



**(19) 대한민국특허청(KR)**  
**(12) 공개특허공보(A)**

(11) 공개번호 10-2016-0129781  
 (43) 공개일자 2016년11월09일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)  
 C07D 495/04 (2006.01) C07F 9/02 (2006.01)  
 C09K 11/06 (2006.01) H01L 51/00 (2006.01)  
 H01L 51/50 (2006.01)

(71) 출원인  
**희성소재 (주)**  
 경기도 용인시 처인구 남사면 당하로 113-19

(52) CPC특허분류  
 C07D 495/04 (2013.01)  
 C07F 9/02 (2013.01)

(72) 발명자  
**이정현**  
 경기도 오산시 남부대로 486-23, 106동 302호 (청호동, 휴먼시아아파트)

(21) 출원번호 10-2016-0054206

**정원장**

(22) 출원일자 2016년05월02일  
 심사청구일자 2016년05월02일

경기도 화성시 봉담읍 와우로15번길 10, 314동 1704호 (임광그대가3단지)

(30) 우선권주장  
 1020150061913 2015년04월30일 대한민국(KR)

(뒀면에 계속)

(74) 대리인  
**정순성**

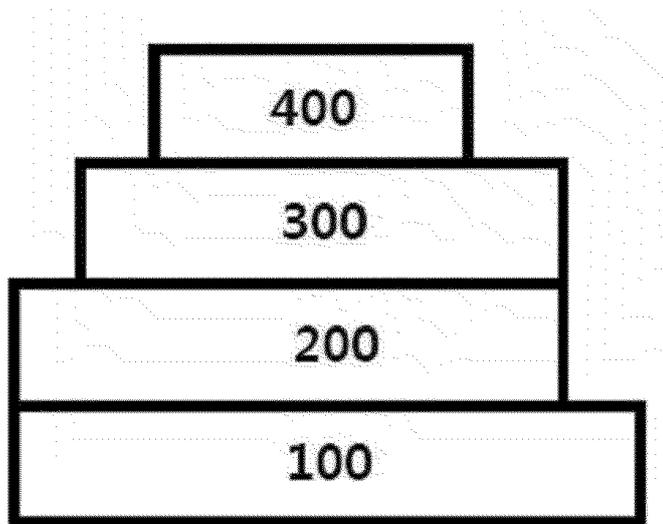
전체 청구항 수 : 총 16 항

(54) 발명의 명칭 **다환 화합물 및 이를 이용한 유기 발광 소자**

**(57) 요약**

본 출원은 유기 발광 소자의 수명, 효율, 전기 화학적 안정성 및 열적 안정성을 크게 향상시킬 수 있는 화합물, 및 상기 화합물이 유기 화합물층에 함유되어 있는 유기 발광 소자를 제공한다.

**대표도** - 도1



(52) CPC특허분류

*C09K 11/06* (2013.01)  
*H01L 51/0072* (2013.01)  
*H01L 51/0074* (2013.01)  
*H01L 51/5056* (2013.01)  
*H01L 51/5072* (2013.01)  
*C09K 2211/1011* (2013.01)  
*C09K 2211/1029* (2013.01)  
*C09K 2211/1037* (2013.01)

(72) 발명자

**최진석**

경기도 수원시 팔달구 화양로50번길 30, 123동  
1201호 (화서동, 블루밍 푸른숲 아파트)

**최대혁**

경기도 용인시 기흥구 흥덕2로 126, 703동 1302호  
(영덕동, 흥덕마을7단지흥덕힐스테이트아파트)

**이주동**

경기도 성남시 분당구 돌마로486번길 7, 207동  
1003호(서현동, 효자촌동아아파트)

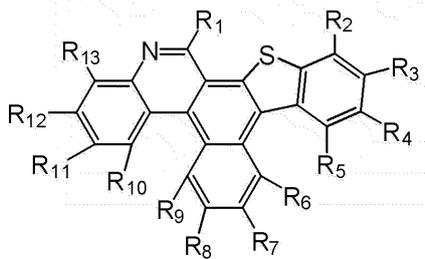
명세서

청구범위

청구항 1

하기 화학식 1로 표시되는 화합물:

[화학식 1]



상기 화학식 1에 있어서,

R<sub>1</sub> 내지 R<sub>13</sub>은 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; 중수소; 할로젠기; -CN; 치환 또는 비치환된 알킬기; 치환 또는 비치환된 알케닐기; 치환 또는 비치환된 직쇄 또는 분지쇄의 알킬닐기; 치환 또는 비치환된 알콕시기; 치환 또는 비치환된 시클로알킬기; 치환 또는 비치환된 헤테로시클로알킬기; 치환 또는 비치환된 아릴기; 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기; -NRR'; -SiRR'R"; 및 -P(=O)RR' 로 이루어진 군으로부터 선택되며,

R, R' 및 R"은 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; 중수소; -CN; 치환 또는 비치환된 알킬기; 치환 또는 비치환된 시클로알킬기; 치환 또는 비치환된 아릴기; 및 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기로 이루어진 군으로부터 선택된다.

청구항 2

청구항 1에 있어서, R<sub>1</sub>은 -(L)<sub>m</sub>-(Z)<sub>n</sub>이고,

L은 치환 또는 비치환된 아틸렌기; 또는 치환 또는 비치환된 헤테로아틸렌기이며,

Z는 치환 또는 비치환된 아릴기; 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기; -NRR'; -SiRR'R"; 및 -P(=O)RR' 로 이루어진 군으로부터 선택되고,

상기 R, R' 및 R"은 서로 동일하거나 상이하며, 각각 독립적으로 수소; 중수소; -CN; 치환 또는 비치환된 알킬기; 치환 또는 비치환된 시클로알킬기; 치환 또는 비치환된 아릴기; 및 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기로 이루어진 군으로부터 선택되고,

m은 0 내지 5의 정수이며,

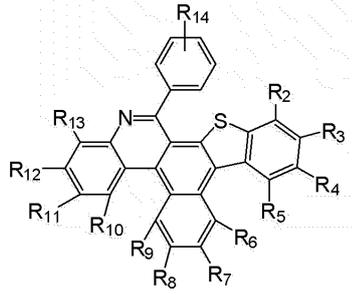
n은 1 내지 3의 정수이고,

상기 m 및 n이 각각 2 이상의 정수일 때, 2 이상의 괄호 내의 치환기는 서로 동일하거나 상이한 것인 화합물.

청구항 3

청구항 1에 있어서, 상기 화학식 1은 하기 화학식 2로 표시되는 것인 화합물:

[화학식 2]



상기 화학식 2에 있어서,

R<sub>2</sub> 내지 R<sub>13</sub>은 화학식 1에서 정의한 바와 동일하고,

R<sub>14</sub>는 -(L<sub>1</sub>)<sub>s</sub>-(Z<sub>1</sub>)<sub>t</sub>이고,

L<sub>1</sub>은 치환 또는 비치환된 아릴렌기; 또는 치환 또는 비치환된 헤테로아릴렌기이며,

Z<sub>1</sub>은 치환 또는 비치환된 아릴기; 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기; -NRR'; -SiRR'R"; 및 -P(=O)RR'로 이루어진 군으로부터 선택되고,

상기 R, R' 및 R"은 서로 동일하거나 상이하며, 각각 독립적으로 수소; 중수소; -CN; 치환 또는 비치환된 알킬기; 치환 또는 비치환된 시클로알킬기; 치환 또는 비치환된 아릴기; 및 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기로 이루어진 군으로부터 선택되고,

s는 0 내지 4의 정수이며,

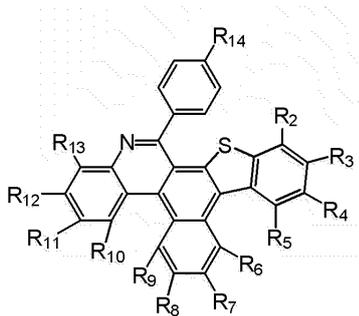
t는 1 내지 3의 정수이고,

상기 s 및 t가 각각 2 이상의 정수일 때, 2 이상의 괄호 내의 치환기는 서로 동일하거나 상이하다.

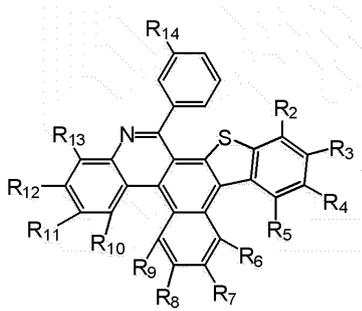
#### 청구항 4

청구항 3에 있어서, 상기 화학식 2는 하기 화학식 2-1 또는 화학식 2-2로 표시되는 것인 화합물:

[화학식 2-1]



[화학식 2-2]



상기 화학식 2-1 및 2-2에 있어서,

R<sub>2</sub> 내지 R<sub>14</sub>는 화학식 2에서 정의한 바와 동일하다.

**청구항 5**

청구항 2에 있어서, 상기 L은 치환 또는 비치환된 C<sub>6</sub> 내지 C<sub>20</sub>의 단환 또는 다환의 아틸렌기; 또는 치환 또는 비치환된 C<sub>2</sub> 내지 C<sub>20</sub>의 단환 또는 다환의 N 함유 헤테로아틸렌기인 것인 화합물.

**청구항 6**

청구항 2에 있어서, 상기 Z는 치환 또는 비치환된 C<sub>6</sub> 내지 C<sub>20</sub>의 단환 또는 다환의 아틸기; 치환 또는 비치환된 C<sub>2</sub> 내지 C<sub>20</sub>의 단환 또는 다환의 헤테로아틸기; 및 -P(=O)RR'로 이루어진 군으로부터 선택되고,

상기 R 및 R'은 서로 동일하거나 상이하며, 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 C<sub>6</sub> 내지 C<sub>20</sub>의 단환 또는 다환의 아틸기; 및 치환 또는 비치환된 C<sub>2</sub> 내지 C<sub>20</sub>의 단환 또는 다환의 헤테로아틸기로 이루어진 군으로부터 선택되는 것인 화합물.

**청구항 7**

청구항 2에 있어서, 상기 L은 페닐렌기, 비페닐렌기, 나프틸렌기, 안트라세닐렌기, 페난트레닐렌기, 피리딜렌기, 피리미딜렌기, 트리아지닐렌기, 퀴놀리닐렌기, 이소퀴놀리닐렌기 및 퀴나졸리닐렌기로 이루어진 군으로부터 선택되고,

상기 L이 치환되는 경우, 중수소, 할로젠, -CN, C<sub>1</sub> 내지 C<sub>60</sub>의 직쇄 또는 분지쇄의 알킬기, C<sub>2</sub> 내지 C<sub>60</sub>의 직쇄 또는 분지쇄의 알케닐기, C<sub>2</sub> 내지 C<sub>60</sub>의 직쇄 또는 분지쇄의 알키닐기, C<sub>3</sub> 내지 C<sub>60</sub>의 단환 또는 다환의 시클로알킬기, C<sub>2</sub> 내지 C<sub>60</sub>의 단환 또는 다환의 헤테로시클로알킬기, C<sub>6</sub> 내지 C<sub>60</sub>의 단환 또는 다환의 아틸기, 및 C<sub>2</sub> 내지 C<sub>60</sub>의 단환 또는 다환의 헤테로아틸기로 이루어진 군으로부터 선택되는 1 이상의 치환기로 치환되는 것인 화합물.

**청구항 8**

청구항 2에 있어서, 상기 Z는 페닐기, 비페닐기, 나프틸기, 안트라세닐기, 페난트레닐기, 트리페닐레닐기, 플루오레닐기, 피리딜기, 피리미딜기, 트리아지닐기, 피리도인다졸기, 피라졸로퀴나졸리닐기, 벤즈이미다졸릴기, 벤즈옥사졸릴기, 옥사디아졸릴기, 벤조티아졸릴기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 퀴나졸리닐기, 나프티리디닐기, 디벤조푸라닐기, 디벤조티오펜기, 이미다조피리디닐기, 페난트롤리닐기, 및 디페닐포스포릴기로 이루어진 군으로부터 선택되고,

상기 Z가 치환되는 경우, 중수소, 할로젠, -CN, 알킬기, 알케닐기, 알키닐기, 시클로알킬기, 헤테로시클로알킬기, 아틸기, 및 헤테로아틸기로 이루어진 군으로부터 선택되는 1 이상의 치환기로 치환되는 것인 화합물.

**청구항 9**

청구항 1에 있어서, 상기  $R_2$  내지  $R_{13}$ 은 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; 중수소; 치환 또는 비치환된  $C_6$  내지  $C_{20}$ 의 단환 또는 다환의 아릴기; 및 치환 또는 비치환된  $C_2$  내지  $C_{20}$ 의 단환 또는 다환의 헤테로아릴기로 이루어진 군으로부터 선택되는 것인 화합물.

**청구항 10**

청구항 1에 있어서, 상기  $R_2$  내지  $R_{13}$ 은 수소인 것인 화합물.

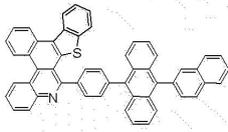
**청구항 11**

청구항 2에 있어서, 상기  $m$ 은 1 내지 3의 정수이고, 상기  $n$ 은 1 또는 2의 정수인 것인 화합물.

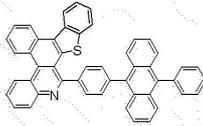
**청구항 12**

청구항 1에 있어서, 상기 화학식 1의 화합물은 하기 그룹 1 및 2의 화합물들 중에서 선택되는 것인 화합물:

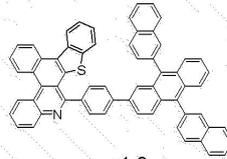
<그룹 1>



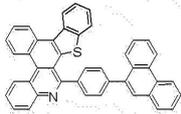
1-1



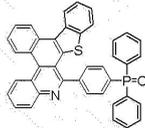
1-2



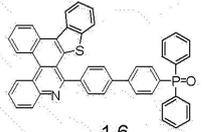
1-3



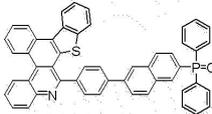
1-4



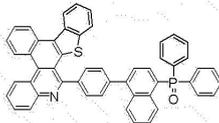
1-5



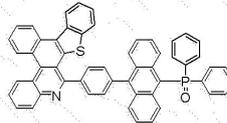
1-6



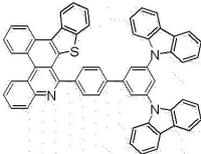
1-7



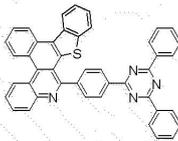
1-8



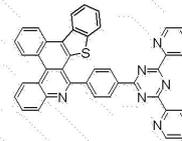
1-9



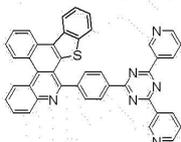
1-10



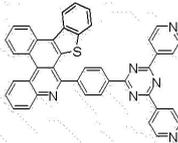
1-11



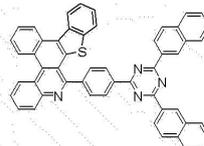
1-12



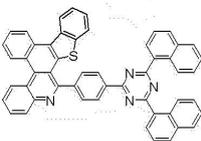
1-13



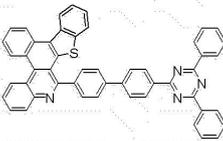
1-14



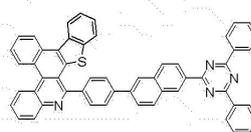
1-15



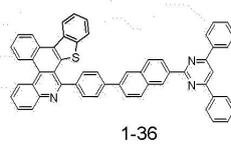
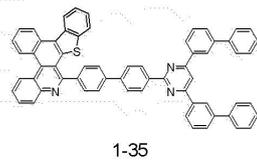
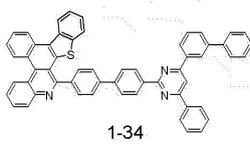
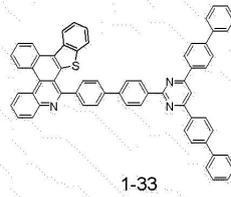
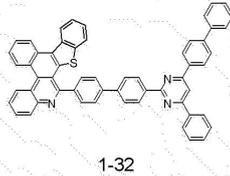
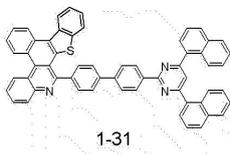
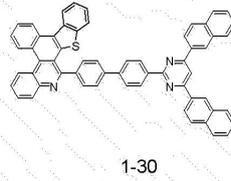
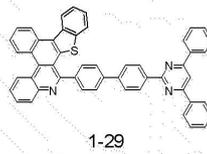
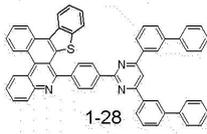
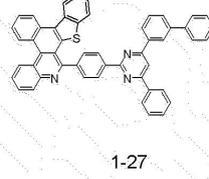
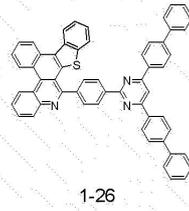
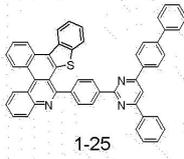
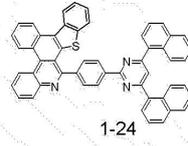
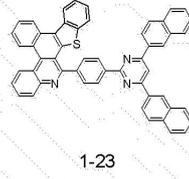
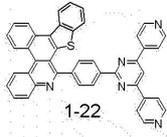
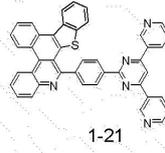
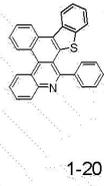
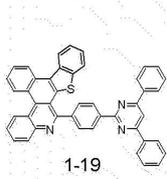
1-16

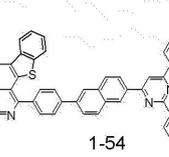
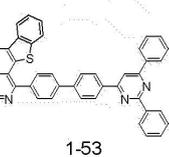
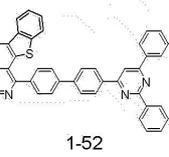
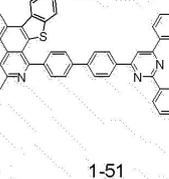
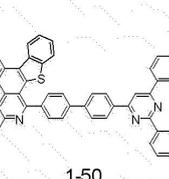
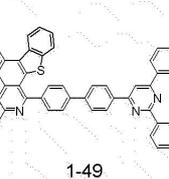
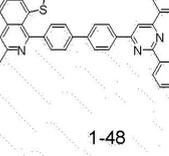
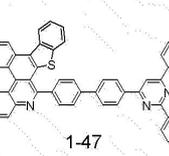
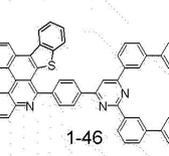
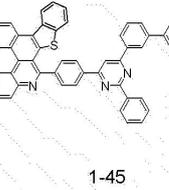
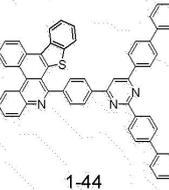
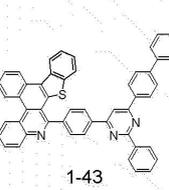
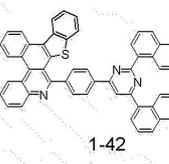
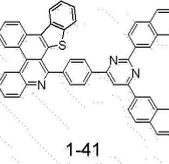
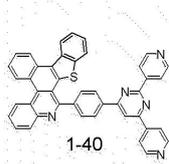
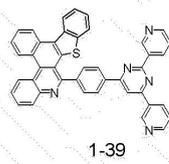
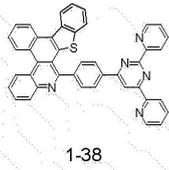


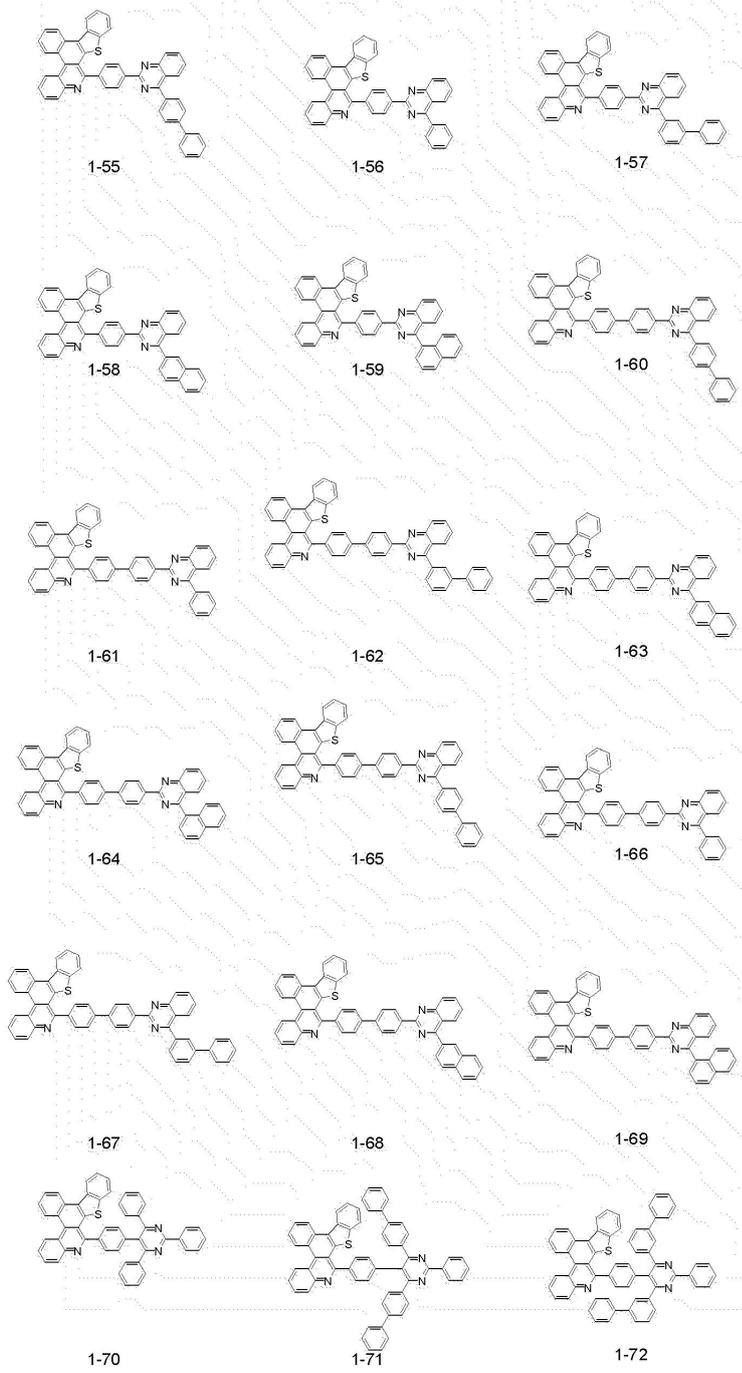
1-17

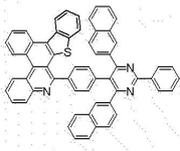


1-18

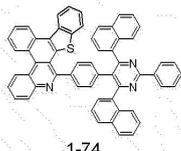




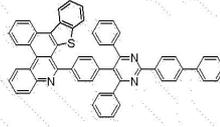




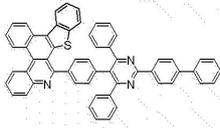
1-73



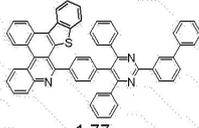
1-74



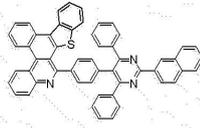
1-75



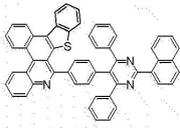
1-76



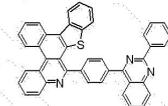
1-77



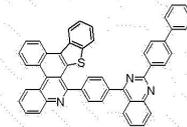
1-78



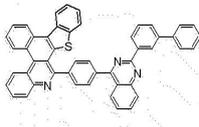
1-79



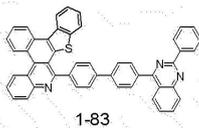
1-80



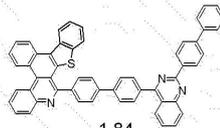
1-81



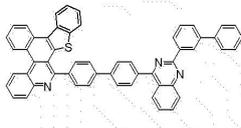
1-82



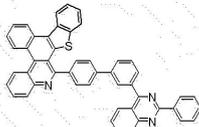
1-83



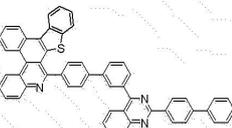
1-84



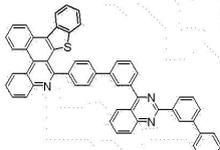
1-85



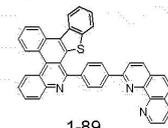
1-86



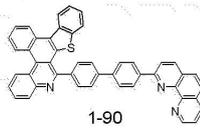
1-87



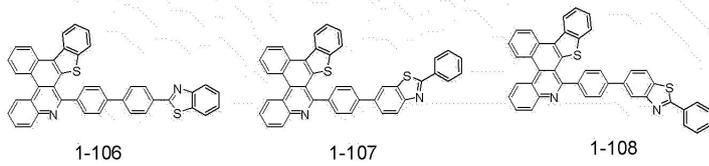
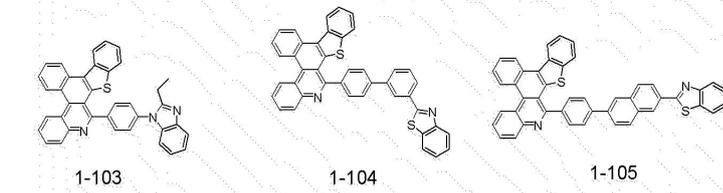
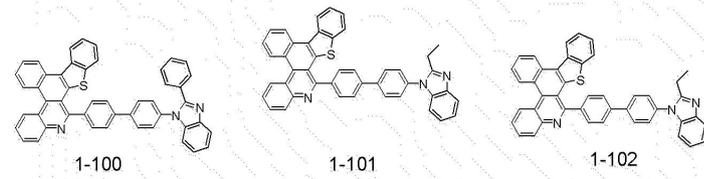
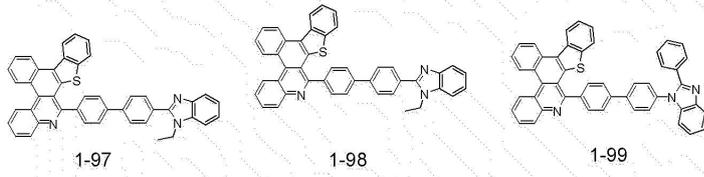
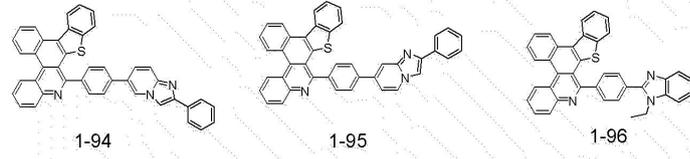
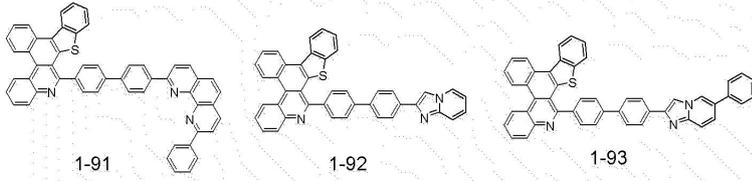
1-88

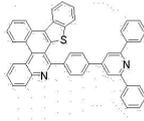


1-89

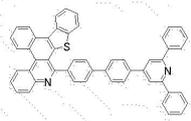


1-90

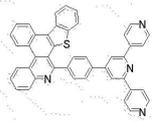




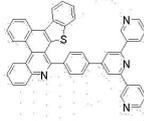
1-109



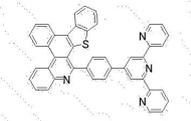
1-110



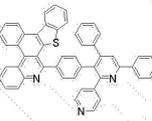
1-111



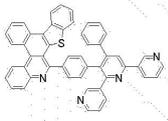
1-112



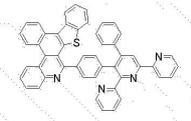
1-113



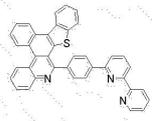
1-114



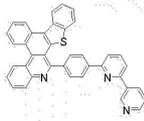
1-115



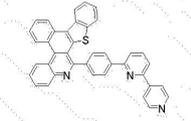
1-116



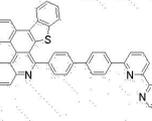
1-117



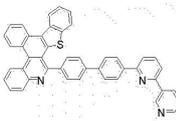
1-118



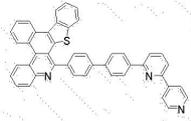
1-119



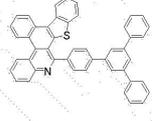
1-120



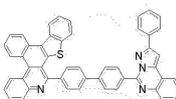
1-121



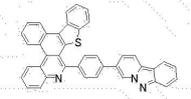
1-122



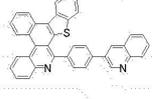
1-123



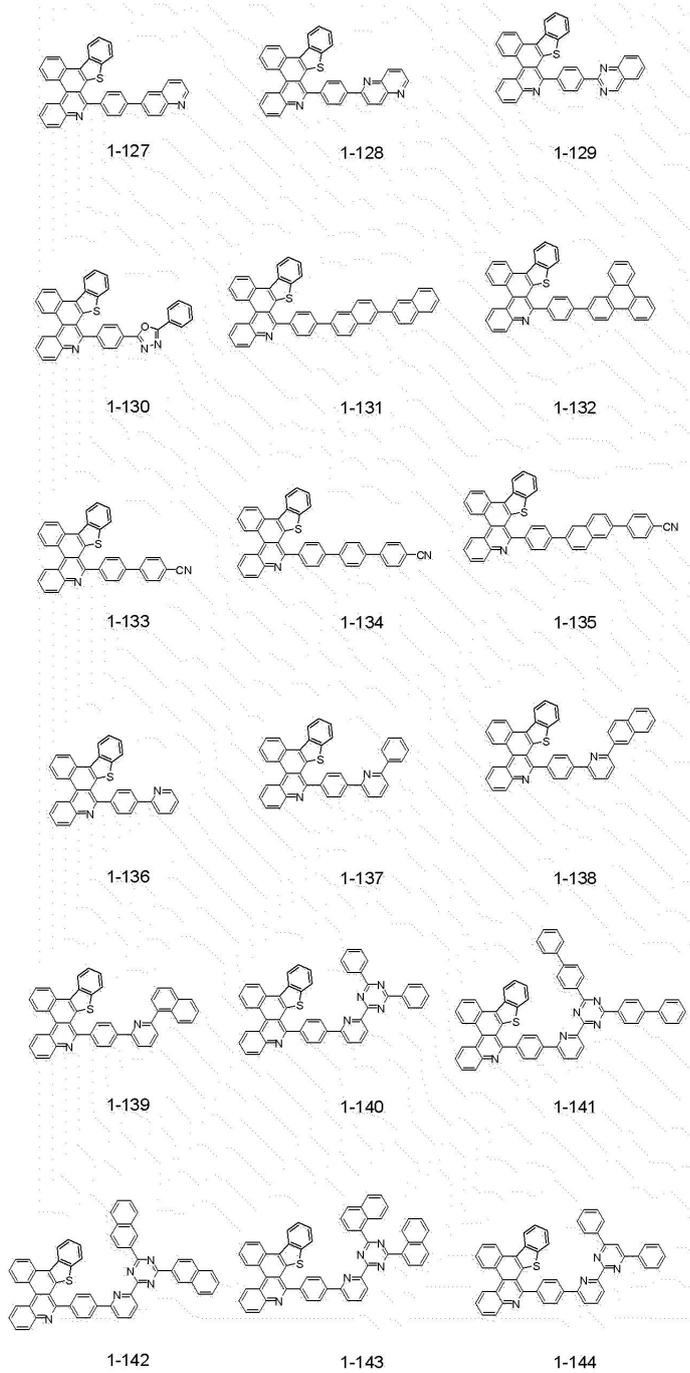
1-124

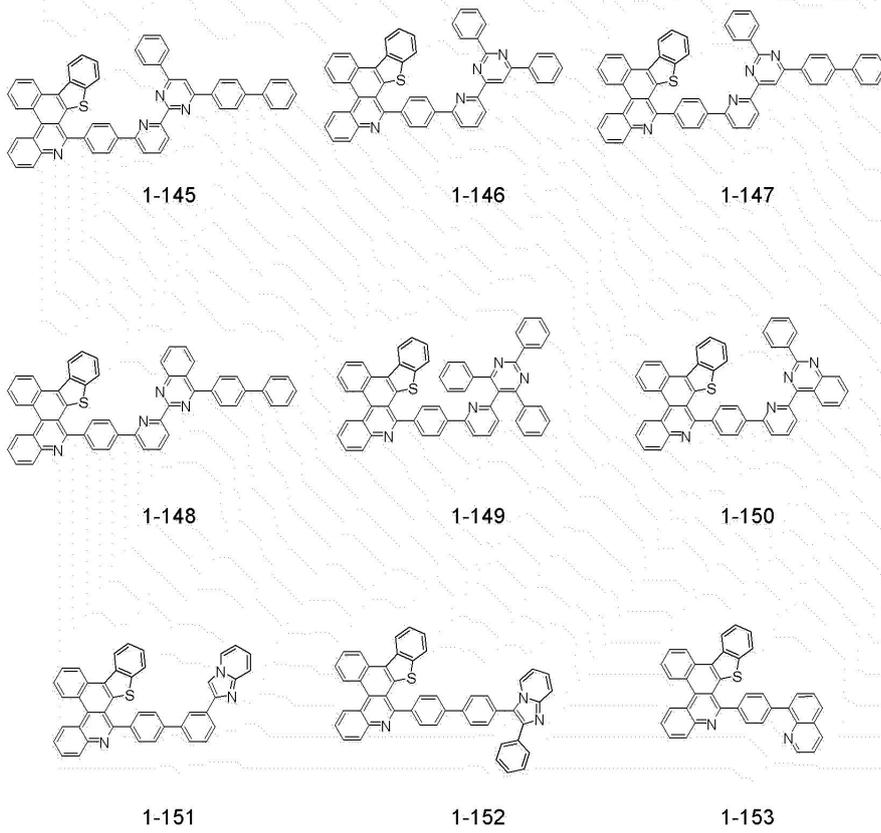


1-125

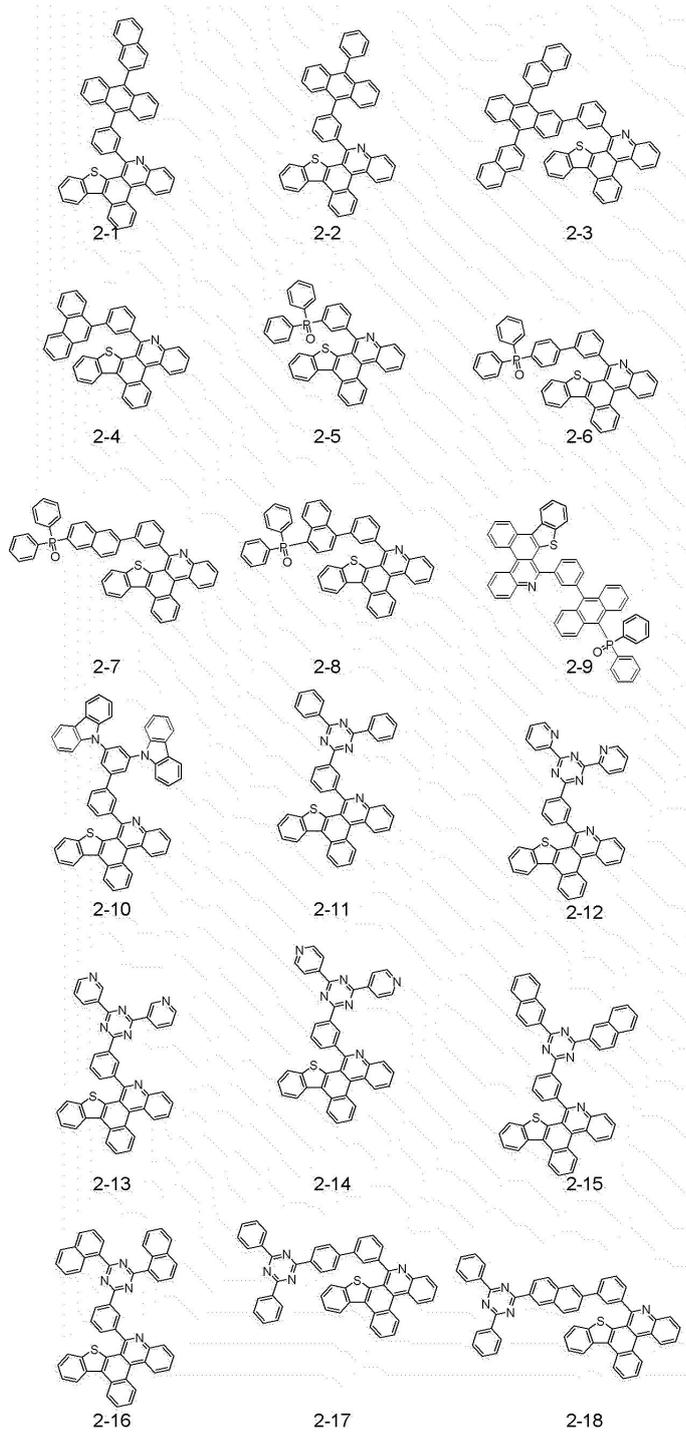


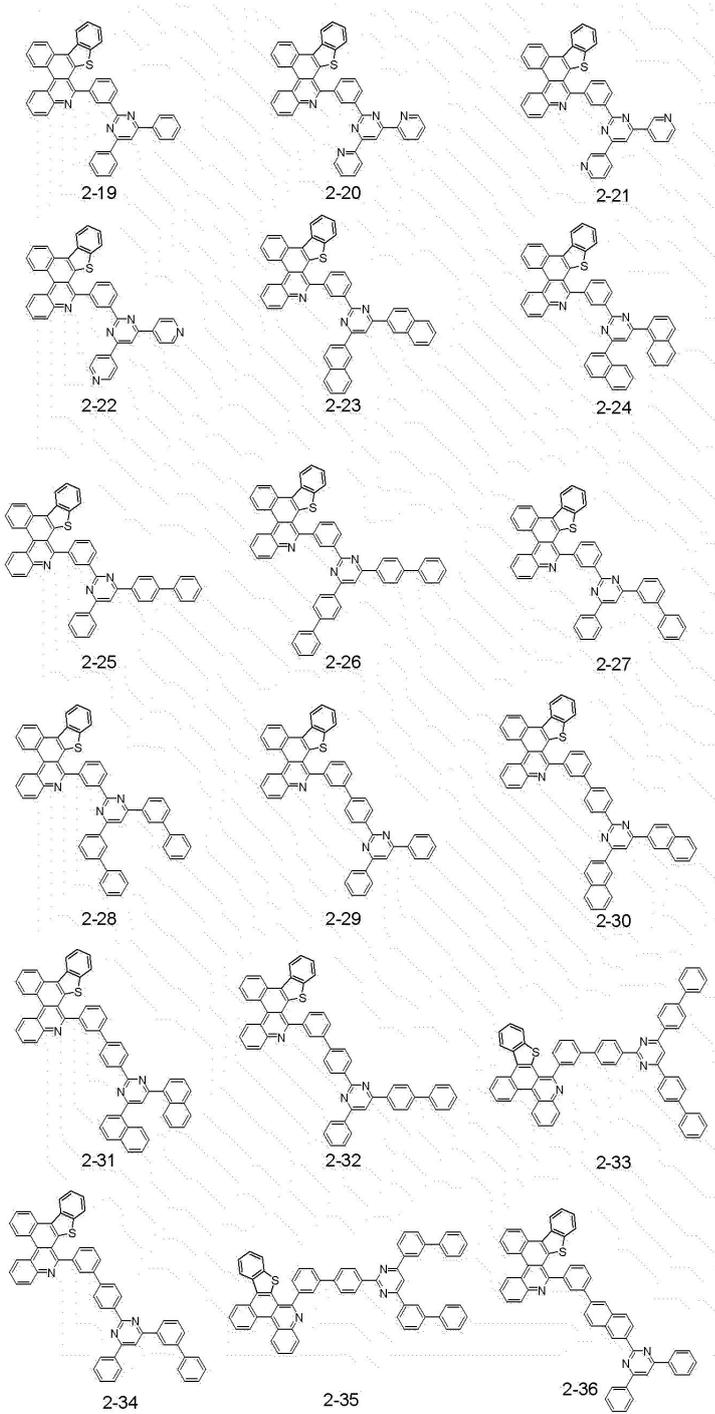
1-126





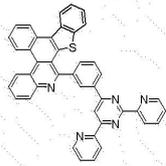
<그림 2>



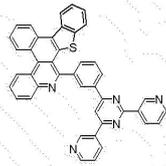




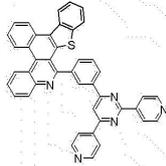
2-37



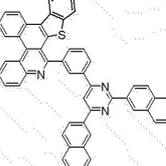
2-38



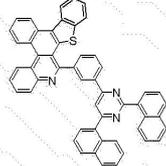
2-39



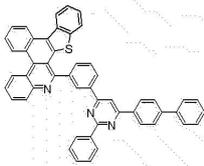
2-40



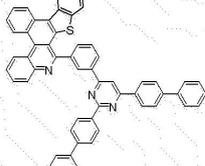
2-41



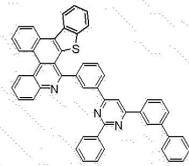
2-42



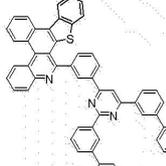
2-43



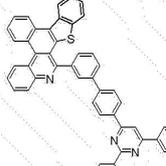
2-44



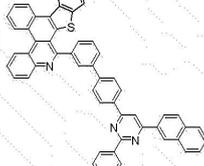
2-45



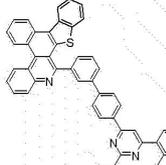
2-46



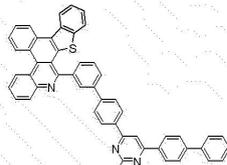
2-47



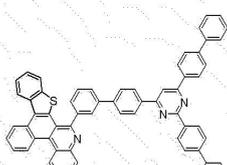
2-48



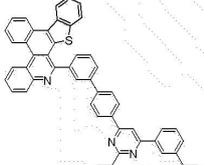
2-49



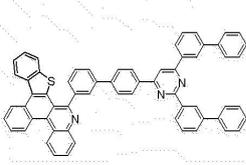
2-50



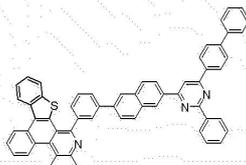
2-51



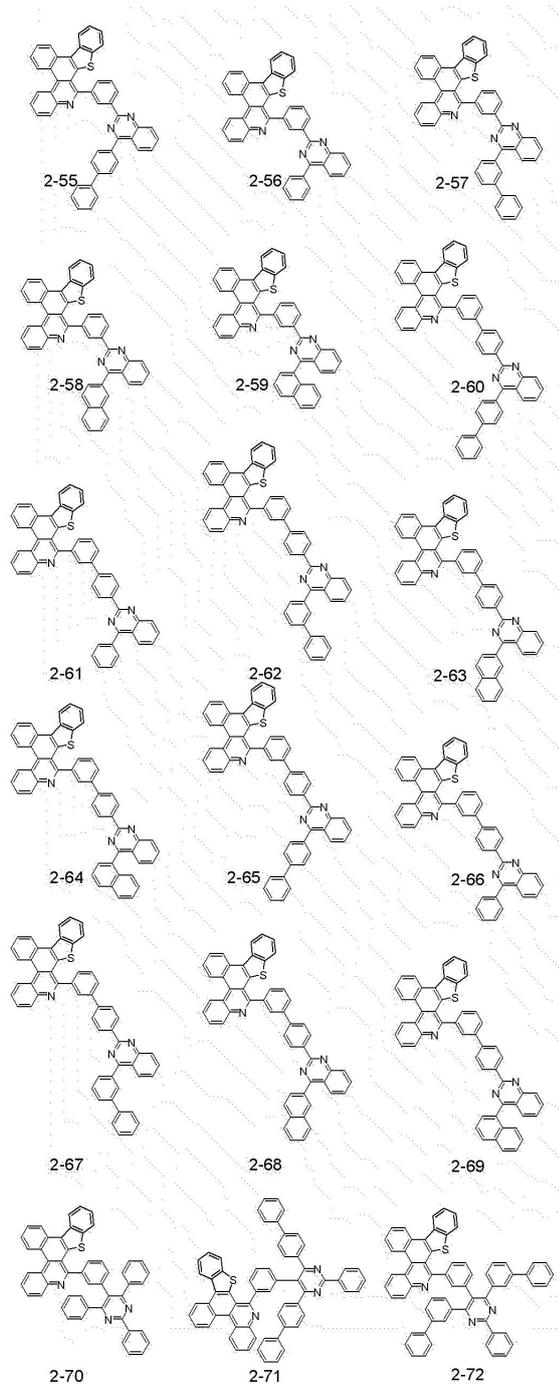
2-52

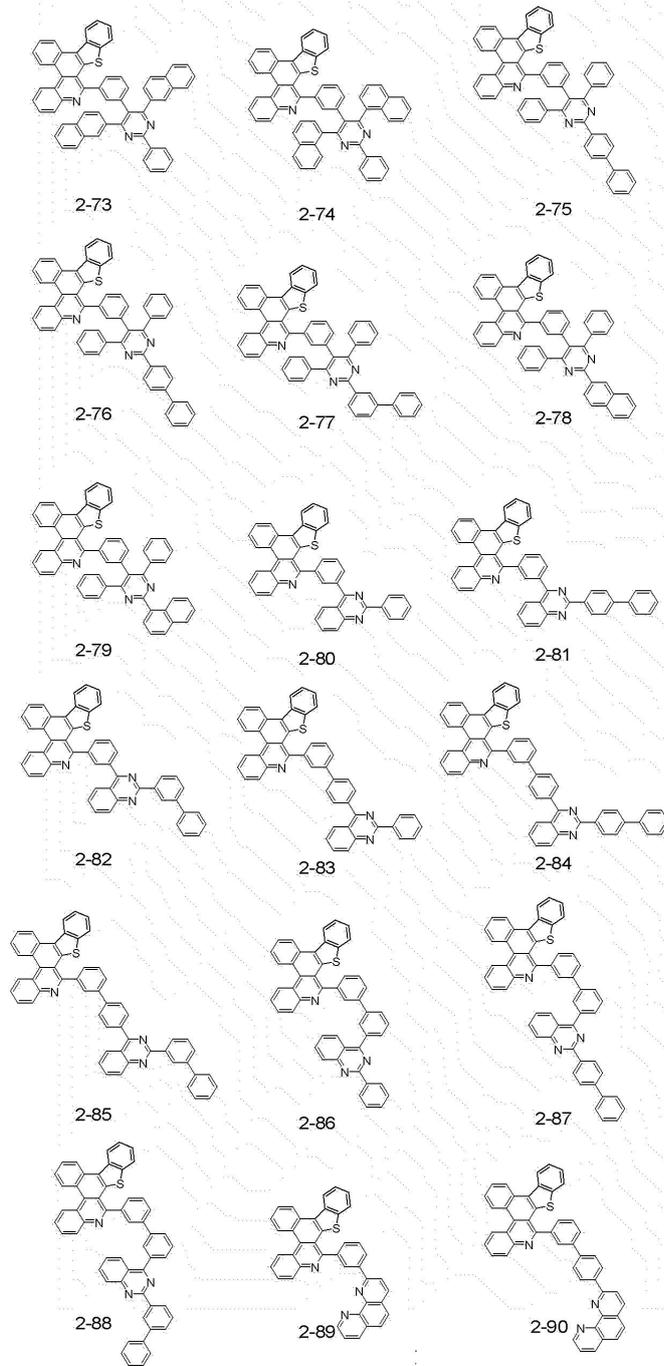


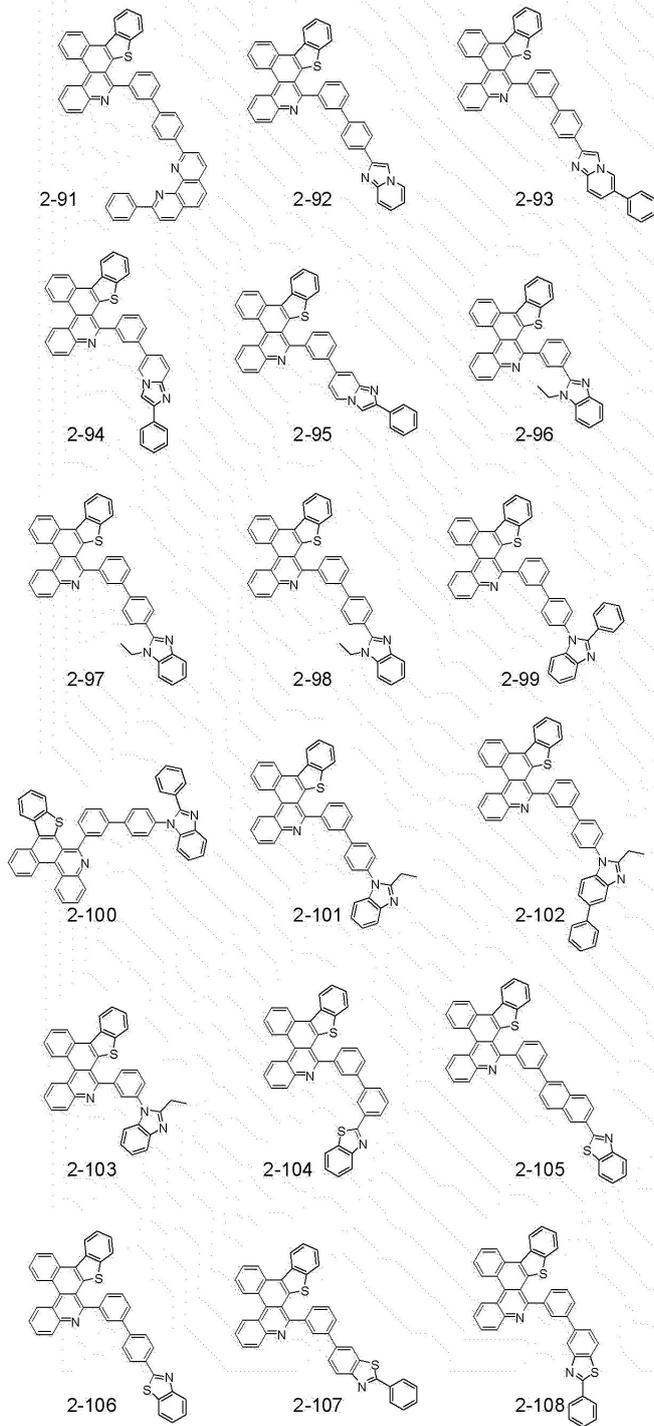
2-53

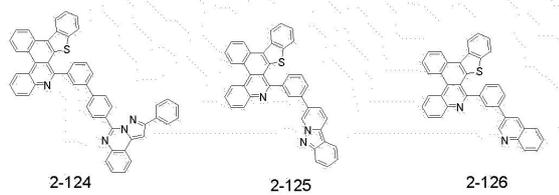
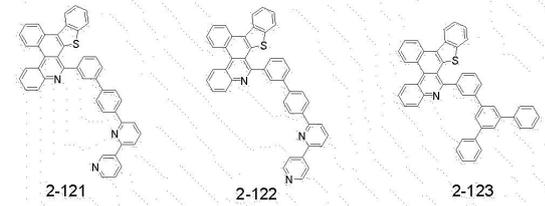
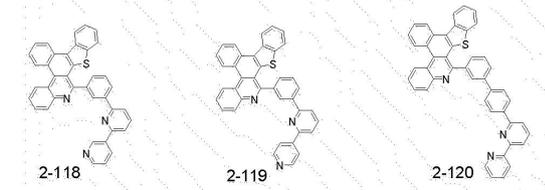
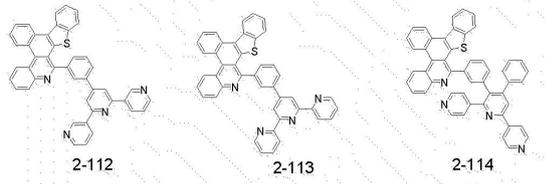
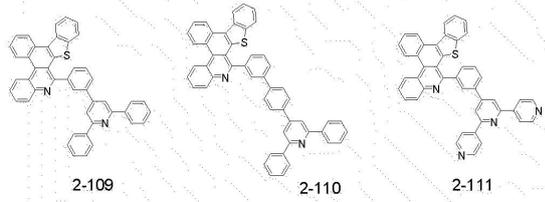


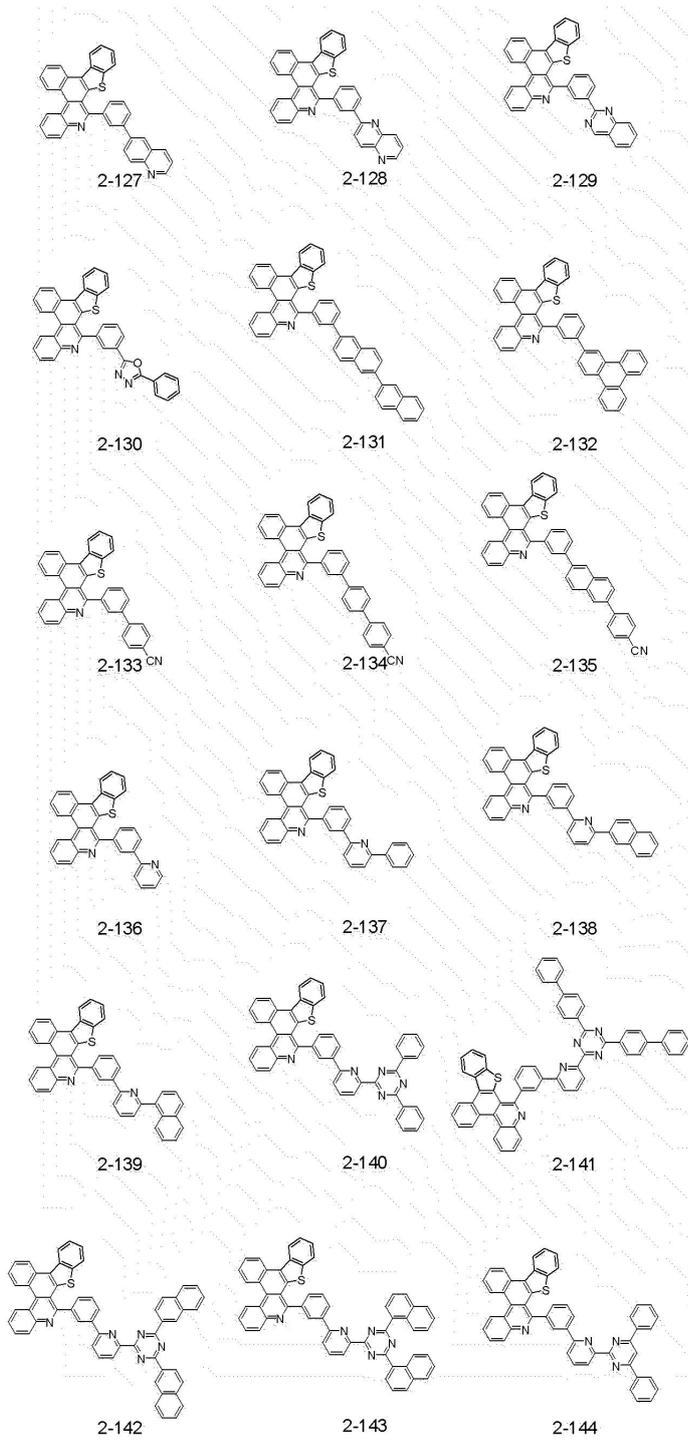
2-54

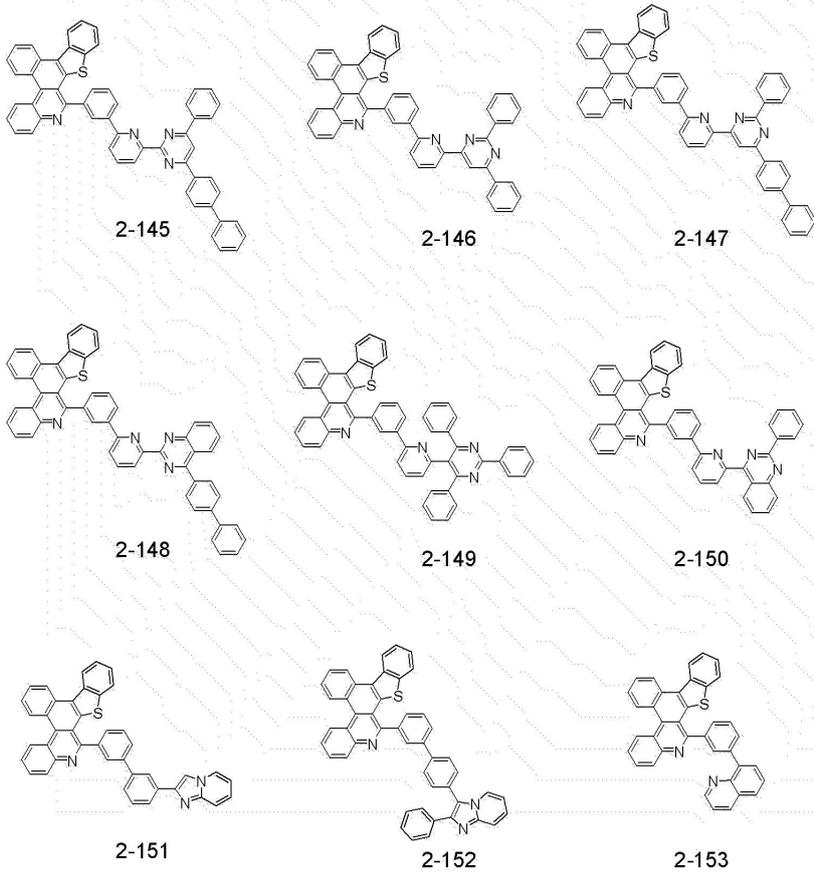












**청구항 13**

양극, 음극 및 상기 양극과 음극 사이에 구비된 1층 이상의 유기물층을 포함하고, 상기 유기물층 중 1층 이상이 청구항 1 내지 12 중 어느 하나의 항에 따른 화합물을 포함하는 유기 발광 소자.

**청구항 14**

청구항 13에 있어서, 상기 화합물을 포함하는 유기물층은 정공 주입층, 정공 수송층, 발광층, 정공 저지층, 전자 수송층 및 전자 주입층으로 이루어진 군에서 선택되는 1층 이상인 것인 유기 발광 소자.

**청구항 15**

청구항 13에 있어서, 상기 유기물층은 전하 생성층을 포함하고, 상기 전하 생성층이 상기 화합물을 포함하는 것을 특징으로 하는 유기 발광 소자.

**청구항 16**

청구항 13에 있어서, 상기 유기 발광 소자는, 양극, 상기 양극 상에 구비되고 제1 발광층을 포함하는 제1 스택, 상기 제1 스택 상에 구비되는 전하 생성층, 상기 전하 생성층 상에 구비되고 제2 발광층을 포함하는 제2 스택, 및 상기 제2 스택 상에 구비되는 음극을 포함하는 것을 특징으로 하는 유기 발광 소자.

**발명의 설명**

**기술 분야**

[0001] 본 출원은 2015년 4월 30일에 한국특허청에 제출된 한국 특허 출원 제 10-2015-0061913호의 출원일의 이익을 주장하며, 그 내용 전부는 본 명세서에 포함된다.

[0002] 본 출원은 신규한 다환 화합물 및 이를 포함하는 유기 발광 소자에 관한 것이다.

**배경 기술**

- [0003] 진계 발광 소자는 자체 발광형 표시 소자의 일종으로서, 시야각이 넓고, 콘트라스트가 우수할 뿐만 아니라 응답 속도가 빠르다는 장점을 가지고 있다.
- [0004] 유기 발광 소자는 2개의 전극 사이에 유기 박막을 배치시킨 구조를 가지고 있다. 이와 같은 구조의 유기 발광 소자에 전압이 인가되면, 2개의 전극으로부터 주입된 전자와 정공이 유기 박막에서 결합하여 쌍을 이룬 후 소멸 하면서 빛을 발하게 된다. 상기 유기박막은 필요에 따라 단층 또는 다층으로 구성될 수 있다.
- [0005] 유기 박막의 재료는 필요에 따라 발광 기능을 가질 수 있다. 예컨대, 유기 박막 재료로는 그 자체가 단독으로 발광층을 구성할 수 있는 화합물이 사용될 수도 있고, 또는 호스트-도펀트계 발광층의 호스트 또는 도펀트 역할을 할 수 있는 화합물이 사용될 수도 있다. 그 외에도, 유기 박막의 재료로서, 정공 주입, 정공 수송, 전자 저지, 정공 저지, 전자 수송 또는 전자 주입 등의 역할을 수행할 수 있는 화합물이 사용될 수도 있다.
- [0006] 유기 발광 소자의 성능, 수명 또는 효율을 향상시키기 위하여, 유기 박막의 재료의 개발이 지속적으로 요구되고 있다.

**선행기술문헌**

**특허문헌**

- [0007] (특허문헌 0001) 미국 특허 제4,356,429호

**발명의 내용**

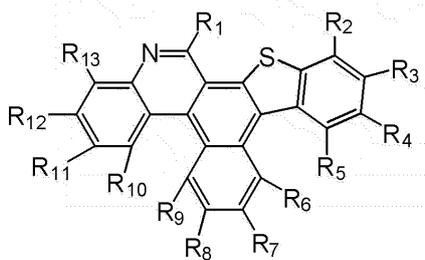
**해결하려는 과제**

- [0008] 유기 발광 소자에서 사용 가능한 물질에 요구되는 조건, 예컨대 적절한 에너지 준위, 전기 화학적 안정성 및 열적 안정성 등을 만족시킬 수 있으며, 치환기에 따라 유기 발광 소자에서 요구되는 다양한 역할을 할 수 있는 화학 구조를 갖는 화합물을 포함하는 유기 발광 소자에 대한 연구가 필요하다.

**과제의 해결 수단**

- [0009] 본 출원의 일 실시상태는, 하기 화학식 1로 표시되는 화합물을 제공한다.

- [0010] [화학식 1]



- [0011] 상기 화학식 1에 있어서,
- [0012] R<sub>1</sub> 내지 R<sub>13</sub>은 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; 중수소; 할로젠기; -CN; 치환 또는 비치환된 알킬기; 치환 또는 비치환된 알케닐기; 치환 또는 비치환된 직쇄 또는 분지쇄의 알킬닐기; 치환 또는 비치환된 알콕시기; 치환 또는 비치환된 시클로알킬기; 치환 또는 비치환된 헤테로시클로알킬기; 치환 또는 비치환된 아릴기; 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기; -NRR'; -SiRR'R"; 및 -P(=O)RR'으로 이루어진 군으로부터 선택되며,
- [0014] R, R' 및 R"은 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; 중수소; -CN; 치환 또는 비치환된 알킬기; 치환 또는 비치환된 시클로알킬기; 치환 또는 비치환된 아릴기; 및 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기로 이루어진 군으로부터 선택된다.
- [0015] 또한, 본 출원의 다른 실시상태는, 양극, 음극 및 상기 양극과 음극 사이에 구비된 1층 이상의 유기물층을 포함하는 유기 발광 소자로서, 상기 유기물층 중 1층 이상이 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하는 유기 발

광 소자를 제공한다.

**발명의 효과**

- [0016] 본 명세서에 기재된 화합물은 유기 발광 소자의 유기물층 재료로서 사용할 수 있다. 상기 화합물은 유기 발광 소자에서 정공 주입 재료, 정공 수송 재료, 발광 재료, 정공 저지 재료, 전자 수송 재료, 전자 주입 재료 등의 역할을 할 수 있다.
- [0017] 특히, 상기 화학식 1의 화합물은 유기 발광 소자의 전자 수송층의 재료로서 사용될 수 있다.
- [0018] 또한, 상기 화학식 1의 화합물은 유기 발광 소자의 정공 저지층의 재료로서 사용될 수 있다.
- [0019] 또한, 상기 화학식 1의 화합물은 유기 발광 소자의 발광층의 재료로 사용될 수 있다.
- [0020] 또한, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 유기 발광 소자에 사용하는 경우, 소자의 구동전압을 낮추고, 광효율을 향상시키며, 화합물의 열적 안정성에 의하여 소자의 수명 특성을 향상시킬 수 있다.

**도면의 간단한 설명**

- [0021] 도 1 내지 4는 본 출원의 실시상태들에 따른 유기 발광 소자의 적층순서를 예시한 것이다.

**발명을 실시하기 위한 구체적인 내용**

- [0022] 이하, 본 출원에 대하여 상세히 설명한다.
- [0023] 본 명세서에 기재된 화합물은 상기 화학식 1로 표시될 수 있다. 구체적으로, 상기 화학식 1의 화합물은 상기와 같은 코어 구조 및 치환기의 구조적 특징에 의하여 유기 발광 소자의 유기물층 재료로 사용될 수 있다.
- [0024] 본 명세서에 있어서, "치환 또는 비치환"이란 중수소; 할로젠기; -CN; C<sub>1</sub> 내지 C<sub>60</sub>의 알킬기; C<sub>2</sub> 내지 C<sub>60</sub>의 알케닐기; C<sub>2</sub> 내지 C<sub>60</sub>의 알키닐기; C<sub>3</sub> 내지 C<sub>60</sub>의 시클로알킬기; C<sub>2</sub> 내지 C<sub>60</sub>의 헤테로시클로알킬기; C<sub>6</sub> 내지 C<sub>60</sub>의 아릴기; C<sub>2</sub> 내지 C<sub>60</sub>의 헤테로아릴기; -SiRR'R'; -P(=O)RR'; 및 -NRR'로 이루어진 군으로부터 선택된 1 이상의 치환기로 치환 또는 비치환되거나, 상기 예시된 치환기 중 2 이상의 치환기가 연결된 치환기로 치환 또는 비치환된 것을 의미하고, 상기 R, R' 및 R"은 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; 중수소; 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub> 내지 C<sub>60</sub>의 알킬기; 치환 또는 비치환된 C<sub>3</sub> 내지 C<sub>60</sub>의 시클로알킬기; 치환 또는 비치환된 C<sub>6</sub> 내지 C<sub>60</sub>의 아릴기; 및 치환 또는 비치환된 C<sub>2</sub> 내지 C<sub>60</sub>의 헤테로아릴기이다. 예컨대, "2 이상의 치환기가 연결된 치환기"는 비페닐기일 수 있다. 즉, 비페닐기는 아릴기일 수도 있고, 2개의 페닐기가 연결된 치환기로 해석될 수 있다.
- [0025] 상기 "치환"이라는 용어는 화합물의 탄소 원자에 결합된 수소 원자가 다른 치환기로 바뀌는 것을 의미하며, 치환되는 위치는 수소 원자가 치환되는 위치 즉, 치환기가 치환 가능한 위치라면 한정하지 않으며, 2 이상 치환되는 경우, 2 이상의 치환기는 서로 동일하거나 상이할 수 있다.
- [0026] 본 명세서에 있어서, 상기 할로젠은 불소, 염소, 브롬 또는 요오드일 수 있다.
- [0027] 본 명세서에 있어서, 상기 알킬기는 탄소수 1 내지 60의 직쇄 또는 분지쇄를 포함하며, 다른 치환기에 의하여 추가로 치환될 수 있다. 상기 알킬기의 탄소수는 1 내지 60, 구체적으로 1 내지 40, 더욱 구체적으로, 1 내지 20일 수 있다. 구체적인 예로는 메틸기, 에틸기, 프로필기, n-프로필기, 이소프로필기, 부틸기, n-부틸기, 이소부틸기, tert-부틸기, sec-부틸기, 1-메틸-부틸기, 1-에틸-부틸기, 펜틸기, n-펜틸기, 이소펜틸기, 네오펜틸기, tert-펜틸기, 헥실기, n-헥실기, 1-메틸펜틸기, 2-메틸펜틸기, 4-메틸-2-펜틸기, 3,3-디메틸부틸기, 2-에틸부틸기, 헵틸기, n-헵틸기, 1-메틸헥실기, 시클로헵틸메틸기, 시클로헥실메틸기, 옥틸기, n-옥틸기, tert-옥틸기, 1-메틸헵틸기, 2-에틸헥실기, 2-프로필펜틸기, n-노닐기, 2,2-디메틸헵틸기, 1-에틸-프로필기, 1,1-디메틸-프로필기, 이소헥실기, 2-메틸펜틸기, 4-메틸헥실기, 5-메틸헥실기 등이 있으나, 이에만 한정되는 것은 아니다.
- [0028] 본 명세서에 있어서, 상기 알케닐기는 탄소수 2 내지 60의 직쇄 또는 분지쇄를 포함하며, 다른 치환기에 의하여 추가로 치환될 수 있다. 상기 알케닐기의 탄소수는 2 내지 60, 구체적으로 2 내지 40, 더욱 구체적으로, 2 내지 20일 수 있다. 구체적인 예로는 비닐기, 1-프로페닐기, 이소프로페닐기, 1-부테닐기, 2-부테닐기, 3-부테닐기, 1-펜테닐기, 2-펜테닐기, 3-펜테닐기, 3-메틸-1-부테닐기, 1,3-부타디에닐기, 알릴기, 1-페닐비닐-1-일기, 2-페닐비닐-1-일기, 2,2-디페닐비닐-1-일기, 2-페닐-2-(나프틸-1-일)비닐-1-일기, 2,2-비스(디페닐-1-일)비닐-1-일

기, 스틸베닐기, 스티레닐기 등이 있으나 이들에 한정되지 않는다.

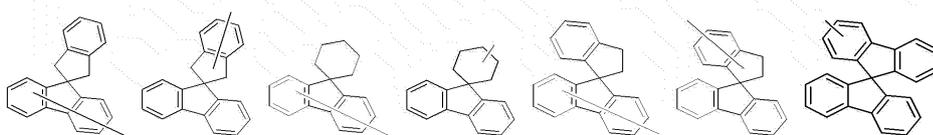
[0029] 본 명세서에 있어서, 상기 알키닐기는 탄소수 2 내지 60의 직쇄 또는 분지쇄를 포함하며, 다른 치환기에 의하여 추가로 치환될 수 있다. 상기 알키닐기의 탄소수는 2 내지 60, 구체적으로 2 내지 40, 더욱 구체적으로, 2 내지 20일 수 있다.

[0030] 본 명세서에 있어서, 상기 시클로알킬기는 탄소수 3 내지 60의 단환 또는 다환을 포함하며, 다른 치환기에 의하여 추가로 치환될 수 있다. 여기서, 다환이란 시클로알킬기가 다른 고리기와 직접 연결되거나 축합된 기를 의미한다. 여기서, 다른 고리기란 시클로알킬기일 수도 있으나, 다른 종류의 고리기, 예컨대 헤테로시클로알킬기, 아릴기, 헤테로아릴기 등일 수도 있다. 상기 시클로알킬기의 탄소수는 3 내지 60, 구체적으로 3 내지 40, 더욱 구체적으로 5 내지 20일 수 있다. 구체적으로, 시클로프로필기, 시클로부틸기, 시클로펜틸기, 3-메틸시클로펜틸기, 2,3-디메틸시클로펜틸기, 시클로헥실기, 3-메틸시클로헥실기, 4-메틸시클로헥실기, 2,3-디메틸시클로헥실기, 3,4,5-트리메틸시클로헥실기, 4-tert-부틸시클로헥실기, 시클로헵틸기, 시클로옥틸기 등이 있으나, 이에 한정되지 않는다.

[0031] 본 명세서에 있어서, 상기 헤테로시클로알킬기는 헤테로 원자로서 O, S, Se, N 또는 Si를 포함하고, 탄소수 2 내지 60의 단환 또는 다환을 포함하며, 다른 치환기에 의하여 추가로 치환될 수 있다. 여기서, 다환이란 헤테로시클로알킬기가 다른 고리기와 직접 연결되거나 축합된 기를 의미한다. 여기서, 다른 고리기란 헤테로시클로알킬기일 수도 있으나, 다른 종류의 고리기, 예컨대 시클로알킬기, 아릴기, 헤테로아릴기 등일 수도 있다. 상기 헤테로시클로알킬기의 탄소수는 2 내지 60, 구체적으로 2 내지 40, 더욱 구체적으로 3 내지 20일 수 있다.

[0032] 본 명세서에 있어서, 상기 아릴기는 탄소수 6 내지 60의 단환 또는 다환을 포함하며, 다른 치환기에 의하여 추가로 치환될 수 있다. 여기서, 다환이란 아릴기가 다른 고리기와 직접 연결되거나 축합된 기를 의미한다. 여기서, 다른 고리기란 아릴기일 수도 있으나, 다른 종류의 고리기, 예컨대 시클로알킬기, 헤테로시클로알킬기, 헤테로아릴기 등일 수도 있다. 상기 아릴기는 스피로기를 포함한다. 상기 아릴기의 탄소수는 6 내지 60, 구체적으로 6 내지 40, 더욱 구체적으로 6 내지 25일 수 있다. 상기 아릴기의 구체적인 예로는 페닐기, 비페닐기, 트리페닐기, 나프틸기, 안트릴기, 크라이세닐기, 페난트레닐기, 페틸레닐기, 플루오란테닐기, 트리페닐레닐기, 페날레닐기, 파이레닐기, 테트라세닐기, 펜타세닐기, 플루오레닐기, 인데닐기, 아세나프틸레닐기, 벤조플루오레닐기, 스피로비플루오레닐기, 2,3-디히드로-1H-인데닐기, 이들의 축합고리기를 들 수 있으나, 이에만 한정되는 것은 아니다.

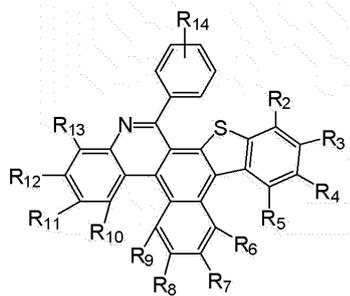
[0033] 본 명세서에 있어서, 상기 스피로기는 스피로 구조를 포함하는 기로서, 탄소수 15 내지 60일 수 있다. 예컨대, 상기 스피로기는 플루오레닐기에 2,3-디히드로-1H-인덴기 또는 시클로헥산기가 스피로 결합된 구조를 포함할 수 있다. 구체적으로, 하기 스피로기는 하기 구조식의 기 중 어느 하나를 포함할 수 있다.



[0034] 본 명세서에 있어서, 상기 헤테로아릴기는 헤테로 원자로서 S, O, Se, N 또는 Si를 포함하고, 탄소수 2 내지 60인 단환 또는 다환을 포함하며, 다른 치환기에 의하여 추가로 치환될 수 있다. 여기서, 상기 다환이란 헤테로아릴기가 다른 고리기와 직접 연결되거나 축합된 기를 의미한다. 여기서, 다른 고리기란 헤테로아릴기일 수도 있으나, 다른 종류의 고리기, 예컨대 시클로알킬기, 헤테로시클로알킬기, 아릴기 등일 수도 있다. 상기 헤테로아릴기의 탄소수는 2 내지 60, 구체적으로 2 내지 40, 더욱 구체적으로 3 내지 25일 수 있다. 상기 헤테로아릴기의 구체적인 예로는 피리딜기, 피롤릴기, 피리미딜기, 피리다지닐기, 푸라닐기, 티오펜기, 이미다졸릴기, 피라졸릴기, 옥사졸릴기, 이속사졸릴기, 티아졸릴기, 이소티아졸릴기, 트리아졸릴기, 푸라자닐기, 옥사디아졸릴기, 티아디아졸릴기, 디티아졸릴기, 테트라졸릴기, 파이라닐기, 티오파이라닐기, 디아지닐기, 옥사지닐기, 티아지닐기, 디옥시닐기, 트리아지닐기, 테트라지닐기, 퀴놀릴기, 이소퀴놀릴기, 퀴나졸리닐기, 이소퀴나졸리닐기, 퀴노졸리릴기, 나프티리딜기, 아크리디닐기, 페난트리디닐기, 이미다조피리디닐기, 디아자나프탈레닐기, 트리아자인덴기, 인돌릴기, 인돌리지닐기, 벤조티아졸릴기, 벤즈옥사졸릴기, 벤즈이미다졸릴기, 벤조티오펜기, 벤조푸란기, 디벤조티오펜기, 디벤조푸란기, 카바졸릴기, 벤조카바졸릴기, 디벤조카바졸릴기, 페나지닐기, 디벤조실릴기, 스피로비(디벤조실릴), 디히드로페나지닐기, 페녹사지닐기, 페난트리디닐기, 이미다조피리디닐기, 티에닐기, 인돌로[2,3-a]카바졸릴기, 인돌로[2,3-b]카바졸릴기, 인돌리닐기, 10,11-디히드로-디벤조[b,f]아제핀기,

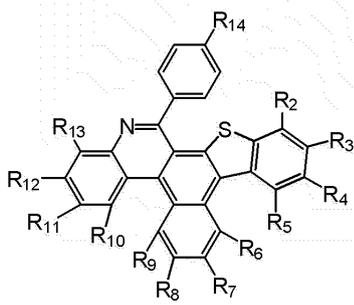
9,10-디히드로아크리디닐기, 페난트라지닐기, 페노티아티아지닐기, 프탈라지닐기, 나프틸리디닐기, 페난트롤리닐기, 벤조[c][1,2,5]티아디아졸릴기, 5,10-디히드로디벤조[b,e][1,4]아자실리닐, 피라졸로[1,5-c]퀴나졸리닐기, 피리도[1,2-b]인다졸릴기, 피리도[1,2-a]이미다조[1,2-e]인돌리닐기, 5,11-디히드로인데노[1,2-b]카바졸릴기 등을 들 수 있으나, 이에만 한정되는 것은 아니다.

- [0036] 본 명세서에 있어서, 아릴렌기 및 헤테로아릴렌기는 2가기인 것을 제외하고는 각각 전술한 아릴기 및 헤테로아릴기와 동일하게 해석될 수 있다.
- [0037] 본 출원의 일 실시상태에 따르면, 상기 R<sub>1</sub>은 -(L)<sub>m</sub>-(Z)<sub>n</sub>이고,
- [0038] L은 치환 또는 비치환된 아릴렌기; 또는 치환 또는 비치환된 헤테로아릴렌기이며,
- [0039] Z는 치환 또는 비치환된 아릴기; 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기; -NRR'; -SiRR'R"; 및 -P(=O)RR'로 이루어진 군으로부터 선택되고,
- [0040] 상기 R, R' 및 R"은 서로 동일하거나 상이하며, 각각 독립적으로 수소; 중수소; -CN; 치환 또는 비치환된 알킬기; 치환 또는 비치환된 시클로알킬기; 치환 또는 비치환된 아릴기; 및 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기로 이루어진 군으로부터 선택되고,
- [0041] m은 0 내지 5의 정수이며,
- [0042] n은 1 내지 3의 정수이고,
- [0043] 상기 m 및 n이 각각 2 이상의 정수일 때, 2 이상의 괄호 내의 치환기는 서로 동일하거나 상이할 수 있다.
- [0044] 본 출원의 일 실시상태에 따르면, 상기 화학식 1은 하기 화학식 2로 표시될 수 있다.
- [0045] [화학식 2]



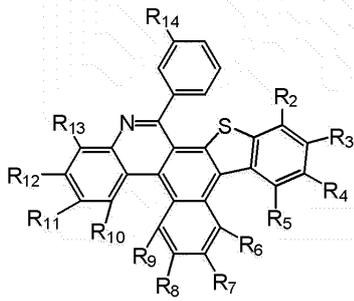
- [0046] 상기 화학식 2에 있어서,
- [0047] R<sub>2</sub> 내지 R<sub>13</sub>은 화학식 1에서 정의한 바와 동일하고,
- [0049] R<sub>14</sub>는 -(L)<sub>s</sub>-(Z)<sub>t</sub>이고,
- [0050] L<sub>1</sub>은 치환 또는 비치환된 아릴렌기; 또는 치환 또는 비치환된 헤테로아릴렌기이며,
- [0051] Z<sub>1</sub>은 치환 또는 비치환된 아릴기; 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기; -NRR'; -SiRR'R"; 및 -P(=O)RR'로 이루어진 군으로부터 선택되고,
- [0052] 상기 R, R' 및 R"은 서로 동일하거나 상이하며, 각각 독립적으로 수소; 중수소; -CN; 치환 또는 비치환된 알킬기; 치환 또는 비치환된 시클로알킬기; 치환 또는 비치환된 아릴기; 및 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기로 이루어진 군으로부터 선택되고,
- [0053] s는 0 내지 4의 정수이며,
- [0054] t는 1 내지 3의 정수이고,
- [0055] 상기 s 및 t가 각각 2 이상의 정수일 때, 2 이상의 괄호 내의 치환기는 서로 동일하거나 상이할 수 있다.
- [0056] 본 출원의 일 실시상태에 따르면, 상기 화학식 2는 하기 화학식 2-1 또는 화학식 2-2로 표시될 수 있다.

[0057] [화학식 2-1]



[0058]

[0059] [화학식 2-2]



[0060]

[0061] 상기 화학식 2-1 및 2-2에 있어서,

[0062] R<sub>2</sub> 내지 R<sub>14</sub>는 화학식 2에서 정의한 바와 동일하다.

[0063] 본 출원의 일 실시상태에 따르면, 상기 L<sub>1</sub>은 상기 L의 정의와 동일할 수 있다.

[0064] 본 출원의 일 실시상태에 따르면, 상기 Z<sub>1</sub>은 상기 Z의 정의와 동일할 수 있다.

[0065] 본 출원의 일 실시상태에 따르면, 상기 L은 치환 또는 비치환된 C<sub>6</sub> 내지 C<sub>20</sub>의 단환 또는 다환의 아릴렌기; 또는 치환 또는 비치환된 C<sub>2</sub> 내지 C<sub>20</sub>의 단환 또는 다환의 N 함유 헤테로아릴렌기일 수 있다.

[0066] 본 출원의 일 실시상태에 따르면, 상기 Z는 치환 또는 비치환된 C<sub>6</sub> 내지 C<sub>20</sub>의 단환 또는 다환의 아릴기; 치환 또는 비치환된 C<sub>2</sub> 내지 C<sub>20</sub>의 단환 또는 다환의 헤테로아릴기; 및 -P(=O)RR'로 이루어진 군으로부터 선택되고,

[0067] 상기 R 및 R'은 서로 동일하거나 상이하며, 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 C<sub>6</sub> 내지 C<sub>20</sub>의 단환 또는 다환의 아릴기; 및 치환 또는 비치환된 C<sub>2</sub> 내지 C<sub>20</sub>의 단환 또는 다환의 헤테로아릴기로 이루어진 군으로부터 선택될 수 있다.

[0068] 본 출원의 일 실시상태에 따르면, 상기 L은 페닐렌기, 비페닐렌기, 나프틸렌기, 안트라세닐렌기, 페난트레닐렌기, 피리딜렌기, 피리미딜렌기, 트리아지닐렌기, 퀴놀리닐렌기, 이소퀴놀리닐렌기 및 퀴나졸리닐렌기로 이루어진 군으로부터 선택되고,

[0069] 상기 L이 치환되는 경우, 중수소, 할로젠기, -CN, C<sub>1</sub> 내지 C<sub>60</sub>의 직쇄 또는 분지쇄의 알킬기, C<sub>2</sub> 내지 C<sub>60</sub>의 직쇄 또는 분지쇄의 알케닐기, C<sub>2</sub> 내지 C<sub>60</sub>의 직쇄 또는 분지쇄의 알킬닐기, C<sub>3</sub> 내지 C<sub>60</sub>의 단환 또는 다환의 시클로알킬기, C<sub>2</sub> 내지 C<sub>60</sub>의 단환 또는 다환의 헤테로시클로알킬기, C<sub>6</sub> 내지 C<sub>60</sub>의 단환 또는 다환의 아릴기, 및 C<sub>2</sub> 내지 C<sub>60</sub>의 단환 또는 다환의 헤테로아릴기로 이루어진 군으로부터 선택되는 1 이상의 치환기로 치환될 수 있다.

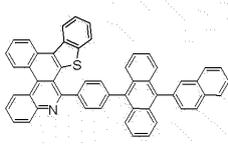
[0070] 본 출원의 일 실시상태에 따르면, 상기 Z는 페닐기, 비페닐기, 나프틸기, 안트라세닐기, 페난트레닐기, 트리페닐레닐기, 플루오레닐기, 피리딜기, 피리미딜기, 트리아지닐기, 피리도인다졸기, 피라졸로퀴나졸리닐기, 벤즈이미다졸릴기, 벤즈옥사졸릴기, 옥사디아졸릴기, 벤조티아졸릴기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 퀴나졸리닐기, 나프티리디닐기, 디벤조푸라닐기, 디벤조티오페닐기, 이미다조피리디닐기, 페난트롤리닐기, 및 디페닐포스포릴기

로 이루어진 군으로부터 선택되고,

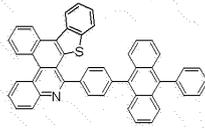
- [0071] 상기 Z가 치환되는 경우, 중수소, 할로젠기, -CN, 알킬기, 알케닐기, 알키닐기, 시클로알킬기, 헤테로시클로알킬기, 아릴기, 및 헤테로아릴기로 이루어진 군으로부터 선택되는 1 이상의 치환기로 치환될 수 있다.
- [0072] 본 출원의 일 실시상태에 따르면, 상기 R<sub>2</sub> 내지 R<sub>13</sub>은 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; 중수소; 치환 또는 비치환된 C<sub>6</sub> 내지 C<sub>20</sub>의 단환 또는 다환의 아릴기; 및 치환 또는 비치환된 C<sub>2</sub> 내지 C<sub>20</sub>의 단환 또는 다환의 헤테로아릴기로 이루어진 군으로부터 선택될 수 있다.
- [0073] 본 출원의 일 실시상태에 따르면, 상기 R<sub>2</sub> 내지 R<sub>13</sub>은 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소 또는 중수소이다.
- [0074] 본 출원의 일 실시상태에 따르면, 상기 m은 0 내지 3의 정수일 수 있다.
- [0075] 본 출원의 일 실시상태에 따르면, 상기 m은 0, 1, 2 또는 3의 정수일 수 있다.
- [0076] 본 출원의 일 실시상태에 따르면, 상기 m은 1 내지 3의 정수일 수 있다.
- [0077] 본 출원의 일 실시상태에 따르면, 상기 n은 1 또는 2의 정수일 수 있다.
- [0078] 본 출원의 일 실시상태에 따르면, 상기 s는 0 내지 2의 정수일 수 있다.
- [0079] 본 출원의 일 실시상태에 따르면, 상기 s는 0, 1 또는 2의 정수일 수 있다.
- [0080] 본 출원의 일 실시상태에 따르면, 상기 t는 1 또는 2의 정수일 수 있다.
- [0081] 본 출원의 일 실시상태에 따르면, 상기 화학식 1은 하기 그룹 1 및 2의 화합물들 중에서 선택될 수 있다.

[0082]

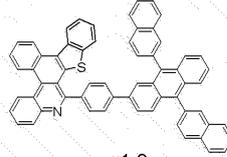
<그룹 1>



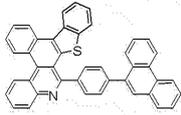
1-1



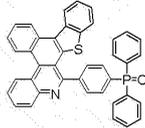
1-2



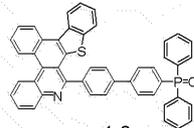
1-3



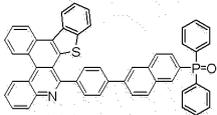
1-4



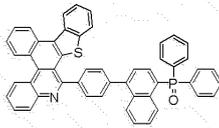
1-5



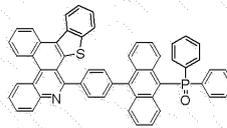
1-6



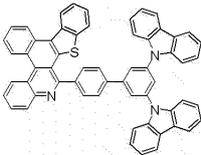
1-7



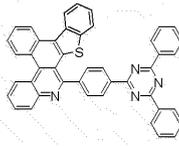
1-8



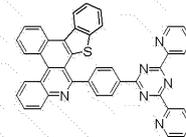
1-9



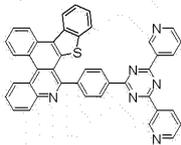
1-10



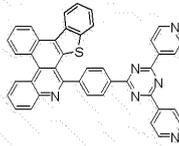
1-11



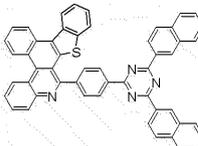
1-12



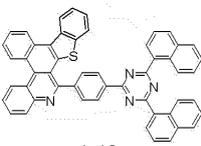
1-13



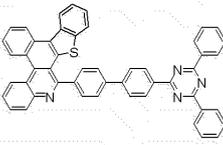
1-14



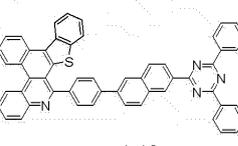
1-15



1-16

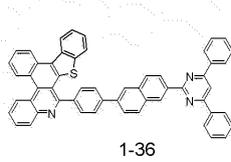
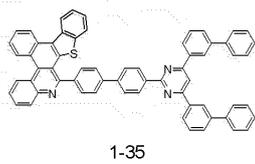
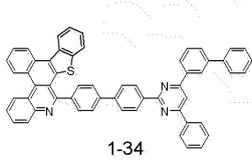
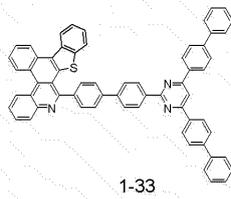
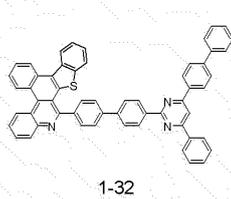
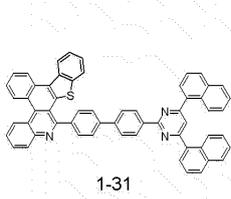
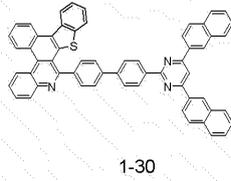
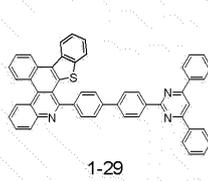
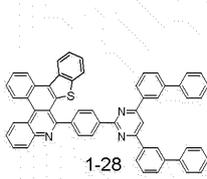
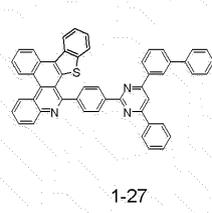
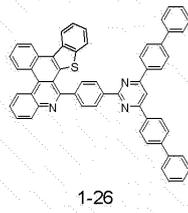
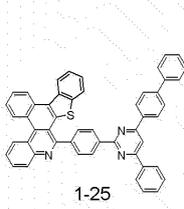
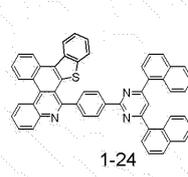
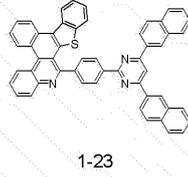
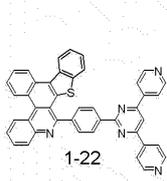
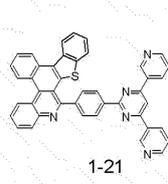
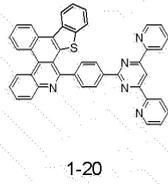
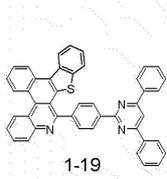


1-17

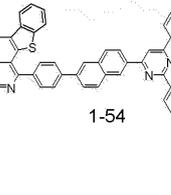
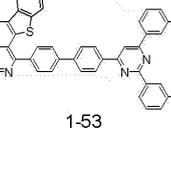
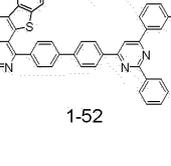
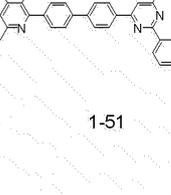
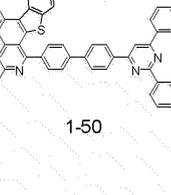
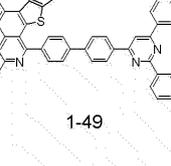
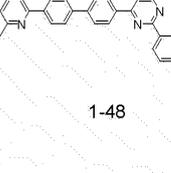
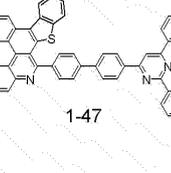
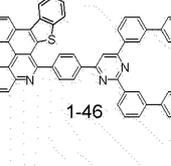
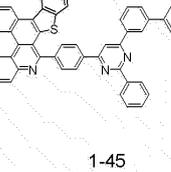
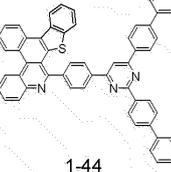
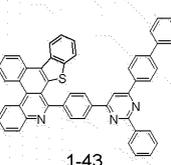
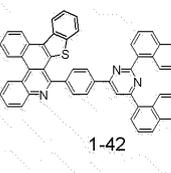
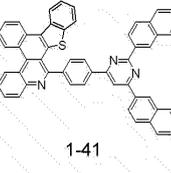
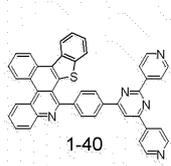
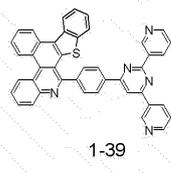
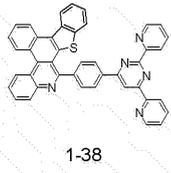
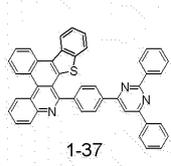


1-18

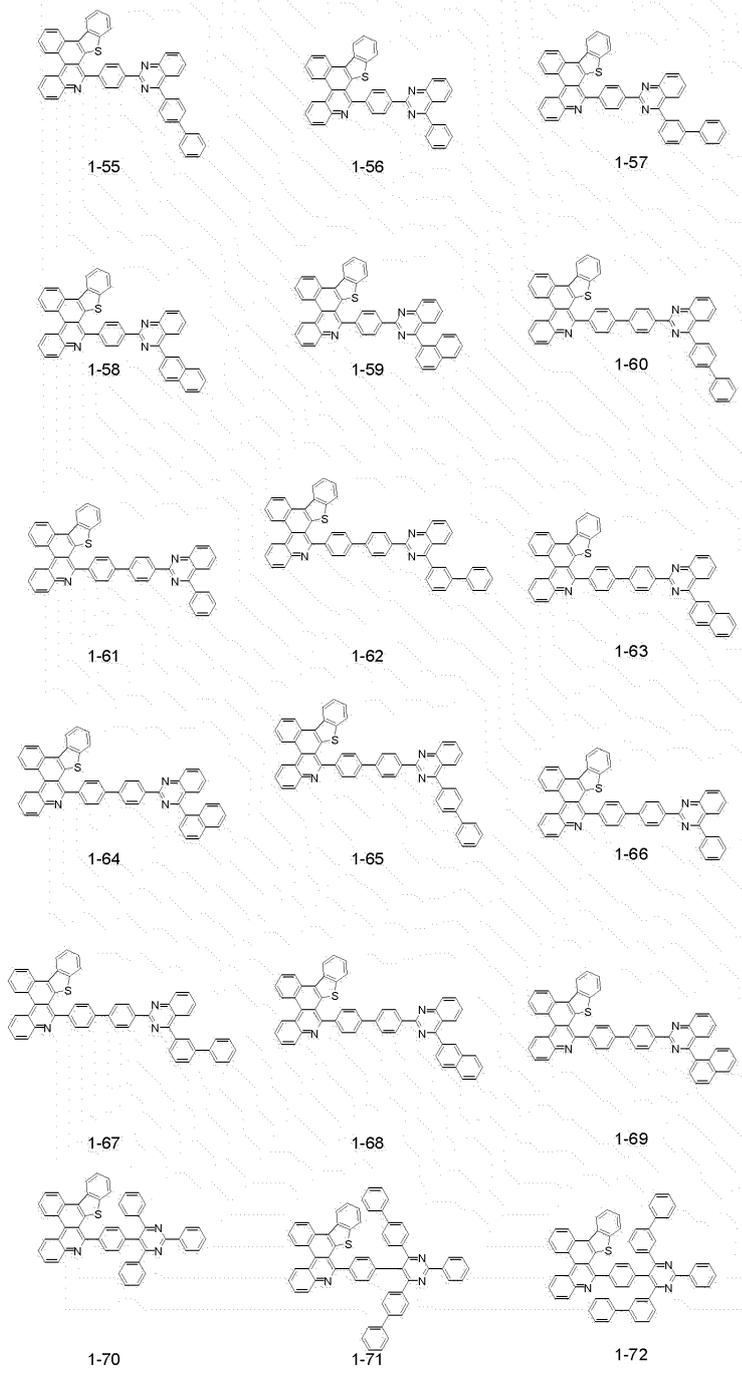
[0083]



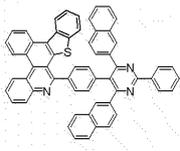
[0084]



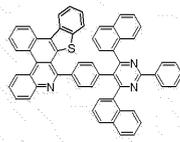
[0085]



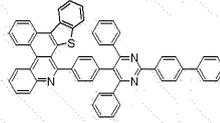
[0086]



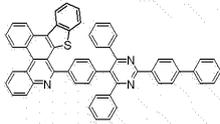
1-73



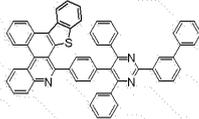
1-74



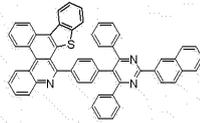
1-75



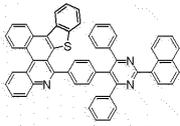
1-76



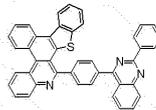
1-77



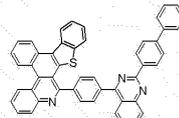
1-78



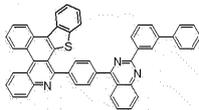
1-79



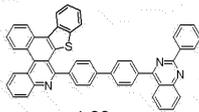
1-80



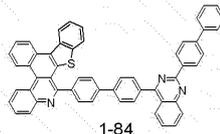
1-81



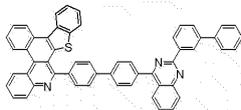
1-82



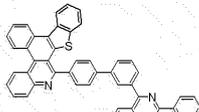
1-83



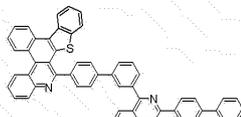
1-84



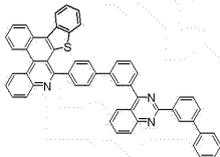
1-85



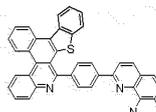
1-86



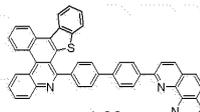
1-87



1-88

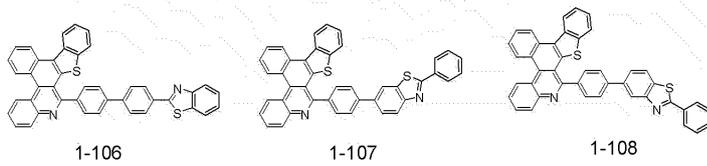
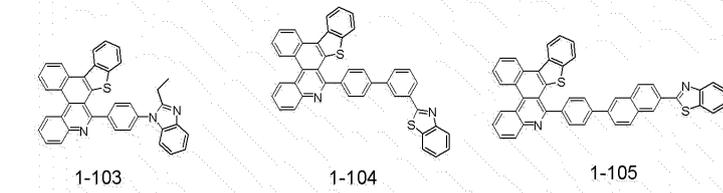
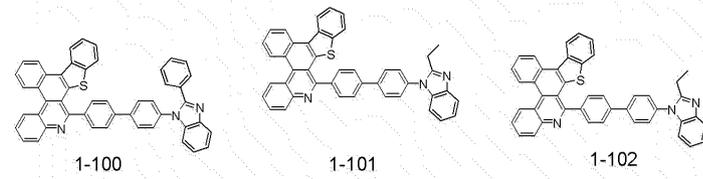
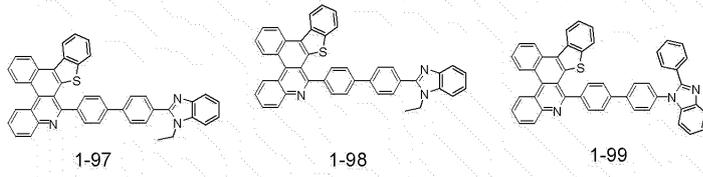
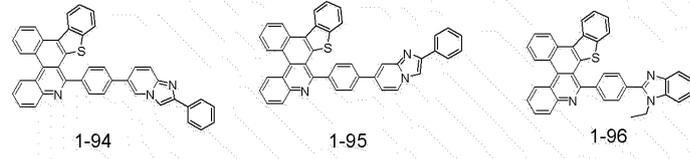
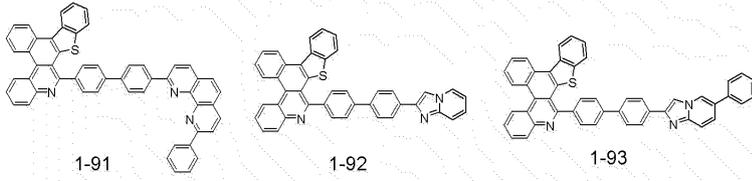


1-89

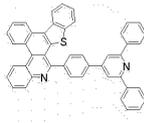


1-90

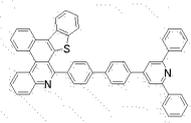
[0087]



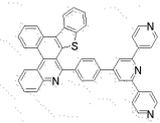
[0088]



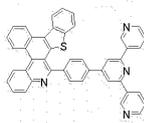
1-109



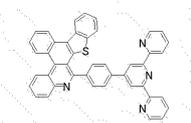
1-110



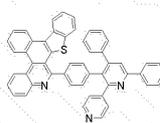
1-111



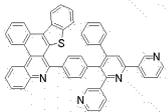
1-112



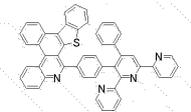
1-113



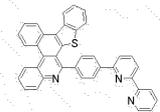
1-114



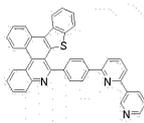
1-115



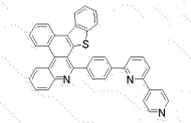
1-116



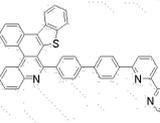
1-117



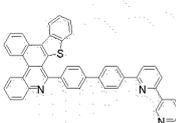
1-118



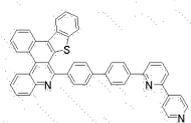
1-119



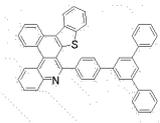
1-120



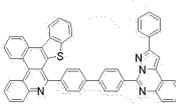
1-121



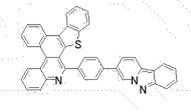
1-122



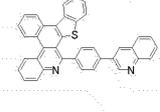
1-123



1-124

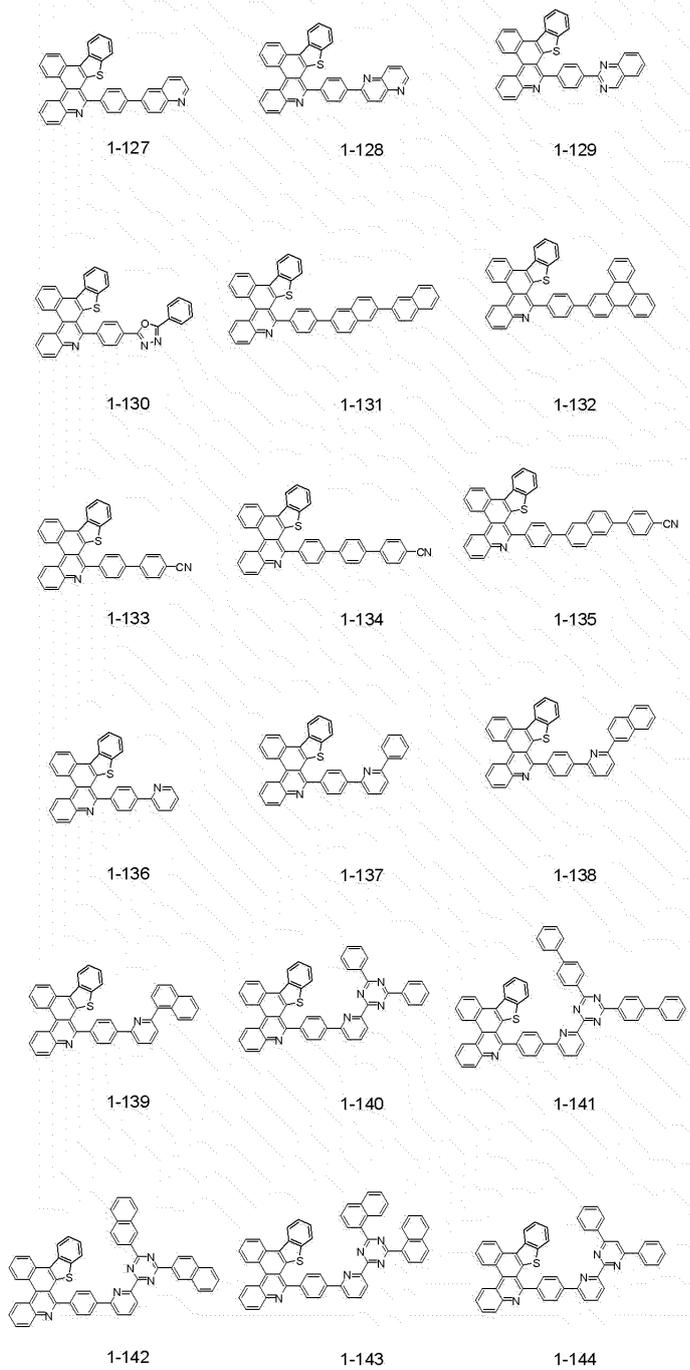


1-125

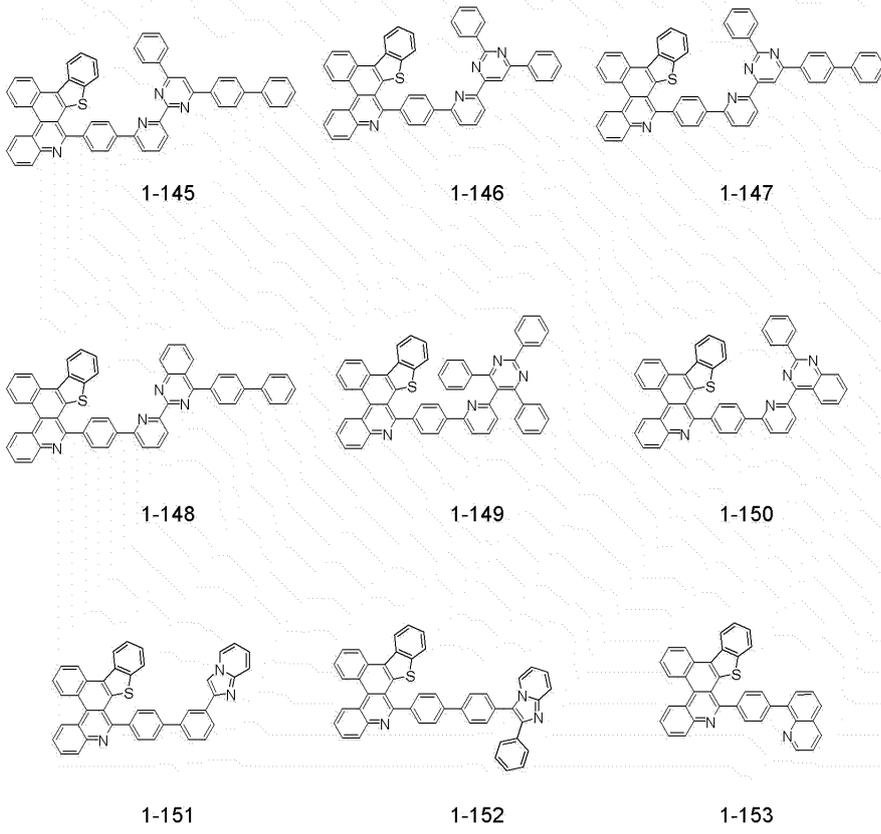


1-126

[0089]



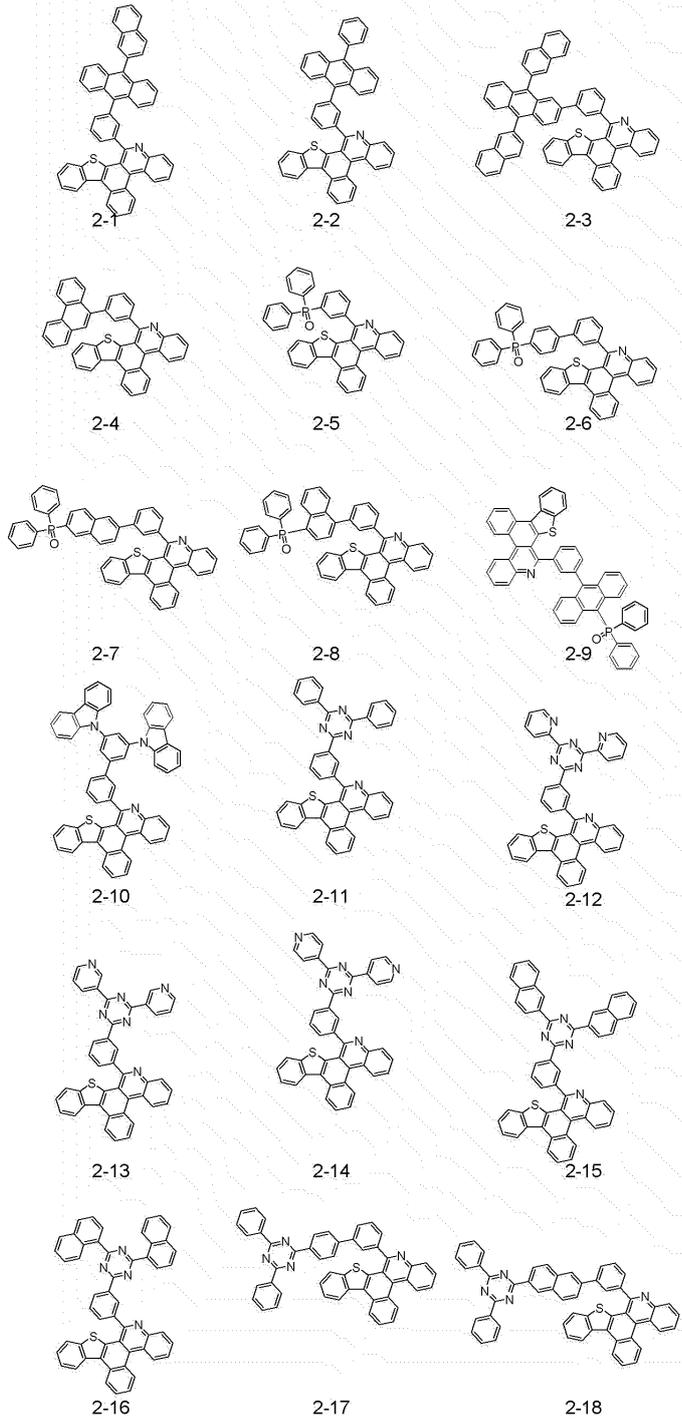
[0090]



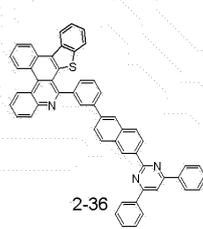
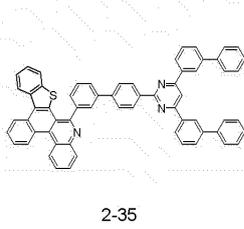
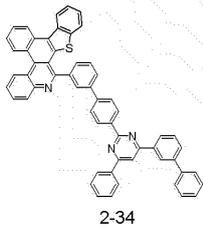
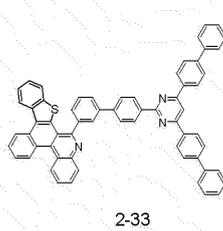
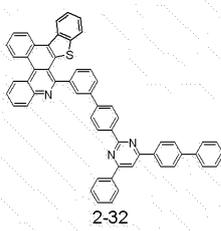
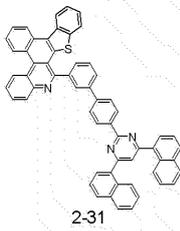
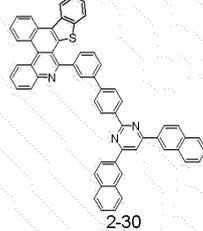
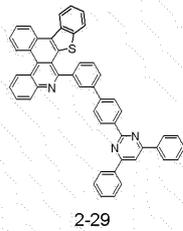
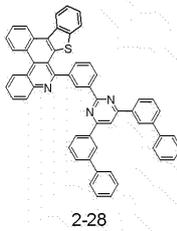
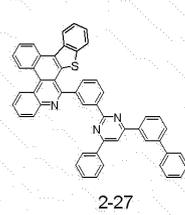
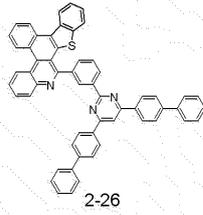
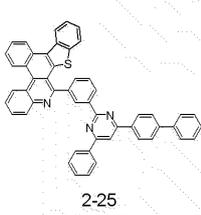
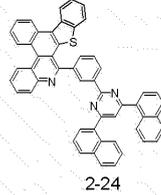
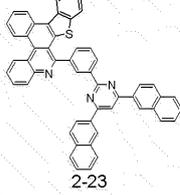
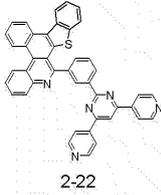
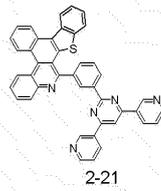
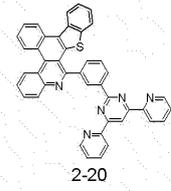
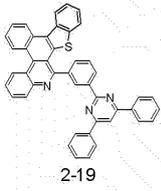
[0091]

[0092]

<그룹 2>



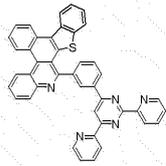
[0093]



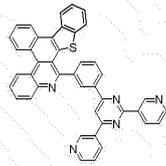
[0094]



2-37



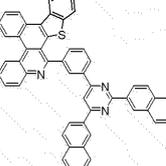
2-38



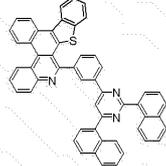
2-39



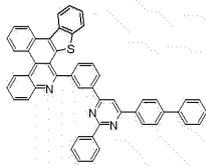
2-40



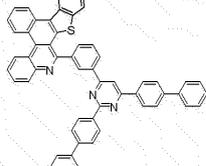
2-41



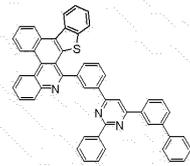
2-42



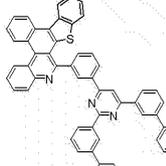
2-43



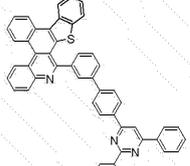
2-44



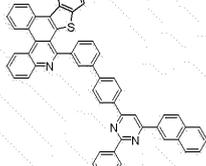
2-45



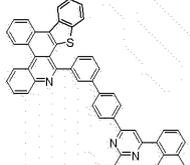
2-46



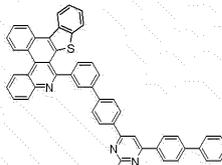
2-47



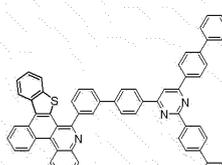
2-48



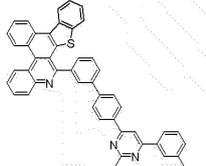
2-49



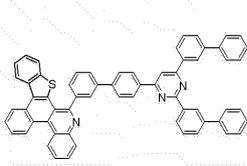
2-50



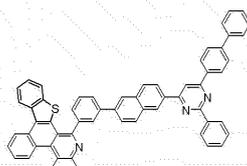
2-51



2-52

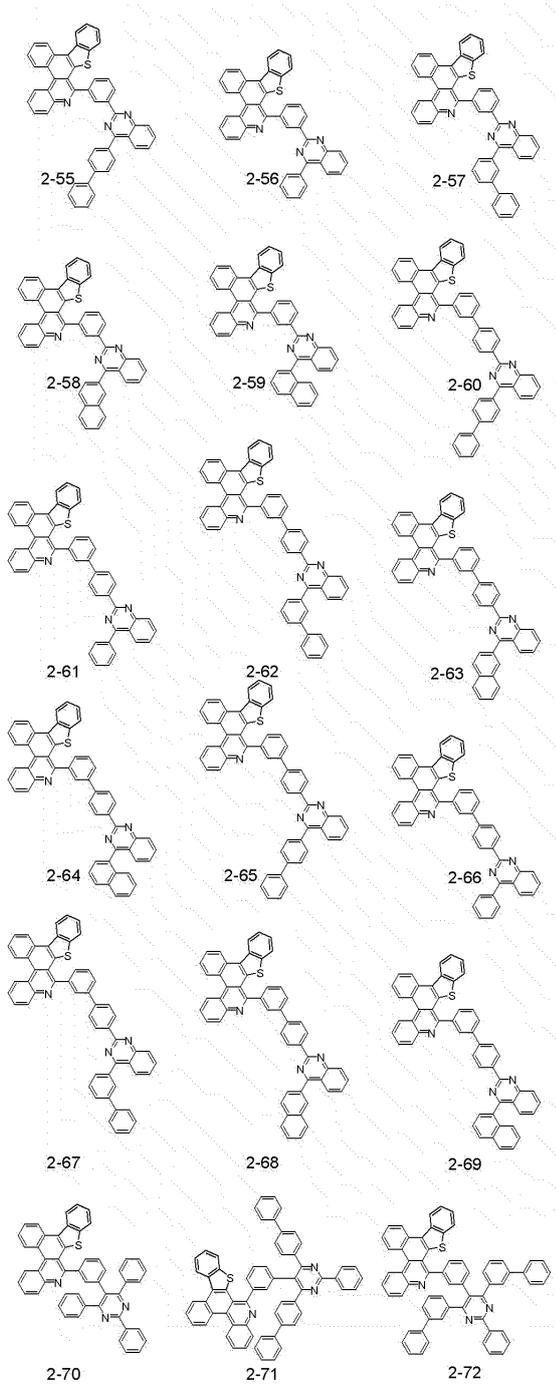


2-53

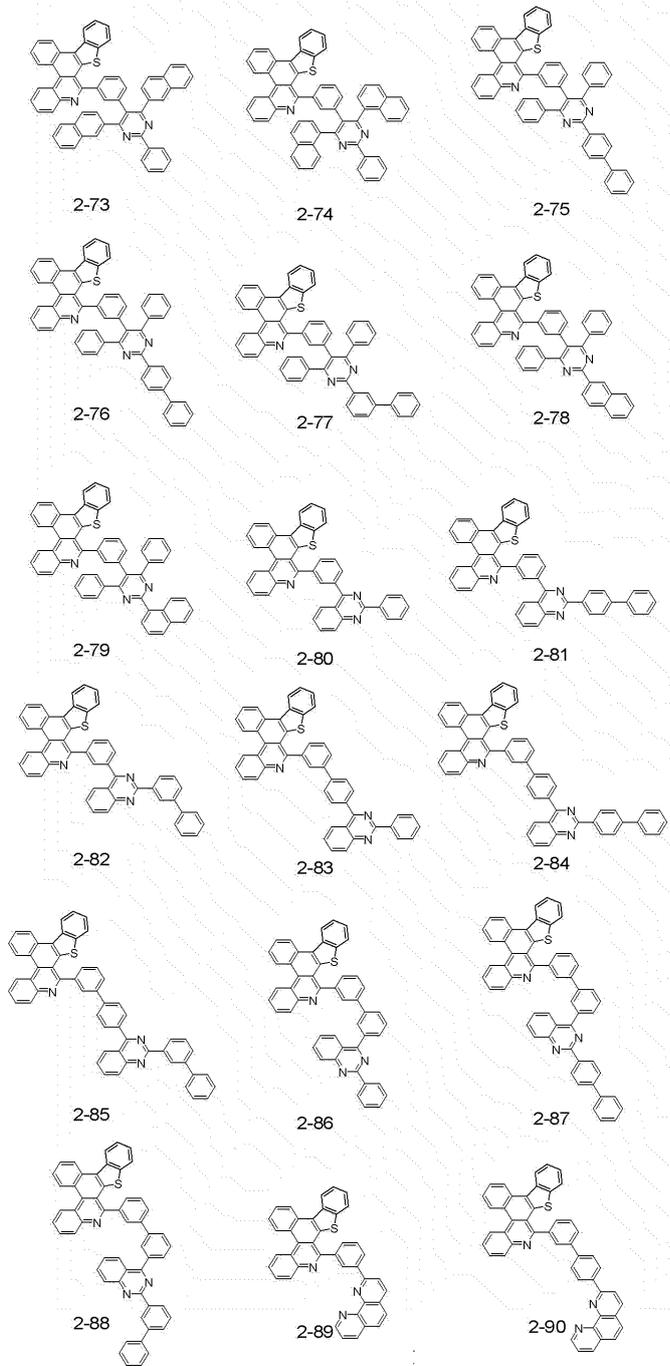


2-54

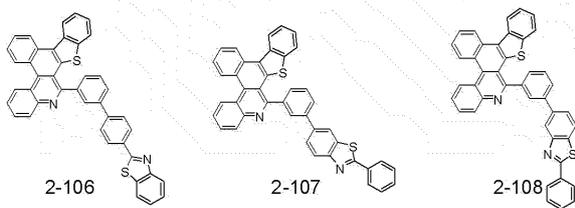
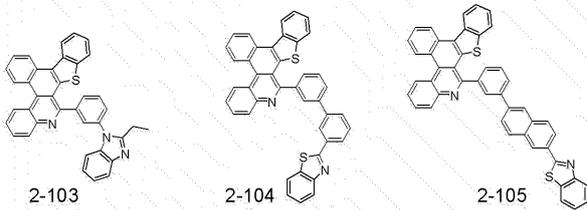
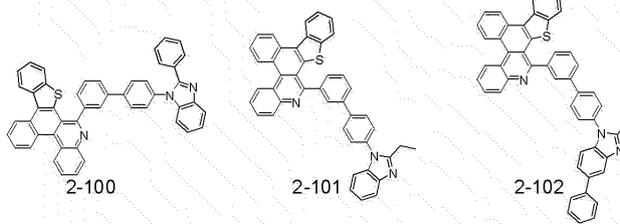
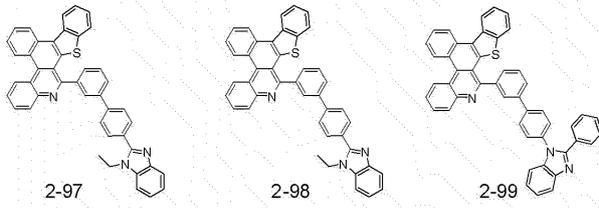
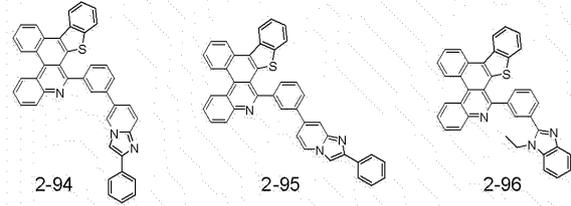
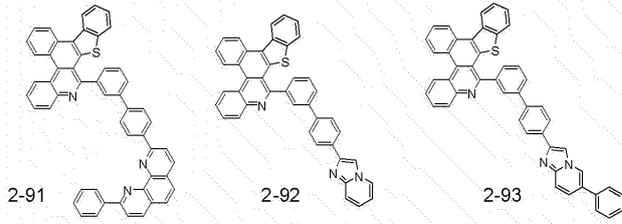
[0095]



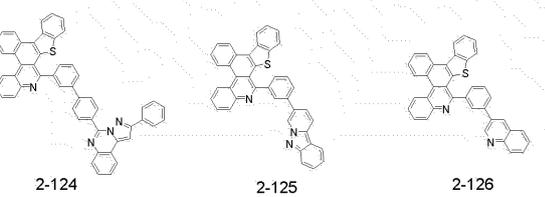
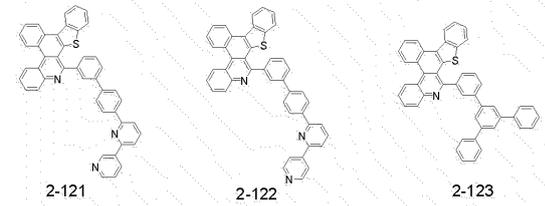
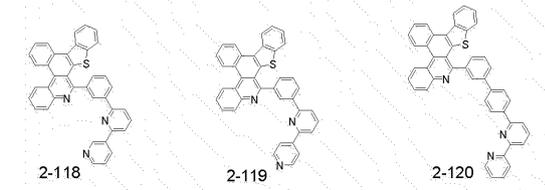
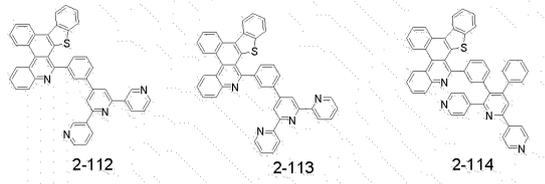
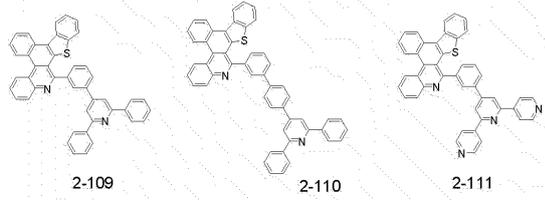
[0096]



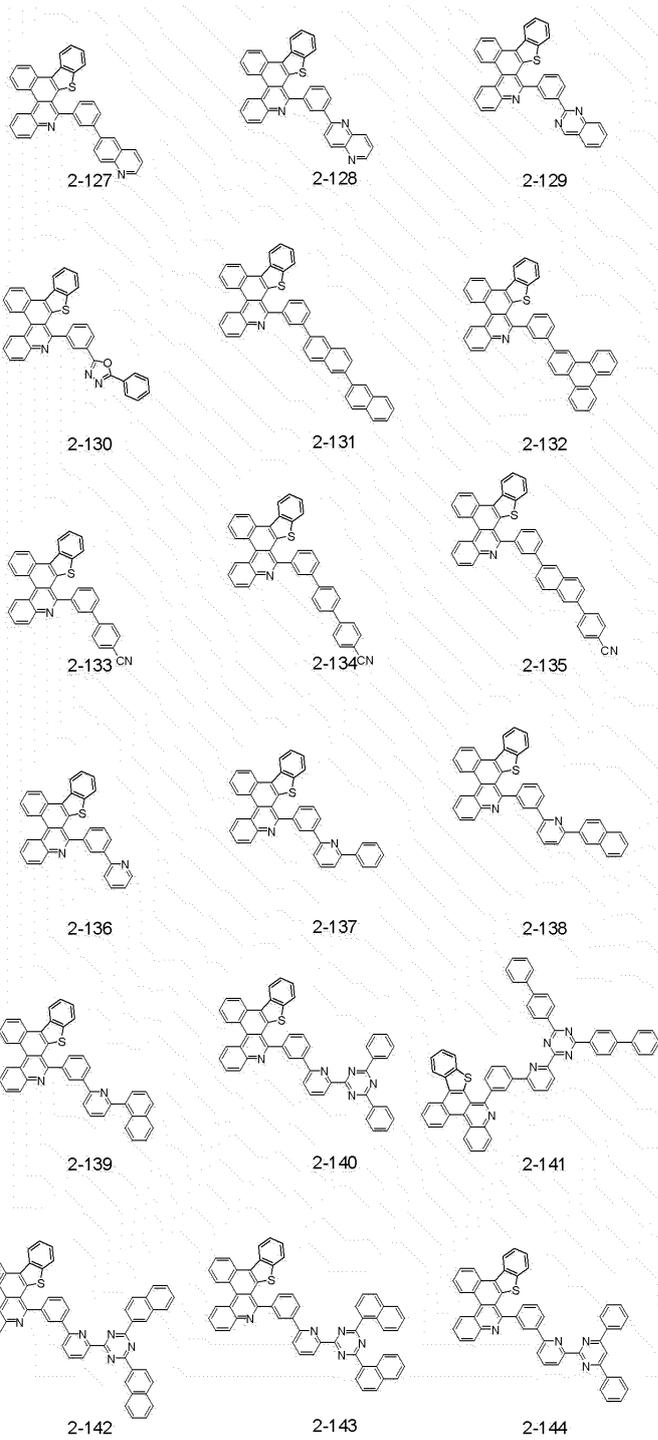
[0097]



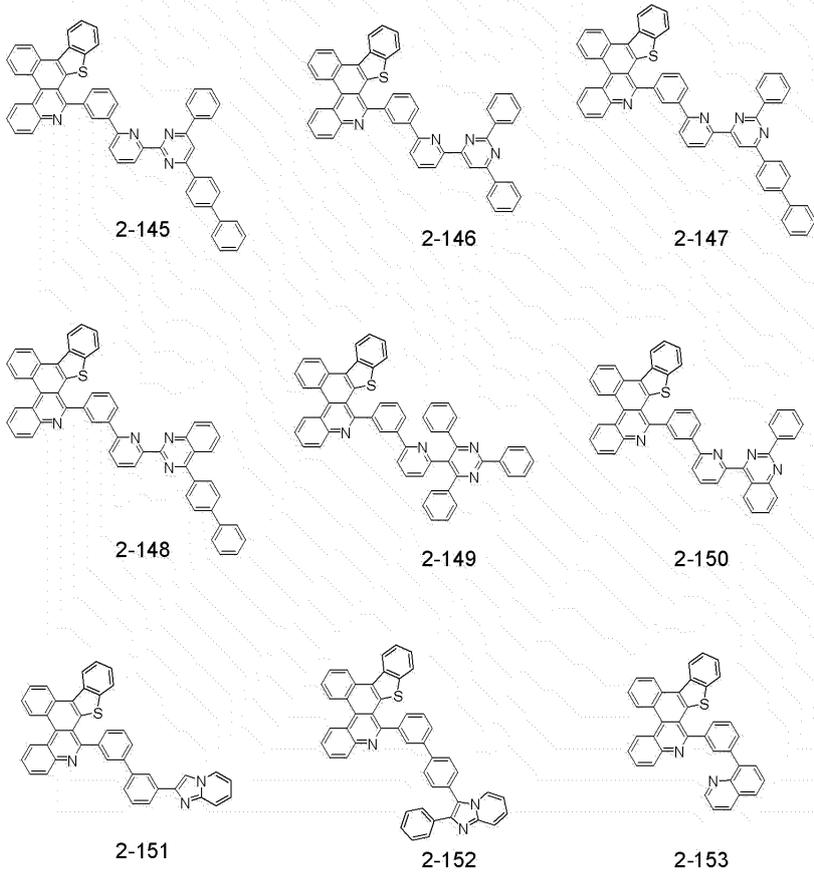
[0098]



[0099]



[0100]



[0101]

[0102]

전술한 화합물들은 후술하는 제조예를 기초로 제조될 수 있다. 후술하는 제조예들에서는 대표적인 예시들을 기재하지만, 필요에 따라, 치환기를 추가하거나 제외할 수 있으며, 치환기의 위치를 변경할 수 있다. 또한, 당 기술분야에 알려져 있는 기술을 기초로, 출발물질, 반응물질, 반응 조건 등을 변경할 수 있다.

[0103]

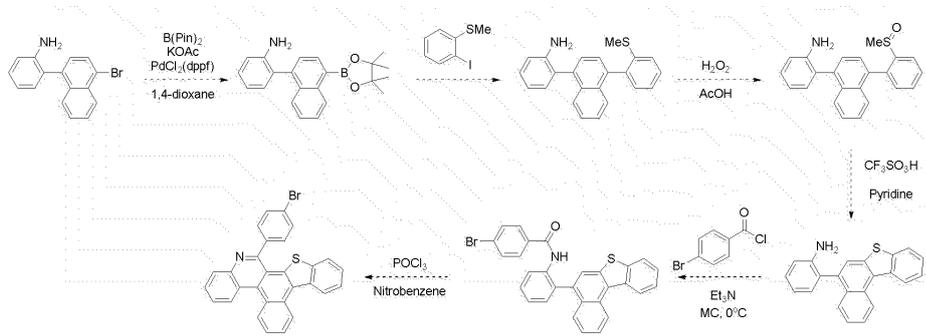
예컨대, 상기 화학식 2-1의 화합물은 하기 반응식 1과 같이 코어구조가 제조될 수 있다. 치환기는 당 기술분야에 알려져 있는 방법에 의하여 결합될 수 있으며, 치환기 위치나 치환기의 개수는 당 기술분야에 알려져 있는 기술에 따라 변경될 수 있다.

[0104]

하기 반응식 1에서 제조된 최종물질 중 -Br의 위치에 다른 치환기를 치환하여 상기 구체에 화합물과 같은 구조를 합성할 수 있다.

[0105]

[반응식 1]



[0106]

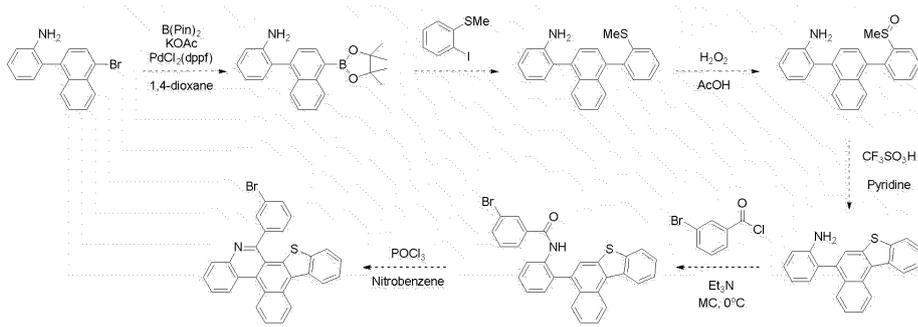
[0107]

또한, 상기 화학식 2-2의 화합물은 하기 반응식 2와 같이 코어구조가 제조될 수 있다. 치환기는 당 기술분야에 알려져 있는 방법에 의하여 결합될 수 있으며, 치환기 위치나 치환기의 개수는 당 기술분야에 알려져 있는 기술에 따라 변경될 수 있다.

[0108]

하기 반응식 2에서 제조된 최종물질 중 -Br의 위치에 다른 치환기를 치환하여 상기 구체에 화합물과 같은 구조를 합성할 수 있다.

[0109] [반응식 2]



[0110]

[0111] 구체적 제조 방법은 후술하는 제조예에서 더욱 상세히 설명한다.

[0112] 본 출원의 또 하나의 실시상태는 전술한 화학식 1의 화합물을 포함하는 유기 발광 소자를 제공한다. 구체적으로, 본 출원에 따른 유기 발광 소자는 양극, 음극 및 양극과 음극 사이에 구비된 1층 이상의 유기물층을 포함하고, 상기 유기물층 중 1층 이상은 상기 화학식 1의 화합물을 포함한다.

[0113] 도 1 내지 3에 본 출원의 실시상태들에 따른 유기 발광 소자의 전극과 유기물층의 적층 순서를 예시하였다. 그러나, 이들 도면에 의하여 본 출원의 범위가 한정될 것을 의도한 것은 아니며, 당 기술분야에 알려져 있는 유기 발광 소자의 구조가 본 출원에도 적용될 수 있다.

[0114] 도 1에 따르면, 기판(100) 상에 양극(200), 유기물층(300) 및 음극(400)이 순차적으로 적층된 유기 발광 소자가 도시된다. 그러나, 이와 같은 구조에만 한정되는 것은 아니고, 도 2와 같이, 기판 상에 음극, 유기물층 및 양극이 순차적으로 적층된 유기 발광 소자가 구현될 수도 있다.

[0115] 도 3은 유기물층이 다층인 경우를 예시한 것이다. 도 3에 따른 유기 발광 소자는 정공 주입층(301), 정공 수송층(302), 발광층(303), 정공 저지층(304), 전자 수송층(305) 및 전자 주입층(306)을 포함한다. 그러나, 이와 같은 적층구조에 의하여 본 출원의 범위가 한정되는 것은 아니며, 필요에 따라 발광층을 제외한 나머지 층은 생략될 수도 있고, 필요한 다른 기능층이 더 추가될 수 있다.

[0116] 또한, 본 출원의 일 실시상태에 따른 유기 발광 소자는, 양극, 음극 및 양극과 음극 사이에 구비된 2 이상의 스택을 포함하고, 상기 2 이상의 스택은 각각 독립적으로 발광층을 포함하며, 상기 2 이상의 스택 간의 사이에는 전하 생성층을 포함하고, 상기 전하 생성층은 상기 화학식 1로 표시되는 헤테로고리 화합물을 포함한다.

[0117] 또한, 본 출원의 일 실시상태에 따른 유기 발광 소자는, 양극, 상기 양극 상에 구비되고 제1 발광층을 포함하는 제1 스택, 상기 제1 스택 상에 구비되는 전하 생성층, 상기 전하 생성층 상에 구비되고 제2 발광층을 포함하는 제2 스택, 및 상기 제2 스택 상에 구비되는 음극을 포함한다. 이 때, 상기 전하 생성층은 상기 화학식 1로 표시되는 헤테로고리 화합물을 포함할 수 있다. 또한, 상기 제1 스택 및 제2 스택은 각각 독립적으로 전술한 정공 주입층, 정공 수송층, 정공 저지층, 전자 수송층, 전자 주입층 등을 1종 이상 추가로 포함할 수 있다.

[0118] 상기 전하 생성층은 N-타입 전하 생성층일 수 있고, 상기 전하 생성층은 화학식 1로 표시되는 헤테로고리 화합물 이외에 당 기술분야에 알려진 도펀트를 추가로 포함할 수 있다.

[0119] 본 출원의 일 실시상태에 따른 유기 발광 소자로서, 2-스택 텐덤 구조의 유기 발광 소자를 하기 도 4에 개략적으로 나타내었다.

[0120] 이때, 상기 도 4에 기재된 제 1 전자저지층, 제 1 정공저지층 및 제 2 정공저지층 등은 경우에 따라 생략될 수 있다

[0121] 본 출원에 따른 유기 발광 소자는 유기물층 중 1층 이상에 상기 화학식 1의 화합물을 포함하는 것을 제외하고는 당 기술분야에 알려져 있는 재료와 방법으로 제조될 수 있다.

[0122] 상기 화학식 1의 화합물은 단독으로 유기 발광 소자의 유기물층 중 1층 이상을 구성할 수 있다. 그러나, 필요에 따라 다른 물질과 혼합하여 유기물층을 구성할 수도 있다.

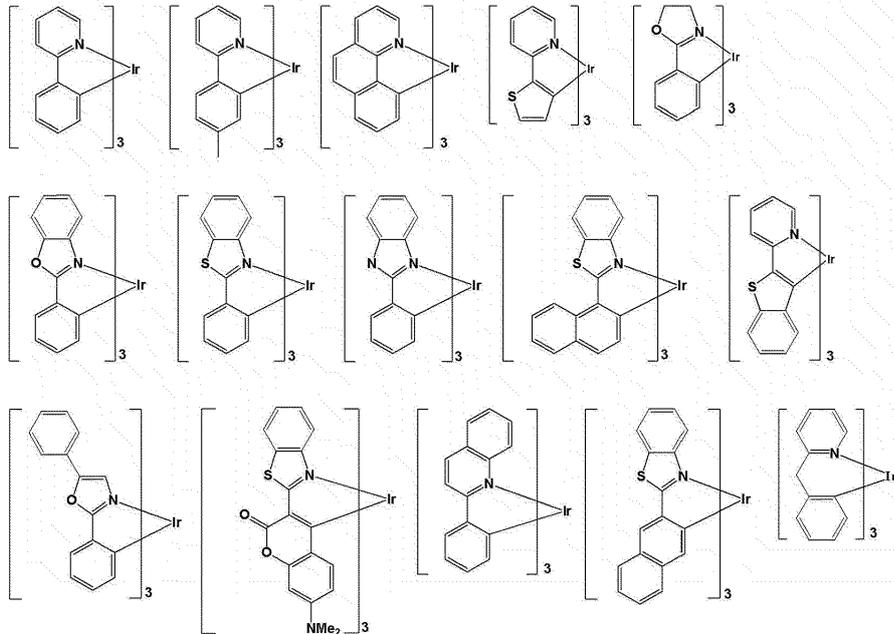
[0123] 상기 화학식 1의 화합물은 유기 발광 소자에서 발광층 또는 공통층의 재료로 사용될 수 있다. 일반적으로 유기 발광 소자에서 전류와 직접적으로 관련된 층을 공통층이라 칭하고, 발광층 이외에 전자 또는 정공의 주입,

저지, 수송 등의 역할을 하는 모든 층은 공통층으로 해석된다.

- [0124] 즉, 상기 화학식 1의 화합물은 유기 발광 소자에서 정공 주입 재료, 정공 수송 재료, 발광재료, 정공 저지 재료, 전자 수송 재료, 전자 주입 재료 등으로 사용될 수 있다.
- [0125] 예컨대, 본 출원의 일 실시상태에 따른 화합물은 유기 발광 소자의 전자 주입층, 전자 수송층 또는 전자 주입과 수송을 동시에 하는 층의 재료로서 사용될 수 있다.
- [0126] 또한, 본 출원의 일 실시상태에 따른 화합물은 유기 발광 소자의 발광층 재료로서 사용될 수 있다. 구체적으로, 상기 화합물은 단독으로 발광 재료로 사용될 수도 있고, 발광층의 호스트 재료 또는 도펀트 재료로서 사용될 수 있다.
- [0127] 또한, 본 출원의 일 실시상태에 따른 화합물은 유기 발광 소자의 인광 호스트 재료로서 사용될 수 있다. 이 경우, 본 출원의 일 실시상태에 따른 화합물은 인광 도펀트와 함께 포함된다.
- [0128] 또한, 본 출원의 일 실시상태에 따른 화합물은 유기 발광 소자의 정공 저지층의 재료로서 사용될 수 있다.
- [0129] 본 출원에 따른 유기 발광 소자에 있어서, 상기 화학식 1의 화합물 이외의 재료를 하기에 예시하지만, 이들은 예시를 위한 것일 뿐 본 출원의 범위를 한정하기 위한 것은 아니며, 당 기술분야에 공지된 재료들로 대체될 수 있다.
- [0130] 양극 재료로는 비교적 일함수가 큰 재료들을 이용할 수 있으며, 투명 전도성 산화물, 금속 또는 전도성 고분자 등을 사용할 수 있다.
- [0131] 음극 재료로는 비교적 일함수가 낮은 재료들을 이용할 수 있으며, 금속, 금속 산화물 또는 전도성 고분자 등을 사용할 수 있다.
- [0132] 정공 주입 재료로는 공지된 정공 주입 재료를 이용할 수도 있는데, 예를 들면, 미국 특허 제4,356,429호에 개시된 구리프탈로시아닌 등의 프탈로시아닌 화합물 또는 문헌[Advanced Material, 6, p.677 (1994)]에 기재되어 있는 스타버스트형 아민 유도체류, 예컨대 TCTA, m-MTDATA, m-MTDAPB, 용해성이 있는 전도성 고분자인 Pani/DBSA(Polyaniline/Dodecylbenzenesulfonic acid: 폴리아닐린/도데실벤젠술포산) 또는 PEDOT/PSS(Poly(3,4-ethylenedioxythiophene)/Poly(4-styrenesulfonate):폴리(3,4-에틸렌디옥시티오펜)/폴리(4-스티렌술포네이트)), Pani/CSA(Polyaniline/Camphor sulfonic acid:폴리아닐린/캄퍼술포산) 또는 PANI/PSS(Polyaniline/Poly(4-styrene-sulfonate):폴리아닐린/폴리(4-스티렌술포네이트)) 등을 사용할 수 있다.
- [0133] 정공 수송 재료로는 피라졸린 유도체, 아릴아민계 유도체, 스티벤 유도체, 트리페닐디아민 유도체 등이 사용될 수 있으며, 저분자 또는 고분자 재료가 사용될 수도 있다.
- [0134] 전자 수송 재료로는 옥사디아졸 유도체, 안트라퀴노디메탄 및 이의 유도체, 벤조퀴논 및 이의 유도체, 나프토퀴논 및 이의 유도체, 안트라퀴논 및 이의 유도체, 테트라시아노안트라퀴노디메탄 및 이의 유도체, 플루오레논 유도체, 디페닐디시아노에틸렌 및 이의 유도체, 디페노퀴논 유도체, 8-히드록시퀴놀린 및 이의 유도체의 금속 착체 등이 사용될 수 있으며, 저분자 물질 뿐만 아니라 고분자 물질이 사용될 수도 있다.
- [0135] 전자 주입 재료로는 예를 들어, LiF가 당업계 대표적으로 사용되나, 본 출원이 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0136] 발광 재료로는 적색, 녹색 또는 청색 발광재료가 사용될 수 있으며, 필요한 경우 2 이상의 발광 재료를 혼합하여 사용할 수 있다. 또한, 발광 재료로서 형광 재료를 사용할 수도 있으나, 인광 재료를 사용할 수도 있다. 발광 재료로는 단독으로서 양극과 음극으로부터 각각 주입된 정공과 전자를 결합하여 발광시키는 재료가 사용될 수도 있으나, 호스트 재료와 도펀트 재료가 함께 발광에 관여하는 재료들이 사용될 수도 있다.
- [0137] 본 출원에 따른 화합물이 인광 호스트 재료로서 사용되는 경우, 함께 사용되는 인광 도펀트 재료로는 당 기술분야에 알려져 있는 것들을 사용할 수 있다.
- [0138] 예컨대, LL'MX, LL'L"M, LMXX', L<sub>2</sub>MX 및 L<sub>3</sub>M로 표시되는 인광 도펀트 재료를 사용할 수 있으나, 이들 예에 의하여 본 출원의 범위가 한정되는 것은 아니다.
- [0139] 여기서, L, L', L", X 및 X'는 서로 상이한 2차 배위자이고, M은 8 면상 착체를 형성하는 금속이다.
- [0140] M은 이리듐, 백금, 오스뮴 등이 될 수 있다.

[0141] L은  $sp^2$  탄소 및 헤테로 원자에 의하여 M에 배위되는 음이온성 2좌 배위자이고, X는 전자 또는 정공을 트랩하는 기능을 할 수 있다. L의 비한정적인 예로는 2-(1-나프틸)벤즈옥사졸, (2-페닐벤즈옥사졸), (2-페닐벤조티아졸), (7,8-벤조퀴놀린), (티에닐피리진), 페닐피리딘, 벤조티에닐피리진, 3-메톡시-2-페닐피리딘, 티에닐피리진, 톨릴피리딘 등이 있다. X의 비한정적인 예로는 아세틸아세토네이트(acac), 헥사플루오로아세틸아세토네이트, 살리실리덴, 피콜리네이트, 8-히드록시퀴놀리네이트 등이 있다.

[0142] 더욱 구체적인 예를 하기에 표시하나, 이들 예로만 한정되는 것은 아니다.

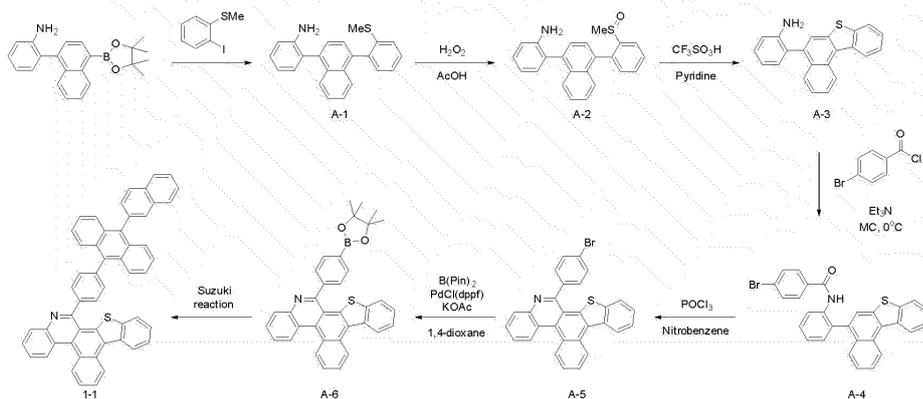


[0143]

[0144] 이하에서, 실시예를 통하여 본 명세서를 더욱 상세하게 설명하지만, 이들은 본 출원을 예시하기 위한 것일 뿐, 본 출원 범위를 한정하기 위한 것은 아니다.

[0145] <실시예>

[0146] <제조예 1> 화합물 1-1의 제조



[0147]

[0148] 화합물 A-1의 제조

[0149] 플라스크에 2-(4-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)naphthalen-1-yl)aniline 100.0g(289.65mmol, 1eq.), 1,4-dioxane/H<sub>2</sub>O=5:1 (1,000mL/200mL) 비율로 넣고, (2-iodophenyl)(methyl)sulfane 72.44g(289.65mmol, 1eq.), Pd(PPh<sub>3</sub>)<sub>4</sub> 14.48g(16.74mmol, 0.05eq.), K<sub>3</sub>PO<sub>4</sub> 184.5g(868.95mmol, 3eq.) 을 넣었다. 100℃에서 6시간 교반하였다. 반응이 종결되면 온도를 상온으로 낮춘 후, H<sub>2</sub>O, EA를 넣고 교반하였다. 추출한 유기층을 MgSO<sub>4</sub>로 건조한 뒤, 여과, 농축 한 후 생성된 유기물을 Column 분리하여 A-1을 얻었다

(87g, 88%).

[0150] **화합물 A-2의 제조**

[0151] 플라스크에 A-1 87g(254.7mmol, 1eq)을 전부 녹이고 과산화수소를 아세트산에 용해시킨 것을 적가한 후 상온에서 6시간동안 교반하였다. 반응이 종결되어 아세트산을 제거한 후 Column 분리하여 A-2를 얻었다(89g, 98%).

[0152] **화합물 A-3의 제조**

[0153] 플라스크에 A-2 89g(249.6mmol, 1eq)과 CF<sub>3</sub>SO<sub>3</sub>H을 넣고 상온에서 24시간 교반한 뒤 물과 피리딘을 (10:1)을 천천히 적가한 뒤 교반하였다. 반응이 종결되면 H<sub>2</sub>O, MC를 넣고 교반하였다. 추출한 유기층을 MgSO<sub>4</sub>로 건조한 뒤, 여과, 농축 한 후 생성된 유기물을 Column 분리하여 A-3을 얻었다(77.2g, 95%).

[0154] **화합물 A-4의 제조**

[0155] 플라스크에 A-3 77.2g(237.2mmol, 1eq)을 넣고 MC에 전부 녹인 뒤 TEA 19mL(237.2mmol, 1eq)를 넣었다. 실온에서 0℃로 온도를 낮춘 뒤 4-Bromobenzoyl chloride 52g(237.2mmol, 1eq)를 MC에 녹여 천천히 적가하였다. 반응이 종결되면 H<sub>2</sub>O, MC를 넣고 교반하였다. 추출한 유기층을 MgSO<sub>4</sub>로 건조한 뒤, 여과, 농축 한 후 생성된 유기물을 EA로 씻어준 뒤 A-4을 얻었다(114.6g, 95%).

[0156] **화합물 A-5의 제조**

[0157] 플라스크에 A-4 114.6g(225.4mmol, 1eq)을 Nitrobenzene에 전부 녹인 뒤 POCl<sub>3</sub> 34mL(225.4mmol, 1eq)를 천천히 적가하였다. 150℃에서 3시간동안 교반하였다. 반응이 종결되면 H<sub>2</sub>O, MC를 넣고 교반하였다. 추출한 유기층을 MgSO<sub>4</sub>로 건조한 뒤, 여과, 농축 한 후 생성된 유기물을 EA로 씻어준 뒤 A-5을 얻었다(100.6g, 91%).

[0158] **화합물 A-6의 제조**

[0159] A-5 100.6g(205.1mmol, 1eq)을 1,4-dioxane에 녹인 후, Bis(pinacolato)diborone 62.5g(246.1mmol, 1.2eq), Pd(dppf)Cl<sub>2</sub> 7.5g(10.26mmol, 0.05eq), KOAc 60.4g(615.4mmol, 3eq)를 상온에서 가한 후, 80℃에서 6시간동안 교반하였다. 반응이 종결되면 H<sub>2</sub>O, MC를 넣고 교반하였다. 추출한 유기층을 MgSO<sub>4</sub>로 건조한 뒤, 여과, 농축 한 후 생성된 유기물을 Hexane으로 씻어준 뒤 A-6을 얻었다(94.8g, 86%).

[0160] **화합물 1-1의 제조**

[0161] 플라스크에 A-6 10.0g(18.6mmol, 1eq.), 1,4-dioxane/H<sub>2</sub>O=5:1 (100mL/20mL) 비율로 넣고, 9-bromo-10-(naphthalen-2-yl)anthracene 7.13g(18.6mmol, 1eq.), Pd(PPh<sub>3</sub>)<sub>4</sub> 1.07g(0.93mmol, 0.05eq.), K<sub>3</sub>PO<sub>4</sub> 11.8g(55.8mmol, 3eq.)을 넣었다. 100℃에서 3시간 교반하였다. 반응이 종결되면 온도를 상온으로 낮춘 후, H<sub>2</sub>O, MC를 넣고 교반하였다. 추출한 유기층을 MgSO<sub>4</sub>로 건조한 뒤, 여과, 농축한 후 생성된 유기물을 Column 분리하여 1-1을 얻었다 (10.2g, 77%).

[0162] **<제조예 2> 화합물 1-3의 제조**

[0163] 화합물 1-1의 제조방법 중 reagent를 2-bromo-9,10-di(naphthalen-2-yl)anthracene으로 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 제조하였다(88%).

[0164] **<제조예 3> 화합물 1-5의 제조**

[0165] 화합물 1-1의 제조방법 중 reagent를 diphenylphosphinic bromide으로 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 제조하였다(73%).

[0166] **<제조예 4> 화합물 1-7의 제조**

[0167] 화합물 1-1의 제조방법 중 reagent를 (6-bromonaphthalen-2-yl)diphenylphosphine oxide으로 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 제조하였다(55%).

[0168] **<제조예 5> 화합물 1-10의 제조**

[0169] 화합물 1-1의 제조방법 중 reagent를 9,9'-(5-bromo-1,3-phenylene)bis(9H-carbazole)으로 사용한 것을 제외하

고는 동일한 방법으로 제조하였다(76%).

[0170] <제조예 6> 화합물 1-11 제조

[0171] 화합물 1-1의 제조방법 중 reagent를 2-chloro-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine으로 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 제조하였다(49%).

[0172] <제조예 7> 화합물 1-37의 제조

[0173] 화합물 1-1의 제조방법 중 reagent를 4-bromo-2,6-diphenylpyrimidine으로 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 제조하였다(66%).

[0174] <제조예 8> 화합물 1-43의 제조

[0175] 화합물 1-1의 제조방법 중 reagent를 4-([1,1'-biphenyl]-4-yl)-6-bromo-2-phenylpyrimidine으로 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 제조하였다(88%).

[0176] <제조예 9> 화합물 1-56의 제조

[0177] 화합물 1-1의 제조방법 중 reagent를 2-bromo-4-phenylquinazoline으로 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 제조하였다(82%).

[0178] <제조예 10> 화합물 1-89의 제조

[0179] 화합물 1-1의 제조방법 중 reagent를 2-bromo-1,10-phenanthroline으로 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 제조하였다(88%).

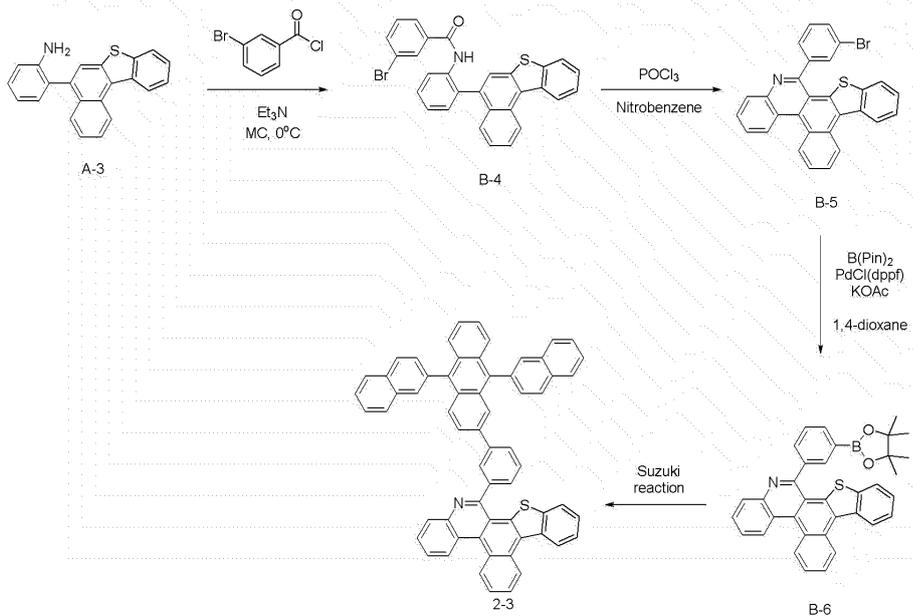
[0180] <제조예 11> 화합물 1-126의 제조

[0181] 화합물 1-1의 제조방법 중 reagent를 2-bromoquinoline으로 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 제조하였다(85%).

[0182] <제조예 12> 화합물 1-147의 제조

[0183] 화합물 1-1의 제조방법 중 reagent를 4-([1,1'-biphenyl]-4-yl)-6-(6-bromopyridin-2-yl)-2-phenylpyrimidine으로 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 제조하였다(88%).

[0184] <제조예 13> 화합물 2-3의 제조



[0185]

[0186] 화합물 B-4의 제조

[0187] 플라스크에 A-3 77.2g(237.2mmol, 1eq)을 넣고 MC에 전부 녹인 뒤 TEA 19mL(237.2mmol, 1eq)를 넣었다. 실온에서 0°C로 온도를 낮춘 뒤 3-Bromobenzoyl chloride 52g(237.2mmol, 1eq)를 MC에 녹여 천천히 적가하였다. 반응

이 종결되면 H<sub>2</sub>O, MC를 넣고 교반한다. 추출한 유기층을 MgSO<sub>4</sub>로 건조한 뒤, 여과, 농축한 후 생성된 유기물을 EA로 씻어준 뒤 A-4을 얻었다(118.2g, 98%).

[0188] **화합물 B-5의 제조**

[0189] 플라스크에 B-4 114.6g(225.4mmol, 1eq)을 Nitrobenzene에 전부 녹인 뒤 POCl<sub>3</sub> 34mL(225.4mmol, 1eq)를 천천히 적가하였다. 150℃에서 3시간동안 교반하였다. 반응이 종결되면 H<sub>2</sub>O, MC를 넣고 교반하였다. 추출한 유기층을 MgSO<sub>4</sub>로 건조한 뒤, 여과, 농축한 후 생성된 유기물을 EA로 씻어준 뒤 A-5을 얻었다(105g, 95%).

[0190] **화합물 B-6의 제조**

[0191] B-5 100.6g(205.1mmol, 1eq)을 1,4-dioxane에 녹인 후, Bis(pinacolato)diborone 62.5g(246.1mmol, 1.2eq), Pd(dppf)Cl<sub>2</sub> 7.5g(10.26mmol, 0.05eq), KOAc 60.4g(615.4mmol, 3eq)를 상온에서 가한 후, 80℃에서 6시간동안 교반하였다. 반응이 종결되면 H<sub>2</sub>O, MC를 넣고 교반하였다. 추출한 유기층을 MgSO<sub>4</sub>로 건조한 뒤, 여과, 농축한 후 생성된 유기물을 Hexane으로 씻어준 뒤 A-6을 얻었다(103.6g, 94%).

[0192] **화합물 2-3의 제조**

[0193] 플라스크에 B-6 10.0g(18.6mmol, 1eq.), 1,4-dioxane/H<sub>2</sub>O=5:1 (100mL/20mL) 비율로 넣고, 2-bromo-9,10-di(naphthalen-2-yl)anthracene 9.45g(18.6mmol, 1eq.), Pd(PPh<sub>3</sub>)<sub>4</sub> 1.07g(0.93mmol, 0.05eq.), K<sub>3</sub>PO<sub>4</sub> 11.8g(55.8mmol, 3eq.)을 넣는다. 100℃에서 3시간 교반하였다. 반응이 종결되면 온도를 상온으로 낮춘 후, H<sub>2</sub>O, MC를 넣고 교반하였다. 추출한 유기층을 MgSO<sub>4</sub>로 건조한 뒤, 여과, 농축한 후 생성된 유기물을 Column 분리하여 2-3을 얻었다 (11.3g, 72%).

[0194] **<제조예 14> 화합물 2-6의 제조**

[0195] 화합물 2-3의 제조방법 중 reagent를 (4-bromophenyl)diphenylphosphine oxide으로 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 제조하였다. (80%)

[0196] **<제조예 15> 화합물 2-7의 제조**

[0197] 화합물 2-3의 제조방법 중 reagent를 (6-bromonaphthalen-2-yl)diphenylphosphine oxide으로 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 제조하였다(60%).

[0198] **<제조예 16> 화합물 2-10의 제조**

[0199] 화합물 2-3의 제조방법 중 reagent를 9,9'-(5-bromo-1,3-phenylene)bis(9H-carbazole)으로 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 제조하였다. (66%)

[0200] **<제조예 17> 화합물 2-19의 제조**

[0201] 화합물 2-3의 제조방법 중 reagent를 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine으로 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 제조하였다. (67%)

[0202] **<제조예 18> 화합물 2-37의 제조**

[0203] 화합물 2-3의 제조방법 중 reagent를 4-bromo-2,6-diphenylpyrimidine으로 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 제조하였다. (74%)

[0204] **<제조예 19> 화합물 2-89의 제조**

[0205] 화합물 2-3의 제조방법 중 reagent를 2-bromo-1,10-phenanthroline으로 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 제조하였다. (78%)

[0206] **<제조예 20> 화합물 2-131의 제조**

[0207] 화합물 2-3의 제조방법 중 reagent를 6-bromo-2,2'-binaphthalene으로 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 제조하였다. (88%)

[0208] **<제조예 21> 화합물 2-146의 제조**

[0209] 화합물 2-3의 제조방법 중 reagent를 4-(6-bromopyridin-2-yl)-2,6-diphenylpyrimidine으로 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 제조하였다. (69%)

[0210] 상기 제조예들과 같은 방법으로 화합물을 제조하고, 그 합성확인결과를 하기 표 1 내지 표 3에 나타내었다.

[0211] [표 1]

화합물 No.	<sup>1</sup> H NMR(CDCI <sub>3</sub> , 300Mz)
1-1	δ= 7.25(2H, d), 7.37~7.38(5H, m), 7.55~7.70(8H, m), 7.93~8.09(6H, m), 8.20~8.21(5H, m), 8.45~8.69(5H, m)
1-5	7.51~7.96(20H, m), 8.20(1H, d), 8.36(2H, d), 8.45~8.54(3H, m)
1-7	7.38(1H, d), 7.51~8.03(23H, m), 8.16~8.20(2H, m), 8.43~8.54(4H, m)
1-10	7.16~7.20(4H, m), 7.35(2H, m), 7.50~7.70(10H, m), 7.85~7.94(7H, m), 8.17~8.20(5H, m), 8.45~8.55(5H, m), 8.69(2H, d)
1-11	7.49~7.70(11H, m), 7.85~7.96(5H, m), 8.20(1H, d), 8.36(4H, m), 8.45~8.54(3H, m), 8.69(2H, m)
1-37	7.49~7.70(11H, m), 7.85~7.94(5H, m), 8.20~8.23(2H, m), 8.30~8.45(5H, m), 8.54(2H, m), 8.69(2H, m)
1-43	7.56~7.70(13H, m), 7.85~7.94(5H, m), 8.20~8.23(2H, m), 8.30~8.45(5H, m), 8.54(2H, m), 8.69(2H, m)
1-56	7.56~7.84(18H, m), 8.13~8.20(2H, m), 8.54(2H, m), 8.69(2H, m)
1-89	7.29(1H, d), 7.56~7.70(6H, m), 7.85~7.94(4H, m), 8.20(2H, m), 8.45~8.54(4H, m), 8.69~8.80(6H, m)
1-126	7.25(2H, m), 7.49~7.71(7H, m), 7.85~7.94(3H, m), 8.06~8.09(2H, m), 8.20~8.26(3H, m), 8.45~8.54(3H, m), 8.69(2H, m)
1-147	7.24(1H, d), 7.41~7.65(14H, m), 7.85~8.00(6H, m), 8.20~8.54(8H, m), 8.69(4H, s), 9.19(1H, s)
2-3	7.38~7.73(18H, m), 7.85~8.09(9H, m), 8.20(3H, m), 8.33(2H, m), 8.42~8.54(3H, m), 8.99(1H, s)
2-6	7.51~7.97(24H, m), 8.20(1H, d), 8.33(2H, m), 8.45~8.54(3H, m)

[0212]

2-7	7.38(1H, d), 7.49~7.93(23H, m), 8.16~8.20(2H, m), 8.33(2H, m), 8.43~8.54(4H, m)
2-10	7.16~7.20(4H, m), 7.35(2H, m), 7.50~7.70(12H, m), 7.85~7.94(4H, m), 8.17~8.20(5h, m), 8.33(2H, m), 8.45~8.55(5H, m)
2-19	7.55~7.73(12H, m), 7.85~7.94(7H, m), 8.20~8.23(2H, m), 8.33~8.45(4H, m), 8.54(2H, m)
2-37	7.49~7.70(12H, m), 7.85~7.94(6H, m), 8.20~8.23(2H, m), 8.33~8.35(4H, m), 8.45~8.54(3H, m)
2-89	7.29(1H, d), 7.49~7.73(7H, m), 7.85~7.94(4H, m), 8.20~8.33(4H, m), 8.45~8.54(4H, m), 8.71~8.80(3H, m)
2-90	7.29(1H, d), 7.49~7.73(8H, m), 7.85~7.94(6H, m), 8.20(2H, m), 8.33~8.54(6H, m), 8.69~8.80(4H, m)
2-131	7.38~7.40(3H, m), 7.56~7.63(12H, m), 7.85~8.09(8H, m), 8.20(1H, d), 8.33(2H, m), 8.45~8.54(3H, m)
2-146	7.24(1H, d), 7.49~7.70(13H, m), 7.85~8.00(6H, m), 8.20(1H, d), 8.33~8.55(4H, m), 8.45~8.54(3H, m), 8.72(1H, s), 9.19(1H, s)

[0213]

[0214]

[표 2]

그룹 1			
화합물	FD-MS	화합물	FD-MS
1-1	m/z= 713.90 (C53H31NS=719.22)	1-2	m/z= 663.84 (C49H29NS=663.20)
1-3	m/z= 840.06 (C63H37NS=839.26)	1-4	m/z= 587.74 (C43H25NS=587.17)
1-5	m/z= 611.70 (C41H26NOPS=611.15)	1-6	m/z= 687.80 (C47H30NOPS=687.18)
1-7	m/z= 737.86 (C51H32NOPS=737.19)	1-8	m/z= 737.86 (C51H32NOPS=737.19)
1-9	m/z= 787.92 (C55H34NOPS=787.21)	1-10	m/z= 818.01 (C59H35N3S=817.26)
1-11	m/z= 642.78 (C44H26N4S=642.19)	1-12	m/z= 644.76 (C42H24N6S=644.18)
1-13	m/z= 644.76 (C42H24N6S=644.18)	1-14	m/z= 644.76 (C42H24N6S=644.18)
1-15	m/z= 742.90 (C52H30N4S=742.22)	1-16	m/z= 742.90 (C52H30N4S=742.22)
1-17	m/z= 718.88 (C50H30N4S=718.22)	1-18	m/z= 768.94 (C54H32N4S=768.23)
1-19	m/z= 641.79 (C45H27N3S=641.19)	1-20	m/z= 643.77 (C4325N5S=643.18)
1-21	m/z= 643.77 (C4325N5S=643.18)	1-22	m/z= 643.77 (C4325N5S=643.18)
1-23	m/z= 741.91 (C53H31N3S=741.22)	1-24	m/z= 741.91 (C53H31N3S=741.22)
1-25	m/z= 717.89 (C51H31N3S=717.21)	1-26	m/z= 793.99 (C57H35N3S=793.26)
1-27	m/z= 717.89 (C51H31N3S=717.21)	1-28	m/z= 793.99 (C57H35N3S=793.26)
1-29	m/z= 717.89 (C51H31N3S=717.21)	1-30	m/z= 818.01 (C59H35N3S=817.26)
1-31	m/z= 818.01 (C59H35N3S=817.26)	1-32	m/z= 793.99 (C57H35N3S=793.26)
1-33	m/z= 870.09 (C63H39N3S=876.29)	1-34	m/z= 793.99 (C57H35N3S=793.26)
1-35	m/z= 870.09 (C63H39N3S=876.29)	1-36	m/z= 767.95 (C55H33N3S=767.24)
1-37	m/z= 641.79 (C45H27N3S=641.19)	1-38	m/z= 643.77 (C43H25N5S=643.18)
1-39	m/z= 643.77 (C43H25N5S=643.18)	1-40	m/z= 643.77 (C43H25N5S=643.18)
1-41	m/z= 741.91 (C53H31N3S=741.22)	1-42	m/z= 741.91 (C53H31N3S=741.22)
1-43	m/z= 717.89 (C51H31N3S=717.22)	1-44	m/z= 793.99 (C57H35N3S=793.29)
1-45	m/z= 717.89 (C51H31N3S=717.22)	1-46	m/z= 793.99 (C57H35N3S=793.29)
1-47	m/z= 717.89 (C51H31N3S=717.22)	1-48	m/z= 818.01 (C59H35N3S=817.26)
1-49	m/z= 818.01 (C59H35N3S=817.26)	1-50	m/z= 793.99 (C57H35N3S=793.29)
1-51	m/z= 870.90 (C63H393S=869.29)	1-52	m/z= 793.99 (C57H35N3S=793.29)
1-53	m/z= 870.90 (C63H393S=869.29)	1-54	m/z= 844.05 (C61H37N3S=843.27)
1-55	m/z= 691.85 (C49H29N3S=691.21)	1-56	m/z= 615.75 (C43H25N3S=615.18)

[0215]

1-57	m/z= 691.85 (C49H29N3S=691.21)	1-58	m/z= 665.81 (C47H27N3S=665.19)
1-59	m/z= 665.81 (C47H27N3S=665.19)	1-60	m/z= 767.95 (C55H33N3S=767.24)
1-61	m/z= 691.85 (C49H29N3S=691.21)	1-62	m/z= 767.95 (C55H33N3S=767.24)
1-63	m/z= 741.91 (C53H31N3S=741.22)	1-64	m/z= 741.91 (C53H31N3S=741.22)
1-65	m/z= 767.95 (C55H33N3S=767.24)	1-66	m/z= 691.85 (C49H29N3S=691.21)
1-67	m/z= 767.95 (C55H33N3S=767.24)	1-68	m/z= 741.91 (C53H31N3S=741.22)
1-69	m/z= 741.91 (C53H31N3S=741.22)	1-70	m/z= 717.89 (C51H31N3S=717.21)
1-71	m/z= 870.09 (C63H39N3S=869.29)	1-72	m/z= 870.09 (C63H39N3S=869.29)
1-73	m/z= 818.01 (C59H35N3S=817.26)	1-74	m/z= 818.01 (C59H35N3S=817.26)
1-75	m/z= 793.99 (C57H35N3S=793.29)	1-76	m/z= 793.99 (C57H35N3S=793.29)
1-77	m/z= 793.99 (C57H35N3S=793.29)	1-78	m/z= 767.95 (C55H33N3S=767.24)
1-79	m/z= 767.95 (C55H33N3S=767.24)	1-80	m/z= 615.75 (C43H25N3S=615.18)
1-81	m/z= 691.85 (C49H29N3S=691.21)	1-82	m/z= 691.85 (C49H29N3S=691.21)
1-83	m/z= 691.85 (C49H29N3S=691.21)	1-84	m/z= 767.95 (C55H33N3S=767.24)
1-85	m/z= 767.95 (C55H33N3S=767.24)	1-86	m/z= 691.85 (C49H29N3S=691.21)
1-87	m/z= 767.95 (C55H33N3S=767.24)	1-88	m/z= 767.95 (C55H33N3S=767.24)
1-89	m/z= 589.72 (C41H23N3S=589.16)	1-90	m/z= 665.81 (C47H27N3S=665.19)
1-91	m/z= 665.81 (C47H27N3S=665.19)	1-92	m/z= 603.74 (C42H25N3S=603.18)
1-93	m/z= 603.74 (C42H25N3S=603.18)	1-94	m/z= 603.74 (C42H25N3S=603.18)
1-95	m/z= 603.74 (C42H25N3S=603.18)	1-96	m/z= 555.70 (C3825N3S=555.18)
1-97	m/z= 631.80 (C44H29N3S=631.21)	1-98	m/z= 631.80 (C44H29N3S=631.21)
1-99	m/z= 679.84 (C48H29N3S=679.21)	1-100	m/z= 679.84 (C48H29N3S=679.21)
1-101	m/z= 631.80 (C44H29N3S=631.21)	1-102	m/z= 631.80 (C44H29N3S=631.21)
1-103	m/z= 555.70 (C3825N3S=555.18)	1-104	m/z= 620.79 (C42H24N2S2=620.14)
1-105	m/z= 670.85 (C46H26N2S2=670.15)	1-106	m/z= 620.79 (C42H24N2S2=620.14)
1-107	m/z= 620.79 (C42H24N2S2=620.14)	1-108	m/z= 620.79 (C42H24N2S2=620.14)
1-109	m/z= 640.80 (C46H28N2S=640.20)	1-110	m/z= 716.90 (C52H32N2S=716.23)
1-111	m/z= 642.78 (C44H26N4S=642.19)	1-112	m/z= 642.78 (C44H26N4S=642.19)
1-113	m/z= 642.78 (C44H26N4S=642.19)	1-114	m/z= 718.88 (C50H30N4S=718.22)
1-115	m/z= 718.88 (C50H30N4S=718.22)	1-116	m/z= 718.88 (C50H30N4S=718.22)
1-117	m/z= 565.69 (C39H23N3S=565.16)	1-118	m/z= 565.69 (C39H23N3S=565.16)
1-119	m/z= 565.69 (C39H23N3S=565.16)	1-120	m/z= 641.79 (C45H27N3S=641.19)

[0216]

1-121	m/z= 641.79 (C45H27N3S=641.19)	1-122	m/z= 641.79 (C45H27N3S=641.19)
1-123	m/z= 639.82 (C47H29NS=639.20)	1-124	m/z= 730.89 (C51H30N4S=730.22)
1-125	m/z= 577.70 (C40H23N3S=577.16)	1-126	m/z= 538.67 (C38H22N2S=538.15)
1-127	m/z= 538.67 (C38H22N2S=538.15)	1-128	m/z= 539.66 (C37H21N3S=539.15)
1-129	m/z= 539.66 (C37H21N3S=539.15)	1-130	m/z= 555.65 (C37H21N3OS=555.14)
1-131	m/z= 663.84 (C49H29NS=663.20)	1-132	m/z= 637.80 (C47H27NS=637.19)
1-133	m/z= 512.63 (C36H20N2S=512.13)	1-134	m/z= 588.73 (C42H24N2S=588.17)
1-135	m/z= 638.79 (C46H26N2S=638.18)	1-136	m/z= 488.61 (C34H20N2S=488.13)
1-137	m/z= 488.61 (C34H20N2S=488.13)	1-138	m/z= 614.77 (C44H26N2S=614.18)
1-139	m/z= 614.77 (C44H26N2S=614.18)	1-140	m/z= 719.87 (C49H29N5S=719.21)
1-141	m/z= 872.06 (C61H37N5S=871.28)	1-142	m/z= 819.99 (C57H33N5S=819.25)
1-143	m/z= 819.99 (C57H33N5S=819.25)	1-144	m/z= 718.88 (C50H30N4S=718.22)
1-145	m/z= 794.98 (C56H34N4S=794.25)	1-146	m/z= 718.88 (C50H30N4S=718.22)
1-147	m/z= 794.98 (C56H34N4S=794.25)	1-148	m/z= 768.94 (C54H32N4S=768.23)
1-149	m/z= 794.98 (C56H34N4S=794.25)	1-150	m/z= 692.84 (C48H28N4S=692.20)
1-151	m/z= 603.74 (C42H25N3S=603.18)	1-152	m/z= 603.74 (C42H25N3S=603.18)
1-153	m/z= 538.67 (C38H22N2S=538.15)		

[0217]

[0218] [표 3]

그룹 2			
화합물	FD-MS	화합물	FD-MS
2-1	m/z= 713.90 (C53H31NS=719.22)	2-2	m/z= 663.84 (C49H29NS=663.20)
2-3	m/z= 840.06 (C63H37NS=839.26)	2-4	m/z= 587.74 (C43H25NS=587.17)
2-5	m/z= 611.70 (C41H26NOPS=611.15)	2-6	m/z= 687.80 (C47H30NOPS=687.18)
2-7	m/z= 737.86 (C51H32NOPS=737.19)	2-8	m/z= 737.86 (C51H32NOPS=737.19)
2-9	m/z= 787.92 (C55H34NOPS=787.21)	-10	m/z= 818.01 (C59H35N3S=817.26)
2-11	m/z= 642.78 (C44H26N4S=642.19)	2-12	m/z= 644.76 (C42H24N6S=644.18)
2-13	m/z= 644.76 (C42H24N6S=644.18)	2-14	m/z= 644.76 (C42H24N6S=644.18)
2-15	m/z= 742.90 (C52H30N4S=742.22)	2-16	m/z= 742.90 (C52H30N4S=742.22)
2-17	m/z= 718.88 (C50H30N4S=718.22)	2-18	m/z= 768.94 (C54H32N4S=768.23)
2-19	m/z= 641.79 (C45H27N3S=641.19)	2-20	m/z= 643.77 (C4325N5S=643.18)
2-21	m/z= 643.77 (C4325N5S=643.18)	2-22	m/z= 643.77 (C4325N5S=643.18)
2-23	m/z= 741.91 (C53H31N3S=741.22)	2-24	m/z= 741.91 (C53H31N3S=741.22)
2-25	m/z= 717.89 (C51H31N3S=717.21)	2-26	m/z= 793.99 (C57H35N3S=793.26)
2-27	m/z= 717.89 (C51H31N3S=717.21)	2-28	m/z= 793.99 (C57H35N3S=793.26)
2-29	m/z= 717.89 (C51H31N3S=717.21)	2-30	m/z= 818.01 (C59H35N3S=817.26)
2-31	m/z= 818.01 (C59H35N3S=817.26)	2-32	m/z= 793.99 (C57H35N3S=793.26)
2-33	m/z= 870.09 (C63H39N3S=876.29)	2-34	m/z= 793.99 (C57H35N3S=793.26)
2-35	m/z= 870.09 (C63H39N3S=876.29)	2-36	m/z= 767.95 (C55H33N3S=767.24)
2-37	m/z= 641.79 (C45H27N3S=641.19)	2-38	m/z= 643.77 (C43H25N5S=643.18)
2-39	m/z= 643.77 (C43H25N5S=643.18)	2-40	m/z= 643.77 (C43H25N5S=643.18)
2-41	m/z= 741.91 (C53H31N3S=741.22)	2-42	m/z= 741.91 (C53H31N3S=741.22)
2-43	m/z= 717.89 (C51H31N3S=717.22)	2-44	m/z= 793.99 (C57H35N3S=793.29)
2-45	m/z= 717.89 (C51H31N3S=717.22)	2-46	m/z= 793.99 (C57H35N3S=793.29)
2-47	m/z= 717.89 (C51H31N3S=717.22)	2-48	m/z= 818.01 (C59H35N3S=817.26)
2-49	m/z= 818.01 (C59H35N3S=817.26)	2-50	m/z= 793.99 (C57H35N3S=793.29)
2-51	m/z= 870.90 (C63H39S=869.29)	2-52	m/z= 793.99 (C57H35N3S=793.29)
2-53	m/z= 870.90 (C63H39S=869.29)	2-54	m/z= 844.05 (C61H37N3S=843.27)
2-55	m/z= 691.85 (C49H29N3S=691.21)	2-56	m/z= 615.75 (C43H25N3S=615.18)

[0219]

2-57	m/z= 691.85 (C49H29N3S=691.21)	2-58	m/z= 665.81 (C47H27N3S=665.19)
2-59	m/z= 665.81 (C47H27N3S=665.19)	2-60	m/z= 767.95 (C55H33N3S=767.24)
2-61	m/z= 691.85 (C49H29N3S=691.21)	2-62	m/z= 767.95 (C55H33N3S=767.24)
2-63	m/z= 741.91 (C53H31N3S=741.22)	2-64	m/z= 741.91 (C53H31N3S=741.22)
2-65	m/z= 767.95 (C55H33N3S=767.24)	2-66	m/z= 691.85 (C49H29N3S=691.21)
2-67	m/z= 767.95 (C55H33N3S=767.24)	2-68	m/z= 741.91 (C53H31N3S=741.22)
2-69	m/z= 741.91 (C53H31N3S=741.22)	2-70	m/z= 717.89 (C51H31N3S=717.21)
2-71	m/z= 870.09 (C63H39N3S=869.29)	2-72	m/z= 870.09 (C63H39N3S=869.29)
2-73	m/z= 818.01 (C59H35N3S=817.26)	2-74	m/z= 818.01 (C59H35N3S=817.26)
2-75	m/z= 793.99 (C57H35N3S=793.29)	2-76	m/z= 793.99 (C57H35N3S=793.29)
2-77	m/z= 793.99 (C57H35N3S=793.29)	2-78	m/z= 767.95 (C55H33N3S=767.24)
2-79	m/z= 767.95 (C55H33N3S=767.24)	2-80	m/z= 615.75 (C43H25N3S=615.18)
2-81	m/z= 691.85 (C49H29N3S=691.21)	2-82	m/z= 691.85 (C49H29N3S=691.21)
2-83	m/z= 691.85 (C49H29N3S=691.21)	2-84	m/z= 767.95 (C55H33N3S=767.24)
2-85	m/z= 767.95 (C55H33N3S=767.24)	2-86	m/z= 691.85 (C49H29N3S=691.21)
2-87	m/z= 767.95 (C55H33N3S=767.24)	2-88	m/z= 767.95 (C55H33N3S=767.24)
2-89	m/z= 589.72 (C41H23N3S=589.16)	2-90	m/z= 665.81 (C47H27N3S=665.19)
2-91	m/z= 665.81 (C47H27N3S=665.19)	2-92	m/z= 603.74 (C42H25N3S=603.18)
2-93	m/z= 603.74 (C42H25N3S=603.18)	2-94	m/z= 603.74 (C42H25N3S=603.18)
2-95	m/z= 603.74 (C42H25N3S=603.18)	2-96	m/z= 555.70 (C3825N3S=555.18)
2-97	m/z= 631.80 (C44H29N3S=631.21)	2-98	m/z= 631.80 (C44H29N3S=631.21)
2-99	m/z= 679.84 (C48H29N3S=679.21)	2-100	m/z= 679.84 (C48H29N3S=679.21)
2-101	m/z= 631.80 (C44H29N3S=631.21)	2-102	m/z= 631.80 (C44H29N3S=631.21)
2-103	m/z= 555.70 (C3825N3S=555.18)	2-104	m/z= 620.79 (C42H24N2S2=620.14)
2-105	m/z= 670.85 (C46H26N2S2=670.15)	2-106	m/z= 620.79 (C42H24N2S2=620.14)
2-107	m/z= 620.79 (C42H24N2S2=620.14)	2-108	m/z= 620.79 (C42H24N2S2=620.14)
2-109	m/z= 640.80 (C46H28N2S=640.20)	2-110	m/z= 716.90 (C52H32N2S=716.23)
2-111	m/z= 642.78 (C44H26N4S=642.19)	2-112	m/z= 642.78 (C44H26N4S=642.19)
2-113	m/z= 642.78 (C44H26N4S=642.19)	2-114	m/z= 718.88 (C50H30N4S=718.22)
2-115	m/z= 718.88 (C50H30N4S=718.22)	2-116	m/z= 718.88 (C50H30N4S=718.22)
2-117	m/z= 565.69 (C39H23N3S=565.16)	2-118	m/z= 565.69 (C39H23N3S=565.16)
2-119	m/z= 565.69 (C39H23N3S=565.16)	2-120	m/z= 641.79 (C45H27N3S=641.19)

[0220]

2-121	m/z= 641.79 (C45H27N3S=641.19)	2-122	m/z= 641.79 (C45H27N3S=641.19)
2-123	m/z= 639.82 (C47H29NS=639.20)	2-124	m/z= 730.89 (C51H30N4S=730.22)
2-125	m/z= 577.70 (C40H23N3S=577.16)	2-126	m/z= 538.67 (C38H22N2S=538.15)
2-127	m/z= 538.67 (C38H22N2S=538.15)	2-128	m/z= 539.66 (C37H21N3S=539.15)
2-129	m/z= 539.66 (C37H21N3S=539.15)	2-130	m/z= 555.65 (C37H21N3OS=555.14)
2-131	m/z= 663.84 (C49H29NS=663.20)	2-132	m/z= 637.80 (C47H27NS=637.19)
2-133	m/z= 512.63 (C36H20N2S=512.13)	2-134	m/z= 588.73 (C42H24N2S=588.17)
2-135	m/z= 638.79 (C46H26N2S=638.18)	2-136	m/z= 488.61 (C34H20N2S=488.13)
2-137	m/z= 488.61 (C34H20N2S=488.13)	2-138	m/z= 614.77 (C44H26N2S=614.18)
2-139	m/z= 614.77 (C44H26N2S=614.18)	2-140	m/z= 719.87 (C49H29N5S=719.21)
2-141	m/z= 872.06 (C61H37N5S=871.28)	2-142	m/z= 819.99 (C57H33N5S=819.25)
2-143	m/z= 819.99 (C57H33N5S=819.25)	2-144	m/z= 718.88 (C50H30N4S=718.22)
2-145	m/z= 794.98 (C56H34N4S=794.25)	2-146	m/z= 718.88 (C50H30N4S=718.22)
2-147	m/z= 794.98 (C56H34N4S=794.25)	2-148	m/z= 768.94 (C54H32N4S=768.23)
2-149	m/z= 794.98 (C56H34N4S=794.25)	2-150	m/z= 692.84 (C48H28N4S=692.20)
2-151	m/z= 603.74 (C42H25N3S=603.18)	2-152	m/z= 603.74 (C42H25N3S=603.18)
2-153	m/z= 538.67 (C38H22N2S=538.15)		

[0221]

[0222] 상기 표 1은 NMR 값이고, 표 2 및 3은 FD-질량분석계(FD-MS: Field desorption mass spectrometry)의 측정값이다.

[0223] <실험예>

[0224] <실험예 1>

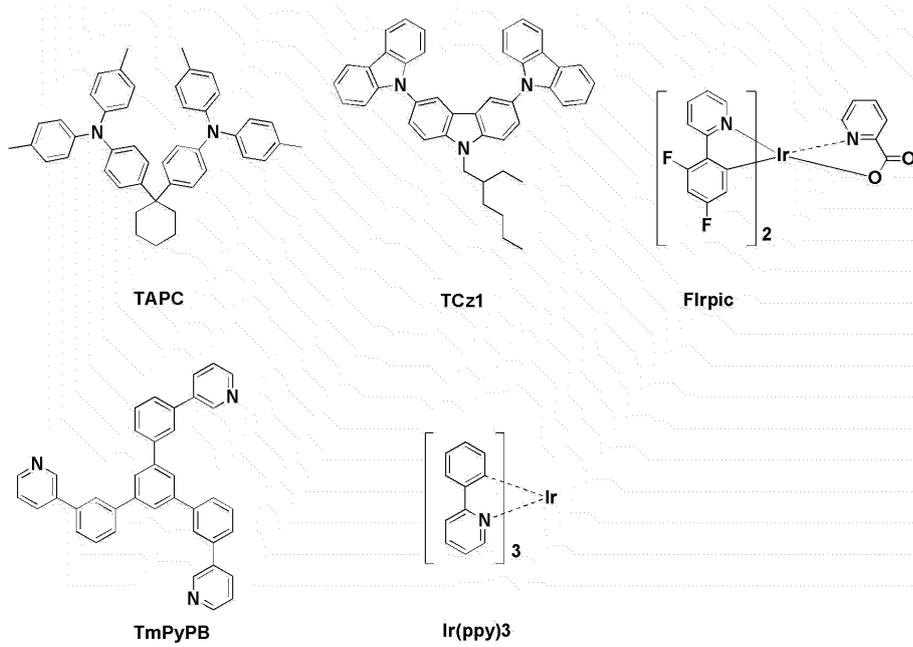
[0225] 1) 유기 발광 소자의 제작

[0226] 1,500Å의 두께로 ITO가 박막 코팅된 유리 기판을 증류수 초음파로 세척하였다. 증류수 세척이 끝나면 아세톤, 메탄올, 이소프로필 알코올 등의 용제로 초음파 세척을 하고 건조시킨 후 UV 세정기에서 UV를 이용하여 5분간 UVO 처리하였다. 이후 기판을 플라즈마 세정기(PT)로 이송시킨 후, 진공상태에서 ITO 일함수 및 잔막 제거를 위해 플라즈마 처리를 하여, 유기 증착용 열증착 장비로 이송하였다.

[0227] 상기 ITO 투명 전극(양극) 위에 2 스택 WOLED(White Organic Light Device) 구조로 유기물을 형성하였다. 제1 스택은 우선 TAPC를 300Å의 두께로 열진공 증착하여 정공 수송층을 형성하였다. 정공 수송층을 형성시킨 후, 그 위에 발광층을 다음과 같이 열 진공 증착시켰다. 발광층은 호스트인 TCz1에 청색 인광 도펀트로 FIrpic를 8% 도핑하여 300Å 증착하였다. 전자 수송층은 TmPyPB를 사용하여 400Å을 형성한 후, 전하 생성층으로 하기 표 4에 기재된 화합물에 Cs<sub>2</sub>CO<sub>3</sub>를 20% 도핑하여 100Å 형성하였다.

[0228] 제2 스택은 우선 MoO<sub>3</sub>을 50Å의 두께로 열진공 증착하여 정공 주입층을 형성하였다. 공통층인 정공 수송층을 TAPC에 MoO<sub>3</sub>를 20% 도핑하여 100Å 형성한 후, TAPC를 300Å 증착하여 형성하였다, 그 위에 발광층은 호스트인 TCz1에 녹색 인광 도펀트인 Ir(ppy)<sub>3</sub>를 8% 도핑하여 300Å 증착한 후, 전자 수송층으로 TmPyPB를 사용하여 600Å을 형성하였다. 마지막으로 전자 수송층 위에 리튬 플루오라이드(lithium fluoride: LiF)를 10Å 두께로 증착하여 전자 주입층을 형성한 후, 전자 주입층 위에 알루미늄(Al) 음극을 1,200Å의 두께로 증착하여 음극을 형성함으로써 유기 발광 소자를 제조하였다.

[0229] 한편, OLED 소자 제작에 필요한 모든 유기 화합물은 재료 별로 각각 10<sup>-6</sup>~10<sup>-8</sup> torr 하에서 진공 승화 정제하여 OLED 제작에 사용하였다.



[0230]

[0231]

[0232]

## 2) 유기 발광 소자의 구동 전압 및 발광 효율

상기와 같이 제조된 유기 발광 소자에 대하여 맥사이언스사의 M7000으로 전계 발광(EL) 특성을 측정하였으며, 그 측정 결과를 가지고 맥사이언스사에서 제조된 수명측정장비(M6000)를 통해 기준 휘도가 3,500 cd/m<sup>2</sup> 일 때, T<sub>95</sub>를 측정하였다. 본 발명에 따라 제조된 백색 유기 발광 소자의 구동전압, 발광효율, 외부양자효율, 색좌표(CIE)를 측정한 결과는 표 4와 같았다.

[0233] [표 4]

	화합물 (전하생성층)	구동전압 (V)	발광효율 (cd/A)	CIE (x, y)	수명 (T95)
실시예 1	1-1	8.13	60.17	(0.211, 0.434)	27
실시예 2	1-5	7.41	64.86	(0.220, 0.480)	33
실시예 3	1-7	8.03	62.27	(0.210, 0.424)	25
실시예 4	1-10	7.08	68.92	(0.208, 0.420)	31
실시예 5	1-11	7.18	69.91	(0.207, 0.421)	31
실시예 6	1-37	6.53	69.32	(0.206, 0.419)	37
실시예 7	1-43	6.28	72.88	(0.205, 0.411)	33
실시예 8	1-56	6.91	71.52	(0.201, 0.416)	36
실시예 9	1-89	6.22	77.08	(0.215, 0.425)	51
실시예 10	1-126	7.63	66.13	(0.211, 0.427)	32
실시예 11	1-147	7.00	69.92	(0.212, 0.391)	40
실시예 12	2-3	7.93	62.05	(0.234, 0.445)	36
실시예 13	2-6	7.12	67.56	(0.209, 0.415)	34
실시예 14	2-7	7.86	61.19	(0.232, 0.443)	22
실시예 15	2-10	7.01	69.94	(0.209, 0.418)	37
실시예 16	2-19	7.55	66.48	(0.208, 0.419)	33
실시예 17	2-37	7.87	62.86	(0.229, 0.452)	24
실시예 18	2-89	6.47	79.99	(0.218, 0.443)	53
실시예 19	2-90	6.49	79.68	(0.216, 0.483)	50
실시예 20	2-131	7.44	65.32	(0.207, 0.423)	33
실시예 21	2-146	7.34	65.77	(0.208, 0.418)	40
비교예 1	TmPyPB	8.54	54.23	(0.211, 0.430)	25

[0234]

[0235]

상기 표 4의 결과로부터 알 수 있듯이, 본 발명의 2-스택 백색 유기 전계 발광 소자의 전하 생성층 재료를 이용한 유기 전계 발광 소자는 비교예 1에 비해 구동 전압이 낮고, 발광효율이 개선되었다. 특히 실시예 9, 11, 18, 19, 21은 구동, 효율, 수명 모든 면에서 현저히 우수함을 확인 하였다.

[0236]

이러한 결과가 나온 이유는 적절한 길이와 강도 및 평단한 특성을 가진 발명된 골격과 메탈과 바인딩 할 수 있는 적절한 헤테로화합물로 구성된 N 타입 전하 생성층으로 사용된 본 발명의 화합물이 알칼리 금속 또는 알칼리 토금속을 도핑되어 N 타입 전하 생성층 내에 갭 스테이트가 형성한 것으로 추정되고, P 타입 전하 생성층으로부터 생성된 전자가 N 타입 전하 생성층 내에서 생성된 갭 스테이트를 통해 전자 수송층으로 전자주입이 용이하게 되었을 것으로 판단된다. 따라서, P 타입 전하 생성층은 N 타입 전하 생성층으로 전자주입과 전자전달을 잘 할 수 있게 되고, 이 때문에 유기 발광 소자의 구동 전압이 낮아졌고 효율과 수명이 개선될 것으로 판단된다.

[0237]

<실험예 2>

[0238]

1) 유기 발광 소자의 제작

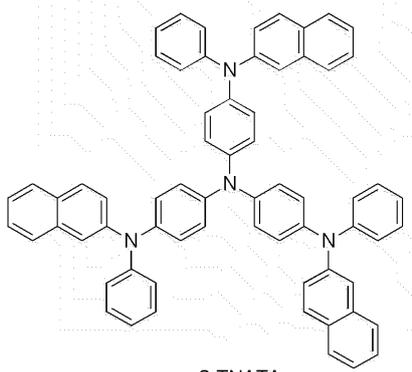
[0239]

OLED용 글래스(삼성-코닝사 제조)로부터 얻어진 투명전극 ITO 박막을 트리클로로에틸렌, 아세톤, 에탄올, 증류수를 순차적으로 사용하여 각 5분간 초음파 세척을 실시한 후, 이소프로판올에 넣어 보관한 후 사용하였다.

[0240]

다음으로 진공 증착 장비의 기관 폴더에 ITO 기관을 설치하고, 진공 증착 장비 내의 셀에 하기 4,4',4"-트리스(N,N-(2-나프틸)-페닐아미노)트리페닐 아민 (4,4',4"-tris(N,N-(2-naphthyl)-phenylamino)triphenyl amine: 2-

TNATA)을 넣었다.

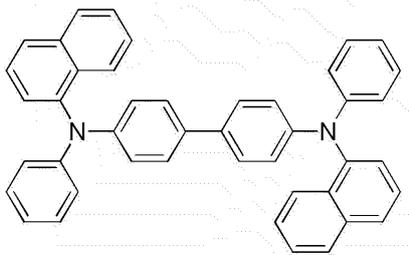


2-TNATA

[0241]

[0242] 이어서 챔버 내의 진공도가  $10^{-6}$  torr에 도달할 때까지 배기시킨 후, 셀에 전류를 인가하여 2-TNATA를 증발시켜 ITO 기판 상에 600Å 두께의 정공 주입층을 증착하였다.

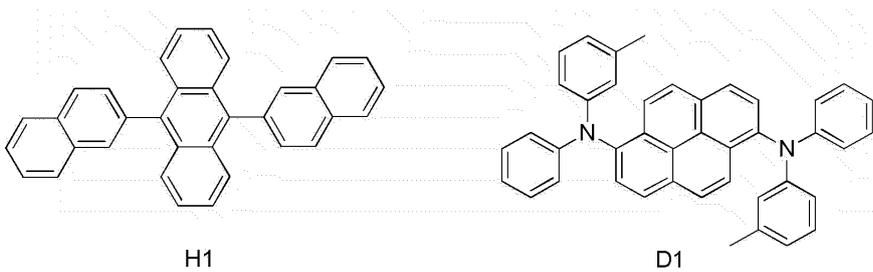
[0243] 진공 증착 장비 내의 다른 셀에 하기 N,N'-비스( $\alpha$ -나프틸)-N,N'-디페닐-4,4'-디아민(N,N'-bis( $\alpha$ -naphthyl)-N,N'-diphenyl-4,4'-diamine: NPB)을 넣고, 셀에 전류를 인가하여 증발시켜 정공 주입층 위에 300Å 두께의 정공 수송층을 증착하였다.



NPB

[0244]

[0245] 이와 같이 정공 주입층 및 정공 수송층을 형성시킨 후, 그 위에 발광층으로서 다음과 같은 구조의 청색 발광 재료를 증착시켰다. 구체적으로, 진공 증착 장비 내의 한쪽 셀에 청색 발광 호스트 재료인 H1을 200Å 두께로 진공 증착시키고 그 위에 청색 발광 도판트 재료인 D1을 호스트 재료 대비 5% 진공 증착시켰다.

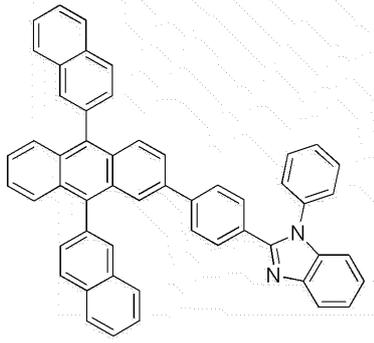


H1

D1

[0246]

[0247] 이어서 전자 수송층으로서 하기 구조식 E1의 화합물을 300Å 두께로 증착하였다.



E1

[0248]

[0249] 전자 주입층으로 리튬 플루오라이드(lithium fluoride: LiF)를 10Å 두께로 증착하였고 Al 음극을 1000Å의 두께로 하여 OLED 소자를 제작하였다.

[0250] 한편, OLED 소자 제작에 필요한 모든 유기 화합물은 재료 별로 각각  $10^{-6}$ ~ $10^{-8}$  torr 하에서 진공 승화 정제하여 OLED 제작에 사용하였다

[0251] **2) 유기 발광 소자의 구동 전압 및 발광 효율**

[0252] 상기와 같이 제조된 유기 발광 소자에 대하여 맥사이언스사의 M7000으로 전계 발광(EL) 특성을 측정하였으며, 그 측정 결과를 가지고 맥사이언스사에서 제조된 수명측정장비(M6000)를 통해 기준 휘도가  $700 \text{ cd/m}^2$  일 때,  $T_{95}$  을 측정하였다. 본 발명에 따라 제조된 백색 유기 전계 발광 소자의 구동전압, 발광효율, 외부양자효율, 색좌표(CIE)를 측정한 결과는 표 5와 같았다.

[0253] [표 5]

	화합물 (전자수송층)	구동전압 (V)	발광효율 (cd/A)	CIE (x, y)	수명 (T95)
실시예 22	1-1	4.69	4.72	(0.130, 0.109)	33
실시예 23	1-5	4.55	4.92	(0.130, 0.108)	26
실시예 24	1-7	4.89	4.68	(0.130, 0.100)	35
실시예 25	1-10	5.01	4.78	(0.130, 0.100)	38
실시예 26	1-11	4.69	4.72	(0.130, 0.109)	38
실시예 27	1-37	4.47	4.93	(0.130, 0.107)	49
실시예 28	1-43	4.88	5.22	(0.131, 0.107)	29
실시예 29	1-56	4.61	5.09	(0.130, 0.108)	32
실시예 30	1-89	4.92	5.18	(0.131, 0.117)	27
실시예 31	1-126	4.82	5.18	(0.130, 0.110)	40
실시예 32	1-147	4.97	5.22	(0.128, 0.117)	29
실시예 33	2-3	4.92	4.95	(0.130, 0.113)	23
실시예 34	2-6	4.89	4.68	(0.130, 0.100)	42
실시예 35	2-7	5.01	4.78	(0.130, 0.100)	38
실시예 36	2-10	4.69	4.72	(0.129, 0.109)	38
실시예 37	2-19	5.00	5.07	(0.131, 0.106)	38
실시예 38	2-37	4.92	5.18	(0.130, 0.107)	40
실시예 39	2-89	4.72	5.03	(0.130, 0.100)	29
실시예 40	2-90	4.79	4.97	(0.130, 0.109)	25
실시예 41	2-131	4.73	4.88	(0.132, 0.105)	27
실시예 42	2-146	5.00	5.07	(0.131, 0.106)	28
비교예 2	E1	5.56	5.91	(0.130, 0.101)	30

[0254]

[0255] 상기 표 5의 결과로부터 알 수 있듯이, 본 발명의 청색 유기 전계 발광 소자의 전자수송층 재료를 이용한 유기 전계 발광 소자는 비교예 2에 비해 구동 전압이 낮고, 발광효율 및 수명이 현저히 개선되었다. 특히 실시예 4, 5, 6, 10, 13, 14, 15, 16, 17은 구동, 효율, 수명 모든 면에서 우수함을 확인하였다.

[0256] 이러한 결과의 원인은 적절한 길이와 강도 및 평탄한 특성을 가진 발명된 화합물이 전자수송층으로 사용되었을 때, 특정 조건하에 전자를 받아 여기된 상태의 화합물을 만들고 특히, 화합물의 헤테로골격 부위의 여기된 상태가 형성되면, 여기된 헤테로골격 부위가 다른 반응하기 전에 여기된 에너지가 안정한 상태로 이동될 것이며 비교적 안정해진 화합물은 화합물의 분해 혹은 파괴는 일어나지 않고 전자를 효율적으로 전달할 수 있기 때문이라고 판단된다. 참고로 여기되었을 때 안정한 상태를 가지는 것들은 아릴 혹은 아센류 화합물들 혹은 다원환 헤테로 화합물들이라고 생각한다. 따라서 본 발명의 화합물이 향상된 전자-수송 특성 혹은 개선된 안정성을 향상시켜 구동, 효율, 수명 모든 면에서 우수함을 가져다 주었다고 판단된다.

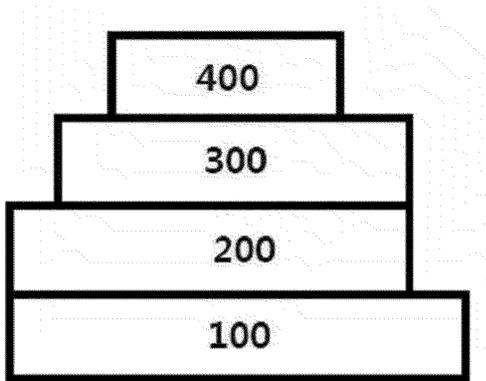
**부호의 설명**

- [0257] 100 기관
- 200 양극
- 300 유기물층

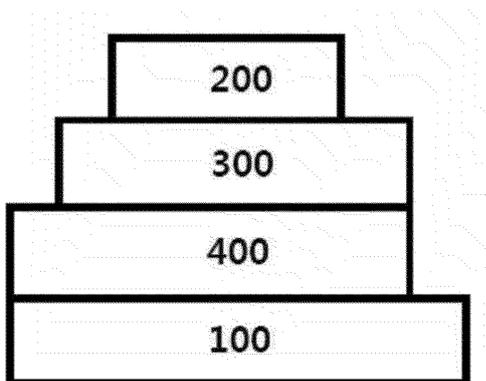
- 301 정공 주입층
- 302 정공 수송층
- 303 발광층
- 304 정공 저지층
- 305 전자 수송층
- 306 전자 주입층
- 400 음극

도면

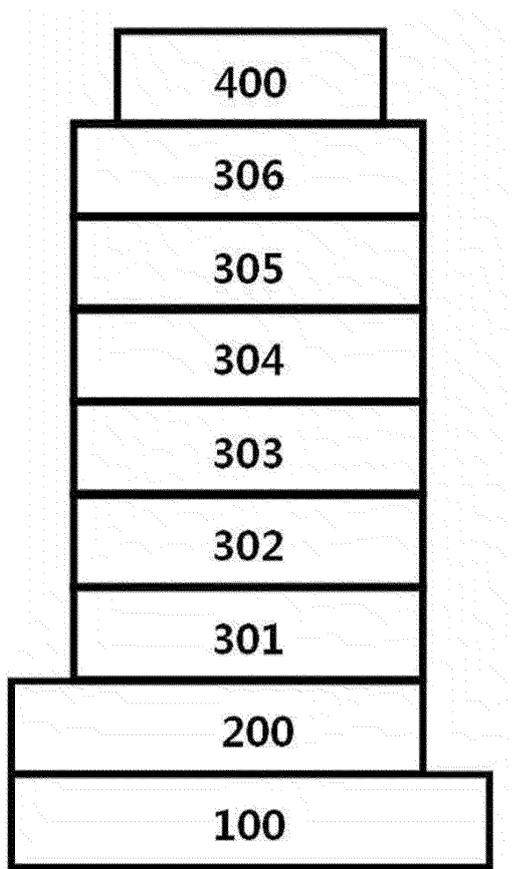
도면1



도면2



도면3



도면4

음극
전자주입층
제2 전자수송층
제2 정공저지층
제2 스택발광층
제2 전자저지층
제2 정공수송층
P형 전하생성층
N형 전하생성층
제1 전자수송층
제1 정공저지층
제1 스택발광층
제1 전자저지층
제1 정공수송층
제1 정공주입층
양극
기판