



**(19) 대한민국특허청(KR)**  
**(12) 등록특허공보(B1)**

(45) 공고일자 2017년03월28일  
 (11) 등록번호 10-1720719  
 (24) 등록일자 2017년03월22일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)  
 C07D 401/10 (2006.01) C09K 11/07 (2006.01)  
 H01L 51/50 (2006.01)  
 (21) 출원번호 10-2013-0136513  
 (22) 출원일자 2013년11월11일  
 심사청구일자 2014년11월12일  
 (65) 공개번호 10-2015-0006758  
 (43) 공개일자 2015년01월19일  
 (30) 우선권주장  
 1020130080563 2013년07월09일 대한민국(KR)  
 (56) 선행기술조사문헌  
 W02012157537 A1\*  
 JP2013048194 A  
 KR1020100027760 A  
 JP2010114180 A  
 \*는 심사관에 의하여 인용된 문헌

(73) 특허권자  
**제일모직주식회사**  
 경상북도 구미시 구미대로 58 (공단동)  
 (72) 발명자  
**이한일**  
 경기 의왕시 고산로 56, (고천동, 제일모직)  
**유은선**  
 경기 의왕시 고산로 56, (고천동, 제일모직)  
 (뒷면에 계속)  
 (74) 대리인  
**팬코리아특허법인**

전체 청구항 수 : 총 13 항

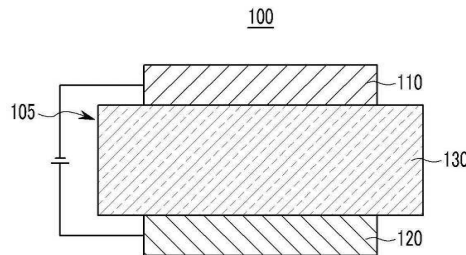
심사관 : 지무근

(54) 발명의 명칭 **화합물, 이를 포함하는 유기 광전자 소자 및 표시장치**

**(57) 요약**

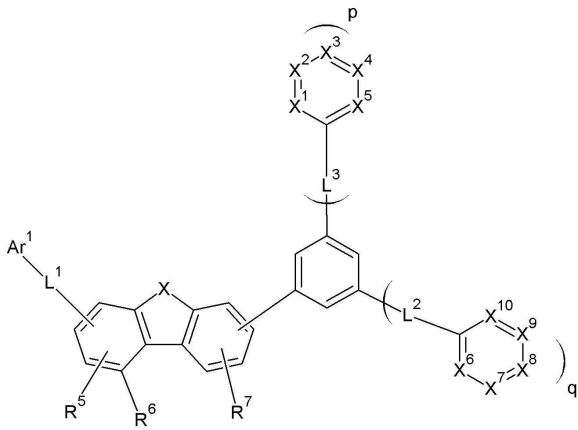
화합물, 이를 포함하는 유기발광소자 및 상기 유기발광소자를 포함하는 표시장치에 관한 것으로, 하기 화학식 I (뒷면에 계속)

**대표도** - 도1



로 표시되는 화합물을 제공한다.

[화학식 I]



상기 화학식 I에서, X<sup>1</sup> 내지 X<sup>10</sup>, L<sup>1</sup> 내지 L<sup>3</sup>, R<sup>5</sup> 내지 R<sup>7</sup>, X, Ar<sup>1</sup>, p 및 q의 정의는 명세서에 정의된 바와 같다.

(72) 발명자

**강동민**

경기 의왕시 고산로 56, (고천동, 제일모직)

**강의수**

경기 의왕시 고산로 56, (고천동, 제일모직)

**양용탁**

경기 의왕시 고산로 56, (고천동, 제일모직)

**오재진**

경기 의왕시 고산로 56, (고천동, 제일모직)

**유동규**

경기 의왕시 고산로 56, (고천동, 제일모직)

**이상신**

경기 의왕시 고산로 56, (고천동, 제일모직)

**장유나**

경기 의왕시 고산로 56, (고천동, 제일모직)

**정수영**

경기 의왕시 고산로 56, (고천동, 제일모직)

**한수진**

경기 의왕시 고산로 56, (고천동, 제일모직)

**홍진석**

경기 의왕시 고산로 56, (고천동, 제일모직)

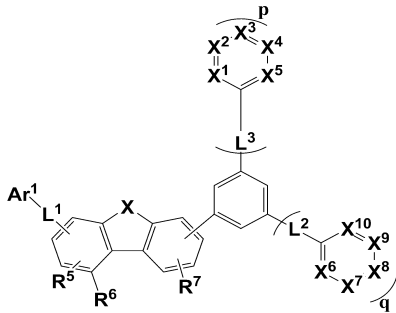
명세서

청구범위

청구항 1

하기 화학식 I로 표시되는 화합물:

[화학식 I]



상기 화학식 I에서,

$X^1$  내지  $X^{10}$ 은 각각 독립적으로, N 또는 CR이되,  $X^1$  내지  $X^{10}$  중 적어도 하나는 N이고,

p 및 q는 각각 독립적으로 0 또는 1이되, p 및 q가 0은 아니고,

X는 O, 또는 S이고,

$L^1$  내지  $L^3$ 는 각각 독립적으로, 단일 결합, 또는 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴렌기이고,

$Ar^1$ 은 치환 또는 비치환된 카바졸릴기이고,

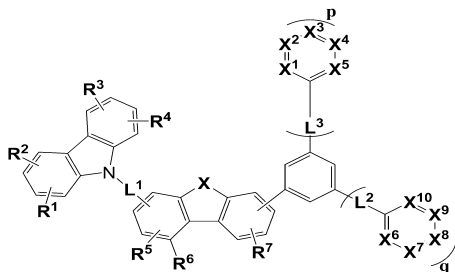
R 및  $R^5$  내지  $R^7$ 는 각각 독립적으로, 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C40 실릴기, 또는 이들의 조합이다.

청구항 2

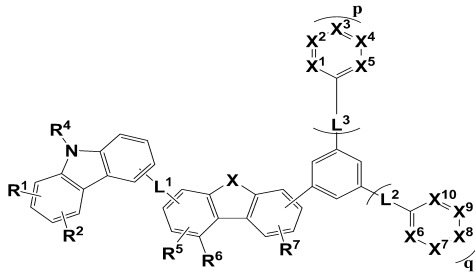
제1항에 있어서,

상기 화학식 I은 하기 화학식 II 또는 화학식 III로 표시되는 화합물:

[화학식 II]



[화학식 III]



상기 화학식 II 및 화학식 III에서,

$X^1$  내지  $X^{10}$ 는 각각 독립적으로, N 또는 CR이되,  $X^1$  내지  $X^{10}$  중 적어도 하나는 N이고,

p 및 q는 각각 독립적으로 0 또는 1이되, p 및 q가 0은 아니고,

X는 O, 또는 S이고,

$L^1$  내지  $L^3$ 는 각각 독립적으로, 단일 결합, 또는 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴렌기이고,

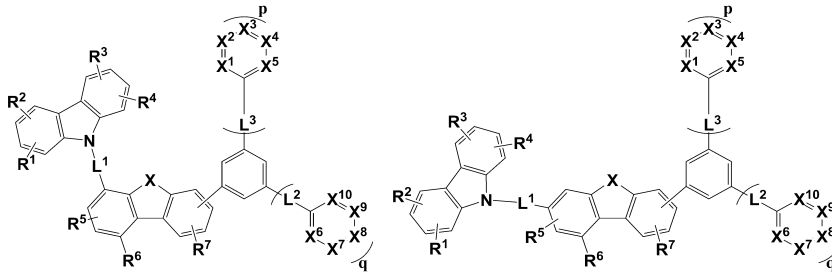
R 및  $R^1$  내지  $R^7$ 는 각각 독립적으로, 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C3 내지 C40 실릴기이다.

청구항 3

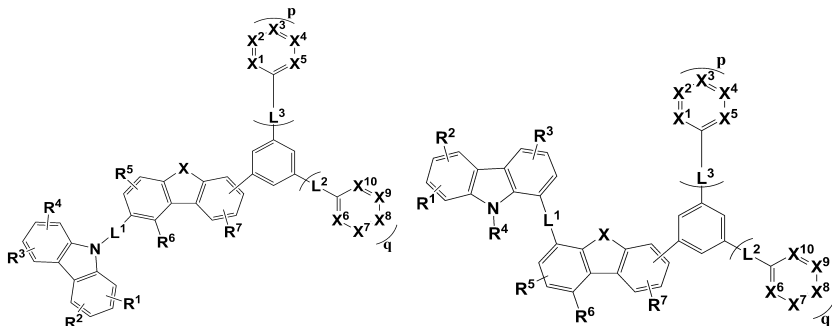
제1항에 있어서,

상기 화학식 I은 하기 화학식 1 내지 12 중 어느 하나로 표시되는 화합물:

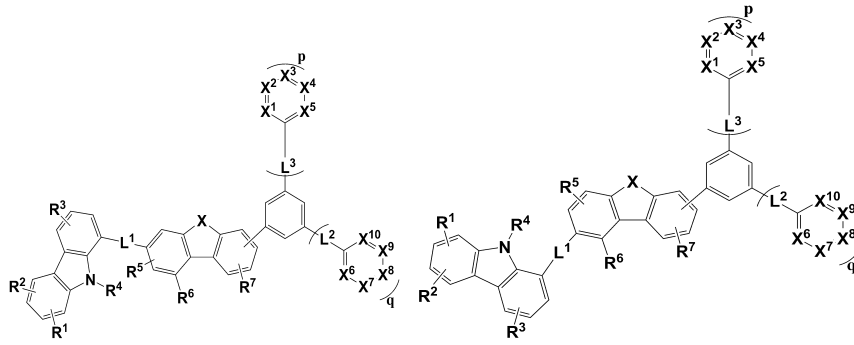
[화학식 1][화학식 2]



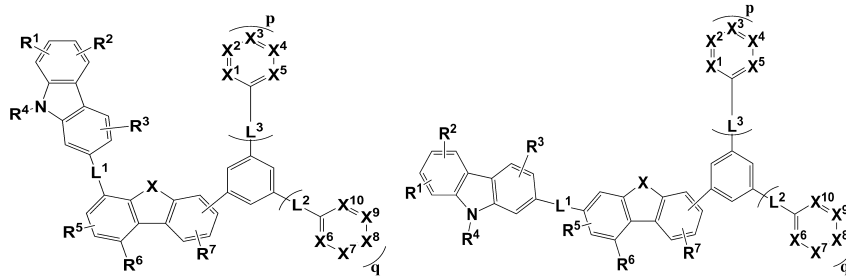
[화학식 3][화학식 4]



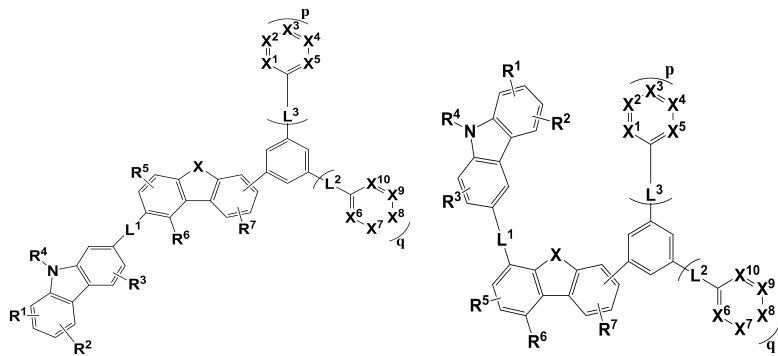
[화학식 5][화학식 6]



[화학식 7][화학식 8]



[화학식 9][화학식 10]



[화학식 11][화학식 12]

상기 화학식 1 내지 화학식 12 에서,  
 $X^1$  내지  $X^{10}$ 는 각각 독립적으로, N 또는 CR이되,  $X^1$  내지  $X^{10}$  중 적어도 하나는 N이고,  
 $p$  및  $q$ 는 각각 독립적으로 0 또는 1이되,  $p$  및  $q$ 가 0은 아니고,  
 $X$ 는 O, 또는 S이고,

$L^1$  내지  $L^3$ 는 각각 독립적으로, 단일 결합, 또는 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴렌기이고,

R 및  $R^1$  내지  $R^7$ 는 각각 독립적으로, 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C3 내지 C40 실릴기이다.

**청구항 4**

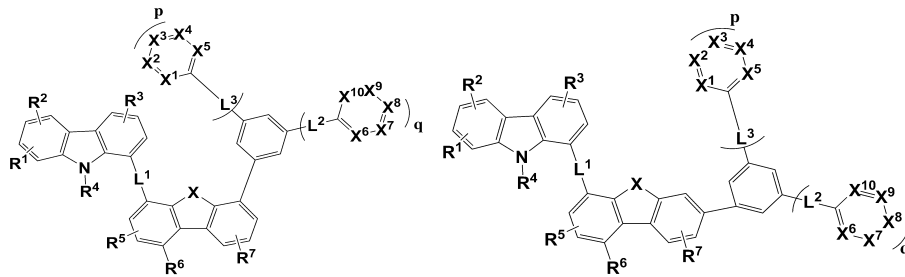
삭제

**청구항 5**

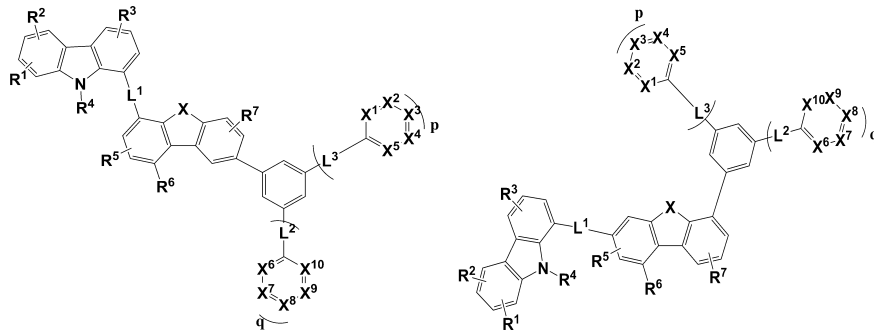
제1항에 있어서,

상기 화학식 I은 하기 화학식 13 내지 21 중 어느 하나로 표시되는 화합물:

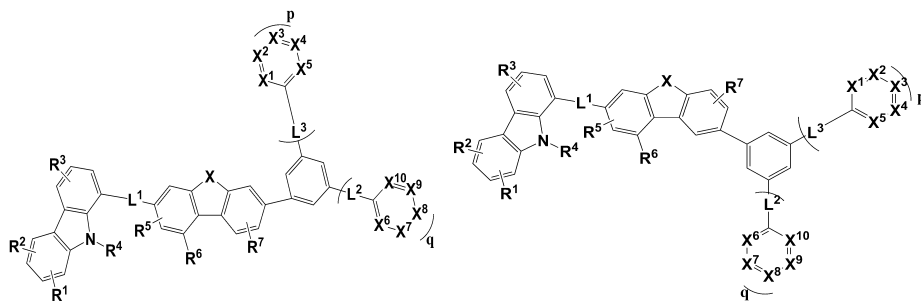
[화학식 13] [화학식 14]



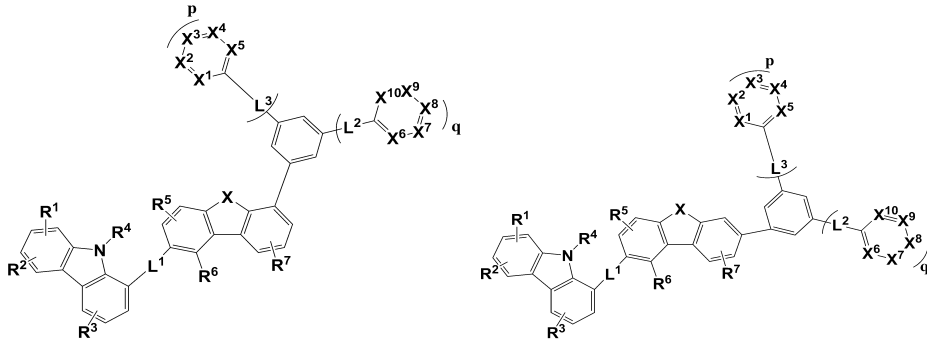
[화학식 15] [화학식 16]



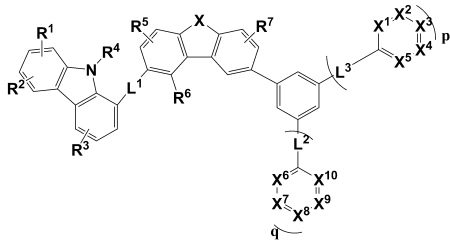
[화학식 17] [화학식 18]



[화학식 19] [화학식 20]



[화학식 21]



상기 화학식 13 내지 화학식 21에서,

$X^1$  내지  $X^{10}$ 는 각각 독립적으로, N 또는 CR이되,  $X^1$  내지  $X^{10}$  중 적어도 하나는 N이고,

p 및 q는 각각 독립적으로 0 또는 1이되, p 및 q가 0은 아니고,

X는 O, 또는 S이고,

$L^1$  내지  $L^3$ 는 각각 독립적으로, 단일 결합, 또는 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴렌기이고,

R 및  $R^1$  내지  $R^7$ 는 각각 독립적으로, 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C3 내지 C40 실릴기이다.

**청구항 6**

삭제

**청구항 7**

제1항에 있어서,

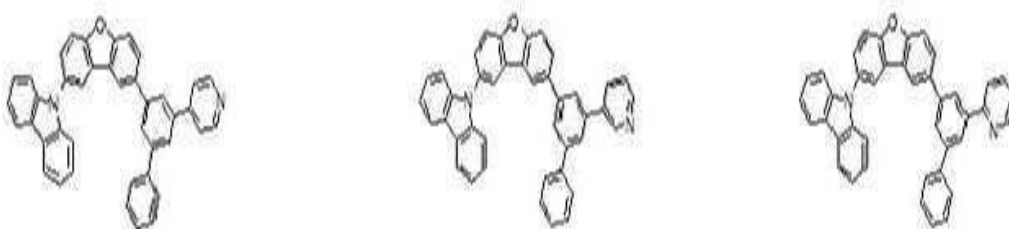
R은 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C4 알킬기, 또는 치환 또는 비치환된 페닐기인 화합물.

**청구항 8**

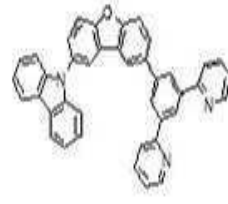
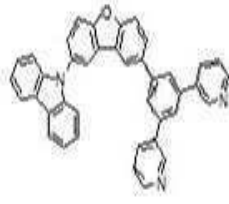
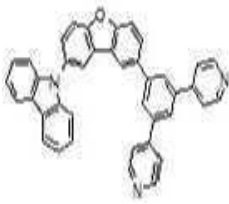
제1항에 있어서,

상기 화학식 I은 하기 II-13 내지 II-48, 및 III-10 내지 III-27 중 어느 하나로 표시되는 화합물:

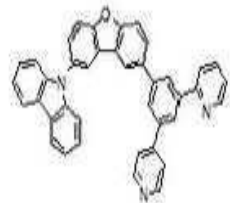
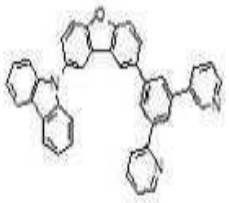
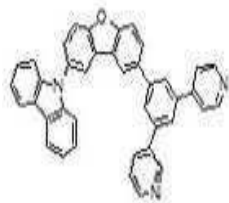
[II-13][II-14][II-15]



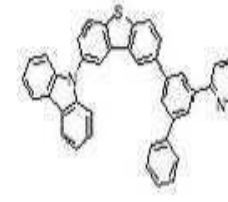
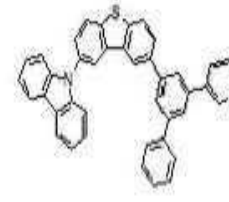
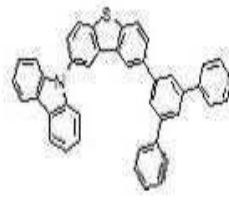
[ II-16][ II-17][ II-18]



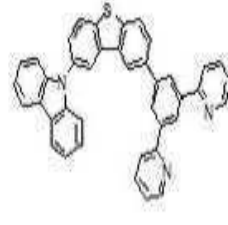
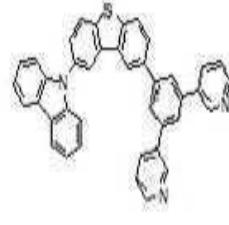
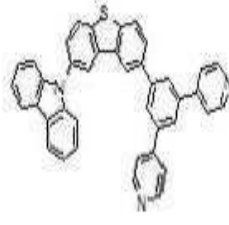
[ II-19][ II-20][ II-21]



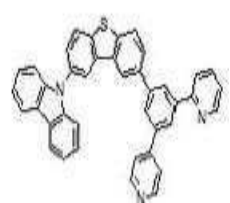
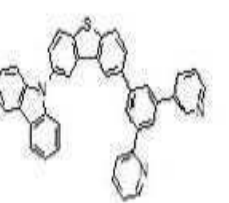
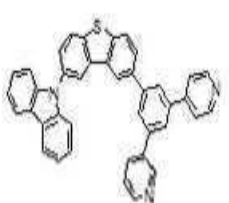
[ II-22][ II-23][ II-24]



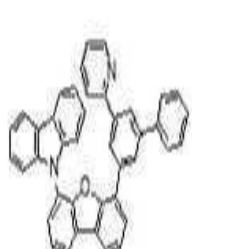
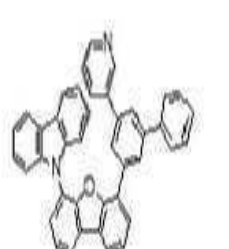
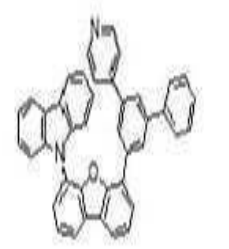
[ II-25][ II-26][ II-27]



[ II-28][ II-29][ II-30]

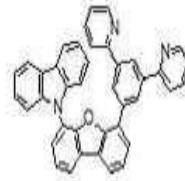
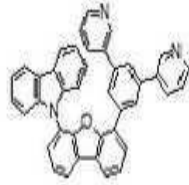
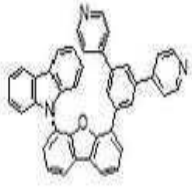


[ II-31][ II-32][ II-33]

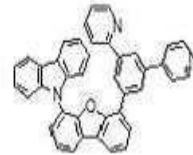
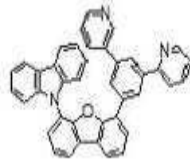
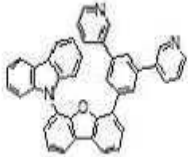




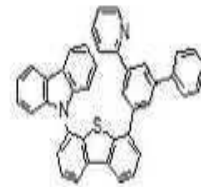
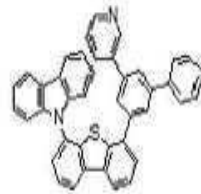
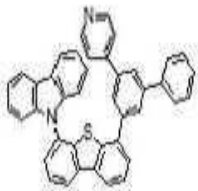
[ II-34][ II-35][ II-36]



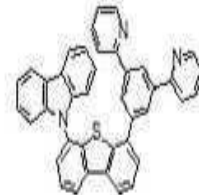
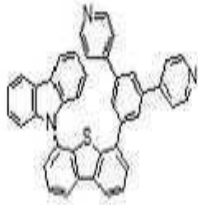
[ II-37][ II-38][ II-39]



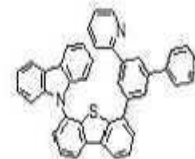
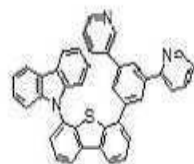
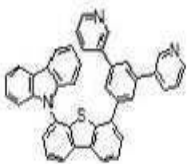
[ II-40][ II-41][ II-42]



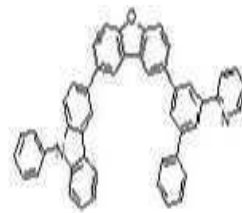
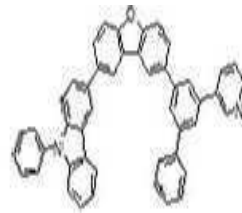
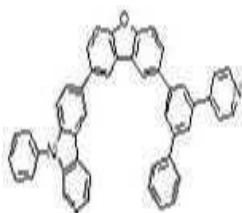
[ II-43][ II-44][ II-45]



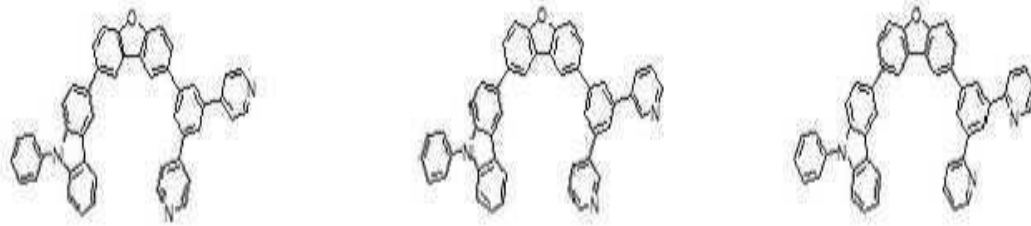
[ II-46][ II-47][ II-48]



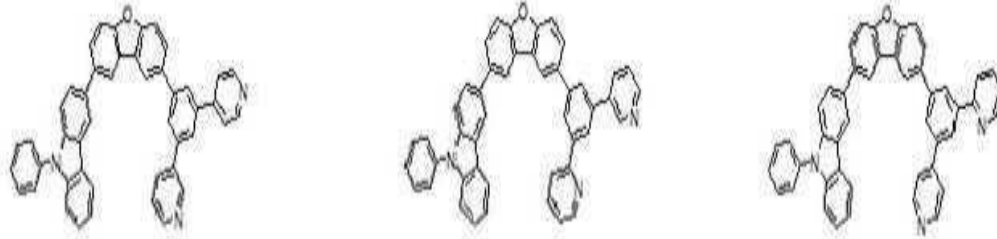
[ III-10][ III-11][ III-12]



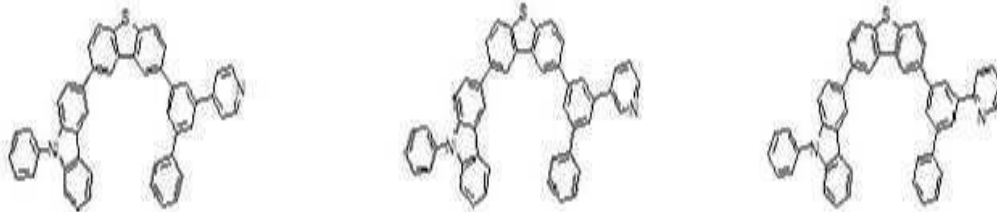
[III-13][III-14][III-15]



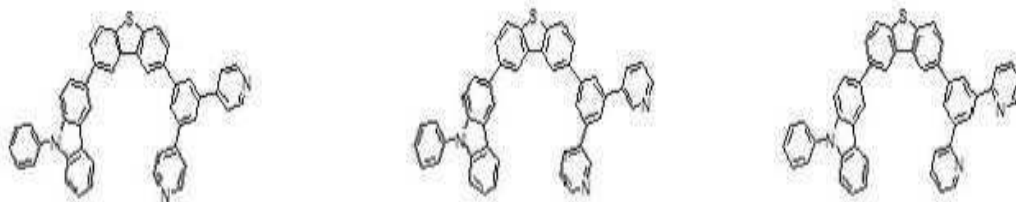
[III-16][III-17][III-18]



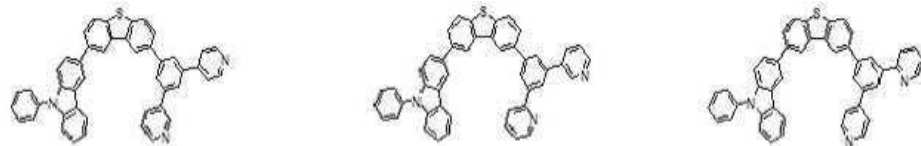
[III-19][III-20][III-21]



[III-22][III-23][III-24]



[III-25][III-26][III-27]



**청구항 9**

제1항 내지 제3항, 제5항, 제7항 및 제8항 중 어느 한 항에 있어서,  
상기 화합물은 3중항 여기에너지(T1) 2.0eV 이상인 것인 화합물.

**청구항 10**

서로 마주하는 양극과 음극, 및  
상기 양극과 상기 음극 사이에 위치하는 적어도 한 층의 유기층을 포함하고,  
상기 유기층은 제1항 내지 제3항, 제5항, 제7항 및 제8항 중 어느 한 항에 따른 화합물을 포함하는 유기 광전자

소자.

**청구항 11**

제10항에 있어서,  
 상기 유기층은 발광층을 포함하고,  
 상기 발광층은 상기 화합물을 포함하는 유기광전자 소자.

**청구항 12**

제11항에 있어서,  
 상기 화합물은 상기 발광층의 호스트로서 포함되는 유기 광전자 소자.

**청구항 13**

제11항에 있어서,  
 상기 화합물은 상기 발광층의 그린 인광 호스트로서 포함되는 유기 광전자 소자.

**청구항 14**

제10항에 있어서,  
 상기 유기층은 정공 주입 층, 정공 수송 층, 전자 차단 층, 전자 수송 층, 전자 주입 층 및 정공 차단 층에서 선택된 적어도 하나의 보조층을 포함하고,  
 상기 보조층은 상기 화합물을 포함하는 유기 광전자 소자.

**청구항 15**

제10항에 따른 유기 광전자 소자를 포함하는 표시장치.

**발명의 설명**

**기술 분야**

[0001] 화합물, 이를 포함하는 유기 광전자 소자 및 표시장치에 관한 것이다.

**배경 기술**

[0002] 유기 광전자 소자(organic optoelectric diode)는 전기 에너지와 광 에너지를 상호 전환할 수 있는 소자이다.

[0003] 유기 광전자 소자는 동작 원리에 따라 크게 두 가지로 나눌 수 있다. 하나는 광 에너지에 의해 형성된 엑시톤(exciton)이 전자와 정공으로 분리되고 상기 전자와 정공이 각각 다른 전극으로 전달되면서 전기 에너지를 발생시키는 광전 소자이고, 다른 하나는 전극에 전압 또는 전류를 공급하여 전기 에너지로부터 광 에너지를 발생하는 발광 소자이다.

[0004] 유기 광전자 소자의 예로는 유기 광전 소자, 유기 발광 소자, 유기 태양 전지 및 유기 감광체 드럼(organic photo conductor drum) 등을 들 수 있다.

[0005] 이 중, 유기 발광 소자(organic light emitting diode, OLED)는 근래 평판 표시 장치(flat panel display device)의 수요 증가에 따라 크게 주목받고 있다. 상기 유기 발광 소자는 유기 발광 재료에 전류를 가하여 전기 에너지를 빛으로 전환시키는 소자로서, 통상 양극(anode)과 음극(cathode) 사이에 유기 층이 삽입된 구조로 이루어져 있다. 여기서 유기 층은 발광층과 선택적으로 보조층을 포함할 수 있으며, 상기 보조층은 예컨대 유기 발광 소자의 효율과 안정성을 높이기 위한 정공 주입 층, 정공 수송 층, 전자 차단 층, 전자 수송 층, 전자 주입 층 및 정공 차단 층에서 선택된 적어도 1층을 포함할 수 있다.

[0006] 유기 발광 소자의 성능은 상기 유기 층의 특성에 의해 영향을 많이 받으며, 그 중에서도 상기 유기 층에 포함된

유기 재료에 의해 영향을 많이 받는다.

[0007] 특히 상기 유기 발광 소자가 대형 평판 표시 장치에 적용되기 위해서는 정공 및 전자의 이동성을 높이는 동시에 전기화학적 안정성을 높일 수 있는 유기 재료의 개발이 필요하다.

**발명의 내용**

**해결하려는 과제**

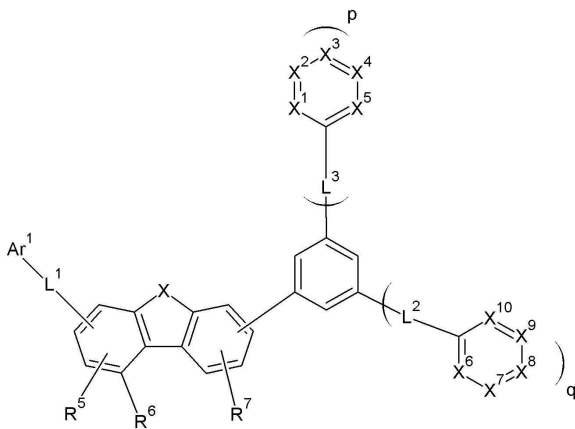
[0008] 고효율, 장수명 등의 특성을 가지는 유기 광전자 소자를 제공할 수 있는 화합물을 제공하는 것이다.

[0009] 상기 화합물을 포함하는 유기 광전자 소자 및 상기 유기 광전자 소자를 포함하는 표시장치를 제공하는 것이다.

**과제의 해결 수단**

[0010] 본 발명의 일 구현예에서는, 하기 화학식 I로 표시되는 화합물을 제공한다.

[0011] [화학식 I]



[0012] 상기 화학식 I에서,  
 [0013]

[0014] X¹ 내지 X¹⁰은 각각 독립적으로, N 또는 CR이되, X¹ 내지 X¹⁰ 중 적어도 하나는 N이고,

[0015] p 및 q는 각각 독립적으로 0 또는 1이되, p 및 q가 0은 아니고,

[0016] X는 O, S, SO₂(O=S=O), PO(P=O), NR, CR R', 또는 SiR R' 이고,

[0017] 여기서, R 및 R'은 각각 독립적으로, 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 사이클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 헤테로사이클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 아민기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴아민기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴아민기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 알콕시카르보닐기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 알콕시카르보닐아미노기, 치환 또는 비치환된 C7 내지 C30 아릴옥시카르보닐아미노기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 술포모일아미노기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 알케닐기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 알키닐기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C40 실릴기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C40 실릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 아실기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 아실옥시기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 아실아미노기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 술포닐기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬티올기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로사이클로티올기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴티올기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴티올기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 우레이드기, 할로젠기, 할로젠 함유기, 시아노기, 히드록실기, 아미노기, 니트로기, 카르복실기, 페로세닐기, 또는 이들의 조합이고,

[0018] L¹ 내지 L³는 각각 독립적으로, 단일 결합, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬렌기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 사이클로알킬렌기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 헤테로사이클로알킬렌기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴렌기, 또는 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 헤테로아릴렌기이고, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴렌아민기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴렌아민기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알콕

실렌기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴옥실렌기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 알케닐렌기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 알킬닐렌기 또는 이들의 조합이고,

[0019] Ar<sup>1</sup>은 치환 또는 비치환된 카바졸릴기이고,

[0020] R<sup>5</sup> 내지 R<sup>7</sup>는 각각 독립적으로, 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 사이클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 헤테로사이클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 아민기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴아민기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴아민기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 알콕시카르보닐기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 알콕시카르보닐아미노기, 치환 또는 비치환된 C7 내지 C30 아릴옥시카르보닐아미노기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 술폰아미노기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 알케닐기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 알킬닐기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C40 실릴기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C40 실릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 아실기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 아실옥시기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 아실아미노기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 술폰닐기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬티올기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로사이클로티올기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴티올기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴티올기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 우레이드기, 할로젠기, 할로겐 함유기, 시아노기, 히드록실기, 아미노기, 니트로기, 카복실기, 페로세닐기, 또는 이들의 조합이다.

[0021] 본 발명의 다른 일 구현예에서는, 서로 마주하는 양극과 음극, 및

[0022] 상기 양극과 상기 음극 사이에 위치하는 적어도 한 층의 유기층을 포함하고,

[0023] 상기 유기층은 상기 화합물을 포함하는 유기 광전자 소자를 제공한다.

[0024] 본 발명의 또 다른 일 구현예에서는, 전술한 유기 광전자 소자를 포함하는 표시장치를 제공한다.

**발명의 효과**

[0025] 고효율 · 장수명 유기 광전자 소자를 구현할 수 있다.

**도면의 간단한 설명**

[0026] 도 1 및 도 2는 각각 일 구현예에 따른 유기 발광 소자를 도시한 단면도이다.

**발명을 실시하기 위한 구체적인 내용**

[0027] 이하, 본 발명의 구현예를 상세히 설명하기로 한다. 다만, 이는 예시로서 제시되는 것으로, 이에 의해 본 발명이 제한되지는 않으며 본 발명은 후술할 청구범위의 범주에 의해 정의될 뿐이다.

[0028] 본 명세서에서 "치환"이란 별도의 정의가 없는 한, 치환기 또는 화합물 중의 적어도 하나의 수소가 중수소, 할로젠기, 히드록시기, 아미노기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 아민기, 니트로기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C40 실릴기, C1 내지 C30 알킬기, C1 내지 C10 알킬실릴기, C3 내지 C30 시클로알킬기, C6 내지 C30 아릴기, C1 내지 C20 알콕시기, 플루오로기, 트리플루오로메틸기 등의 C1 내지 C10 트리플루오로알킬기 또는 시아노기로 치환된 것을 의미한다.

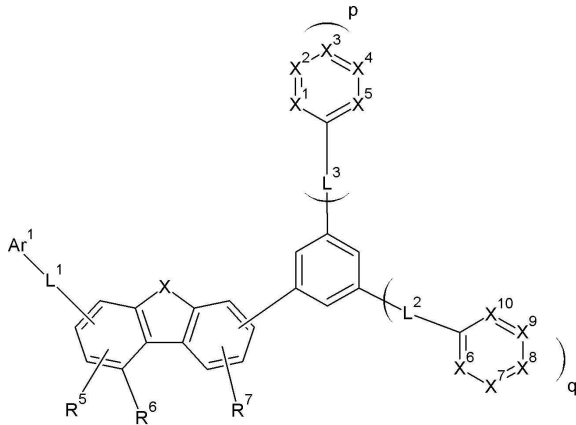
[0029] 또한, 상기 치환된 할로젠기, 히드록시기, 아미노기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 아민기, 니트로기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C40 실릴기, C1 내지 C30 알킬기, C1 내지 C10 알킬실릴기, C3 내지 C30 시클로알킬기, C6 내지 C30 아릴기, C1 내지 C20 알콕시기, 플루오로기, 트리플루오로메틸기 등의 C1 내지 C10 트리플루오로알킬기 또는 시아노기 중 인접한 두 개의 치환기가 융합되어 고리를 형성할 수도 있다. 구체적으로, 상기 치환된 C6 내지 C30 아릴기는 인접한 또 다른 치환된 C6 내지 C30 아릴기와 융합되어 치환 또는 비치환된 플루오렌 고리를 형성할 수 있다.

[0030] 본 명세서에서 "헤테로"란 별도의 정의가 없는 한, 하나의 작용기 내에 N, O, S 및 P로 이루어진 군에서 선택되는 헤테로 원자를 1 내지 3개 함유하고, 나머지는 탄소인 것을 의미한다.

[0031] 본 명세서에서 "알킬(alkyl)기"란 별도의 정의가 없는 한, 지방족 탄화수소기를 의미한다. 알킬기는 어떠한 이 중결합이나 삼중결합을 포함하고 있지 않은 "포화 알킬(saturated alkyl)기"일 수 있다.

- [0032] 상기 알킬기는 C1 내지 C20인 알킬기일 수 있다. 보다 구체적으로 알킬기는 C1 내지 C10 알킬기 또는 C1 내지 C6 알킬기일 수도 있다. 예를 들어, C1 내지 C4 알킬기는 알킬쇄에 1 내지 4 개의 탄소원자가 포함되는 것을 의미하며, 메틸, 에틸, 프로필, 이소-프로필, n-부틸, 이소-부틸, sec-부틸 및 t-부틸로 이루어진 군에서 선택됨을 나타낸다.
- [0033] 상기 알킬기는 구체적인 예를 들어 메틸기, 에틸기, 프로필기, 이소프로필기, 부틸기, 이소부틸기, t-부틸기, 펜틸기, 헥실기, 시클로프로필기, 시클로부틸기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기 등을 의미한다.
- [0034] 본 명세서에서 "아릴(aryl)기"는 환형인 치환기의 모든 원소가 p-오비탈을 가지고 있으며, 이들 p-오비탈이 공액(conjugation)을 형성하고 있는 치환기를 의미하고, 모노시클릭 또는 융합 고리 폴리시클릭(즉, 탄소원자들의 인접한 쌍들을 나눠 가지는 고리) 작용기를 포함한다.
- [0035] 본 명세서에서 "헤테로아릴(heteroaryl)기"는 아릴기 내에 N, O, S 및 P로 이루어진 군에서 선택되는 헤테로 원자를 1 내지 3개 함유하고, 나머지는 탄소인 것을 의미한다. 상기 헤테로아릴기가 융합고리인 경우, 각각의 고리마다 상기 헤테로 원자를 1 내지 3개 포함할 수 있다.
- [0036] 보다 구체적으로, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기 및/또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴기는, 치환 또는 비치환된 페닐기, 치환 또는 비치환된 나프틸기, 치환 또는 비치환된 안트라세닐기, 치환 또는 비치환된 페난트릴렌기, 치환 또는 비치환된 나프타세닐기, 치환 또는 비치환된 피레닐기, 치환 또는 비치환된 바이페닐기, 치환 또는 비치환된 p-터페닐기, 치환 또는 비치환된 m-터페닐기, 치환 또는 비치환된 크리세닐기, 치환 또는 비치환된 트리페닐레닐기, 치환 또는 비치환된 페릴레닐기, 치환 또는 비치환된 인테닐기, 치환 또는 비치환된 퓨라닐기, 치환 또는 비치환된 티오페닐기, 치환 또는 비치환된 피롤릴기, 치환 또는 비치환된 피라졸릴기, 치환 또는 비치환된 이미다졸릴기, 치환 또는 비치환된 트리아졸릴기, 치환 또는 비치환된 옥사졸릴기, 치환 또는 비치환된 티아졸릴기, 치환 또는 비치환된 옥사디아졸릴기, 치환 또는 비치환된 티아디아졸릴기, 치환 또는 비치환된 피리딜기, 치환 또는 비치환된 피리미디닐기, 치환 또는 비치환된 피라지닐기, 치환 또는 비치환된 트리아지닐기, 치환 또는 비치환된 벤조퓨라닐기, 치환 또는 비치환된 벤조티오페닐기, 치환 또는 비치환된 벤즈이미다졸릴기, 치환 또는 비치환된 인돌릴기, 치환 또는 비치환된 퀴놀리닐기, 치환 또는 비치환된 이소퀴놀리닐기, 치환 또는 비치환된 퀴나졸리닐기, 치환 또는 비치환된 퀴녹살리닐기, 치환 또는 비치환된 나프티리디닐기, 치환 또는 비치환된 벤즈옥사진일기, 치환 또는 비치환된 벤즈티아진일기, 치환 또는 비치환된 아크리디닐기, 치환 또는 비치환된 페나진일기, 치환 또는 비치환된 페노티아진일기, 치환 또는 비치환된 페녹사진일기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐기, 치환 또는 비치환된 카바졸릴기, 치환 또는 비치환된 디벤조퓨란일기, 치환 또는 비치환된 디벤조티오펜일기, 또는 이들의 조합일 수 있으나, 이에 제한되지는 않는다.
- [0037] 본 명세서에서, 단일 결합이란 탄소 또는 탄소 이외의 헤테로 원자를 경유하지 않고 직접 연결되는 결합을 의미하는 것으로, 구체적으로 L이 단일 결합이라는 의미는 L과 연결되는 치환기가 중심 코어에 직접 연결되는 것을 의미한다. 즉, 본 명세서에서 단일 결합이란 탄소를 경유하는 메틸렌 등을 의미하는 것이 아니다.
- [0038] 본 명세서에서, 정공 특성이란, HOMO 준위를 따라 전도 특성을 가져 양극에서 형성된 정공의 발광층으로의 주입 및 발광층에서의 이동을 용이하게 하는 특성을 의미한다. 구체적으로, 전자를 밀어내는 특성과도 유사할 수 있다.
- [0039] 또한 전자 특성이란, LUMO 준위를 따라 전도 특성을 가져 음극에서 형성된 전자의 발광층으로의 주입 및 발광층에서의 이동을 용이하게 하는 특성을 의미한다. 구체적으로 전자를 당기는 특성과도 유사할 수 있다.
- [0040] 본 발명의 일 구현예에서는, 하기 화학식 I로 표시되는 화합물을 제공할 수 있다.

[0041] [화학식 I]



[0042]

[0043] 상기 화학식 I에서,

[0044] X¹ 내지 X¹⁰은 각각 독립적으로, N 또는 CR이되, X¹ 내지 X¹⁰ 중 적어도 하나는 N이고,

[0045] p 및 q는 각각 독립적으로 0 또는 1이되, p 및 q가 0은 아니고,

[0046] X는 O, S, SO₂(O=S=O), PO(P=O), NR, CR R', 또는 SiR R' 이고,

[0047] 여기서, R 및 R'은 각각 독립적으로, 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 사이클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 헤테로사이클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 아민기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴아민기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴아민기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 알콕시카르보닐기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 알콕시카르보닐아미노기, 치환 또는 비치환된 C7 내지 C30 아릴옥시카르보닐아미노기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 술포아미노기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 알케닐기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 알키닐기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C40 실릴기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C40 실릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 아실기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 아실옥시기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 아실아미노기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 술포닐기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬티올기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로사이클로티올기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴티올기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴티올기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 우레이드기, 할로젠기, 할로젠 함유기, 시아노기, 히드록실기, 아미노기, 니트로기, 카르복실기, 페로세닐기, 또는 이들의 조합이고,

[0048] L¹ 내지 L³는 각각 독립적으로, 단일 결합, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬렌기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 사이클로알킬렌기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 헤테로사이클로알킬렌기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴렌기, 또는 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 헤테로아릴렌기이고, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴렌아민기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴렌아민기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알콕실렌기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴옥실렌기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 알케닐렌기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 알키닐렌기 또는 이들의 조합이고,

[0049] Ar¹은 치환 또는 비치환된 카바졸릴기이고,

[0050] R⁵ 내지 R⁷는 각각 독립적으로, 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 사이클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 헤테로사이클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 아민기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴아민기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴아민기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 알콕시카르보닐기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 알콕시카르보닐아미노기, 치환 또는 비치환된 C7 내지 C30 아릴옥시카르보닐아미노기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 술포아미노기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 알케닐기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 알키닐기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C40 실릴기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C40 실릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30

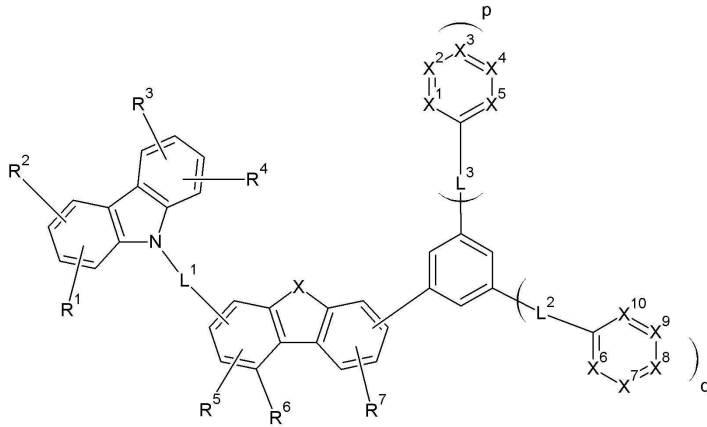


아실기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 아실옥시기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 아실아미노기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 술폰닐기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬티올기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로사이클로티올기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴티올기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴티올기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 우레이드기, 할로젠기, 할로겐 함유기, 시아노기, 히드록실기, 아미노기, 니트로기, 카르복실기, 페로세닐기, 또는 이들의 조합이다.

- [0051] 본 발명의 일 실시예에서, 상기 화학식 I 은  $X^1$  내지  $X^{10}$ 이 각각 독립적으로, N 또는 CR이되,  $X^1$  내지  $X^{10}$  중 적어도 하나는 N이고,
- [0052] p 및 q는 각각 독립적으로 0 또는 1이되, p 및 q가 0은 아니고,
- [0053] X는 O, S,  $SO_2(O=S=O)$ ,  $PO(P=O)$ , CR R', 또는 SiR R' 이고,
- [0054] 여기서, R 및 R'은 각각 독립적으로, 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C40 실릴기이고,
- [0055]  $L^1$  내지  $L^3$ 는 각각 독립적으로, 단일 결합, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬렌기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴렌기, 또는 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 헤테로아릴렌기이고,
- [0056] Ar<sup>1</sup>은 치환 또는 비치환된 카바졸릴기이고,
- [0057]  $R^5$  내지  $R^7$ 는 각각 독립적으로, 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C40 실릴기일 수 있다.
- [0058] 상기 본 발명의 화합물은 카바졸릴기 유도체를 포함하고 이 카바졸릴기에 포함된 질소(N) 유닛은 극성기를 가져 전극과의 상호작용이 가능하며, 이에 따라 전하의 주입이 용이하게 되어 구동 전압이 저하되는 효과가 나타날 수 있다. 또한, 본 발명의 화합물은 카바졸릴기에 정공수송능력이 다른 물질이면서 카바졸릴기의 단점을 해결하고 HT기-ET기를 연결해 줄 수 있는 정공/전자 수송능력이 뛰어난 디벤조티오펜(dibenzoth I ophene), 디벤조퓨란(dibenzofuran), 플루오렌(fluorene) 등을 중간 연결기로 사용하여 전자의 이동을 자유롭게 하였다. 더욱이 카바졸-중간 연결기-페닐-ET와 같이 중간 연결기와 ET기 사이에 페닐기를 둬으로써, 전자오비탈 구조의 큰 변화를 막았다. 본 발명에서 ET기로 사용하고 있는 함질소의 경우 전자오비탈을 당겨오는 그룹(withdrawing group)으로 중간 연결기에 바로 연결될 경우 중간 연결기의 정공/전자 수송능력을 크게 방해할 수 있으며, 전자오비탈을 강하게 당겨오는 그룹인 ET기가 중간 연결기인 디벤조티오펜(dibenzothiophene), 디벤조퓨란(dibenzofuran), 플루오렌(fluorene)기에 바로 붙을 경우 중간 연결기의 전자가 크게 부족하게 되어 우리가 원하는 효과를 낼 수 없다. 따라서, 페닐기를 사이에 고정하여 이런 부정적인 효과를 막았다. 마지막으로 전자 수송 능력 및 전자 수송 능력이 우수한 것으로 널리 알려진 함질소 화합물인 ET기를 연결함으로써 정공/전자를 모두 잘 받을 수 있고 수송능력이 뛰어난 화합물을 구현할 수 있었다.
- [0059] 또한, 이와 동시에 일 구현예에 따른 화합물의 분자 구조 자체는 입체 장애성이 있어 분자 사이의 상호작용이 감소됨으로써 결정화가 억제되고, 이로 인해 유기 EL 소자의 수명이 향상되는 효과가 나타날 수 있고,
- [0060] 분자량이 큰 화합물 중 비대칭 구조를 갖는 화합물의 경우에는 증착 온도가 증가하므로 증착 시 화합물의 분해를 억제하므로 유기 EL 소자의 장수명화가 가능하다.
- [0061] 본 발명의 다른 일 구현예에서는, 상기 화학식 I 은 하기 화학식 II 또는 화학식 III로 표시되는 화합물을 제공할 수 있다.

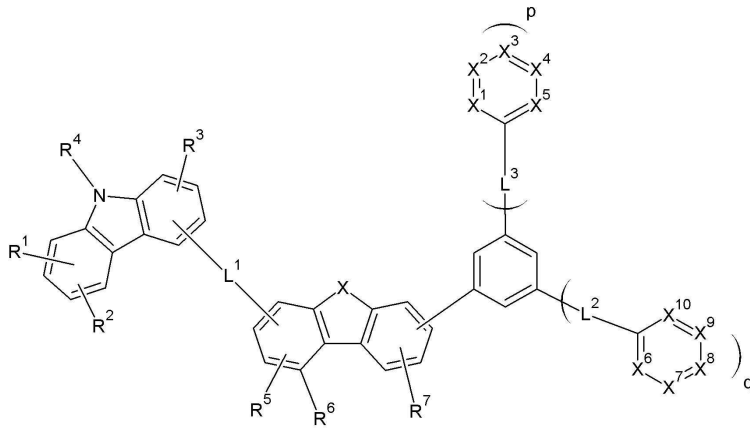


[0062] [화학식 II]



[0063]

[0064] [화학식 III]



[0065]

[0066] 상기 화학식 II 및 화학식 III에서,

[0067]  $X^1$  내지  $X^{10}$ 는 각각 독립적으로, N 또는 CR이되,  $X^1$  내지  $X^{10}$  중 적어도 하나는 N이고,

[0068] p 및 q는 각각 독립적으로 0 또는 1이되, p 및 q가 0은 아니고,

[0069] X는 O, S,  $SO_2(O=S=O)$ ,  $PO(P=O)$ , CR R', 또는 SiR R' 이고,

[0070] 여기서, R 및 R'은 각각 독립적으로, 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C40 실릴기이고,

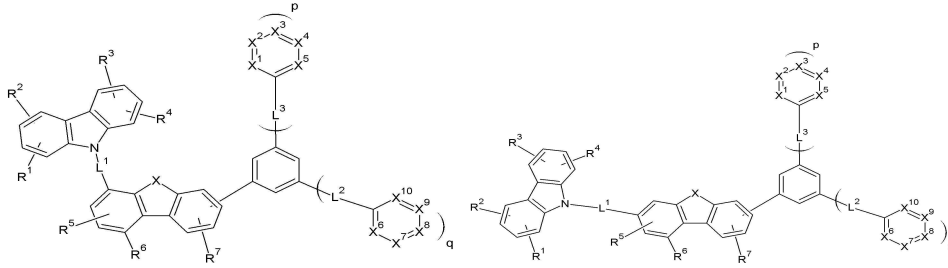
[0071]  $L^1$  내지  $L^3$ 는 각각 독립적으로, 단일 결합, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬렌기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴렌기, 또는 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 헤테로아릴렌기이고,

[0072]  $R^1$  내지  $R^7$ 는 각각 독립적으로, 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C40 실릴기일 수 있다.

[0073] 상기 화합물의 치환기에 따라 적절한 에너지 준위를 가지는 화합물을 유기광전자소자에 사용함으로써, 정공전달 능력 또는 전자전달 능력이 강화되어 효율 및 구동전압 면에서 우수한 효과를 가지고, 전기화학적 및 열적 안정성이 뛰어나 유기광전자소자 구동시 수명 특성을 향상시킬 수 있다.

[0074] 본 발명의 일 실시예에서, 상기 화학식 I은 하기 화학식 1 내지 12 중 어느 하나로 표시될 수 있다:

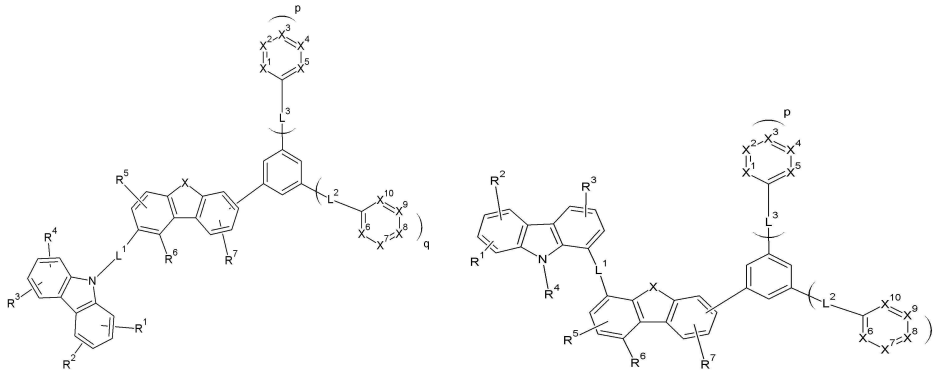
[0075] [화학식 1][화학식 2]



[0076]

[0077]

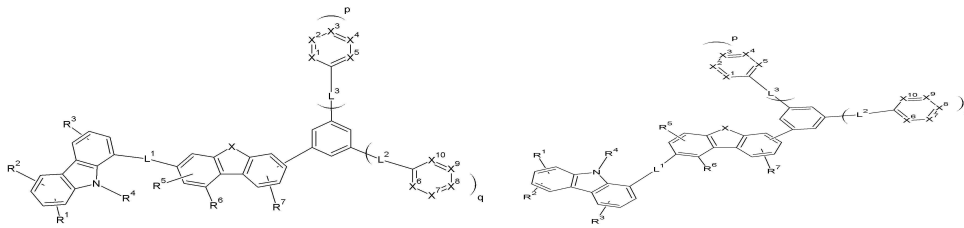
[화학식 3][화학식 4]



[0078]

[0079]

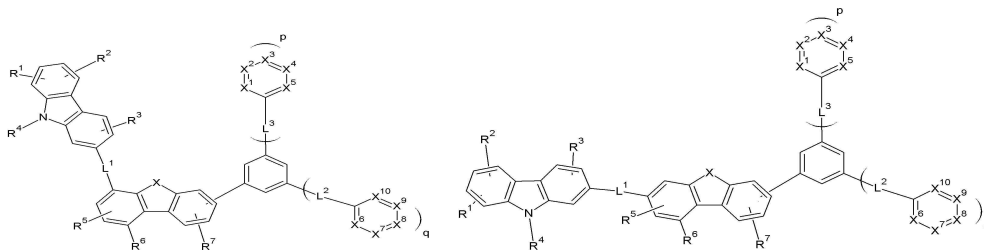
[화학식 5][화학식 6]



[0080]

[0081]

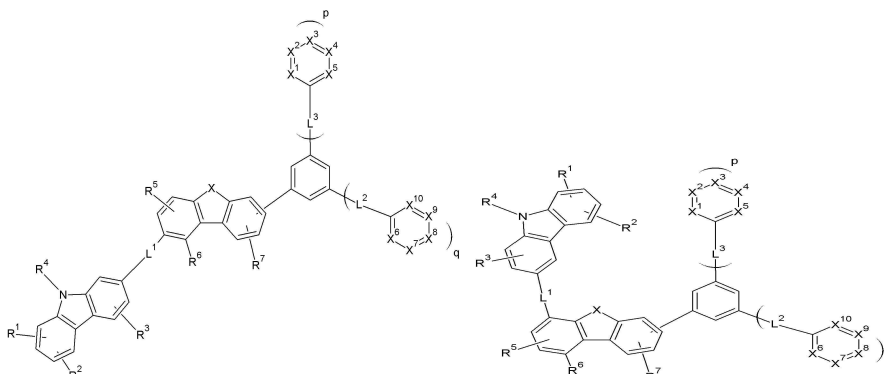
[화학식 7][화학식 8]



[0082]

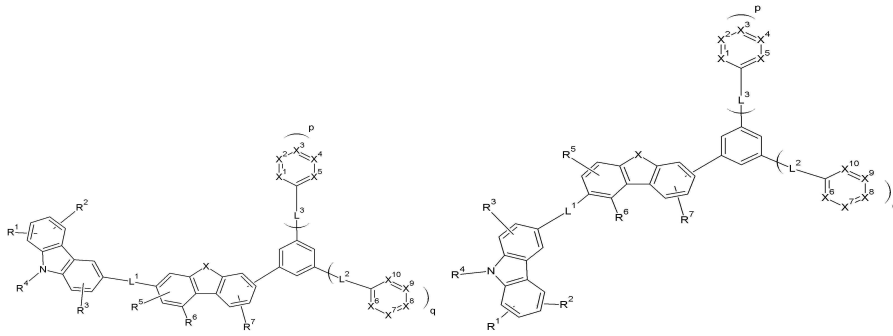
[0083]

[화학식 9][화학식 10]



[0084]

[0085] [화학식 11][화학식 12]



[0086]

[0087] 상기 화학식 1 내지 화학식 12에서,

[0088]  $X^1$  내지  $X^{10}$ 는 각각 독립적으로, N 또는 CR이되,  $X^1$  내지  $X^{10}$  중 적어도 하나는 N이고,

[0089] p 및 q는 각각 독립적으로 0 또는 1이되, p 및 q가 0은 아니고,

[0090] X는 O, S,  $SO_2(O=S=O)$ ,  $PO(P=O)$ , CR R', 또는 SiR R' 이고,

[0091] 여기서, R 및 R'은 각각 독립적으로, 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C3 내지 C40 실릴기 이고,

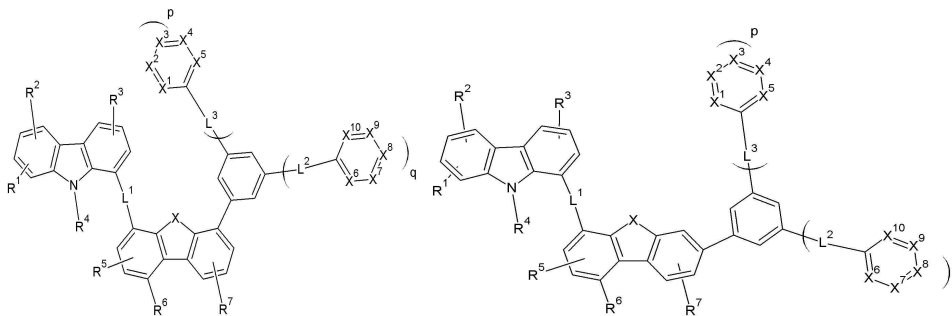
[0092]  $L^1$  내지  $L^3$ 는 각각 독립적으로, 단일 결합, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬렌기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴렌기, 또는 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 헤테로아릴렌기이고,

[0093]  $R^1$  내지  $R^7$ 는 각각 독립적으로, 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C40 실릴기이다.

[0094] 상기 화학식 II 및 III에서,  $R^1$  및  $R^2$ 가 서로 인접하는 경우, 융합하여 고리를 형성할 수 있다.

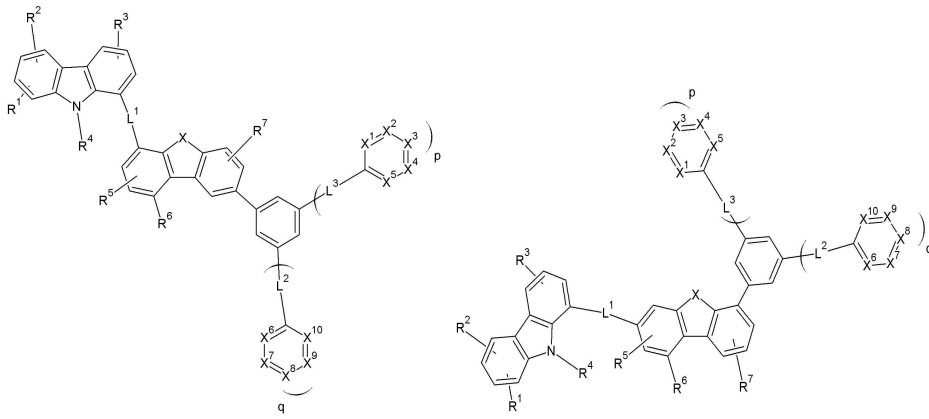
[0095] 또한, 본 발명의 일 실시예에서 화학식 I은 하기 화학식 13 내지 21 중 어느 하나로 표시될 수 있다:

[0096] [화학식 13] [화학식 14]



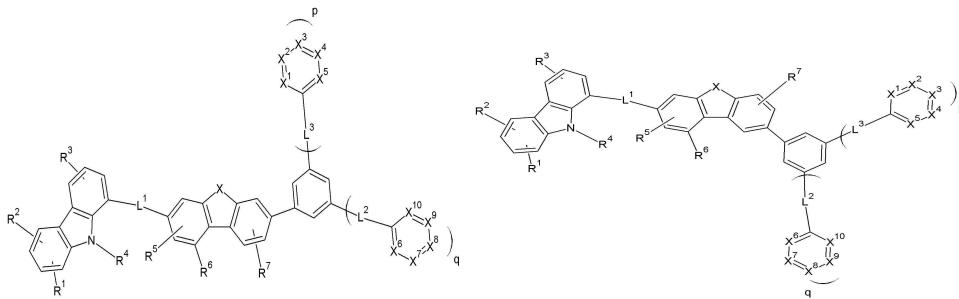
[0097]

[0098] [화학식 15] [화학식 16]



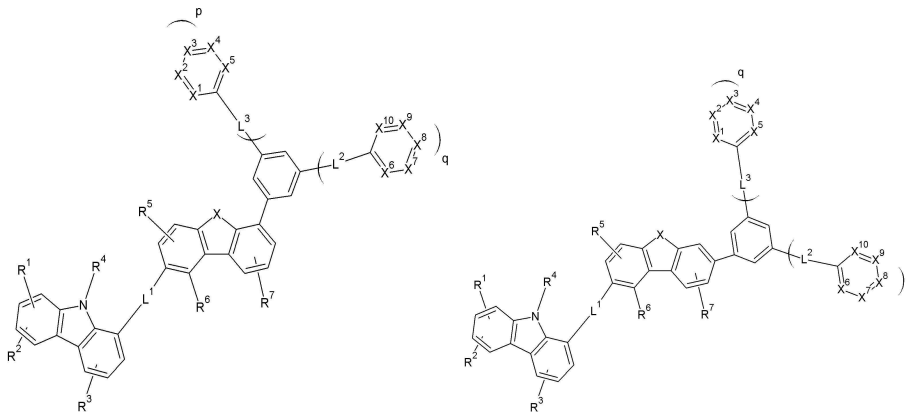
[0099]

[0100] [화학식 17] [화학식 18]



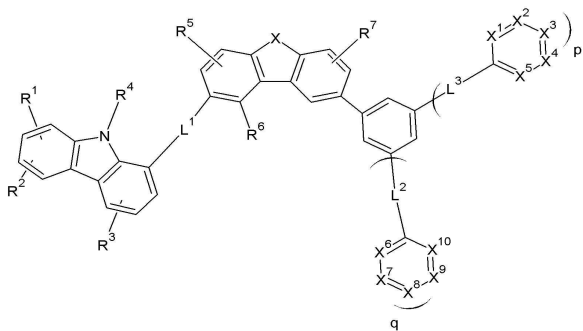
[0101]

[0102] [화학식 19] [화학식 20]



[0103]

[0104] [화학식 21]



[0105]

[0106] 상기 화학식 13 내지 21에서,

[0107]  $X^1$  내지  $X^{10}$ 는 각각 독립적으로, N 또는 CR이되,  $X^1$  내지  $X^{10}$  중 적어도 하나는 N이고,

[0108] p 및 q는 각각 독립적으로 0 또는 1이되, p 및 q가 0은 아니고,

[0109] X는 O, S, SO<sub>2</sub>(O=S=O), PO(P=O), CR R', 또는 SiR R' 이고,

[0110] 여기서, R 및 R'은 각각 독립적으로, 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C3 내지 C40 실릴기 이고,

[0111] L<sup>1</sup> 내지 L<sup>3</sup>는 각각 독립적으로, 단일 결합, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬렌기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴렌기, 또는 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 헤테로아릴렌기이고,

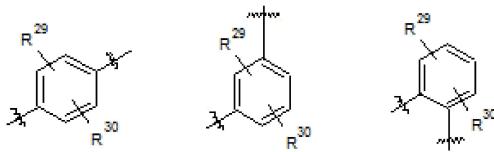
[0112] R<sup>1</sup> 내지 R<sup>7</sup>는 각각 독립적으로, 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C40 실릴기이다.

[0113] 상기 화학식 I에서, 상기 L<sup>1</sup> 내지 L<sup>3</sup>을 선택적으로 조절하여 화합물 전체의 공액(conjugation) 길이를 결정할 수 있으며, 이로부터 삼중항(triplet) 에너지 밴드갭을 조절할 수 있다. 이를 통해 유기광전자소자에서 필요로 하는 재료의 특성을 구현해 낼 수 있다. 또한, 올소(ortho), 파라(para), 메타(meta)의 결합위치 변경을 통해서도 삼중항 에너지 밴드갭을 조절할 수 있다.

[0114] 상기 L<sup>1</sup> 내지 L<sup>3</sup>의 구체적인 예로는 치환 또는 비치환된 페닐렌기, 치환 또는 비치환된 바이페닐렌기, 치환 또는 비치환된 p-터페닐렌기, 치환 또는 비치환된 m-터페닐렌기, 치환 또는 비치환된 o-터페닐렌기, 치환 또는 비치환된 나프틸렌기, 치환 또는 비치환된 안트라세닐렌기, 치환 또는 비치환된 페난트릴렌기, 치환 또는 비치환된 피레닐렌기, 또는 치환 또는 비치환된 플루오레닐렌기 등이 있다.

[0115] 보다 구체적으로, 치환 또는 비치환된 페닐렌기로 하기와 같은 화학식 S-1, S-2, 및 S-3 등을 예로 들 수 있다.

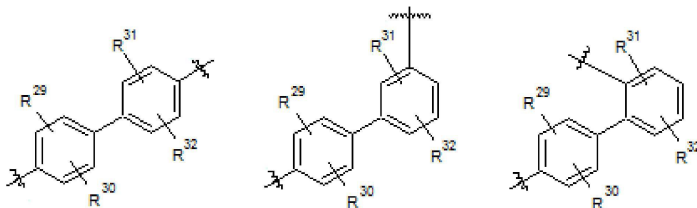
[0116] [화학식 S-1] [화학식 S-2] [화학식 S-3]



[0117]

[0118] 보다 구체적으로, 치환 또는 비치환된 바이페닐렌기로는 하기와 같은 화학식 S-4, S-5, 및 S-6 등을 예로 들 수 있다.

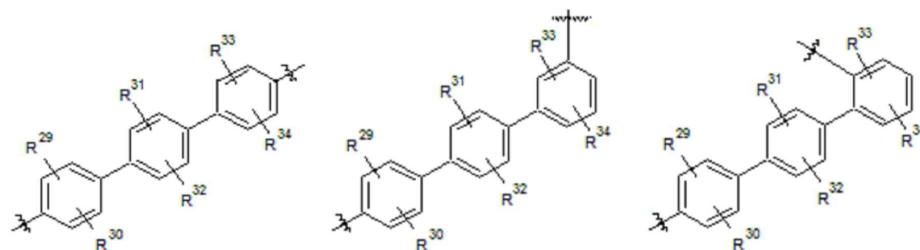
[0119] [화학식 S-4] [화학식 S-5] [화학식 S-6]



[0120]

[0121] 보다 구체적으로, 치환 또는 비치환된 p-터페닐렌기로는 하기와 같은 화학식 S-7, S-8, 및 S-9 등을 예로 들 수 있다.

[0122] [화학식 S-7] [화학식 S-8] [화학식 S-9]

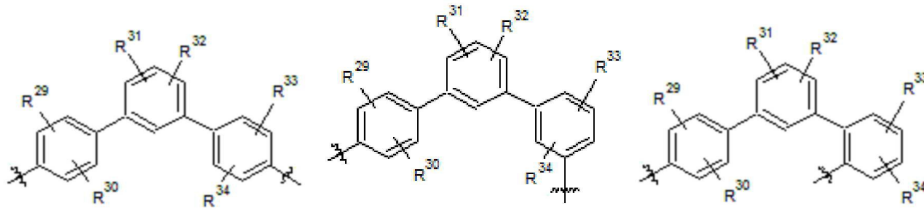


[0123]

[0124] 보다 구체적으로, 치환 또는 비치환된 m-터페닐렌기로는 하기와 같은 화학식 S-10, S-11, 및 S-12 등을 예로 들

수 있다.

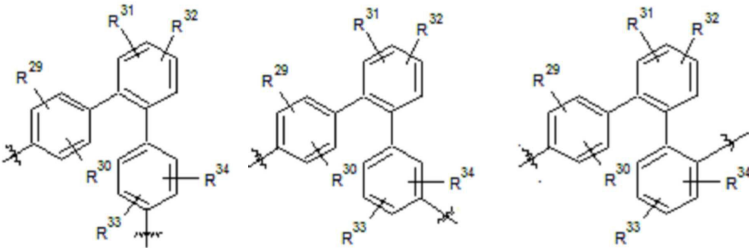
[0125] [화학식 S-10] [화학식 S-11] [화학식 S-12]



[0126]

[0127] 보다 구체적으로, 치환 또는 비치환된 o-터페닐렌기로는 하기와 같은 화학식 S-13, S-14, 및 S-15 등을 예로 들 수 있다.

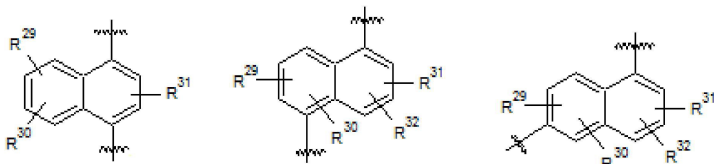
[0128] [화학식 S-13] [화학식 S-14] [화학식 S-15]



[0129]

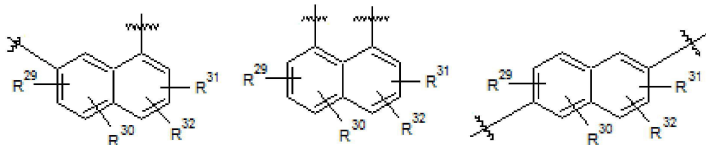
[0130] 보다 구체적으로, 치환 또는 비치환된 나프틸렌기로는 하기와 같은 화학식 S-16, S-17, S-18, S-19, S-20, S-21, 및 S-22 등을 예로 들 수 있다.

[0131] [화학식 S-16] [화학식 S-17] [화학식 S-18]



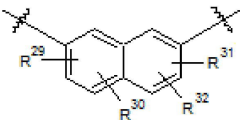
[0132]

[0133] [화학식 S-19] [화학식 S-20] [화학식 S-21]



[0134]

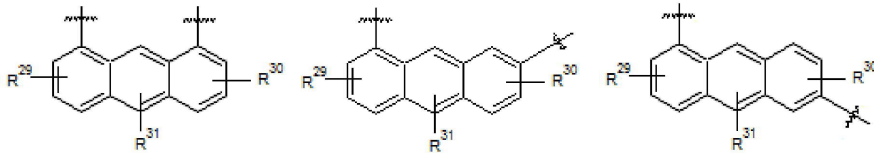
[0135] [화학식 S-22]



[0136]

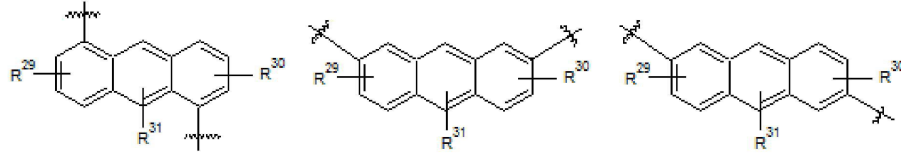
[0137] 보다 구체적으로, 치환 또는 비치환된 안트라세닐렌기로는 하기와 같은 화학식 S-23, S-24, S-25, S-26, S-27, S-28, 및 S-29 등을 예로 들 수 있다.

[0138] [화학식 S-23] [화학식 S-24] [화학식 S-25]



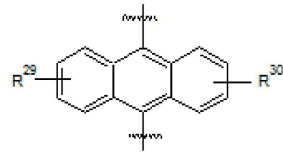
[0139]

[0140] [화학식 S-26]                      [화학식 S-27]                      [화학식 S-28]



[0141]

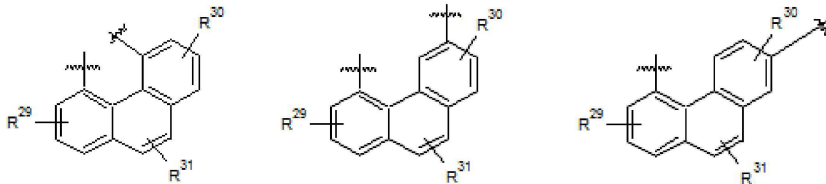
[0142] [화학식 S-29]



[0143]

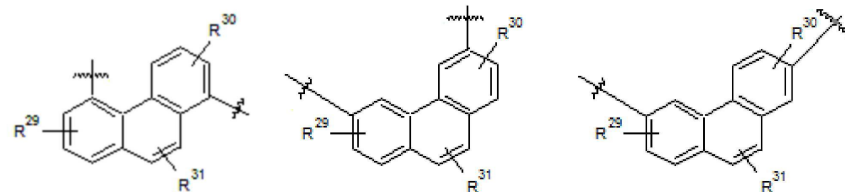
[0144] 보다 구체적으로, 치환 또는 비치환된 페난트릴렌기로는 하기와 같은 화학식 S-30, S-31, S-32, S-33, S-34, S-35, S-36, S-37, S-38, S-39, 및 S-40 등을 예로 들 수 있다.

[0145] [화학식 S-30]                      [화학식 S-31]                      [화학식 S-32]



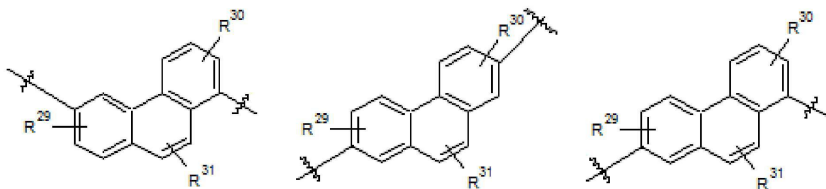
[0146]

[0147] [화학식 S-33]                      [화학식 S-34]                      [화학식 S-35]



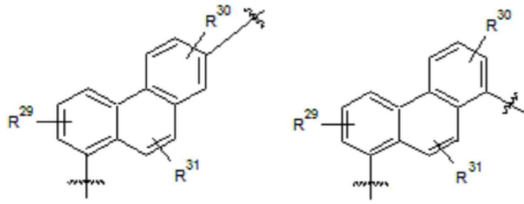
[0148]

[0149] [화학식 S-36]                      [화학식 S-37]                      [화학식 S-38]



[0150]

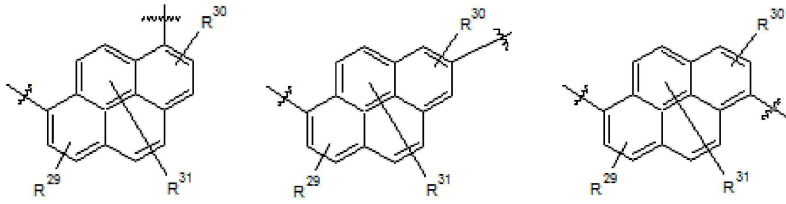
[0151] [화학식 S-39]                      [화학식 S-40]



[0152]

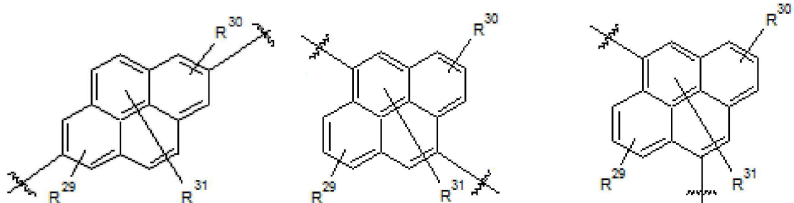
[0153] 보다 구체적으로, 치환 또는 비치환된 피레닐렌기로는 하기와 같은 화학식 S-41, S-42, S-43, S-44, S-45, 및 S-46 등을 예로 들 수 있다.

[0154] [화학식 S-41]                      [화학식 S-42]                      [화학식 S-43]



[0155]

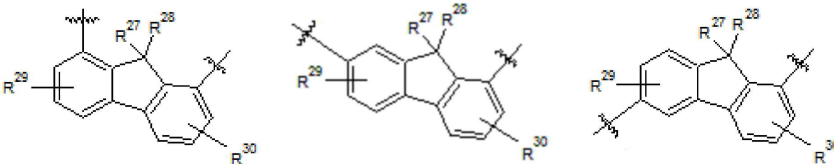
[0156] [화학식 S-44]                      [화학식 S-45]                      [화학식 S-46]



[0157]

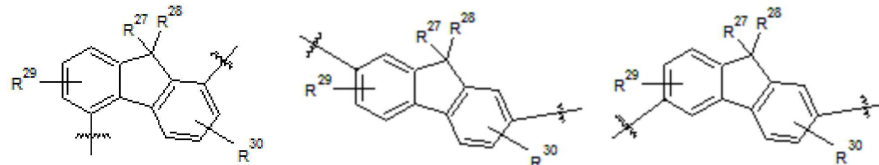
[0158] 보다 구체적으로, 치환 또는 비치환된 플루오레닐렌기로는 하기와 같은 화학식 S-47, S-48, S-49, S-50, S-51, S-52, S-53, S-54, S-55, 및 S-56 등을 예로 들 수 있다.

[0159] [화학식 S-47]                      [화학식 S-48]                      [화학식 S-49]



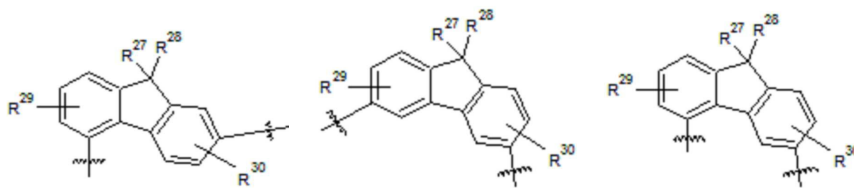
[0160]

[0161] [화학식 S-50]                      [화학식 S-51]                      [화학식 S-52]



[0162]

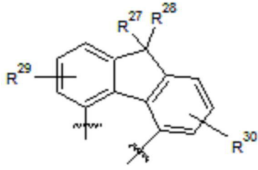
[0163] [화학식 S-53]                      [화학식 S-54]                      [화학식 S-55]



[0164]



[0165] [화학식 S-56]



[0166]

[0167] 상기 화학식 S-1 내지 S-56에서,

[0168]  $R^{27}$  내지  $R^{34}$ 는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 할로젠기, 히드록시기, 아미노기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 아민기, 니트로기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C40 실릴기, C1 내지 C30 알킬기, C1 내지 C10 알킬실릴기, C3 내지 C30 시클로알킬기, C6 내지 C30 아릴기, C1 내지 C20 알콕시기, 플루오로기, 트리플루오로메틸기 등의 C1 내지 C10 트리플루오로알킬기 또는 시아노기일 수 있다.

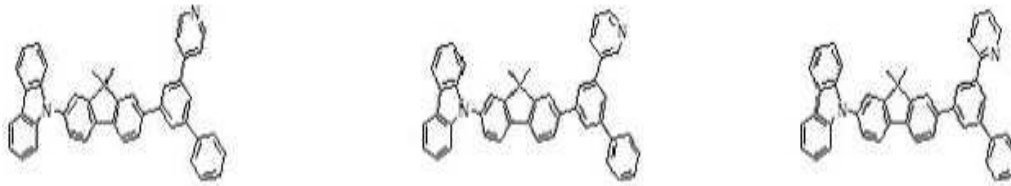
[0169] 상기 화학식 I에서, 상기  $R^5$  및  $R^6$ 는 융합하여 고리를 형성할 수 있다.

[0170] 또한, 본 발명의 일 실시예에서 X는 O, S, CR R' 또는 SiR R' 일 수 있고, 여기서, R 및 R'은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C4 알킬기, 또는 치환 또는 비치환된 페닐기일 수 있다.

[0171] 상기 화합물은 3중항 여기에너지(T1) 2.0eV 이상일 수 있다. 구체적으로 2.0 내지 3.2 eV의 값을 가질 수 있고, 더 구체적으로는 2.7 내지 3.0 eV의 값을 가질 수 있다.

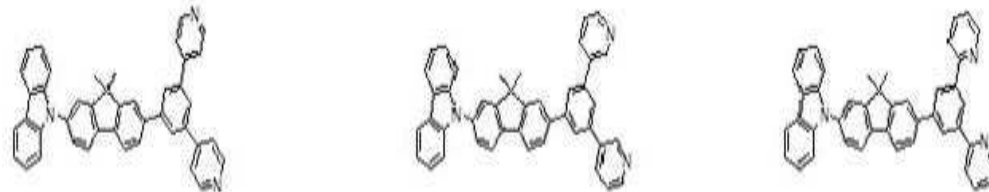
[0172] 본 발명의 일 구현예에 따른 화합물의 구체적인 예는 다음과 같으나, 이에 제한되는 것은 아니다.,

[0173] [ II-1][ II-2][ II-3]



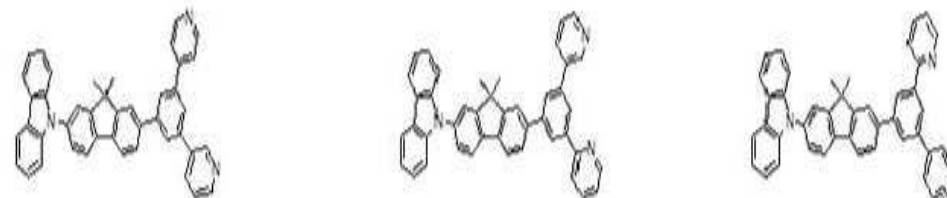
[0174]

[0175] [ II-4][ II-5][ II-6]



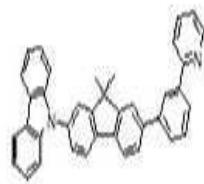
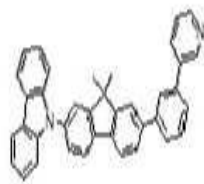
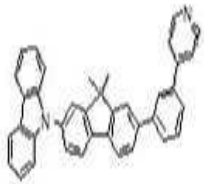
[0176]

[0177] [ II-7][ II-8][ II-9]



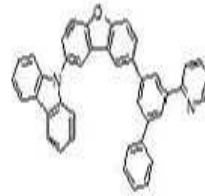
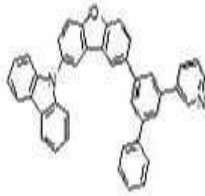
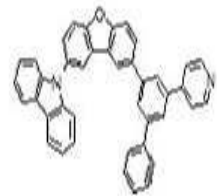
[0178]

[0179] [ II-10][ II-11][ II-12]



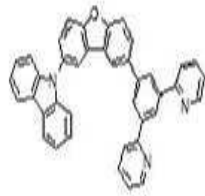
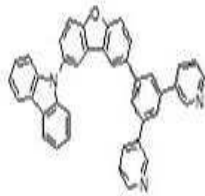
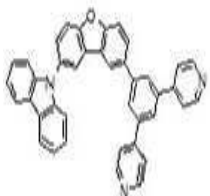
[0180]

[0181] [ II-13][ II-14][ II-15]



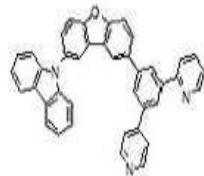
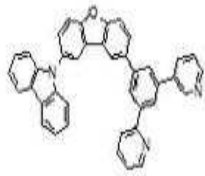
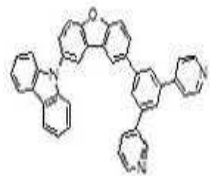
[0182]

[0183] [ II-16][ II-17][ II-18]



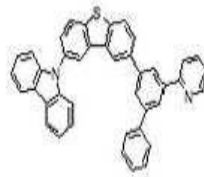
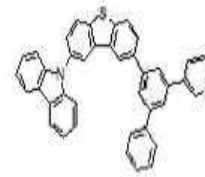
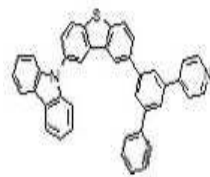
[0184]

[0185] [ II-19][ II-20][ II-21]



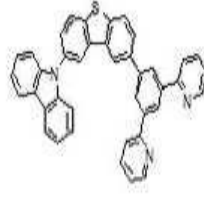
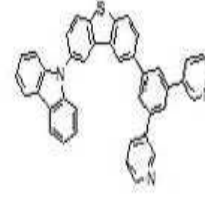
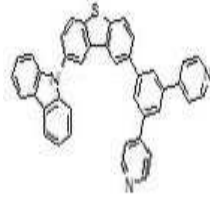
[0186]

[0187] [ II-22][ II-23][ II-24]



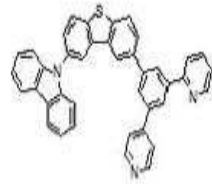
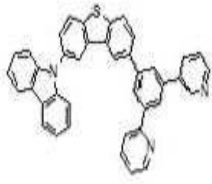
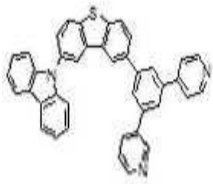
[0188]

[0189] [ II-25][ II-26][ II-27]



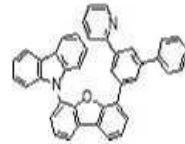
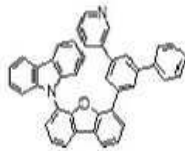
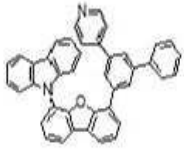
[0190]

[0191] [ II-28][ II-29][ II-30]



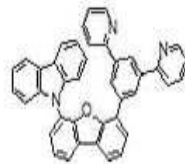
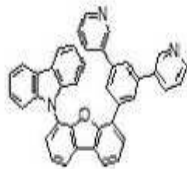
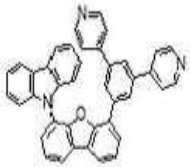
[0192]

[0193] [ II-31][ II-32][ II-33]



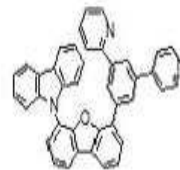
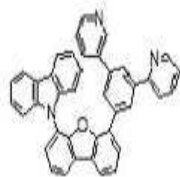
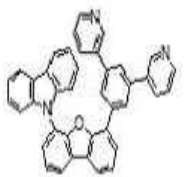
[0194]

[0195] [ II-34][ II-35][ II-36]



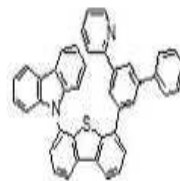
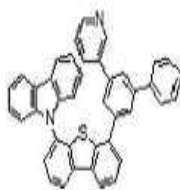
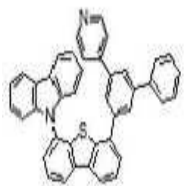
[0196]

[0197] [ II-37][ II-38][ II-39]



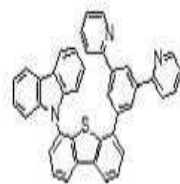
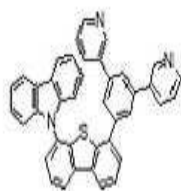
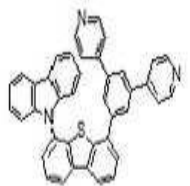
[0198]

[0199] [ II-40][ II-41][ II-42]



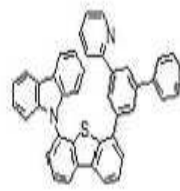
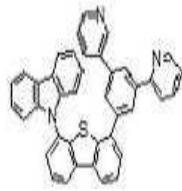
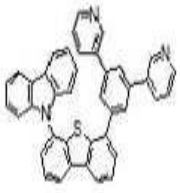
[0200]

[0201] [ II-43][ II-44][ II-45]



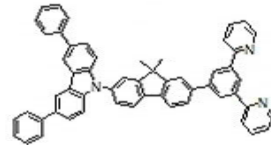
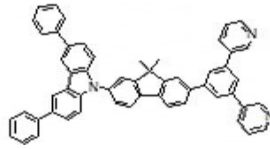
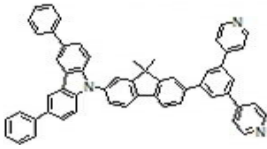
[0202]

[0203] [ II-46][ II-47][ II-48]



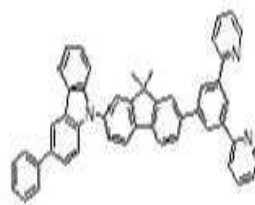
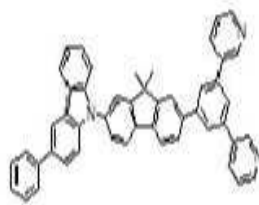
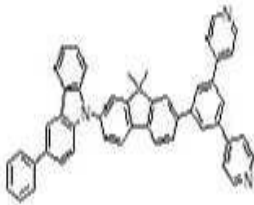
[0204]

[0205] [ II-49][ II-50][ II-51]



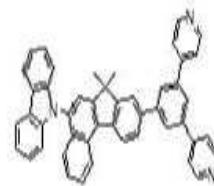
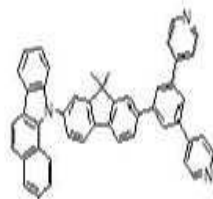
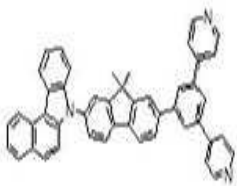
[0206]

[0207] [ II-52][ II-53][ II-54]



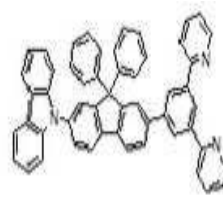
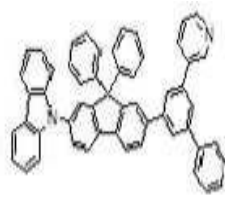
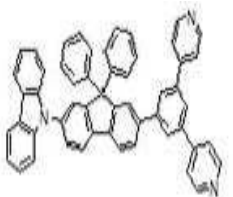
[0208]

[0209] [ II-55][ II-56][ II-57]



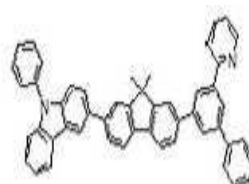
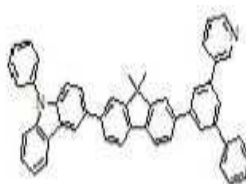
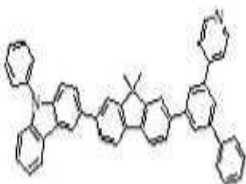
[0210]

[0211] [ II-58][ II-59][ II-60]



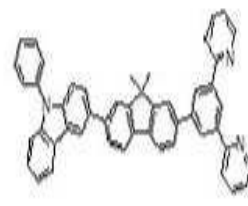
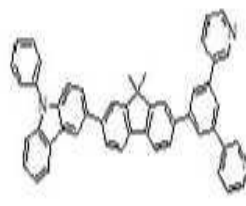
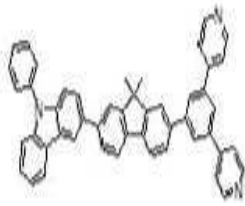
[0212]

[0213] [ III-1][ III-2][ III-3]



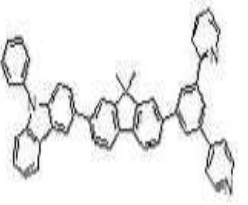
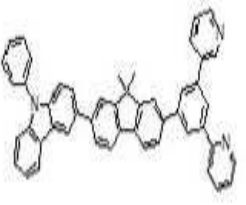
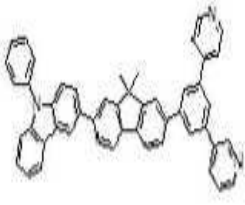
[0214]

[0215] [Ⅲ-4][Ⅲ-5][Ⅲ-6]



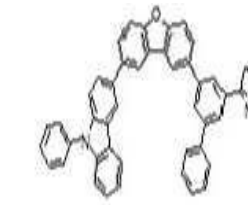
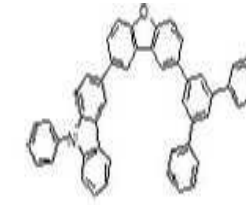
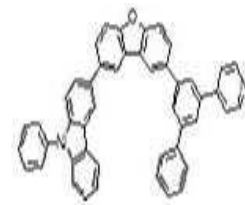
[0216]

[0217] [Ⅲ-7][Ⅲ-8][Ⅲ-9]



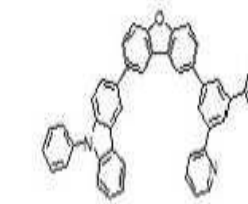
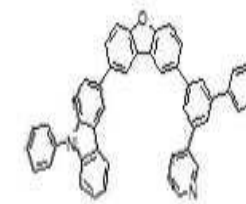
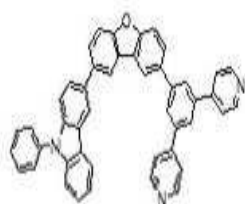
[0218]

[0219] [Ⅲ-10][Ⅲ-11][Ⅲ-12]



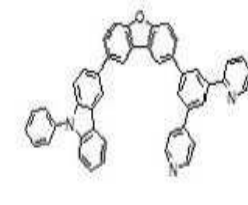
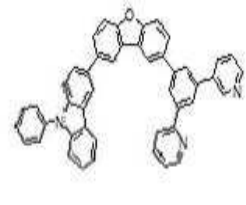
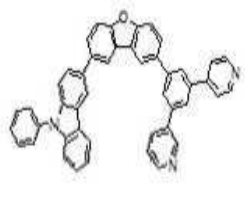
[0220]

[0221] [Ⅲ-13][Ⅲ-14][Ⅲ-15]



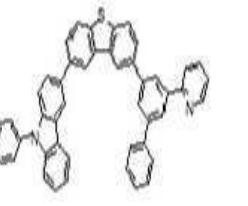
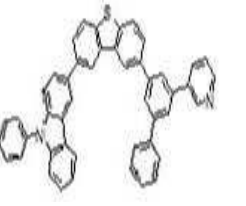
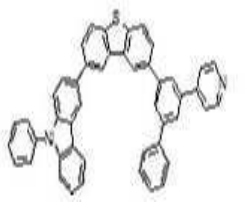
[0222]

[0223] [Ⅲ-16][Ⅲ-17][Ⅲ-18]



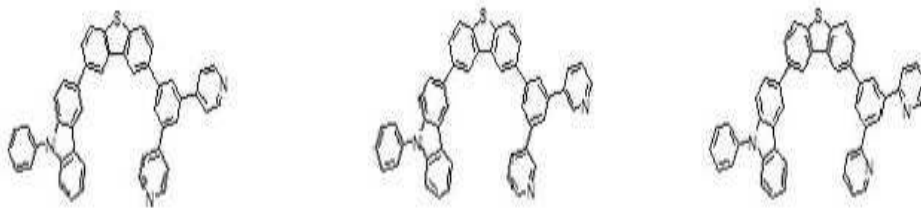
[0224]

[0225] [Ⅲ-19][Ⅲ-20][Ⅲ-21]



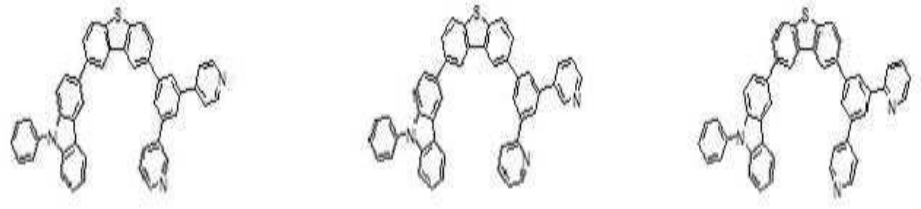
[0226]

[0227] [Ⅲ-22][Ⅲ-23][Ⅲ-24]



[0228]

[0229] [Ⅲ-25][Ⅲ-26][Ⅲ-27]



[0230]

[0231] 이하, 상술한 유기 화합물을 적용한 유기 광전자 소자를 설명한다.

[0232] 상기 유기 광전자 소자는 전기 에너지와 광 에너지를 상호 전환할 수 있는 소자이면 특별히 한정되지 않으며, 예컨대 유기 광전 소자, 유기 발광 소자, 유기 태양 전지 및 유기 감광체 드럼 등을 들 수 있다.

[0233] 여기서는 유기 광전자 소자의 일 예인 유기 발광 소자를 도면을 참고하여 설명한다.

[0234] 도 1 및 도 2는 일 구현예에 따른 유기 발광 소자를 보여주는 단면도이다.

[0235] 도 1을 참고하면, 일 구현예에 따른 유기 광전자 소자(100)는 서로 마주하는 양극(120)과 음극(110), 그리고 양극(120)과 음극(110) 사이에 위치하는 유기층(105)을 포함한다.

[0236] 양극(120)은 예컨대 정공 주입이 원활하도록 일 함수가 높은 도전체로 만들어질 수 있으며, 예컨대 금속, 금속 산화물 및/또는 도전성 고분자로 만들어질 수 있다. 양극(120)은 예컨대 니켈, 백금, 바나듐, 크롬, 구리, 아연, 금과 같은 금속 또는 이들의 합금; 아연산화물, 인듐산화물, 인듐주석산화물(ITO), 인듐아연산화물(IZO)과 같은 금속 산화물; ZnO와 Al 또는 SnO<sub>2</sub>와 Sb와 같은 금속과 산화물의 조합; 폴리(3-메틸티오펜), 폴리(3,4-(에틸렌-1,2-디옥시)티오펜)(polyethylenedioxythiophene: PEDT), 폴리피롤 및 폴리아닐린과 같은 도전성 고분자 등을 들 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0237] 음극(110)은 예컨대 전자 주입이 원활하도록 일 함수가 낮은 도전체로 만들어질 수 있으며, 예컨대 금속, 금속 산화물 및/또는 도전성 고분자로 만들어질 수 있다. 음극(110)은 예컨대 마그네슘, 칼슘, 나트륨, 칼륨, 타이타늄, 인듐, 이트륨, 리튬, 가돌리늄, 알루미늄, 은, 주석, 납, 세슘, 바륨 등과 같은 금속 또는 이들의 합금; LiF/Al, LiO<sub>2</sub>/Al, LiF/Ca, LiF/Al 및 BaF<sub>2</sub>/Ca과 같은 다층 구조 물질을 들 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0238] 유기층(105)은 전술한 유기 화합물을 포함하는 발광층(130)을 포함한다.

[0239] 발광층(130)은 예컨대 전술한 유기 화합물을 단독으로 포함할 수도 있고 전술한 유기 화합물 중 적어도 두 종류를 혼합하여 포함할 수도 있고 전술한 유기 화합물과 다른 화합물을 혼합하여 포함할 수도 있다. 전술한 유기 화합물과 다른 화합물을 혼합하여 포함하는 경우, 예컨대 호스트(host)와 도펀트(dopant)의 형태로 포함될 수 있으며, 전술한 유기 화합물은 예컨대 호스트로 포함될 수 있다. 상기 호스트는 예컨대 인광 호스트일 수 있다. 상기 화합물은 발광층 내 그린 인광 호스트로 이용될 수 있다.

[0240] 전술한 유기 화합물이 호스트로 포함되는 경우, 도펀트는 무기, 유기, 유무기 화합물일 수 있으며 공지된 도펀트 중에서 선택될 수 있다.

[0241] 도 2를 참고하면, 유기 발광 소자(200)는 발광층(230) 외에 정공 보조층(140)을 더 포함한다. 정공 보조층(140)은 양극(120)과 발광층(230) 사이의 정공 주입 및/또는 정공 이동성을 더욱 높이고 전자를 차단할 수



있다. 정공 보조층(140)은 예컨대 정공 수송층, 정공 주입층 및/또는 전자 차단층일 수 있으며, 적어도 1층을 포함할 수 있다. 전술한 유기 화합물은 발광층(230) 및/또는 정공 보조층(140)에 포함될 수 있다. 또한, 본 발명의 일 구현예에서는 도 1 또는 도 2에서 유기박막층(105)으로서 추가로 전자 수송층, 전자 주입층, 정공 주입층 등을 더 포함한 유기 발광 소자일 수도 있다.

[0242] 유기 발광 소자(100, 200)는 기판 위에 양극 또는 음극을 형성한 후, 진공증착법(evaporation), 스퍼터링(sputtering), 플라즈마 도금 및 이온도금과 같은 건식성막법; 또는 스핀코팅(spin coating), 슬릿코팅(slit coating), 침지법(dipping), 유동코팅법(flow coating) 및 잉크젯 인쇄(inkjet printing)과 같은 습식성막법 등으로 유기층을 형성한 후, 그 위에 음극 또는 양극을 형성하여 제조할 수 있다.

[0243] 상술한 유기 발광 소자는 유기 발광 표시 장치에 적용될 수 있다.

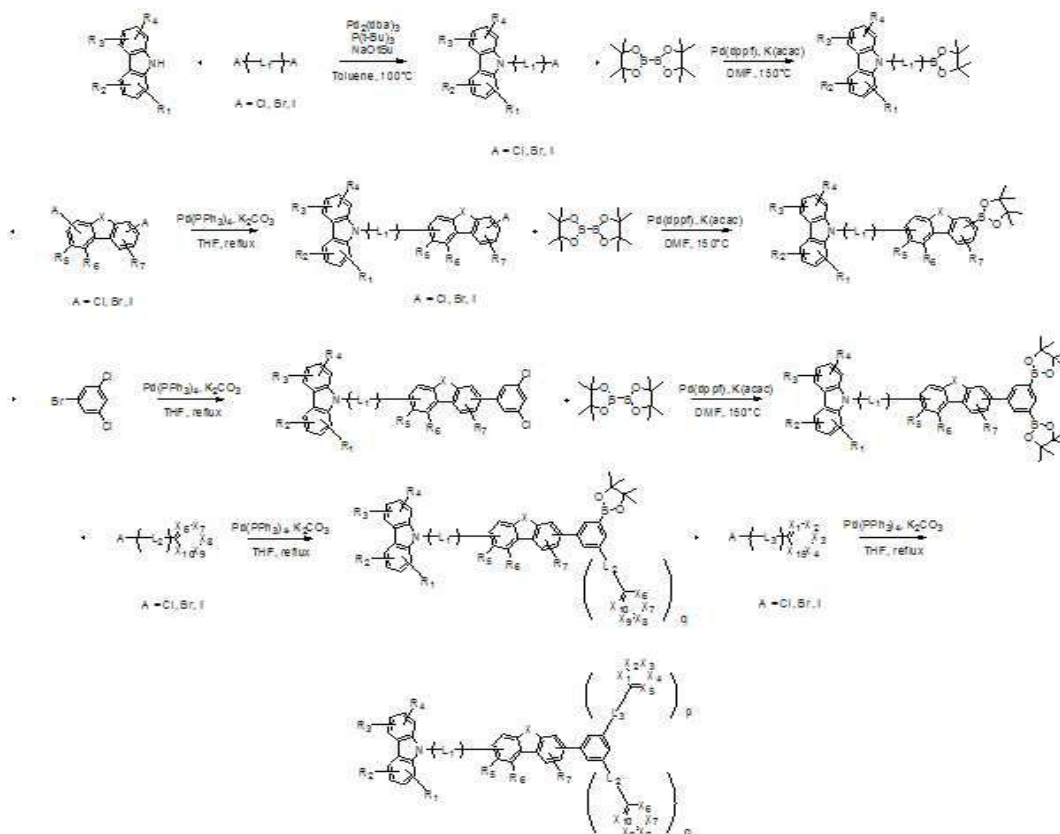
[0244]

[0245] 이하에서는 본 발명의 구체적인 실시예들을 제시한다. 다만, 하기에 기재된 실시예들은 본 발명을 구체적으로 예시하거나 설명하기 위한 것에 불과하며, 이로서 본 발명이 제한되어서는 아니된다.

[0246] (유기 광전자 소자용 화합물의 제조)

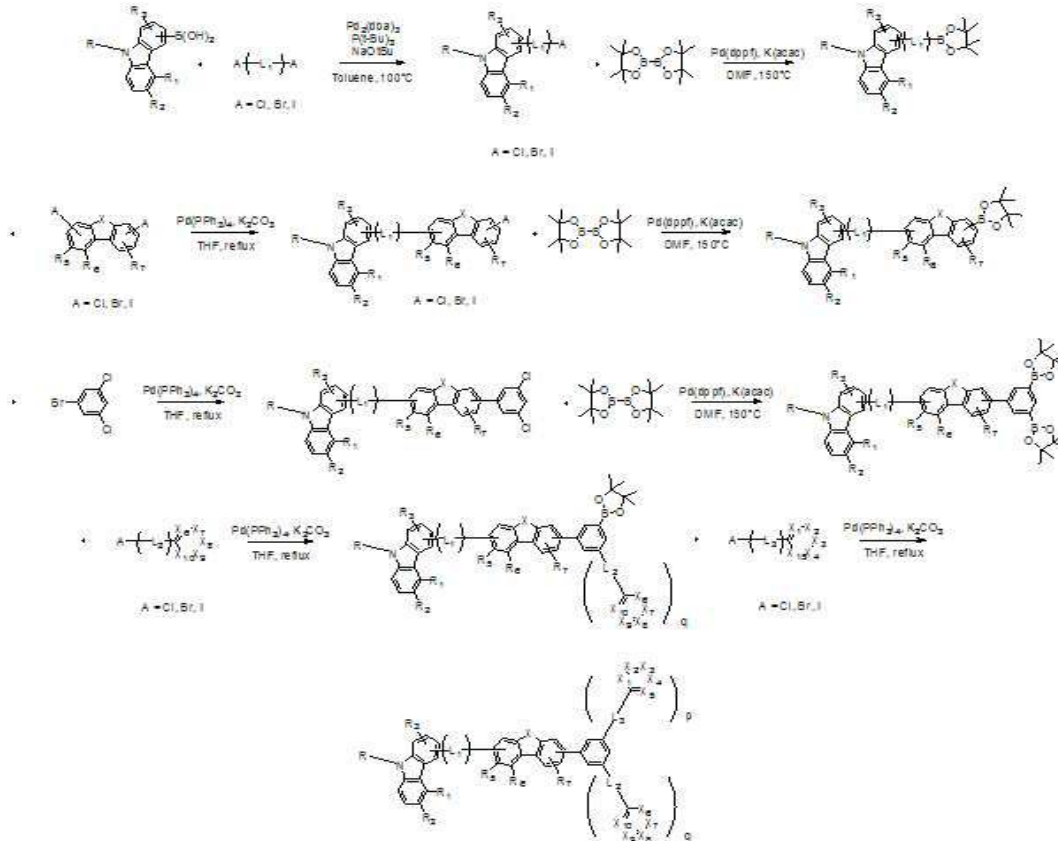
[0247] 유기 광전자 소자용 화합물의 합성

[0248] 화학식 II로 표시되는 화합물의 대표 합성법



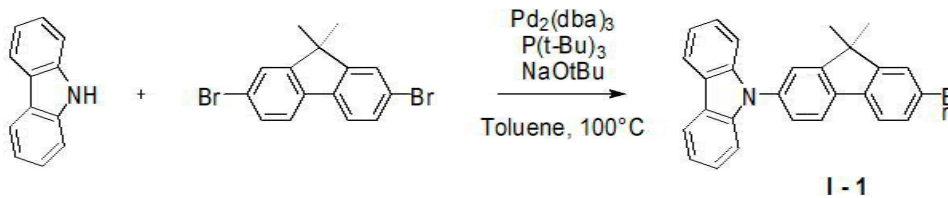
[0249]

[0250] 화학식 III로 표시되는 화합물의 대표 합성법



[0251]

[0252] 합성예 1: 중간체 I-1의 합성



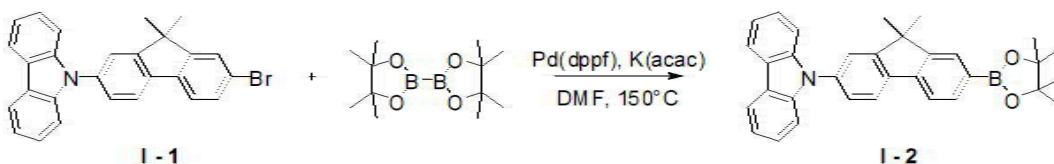
[0253]

[0254] 질소 환경에서 9H-카바졸(100 g, 598 mmol)을 톨루엔 2,000 mL에 녹인 후, 여기에 2,7-디브로모-9,9-디메틸-9H-플루오렌(316 g, 897 mmol), 트리스(디페닐리테나세톤)디팔라듐(o)(5.48 g, 5.98 mmol), 트리스-tert-부틸 포스핀(6.05 g, 29.9 mmol) 그리고 소듐 tert-부톡사이드(69.0 g, 718 mmol)을 순차적으로 넣고 100 °C에서 48 시간 동안 가열하여 환류시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 디클로로메탄(DCM)로 추출한 다음 무수 MgSO<sub>4</sub>로 수분을 제거한 후, 필터하고 감압 농축하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 플래쉬 컬럼 크로마토그래피로 분리 정제하여 화합물 I-1(89.1 g, 34 %)을 얻었다.

[0255] HRMS (70 eV, EI<sup>+</sup>): m/z calcd for C<sub>27</sub>H<sub>20</sub>BrN: 437.0779, found: 437.

[0256] Elemental Analysis: C, 74 %; H, 5 %

[0257] 합성예 2: 중간체 I-2의 합성



[0258]

[0259] 질소 환경에서 I-1(89 g, 203 mmol)을 디메틸포름아마이드(DMF) 750 mL에 녹인 후, 여기에 비스(피나콜라토)디

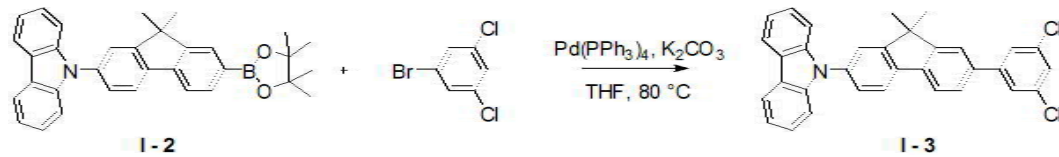


보론(61.9 g, 244 mmol)와 (1,1'-비스(디페닐포스핀)페로센)디클로로팔라듐(II)(1.66 g, 2.03 mmol) 그리고 포타슘 아세테이트(59.8 g, 609 mmol)을 넣고 150 °C에서 5시간 동안 가열하여 환류 시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 혼합물을 필터한 후, 진공오븐에서 건조하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 플래쉬 컬럼 크로마토그래피로 분리 정제하여 화합물 I-2(69.0 g, 70 %)을 얻었다.

[0260] HRMS (70 eV, EI+): m/z calcd for C33H32BN02: 485.2526, found: 485.

[0261] Elemental Analysis: C, 82 %; H, 7 %

[0262] **합성예 3: 중간체 I-3의 합성**



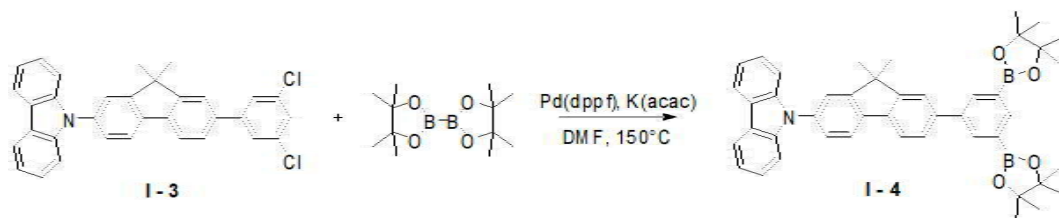
[0263]

[0264] 질소 환경에서 I-2(68 g, 140 mmol)을 테트라히드로퓨란(THF) 500 mL에 녹인 후, 여기에 1-브로모-3,5-디클로로벤젠(38.0 g, 168.1 mmol)와 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐(1.62 g, 1.4 mmol)을 넣고 교반시켰다. 물에 포화된 포타슘 카보네이트(48.4 g, 350 mmol)을 넣고 80 °C에서 12시간 동안 가열하여 환류 시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 디클로로메탄(DCM)로 추출한 다음 무수 MgSO<sub>4</sub>로 수분을 제거한 후, 필터하고 감압 농축하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 플래쉬 컬럼 크로마토그래피로 분리 정제하여 화합물 I-3(61.4 g, 87 %)을 얻었다.

[0265] HRMS (70 eV, EI+): m/z calcd for C33H23Cl2N: 503.1208, found: 503.

[0266] Elemental Analysis: C, 79 %; H, 5 %

[0267] **합성예 4: 중간체 I-4의 합성**



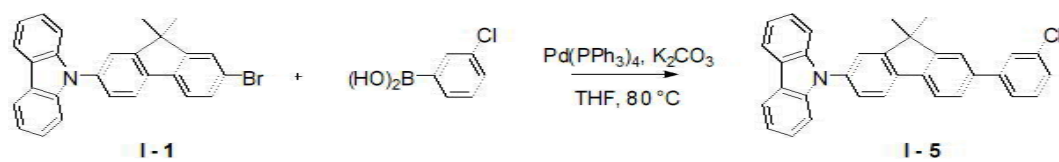
[0268]

[0269] 질소 환경에서 I-3(60 g, 119 mmol)을 디메틸포름아마이드(DMF) 700 mL에 녹인 후, 여기에 비스(피나콜라토)디보론(75.5 g, 298 mmol)와 (1,1'-비스(디페닐포스핀)페로센)디클로로팔라듐(II)(1.94 g, 2.38 mmol) 그리고 포타슘 아세테이트(58.4 g, 595 mmol)을 넣고 150 °C에서 51시간 동안 가열하여 환류 시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 혼합물을 필터한 후, 진공오븐에서 건조하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 플래쉬 컬럼 크로마토그래피로 분리 정제하여 화합물 I-4(56.4 g, 69 %)을 얻었다.

[0270] HRMS (70 eV, EI+): m/z calcd for C45H47B2N04: 687.3691, found: 687.

[0271] Elemental Analysis: C, 79 %; H, 7 %

[0272] **합성예 5: 중간체 I-5의 합성**



[0273]

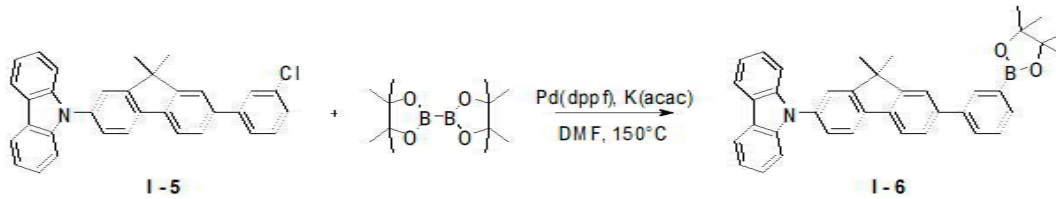
[0274] 질소 환경에서 I-1(50 g, 114 mmol)을 테트라히드로퓨란(THF) 360 mL에 녹인 후, 여기에 3-클로로페닐보로닉

에시드(21.4 g, 137 mmol)와 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐(1.32 g, 1.14 mmol)을 넣고 교반시켰다. 물에 포화된 포타슘 카보네이트(39.4 g, 285 mmol)을 넣고 80 °C에서 8시간 동안 가열하여 환류 시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 디클로로메탄(DCM)로 추출한 다음 무수 MgSO<sub>4</sub>로 수분을 제거한 후, 필터하고 감압 농축 하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 플래쉬 컬럼 크로마토그래피로 분리 정제하여 화합물 I-5(52.5 g, 98 %)을 얻었다.

[0275] HRMS (70 eV, EI<sup>+</sup>): m/z calcd for C<sub>33</sub>H<sub>24</sub>C<sub>1</sub>N: 469.1597, found: 469.

[0276] Elemental Analysis: C, 84 %; H, 5 %

[0277] **합성예 6: 중간체 I-6의 합성**



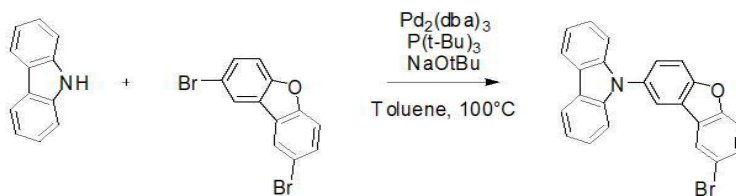
[0278]

[0279] 질소 환경에서 I-5(50 g, 106 mmol)을 디메틸포름아마이드(DMF) 400 mL에 녹인 후, 여기에 비스(피나콜라토)디 보론(32.4 g, 128 mmol)와 (1,1'-비스(디페닐포스핀)페로센)디클로로팔라듐(II)(0.87 g, 1.06 mmol) 그리고 포 타슘 아세테이트(31.2 g, 318 mmol)을 넣고 150 °C에서 46시간 동안 가열하여 환류 시켰다. 반응 완료 후 반응 액에 물을 넣고 혼합물을 필터한 후, 진공오븐에서 건조하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 플래쉬 컬럼 크로마토그 래피로 분리 정제하여 화합물 I-6(38.7 g, 65 %)을 얻었다.

[0280] HRMS (70 eV, EI<sup>+</sup>): m/z calcd for C<sub>39</sub>H<sub>36</sub>BN<sub>2</sub>O<sub>2</sub>: 561.2839, found: 561.

[0281] Elemental Analysis: C, 83 %; H, 6 %

[0282] **합성예 7: 중간체 I-7의 합성**



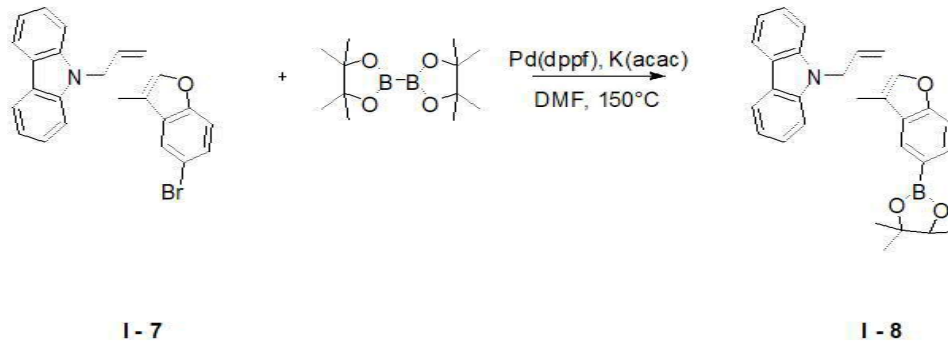
[0283]

[0284] 질소 환경에서 9H-카바졸(100 g, 598 mmol)을 톨루엔 2,000 mL에 녹인 후, 여기에 2,8-디브로모디벤조퓨란(292 g, 897 mmol), 트리스(디페닐리덴아세톤)디팔라듐(o)(5.48 g, 5.98 mmol), 트리스-tert 부틸포스핀(6.05 g, 29.9 mmol) 그리고 소듐 tert-부톡사이드(69.0 g, 718 mmol)을 순차적으로 넣고 100 °C에서 32시간 동안 가열 하여 환류시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 디클로로메탄(DCM)로 추출한 다음 무수 MgSO<sub>4</sub>로 수분을 제 거한 후, 필터하고 감압 농축하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 플래쉬 컬럼 크로마토그래피로 분리 정제하여 화합 물 I-7(98.6 g, 40 %)을 얻었다.

[0285] HRMS (70 eV, EI<sup>+</sup>): m/z calcd for C<sub>24</sub>H<sub>14</sub>BrNO: 411.0259, found: 411.

[0286] Elemental Analysis: C, 70 %; H, 3 %

[0287] **합성예 8: 중간체 I-8의 합성**



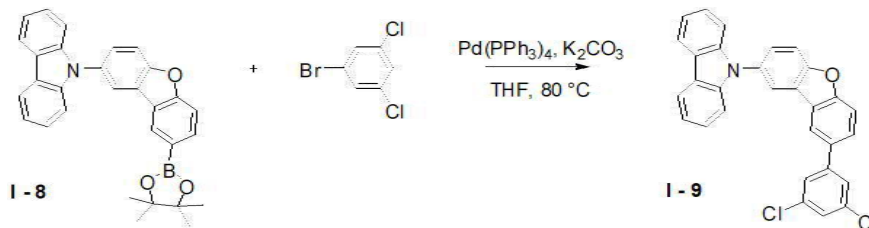
[0288]

[0289] 질소 환경에서 I-7(98 g, 238 mmol)을 디메틸포름아마이드(DMF) 950 mL에 녹인 후, 여기에 비스(피나콜라토)디보론(90.7 g, 357 mmol)와 (1,1'-비스(디페닐포스핀)페로센)디칼로로팔라듐(II)(1.94 g, 2.38 mmol) 그리고 포타슘 아세테이트(70.1 g, 714 mmol)을 넣고 150 °C에서 6시간 동안 가열하여 환류 시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 혼합물을 필터한 후, 진공오븐에서 건조하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 플래쉬 컬럼 크로마토그래피로 분리 정제하여 화합물 I-8(74.3 g, 68 %)을 얻었다.

[0290] HRMS (70 eV, EI+): m/z calcd for C<sub>30</sub>H<sub>26</sub>BN<sub>3</sub>O<sub>3</sub>: 459.2006, found: 459.

[0291] Elemental Analysis: C, 78 %; H, 6 %

[0292] **합성예 9: 중간체 I-9의 합성**



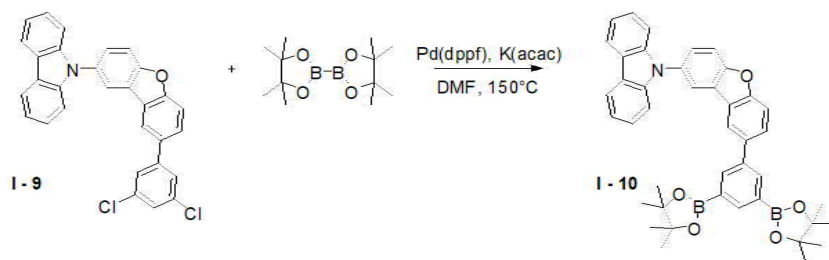
[0293]

[0294] 질소 환경에서 I-8(73 g, 159 mmol)을 테트라히드로퓨란(THF) 600 mL에 녹인 후, 여기에 1-브로모-3,5-디클로로벤젠(43.1 g, 191 mmol)와 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐(1.84 g, 1.59 mmol)을 넣고 교반시켰다. 물에 포화된 포타슘 카보네이트(54.9 g, 398 mmol)을 넣고 80 °C에서 8시간 동안 가열하여 환류 시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 디클로로메탄(DCM)로 추출한 다음 무수 MgSO<sub>4</sub>로 수분을 제거한 후, 필터하고 감압 농축하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 플래쉬 컬럼 크로마토그래피로 분리 정제하여 화합물 I-9(61.6 g, 81 %)을 얻었다.

[0295] HRMS (70 eV, EI+): m/z calcd for C<sub>30</sub>H<sub>17</sub>Cl<sub>2</sub>N<sub>3</sub>O: 477.0687, found: 477.

[0296] Elemental Analysis: C, 75 %; H, 4 %

[0297] **합성예 10: 중간체 I-10의 합성**



[0298]

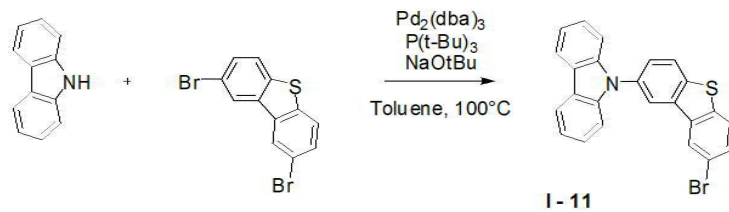
[0299] 질소 환경에서 I-9(60 g, 125 mmol)을 디메틸포름아마이드(DMF) 800 mL에 녹인 후, 여기에 비스(피나콜라토)디

보론(95.6 g, 376 mmol)와 (1,1'-비스(디페닐포스핀)페로센)디클로로팔라듐(II)(3.06 g, 3.75 mmol) 그리고 포타슘 아세테이트(61.3 g, 625 mmol)을 넣고 150 °C에서 55시간 동안 가열하여 환류 시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 혼합물을 필터한 후, 진공오븐에서 건조하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 플래쉬 컬럼 크로마토그래피로 분리 정제하여 화합물 I-10(43.8 g, 53 %)을 얻었다.

[0300] HRMS (70 eV, EI+): m/z calcd for C<sub>42</sub>H<sub>41</sub>B<sub>2</sub>N<sub>0</sub>S: 661.3171, found: 661.

[0301] Elemental Analysis: C, 76 %; H, 6 %

[0302] **합성예 11: 중간체 I-11의 합성**



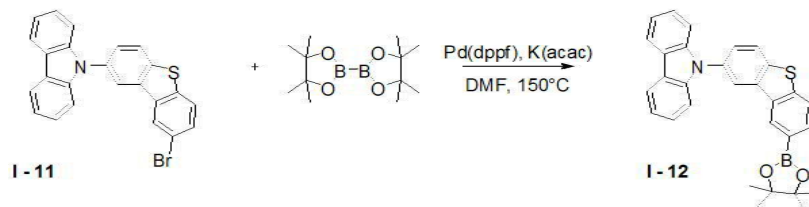
[0303]

[0304] 질소 환경에서 9H-카바졸(100 g, 598 mmol)을 toluene 2,000 mL에 녹인 후, 여기에 2,8-디브로모디벤조티오펜(307 g, 897 mmol), 트리스(디페닐리덴아세톤)디팔라듐(o)(5.48 g, 5.98 mmol), 트리스-tert 부틸포스핀(6.05 g, 29.9 mmol) 그리고 소듐 tert-부톡사이드(69.0 g, 718 mmol)을 순차적으로 넣고 100 °C에서 21시간 동안 가열하여 환류시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 디클로로메탄(DCM)으로 추출한 다음 무수 MgSO<sub>4</sub>로 수분을 제거한 후, 필터하고 감압 농축하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 플래쉬 컬럼 크로마토그래피로 분리 정제하여 화합물 I-11(131 g, 51 %)을 얻었다.

[0305] HRMS (70 eV, EI+): m/z calcd for C<sub>24</sub>H<sub>14</sub>BrNS: 427.0030, found: 427.

[0306] Elemental Analysis: C, 67 %; H, 3 %

[0307] **합성예 12: 중간체 I-12의 합성**



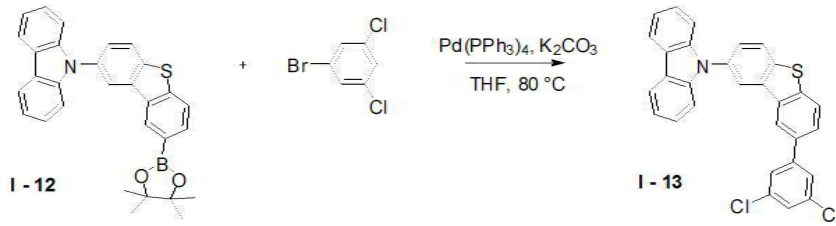
[0308]

[0309] 질소 환경에서 I-11(130 g, 303 mmol)을 디메틸포름아마이드(DMF) 1,300 mL에 녹인 후, 여기에 비스(피나콜라토)디보론(115 g, 455 mmol)와 (1,1'-비스(디페닐포스핀)페로센)디클로로팔라듐(II)(2.47 g, 3.03 mmol) 그리고 포타슘 아세테이트(89.2 g, 909 mmol)을 넣고 150 °C에서 6시간 동안 가열하여 환류 시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 혼합물을 필터한 후, 진공오븐에서 건조하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 플래쉬 컬럼 크로마토그래피로 분리 정제하여 화합물 I-12(101 g, 70 %)을 얻었다.

[0310] HRMS (70 eV, EI+): m/z calcd for C<sub>30</sub>H<sub>26</sub>BN<sub>0</sub>S<sub>2</sub>: 475.1777, found: 475.

[0311] Elemental Analysis: C, 76 %; H, 6 %

[0312] **합성예 13: 중간체 I-13의 합성**



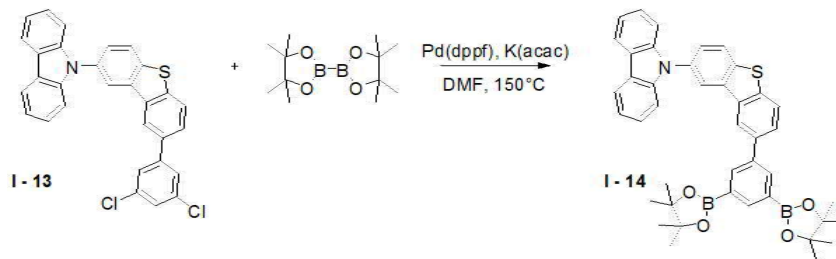
[0313]

[0314] 질소 환경에서 I-12(99 g, 208 mmol)을 테트라히드로푸란(THF) 600 mL에 녹인 후, 여기에 1-브로모-3,5-디클로로벤젠(56.4 g, 250 mmol)와 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐(2.40 g, 2.08 mmol)을 넣고 교반시켰다. 물에 포화된 포타슘 카보네이트(71.9 g, 520 mmol)을 넣고 80 °C에서 6시간 동안 가열하여 환류 시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 디클로로메탄(DCM)로 추출한 다음 무수 MgSO4로 수분을 제거한 후, 필터하고 감압 농축하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 플래쉬 컬럼 크로마토그래피로 분리 정제하여 화합물 I-13(77.1 g, 75 %)을 얻었다.

[0315] HRMS (70 eV, EI+): m/z calcd for C30H17C12NS: 493.0459, found: 493.

[0316] Elemental Analysis: C, 73 %; H, 3 %

[0317] **합성예 14: 중간체 I-14의 합성**



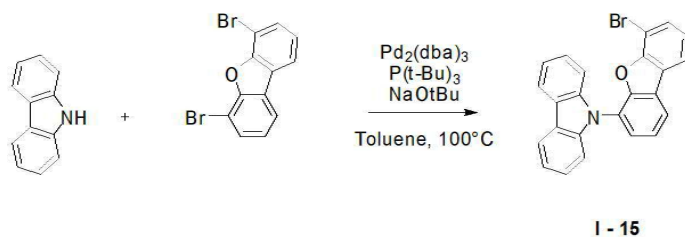
[0318]

[0319] 질소 환경에서 I-13(75 g, 152 mmol)을 디메틸포름아미드(DMF) 1,000 mL에 녹인 후, 여기에 비스(피나콜라토)디보론(116 g, 455 mmol)와 (1,1'-비스(디페닐포스핀)페로센)디클로로팔라듐(II)(3.72 g, 4.56 mmol) 그리고 포타슘 아세테이트(74.6 g, 760 mmol)을 넣고 150 °C에서 53시간 동안 가열하여 환류 시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 혼합물을 필터한 후, 진공오븐에서 건조하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 플래쉬 컬럼 크로마토그래피로 분리 정제하여 화합물 I-14(50.5 g, 49 %)을 얻었다.

[0320] HRMS (70 eV, EI+): m/z calcd for C42H41B2N04S: 677.2942, found: 677.

[0321] Elemental Analysis: C, 74 %; H, 6 %

[0322] **합성예 15: 중간체 I-15의 합성**



[0323]

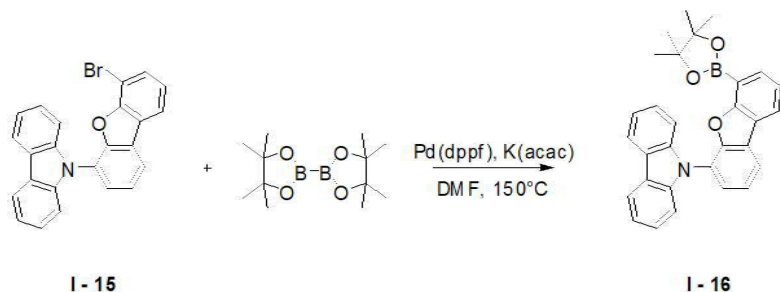
[0324] 질소 환경에서 9H-카바졸(100 g, 598 mmol)을 톨루엔 2,000 mL에 녹인 후, 여기에 4,6-디브로모디벤조퓨란(292 g, 897 mmol), 트리스(디페닐리덴아세톤)디팔라듐(o)(5.48 g, 5.98 mmol), 트리스-tert 부틸포스핀(6.05 g, 29.9 mmol) 그리고 소듐 tert-부톡사이드(69.0 g, 718 mmol)을 순차적으로 넣고 100 °C에서 35시간 동안 가열하여 환류시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 디클로로메탄(DCM)로 추출한 다음 무수 MgSO4로 수분을 제거한 후, 필터하고 감압 농축하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 플래쉬 컬럼 크로마토그래피로 분리 정제하여 화합물 I-15(100 g, 75 %)을 얻었다.

물 I-15(93.7 g, 38 %)을 얻었다.

[0325] HRMS (70 eV, EI+): m/z calcd for C<sub>24</sub>H<sub>14</sub>BrNO: 411.0259, found: 411.

[0326] Elemental Analysis: C, 70 %; H, 3 %

[0327] **합성예 16: 중간체 I-16의 합성**



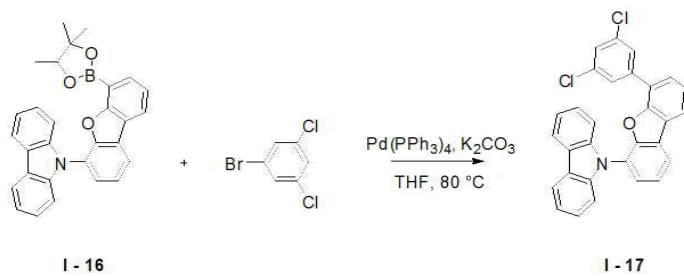
[0328]

[0329] 질소 환경에서 I-15(93 g, 226 mmol)을 디메틸포름아마이드(DMF) 900 mL에 녹인 후, 여기에 비스(피나콜라토) 디보론(85.9 g, 338 mmol)와 (1,1'-비스(디페닐포스핀)페로센)디클로로팔라듐(II)(1.85 g, 2.26 mmol) 그리고 포타슘 아세테이트(66.5 g, 678 mmol)을 넣고 150 °C에서 8시간 동안 가열하여 환류 시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 혼합물을 필터한 후, 진공오븐에서 건조하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 플래쉬 컬럼 크로마토그래피로 분리 정제하여 화합물 I-16(67.5 g, 65 %)을 얻었다.

[0330] HRMS (70 eV, EI+): m/z calcd for C<sub>30</sub>H<sub>26</sub>BN<sub>3</sub>O<sub>3</sub>: 459.2006, found: 459.

[0331] Elemental Analysis: C, 78 %; H, 6 %

[0332] **합성예 17: 중간체 I-17의 합성**



[0333]

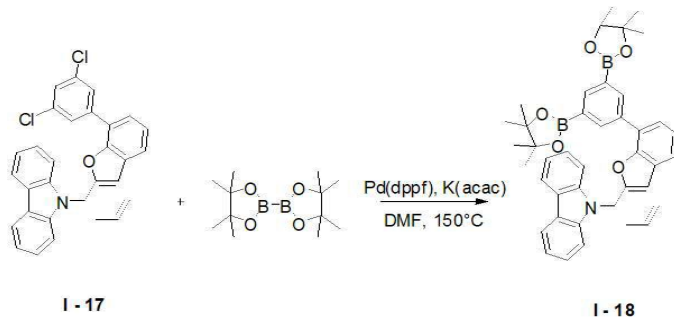
[0334] 질소 환경에서 I-16(65 g, 142 mmol)을 테트라히드로퓨란(THF) 500 mL에 녹인 후, 여기에 1-브로모-3,5-디클로로벤젠(38.4 g, 170 mmol)와 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐(1.64 g, 1.42 mmol)을 넣고 교반시켰다. 물에 포화된 포타슘 카보네이트(49.1 g, 355 mmol)을 넣고 80 °C에서 8시간 동안 가열하여 환류 시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 디클로로메탄(DCM)로 추출한 다음 무수 MgSO<sub>4</sub>로 수분을 제거한 후, 필터하고 감압 농축하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 플래쉬 컬럼 크로마토그래피로 분리 정제하여 화합물 I-17(53.7 g, 79 %)을 얻었다.

[0335] HRMS (70 eV, EI+): m/z calcd for C<sub>30</sub>H<sub>17</sub>Cl<sub>2</sub>N<sub>3</sub>O: 477.0687, found: 477.

[0336] Elemental Analysis: C, 75 %; H, 4 %



[0337] **합성예 18: 중간체 I-18의 합성**



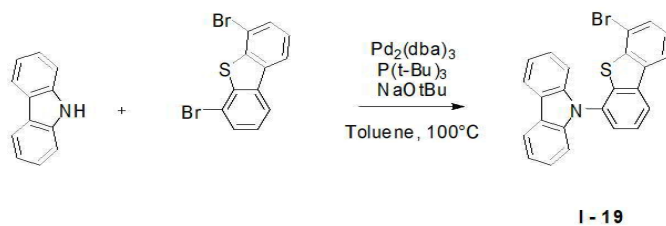
[0338]

[0339] 질소 환경에서 I-17(50 g, 105 mmol)을 디메틸포름아마이드(DMF) 650 mL에 녹인 후, 여기에 비스(피나콜라토)디보론(80.0 g, 315 mmol)와 (1,1'-비스(디페닐포스핀)페로센)디클로로팔라듐(II)(2.57 g, 3.15 mmol) 그리고 포타슘 아세테이트(51.5 g, 525 mmol)을 넣고 150 °C에서 60시간 동안 가열하여 환류 시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 혼합물을 필터한 후, 진공오븐에서 건조하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 플래쉬 컬럼 크로마토그래피로 분리 정제하여 화합물 I-18(34.7 g, 50 %)을 얻었다.

[0340] HRMS (70 eV, EI+): m/z calcd for C<sub>42</sub>H<sub>41</sub>B<sub>2</sub>N<sub>0</sub>O<sub>5</sub>: 661.3171, found: 661.

[0341] Elemental Analysis: C, 76 %; H, 6 %

[0342] **합성예 19: 중간체 I-19의 합성**



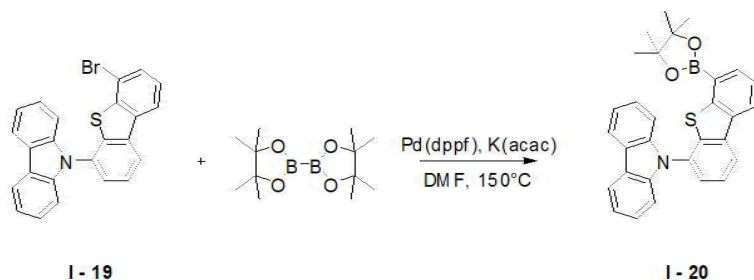
[0343]

[0344] 질소 환경에서 9H-카바졸(100 g, 598 mmol)을 톨루엔 2,000 mL에 녹인 후, 여기에 4,6-디브로모디벤조퓨란(307 g, 897 mmol), 트리스(디페닐리덴아세톤)디팔라듐(o)(5.48 g, 5.98 mmol), 트리스-tert 부틸포스핀(6.05 g, 29.9 mmol) 그리고 소듐 tert-부톡사이드(69.0 g, 718 mmol)을 순차적으로 넣고 100 °C에서 30시간 동안 가열하여 환류시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 디클로로메탄(DCM)로 추출한 다음 무수 MgSO<sub>4</sub>로 수분을 제거한 후, 필터하고 감압 농축하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 플래쉬 컬럼 크로마토그래피로 분리 정제하여 화합물 I-19(112.7 g, 44 %)을 얻었다.

[0345] HRMS (70 eV, EI+): m/z calcd for C<sub>24</sub>H<sub>14</sub>BrNS: 427.0030, found: 427.

[0346] Elemental Analysis: C, 67 %; H, 3 %

[0347] **합성예 20: 중간체 I-20의 합성**



[0348]

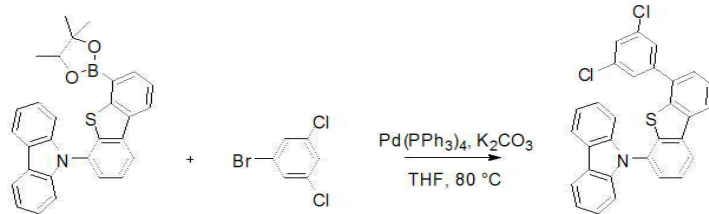
[0349] 질소 환경에서 I-19(111 g, 259 mmol)을 디메틸포름아마이드(DMF) 1,000 mL에 녹인 후, 여기에 비스(피나콜라토)디보론(98.7 g, 389 mmol)와 (1,1'-비스(디페닐포스핀)페로센)디클로로팔라듐(II)(2.12 g, 2.59 mmol) 그리

고 포타슘 아세테이트(76.3 g, 777 mmol)을 넣고 150 °C에서 7시간 동안 가열하여 환류 시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 혼합물을 필터한 후, 진공오븐에서 건조하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 플래쉬 컬럼 크로마토그래피로 분리 정제하여 화합물 I-20(86.2 g, 70 %)을 얻었다.

[0350] HRMS (70 eV, EI+): m/z calcd for C<sub>30</sub>H<sub>26</sub>NO<sub>2</sub>S: 475.1777, found: 475.

[0351] Elemental Analysis: C, 76 %; H, 6 %

[0352] **합성예 21: 중간체 I-21의 합성**



[0353] I-20

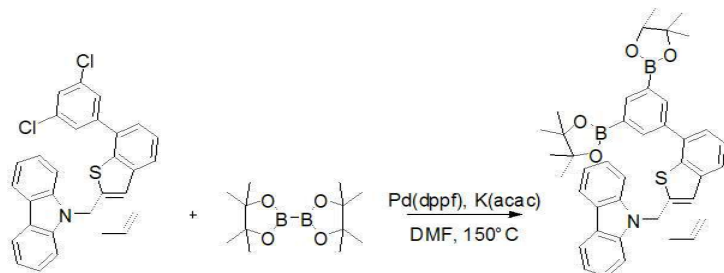
I-21

[0354] 질소 환경에서 I-20(85 g, 179 mmol)을 테트라히드로퓨란(THF) 700 mL에 녹인 후, 여기에 1-브로모-3,5-디클로로벤젠(48.5 g, 215 mmol)와 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐(2.07 g, 1.79 mmol)을 넣고 교반시켰다. 물에 포화된 포타슘 카보네이트(61.8 g, 448 mmol)을 넣고 80 °C에서 7시간 동안 가열하여 환류 시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 디클로로메탄(DCM)로 추출한 다음 무수 MgSO<sub>4</sub>로 수분을 제거한 후, 필터하고 감압 농축하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 플래쉬 컬럼 크로마토그래피로 분리 정제하여 화합물 I-21(72.6 g, 82 %)을 얻었다.

[0355] HRMS (70 eV, EI+): m/z calcd for C<sub>30</sub>H<sub>17</sub>Cl<sub>2</sub>NS: 493.0459, found: 493.

[0356] Elemental Analysis: C, 73 %; H, 3 %

[0357] **합성예 22: 중간체 I-22의 합성**



[0358] I-21

I-22

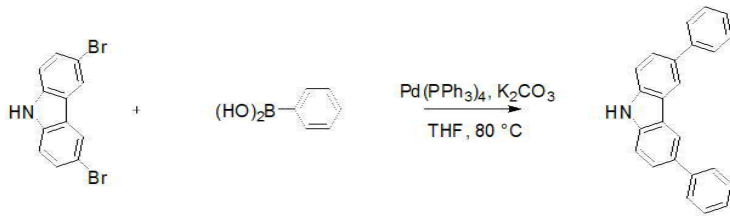
[0359] 질소 환경에서 I-21(70 g, 142 mmol)을 디메틸포름아미드(DMF) 650 mL에 녹인 후, 여기에 비스(피나콜라토)디보론(108 g, 425 mmol)와 (1,1'-비스(디페닐포스핀)페로센)디클로로팔라듐(II)(3.48 g, 4.26 mmol) 그리고 포타슘 아세테이트(69.7 g, 710 mmol)을 넣고 150 °C에서 55시간 동안 가열하여 환류 시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 혼합물을 필터한 후, 진공오븐에서 건조하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 플래쉬 컬럼 크로마토그래피로 분리 정제하여 화합물 I-22(52.9 g, 55 %)을 얻었다.

[0360] HRMS (70 eV, EI+): m/z calcd for C<sub>42</sub>H<sub>41</sub>B<sub>2</sub>N<sub>0</sub>4S: 677.2942, found: 677.

[0361] Elemental Analysis: C, 74 %; H, 6 %



[0362] **합성예 23: 중간체 I-23의 합성**



I - 23

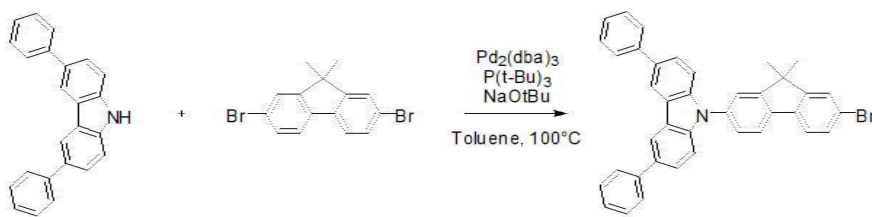
[0363]

[0364] 질소 환경에서 3,6-디브로모-9H-카바졸(100 g, 308 mmol)을 테트라히드로퓨란(THF) 700 mL에 녹인 후, 여기에 페닐보로닉 에시드(45.1 g, 370 mmol)와 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐(10.7 g, 9.24 mmol)을 넣고 교반시켰다. 물에 포화된 포타슘 카보네이트(213 g, 1,540 mmol)을 넣고 80 °C에서 16시간 동안 가열하여 환류시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 DCM로 추출한 다음 무수 MgSO4로 수분을 제거한 후, 필터하고 감압 농축하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 플래쉬 컬럼 크로마토그래피로 분리 정제하여 화합물 I-23(74.8 g, 76 %)을 얻었다.

[0365] HRMS (70 eV, EI+): m/z calcd for C24H17N: 319.1361, found: 319.

[0366] Elemental Analysis: C, 90 %; H, 5 %

[0367] **합성예 24: 중간체 I-24의 합성**



I - 23

I - 24

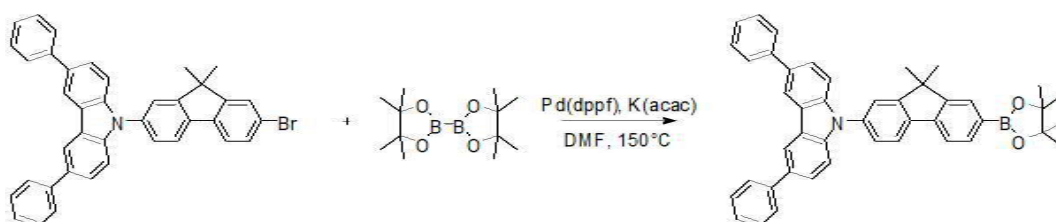
[0368]

[0369] 질소 환경에서 I-23(73 g, 229 mmol)을 톨루엔 1,000 mL에 녹인 후, 여기에 2,7-디브로모-9,9-디메틸-9H-플루오렌(121 g, 344 mmol), 트리스(디페닐리덴아세톤)디팔라듐(o)(2.10 g, 2.29 mmol), 트리스-tert 부틸포스핀(2.32 g, 11.5 mmol) 그리고 소듐 tert-부톡사이드(26.4 g, 275 mmol)을 순차적으로 넣고 100 °C에서 40시간 동안 가열하여 환류시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 디클로로메탄(DCM)로 추출한 다음 무수 MgSO4로 수분을 제거한 후, 필터하고 감압 농축하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 플래쉬 컬럼 크로마토그래피로 분리 정제하여 화합물 I-24(40.6 g, 30 %)을 얻었다.

[0370] HRMS (70 eV, EI+): m/z calcd for C39H28BrN: 589.1405, found: 589.

[0371] Elemental Analysis: C, 79 %; H, 5 %

[0372] **합성예 25: 중간체 I-25의 합성**



I - 24

I - 25

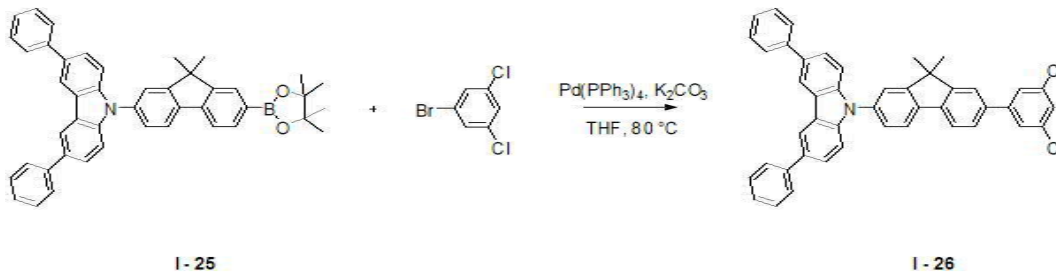
[0373]

[0374] 질소 환경에서 I-24(40 g, 67.7 mmol)을 DMF 300 mL에 녹인 후, 여기에 비스(피나콜라토)디보론(25.8 g, 102 mmol)와 (1,1'-비스(디페닐포스핀)페로센)디클로로팔라듐(II)(0.55 g, 0.68 mmol) 그리고 포타슘 아세테이트(19.9 g, 203 mmol)을 넣고 150 °C에서 8시간 동안 가열하여 환류 시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 혼합물을 필터한 후, 진공오븐에서 건조하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 플래쉬 컬럼 크로마토그래피로 분리 정제하여 화합물 I-25(28.5 g, 66 %)을 얻었다.

[0375] HRMS (70 eV, EI+): m/z calcd for C<sub>45</sub>H<sub>40</sub>BN<sub>2</sub>O<sub>2</sub>: 637.3152, found: 637.

[0376] Elemental Analysis: C, 85 %; H, 6 %

[0377] **합성예 26: 중간체 I-26의 합성**



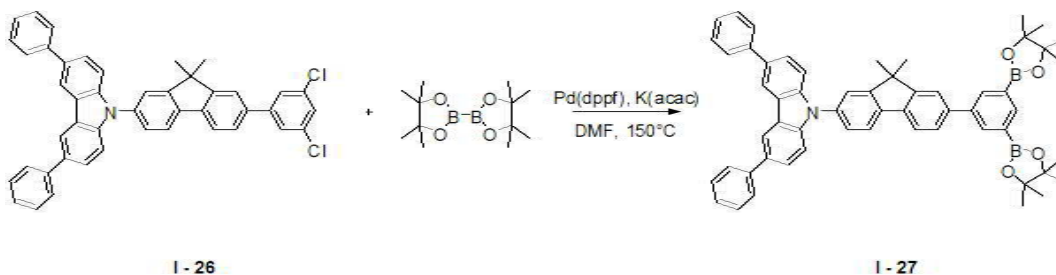
[0378]

[0379] 질소 환경에서 I-25(27 g, 42.3 mmol)을 THF 200 mL에 녹인 후, 여기에 1-브로모-3,5-디클로로벤젠(11.5 g, 50.8 mmol)와 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐(0.49 g, 0.42 mmol)을 넣고 교반시켰다. 물에 포화된 포타슘 카보네이트(14.6 g, 106 mmol)을 넣고 80 °C에서 15시간 동안 가열하여 환류 시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 DCM로 추출한 다음 무수 MgSO<sub>4</sub>로 수분을 제거한 후, 필터하고 감압 농축하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 플래쉬 컬럼 크로마토그래피로 분리 정제하여 화합물 I-26(23.1 g, 83 %)을 얻었다.

[0380] HRMS (70 eV, EI+): m/z calcd for C<sub>45</sub>H<sub>31</sub>Cl<sub>2</sub>N<sub>2</sub>: 655.1834, found: 655.

[0381] Elemental Analysis: C, 82 %; H, 5 %

[0382] **합성예 27: 중간체 I-27의 합성**



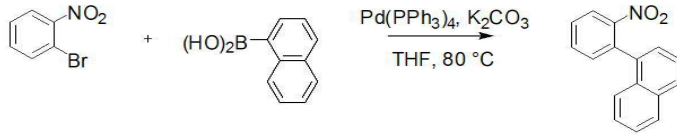
[0383]

[0384] 질소 환경에서 I-26(22 g, 33.5 mmol)을 DMF 200 mL에 녹인 후, 여기에 비스(피나콜라토)디보론(21.3 g, 83.8 mmol)와 (1,1'-비스(디페닐포스핀)페로센)디클로로팔라듐(II)(0.82 g, 1.01 mmol) 그리고 포타슘 아세테이트(16.4 g, 168 mmol)을 넣고 150 °C에서 50시간 동안 가열하여 환류 시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 혼합물을 필터한 후, 진공오븐에서 건조하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 플래쉬 컬럼 크로마토그래피로 분리 정제하여 화합물 I-27(18.3 g, 65 %)을 얻었다.

[0385] HRMS (70 eV, EI+): m/z calcd for C<sub>57</sub>H<sub>55</sub>B<sub>2</sub>N<sub>2</sub>O<sub>4</sub>: 839.4317, found: 839.

[0386] Elemental Analysis: C, 82 %; H, 7 %

[0387] **합성예 28: 중간체 I-28의 합성**



[0388]

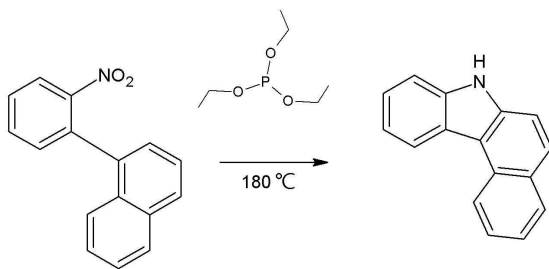
I-28

[0389] 질소 환경에서 1-브로모-2-니트로벤젠(100 g, 495 mmol)을 THF 1,100 mL에 녹인 후, 여기에 나프탈렌-1-일-보로닉 에시드(102 g, 594 mmol)와 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐(5.72 g, 4.95 mmol)을 넣고 교반시켰다. 물에 포화된 포타슘 카보네이트(171 g, 1.238 mmol)을 넣고 80 °C에서 9시간 동안 가열하여 환류 시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 DCM로 추출한 다음 무수 MgSO4로 수분을 제거한 후, 필터하고 감압 농축하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 플래쉬 컬럼 크로마토그래피로 분리 정제하여 화합물 I-28(123 g, 90 %)을 얻었다.

[0390] HRMS (70 eV, EI+): m/z calcd for C16H11NO2: 249.0709, found: 249.

[0391] Elemental Analysis: C, 77 %; H, 4 %

[0392] **합성예 29: 중간체 I-29의 합성**



I-28

I-29

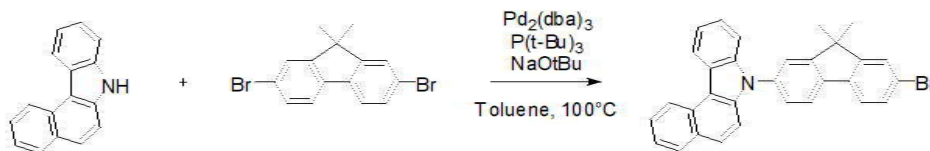
[0393]

[0394] 질소 환경에서 I-28(120 g, 481 mmol)을 트리에틸포스파이트 600 mL에 녹인 후, 180 °C에서 5시간 동안 가열하여 환류 시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣어 침전을 시킨 후, 필터하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 플래쉬 컬럼 크로마토그래피로 분리 정제하여 화합물 I-29(74.2 g, 71 %)을 얻었다.

[0395] HRMS (70 eV, EI+): m/z calcd for C16H11N: 217.0891, found: 217.

[0396] Elemental Analysis: C, 88 %; H, 5 %

[0397] **합성예 30: 중간체 I-30의 합성**



I-29

I-30

[0398]

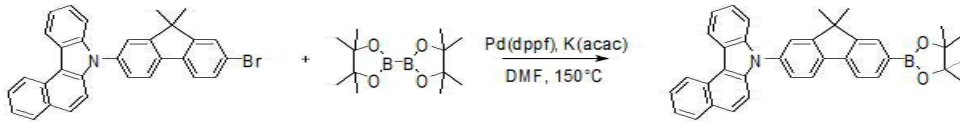
[0399] 질소 환경에서 I-29(70 g, 322 mmol)을 톨루엔 1,000 mL에 녹인 후, 여기에 2,7-디브로모-9,9-디메틸-9H-플루오렌(170 g, 483 mmol), 트리스(디페닐리덴아세톤)디팔라듐(o)(2.95 g, 3.22 mmol), 트리스-tert 부틸포스핀(3.26 g, 16.1 mmol) 그리고 소듐 tert-부톡사이드(37.1 g, 386 mmol)을 순차적으로 넣고 100 °C에서 32시간 동안 가열하여 환류시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 DCM로 추출한 다음 무수 MgSO4로 수분을 제거한 후, 필터하고 감압 농축하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 플래쉬 컬럼 크로마토그래피로 분리 정제하여 화합물 I-

30(51.9 g, 33 %)을 얻었다.

[0400] HRMS (70 eV, EI+): m/z calcd for C<sub>31</sub>H<sub>22</sub>BrN: 487.0936, found: 487.

[0401] Elemental Analysis: C, 76 %; H, 5 %

[0402] **합성예 31: 중간체 I-31의 합성**



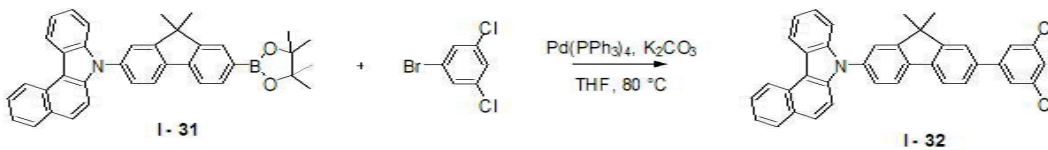
[0403]

[0404] 질소 환경에서 I-30(50 g, 102 mmol)을 DMF 400 mL에 녹인 후, 여기에 비스(피나콜라토)디보론 (31.2 g, 123 mmol)와 (1,1'-비스(디페닐포스핀)페로센)디클로로팔라듐(II)(0.83 g, 1.02 mmol) 그리고 포타슘 아세테이트 (30.0 g, 306 mmol)을 넣고 150 °C에서 7시간 동안 가열하여 환류 시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 혼합물을 필터한 후, 진공오븐에서 건조하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 플래쉬 컬럼 크로마토그래피로 분리 정제하여 화합물 I-31(33.3 g, 61 %)을 얻었다.

[0405] HRMS (70 eV, EI+): m/z calcd for C<sub>37</sub>H<sub>34</sub>BN<sub>2</sub>O<sub>2</sub>: 535.2683, found: 535.

[0406] Elemental Analysis: C, 83 %; H, 6 %

[0407] **합성예 32: 중간체 I-32의 합성**



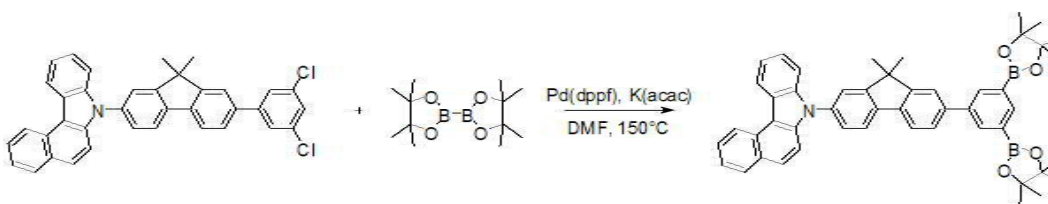
[0408]

질소 환경에서 I-31(32 g, 59.8 mmol)을 THF 250 mL에 녹인 후, 여기에 1-브로모-3,5-디클로로벤젠(16.2 g, 71.7 mmol)와 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐(0.69 g, 0.60 mmol)을 넣고 교반시켰다. 물에 포화된 포타슘 카보네이트(20.7 g, 150 mmol)을 넣고 80 °C에서 13시간 동안 가열하여 환류 시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 DCM로 추출한 다음 무수 MgSO<sub>4</sub>로 수분을 제거한 후, 필터하고 감압 농축하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 플래쉬 컬럼 크로마토그래피로 분리 정제하여 화합물 I-32(25.9 g, 78 %)을 얻었다.

[0409] HRMS (70 eV, EI+): m/z calcd for C<sub>37</sub>H<sub>25</sub>Cl<sub>2</sub>N: 553.1364, found: 553.

[0410] Elemental Analysis: C, 80 %; H, 5 %

[0411] **합성예 33: 중간체 I-33의 합성**



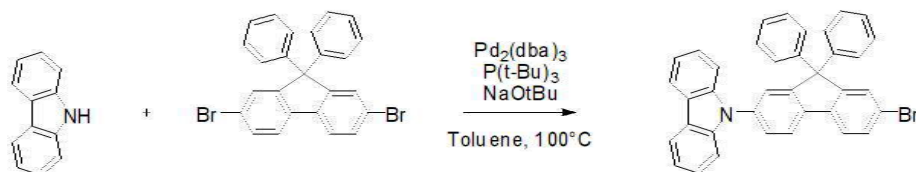
[0412]

[0413] 질소 환경에서 I-32(24 g, 43.3 mmol) DMF 300 mL에 녹인 후, 여기에 비스(피나콜라토)디보론 (27.5 g, 108 mmol)와 (1,1'-비스(디페닐포스핀)페로센)디클로로팔라듐(II)(1.06 g, 1.30 mmol) 그리고 포타슘 아세테이트 (21.2 g, 217 mmol)을 넣고 150 °C에서 53시간 동안 가열하여 환류 시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 혼합물을 필터한 후, 진공오븐에서 건조하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 플래쉬 컬럼 크로마토그래피로 분리 정제하여 화합물 I-33(21.1 g, 66 %)을 얻었다.

[0414] HRMS (70 eV, EI+): m/z calcd for C<sub>49</sub>H<sub>49</sub>B<sub>2</sub>N<sub>0</sub>4: 737.3848, found: 737.

[0415] Elemental Analysis: C, 80 %; H, 7 %

[0416] **합성예 34: 중간체 I-34의 합성**



I - 34

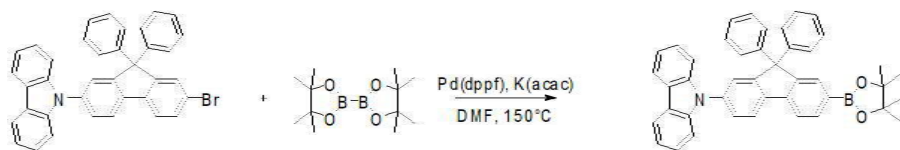
[0417]

[0418] 질소 환경에서 cabazole(100 g, 598 mmol)을 톨루엔 2,500 mL에 녹인 후, 여기에 2,7-디브로모-9,9-디메틸-9H-플루오렌(427 g, 897 mmol), 트리스(디페닐리덴아세톤)디팔라듐(0)(5.48 g, 5.98 mmol), 트리스-tert 부틸포스핀(6.05 g, 29.9 mmol) 그리고 소듐 tert-부톡사이드(69.0 g, 718 mmol)을 순차적으로 넣고 100 °C에서 33시간 동안 가열하여 환류시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 DCM로 추출한 다음 무수 MgSO<sub>4</sub>로 수분을 제거한 후, 필터하고 감압 농축하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 플래쉬 컬럼 크로마토그래피로 분리 정제하여 화합물 I-34(138 g, 41 %)을 얻었다.

[0419] HRMS (70 eV, EI+): m/z calcd for C<sub>37</sub>H<sub>24</sub>BrN: 561.1092, found: 561.

[0420] Elemental Analysis: C, 79 %; H, 4 %

[0421] **합성예 35: 중간체 I-35의 합성**



I - 34

I - 35

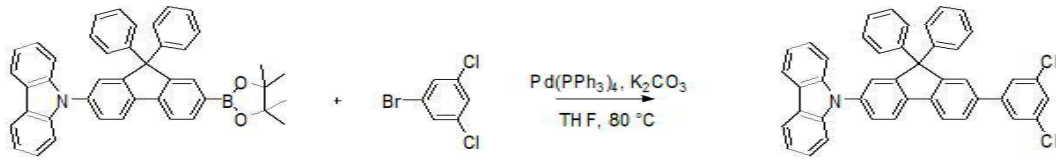
[0422]

[0423] 질소 환경에서 I-34(100 g, 178 mmol)을 DMF 800 mL에 녹인 후, 여기에 비스(피나콜라토)디보론 (54.2 g, 213 mmol)와 (1,1'-비스(디페닐포스핀)페로센)디클로로팔라듐(II)(1.45 g, 1.78 mmol) 그리고 포타슘 아세테이트 (52.4 g, 534 mmol)을 넣고 150 °C에서 8시간 동안 가열하여 환류 시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 혼합물을 필터한 후, 진공오븐에서 건조하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 플래쉬 컬럼 크로마토그래피로 분리 정제하여 화합물 I-35(69.4 g, 64 %)을 얻었다.

[0424] HRMS (70 eV, EI+): m/z calcd for C<sub>43</sub>H<sub>36</sub>BN<sub>0</sub>2: 609.2839, found: 609.

[0425] Elemental Analysis: C, 85 %; H, 6 %

[0426] **합성예 36: 중간체 I-36의 합성**



I-35

I-36

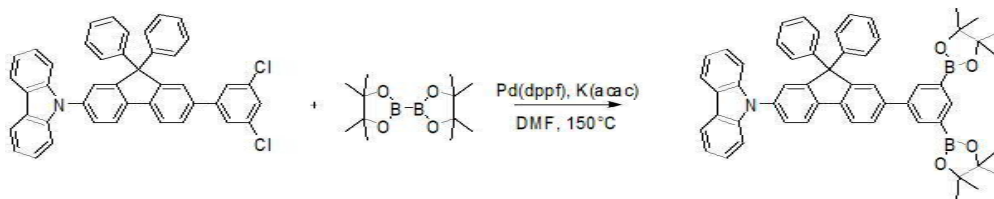
[0427]

[0428] 질소 환경에서 I-35(65 g, 107 mmol)을 THF 500 mL에 녹인 후, 여기에 1-브로모-3,5-디클로로벤젠(29.0 g, 128 mmol)와 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐(1.24 g, 1.07 mmol)을 넣고 교반시켰다. 물에 포화된 포타슘 카보네이트(37.0 g, 268 mmol)을 넣고 80 °C에서 15시간 동안 가열하여 환류 시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 DCM로 추출한 다음 무수 MgSO4로 수분을 제거한 후, 필터하고 감압 농축하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 플래쉬 컬럼 크로마토그래피로 분리 정제하여 화합물 I-36(50.4 g, 75 %)을 얻었다.

[0429] HRMS (70 eV, EI+): m/z calcd for C43H27Cl2N: 627.1521, found: 627.

[0430] Elemental Analysis: C, 82 %; H, 4 %

[0431] **합성예 37: 중간체 I-37의 합성**



I-36

I-37

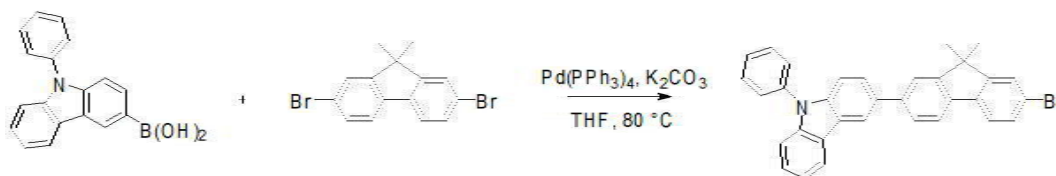
[0432]

[0433] 질소 환경에서 I-36(45 g, 28.3 mmol)을 DMF 300 mL에 녹인 후, 여기에 비스(피나콜라토)디보론 (18.0 g, 70.7 mmol)와 (1,1'-비스(디페닐포스핀)페로센)디클로로팔라듐(II)(0.69 g, 0.85 mmol) 그리고 포타슘 아세테이트(13.4 g, 142 mmol)을 넣고 150 °C에서 48시간 동안 가열하여 환류 시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 혼합물을 필터한 후, 진공오븐에서 건조하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 플래쉬 컬럼 크로마토그래피로 분리 정제하여 화합물 I-37(14.2 g, 62 %)을 얻었다.

[0434] HRMS (70 eV, EI+): m/z calcd for C55H51B2N04: 811.4004, found: 811.

[0435] Elemental Analysis: C, 81 %; H, 6 %

[0436] **합성예 38: 중간체 I-38의 합성**



I-38

[0437]

[0438] 질소 환경에서 9-페닐-9H-카바졸-3-일-보로닉 에시드(100 g, 348 mmol)을 THF 1,500 mL에 녹인 후, 여기에 2,7-디브로모-9,9-디메틸-9H-플루오렌(184 g, 522 mmol)와 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐(4.02 g, 3.48 mmol)을 넣고 교반시켰다. 물에 포화된 포타슘 카보네이트(120 g, 870 mmol)을 넣고 80 °C에서 8시간 동안 가열하여 환류 시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 DCM로 추출한 다음 무수 MgSO4로 수분을 제거한 후, 필터

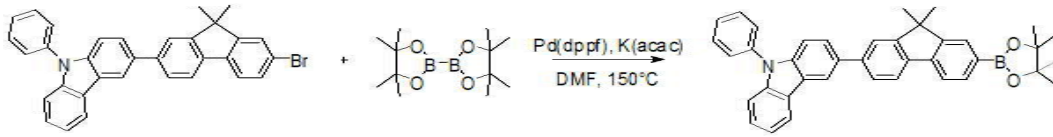


하고 감압 농축하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 플래쉬 컬럼 크로마토그래피로 분리 정제하여 화합물 I-38(125 g, 70 %)을 얻었다.

[0439] HRMS (70 eV, EI+): m/z calcd for C<sub>33</sub>H<sub>24</sub>BrN: 513.1092, found: 513.

[0440] Elemental Analysis: C, 77 %; H, 5 %

[0441] **합성예 39: 중간체 I-39의 합성**



[0442] **I-38**

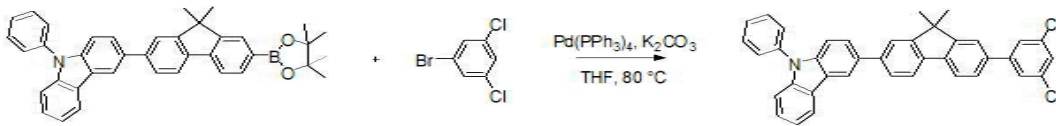
**I-39**

[0443] 질소 환경에서 I-38(120 g, 233 mmol)을 DMF 1,000 mL에 녹인 후, 여기에 비스(피나콜라토)디보론(71 g, 280 mmol)와 (1,1'-비스(디페닐포스핀)페로센)디클로로팔라듐(II)(1.90 g, 2.33 mmol) 그리고 포타슘 아세테이트(68.6 g, 699 mmol)을 넣고 150 °C에서 10시간 동안 가열하여 환류 시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 혼합물을 필터한 후, 진공오븐에서 건조하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 플래쉬 컬럼 크로마토그래피로 분리 정제하여 화합물 I-39(95.5 g, 73 %)을 얻었다.

[0444] HRMS (70 eV, EI+): m/z calcd for C<sub>39</sub>H<sub>36</sub>BN<sub>2</sub>O<sub>2</sub>: 561.2839, found: 561.

[0445] Elemental Analysis: C, 83 %; H, 7 %

[0446] **합성예 40: 중간체 I-40의 합성**



**I-39**

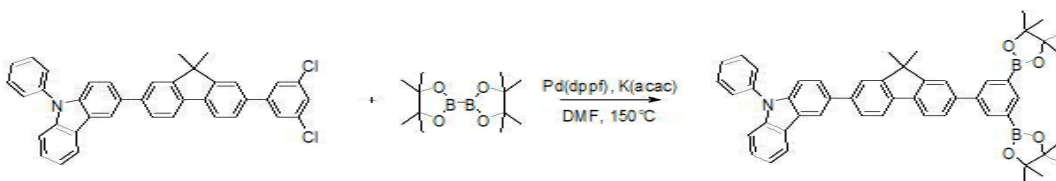
**I-40**

[0447] 질소 환경에서 I-39(90 g, 160 mmol)을 THF 700 mL에 녹인 후, 여기에 1-브로모-3,5-디클로로벤젠(43.4 g, 192 mmol)와 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐(1.85 g, 1.60 mmol)을 넣고 교반시켰다. 물에 포화된 포타슘 카보네이트(55.3 g, 400 mmol)을 넣고 80 °C에서 10시간 동안 가열하여 환류 시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 DCM로 추출한 다음 무수 MgSO<sub>4</sub>로 수분을 제거한 후, 필터하고 감압 농축하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 플래쉬 컬럼 크로마토그래피로 분리 정제하여 화합물 I-40(66.9 g, 72 %)을 얻었다.

[0449] HRMS (70 eV, EI+): m/z calcd for C<sub>39</sub>H<sub>27</sub>Cl<sub>2</sub>N<sub>2</sub>: 579.1521, found: 579.

[0450] Elemental Analysis: C, 81 %; H, 5 %

[0451] **합성예 41: 중간체 I-41의 합성**



**I-40**

**I-41**

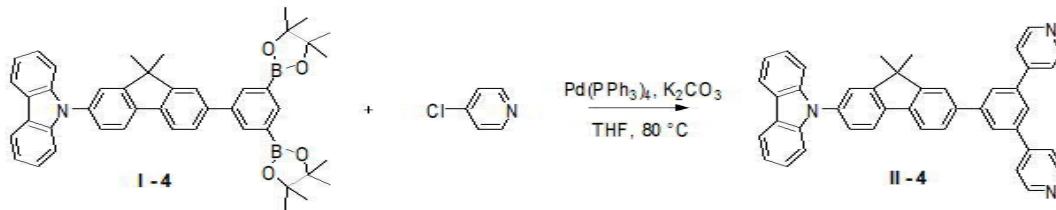
[0452] 질소 환경에서 I-40(60 g, 103 mmol)을 DMF 300 mL에 녹인 후, 여기에 비스(피나콜라토)디보론(65.6 g, 258

mmol)와 (1,1'-비스(디페닐포스핀)페로센)디클로로팔라듐(II)(2.52 g, 3.09 mmol) 그리고 포타슘 아세테이트 (50.5 g, 515 mmol)을 넣고 150 °C에서 45시간 동안 가열하여 환류 시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 혼합물을 필터한 후, 진공오븐에서 건조하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 플래쉬 컬럼 크로마토그래피로 분리 정제 하여 화합물 I-41(44.8 g, 57 %)을 얻었다.

[0454] HRMS (70 eV, EI+): m/z calcd for C51H51B2N04: 763.4004, found: 763.

[0455] Elemental Analysis: C, 80 %; H, 7 %

[0456] **실시예 1: 화합물 II-4의 합성**



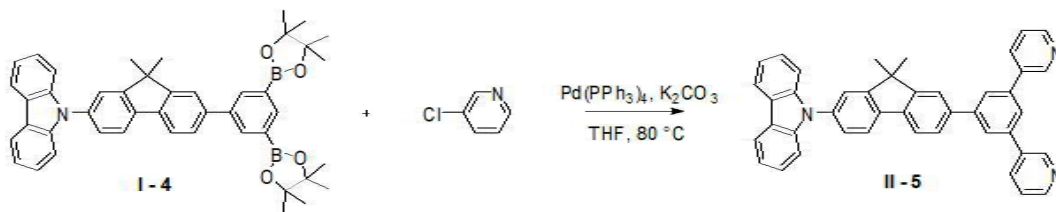
[0457]

[0458] 질소 환경에서 I-4(20 g, 29.1 mmol)을 THF 150 mL에 녹인 후, 여기에 4-클로로피리딘(8.26 g, 72.8 mmol)와 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐(0.67 g, 0.58 mmol)을 넣고 교반시켰다. 물에 포화된 포타슘 카보네이트 (20.1 g, 146 mmol)을 넣고 80 °C에서 10시간 동안 가열하여 환류 시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 DCM로 추출한 다음 무수 MgSO4로 수분을 제거한 후, 필터하고 감압 농축하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 플래쉬 컬럼 크로마토그래피로 분리 정제하여 화합물 II-4(15.8 g, 92 %)을 얻었다.

[0459] HRMS (70 eV, EI+): m/z calcd for C43H31N3: 589.2518, found: 589.

[0460] Elemental Analysis: C, 88 %; H, 5 %

[0461] **실시예 2: 화합물 II-5의 합성**



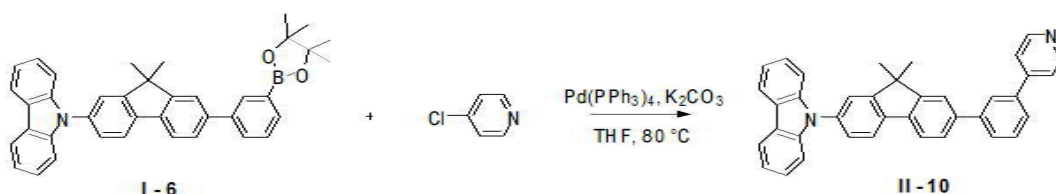
[0462]

[0463] 질소 환경에서 I-4(20 g, 29.1 mmol)을 THF 150 mL에 녹인 후, 여기에 3-클로로피리딘(8.26 g, 72.8 mmol)와 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐(0.67 g, 0.58 mmol)을 넣고 교반시켰다. 물에 포화된 포타슘 카보네이트 (20.1 g, 146 mmol)을 넣고 80 °C에서 12시간 동안 가열하여 환류 시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 DCM로 추출한 다음 무수 MgSO4로 수분을 제거한 후, 필터하고 감압 농축하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 플래쉬 컬럼 크로마토그래피로 분리 정제하여 화합물 II-5(15.4 g, 90 %)을 얻었다.

[0464] HRMS (70 eV, EI+): m/z calcd for C43H31N3: 589.2518, found: 589.

[0465] Elemental Analysis: C, 88 %; H, 5 %

[0466] **실시예 3: 화합물 II-10의 합성**



[0467]

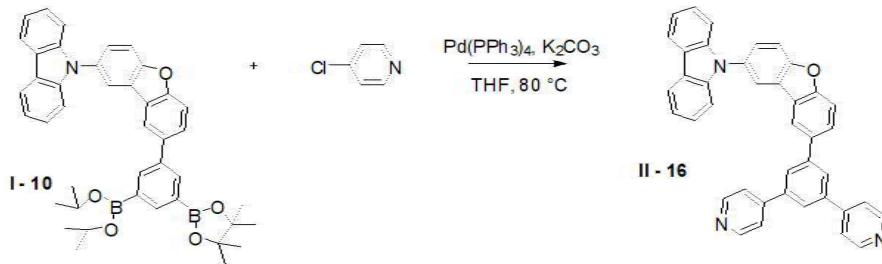


[0468] 질소 환경에서 I-6(20 g, 35.6 mmol)을 THF 150 mL에 녹인 후, 여기에 4-클로로피리딘 (4.85 g, 42.7 mmol)와 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐(0.41 g, 0.36 mmol)을 넣고 교반시켰다. 물에 포화된 포타슘 카보네이트 (12.3 g, 89.0 mmol)을 넣고 80 °C에서 8시간 동안 가열하여 환류 시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 DCM로 추출한 다음 무수 MgSO<sub>4</sub>로 수분을 제거한 후, 필터하고 감압 농축하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 플래쉬 컬럼 크로마토그래피로 분리 정제하여 화합물 II-10(17.3 g, 95 %)을 얻었다.

[0469] HRMS (70 eV, EI+): m/z calcd for C<sub>38</sub>H<sub>28</sub>N<sub>2</sub>: 512.2252, found: 512.

[0470] Elemental Analysis: C, 89 %; H, 6 %

[0471] **실시예 4: 화합물 II-16의 합성**



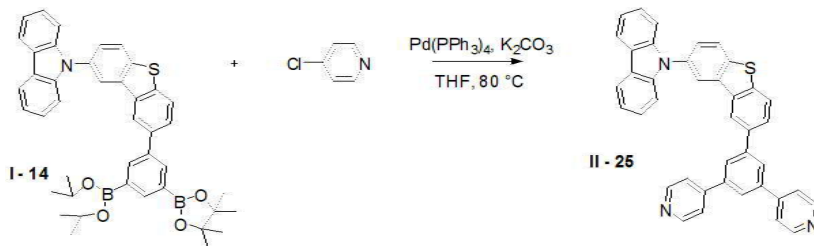
[0472]

[0473] 질소 환경에서 I-10(20 g, 30.2 mmol)을 THF 150 mL에 녹인 후, 여기에 4-클로로피리딘(6.87 g, 60.5 mmol)와 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐 (1.05 g, 0.91 mmol)을 넣고 교반시켰다. 물에 포화된 포타슘 카보네이트 (20.9 g, 151 mmol)을 넣고 80 °C에서 7시간 동안 가열하여 환류 시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 DCM로 추출한 다음 무수 MgSO<sub>4</sub>로 수분을 제거한 후, 필터하고 감압 농축하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 플래쉬 컬럼 크로마토그래피로 분리 정제하여 화합물 II-16(14.5 g, 85 %)을 얻었다.

[0474] HRMS (70 eV, EI+): m/z calcd for C<sub>40</sub>H<sub>25</sub>N<sub>3</sub>O: 563.1998, found: 563.

[0475] Elemental Analysis: C, 85 %; H, 4 %

[0476] **실시예 5: 화합물 II-25의 합성**



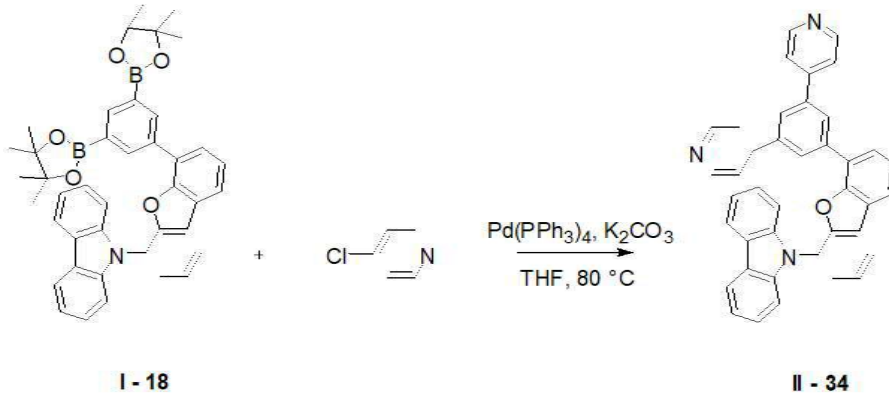
[0477]

[0478] 질소 환경에서 I-14(20 g, 29.5 mmol)을 THF 150 mL에 녹인 후, 여기에 4-클로로피리딘(6.70 g, 59.0 mmol)와 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐(1.02 g, 0.89 mmol)을 넣고 교반시켰다. 물에 포화된 포타슘 카보네이트 (20.4 g, 148 mmol)을 넣고 80 °C에서 8시간 동안 가열하여 환류 시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 DCM로 추출한 다음 무수 MgSO<sub>4</sub>로 수분을 제거한 후, 필터하고 감압 농축하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 플래쉬 컬럼 크로마토그래피로 분리 정제하여 화합물 II-25(14.2 g, 83 %)을 얻었다.

[0479] HRMS (70 eV, EI+): m/z calcd for C<sub>40</sub>H<sub>25</sub>N<sub>3</sub>S: 579.1769, found: 579.

[0480] Elemental Analysis: C, 83 %; H, 4 %

[0481] **실시예 6: 화합물 II-34의 합성**



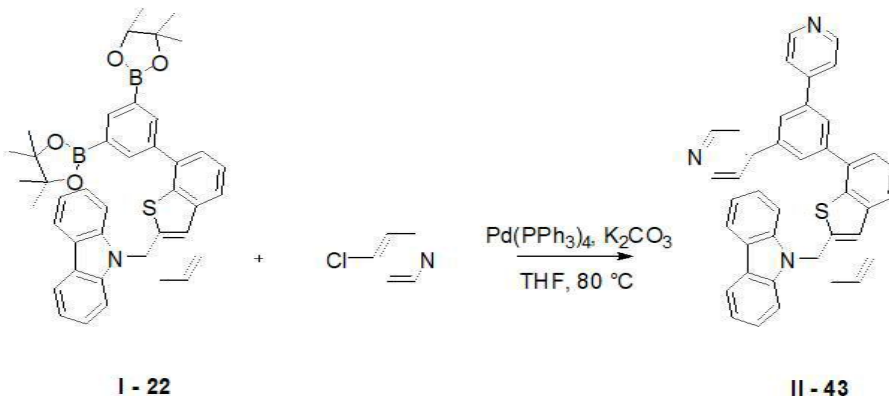
[0482]

[0483] 질소 환경에서 I-18(20 g, 30.2 mmol)을 THF 150 mL에 녹인 후, 여기에 4- 클로로피리딘(6.87 g, 60.5 mmol)와 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐(1.05 g, 0.91 mmol)을 넣고 교반시켰다. 물에 포화된 포타슘 카보네이트(20.9 g, 151 mmol)을 넣고 80 °C에서 9시간 동안 가열하여 환류 시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 DCM로 추출한 다음 무수 MgSO4로 수분을 제거한 후, 필터하고 감압 농축하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 플래쉬 컬럼 크로마토그래피로 분리 정제하여 화합물 II-34(13.4 g, 79 %)을 얻었다.

[0484] HRMS (70 eV, EI+): m/z calcd for C40H25N3O: 563.1998, found: 563.

[0485] Elemental Analysis: C, 85 %; H, 4 %

[0486] **실시예 7: 화합물 II-43의 합성**



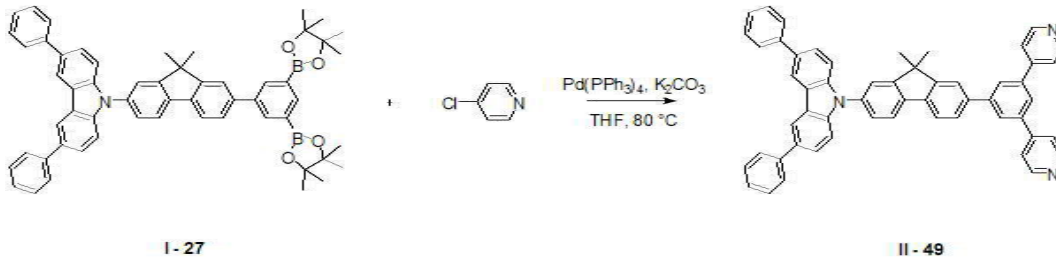
[0487]

[0488] 질소 환경에서 I-22(20 g, 29.5 mmol)을 THF 140 mL에 녹인 후, 여기에 4- 클로로피리딘 (6.70 g, 59.0 mmol)와 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐(1.02 g, 0.89 mmol)을 넣고 교반시켰다. 물에 포화된 포타슘 카보네이트(20.4 g, 148 mmol)을 넣고 80 °C에서 7시간 동안 가열하여 환류 시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 DCM로 추출한 다음 무수 MgSO4로 수분을 제거한 후, 필터하고 감압 농축하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 플래쉬 컬럼 크로마토그래피로 분리 정제하여 화합물 II-43(13.9 g, 81 %)을 얻었다.

[0489] HRMS (70 eV, EI+): m/z calcd for C40H25N3S: 579.1769, found: 579.

[0490] Elemental Analysis: C, 83 %; H, 4 %

[0491] **실시예 8: 화합물 II-49의 합성**



[0492]

[0493] 질소 환경에서 I-27(15 g, 17.9 mmol)을 THF 140 mL에 녹인 후, 여기에 4-클로로피리딘(5.70 g, 44.7 mmol)와 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐(0.62 g, 0.54 mmol)을 넣고 교반시켰다. 물에 포화된 포타슘 카보네이트(12.4 g, 89.5 mmol)을 넣고 80 °C에서 9시간 동안 가열하여 환류 시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 DCM로 추출한 다음 무수 MgSO4로 수분을 제거한 후, 필터하고 감압 농축하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 플래쉬 컬럼 크로마토그래피로 분리 정제하여 화합물 II-49(10.4 g, 78 %)을 얻었다.

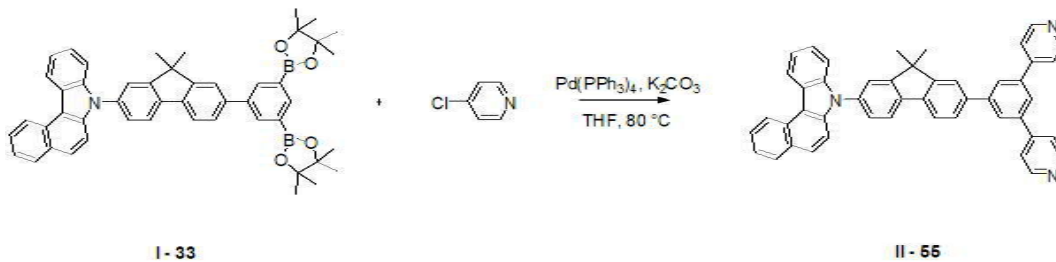
[0494]

HRMS (70 eV, EI+): m/z calcd for C55H39N3: 741.3144, found: 741.

[0495]

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

[0496] **실시예 9: 화합물 II-55의 합성**



[0497]

[0498] 질소 환경에서 I-33(20 g, 27.1 mmol)을 THF 150 mL에 녹인 후, 여기에 4-클로로피리딘(6.16 g, 54.2 mmol)와 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐(0.94 g, 0.81 mmol)을 넣고 교반시켰다. 물에 포화된 포타슘 카보네이트(18.7 g, 136 mmol)을 넣고 80 °C에서 10시간 동안 가열하여 환류 시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 DCM로 추출한 다음 무수 MgSO4로 수분을 제거한 후, 필터하고 감압 농축하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 플래쉬 컬럼 크로마토그래피로 분리 정제하여 화합물 II-55(13.9 g, 80 %)을 얻었다.

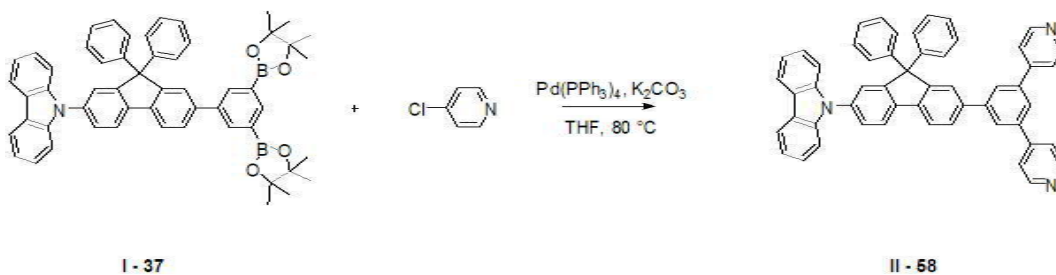
[0499]

HRMS (70 eV, EI+): m/z calcd for C47H33N3: 639.2674, found: 639.

[0500]

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

[0501] **실시예 10: 화합물 II-58의 합성**



[0502]

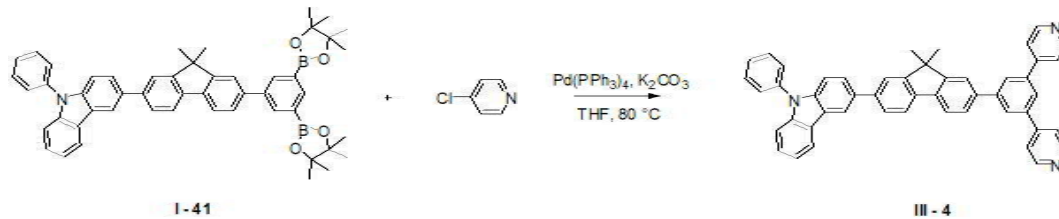
[0503] 질소 환경에서 I-37(12 g, 14.8 mmol)을 THF 100 mL에 녹인 후, 여기에 4-클로로피리딘(3.36 g, 29.6 mmol)와 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐(0.51 g, 0.44 mmol)을 넣고 교반시켰다. 물에 포화된 포타슘 카보네이트(10.2 g, 74 mmol)을 넣고 80 °C에서 8시간 동안 가열하여 환류 시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 DCM로 추출한 다음 무수 MgSO4로 수분을 제거한 후, 필터하고 감압 농축하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 플래쉬 컬럼

크로마토그래피로 분리 정제하여 화합물 II-58(8.87 g, 84 %)을 얻었다.

[0504] HRMS (70 eV, EI+): m/z calcd for C53H35N3: 713.2831, found: 713.

[0505] Elemental Analysis: C, 89 %; H, 5 %

[0506] **실시예 11: 화합물 III-4의 합성**



[0507]

[0508] 질소 환경에서 I-41(20 g, 26.2 mmol)을 THF 100 mL에 녹인 후, 여기에 4-클로로피리딘(2.97 g, 29.6 mmol)와 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐(0.91 g, 0.79 mmol)을 넣고 교반시켰다. 물에 포화된 포타슘 카보네이트(18.1 g, 131 mmol)을 넣고 80 °C에서 8시간 동안 가열하여 환류 시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 DCM로 추출한 다음 무수 MgSO4로 수분을 제거한 후, 필터하고 감압 농축하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 플래쉬 컬럼 크로마토그래피로 분리 정제하여 화합물 III-4(14.0 g, 80 %)을 얻었다.

[0509] HRMS (70 eV, EI+): m/z calcd for C49H35N3: 665.2831, found: 665.

[0510] Elemental Analysis: C, 88 %; H, 5 %

[0511] **(유기발광소자의 제조)**

[0512] **실시예 12: 유기발광소자의 제조**

[0513] 실시예 1에서 얻은 화합물 II-4를 호스트로 사용하고, Ir(PPy)3를 도펀트로 사용하여 유기발광소자를 제작하였다. 양극으로는 ITO를 1000 Å의 두께로 사용하였고, 음극으로는 알루미늄(Al)을 1000 Å의 두께로 사용하였다. 구체적으로, 유기발광소자의 제조방법을 설명하면, 양극은 15 Ω/cm<sup>2</sup>의 면저항값을 가진 ITO 유리 기판을 50 mm × 50 mm × 0.7 mm의 크기로 잘라서 아세톤과 이소프로필알코올과 순수물 속에서 각 15 분 동안 초음파세정한 후, 30 분 동안 UV 오존 세정하여 사용하였다. 상기 기판 상부에 진공도 650×10<sup>-7</sup>Pa, 증착속도 0.1 내지 0.3 nm/s의 조건으로 N4,N4'-디(나프탈렌-1-일)-N4,N4'-디페닐비페닐-4,4'-디아민(NPB) (80 nm)를 증착하여 800 Å의 정공수송층을 형성하였다. 이어서, 동일한 진공 증착조건에서 실시예 1에서 얻은 화합물 II-4를 이용하여 막 두께 300 Å의 발광층을 형성하였고, 이 때, 인광 도펀트인 Ir(PPy)3을 동시에 증착하였다. 이 때, 인광 도펀트의 증착속도를 조절하여, 발광층의 전체량을 100 중량%로 하였을 때, 인광 도펀트의 배합량이 7 중량%가 되도록 증착하였다. 상기 발광층 상부에 동일한 진공 증착조건을 이용하여 비스(2-메틸-8-퀴놀리놀레이트)-4-(페닐페놀라토)알루미늄(BAlq)를 증착하여 막 두께 50 Å의 정공저지층을 형성하였다. 이어서, 동일한 진공 증착조건에서 Alq3를 증착하여, 막 두께 200 Å의 전자수송층을 형성하였다. 상기 전자수송층 상부에 음극으로서 LiF와 Al을 순차적으로 증착하여 유기발광소자를 제작하였다. 상기 유기발광소자의 구조는 ITO/ NPB (80 nm)/ EML (화합물 II-4 (93 중량%) + Ir(PPy)3(7 중량%), 30 nm)/ Balq (5 nm)/ Alq3 (20 nm)/ LiF (1 nm) / Al (100 nm)의 구조로 제작하였다.

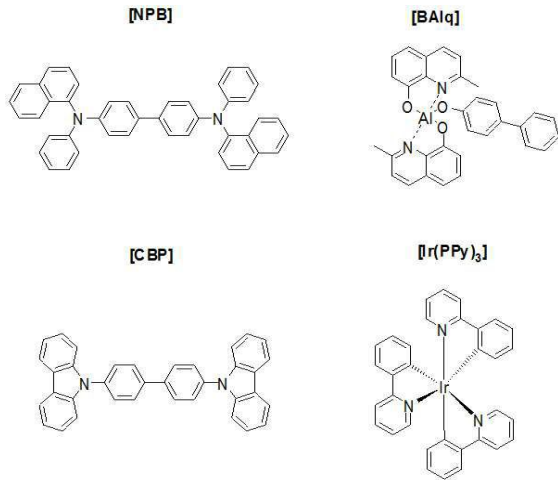
[0514] **실시예 13**

[0515] 상기 실시예 12에서, 실시예 1의 화합물 II-4 대신 실시예 2의 화합물 II-5를 사용한 점을 제외하고는 동일한 방법으로 유기발광소자를 제조하였다.

[0516] **실시예 14**

- [0517] 상기 실시예 12에서, 실시예 1의 화합물 II-4 대신 실시예 3의 화합물 II-10을 사용한 점을 제외하고는 동일한 방법으로 유기발광소자를 제조하였다.
- [0518] **실시예 15**
- [0519] 상기 실시예 12에서, 실시예 1의 화합물 II-4 대신 실시예 4의 화합물 II-16을 사용한 점을 제외하고는 동일한 방법으로 유기발광소자를 제조하였다.
- [0520] **실시예 16**
- [0521] 상기 실시예 12에서, 실시예 1의 화합물 II-4 대신 실시예 5의 화합물 II-25를 사용한 점을 제외하고는 동일한 방법으로 유기발광소자를 제조하였다.
- [0522] **실시예 17**
- [0523] 상기 실시예 12에서, 실시예 1의 화합물 II-4 대신 실시예 6의 화합물 II-34를 사용한 점을 제외하고는 동일한 방법으로 유기발광소자를 제조하였다.
- [0524] **실시예 18**
- [0525] 상기 실시예 12에서, 실시예 1의 화합물 II-4 대신 실시예 7의 화합물 II-43을 사용한 점을 제외하고는 동일한 방법으로 유기발광소자를 제조하였다.
- [0526] **실시예 19**
- [0527] 상기 실시예 12에서, 실시예 1의 화합물 II-4 대신 실시예 8의 화합물 II-49를 사용한 점을 제외하고는 동일한 방법으로 유기발광소자를 제조하였다.
- [0528] **실시예 20**
- [0529] 상기 실시예 12에서, 실시예 1의 화합물 II-4 대신 실시예 9의 화합물 II-55를 사용한 점을 제외하고는 동일한 방법으로 유기발광소자를 제조하였다.
- [0530] **실시예 21**
- [0531] 상기 실시예 12에서, 실시예 1의 화합물 II-4 대신 실시예 10의 화합물 II-58을 사용한 점을 제외하고는 동일한 방법으로 유기발광소자를 제조하였다.
- [0532] **실시예 22**
- [0533] 상기 실시예 12에서, 실시예 1의 화합물 II-4 대신 실시예 10의 화합물 III-4를 사용한 점을 제외하고는 동일한 방법으로 유기발광소자를 제조하였다.
- [0534] **비교예 1**
- [0535] 상기 실시예 12에서, 실시예 1의 화합물 II-4 대신 CBP를 사용한 점을 제외하고는 동일한 방법으로 유기발광소자를 제조하였다. 상기 CBP의 구조는 하기에 기재되어 있다.

[0536] 상기 유기발광소자 제작에 사용된 NPB, BA1q, CBP, Ir(PPy)<sub>3</sub>의 구조는 하기와 같다.



[0537]

[0538] (유기발광소자의 성능 측정)

[0539] 상기 실시예 12 내지 22과 비교예 1에서 제조된 각각의 유기발광소자에 대하여 전압에 따른 전류밀도 변화, 휘도 변화 및 발광효율을 측정하였다. 구체적인 측정방법은 하기와 같고, 그 결과는 하기 표 1에 나타내었다

[0540] (1) 전압변화에 따른 전류밀도의 변화 측정

[0541] 제조된 유기발광소자에 대해, 전압을 0V 부터 10V까지 상승시키면서 전류-전압계(Keithley 2400)를 이용하여 단위소자에 흐르는 전류값을 측정하고, 측정된 전류값을 면적으로 나누어 결과를 얻었다.

[0542] (2) 전압변화에 따른 휘도 변화 측정

[0543] 제조된 유기발광소자에 대해, 전압을 0V 부터 10V까지 상승시키면서 휘도계(Minolta Cs-1000A)를 이용하여 그때의 휘도를 측정하여 결과를 얻었다.

[0544] (3) 발광효율 측정

[0545] 상기(1) 및 (2)로부터 측정된 휘도와 전류밀도 및 전압을 이용하여 동일 전류밀도(10 mA/cm<sup>2</sup>)의 전류 효율(cd/A) 을 계산하였다.

표 1

[0546]

소자	발광층에 사용한 화합물	구동전압 (V)	색 (EL color)	효율 (cd/A)
실시예 12	화합물 II-4	4.2	Green	52.1
실시예 13	화합물 II-5	4.3	Green	55.0
실시예 14	화합물 II-10	4.3	Green	50.8
실시예 15	화합물 II-16	4.6	Green	67.5
실시예 16	화합물 II-25	4.6	Green	60.1
실시예 17	화합물 II-34	4.4	Green	62.3
실시예 18	화합물 II-43	4.7	Green	65.1
실시예 19	화합물 II-49	3.3	Green	48.3
실시예 20	화합물 II-55	3.5	Green	40.2
실시예 21	화합물 II-58	4.0	Green	49.0
실시예 22	화합물 III-4	4.1	Green	48.5





을 확인할 수 있다.

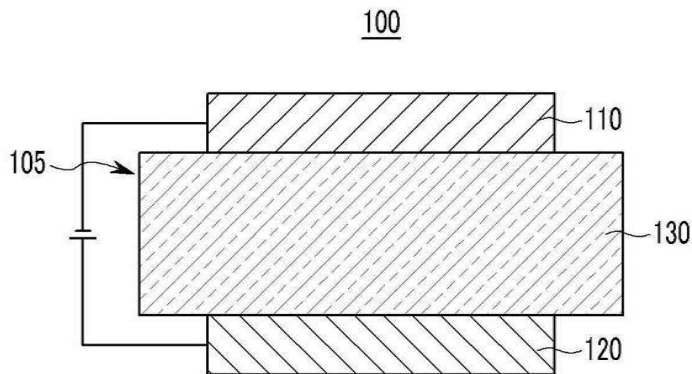
[0557] 본 발명은 상기 실시예들에 한정되는 것이 아니라 서로 다른 다양한 형태로 제조될 수 있으며, 본 발명이 속하는 기술분야에서 통상의 지식을 가진 자는 본 발명의 기술적 사상이나 필수적인 특징을 변경하지 않고서 다른 구체적인 형태로 실시될 수 있다는 것을 이해할 수 있을 것이다. 그러므로 이상에서 기술한 실시예들은 모든 면에서 예시적인 것이며 한정적이 아닌 것으로 이해해야만 한다.

**부호의 설명**

- [0558] 100: 유기 발광 소자 200: 유기 발광 소자  
 105: 유기층  
 110: 음극  
 120: 양극  
 130: 발광층 230: 발광층  
 140: 정공 보조층

**도면**

**도면1**



**도면2**

