-부톡사이드 26.7g(277.41mmol)을 넣고 톨루엔 463ml을 가하여 용해시켰다. 여기에 Pd(dba)<sub>2</sub> 0.266g (0.462mmol)과 트리-터셔리-부틸포스핀 0.187g(0.924mmol)을 차례로 넣은 후 질소 분위기 하에서 4시간 동안 환류 교반 시킨다. 반응 종료 후 에틸아세테이트과 증류수로 추출 후 유기층을 마그네슘 설페이트로 건조, 여과하고 여과액을 감압 농축하였다. 생성물을 n-헥산/디클로로메탄(8:2 부피비) 으로 실리카 겔 컬럼

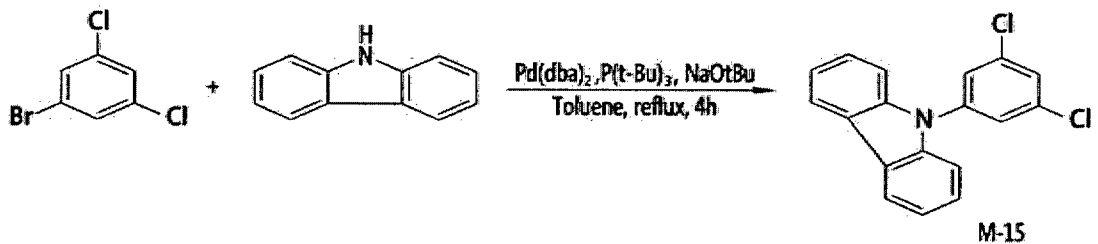
크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 중간체 M-13을 흰색 고체로 36.9g(수율 84%)을 수득하였다. (계산값: 474.11g/mol, 측정값: M+ = 474.26g/mol)

**합성예 14: 중간체 M-14의 합성**



5 동근바닥 플라스크에 1,3-디브로모-5-클로로벤젠 25g(92.47mmol)과 카바졸 30.9g(184.9mmol), 소디움 t-부톡사이드 26.7g(277.41mmol)을 넣고 톨루엔 463ml을 가하여 용해시켰다. 여기에 Pd(dba)<sub>2</sub> 0.266g (0.462mmol)과 트리-  
 10 터셔리-부틸포스핀 0.187g(0.924mmol)을 차례로 넣은 후 질소 분위기 하에서 4시간 동안 환류 교반 시킨다. 반응 종료 후 에틸아세테이트과 증류수로 추출 후 유기층을 마그네슘 설페이트로 건조, 여과하고 여과액을 감압 농축하였다. 생성물을 n-헥산/디클로로메탄(8:2 부피비) 으로 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 중간체 M-14를 흰색 고체로 33.2g(수율 81%)을 수득하였다. (계산값: 442.12g/mol, 측정값: M+ =  
 15 442.36g/mol)

**합성예 15: 중간체 M-15의 합성**

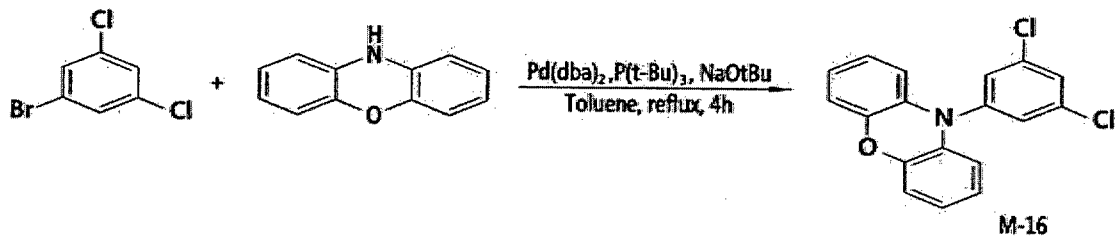


20 동근바닥 플라스크에 1-브로모-3,5-디클로로벤젠 25g(92.47mmol)과 카바졸 15.5g(92.47mmol), 소디움 t-부톡사이드 13.4g(138.7mmol)을 넣고 톨루엔 463ml을 가하여 용해 시켰다. 여기에 Pd(dba)<sub>2</sub> 0.133g (0.231mmol)과 트리-  
 터셔리-부틸포스핀 0.094g(0.462mmol)을 차례로 넣은 후 질소 분위기 하에서 4시간 동안 환류 교반 시킨다. 반응 종료 후 에틸아세테이트과 증류수로

추출 후 유기층을 마그네슘 설페이트로 건조, 여과하고 여과액을 감압 농축하였다. 생성물을 n-헥산/디클로로메탄(9:1 부피비) 으로 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 중간체 M-15를 흰색 고체로 24.0g(수율 83%)을 수득하였다. (계산값: 311.03g/mol, 측정값: M+ =

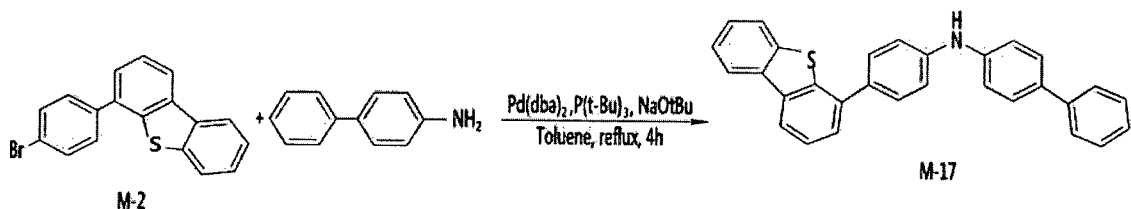
5 311.17g/mol)

**합성예 16: 중간체 M-16의 합성**



10 둥근바닥 플라스크에 1-브로모-3,5-디클로로벤젠 25g(92.47mmol)과 폐녹사진 16.9g(92.47mmol), 소듐 t-부톡사이드 13.4g(138.7mmol)을 넣고 톨루엔 463ml을 가하여 용해시켰다. 여기에 Pd(dba)<sub>2</sub> 0.133g (0.231mmol)과 트리-터셔리-부틸포스핀 0.094g(0.462mmol)을 차례로 넣은 후 질소 분위기 하에서 4시간 동안 환류 교반 시킨다. 반응 종료 후 에틸아세테이트과 증류수로 추출 후 유기층을 마그네슘 설페이트로 건조, 여과하고 여과액을 감압 농축하였다. 생성물을 n-헥산/디클로로메탄(8:2 부피비) 으로 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 중간체 M-16을 흰색 고체로 15 25.7g(수율 85%)을 수득하였다. (계산값: 327.02g/mol, 측정값: M+ = 327.27g/mol)

**합성예 17: 중간체 M-17의 합성**



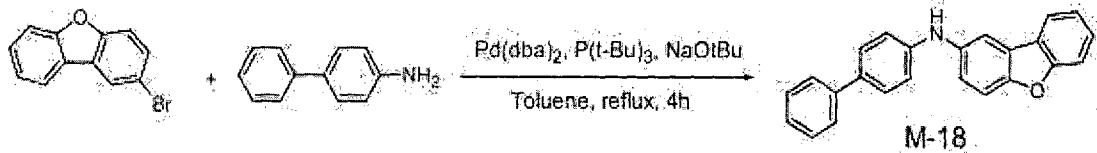
20 둥근바닥 플라스크에 중간체 M-2 10.5g(30.9mmol)과 4-아미노바이페닐 6.3g(37.08mmol), 소듐 t-부톡사이드 5.35g(55.6mmol)을 넣고 톨루엔 155ml을 가하여 용해 시켰다. 여기에 Pd(dba)<sub>2</sub> 0.178g (0.31mmol)과 트리-터셔리-부틸포스핀 0.125g(0.62mmol)을 차례로 넣은 후 질소 분위기 하에서 4시간

동안 환류 교반 시킨다. 반응 종료 후 에틸아세테이트과 증류수로 추출 후 유기층을 마그네슘 설페이트로 건조, 여과하고 여과액을 감압 농축하였다. 생성물을 n-헥산/디클로로메탄(7:3 부피비) 으로 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 중간체 M-17을 흰색 고체로

5 9.91g(수율 75%)을 수득하였다.

(계산값: 427.14g/mol, 측정값: M+ = 427.29g/mol)

**합성예 18: 중간체 M-18의 합성**

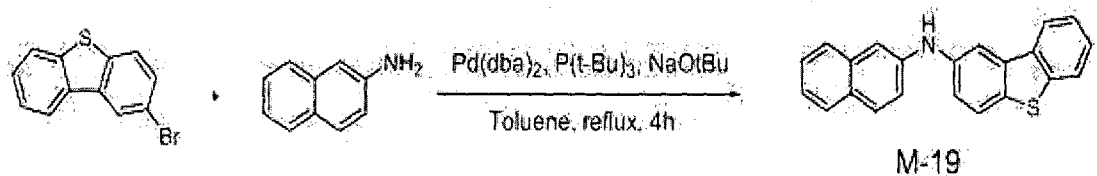


10 동근바닥 플라스크에 중간체 2-브로모디벤조퓨란 7.6g(30.9mmol)과 4-아미노바이페닐 6.3g(37.08mmol), 소듐 t-부톡사이드 5.35g(55.6mmol)을 넣고 톨루엔 155ml을 가하여 용해 시켰다. 여기에 Pd(dba)<sub>2</sub> 0.178g (0.31mmol)과 트리-터셔리-부틸포스핀 0.125g(0.62mmol)을 차례로 넣은 후 질소 분위기 하에서 4시간 동안 환류 교반 시킨다. 반응 종료 후 에틸아세테이트과 증류수로 추출 후 유기층을 마그네슘 설페이트로 건조, 여과하고 여과액을

15 감압 농축하였다. 생성물을 n-헥산/디클로로메탄(7:3 부피비) 으로 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 중간체 M-18을 흰색 고체로 8.1g(수율 78%)을 수득하였다.

(계산값: 335.13g/mol, 측정값: M+ = 335.42g/mol)

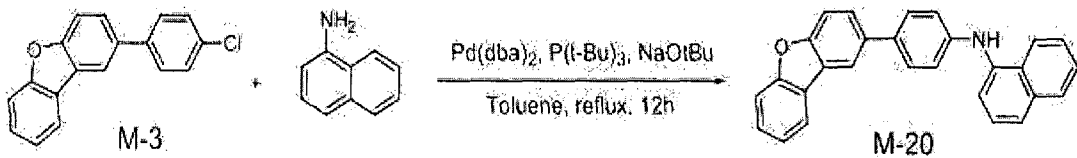
**합성예 19: 중간체 M-19의 합성**



20 동근바닥 플라스크에 중간체 2-브로모디벤조티오펜 8.1g(30.9mmol)과 2-아미노나프탈렌 5.3g(37.08mmol), 소듐 t-부톡사이드 5.35g(55.6mmol)을 넣고 톨루엔 155ml을 가하여 용해시켰다. 여기에 Pd(dba)<sub>2</sub> 0.178g (0.31mmol)과 트리-터셔리-부틸포스핀 0.125g(0.62mmol)을 차례로 넣은 후 질소 분위기

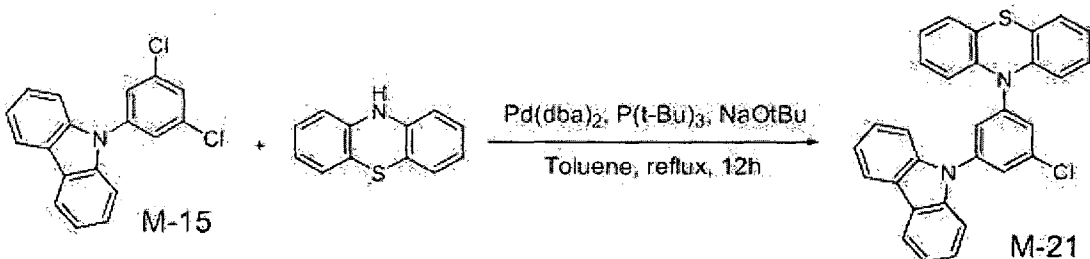
하에서 4시간 동안 환류 교반 시킨다. 반응 종료 후 에틸아세테이트과 증류수로 추출 후 유기층을 마그네슘 설페이트로 건조, 여과하고 여과액을 감압 농축하였다. 생성물을 n-헥산/디클로로메탄(7:3 부피비) 으로 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 중간체 M-19을 흰색 고체로 5 7.9g(수율 79%)을 수득하였다.  
(계산값: 325.09g/mol, 측정값: M+ = 325.33g/mol)

**합성예 20: 중간체 M-20의 합성**



10 등근바닥 플라스크에 중간체 M-3 8.6g(30.9mmol)과 1-아미노나프탈렌 5.3g(37.08mmol), 소듐 t-부톡사이드 5.35g(55.6mmol)을 넣고 톨루엔 155ml을 가하여 용해 시켰다. 여기에 Pd(dba)<sub>2</sub> 0.178g (0.31mmol)과 트리-터셔리-부틸포스핀 0.125g(0.62mmol)을 차례로 넣은 후 질소 분위기 하에서 12시간 동안 환류 교반 시킨다. 반응 종료 후 에틸아세테이트과 증류수로 추출 후 유기층을 마그네슘 설페이트로 건조, 여과하고 여과액을 감압 농축하였다.  
15 생성물을 n-헥산/디클로로메탄(7:3 부피비) 으로 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 중간체 M-20을 흰색 고체로 9.5g(수율 80%)을 수득하였다.  
(계산값: 385.15g/mol, 측정값: M+ = 385.27g/mol)

**합성예 21: 중간체 M-21의 합성**

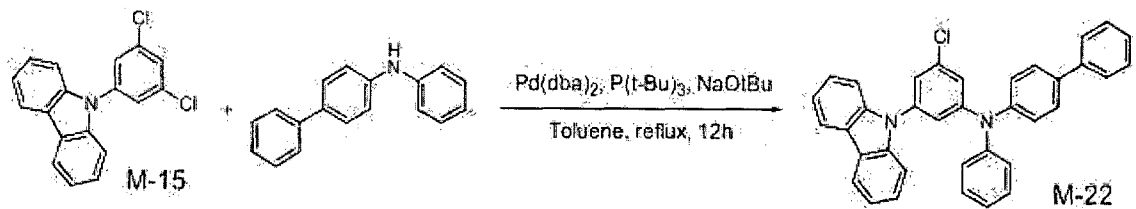


20 등근바닥 플라스크에 M-15 28.9g(92.47mmol)과 페녹사진 16.9g(92.47mmol), 소듐 t-부톡사이드 13.4g(138.7mmol)을 넣고 톨루엔 463ml을 가하여

용해시켰다. 여기에 Pd(dba)<sub>2</sub> 0.133g (0.231mmol)과 트리-터셔리-부틸포스핀 0.094g(0.462mmol) 을 차례로 넣은 후 질소 분위기 하에서 12시간 동안 환류 교반 시킨다. 반응 종료 후 에틸아세테이트과 증류수로 추출 후 유기층을 마그네슘 설페이트로 건조, 여과하고 여과액을 감압 농축하였다. 생성물을 n-  
5 헥산/디클로로메탄(8:2 부피비) 으로 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 중간체 M-21을 흰색 고체로 35.6g(수율 81%)을  
수득하였다.

(계산값: 474.10g/mol, 측정값: M+ = 474.38g/mol)

**합성예 22: 중간체 M-22의 합성**



10

동근바닥 플라스크에 M-15 28.9g(92.47mmol)과 바이페닐-4-일-페닐 아민 22.7g(92.47mmol), 소듐 t-부톡사이드 13.4g(138.7mmol)을 넣고 톨루엔 463ml을 가하여 용해시켰다. 여기에 Pd(dba)<sub>2</sub> 0.133g (0.231mmol)과 트리-  
15 터셔리-부틸포스핀 0.094g(0.462mmol) 을 차례로 넣은 후 질소 분위기 하에서 12시간 동안 환류 교반 시킨다. 반응 종료 후 에틸아세테이트과 증류수로  
추출 후 유기층을 마그네슘 설페이트로 건조, 여과하고 여과액을 감압  
농축하였다. 생성물을 n-헥산/디클로로메탄(8:2 부피비) 으로 실리카 겔 컬럼  
크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 중간체 M-22을 흰색 고체로  
38.1g(수율 79%)을 수득하였다.

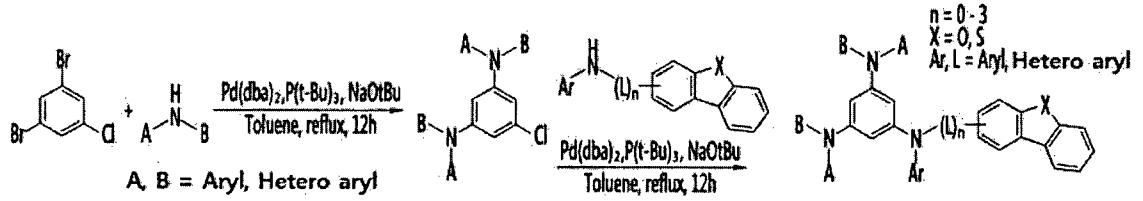
20 (계산값: 520.17g/mol, 측정값: M+ = 520.36g/mol)

**유기광전소자용 화합물의 합성**

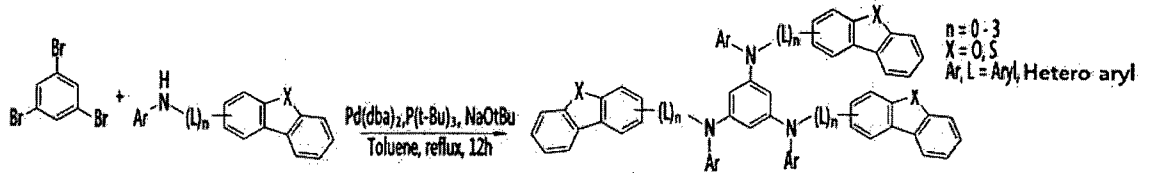
상기에 기재된 화학식 A-1 내지 A-300, B-1 내지 B-20, C-1 내지 C-12, D-1  
내지 D-8, E-1 내지 E-28, 및 F-1 내지 F-20은 하기 일반식 1 내지 6의 합성  
방법에 따라 제조할 수 있다. 본 발명의 일 구현예에 따른 구체 화합물들을  
25 하기 [표 1]에 나타내었다.

[일반식 1] A-1 내지 A-291, 및 A-300 화합물의 합성

[일반식 1-1]

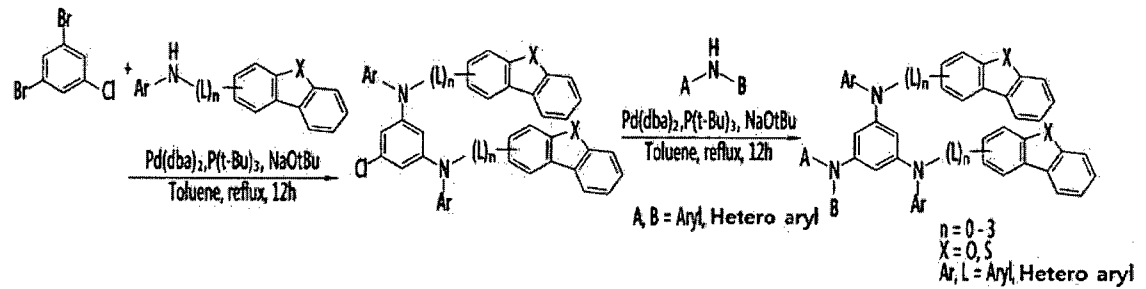


[일반식 1-2]

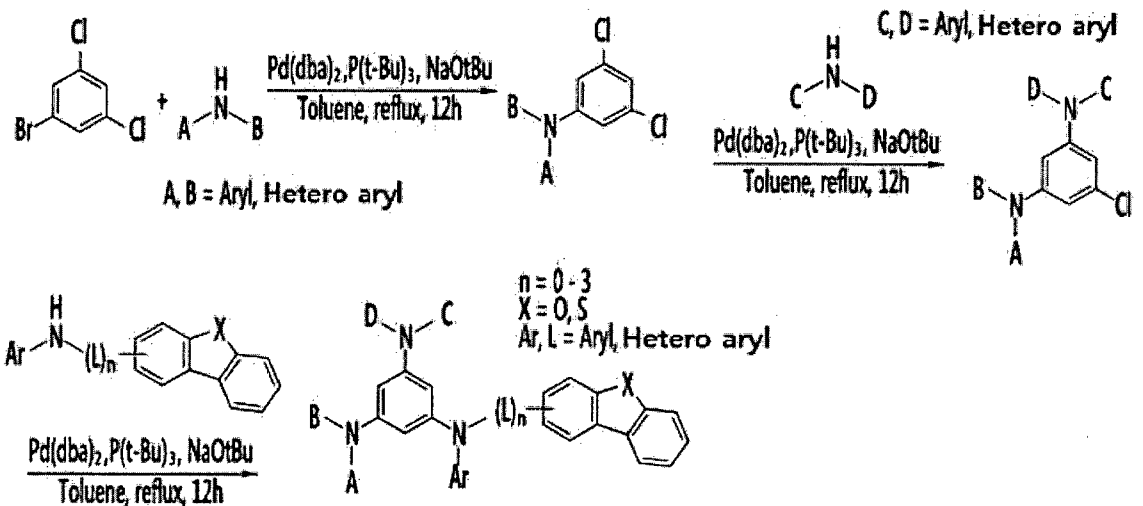


5

[일반식 1-3]

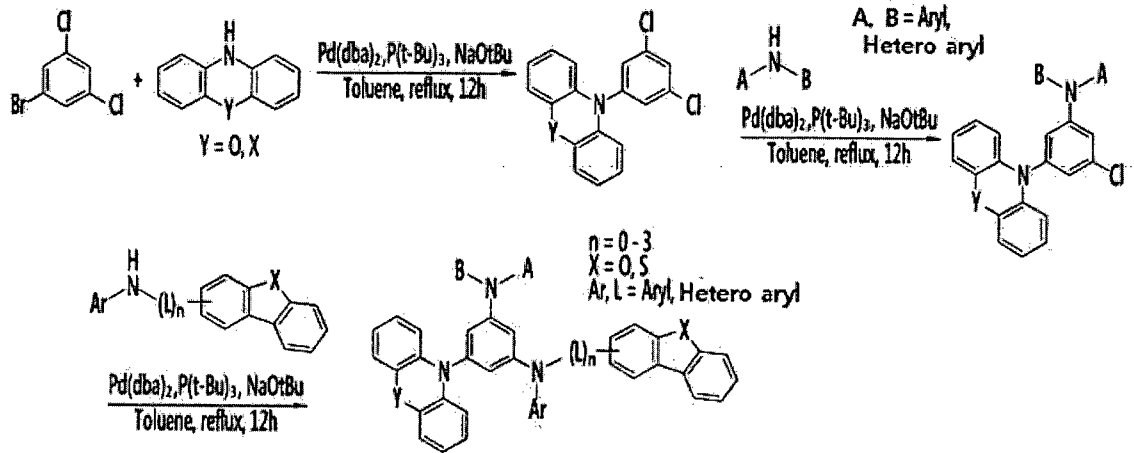


[일반식 1-4]

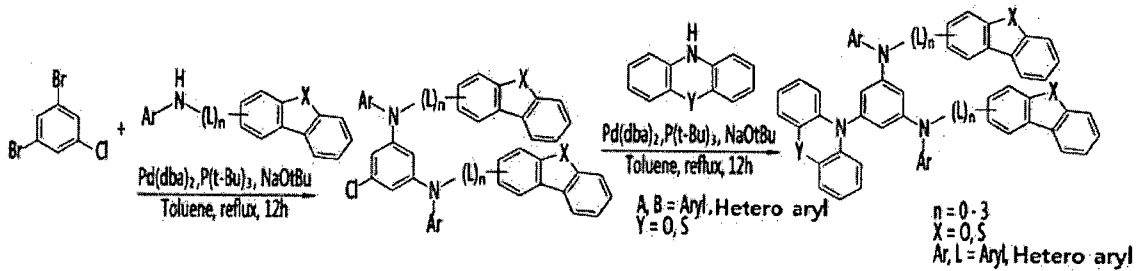


10 [일반식 2] B-1 내지 B-20 화합물의 합성

[일반식 2-1]

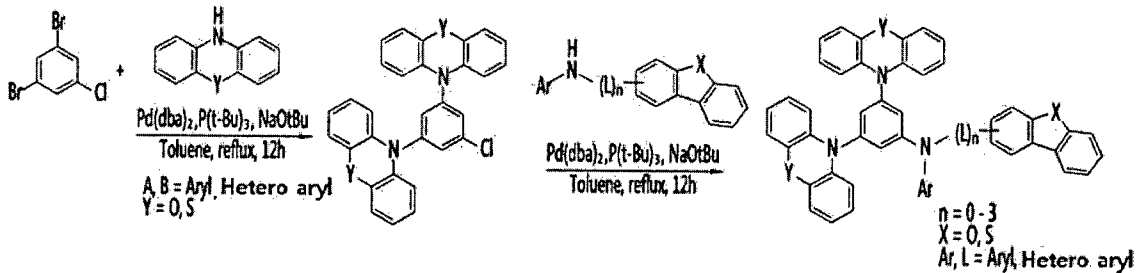


[일반식 2-2]

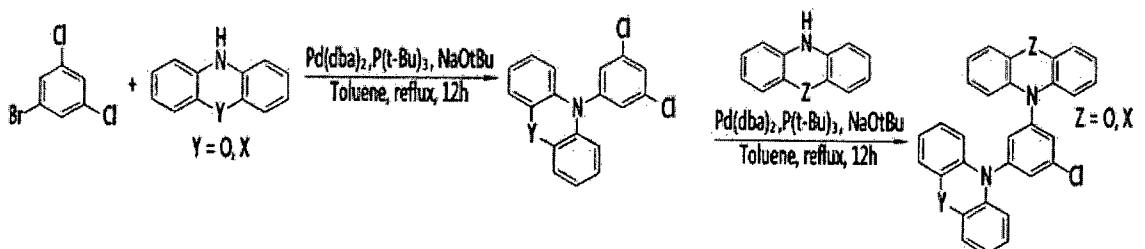


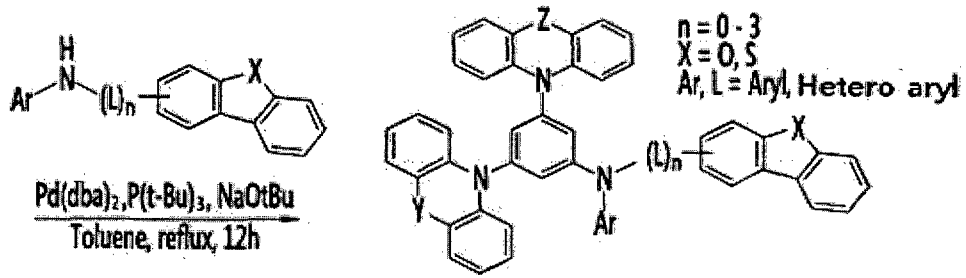
[일반식 3] C-1 내지 C-12 화합물의 합성

5 [일반식 3-1]

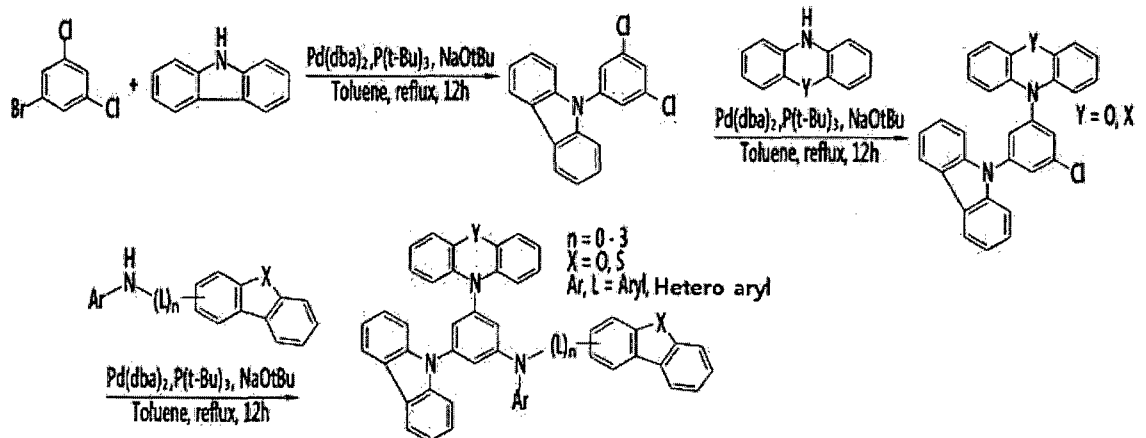


[일반식 3-2]



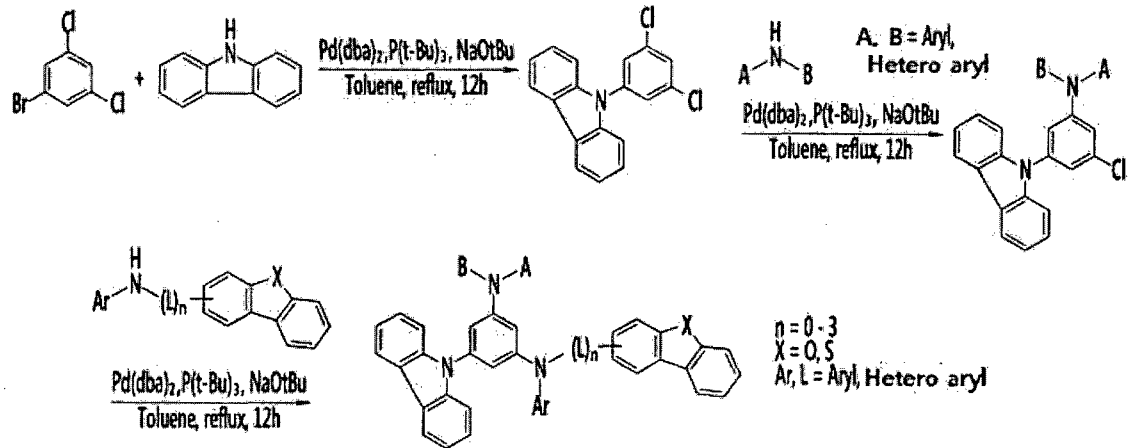


[일반식 4] D-1 내지 D-8 화합물의 합성

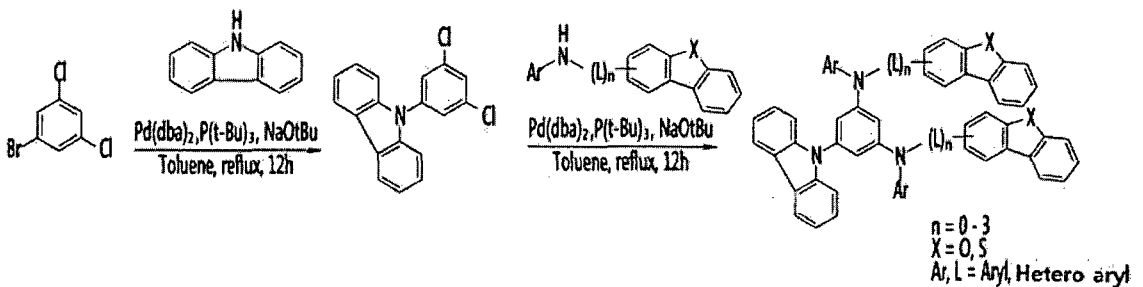


[일반식 5] E-1 내지 E-28 화합물의 합성

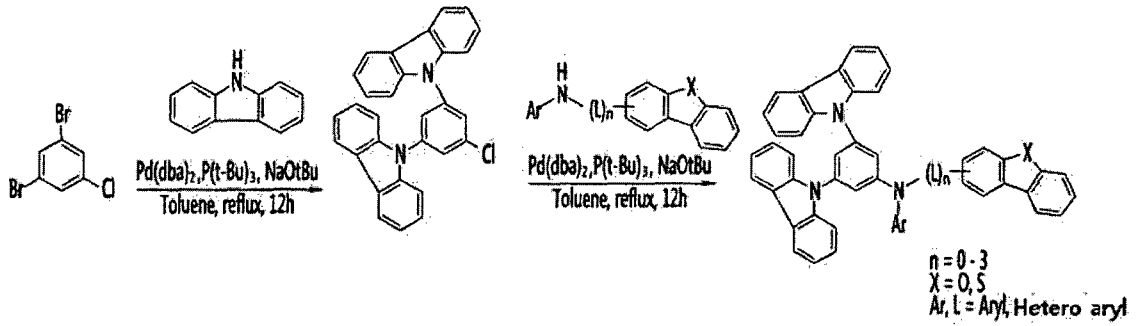
5 [일반식 5-1]



[일반식 5-2]

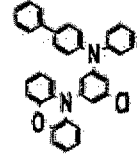
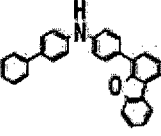
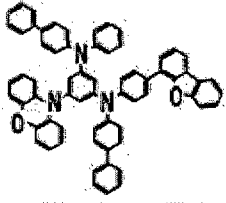
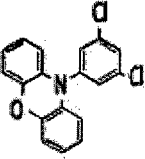
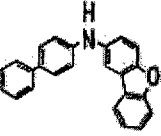
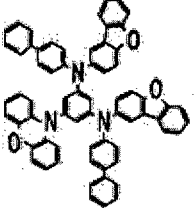
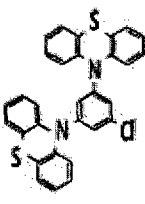
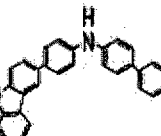
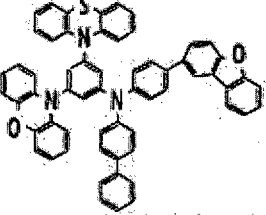
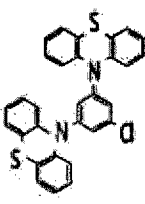
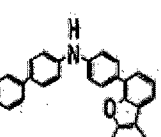
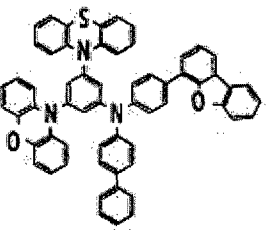
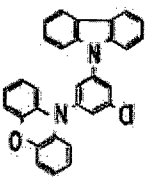
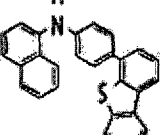
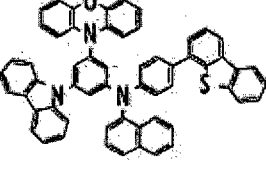


[일반식 6] F-1 내지 F-20 화합물의 합성



[표 1]

합성법	최종 합성 반응 중간체		최종 생성물		
	할로겐 화합물	이갈 아민	화합물 구조	번호	MS[M+]
일반식 1-1				A-38	989.42
일반식 1-2				A-251	1125.51
일반식 1-3				A-209	1063.49
일반식 1-4				A-203	1037.58

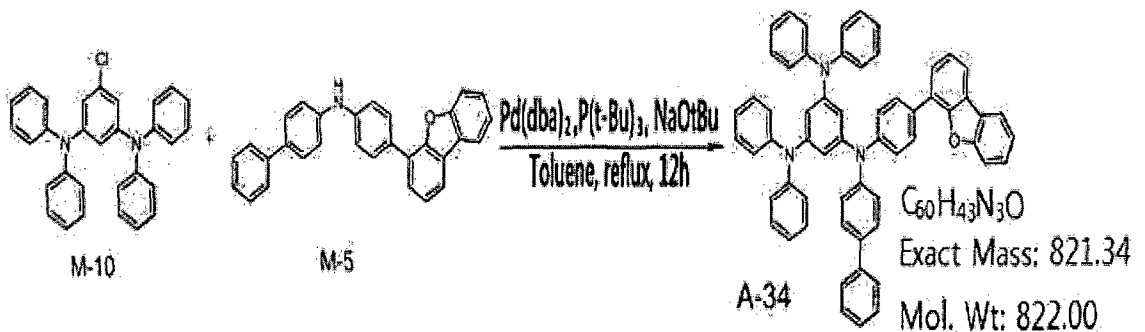
<p>일반식 2-1</p>				<p>B-3</p>	<p>911.57</p>
<p>일반식 2-2</p>				<p>B-10</p>	<p>925.59</p>
<p>일반식 3-1</p>				<p>C-4</p>	<p>881.43</p>
<p>일반식 3-2</p>				<p>C-9</p>	<p>865.51</p>
<p>일반식 4</p>				<p>D-3</p>	<p>823.55</p>

일반식 5-1				E-8	945.62
일반식 5-2				E-17	909.63
일반식 6				F-12	893.57

실시예 1: 화합물 A-34의 합성

상기 화합물 A-34를 하기 반응식 1과 같은 경로를 통해 합성하였다.

5 [반응식 1]



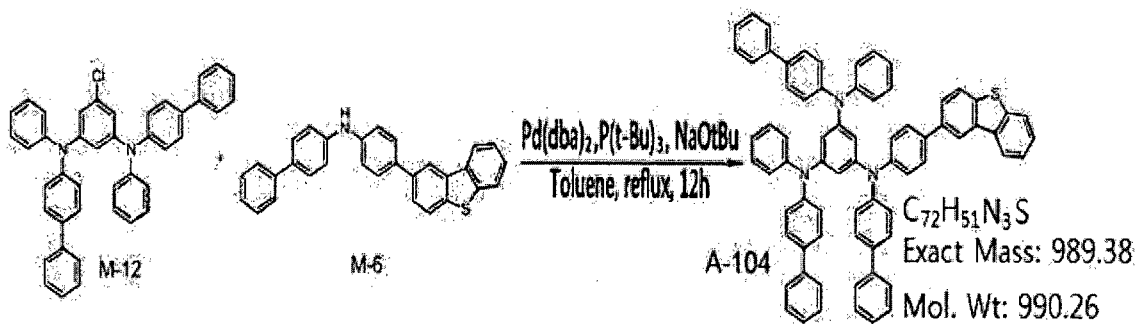
10 등근바닥 플라스크에 중간체 M-10 10g(22.37mmol)과 중간체 M-5 9.2g(22.37mmol), 소디움 t-부톡사이드 3.2g(33.56mmol)을 넣고 톨루엔 250ml을 가하여 용해 시켰다. 여기에 Pd(dba)<sub>2</sub> 0.129g (0.224mmol)과 트리-터셔리-부틸포스핀 0.091g(0.448mmol)을 차례로 넣은 후 질소 분위기 하에서 12시간 동안 환류 교반 시킨다. 반응 종료 후 톨루엔과 증류수로 추출 후 유기층을

마그네슘 설페이트로 건조, 여과하고 여과액을 감압 농축하였다. 생성물을 n-헥산/디클로로메탄(8:2 부피비) 으로 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 A-34를 흰색 고체로 16.9g(수율 92%)을 수득하였다.  
(계산값: 821.34g/mol, 측정값: M+ = 821.46g/mol)

5 **실시예 2: 화합물 A-104의 합성**

상기 화합물 A-104를 하기 반응식 2를 통해 합성하였다.

[반응식 2]

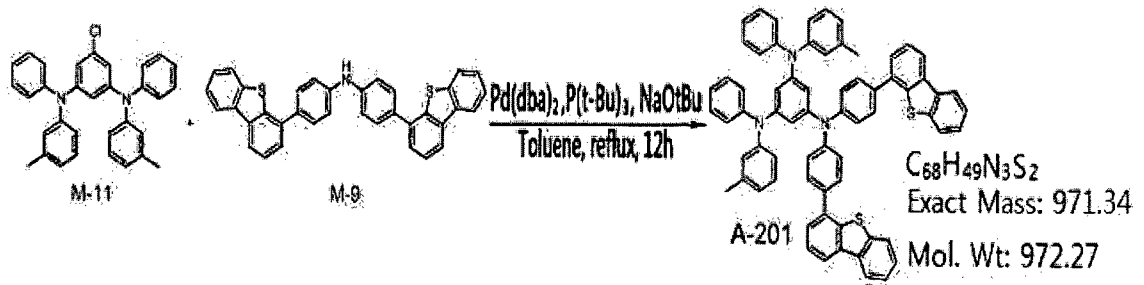


10 둥근바닥 플라스크에 중간체 M-12 13.4g(22.37mmol)과 중간체 M-6 9.6g(22.37mmol), 소듐 t-부톡사이드 3.2g(33.56mmol)을 넣고 톨루엔 250ml을 가하여 용해 시켰다. 여기에 Pd(dba)<sub>2</sub> 0.129g(0.224mmol)과 트리-터셔리-부틸포스핀 0.091g(0.448mmol)을 차례로 넣은 후 질소 분위기 하에서 12시간 동안 환류 교반 시킨다. 반응 종료 후 톨루엔과 증류수로 추출 후 유기층을 15 마그네슘 설페이트로 건조, 여과하고 여과액을 감압 농축하였다. 생성물을 n-헥산/디클로로메탄(8:2 부피비) 으로 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 A-104를 흰색 고체로 20.6g(수율 93%)을 수득하였다.  
(계산값: 989.38g/mol, 측정값: M+ = 989.45g/mol)

**실시예 3: 화합물 A-201의 합성**

상기 화합물 A-201를 하기 반응식 3을 통해 합성하였다.

20 [반응식 3]

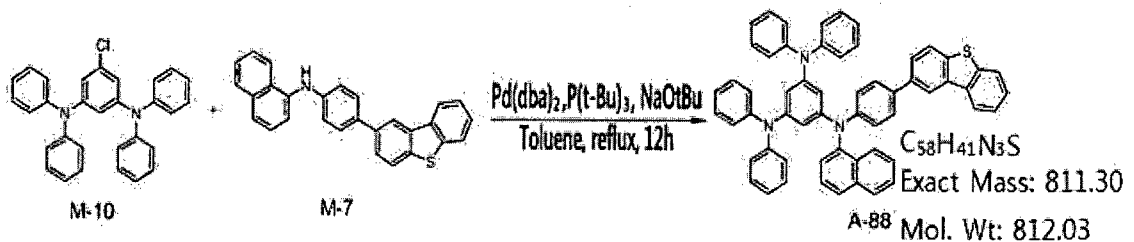


- 5 등근바닥 플라스크에 중간체 M-11 10.6g(22.37mmol)과 중간체 M-9 11.9g (22.37mmol), 소듐 t-부톡사이드 3.2g(33.56mmol)을 넣고 톨루엔 250ml을 가하여 용해시켰다. 여기에 Pd(dba)<sub>2</sub> 0.129g (0.224mmol)과 트리-터셔리-부틸포스핀 0.091g(0.448mmol)을 차례로 넣은 후 질소 분위기 하에서 12시간 동안 환류 교반 시킨다. 반응 종료 후 톨루엔과 증류수로 추출 후 유기층을 마그네슘 설페이트로 건조, 여과하고 여과액을 감압 농축하였다. 생성물을 n-헥산/디클로로메탄(8:2 부피비)으로 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 A-201을 흰색 고체로 19.8g(수율 91%)을 수득하였다.
- 10 (계산값: 971.34g/mol, 측정값: M+ = 971.51g/mol)

**실시예 4: 화합물 A-88의 합성**

상기 화합물 A-88을 하기 반응식 4를 통해 합성하였다.

[반응식 4]



- 15 등근바닥 플라스크에 중간체 M-10 10g(22.37mmol)과 중간체 M-7 9.0g (22.37mmol), 소듐 t-부톡사이드 3.2g(33.56mmol)을 넣고 톨루엔 250ml을 가하여 용해시켰다. 여기에 Pd(dba)<sub>2</sub> 0.129g (0.224mmol)과 트리-터셔리-부틸포스핀 0.091g(0.448mmol)을 차례로 넣은 후 질소 분위기 하에서 12시간 동안 환류 교반 시킨다. 반응 종료 후 톨루엔과 증류수로 추출 후 유기층을 마그네슘 설페이트로 건조, 여과하고 여과액을 감압 농축하였다. 생성물을 n-헥산/디클로로메탄(8:2 부피비)으로 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로
- 20

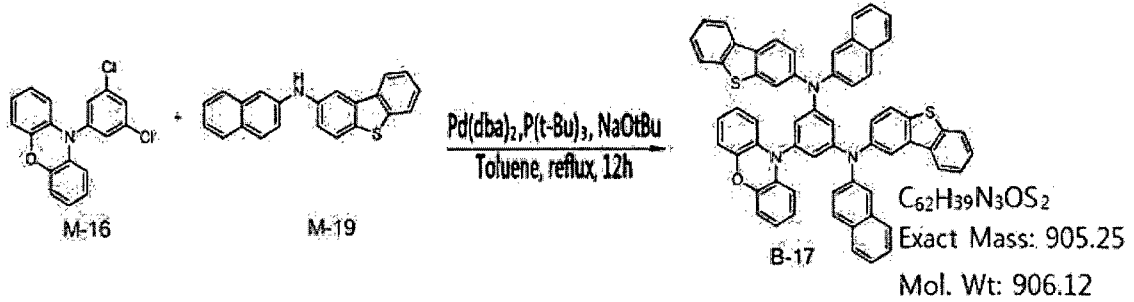
정제하여 목적 화합물인 A-88을 흰색 고체로 16.5g(수율 91%)을 수득하였다.

(계산값: 811.30g/mol, 측정값: M+ = 811.61g/mol)

**실시예 5: 화합물 B-17의 합성**

상기 화합물 B-17을 하기 반응식 5를 통해 합성하였다.

5 [반응식 5]



둥근바닥 플라스크에 중간체 M-16 7.3g(22.37mmol)과 중간체 M-19 14.6g (44.74mmol), 소듐 t-부톡사이드 6.4g(67.11mmol)을 넣고 톨루엔 250ml을 가하여 용해시켰다. 여기에 Pd(dba)<sub>2</sub> 0.258g (0.448mmol)과 트리-터셔리-

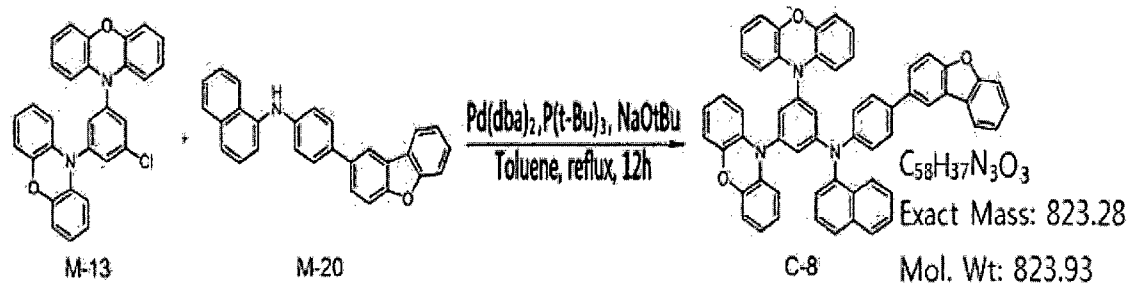
10 부틸포스핀 0.182g(0.896mmol)을 차례로 넣은 후 질소 분위기 하에서 12시간 동안 환류 교반 시킨다. 반응 종료 후 톨루엔과 증류수로 추출 후 유기층을 마그네슘 설페이트로 건조, 여과하고 여과액을 감압 농축하였다. 생성물을 n-헥산/디클로로메탄(8:2 부피비)으로 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 B-17을 연노랑색 고체로 19.1g(수율 94%)을  
15 수득하였다.

(계산값: 905.25g/mol, 측정값: M+ = 905.49g/mol)

**실시예 6: 화합물 C-8의 합성**

상기 화합물 C-8을 하기 반응식 6를 통해 합성하였다.

[반응식 6]



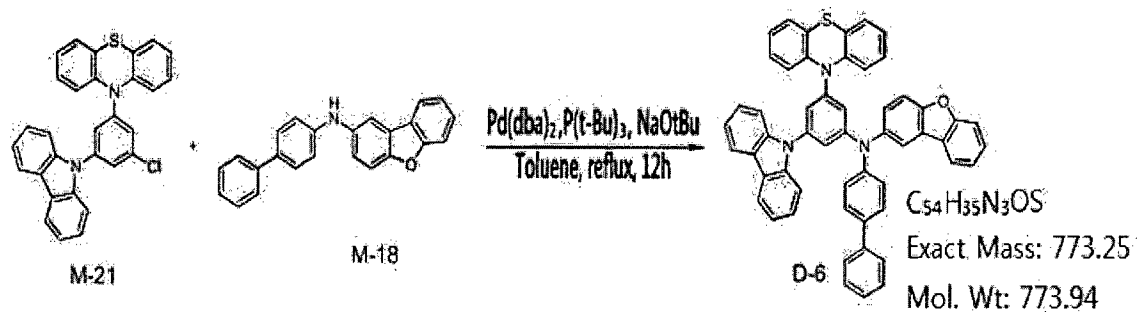
20

둥근바닥 플라스크에 중간체 M-13 10.6g(22.37mmol)과 중간체 M-20 8.6g  
 (22.37mmol), 소듐 t-부톡사이드 3.2g(33.56mmol)을 넣고 톨루엔 250ml을  
 가하여 용해시켰다. 여기에 Pd(dba)<sub>2</sub> 0.129g (0.224mmol)과 트리-터셔리-  
 부틸포스핀 0.091g(0.448mmol)을 차례로 넣은 후 질소 분위기 하에서 12시간  
 5 동안 환류 교반 시킨다. 반응 종료 후 톨루엔과 증류수로 추출 후 유기층을  
 마그네슘 설페이트로 건조, 여과하고 여과액을 감압 농축하였다. 생성물을 n-  
 헥산/디클로로메탄(8:2 부피비)으로 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로  
 정제하여 목적 화합물인 C-8을 흰색 고체로 17g(수율 92%)을 수득하였다.  
 (계산값: 823.28g/mol, 측정값: M+ = 823.41g/mol)

10 실시예 7: 화합물 D-6의 합성

상기 화합물 D-6을 하기 반응식 7을 통해 합성하였다.

[반응식 7]



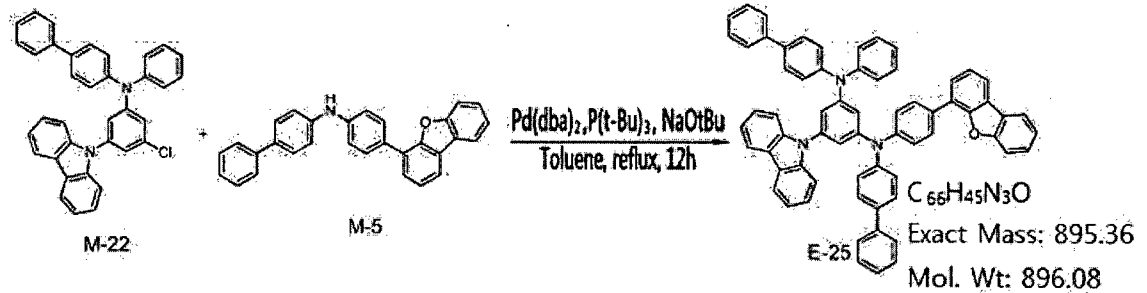
둥근바닥 플라스크에 중간체 M-21 10.6g(22.37mmol)과 중간체 M-18 7.5g  
 (22.37mmol), 소듐 t-부톡사이드 3.2g(33.56mmol)을 넣고 톨루엔 250ml을  
 가하여 용해시켰다. 여기에 Pd(dba)<sub>2</sub> 0.129g (0.224mmol)과 트리-터셔리-  
 부틸포스핀 0.091g(0.448mmol)을 차례로 넣은 후 질소 분위기 하에서 12시간  
 15 동안 환류 교반 시킨다. 반응 종료 후 톨루엔과 증류수로 추출 후 유기층을  
 마그네슘 설페이트로 건조, 여과하고 여과액을 감압 농축하였다. 생성물을 n-  
 20 헥산/디클로로메탄(8:2 부피비)으로 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로  
 정제하여 목적 화합물인 D-6을 연노란색 고체로 16.1g(수율 93%)을  
 수득하였다.

(계산값: 773.25g/mol, 측정값: M+ = 773.51g/mol)

실시예 8: 화합물 E-25의 합성

상기 화합물 E-25를 하기 반응식 8을 통해 합성하였다.

[반응식 8]

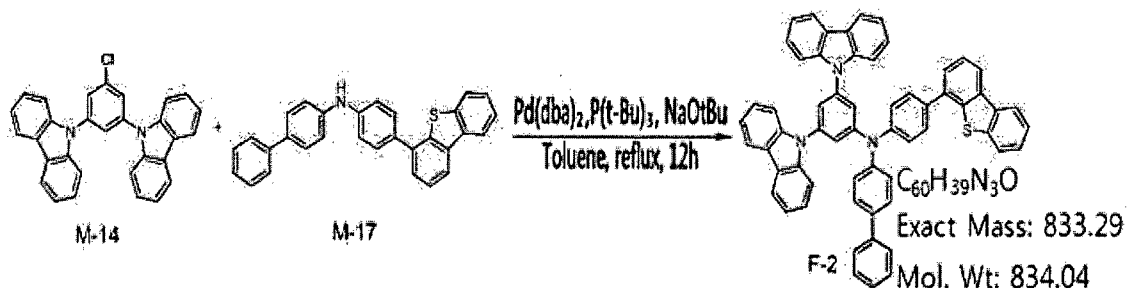


5 둥근바닥 플라스크에 중간체 M-22 11.7g(22.37mmol)과 중간체 M-5 9.2g (22.37mmol), 소듐 t-부톡사이드 3.2g(33.56mmol)을 넣고 톨루엔 250ml을 가하여 용해시켰다. 여기에 Pd(dba)<sub>2</sub> 0.129g (0.224mmol)과 트리-터셔리-부틸포스핀 0.091g(0.448mmol)을 차례로 넣은 후 질소 분위기 하에서 12시간 동안 환류 교반 시킨다. 반응 종료 후 톨루엔과 증류수로 추출 후 유기층을 마그네슘 설페이트로 건조, 여과하고 여과액을 감압 농축하였다. 생성물을 n-10 헥산/디클로로메탄(8:2 부피비)으로 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 E-25를 흰색 고체로 18g(수율 90%)을 수득하였다. (계산값: 895.36g/mol, 측정값: M+ = 895.48g/mol)

실시예 9: 화합물 F-2의 합성

상기 화합물 F-2를 하기 반응식 9를 통해 합성하였다.

15 [반응식 9]



20 둥근바닥 플라스크에 중간체 M-14 9.9g(22.37mmol)과 중간체 M-17 9.6g (22.37mmol), 소듐 t-부톡사이드 3.2g(33.56mmol)을 넣고 톨루엔 250ml을 가하여 용해시켰다. 여기에 Pd(dba)<sub>2</sub> 0.129g (0.224mmol)과 트리-터셔리-부틸포스핀 0.091g(0.448mmol)을 차례로 넣은 후 질소 분위기 하에서 12시간

동안 환류 교반 시킨다. 반응 종료 후 톨루엔과 증류수로 추출 후 유기층을 마그네슘 설페이트로 건조, 여과하고 여과액을 감압 농축하였다. 생성물을 n-헥산/디클로로메탄(8:2 부피비)으로 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 F-2를 흰색 고체로 17.5g(수율 94%)을 수득하였다.

- 5 (계산값: 833.29g/mol, 측정값:  $M^+ = 833.42\text{g/mol}$ )

(제조된 화합물의 분석 및 특성 측정)

1) 분자량 측정

화합물의 구조 분석을 위해 LC-MS를 이용하여 분자량을 측정하였다.

2)  $^1\text{H-NMR}$  결과 분석

- 10 화합물의 구조 분석을 위해 상기 실시예 1에 따른 화합물을  $\text{CD}_2\text{Cl}_2$  용매에 녹인 다음 300MHz NMR 장비를 이용하여  $^1\text{H-NMR}$ 을 측정하였다. 그 결과를 도 3에 나타내었다.

3) 형광 특성 분석

- 15 형광 특성을 측정하기 위해서 상기 실시예 1에 따른 화합물을 THF에 녹인 후 HITACHI F-4500을 이용하여 PL(photoluminescence) 파장을 측정하였다. 그 결과를 도 4에 나타내었다.

(유기발광소자의 제조)

녹색 유기 발광 소자의 제조

실시예 10

- 20 ITO (Indium tin oxide)가 1500Å의 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 5분간 세정한 후 진공 증착기로 기판을 이송하였다. 이렇게 준비된 ITO 투명 전극을 양극으로
- 25 사용하여 ITO 기판 상부에 N,N'-디(1-나프틸)-N,N'-디페닐벤지딘[NPB]을 진공 증착하여 700Å 두께의 정공주입 및 수송층을 형성하였다. 이어서 실시예 1에서 제조된 A-34 화합물을 사용하여 진공 증착으로 100Å 두께의 보조 정공수송층을 형성하였다. 상기 보조 정공수송층 상부에 (4,4'-N,N'-디카바졸)비페닐[CBP]를 호스트로 사용하고 도펀트로 트리스(2-

페닐피리딘)이리듐(III)[Ir(ppy)<sub>3</sub>]를 5중량%로 도핑하여 진공 증착으로 300 Å 두께의 발광층을 형성하였다.

그 후 상기 발광층 상부에 비페녹시-비스(8-히드록시퀴놀린)알루미늄[Balq]을 진공 증착하여 50 Å 두께의 정공저지층을 5 형성하였다. 상기 정공저지층 상부에 트리스(8-히드록시퀴놀린)알루미늄[Alq<sub>3</sub>]을 진공 증착하여 250 Å 두께의 전자수송층을 형성하고 상기 전자수송층 상부에 LiF 10 Å 과 Al 1000 Å 을 순차적으로 진공 증착하여 음극을 형성함으로써 유기발광소자를 제조하였다.

상기 유기발광소자는 5층의 유기박막층을 가지는 구조로 되어 있으며, 10 구체적으로

Al(1000 Å)/LiF(10 Å)/Alq<sub>3</sub>(250 Å)/Balq(50 Å)/EML[CBP:Ir(ppy)<sub>3</sub>=95:5](300 Å)/A-34(100 Å)/NPB(700 Å)/ITO(1500 Å)의 구조로 제작하였다.

#### 실시예 11

상기 실시예 10에서, 실시예 1에서 제조된 화합물(A-34) 대신 실시예 2에서 15 제조된 화합물(A-104)을 사용한 점을 제외하고는 동일한 방법으로 유기발광소자를 제조하였다.

#### 실시예 12

상기 실시예 10에서, 실시예 1 에서 제조된 화합물(A-34) 대신 실시예 3에서 제조된 화합물(A-201)을 사용한 점을 제외하고는 동일한 방법으로 20 유기발광소자를 제조하였다.

#### 실시예 13

상기 실시예 10에서, 실시예 1에서 제조된 화합물(A-34) 대신 실시예 7에서 제조된 화합물(D-6)을 사용한 점을 제외하고는 동일한 방법으로 유기발광소자를 제조하였다.

#### 실시예 14

상기 실시예 10에서, 실시예 1에서 제조된 화합물(A-34) 대신 실시예 8에서 제조된 화합물(E-25)을 사용한 점을 제외하고는 동일한 방법으로 유기발광소자를 제조하였다.

#### 실시예 15

상기 실시예 10에서, 실시예 1에서 제조된 화합물(A-34) 대신 실시예 9에서 제조된 화합물(F-2)을 사용한 점을 제외하고는 동일한 방법으로 유기발광소자를 제조하였다.

#### 비교예 1

- 5    상기 실시예 10에서, 실시예 1에서 제조된 화합물(A-34) 대신 N,N'-디(1-나프틸)-N,N'-디페닐벤지딘[NPB]를 사용한 점을 제외하고는 동일한 방법으로 유기발광소자를 제조하였다.

#### 비교예 2

- 10    상기 실시예 10에서, 실시예 1에서 제조된 화합물(A-34) 대신 TDAB를 사용한 점을 제외하고는 동일한 방법으로 유기발광소자를 제조하였다.

#### 적색 유기 발광 소자의 제조

#### 실시예 16

- ITO (Indium tin oxide)가 1500Å의 두께로 박막 코팅된 유리 기판을 증류수  
 초음파로 세척하였다. 증류수 세척이 끝나면 이소프로필 알코올, 아세톤,  
 15    메탄올 등의 용제로 초음파 세척을 하고 건조시킨 후 플라즈마 세정기로  
 이송시킨 다음 산소 플라즈마를 이용하여 상기 기판을 5분간 세정한 후  
 진공 증착기로 기판을 이송하였다. 이렇게 준비된 ITO 투명 전극을 양극으로  
 사용하여 ITO 기판 상부에 4,4'-bis[N-[4-{N,N-bis(3-methylphenyl)amino}-  
 phenyl]-N-phenylamino]biphenyl [DNTPD]를 진공 증착하여 600Å 두께의 정공  
 20    주입층을 형성하였다. 이어서 N,N'-디(1-나프틸)-N,N'-디페닐벤지딘[NPB]을  
 진공 증착으로 200Å 두께의 정공수송층을 형성하였다. 상기 정공수송층  
 상부에 실시예 1에서 제조된 화합물 A-34를 사용하여 진공 증착으로 100Å  
 두께의 보조 정공수송층을 형성하였다. 상기 보조 정공수송층 상부에 (4,4'-  
 N,N'-디카바졸)비페닐[CBP]를 호스트로 사용하고 도펀트로 비스(2-  
 25    페닐퀴놀린)(아세틸아세토네이트)이리듐(III) [Ir(pq)<sub>2</sub>acac]를 7중량%로 도핑하여  
 진공 증착으로 300Å 두께의 발광층을 형성하였다.

그 후 상기 발광층 상부에 비페녹시-비스(8-  
 히드록시퀴놀린)알루미늄[Balq]을 진공 증착하여 50Å 두께의 정공저지층을  
 형성하였다. 상기 정공저지층 상부에 트리스(8-

히드록시퀴놀린)알루미늄[Alq<sub>3</sub>]을 진공 증착하여 250Å 두께의 전자수송층을 형성하고 상기 전자수송층 상부에 LiF 10Å과 Al 1000Å을 순차적으로 진공 증착하여 음극을 형성함으로써 유기발광소자를 제조하였다.

- 상기 유기발광소자는 6층의 유기박막층을 가지는 구조로 되어 있으며,  
 5 구체적으로 Al(1000Å)/LiF(10Å)/Alq<sub>3</sub>(250Å)/Balq(50Å)/EML[CBP: Ir(pq)<sub>2</sub>acac =93:7](300Å)/A-34(100Å)/NPB(700Å)/DNTPD(600Å)/ITO(1500Å)의 구조로 제작하였다.

#### 실시예 17

- 상기 실시예 16에서, 실시예 1에서 제조된 화합물(A-34) 대신 실시예 2에서  
 10 제조된 화합물(A-104)을 사용한 점을 제외하고는 동일한 방법으로 유기발광소자를 제조하였다.

#### 실시예 18

- 상기 실시예 16에서, 실시예 1에서 제조된 화합물(A-34) 대신 실시예 4에서  
 15 제조된 화합물(A-88)을 사용한 점을 제외하고는 동일한 방법으로 유기발광소자를 제조하였다.

#### 실시예 19

- 상기 실시예 16에서, 실시예 1에서 제조된 화합물(A-34) 대신 실시예 5에서  
 제조된 화합물(B-17)을 사용한 점을 제외하고는 동일한 방법으로  
 유기발광소자를 제조하였다.

#### 실시예 20

상기 실시예 16에서, 실시예 1에서 제조된 화합물(A-34) 대신 실시예 6에서  
 제조된 화합물(C-8)을 사용한 점을 제외하고는 동일한 방법으로  
 유기발광소자를 제조하였다.

#### 실시예 21

- 상기 실시예 16에서, 실시예 1에서 제조된 화합물(A-34) 대신 실시예 8에서  
 25 제조된 화합물(E-25)을 사용한 점을 제외하고는 동일한 방법으로 유기발광소자를 제조하였다.

#### 실시예 22

상기 실시예 16에서, 실시예 1에서 제조된 화합물(A-34) 대신 실시예 9에서

제조된 화합물(F-2)을 사용한 점을 제외하고는 동일한 방법으로 유기발광소자를 제조하였다.

**비교예 3**

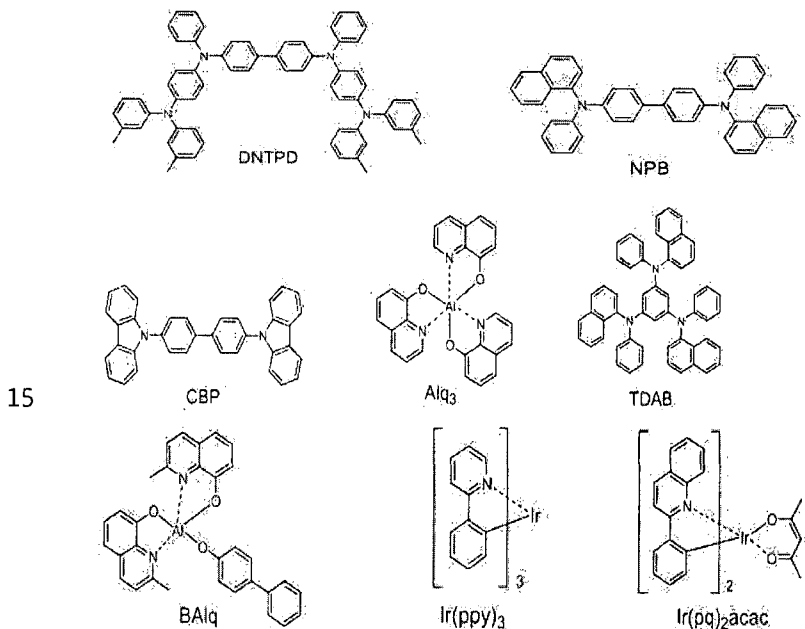
상기 실시예 16에서, 실시예 1에서 제조된 화합물(A-34) 대신 N,N'-디(1-  
5 나프틸)-N,N'-디페닐벤지딘[NPB]를 사용한 점을 제외하고는 동일한 방법으로 유기발광소자를 제조하였다.

**비교예 4**

상기 실시예 16에서, 실시예 1에서 제조된 화합물(A-34) 대신 TDAB를 사용한 점을 제외하고는 동일한 방법으로 유기발광소자를 제조하였다.

10 상기 유기발광소자 제작에 사용된 DNTPD, NPB, TDAB, CBP, Balq, Alq<sub>3</sub>, Ir(ppy)<sub>3</sub>, Ir(pq)<sub>2</sub>acac 의 구조는 아래와 같다.

상기 유기발광소자 제작에 사용된 DNTPD, NPB, TDAB, CBP, Balq, Alq<sub>3</sub>, Ir(ppy)<sub>3</sub>, Ir(pq)<sub>2</sub>acac 의 구조는 아래와 같다.



**(유기발광소자의 성능 측정)**

상기 실시예 10 내지 22, 및 비교예 1 내지 4에서 제조된 각각의 유기발광소자에 대하여 전압에 따른 전류밀도 변화, 휘도변화 및 발광효율을  
20 측정하였다. 구체적인 측정방법은 하기와 같고, 그 결과는 하기 [표 2] 및 [표 3]에 나타내었다

(1) 전압변화에 따른 전류밀도의 변화 측정

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

5 (2) 전압변화에 따른 휘도변화 측정

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

(3) 발광효율 측정

10 상기 (1) 및 (2)로부터 측정된 휘도와 전류밀도 및 전압을 이용하여 동일 휘도(cd/m<sup>2</sup>)에서의 전류 효율(cd/A)을 계산하였다.

(4) 수명 측정

15 제조된 유기발광소자에 대해 플라로닉스 수명 측정 시스템을 사용하여 실시예 10 내지 15, 비교예 1, 및 비교예 2의 녹색 유기 발광 소자의 경우에는 초기 휘도 3,000nit로 발광시키고 시간 경과에 따른 휘도의 감소를 측정하여 초기 휘도 대비 1/2로 휘도가 감소된 시점을 반감수명으로 하였고, 실시예 16 내지 22, 비교예 3, 및 비교예 4의 적색 유기 발광 소자의 경우에는 초기 휘도 1,000nit로 발광시키고 시간 경과에 따른 휘도의 감소를 측정하여 초기 휘도 대비 80%로 휘도가 감소된 시점을 T80수명으로  
20 측정하였다.

[표 2]

소자	정공수송층	보조 정공수송층	구동전압 (V)	발광효율 (cd/A)	EL peak (nm)	반감수명(h) @3000nit
실시예 10	NPB	A-34	7.1	37.5	516	240
실시예 11	NPB	A-104	6.9	39.1	516	249
실시예 12	NPB	A-201	7.2	38.8	516	249
실시예 13	NPB	D-16	7.0	35.1	516	221

실시예 14	NPB	E-25	7.1	39.6	516	261
실시예 15	NPB	F-2	7.4	40.3	516	253
비교예 1	NPB	NPB	8.2	25.8	516	175
비교예 2	NPB	TDAB	8.1	24.1	516	169

(구동전압 및 발광효율 1.000nit에서 측정)

상기 [표 2]의 결과에 따르면 녹색 인광 유기발광소자에서 보조 정공수송층을 사용하지 않은 비교예 1 대비 본 발명의 화합물을 보조 정공수송층으로 사용한 상기 실시예 10 내지 15는 유기발광소자의

- 5 발광효율과 수명을 향상시킴을 알 수 있다. 특히 비교예 1 대비 본 발명의 실시예는 발광효율이 최소 36%에서 최대 56% 이상 크게 상승하는 것을 알 수 있고, 종래에 알려져있는 TDAB를 보조 정공수송층으로 사용한 비교예 2 대비 본 발명의 실시예는 발광 소자 수명이 최소 31%에서 최대 54% 이상 상승하여 실제 소자의 상업화 측면에서 소자의 수명은 제품화의 가장 큰
- 10 문제 중 하나임을 고려할 때 상기 실시예들의 결과는 소자를 제품화하여 상업화하기에 충분한 것으로 판단된다.

[표 3]

소자	정공수송층	보조 정공수송층	구동전압 (V)	발광효율 (cd/A)	EL peak (nm)	T80수명(h) @1000nit
실시예 16	NPB	A-34	8.3	18.6	600	845
실시예 17	NPB	A-104	8.0	18.4	600	867
실시예 18	NPB	A-88	8.2	17.5	600	855
실시예 19	NPB	B-17	7.8	18.7	600	800
실시예	NPB	C-8	8.2	17.3	600	835

20						
실시예	NPB	E-25	8.1	18.9	600	872
21						
실시예	NPB	F-2	8.3	18.5	600	880
22						
비교예 3	NPB	NPB	8.7	15.1	600	720
비교예 4	NPB	TDAB	8.5	16.0	600	630

(구동전압 및 발광효율 1.000nit에서 측정)

상기 [표 3]의 결과에 따르면 적색 인광 유기발광소자에서 보조정공수송층을 사용하지 않은 비교예 3 대비 본 발명의 화합물을 보조정공수송층으로 사용한 상기 실시예 16 내지 22는 유기발광소자의

- 5 발광효율과 수명을 향상시킴을 알 수 있다. 특히 비교예 3 대비 본 발명의 실시예는 발광효율이 최소 14%에서 최대 25% 이상 크게 상승하는 것을 알 수 있고, 종래에 알려져있는 TDAB를 보조 정공수송층으로 사용한 비교예 4 대비 본 발명의 실시예는 발광효율이 최소 8%에서 최대 18% 이상 상승하고, 발광 소자 수명이 최소 27%에서 최대 40% 이상 상승하며, 구동전압을
- 10 낮추어 적색 인광 소자의 전반적인 주요 특성을 크게 향상 시킴을 알 수 있다. 실제 소자의 상업화 측면에서 소자의 수명은 제품화의 가장 큰 문제 중 하나임을 고려할 때 상기 실시예들의 결과는 소자를 제품화하여 상업화하기에 충분한 것으로 판단된다.

본 발명은 상기 실시예들에 한정되는 것이 아니라 서로 다른 다양한

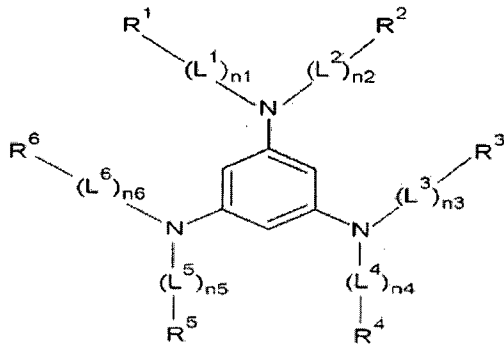
- 15 형태로 제조될 수 있으며, 본 발명이 속하는 기술분야에서 통상의 지식을 가진 자는 본 발명의 기술적 사상이나 필수적인 특징을 변경하지 않고서 다른 구체적인 형태로 실시될 수 있다는 것을 이해할 수 있을 것이다. 그러므로 이상에서 기술한 실시예들은 모든 면에서 예시적인 것이며 한정적이 아닌 것으로 이해해야만 한다.

【청구의 범위】

【청구항 1】

하기 화학식 1로 표시되는 화합물:

[화학식 1]



5

상기 화학식 1에서,

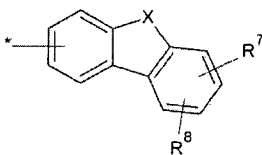
$L^1$  내지  $L^6$ 는 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴렌기, 또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴렌기이나, 치환 또는 비치환된 플루오레닐렌기는 아니며,

10  $n1$  내지  $n6$ 는 서로 독립적으로, 0 내지 3 중 어느 하나의 정수이고,

$R^1$  내지  $R^6$ 는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴기, 및 치환 또는 비치환된 실릴기로 이루어진 군에서 선택되고,

15 상기  $R1$  내지  $R6$  중 적어도 하나는 하기 화학식 2로 표시되고,

[화학식 2]



상기 화학식 2에서,

X는 O 또는 S이고,

20  $R^7$  또는  $R^8$ 은 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 및 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30

헤테로아릴기로 이루어진 군에서 선택되고,

\*는 탄소 원자 또는 탄소 이외의 원자와 연결되는 부분을 의미하고,

R<sup>1</sup> 및 R<sup>2</sup>는 서로 독립적으로 존재하거나 서로 축합되어 축합 고리를 형성하고,

5 R<sup>3</sup> 및 R<sup>4</sup>는 서로 독립적으로 존재하거나 서로 축합되어 축합 고리를 형성하고,

R<sup>5</sup> 및 R<sup>6</sup>는 서로 독립적으로 존재하거나 서로 축합되어 축합 고리를 형성한다.

(단, R<sup>1</sup> 내지 R<sup>6</sup> 중 어느 하나가 치환 또는 비치환된 플루오레닐기인 경우,

10 상기 치환 또는 비치환된 플루오레닐기는 상기 화학식 1의 "N"에 직접 결합되지 않는다)

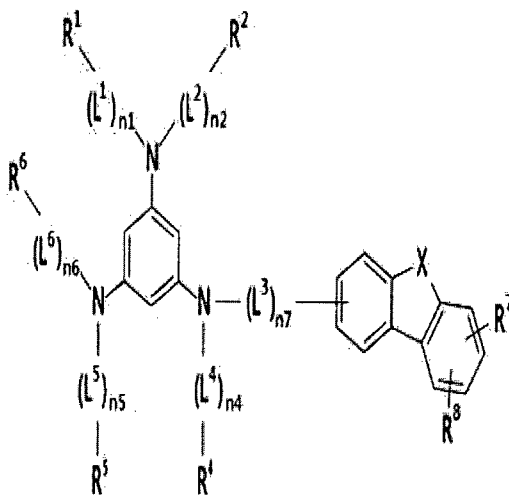
【청구항 2】

제1항에 있어서,

상기 화학식 1은 하기 화학식 3 내지 화학식 14 중 어느 하나로 표시되는

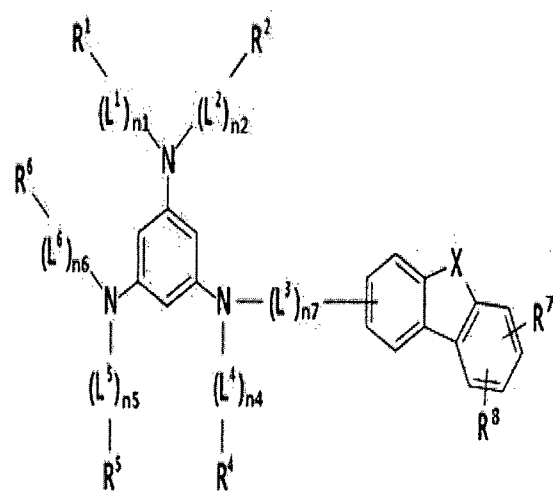
15 화합물:

[화학식 3]

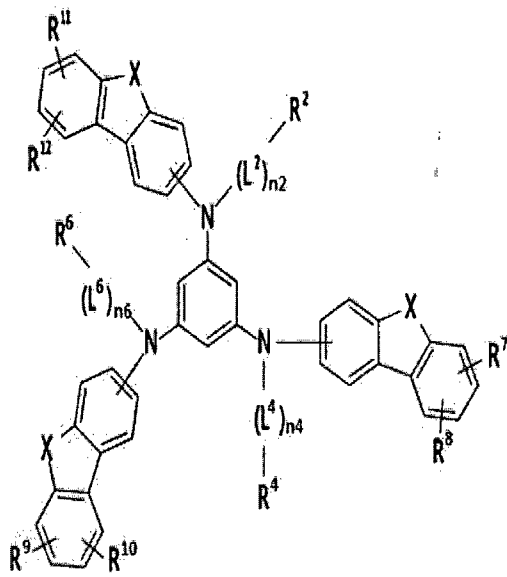


[화학식 5]

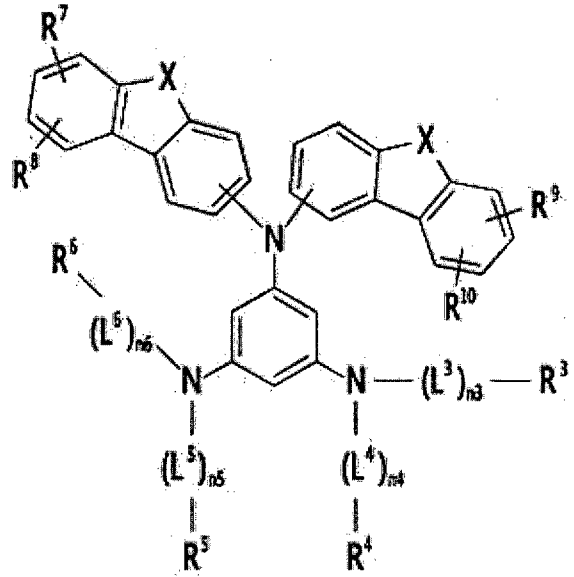
[화학식 4]



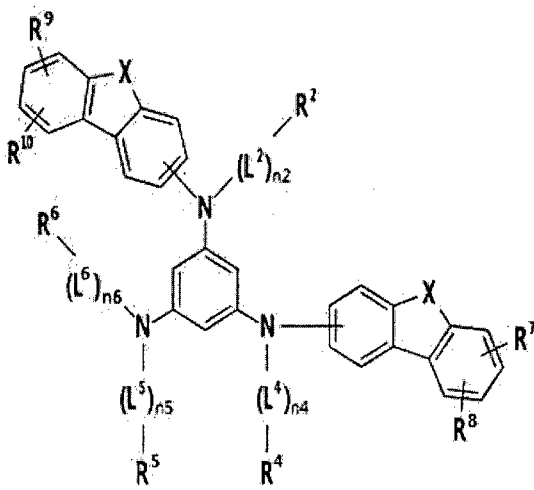
[화학식 6]



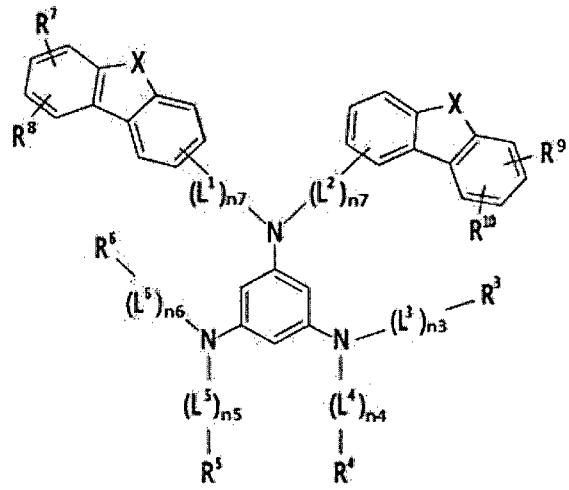
[화학식 7]



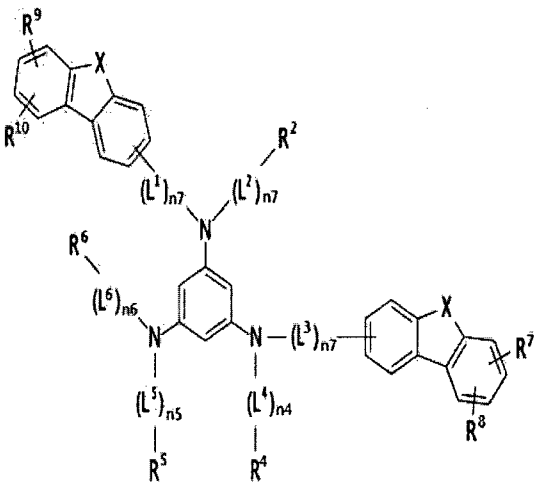
[화학식 8]



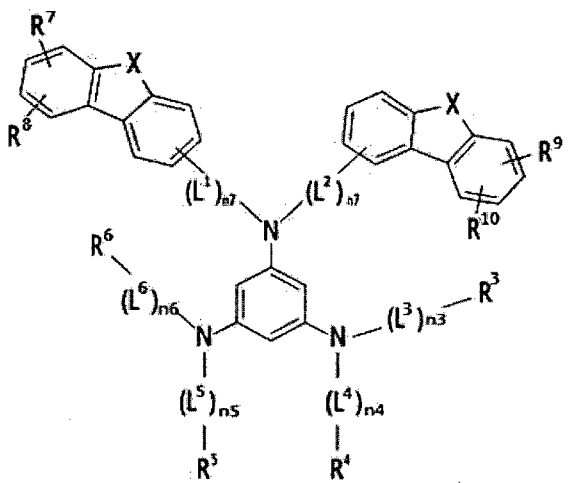
[화학식 9]



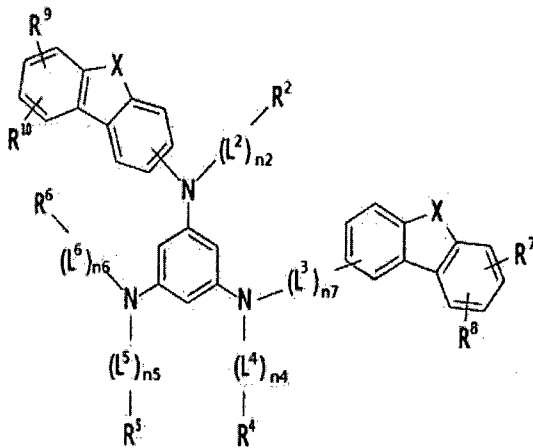
[화학식 10]



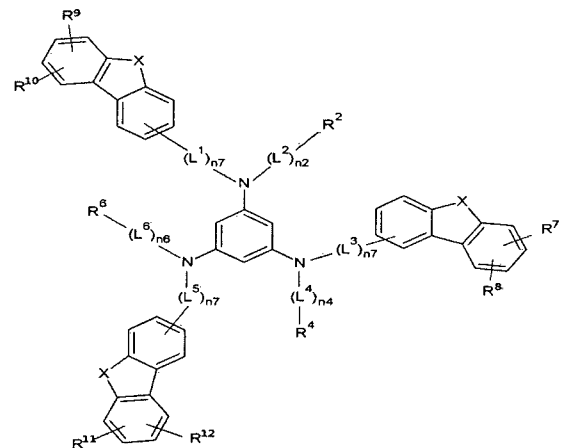
[화학식 11]



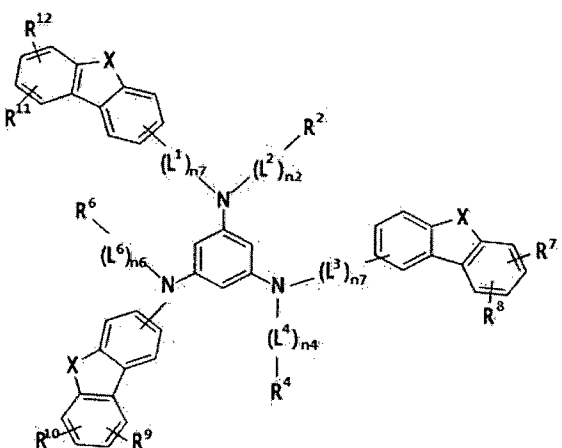
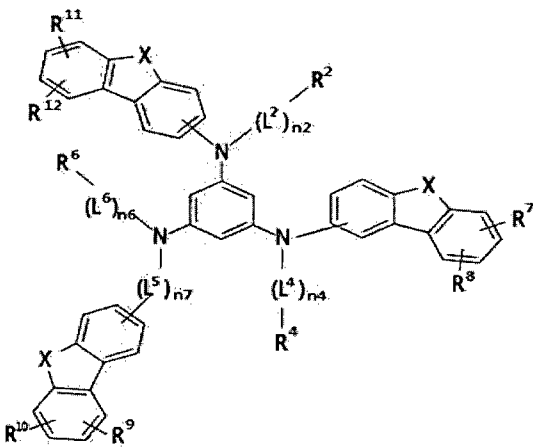
[화학식 12]



[화학식 13]



[화학식 14]



상기 화학식 3 내지 화학식 4에서,

- 5 L<sup>1</sup> 내지 L<sup>6</sup>는 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴렌기, 또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴렌기이나, 치환 또는 비치환된 플루오레닐렌기는 아니며,
  - n1 내지 n6는 서로 독립적으로, 0 내지 3 중 어느 하나의 정수이고,
  - n7은 1 내지 3 중 어느 하나의 정수이고,
- 10 R<sup>1</sup> 내지 R<sup>6</sup>는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴기, 및 치환 또는 비치환된 실릴기로 이루어진 군에서 선택되고, X는 O 또는 S이고,
- 15 R<sup>7</sup> 내지 R<sup>12</sup>은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 및 치환 또는

비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴기로 이루어진 군에서 선택된다. (단, 상기 R1 내지 R6 중 어느 하나가 치환 또는 비치환된 플루오레닐기인 경우, 상기 치환 또는 비치환된 플루오레닐기는 상기 화학식 1의 "N"에 직접 결합되지 않는다)

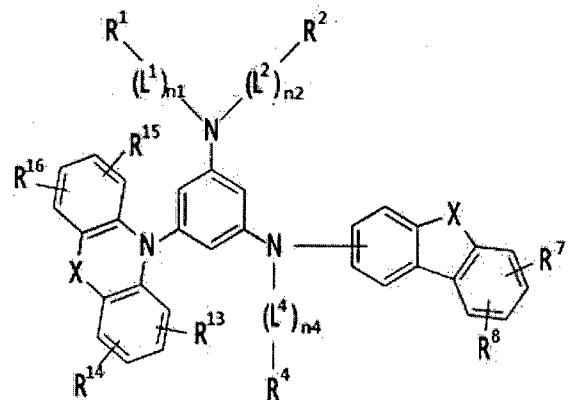
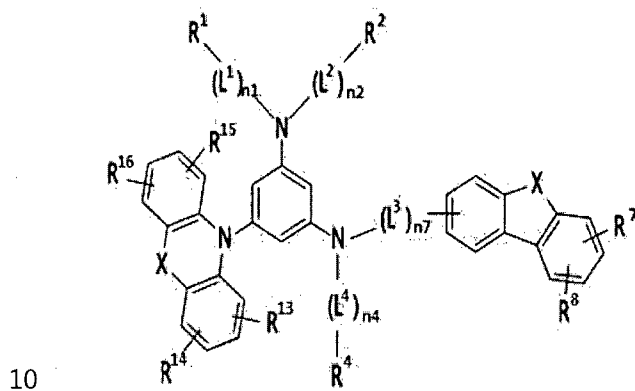
5 【청구항 3】

제1항에 있어서,

상기 화학식 1은 하기 화학식 15 내지 화학식 18 중 어느 하나로 표시되는 화합물:

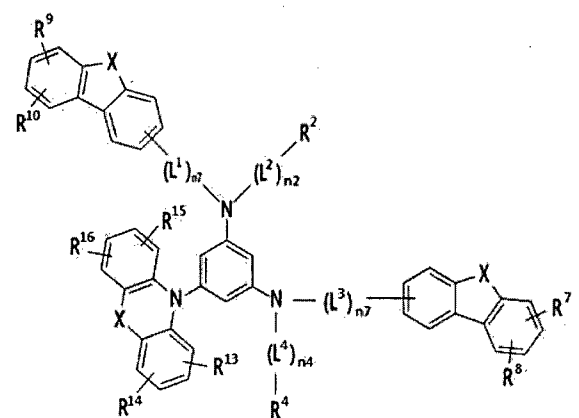
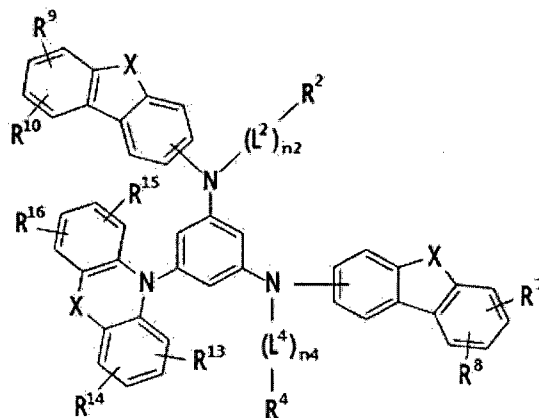
[화학식 15]

[화학식 16]



[화학식 17]

[화학식 18]



상기 화학식 15 내지 18에서,

L1 내지 L4는 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴렌기, 또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴렌기이나, 치환 또는 비치환된 플루오레닐렌기는 제외되며,

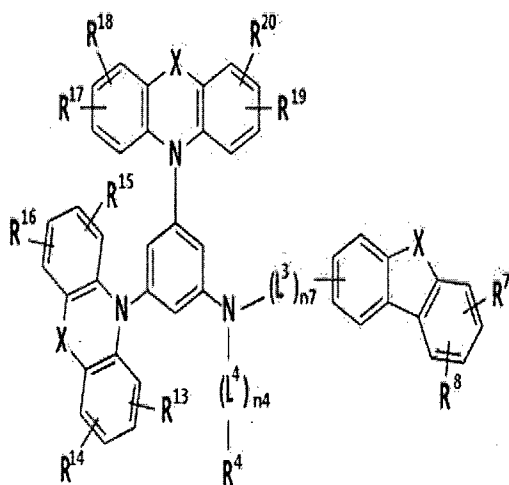
n1 내지 n4는 서로 독립적으로, 0 내지 3 중 어느 하나의 정수이고,

- $n_7$ 은 1 내지 3 중 어느 하나의 정수이고,  
 $R^1, R^2$ , 및  $R^4$ 는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴기, 및 치환 또는 비치환된 실릴기로 이루어진 군에서 선택되고,  
 $X$ 는 O 또는 S이고,  
 $R^7$  내지  $R^{10}$ , 및  $R^{13}$  내지  $R^{16}$ 은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 및 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴기로 이루어진 군에서 선택된다.  
 10 (단,  $R^1, R^2$ , 및  $R^4$ 는 중 어느 하나가 치환 또는 비치환된 플루오레닐기인 경우, 상기 치환 또는 비치환된 플루오레닐기는 상기 화학식 1의 "N"에 직접 결합되지 않는다)

【청구항 4】

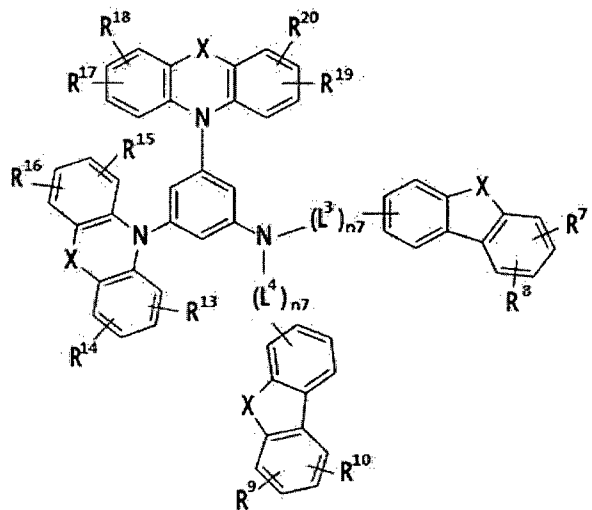
- 제1항에 있어서,  
 15 상기 화학식 1은 하기 화학식 19 내지 화학식 21 중 어느 하나로 표시되는 화합물:

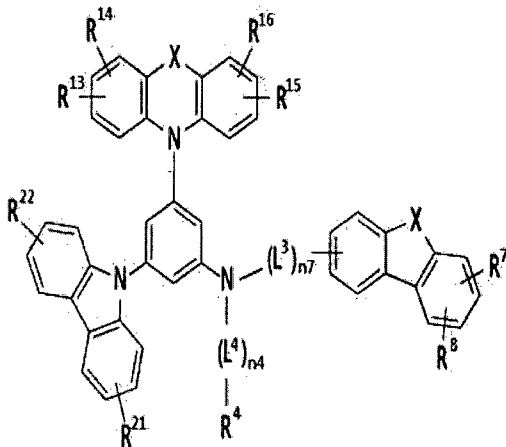
[화학식 19]



[화학식 21]

[화학식 20]





상기 화학식 19 내지 화학식 21에서,

$L^3$  및  $L^4$ 는 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴렌기, 또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴렌기이나, 치환 또는

5 비치환된 플루오레닐렌기는 제외되며,

$n_4$ 는 0 내지 3 중 어느 하나의 정수이고,

$n_7$ 은 1 내지 3 중 어느 하나의 정수이고,

$R^4$ 는 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30

10 아릴기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴기, 및 치환 또는 비치환된 실릴기로 이루어진 군에서 선택되고,

X는 O 또는 S이고,

$R^7$  내지  $R^{10}$ , 및  $R^{13}$  내지  $R^{22}$ 은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 및

15 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴기로 이루어진 군에서 선택된다.

(단, 상기  $R^4$ 가 치환 또는 비치환된 플루오레닐기인 경우, 상기 치환 또는 비치환된 플루오레닐기는 상기 화학식 1의 "N"에 직접결합되지 않는다)

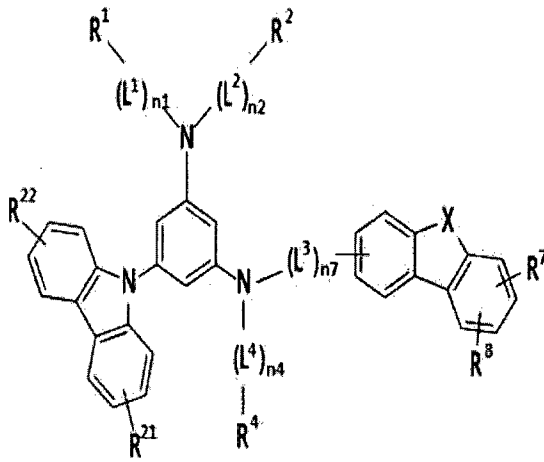
**【청구항 5】**

제1항에 있어서,

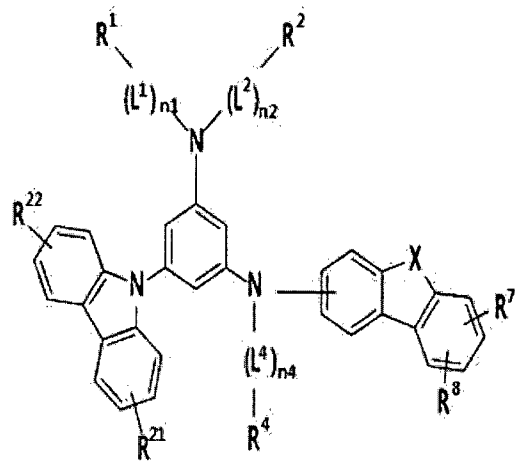
20 상기 화학식 1은 하기 화학식 22 내지 화학식 26 중 어느 하나로 표시되는 화합물:

[화학식 22]

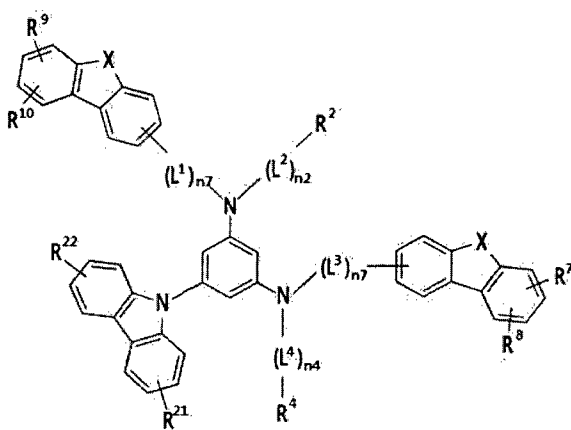
[화학식 23]



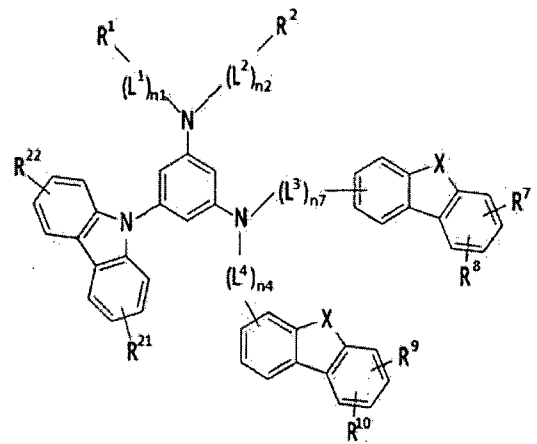
[화학식 24]



[화학식 25]



[화학식 26]



5

상기 화학식 22 내지 화학식 26에서,

L<sup>1</sup> 내지 L<sup>4</sup>는 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C<sub>6</sub> 내지 C<sub>30</sub> 아릴렌기,  
또는 치환 또는 비치환된 C<sub>2</sub> 내지 C<sub>30</sub> 헤테로아릴렌기이나, 치환 또는  
비치환된 플루오레닐렌기는 아니며,

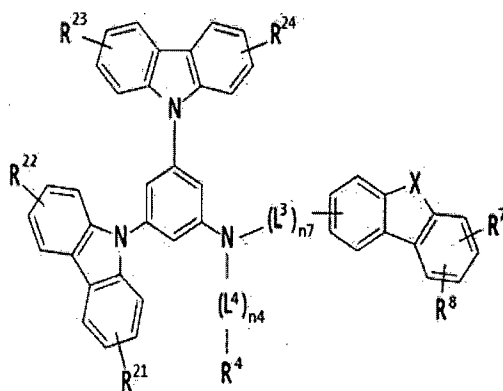
10 n<sub>1</sub>, n<sub>2</sub>, 및 n<sub>4</sub>는 0 내지 3 중 어느 하나의 정수이고,

- n7은 1 내지 3 중 어느 하나의 정수이고,  
 R<sup>1</sup>, R<sup>2</sup>, 및 R<sup>4</sup>는 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기,  
 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6  
 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴기, 및 치환  
 5 또는 비치환된 실릴기로 이루어진 군에서 선택되고,  
 X는 O 또는 S이고,  
 R<sup>7</sup> 내지 R<sup>10</sup>, R<sup>21</sup>, 및 R<sup>22</sup>은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 치환 또는  
 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 및  
 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴기로 이루어진 군에서 선택된다.  
 10 (단, 상기 R<sup>1</sup>, R<sup>2</sup>, 및 R<sup>4</sup> 중 어느 하나가 치환 또는 비치환된 플루오레닐기인  
 경우, 상기 치환 또는 비치환된 플루오레닐기는 상기 화학식 1의 "N"에 직접  
 결합되지 않는다)

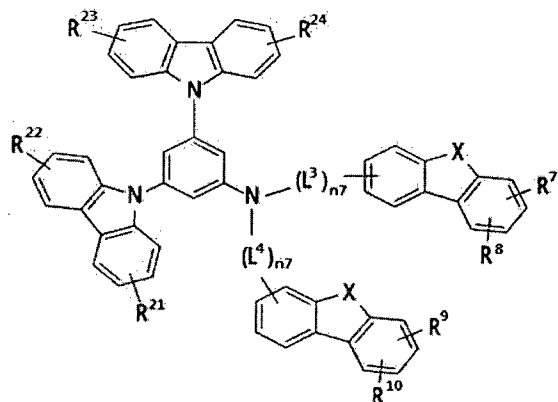
【청구항 6】

- 제1항에 있어서,  
 15 상기 화학식 1은 하기 화학식 27 내지 화학식 29 중 어느 하나로 표시되는  
 화합물:

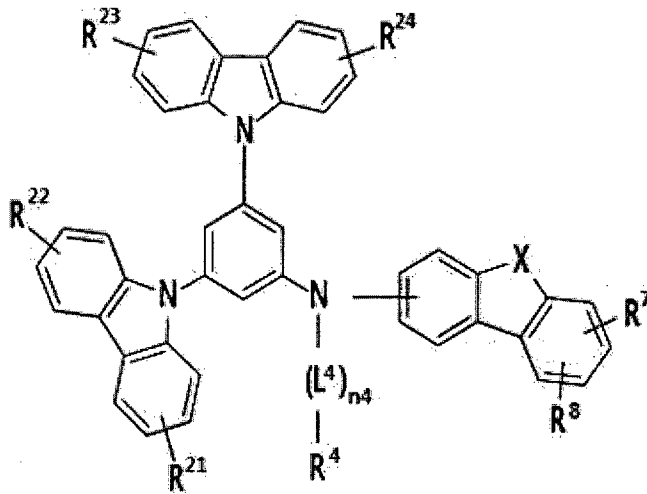
[화학식 27]



[화학식 28]



[화학식 29]



상기 화학식 27 내지 화학식 29에서,

L<sup>3</sup> 및 L<sup>4</sup>는 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴렌기,  
또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴렌기이나, 치환 또는

5 비치환된 플루오레닐렌기는 아니고,

n<sub>4</sub>는 0 내지 3 중 어느 하나의 정수이고,

n<sub>7</sub>은 1 내지 3 중 어느 하나의 정수이고,

R<sup>4</sup>는 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는  
비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30

10 아릴기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴기, 및 치환 또는  
비치환된 실릴기로 이루어진 군에서 선택되고,

X는 O 또는 S이고,

R<sup>7</sup> 내지 R<sup>10</sup>, 및 R<sup>21</sup> 내지 R<sup>24</sup>은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 치환 또는  
비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 및

15 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴기로 이루어진 군에서 선택된다.

(단, 상기 R<sup>4</sup>가 치환 또는 비치환된 플루오레닐기인 경우, 상기 치환 또는  
비치환된 플루오레닐기는 상기 화학식 1의 "N"에 직접 결합되지 않는다)

**【청구항 7】**

제2항에 있어서,

20 상기 화학식 3의 L<sup>3</sup>; 상기 화학식 8의 L<sup>1</sup> 및 L<sup>2</sup>; 상기 화학식 9의 L<sup>1</sup> 및 L<sup>3</sup>;  
상기 화학식 10의 L<sup>2</sup>; 상기 화학식 11의 L<sup>3</sup>; 상기 화학식 12의 L<sup>1</sup>, L<sup>3</sup>, 및 L<sup>5</sup>;

상기 화학식 13의  $L^3$ ; 및 상기 화학식 14의  $L^1$  및  $L^3$ 는 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴렌기, 또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴렌기이나, 치환 또는 비치환된 플루오레닐렌기는 아닌 화합물.

5 **【청구항 8】**

제3항에 있어서,

상기 화학식 15의  $L^3$ ; 및 상기 화학식 18의  $L^1$  및  $L^3$ 는 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴렌기, 또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴렌기이나, 치환 또는 비치환된 플루오레닐렌기는 아닌

10 화합물.

**【청구항 9】**

제4항에 있어서,

상기 화학식 19의  $L^3$ ; 상기 화학식 20의  $L^3$  및  $L^4$ ; 및 상기 화학식 21의  $L^3$ 는 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴렌기, 또는

15 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴렌기이나, 치환 또는 비치환된 플루오레닐렌기는 아닌 화합물.

**【청구항 10】**

제5항에 있어서,

상기 화학식 22의  $L^3$ ; 상기 화학식 24의  $L^1$  및  $L^3$ ; 및 상기 화학식 25의  $L^3$

20 및  $L^4$ 는 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴렌기, 또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴렌기이나, 치환 또는 비치환된 플루오레닐렌기는 아닌 화합물.

**【청구항 11】**

제6항에 있어서,

상기 화학식 27의  $L^3$ ; 및 상기 화학식 28의  $L^3$  및  $L^4$ 는 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴렌기, 또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴렌기이나, 치환 또는 비치환된 플루오레닐렌기는 아닌

25 화합물.

**【청구항 12】**

제1항에 있어서,  
 상기 L<sup>1</sup> 내지 L<sup>6</sup>는 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴렌기이고, 치환 또는 비치환된 플루오레닐렌기는 제외되는 화합물.

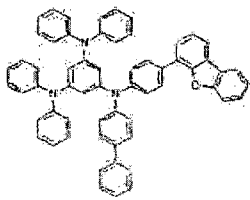
【청구항 13】

- 5 제1항에 있어서,  
 상기 R<sup>1</sup> 내지 R<sup>6</sup>는 서로 독립적으로, 수소, 또는 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기이고, 상기 아릴기가 플루오레닐기인 경우 상기 화학식 1의 "N"에 직접 결합되지 않는 화합물.

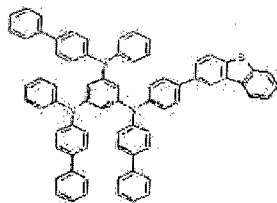
【청구항 14】

- 10 제1항에 있어서,  
 상기 화학식 1은 하기 화합물 중 어느 하나로 표시되는 화합물.

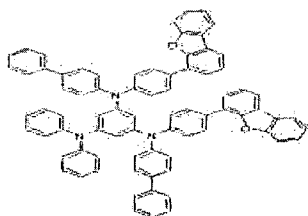
[A-34]



[A-104]



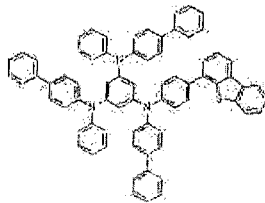
[A-209]



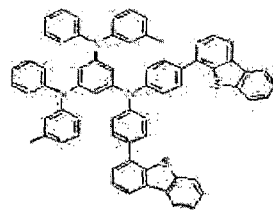
[B-10]

15

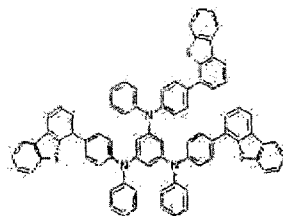
[A-38]



[A-201]

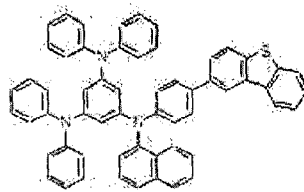


[A-251]

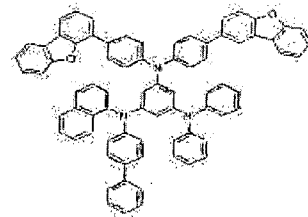


[B-17]

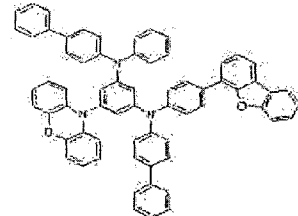
[A-88]



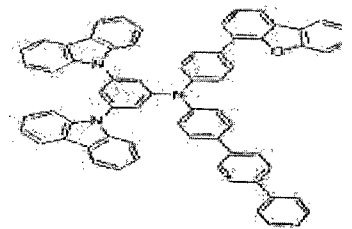
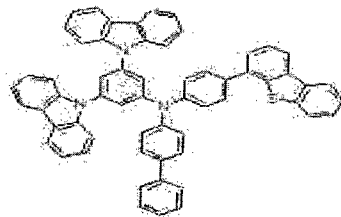
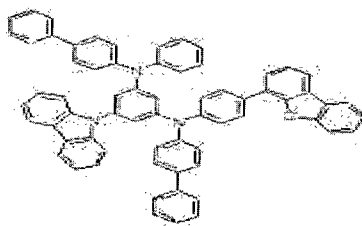
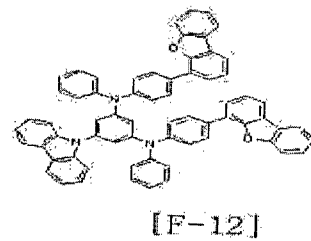
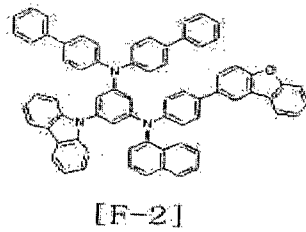
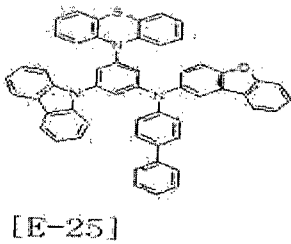
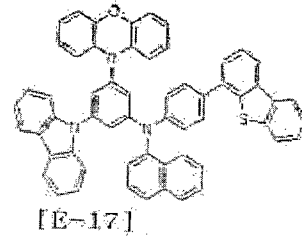
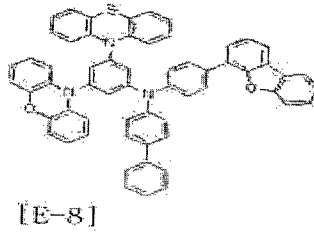
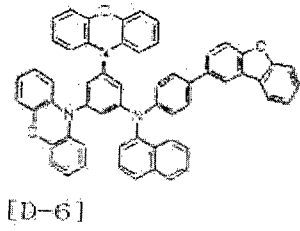
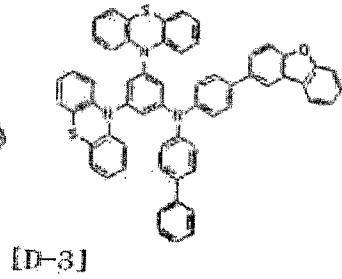
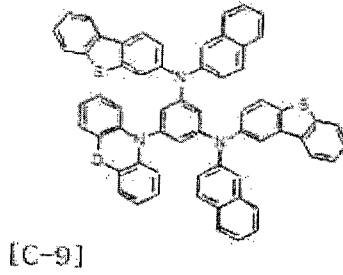
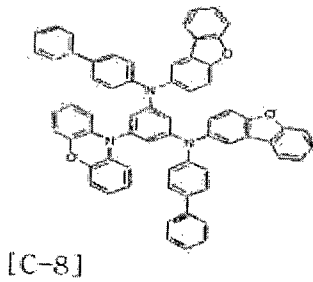
[A-203]



[B-3]



[C-4]



5 【청구항 15】

양극, 음극 및

상기 양극과 음극 사이에 개재되는 한 층 이상의 유기박막층을 포함하고, 상기 유기박막층 중 적어도 어느 한 층은 제1항 내지 제14항 중 어느 한 항에 따른 화합물을 포함하는 것인 유기발광소자.

10 【청구항 16】

제15항에 있어서,

상기 유기박막층은 전자주입층, 전자수송층, 정공주입층, 정공수송층, 보조 정공수송층, 또는 발광층인 것인 유기발광소자.

【청구항 17】

제15항에 있어서,

상기 유기박막층은 보조 정공수송층인 것인 유기발광소자.

**【청구항 18】**

제15항에 있어서,

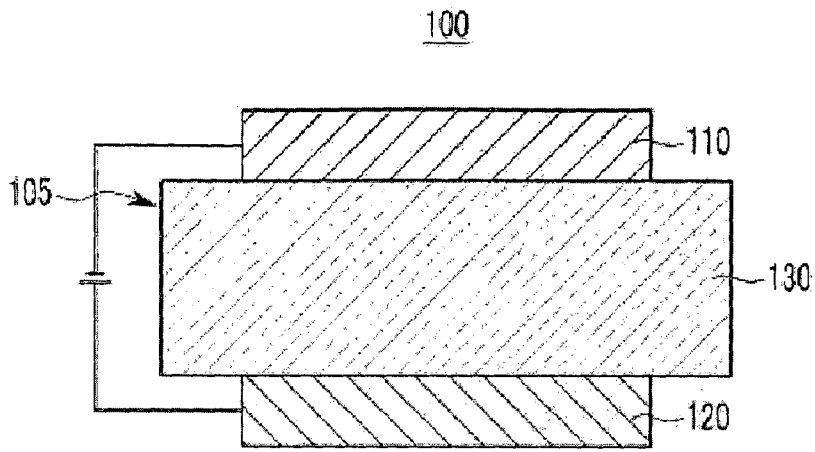
- 5 상기 화합물은 발광층 내 호스트로 이용되는 것인 유기발광소자.

**【청구항 19】**

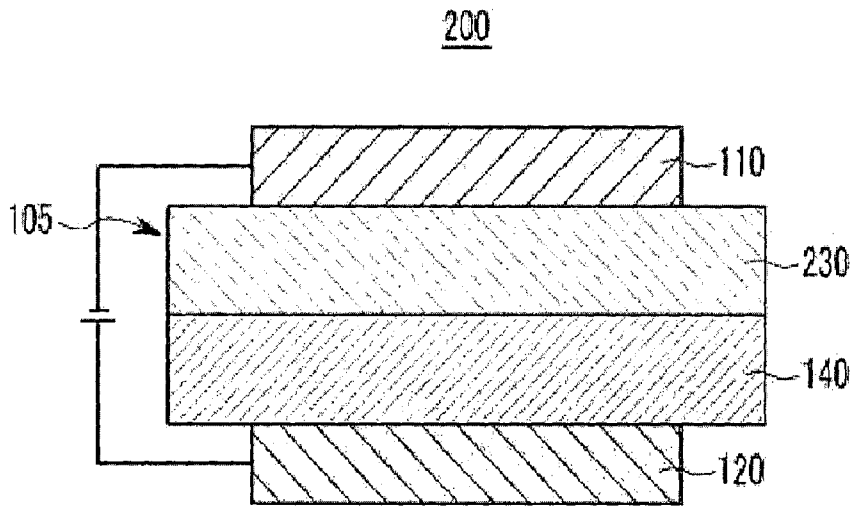
제15항의 유기발광소자를 포함하는 표시장치.

【도면】

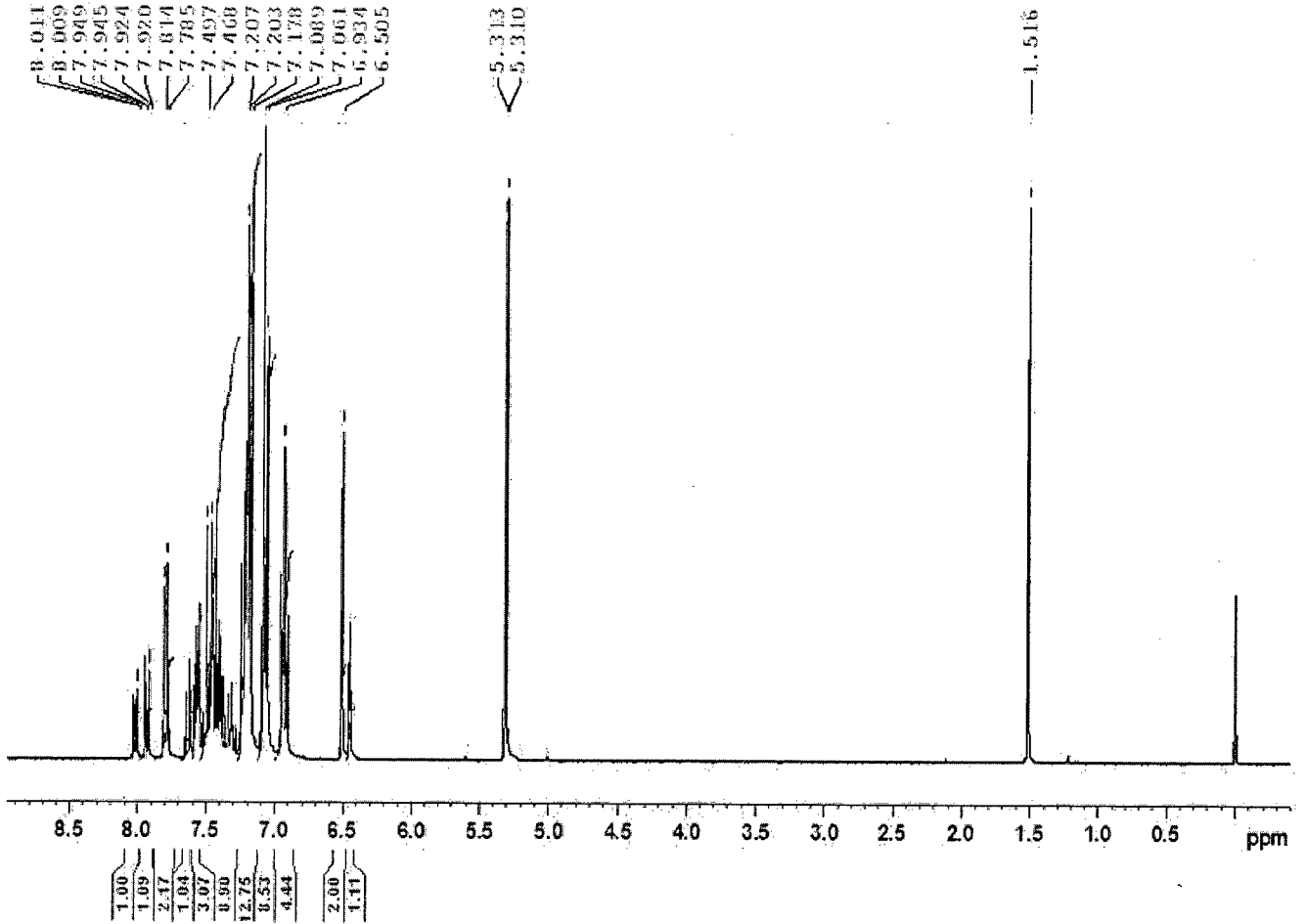
【도 1】



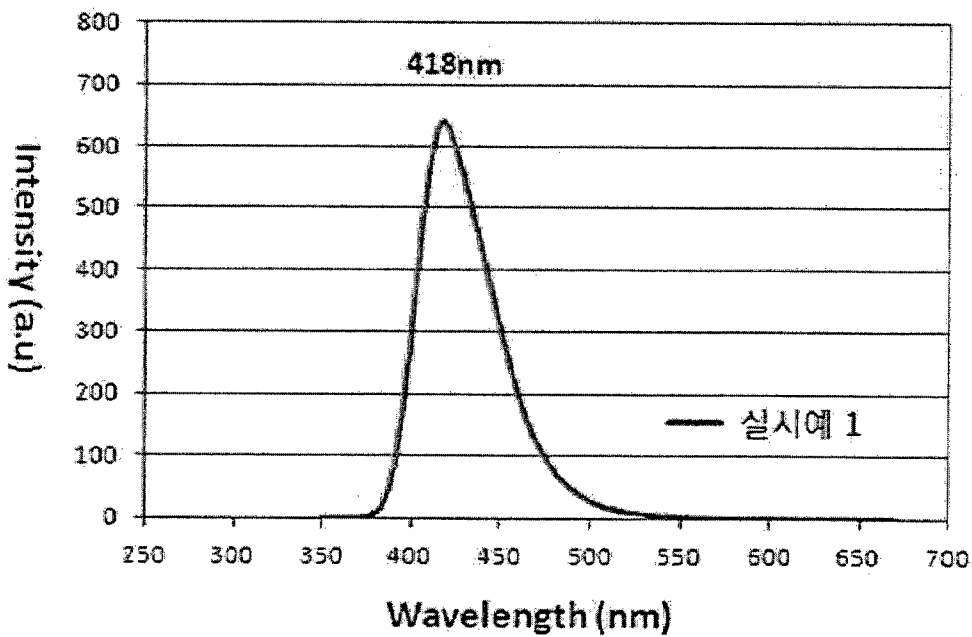
【도 2】



【표 3】



【표 4】



## INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/KR2013/007135

## A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER

*C07D 307/91(2006.01)i, C07D 333/76(2006.01)i, C09K 11/06(2006.01)i, H01L 51/50(2006.01)i*

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

## B. FIELDS SEARCHED

Minimum documentation searched (classification system followed by classification symbols)

C07D 307/91; C07D 403/10; C07D 209/82; C09K 11/06; C07D 403/04; C07D 333/76; H01L 51/50

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

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

eKOMPASS (KIPO internal) &amp; Keywords: fluorenyl, light emitting, semiconductor

## C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
A	KR 10-2013-0020399 A (CHEIL INDUSTRIES INC.) 27 February 2013 The entire document	1-19
A	KR 10-2007-0016418 A (SAMSUNG DISPLAY CO., LTD.) 08 February 2007 The entire document	1-19
A	KR 10-2009-0120699 A (SAMSUNG MOBILE DISPLAY CO., LTD.) 25 November 2009 The entire document	1-19
A	KR 10-2010-0033265 A (LG CHEM. LTD.) 29 March 2010 The entire document	1-19

 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

"I" later document published after the international filing date or priority date and not in conflict with the application but cited to understand the principle or theory underlying the invention

"E" earlier application or patent but published on or after the international filing date

"X" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered novel or cannot be considered to involve an inventive step when the document is taken alone

"L" document which may throw doubts on priority claim(s) or which is cited to establish the publication date of another citation or other special reason (as specified)

"Y" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered to involve an inventive step when the document is combined with one or more other such documents, such combination being obvious to a person skilled in the art

"O" document referring to an oral disclosure, use, exhibition or other means

"P" document published prior to the international filing date but later than the priority date claimed

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

Date of the actual completion of the international search

10 FEBRUARY 2014 (10.02.2014)

Date of mailing of the international search report

14 FEBRUARY 2014 (14.02.2014)

Name and mailing address of the ISA/KR



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

Facsimile No. 82-42-472-7140

Authorized officer

Telephone No.

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

International application No.

**PCT/KR2013/007135**

Patent document cited in search report	Publication date	Patent family member	Publication date
KR 10-2013-0020399 A	27/02/2013	WO 2013-027902 A1	28/02/2013
KR 10-2007-0016418 A	08/02/2007	NONE	
KR 10-2009-0120699 A	25/11/2009	TW200948780 A US 2010-0032656 A1 US 8298684 B2	01/12/2009 11/02/2010 30/10/2012
KR 10-2010-0033265 A	29/03/2010	NONE	

<b>A. 발명이 속하는 기술분류(국제특허분류(IPC))</b> C07D 307/91(2006.01)i, C07D 333/76(2006.01)i, C09K 11/06(2006.01)i, H01L 51/50(2006.01)i		
<b>B. 조사된 분야</b> 조사된 최소문헌(국제특허분류를 기재) C07D 307/91; C07D 403/10; C07D 209/82; C09K 11/06; C07D 403/04; C07D 333/76; H01L 51/50 조사된 기술분야에 속하는 최소문헌 이외의 문헌 한국등록실용신안공보 및 한국공개실용신안공보: 조사된 최소문헌란에 기재된 IPC 일본등록실용신안공보 및 일본공개실용신안공보: 조사된 최소문헌란에 기재된 IPC 국제조사에 이용된 전산 데이터베이스(데이터베이스의 명칭 및 검색어(해당하는 경우)) eKOMPASS(특허청 내부 검색시스템) & 키워드: fluorenyl, light emitting, semiconductor		
<b>C. 관련 문헌</b>		
카테고리*	인용문헌명 및 관련 구절(해당하는 경우)의 기재	관련 청구항
A	KR 10-2013-0020399 A (제일모직주식회사) 2013.02.27 문헌전체	1-19
A	KR 10-2007-0016418 A (삼성에스디아이 주식회사) 2007.02.08 문헌전체	1-19
A	KR 10-2009-0120699 A (삼성모바일디스플레이주식회사) 2009.11.25 문헌전체	1-19
A	KR 10-2010-0033265 A (주식회사 엘지화학) 2010.03.29 문헌전체	1-19
<input type="checkbox"/> 추가 문헌이 C(계속)에 기재되어 있습니다. <input checked="" type="checkbox"/> 대응특허에 관한 별지를 참조하십시오.		
* 인용된 문헌의 특별 카테고리: “A” 특별히 관련이 없는 것으로 보이는 일반적인 기술수준을 정의한 문헌 “E” 국제출원일보다 빠른 출원일 또는 우선일을 가지나 국제출원일 이후에 공개된 선출원 또는 특허 문헌 “L” 우선권 주장에 의문을 제기하는 문헌 또는 다른 인용문헌의 공개일 또는 다른 특별한 이유(이유를 명시)를 밝히기 위하여 인용된 문헌 “O” 구두 개시, 사용, 전시 또는 기타 수단을 언급하고 있는 문헌 “P” 우선일 이후에 공개되었으나 국제출원일 이전에 공개된 문헌 “T” 국제출원일 또는 우선일 후에 공개된 문헌으로, 출원과 상충하지 않으며 발명의 기초가 되는 원리나 이론을 이해하기 위해 인용된 문헌 “X” 특별한 관련이 있는 문헌. 해당 문헌 하나만으로 청구된 발명의 신규성 또는 진보성이 없는 것으로 본다. “Y” 특별한 관련이 있는 문헌. 해당 문헌이 하나 이상의 다른 문헌과 조합하는 경우로 그 조합이 당업자에게 자명한 경우 청구된 발명은 진보성이 없는 것으로 본다. “&” 동일한 대응특허문헌에 속하는 문헌		
국제조사의 실제 완료일 2014년 02월 10일 (10.02.2014)	국제조사보고서 발송일 2014년 02월 14일 (14.02.2014)	
ISA/KR의 명칭 및 우편주소 대한민국 특허청 (302-701) 대전광역시 서구 청사로 189, 4동 (둔산동, 정부대전청사) 팩스 번호 +82-42-472-7140	심사관 강형석 전화번호 +82-42-481-3329	

국제조사보고서에서 인용된 특허문헌	공개일	대응특허문헌	공개일
KR 10-2013-0020399 A	2013/02/27	WO 2013-027902 A1	2013/02/28
KR 10-2007-0016418 A	2007/02/08	없음	
KR 10-2009-0120699 A	2009/11/25	TW200948780 A US 2010-0032656 A1 US 8298684 B2	2009/12/01 2010/02/11 2012/10/30
KR 10-2010-0033265 A	2010/03/29	없음	