(12) 특허협력조약에 의하여 공개된 국제출원

(19) 세계지식재산권기구
국제사무국

(43) 국제공개일
2022 년 1 월 6 일 (06.01.2022)

WIPO | PCT

(10) 국제공개번호
WO 2022/005251 A1

(51) 국제특허분류:
C07D 471/04 (2006.01) *H01L 51/00* (2006.01)
C07F 7/08 (2006.01) *H01L 51/50* (2006.01)
C07F 9/30 (2006.01)

(21) 국제출원번호: PCT/KR2021/008429

(22) 국제출원일: 2021 년 7 월 2 일 (02.07.2021)

(25) 출원언어: 한국어

(26) 공개언어: 한국어

(30) 우선권정보:
10-2020-0081744 2020 년 7 월 2 일 (02.07.2020) KR

(71) 출원인: 솔루스첨단소재 주식회사 (**SOLUS ADVANCED MATERIALS CO., LTD.**) [KR/KR]; 54588 전라북도 익산시 석암로11길 11, Jeollabuk-do (KR).

(72) 발명자: **손호준 (SON, Hojun)**; 16858 경기도 용인시 수지구 수지로112번길 10 (성복동), Gyeonggi-do (KR). **엄민식 (EUM, Minsik)**; 16858 경기도 용인시 수지구 수지로112번길 10 (성복동), Gyeonggi-do (KR). **김회문 (KIM, Hoemoon)**; 16858 경기도 용인시 수지구 수지로112번길 10 (성복동), Gyeonggi-do (KR). **정화순 (JUNG, Hwasoon)**; 16858 경기도 용인시 수지구 수지로112번길 10 (성복동), Gyeonggi-do (KR). **배형찬 (BAE, Hyungchan)**; 16858 경기도 용인시 수지구 수지로112번길 10 (성복동), Gyeonggi-do (KR). **김진웅 (KIM, Jinwoong)**; 16858 경기도 용인시 수지구 수지로112번길 10 (성복동), Gyeonggi-do (KR). **김가현 (KIM, Gahyeon)**; 16858 경기도 용인시 수지구 수지로112번길 10 (성복동), Gyeonggi-do (KR).

(74) 대리인: **특허법인 위더피플 (WETHEPEOPLE IP & LAW FIRM)**; 03752 서울시 서대문구 경기대로 47 진양빌딩 6층, Seoul (KR).

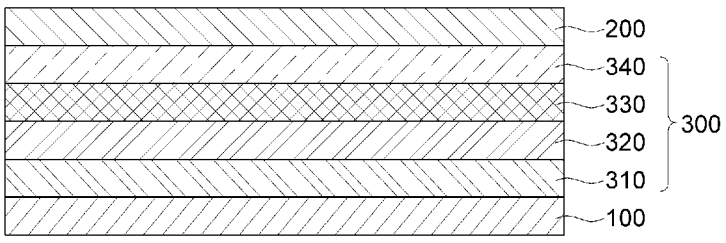
(81) 지정국 (별도의 표시가 없는 한, 가능한 모든 종류의 국내 권리의 보호를 위하여): AE, AG, AL, AM, AO, AT, AU, AZ, BA, BB, BG, BH, BN, BR, BW, BY, BZ, CA, CH, CL, CN, CO, CR, CU, CZ, DE, DJ, DK, DM, DO, DZ, EC, EE, EG, ES, FI, GB, GD, GE, GH, GM, GT, HN, HR, HU, ID, IL, IN, IR, IS, IT, JO, JP, KE, KG, KH, KN, KP, KW, KZ, LA, LC, LK,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

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

공개:
— 국제조사보고서와 함께 (조약 제21조(3))
— 청구범위 보정 기한 만료 전의 공개이며, 보정서를 접수하는 경우 그에 관하여 별도 공개함 (규칙 48.2(h))

(54) **Title:** ORGANIC COMPOUND AND ORGANIC ELECTROLUMINESCENT DEVICE USING SAME

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



(57) **Abstract:** The present invention relates to a novel organic compound and an organic electroluminescent device using same and, more specifically, to a compound having excellent electron injection and transport capabilities, and an organic electroluminescent device of which properties such as luminous efficiency, driving voltage, lifespan, and the like, and progressive driving voltage are improved due to the inclusion of the same in at least one organic layer.

(57) **요약서:** 본 발명은 신규한 유기 화합물 및 이를 이용한 유기 전계 발광 소자에 대한 것으로, 보다 상세하게는 전자 주입 및 수송 능력이 우수한 화합물 및 이를 하나 이상의 유기물층에 포함함으로써 발광효율, 구동 전압, 수명 등의 특성은 물론, 진행성 구동 전압이 향상된 유기 전계 발광 소자에 관한 것이다.

WO 2022/005251 A1

명세서

발명의 명칭: 유기 화합물 및 이를 이용한 유기 전계 발광 소자

기술분야

[1] 본 발명은 신규한 유기 발광 화합물 및 이를 이용한 유기 전계 발광 소자에 관한 것으로, 보다 상세하게는 전자수송 능력이 우수한 화합물 및 이를 하나 이상의 유기물층에 포함함으로써 발광효율, 구동 전압, 수명 등의 특성은 물론, 진행성 구동전입이 향상된 유기 전계 발광 소자에 관한 것이다.

배경기술

[2] 유기 전계 발광 소자(이하, '유기 EL 소자'라 함)는 두 전극 사이에 전압을 걸어주면 양극에서는 정공이 주입되고, 음극에서는 전자가 유기물층으로 주입된다. 주입된 정공과 전자가 만났을 때 엑시톤(exciton)이 형성되며, 이 엑시톤이 바닥상태로 떨어질 때 빛이 나게 된다. 이때 유기물층으로 사용되는 물질은 그 기능에 따라, 발광 물질, 정공 주입 물질, 정공 수송 물질, 전자 수송 물질, 전자 주입 물질 등으로 분류될 수 있다.

[3] 유기 EL 소자의 발광층 형성 재료는 발광색에 따라 청색, 녹색, 적색 발광 재료로 구분될 수 있다. 그 밖에, 보다 나은 천연색을 구현하기 위한 발광 재료로 노란색 및 주황색 발광 재료도 사용된다. 또한, 색순도의 증가와 에너지 전이를 통한 발광 효율을 증가시키기 위하여, 발광 재료로서 호스트/도펀트 계를 사용할 수 있다. 도판트 물질은 유기 물질을 사용하는 형광 도판트와 Ir, Pt 등의 중원자(heavy atoms)가 포함된 금속 착체 화합물을 사용하는 인광 도판트로 나눌 수 있다. 이러한 인광 재료의 개발은 이론적으로 형광에 비해 발광 효율을 4배까지 향상시킬 수 있어 인광 도판트 뿐만 아니라 인광 호스트 재료들에 대해 관심이 집중되고 있다.

[4] 현재까지 정공 주입층, 정공 수송층. 정공 차단층, 전자 수송층으로는, 하기 화학식으로 표현된 NPB, BCP, Alq_3 등이 널리 알려져 있고, 발광 재료는 안트라센 유도체들이 형광 도판트/호스트 재료로서 보고되고 있다. 특히 발광재료 중 효율 향상 측면에서 큰 장점을 가지고 있는 인광 재료로서는 Firpic, $Ir(ppy)_3$, $(acac)Ir(btp)_2$ 등과 같은 Ir을 포함하는 금속 착체 화합물이 청색, 녹색, 적색 도판트 재료로 사용되고 있다. 현재까지는 CBP가 인광 호스트 재료로 우수한 특성을 나타내고 있다.

[5] 그러나, 기존의 재료들은 발광 특성 측면에서는 유리한 면이 있으나, 유리전이온도가 낮고 열적 안정성이 매우 좋지 않아, 유기 EL 소자에서의 수명 측면에서 만족할 만한 수준이 되지 못하고 있다.

발명의 상세한 설명

기술적 과제

[6] 본 발명은 전자 주입 및 수송능, 전기화학적 안정성, 열적 안정성 등이 모두

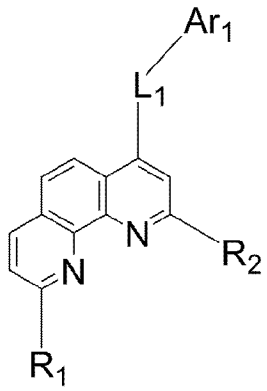
우수하여 유기 전계 발광 소자의 유기물층 재료, 구체적으로 전자 수송층 재료나 N형 전하생성층 재료로 사용될 수 있는 신규 유기 화합물을 제공하는 것을 목적으로 한다.

[7] 또한, 본 발명은 전술한 신규 유기 화합물을 포함하여 낮은 구동전압과 높은 발광효율을 나타내며 수명이 향상되는 유기 전계 발광 소자를 제공하는 것을 또 다른 목적으로 한다.

기술적 해결방법

[8] 상기한 목적을 달성하기 위해, 본 발명은 하기 화학식 1로 표시되는 유기 화합물을 제공한다:

[9] [화학식1]



[10] (상기 화학식 1에서,

[11] R_1 및 R_2는 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소, 중수소(D), C_1~C_{60}의 알킬기, C_3~C_{60}의 시클로알킬기 및 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기로 이루어진 군에서 선택되고, 다만 R_1 및 R_2이 모두 수소인 경우를 제외하며,

[12] L_1은 단일결합, C_6~C_{60}의 아릴렌기 및 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴렌기로 이루어진 군에서 선택되며,

[13] Ar_1은 C_6~C_{60}의 아릴기, -P(=O)(R_3)(R_4), 및 -Si(R_5)(R_6)(R_7)로 이루어진 군에서 선택되며,

[14] R_3 내지 R_7은 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로겐기, 히드록시기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기(amidino group), 히드라지노기(hydrazino group), 히드라조노기(hydrazono group), C_1~C_{60}의 알킬기, C_2~C_{60}의 알케닐기, C_2~C_{60}의 알키닐기, C_3~C_{60}의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 60개의 헤테로시클로알킬기, C_3~C_{60}의 시클로알케닐기, 핵원자수 3 내지 60개의 헤테로시클로알케닐기, C_6~C_{60}의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기, C_1~C_{60}의 알킬옥시기, C_6~C_{60}의 아릴옥시기, C_1~C_{60}의 알킬실릴기, C_6~C_{60}의 아릴실릴기, C_1~C_{40}의 알킬보론기, C_6~C_{60}의 아릴보론기, C_6~C_{60}의 아릴포스핀기, C_6~C_{60}의 아릴포스핀옥사이드기 및 C_6~C_{60}의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택되며,

[15] 상기 R_1 및 R_2의 알킬기, 시클로아킬기와 헤테로아릴기, 상기 L_1의 아릴렌기와

헤테로아릴렌기, 상기 Ar_1의 아릴기, 및 상기 R_3 내지 R_7의 히드라지노기, 히드라조노기, 알킬기, 알케닐기, 알키닐기, 시클로알킬기, 헤테로시클로알킬기, 시클로알케닐기, 헤테로시클로알케닐기, 아릴기, 헤테로아릴기, 알킬옥시기, 아릴옥시기, 알킬실릴기, 아릴실릴기, 알킬보론기, 아릴보론기, 아릴포스핀기, 아릴포스핀옥사이드기 및 아릴아민기는 각각 독립적으로 중수소, 할로겐기, 히드록시기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기(amidino group), 히드라지노기(hydrazino group), 히드라조노기(hydrazono group), C_1~C_{60}의 알킬기, C_2~C_{60}의 알케닐기, C_2~C_{60}의 알키닐기, C_3~C_{60}의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 60개의 헤테로시클로알킬기, C_3~C_{60}의 시클로알케닐기, 핵원자수 3 내지 60개의 헤테로시클로알케닐기, C_6~C_{60}의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기, C_1~C_{60}의 알킬옥시기, C_6~C_{60}의 아릴옥시기, C_1~C_{60}의 알킬실릴기, C_6~C_{60}의 아릴실릴기, C_1~C_{40}의 알킬보론기, C_6~C_{60}의 아릴보론기, C_6~C_{60}의 아릴포스핀기, C_6~C_{60}의 아릴포스핀옥사이드기 및 C_6~C_{60}의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상의 치환기로 치환 또는 비치환되며, 이때 상기 치환기가 복수인 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이함).

[16] 또, 본 발명은 애노드; 캐소드; 및 상기 애노드와 캐소드 사이에 개재(介在)된 1층 이상의 유기물층을 포함하며, 상기 1층 이상의 유기물층 중 적어도 하나는 전술한 유기 화합물을 포함하는 유기 전계 발광 소자를 제공한다. 이때, 상기 화합물을 포함하는 유기물층은 전자 수송층일 수 있다.

[17] 또한, 본 발명은 서로 이격 배향된 애노드와 캐소드; 상기 애노드와 캐소드 사이에 개재된 복수의 발광 유닛; 서로 인접한 발광 유닛 사이에 개재된 N형 전하 생성층 및 P형 전하 생성층을 포함하고, 상기 각 발광 유닛은 정공 수송층, 발광층 및 전자 수송층을 포함하고, 상기 N형 전하 생성층은 전술한 화합물을 포함하는 유기 전계 발광 소자를 제공한다.

발명의 효과

[18] 본 발명의 화합물은 전자수송능, 발광능, 전기화학적 안정성, 열적 안정성 등이 우수하기 때문에, 유기 전계 발광 소자의 유기물층 재료로 사용될 수 있다. 특히, 본 발명의 화합물을 전자 수송층 재료, 전자수송 보조층 재료 및 N형 전하생성층 재료 중 적어도 어느 하나로 사용될 경우, 종래 재료에 비해 우수한 발광 성능, 낮은 구동전압, 높은 효율 및 장수명 특성을 갖는 유기 전계 발광 소자를 제조할 수 있고, 나아가 성능 및 수명이 향상된 풀 칼라 디스플레이 패널도 제조할 수 있다.

도면의 간단한 설명

[19] 도 1은 본 발명의 제1 실시 형태에 따른 유기 전계 발광 소자를 개략적으로 나타낸 단면도이다.

[20] 도 2는 본 발명의 제2 실시 형태에 따른 유기 전계 발광 소자를 개략적으로 나타낸 단면도이다.

[21] 도 3은 본 발명의 제3 실시 형태에 따른 유기 전계 발광 소자를 개략적으로 나타낸 단면도이다.

[22] 도 4는 본 발명의 제4 실시 형태에 따른 유기 전계 발광 소자를 개략적으로 나타낸 단면도이다.

[23] ** 부호의 설명 **

[24] 100: 애노드, 200: 캐소드,

[25] 300: 유기물층, 310: 정공주입층,

[26] 320: 정공수송층, 330: 발광층,

[27] 340: 전자수송층, 350: 전자주입층,

[28] 360: 전자 수송 보조층, 400: 제1 발광 유닛, 410: 제1정공수송층, 420: 제1발광층,

[29] 430: 제1전자수송층, 440: 정공주입층,

[30] 500: 제2 발광 유닛, 510: 제2정공수송층,

[31] 520: 제2발광층, 530: 제2전자수송층,

[32] 600: 전하생성층, 610: N형 전하생성층,

[33] 620: P형 전하생성층

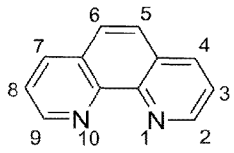
발명의 실시를 위한 형태

[34] 이하, 본 발명에 대해 설명한다.

[35] <신규 화합물>

[36] 본 발명은 전자 주입 및 수송능, 전기화학적 안정성, 열적 안정성 등이 우수하여 유기 전계 발광 소자의 고효율, 장수명, 구동전압 특성 및 진행성 구동전압 특성을 향상시킬 수 있는 전자수송층 재료, 전자수송 보조층 재료 또는 N형 전하생성층 재료로 사용될 수 있는 신규 화합물을 제공한다.

[37] 구체적으로, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 페난트롤린 모이어티(phenanthroline moiety)의 2번 및 9번 탄소 위치에 알킬기, 시클로알킬기 등이 도입되면서, 4번 탄소 위치에 아릴기나 포스핀옥사이드기 또는 실릴기가 직접 또는 링커기(예, 페닐렌기, 비페닐렌기, 터페닐렌기)를 통해 도입되어 이루어진 구조를 포함한다. 여기서, 페난트롤린 모이어티의 탄소/질소 위치 번호는 하기와 같이 나타낼 수 있다.

[38] 

[39] 본 발명의 화합물에서, 페난트롤린 모이어티는 전자가 상대적으로 풍부한 sp2 혼성 오비탈의 질소(N)를 포함한다. 특히, 페난트롤린 모이어티는 2개의 질소가 서로 이웃한 구조이기 때문에, 주변의 수소(H)와 공유 결합하거나 또는 Li, Yb 등과 같은 알칼리 금속 또는 알칼리 토금속과 배위결합이 가능하다. 이러한 페난트롤린 모이어티를 함유하는 상기 화학식 1의 화합물을 전자 수송층이나

N형 전하 생성층에 적용할 경우, 페난트롤린 모이어티는 도핑되는 알칼리 금속이나 알칼리 토금속을 트랩(trap)시켜 분자 내 전자 밀도를 높임으로써, 전자 주입 및 수송능을 향상시킬 수 있다. 예컨대, 본 발명의 화합물을 OLED의 N형 전하 생성층에 적용할 경우, 페난트롤린 모이어티의 질소가 N형 전하 생성층의 도펀트인 알칼리 금속 또는 알칼리 토금속과 결합(binding)하여 갭 스테이트(gap state)를 형성할 수 있다. 특히, 본 발명의 화합물은 N형 전하 생성층의 호스트 물질로 다른 호스트 물질과의 혼합 없이 단독으로 사용되더라도, 갭 스테이트에 의해서 N형 전하 생성층에서 전자 수송층으로 전자를 원활하게 전달할 수 있다. 또한, 본 발명의 화합물을 OLED의 전자 수송층에 적용할 경우에도, 발광층 측으로 전자를 원활하게 전달할 수 있다. 따라서, 본 발명의 화합물이 N형 전하 생성층 재료나 전자 수송층 재료로 사용될 경우, 유기 전계 발광 소자의 구동 전압을 낮추면서, 발광 효율을 높이고, 고수명을 구현할 수 있다.

[40] 또, 상기 화합물의 페난트롤린 모이어티는 전자 흡수성이 큰 모이어티이기 때문에, 전자 끌개기(electron withdrawing group, EWG)로 작용할 수 있다. 이러한 페난트롤린 모이어티의 4번 위치에는 아릴기나 포스핀옥사이드기 또는 실릴기가 직접 또는 링커기를 통해 도입되어 있다. 특히, 아릴기가 페난트롤린 모이어티의 4번 위치에 도입됨으로써, 본 발명의 화합물은 페난트롤린 유도체 고유의 LUMO(lowest unoccupied molecular orbital) 에너지 레벨을 유지하면서, 효율 및 구동 전압을 개선시킬 수 있다. 따라서, 본 발명의 화합물이 유기 전계 발광 소자에 적용될 경우, 소자의 저구동전압, 고전류효율 및 장수명 특성을 구현시킬 뿐만 아니라, 진행성 구동전압 특성을 향상시켜 소자의 소비전력의 상승 및 수명 저하를 방지할 수 있다.

[41] 또한, 상기 화합물의 페난트롤린 모이어티는 활성 사이트(active site)인 2번 및 9번 위치에 알킬기, 시클로알킬기 등과 같은 치환기가 각각 도입됨으로써, 활성 사이트를 차단하여 열적 안정성을 향상시킬 수 있다. 다만, 페난트롤린 모이어티의 2번 및/또는 9번에 아릴기가 도입된 화합물은 분자량의 증가로 인해 화합물의 승화 온도가 증가되기 때문에, 유계 발광 소자의 제조시 화합물을 승화시키기 위한 과량의 고열로 인해서 소자가 손상될 수 있다. 이 때문에, 페난트롤린 모이어티의 2번 및/또는 9번에는 아릴기보다 알킬기, 시클로아킬기, 특히 사슬 길이가 짧은 알킬기나 시클로 알킬기를 도입하는 것이 바람직하다. 이러한 본 발명의 화합물은 최소의 분자량 증가를 통해 활성 사이트를 차단할 수 있기 때문에, 소자의 열화 없이 열적 안정성을 증가시킬 수 있다. 또, 본 발명의 화합물은 페난트롤린 모이어티의 2번 및 9번에 아릴기가 도입된 화합물에 비해 승화 온도가 낮다. 따라서, 본 발명의 화합물은 열적 안정성을 증가시킴과 동시에, 소자의 제조시 소자의 열화를 방지할 수 있다.

[42] 전술한 바와 같이, 본 발명에 따른 화학식 1로 표시되는 화합물은 전자 주입 및 수송 능력이 우수하다. 따라서, 본 발명의 화합물은 유기 전계 발광 소자의 유기물층, 바람직하게 전자 수송층 재료로 사용될 수 있다. 또, 본 발명의

화합물은 탠덤 구조의 유기 전계 발광 소자의 N형 전하 생성층 재료로 사용될 수 있다. 이와 같이, 본 발명의 화학식 1로 표시되는 화합물을 유기 전계 발광 소자의 전자수송층 재료 또는 N형 전하 생성층 재료로 적용할 경우, 소자의 구동 전압, 발광 효율 및 수명 등의 특성을 향상시킬 수 있음은 물론, 진행성 구동 전압의 상승을 방지할 수 있고, 나아가 상기 유기 전계 발광 소자가 적용된 풀 칼라 유기 발광 패널도 성능도 극대화시킬 수 있다.

[43] 상기 화학식 1로 표시되는 화합물에서, R_1 및 R_2는 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소, 중수소(D), C_1~C_{60}의 알킬기, C_3~C_{60}의 시클로알킬기, 및 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기로 이루어진 군에서 선택된다. 다만, R_1 및 R_2가 모두 수소인 경우를 제외한다. 이러한 화학식 1의 화합물은 R_1 및 R_2가 모두 수소인 화합물과 달리, 페난트롤린 모이어티의 활성 사이트(active site) 일부, 바람직하게 모두가 차단함으로써, 열적 안정성이 향상될 수 있다. 또한, 상기 화학식 1의 화합물은 R_1 및 R_2이 아릴기인 화합물과 달리, 최소의 분자량 증가를 통해 활성 사이트가 차단하기 때문에, 소자의 열화 없이 열적 안정성이 증가될 수 있다.

[44] 일례로, 상기 R_1 및 R_2 중 적어도 하나는 C_1~C_{60}의 알킬기 또는 C_3~C_{60}의 시클로알킬기일 수 있다.

[45] 다른 일례로, 상기 R_1 및 R_2는 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소, C_1~C_{20}의 알킬기 및 C_3~C_{20}의 시클로알킬기로 이루어진 군에서 선택되고, 다만 상기 R_1 및 R_2 중 적어도 하나는 C_1~C_{20}의 알킬기 또는 C_3~C_{20}의 시클로알킬기일 수 있다.

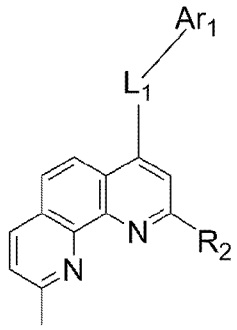
[46] 또 다른 일례로, 상기 R_1 및 R_2는 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소, C_1~C_6의알킬기, 및 C_3~C_6의 시클로알킬기로 이루어진 군에서 선택되고, 다만 상기 R_1 및 R_2 중 적어도 하나는 C_1~C_6의 알킬기 또는 C_3~C_6의 시클로알킬기일 수 있고, 구체적으로 메틸기, 에틸기, 메틸기, 에틸기, 프로필기, 이소프로필기, n-부틸기, s-부틸기, 이소부틸기, t-부틸기 및 시클로헥실기로 이루어진 군에서 선택될 수 있다.

[47] 상기 R_1 및 R_2의 알킬기, 시클로알킬기 및 헤테로아릴기는 각각 독립적으로 중수소, 할로겐기, 히드록시기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기(amidino group), 히드라지노기(hydrazino group), 히드라조노기(hydrazono group), C_1~C_{60}의 알킬기, C_2~C_{60}의 알케닐기, C_2~C_{60}의 알키닐기, C_3~C_{60}의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 60개의 헤테로시클로알킬기, C_3~C_{60}의 시클로알케닐기, 핵원자수 3 내지 60개의 헤테로시클로알케닐기, C_6~C_{60}의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기, C_1~C_{60}의 알킬옥시기, C_6~C_{60}의 아릴옥시기, C_1~C_{60}의 알킬실릴기, C_6~C_{60}의 아릴실릴기, C_1~C_{40}의 알킬보론기, C_6~C_{60}의 아릴보론기, C_6~C_{60}의 아릴포스핀기, C_6~C_{60}의 아릴포스핀옥사이드기 및 C_6~C_{60}의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상의 치환기로 치환 또는 비치환되며, 이때 상기 치환기가 복수인 경우,

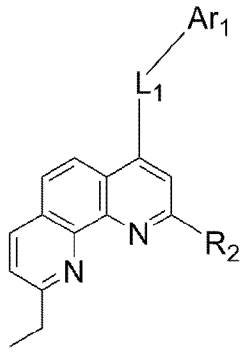
이들은 서로 동일하거나 상이하다. 여기서, 상기 헤테로시클로알킬기 및 헤테로아릴기는 각각 N, S, O 및 Se로 이루어진 군에서 선택된 1개 이상의 헤테로원자를 포함한다.

[48] 이러한 R_1 및 R_2에 따라, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 하기 화학식 2 내지 5 중 어느 하나로 표시되는 화합물일 수 있는데, 이에 한정되지 않는다.

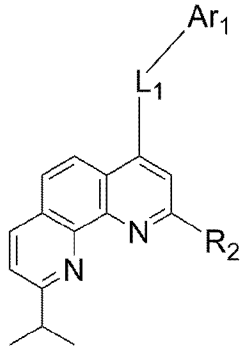
[49] [화학식2]



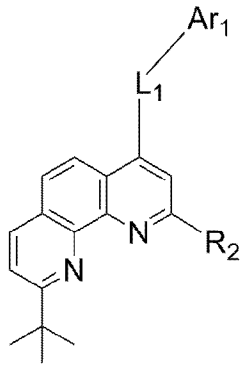
[50] [화학식3]



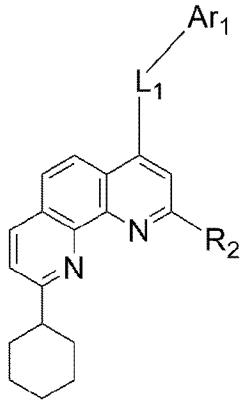
[51] [화학식4]



[52] [화학식5]



[53] [화학식6]



[54] 상기 화학식 2 내지 6에서,

[55] L_1 및 Ar_1은 상기 화학식 1에서 정의한 바와 같고,

[56] R_2는 C_1~C_6의 알킬기 또는 C_3~C_6의 시클로알킬기이고, 구체적으로 메틸기, 에틸기, 메틸기, 에틸기, 프로필기, 이소프로필기, n-부틸기, s-부틸기, 이소부틸기, t-부틸기 및 시클로헥실기로 이루어진 군에서 선택될 수 있다. 이때, R_2는 상기 화학식 1의 R_1에 해당되는 화학식 2~6의 치환기와 동일하거나 상이할 수 있다.

[57] 일례에 따르면, 상기 화학식 2 내지 6의 화합물에서, R_2는 C_1~C_6의 알킬기 또는 C_3~C_6의 시클로알킬기이고, 구체적으로 메틸기, 에틸기, 메틸기, 에틸기, 프로필기, 이소프로필기, n-부틸기, s-부틸기, 이소부틸기, t-부틸기 및 시클로헥실기로 이루어진 군에서 선택될 수 있고, 이때 상기 화학식 1의 R_1에 해당되는 화학식 2~6의 치환기와 동일하다.

[58] 상기 화학식 1에서, L_1은 단일결합, C_6~C_{60}의 아릴렌기 및 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴렌기로 이루어진 군에서 선택되며, 구체적으로 단일결합이거나, 또는 C_6~C_{30}의 아릴렌기 및 핵원자수 5 내지 30개의 헤테로아릴렌기로 이루어진 군에서 선택될 수 있다.

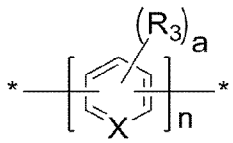
[59] 상기 L_1의 아릴렌기와 헤테로아릴렌기는 각각 독립적으로 중수소, 할로겐기, 히드록시기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기(amidino group), 히드라지노기(hydrazino group), 히드라조노기(hydrazono group), C_1~C_{60}의 알킬기,

C_2~C_{60}의 알케닐기, C_2~C_{60}의 알키닐기, C_3~C_{60}의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 60개의 헤테로시클로알킬기, C_3~C_{60}의 시클로알케닐기, 핵원자수 3 내지 60개의 헤테로시클로알케닐기,C_6~C_{60}의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기, C_1~C_{60}의 알킬옥시기, C_6~C_{60}의 아릴옥시기, C_1~C_{60}의 알킬실릴기, C_6~C_{60}의 아릴실릴기, C_1~C_{40}의 알킬보론기, C_6~C_{60}의 아릴보론기, C_6~C_{60}의 아릴포스핀기, C_6~C_{60}의 아릴포스핀옥사이드기 및 C_6~C_{60}의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상의 치환기로 치환 또는 비치환되며, 이때 상기 치환기가 복수인 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이하다.

[60] 일례로, 상기 L_1은 C_6~C_{60}의 아릴렌기 또는 핵원자수 5 내지 60개의 N-함유 헤테로아릴렌기일 수 있다.

[61] 다른 일례로, 상기 L_1은 하기 화학식 L로 표시되는 링커기일 수 있다.

[62] [화학식 L]

[63] 

[64] 상기 화학식 L에서,

[65] n은 0 내지 3의 정수이고,

[66] a는 0 내지 4의 정수이며,

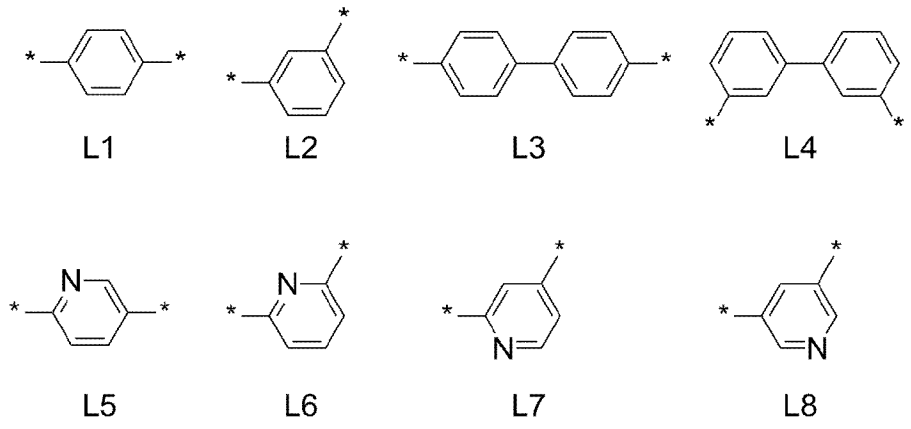
[67] X는 C 또는 N이며,

[68] R_3가 복수인 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이하고,

[69] R_3은 수소, 중수소, 할로겐기, 히드록시기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기(amidino group), 히드라지노기(hydrazino group), 히드라조노기(hydrazono group), C_1~C_{60}의 알킬기, C_2~C_{60}의 알케닐기, C_2~C_{60}의 알키닐기, C_3~C_{60}의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 60개의 헤테로시클로알킬기, C_3~C_{60}의 시클로알케닐기, 핵원자수 3 내지 60개의 헤테로시클로알케닐기, C_6~C_{60}의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기, C_1~C_{60}의 알킬옥시기, C_6~C_{60}의 아릴옥시기, C_1~C_{60}의 알킬실릴기, C_6~C_{60}의 아릴실릴기, C_1~C_{40}의 알킬보론기, C_6~C_{60}의 아릴보론기, C_6~C_{60}의 아릴포스핀기, C_6~C_{60}의 아릴포스핀옥사이드기 및 C_6~C_{60}의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택된다.

[70] 또 다른 일례로, L_1은 하기 링커기 L1 내지 L8로 이루어진 군에서 선택된 것일 수 있다. 이 경우, 본 발명의 화합물은 페난트롤린 모이어티와 치환체 Ar_1이 링커기를 중심으로 파라(para) 또는 메타(meta) 위치로 결합하거나, 또는 파라-파라 혹은 메타-메타 위치로 결합한다. 이로써, 본 발명의 화합물은 판상형 구조를 이루어 분자 간의 스택킹(stacking)이 유도되고, 따라서 전자 이동도가 증가되어 더 우수한 전자 수송성을 가질 수 있다. 또, 본 발명의 화합물은 페난트롤린 모이어티와 치환체 Ar_1 간의 상호 작용이 최소화되고, 분자의 구조적 안정성이 증가되며, 화합물 내 입체 장애(steric hindrance)가 최소화되어 화합물

자체의 물적, 전기화학적 안정성, 열적 안정성이 유의적으로 증가될 수 있다. 또, 본 발명의 화합물은 페난트롤린 모이어티와 치환체 Ar_1이 링커기를 중심으로 오쏘(ortho) 위치로 결합하거나 또는 오쏘-오쏘 위치로 도입된 화합물에 비해, 유기층의 결정화 억제에도 효과가 있어, 유기 전계 발광 소자의 내구성 및 수명 특성을 크게 향상시킬 수 있다.

[71] 

[72] 상기 링커기 L1~L8의 수소는 중수소(D), 할로겐, 시아노기, 니트로기, C_1~C_{12}의 알킬기, C_6~C_{10}의 아릴기, 핵원자수 5~9개의 헤테로아릴기 등의 1 이상의 치환기로 치환될 수 있다.

[73] 상기 화학식 1에서, Ar_1은 C_6~C_{60}의 아릴기, -P(=O)(R_3)(R_4), 및 -Si(R_5)(R_6)(R_7)로 이루어진 군에서 선택되며, 구체적으로 C_6~C_{30}의 아릴기, -P(=O)(R_3)(R_4), 및 -Si(R_5)(R_6)(R_7)로 이루어진 군에서 선택될 수 있다.

[74] 일례로, Ar_1은 C_6~C_{60}의 아릴기, 구체적으로 C_6~C_{30}의 아릴기일 수 있다. 이 경우, 페난트롤린 유도체 고유의 LUMO(lowest unoccupied molecular orbital) 에너지 레벨을 유지하면서, 효율 및 구동 전압을 개선시킬 수 있다.

[75] 상기 R_3 내지 R_7은 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로겐기, 히드록시기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기(amidino group), 히드라지노기(hydrazino group), 히드라조노기(hydrazono group), C_1~C_{60}의 알킬기, C_2~C_{60}의 알케닐기, C_2~C_{60}의 알키닐기, C_3~C_{60}의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 60개의 헤테로시클로알킬기, C_3~C_{60}의 시클로알케닐기, 핵원자수 3 내지 60개의 헤테로시클로알케닐기, C_6~C_{60}의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기, C_1~C_{60}의 알킬옥시기, C_6~C_{60}의 아릴옥시기, C_1~C_{60}의 알킬실릴기, C_6~C_{60}의 아릴실릴기, C_1~C_{40}의 알킬보론기, C_6~C_{60}의 아릴보론기, C_6~C_{60}의 아릴포스핀기, C_6~C_{60}의 아릴포스핀옥사이드기 및 C_6~C_{60}의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택된다. 구체적으로, 상기 R_3 내지 R_7은 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 중수소, 할로겐기, 히드록시기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기(amidino group), 히드라지노기(hydrazino group), 히드라조노기(hydrazono group), C_1~C_{20}의 알킬기, C_2~C_{20}의 알키닐기, C_3~C_{20}의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 30개의

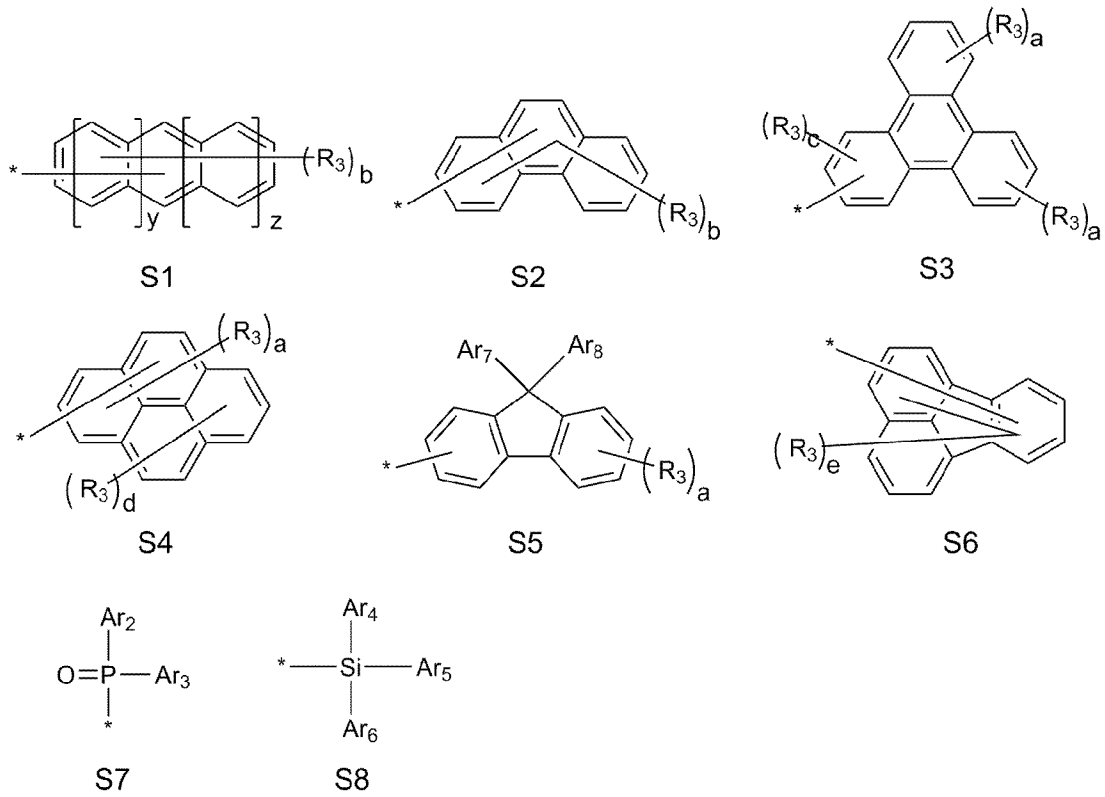
헤테로시클로알킬기, C_3~C_{20}의 시클로알케닐기, 핵원자수 3 내지 30개의 헤테로시클로알케닐기, C_6~C_{30}의 아릴기, 핵원자수 5 내지 30개의 헤테로아릴기, 및 C_1~C_{30}의 알킬옥시기, C_6~C_{30}의 아릴옥시기로 이루어진 군에서 선택될 수 있다.

[76] 일례로, 상기 R_3 내지 R_7은 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 C_6~C_{30}의 아릴기, 구체적으로 C_6~C_{30}의 아릴기일 수 있다. 이러한 아릴기의 예로는 페닐기, 바이페닐기, 터페닐기, 나프틸기, 페난트릴기, 안트릴기, 나프타센일기, 피렌일기, 크라이센일기 등이 있는데, 이에 한정되지 않는다.

[77] 상기 Ar_1의 아릴기, 및 상기 R_3 내지 R_7의 히드라지노기, 히드라조노기, 알킬기, 알케닐기, 알키닐기, 시클로알킬기, 헤테로시클로알킬기, 시클로알케닐기, 헤테로시클로알케닐기, 아릴기, 헤테로아릴기, 알킬옥시기, 아릴옥시기, 알킬실릴기, 아릴실릴기, 알킬보론기, 아릴보론기, 아릴포스핀기, 아릴포스핀옥사이드기 및 아릴아민기는 각각 독립적으로 중수소, 할로겐기, 히드록시기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기(amidino group), 히드라지노기(hydrazino group), 히드라조노기(hydrazono group), C_1~C_{60}의 알킬기, C_2~C_{60}의 알케닐기, C_2~C_{60}의 알키닐기, C_3~C_{60}의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 60개의 헤테로시클로알킬기, C_3~C_{60}의 시클로알케닐기, 핵원자수 3 내지 60개의 헤테로시클로알케닐기,C_6~C_{60}의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기, C_1~C_{60}의 알킬옥시기, C_6~C_{60}의 아릴옥시기, C_1~C_{60}의 알킬실릴기, C_6~C_{60}의 아릴실릴기, C_1~C_{40}의 알킬보론기, C_6~C_{60}의 아릴보론기, C_6~C_{60}의 아릴포스핀기, C_6~C_{60}의 아릴포스핀옥사이드기 및 C_6~C_{60}의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상의 치환기로 치환 또는 비치환되며, 이때 상기 치환기가 복수인 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이하다.

[78] 구체적으로, 상기 Ar_1은 하기 화학식 S1 내지 S8로 이루어진 군에서 선택된 어느 하나로 표시되는 치환체일 수 있는데, 이에 한정되지 않는다.

[79]



[80] 상기 화학식 S1~S8에서,

[81] a는 0 내지 4의 정수이고,

[82] b는 0 내지 9의 정수이며,

[83] c는 0 내지 3의 정수이고,

[84] d는 0 내지 5의 정수이며,

[85] e는 0 내지 9의 정수이고,

[86] 복수의 R_3는 서로 동일하거나 상이하고,

[87] R_3는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로겐기, 히드록시기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기(amidino group), 히드라지노기(hydrazinogroup), 히드라조노기(hydrazono group), C_1~C_{60}의 알킬기, C_2~C_{60}의 알케닐기, C_2~C_{60}의 알키닐기, C_3~C_{60}의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 60개의 헤테로시클로알킬기, C_3~C_{60}의 시클로알케닐기, 핵원자수 3 내지 60개의 헤테로시클로알케닐기,C_6~C_{60}의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기, C_1~C_{60}의 알킬옥시기, C_6~C_{60}의 아릴옥시기, C_1~C_{60}의 알킬실릴기, C_6~C_{60}의 아릴실릴기, C_1~C_{40}의 알킬보론기, C_6~C_{60}의 아릴보론기, C_6~C_{60}의 아릴포스핀기, C_6~C_{60}의 아릴포스핀옥사이드기 및 C_6~C_{60}의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택되며,

[88] y 및 z은 각각 0 또는 1이고,

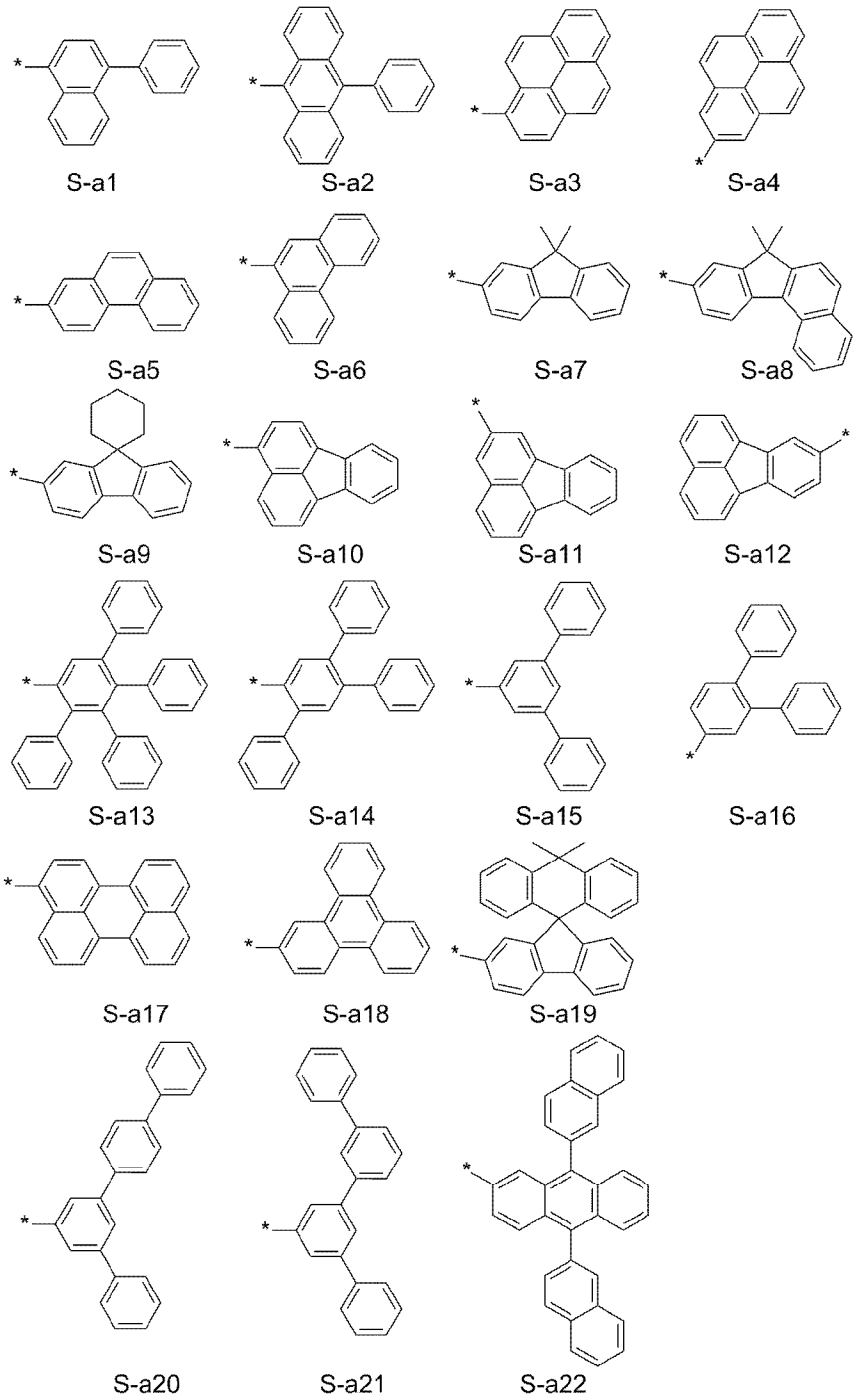
[89] Ar_2 내지 Ar_8은 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로겐기, 히드록시기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기(amidino group), 히드라지노기(hydrazino group), 히드라조노기(hydrazono group), C_1~C_{60}의 알킬기, C_2~C_{60}의 알케닐기, C_2~C_{60}의 알키닐기, C_3~C_{60}의 시클로알킬기,

핵원자수 3 내지 60개의 헤테로시클로알킬기, C_3~C_{60}의 시클로알케닐기, 핵원자수 3 내지 60개의 헤테로시클로알케닐기,C_6~C_{60}의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기, C_1~C_{60}의 알킬옥시기, C_6~C_{60}의 아릴옥시기, C_1~C_{60}의 알킬실릴기, C_6~C_{60}의 아릴실릴기, C_1~C_{40}의 알킬보론기, C_6~C_{60}의 아릴보론기, C_6~C_{60}의 아릴포스핀기, C_6~C_{60}의 아릴포스핀옥사이드기 및 C_6~C_{60}의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택되거나, 또는 인접한 기(예, Ar_7과 Ar_8)와 축합하여 축합 고리(구체적으로, C_3~C_{40}의 축합 지방족 고리, C_6~C_{60}의 축합 방향족 고리, 핵원자수 3 내지 60의 축합 헤테로지방족 고리, 핵원자수 5 내지 60의 축합 헤테로방향족 고리 또는 이들의 조합된 형태)를 형성할 수 있고,

[90] 상기 Ar_2 내지 Ar_8의 히드라지노기, 히드라조노기, 알킬기, 알케닐기, 알키닐기, 시클로알킬기, 헤테로시클로알킬기, 시클로알케닐기, 헤테로시클로알케닐기, 아릴기, 헤테로아릴기, 알킬옥시기, 아릴옥시기, 알킬실릴기, 아릴실릴기, 알킬보론기, 아릴보론기, 아릴포스핀기, 아릴포스핀옥사이드기 및 아릴아민기는각각 독립적으로 중수소, 할로겐기, 히드록시기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기(amidino group), 히드라지노기(hydrazino group), 히드라조노기(hydrazono group), C_1~C_{60}의 알킬기, C_2~C_{60}의 알케닐기, C_2~C_{60}의 알키닐기, C_3~C_{60}의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 60개의 헤테로시클로알킬기, C_3~C_{60}의 시클로알케닐기, 핵원자수 3 내지 60개의 헤테로시클로알케닐기,C_6~C_{60}의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기, C_1~C_{60}의 알킬옥시기, C_6~C_{60}의 아릴옥시기, C_1~C_{60}의 알킬실릴기, C_6~C_{60}의 아릴실릴기, C_1~C_{40}의 알킬보론기, C_6~C_{60}의 아릴보론기, C_6~C_{60}의 아릴포스핀기, C_6~C_{60}의 아릴포스핀옥사이드기 및 C_6~C_{60}의 아릴아민기로1종 이상의 치환기로 치환 또는 비치환되며, 이때 상기 치환기가 복수인 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이하다.

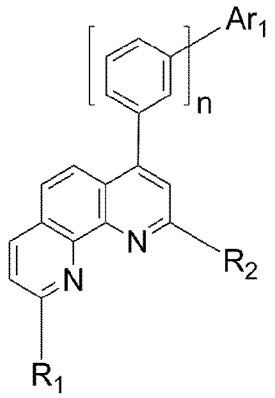
[91] 더 구체적으로, 상기 Ar_1은 하기 화학식 S-a1 내지 S-a22로 이루어진 군에서 선택된 어느 하나로 표시되는 치환체일 수 있는데, 이에 한정되지 않는다.

[92]

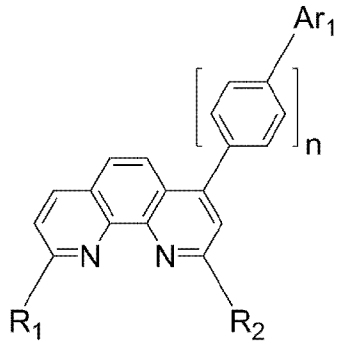


[93] 본 발명에 따른 화학식 1로 표시되는 화합물은 하기 화학식 7 내지 12 중 어느 하나로 표시되는 화합물로 구체화될 수 있는데, 이에 한정되지 않는다.

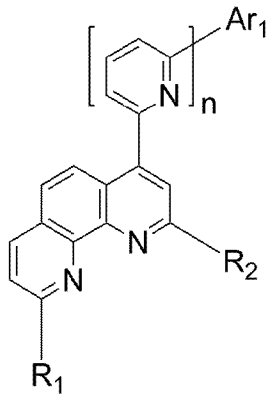
[94] [화학식7]



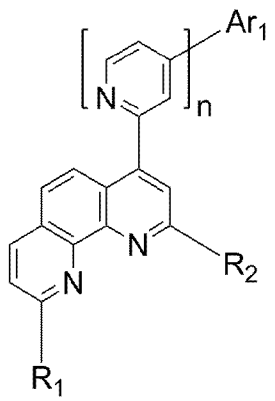
[95] [화학식8]



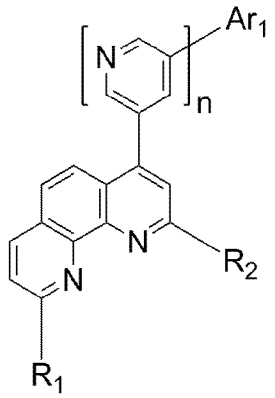
[96] [화학식9]



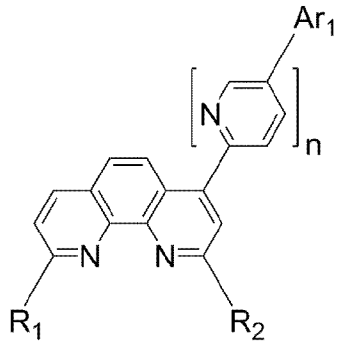
[97] [화학식10]



[98] [화학식11]



[99] [화학식12]



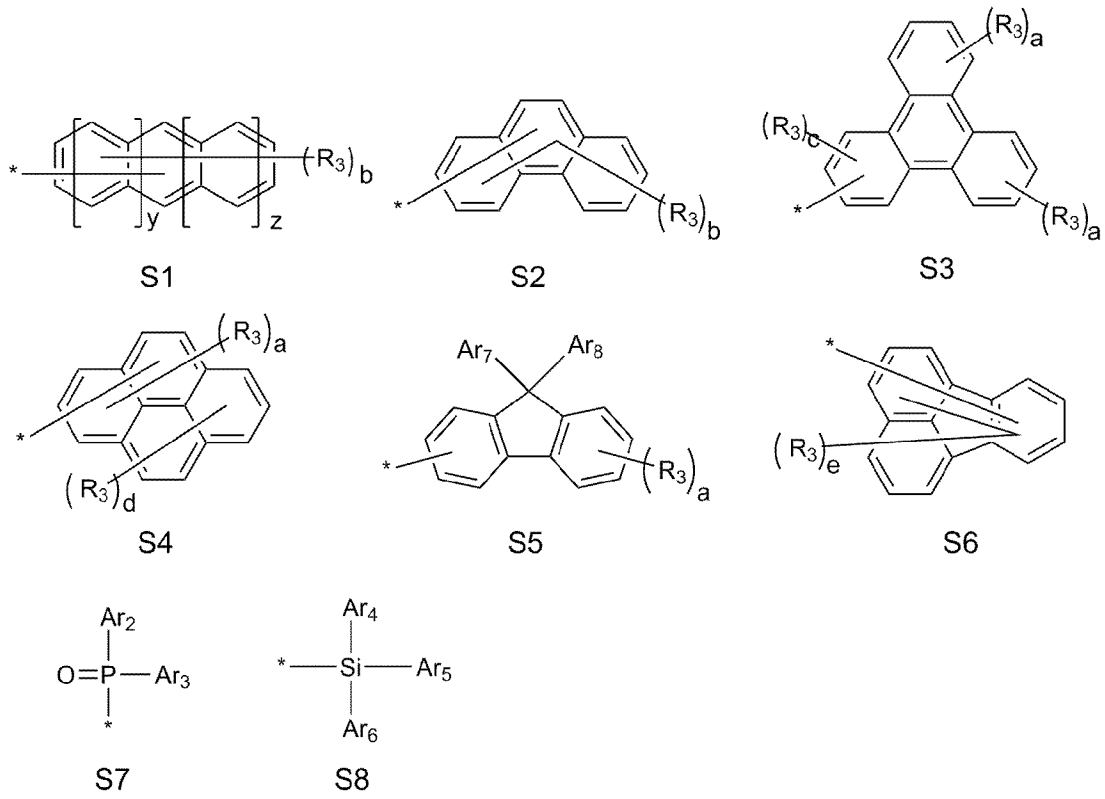
[100] 상기 화학식 7 내지 12에서,

[101] R_1 및 R_2는 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 C_1~C_6의 알킬기 또는 C_3~C_6의 시클로알킬기이고,

[102] n은 0 또는 1이며,

[103] Ar_1은 하기 치환체 S1 내지 S8로 이루어진 군에서 선택된 치환체이며,

[104]



[105] 상기 화학식 S1~S8에서,

[106] a는 0 내지 4의 정수이고,

[107] b는 0 내지 9의 정수이며,

[108] c는 0 내지 3의 정수이고,

[109] d는 0 내지 5의 정수이며,

[110] e는 0 내지 9의 정수이고,

[111] 복수의 R_3는 서로 동일하거나 상이하고,

[112] R_3는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로겐기, 히드록시기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기(amidino group), 히드라지노기(hydrazinogroup), 히드라조노기(hydrazono group), C_1~C_{60}의 알킬기, C_2~C_{60}의 알케닐기, C_2~C_{60}의 알키닐기, C_3~C_{60}의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 60개의 헤테로시클로알킬기, C_3~C_{60}의 시클로알케닐기, 핵원자수 3 내지 60개의 헤테로시클로알케닐기,C_6~C_{60}의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기, C_1~C_{60}의 알킬옥시기, C_6~C_{60}의 아릴옥시기, C_1~C_{60}의 알킬실릴기, C_6~C_{60}의 아릴실릴기, C_1~C_{40}의 알킬보론기, C_6~C_{60}의 아릴보론기, C_6~C_{60}의 아릴포스핀기, C_6~C_{60}의 아릴포스핀옥사이드기 및 C_6~C_{60}의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택되며,

[113] y 및 z은 각각 0 또는 1이고,

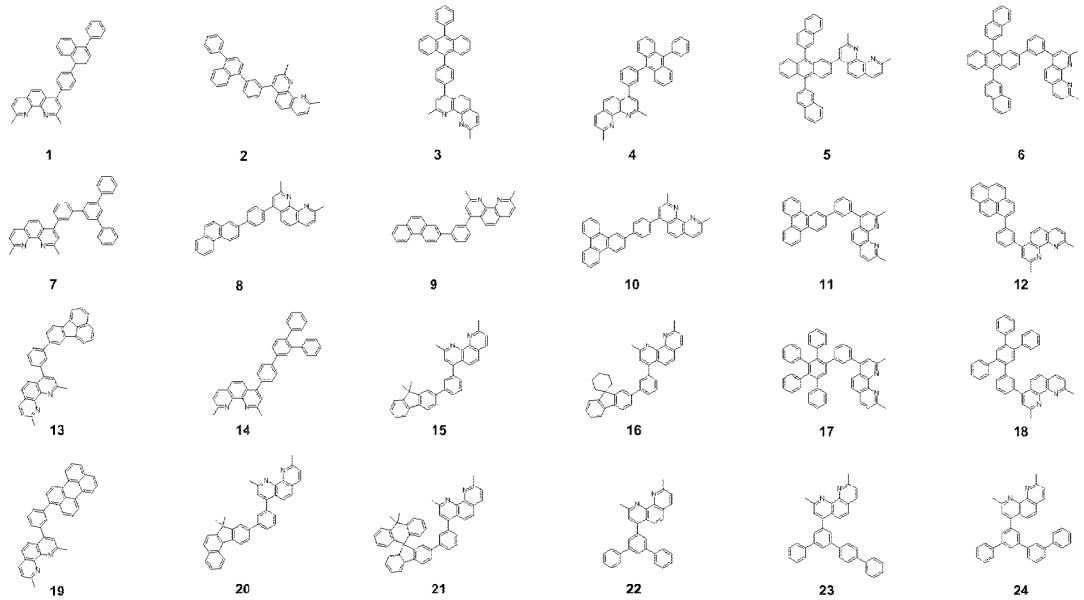
[114] Ar_2 내지 Ar_8은 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로겐기, 히드록시기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기(amidino group), 히드라지노기(hydrazino group), 히드라조노기(hydrazono group), C_1~C_{60}의 알킬기, C_2~C_{60}의 알케닐기, C_2~C_{60}의 알키닐기, C_3~C_{60}의 시클로알킬기,

핵원자수 3 내지 60개의 헤테로시클로알킬기, C_3~C_{60}의 시클로알케닐기, 핵원자수 3 내지 60개의 헤테로시클로알케닐기,C_6~C_{60}의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기, C_1~C_{60}의 알킬옥시기, C_6~C_{60}의 아릴옥시기, C_1~C_{60}의 알킬실릴기, C_6~C_{60}의 아릴실릴기, C_1~C_{40}의 알킬보론기, C_6~C_{60}의 아릴보론기, C_6~C_{60}의 아릴포스핀기, C_6~C_{60}의 아릴포스핀옥사이드기 및 C_6~C_{60}의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택되거나, 또는 인접한 기와 축합하여 축합고리를 형성할 수 있고,

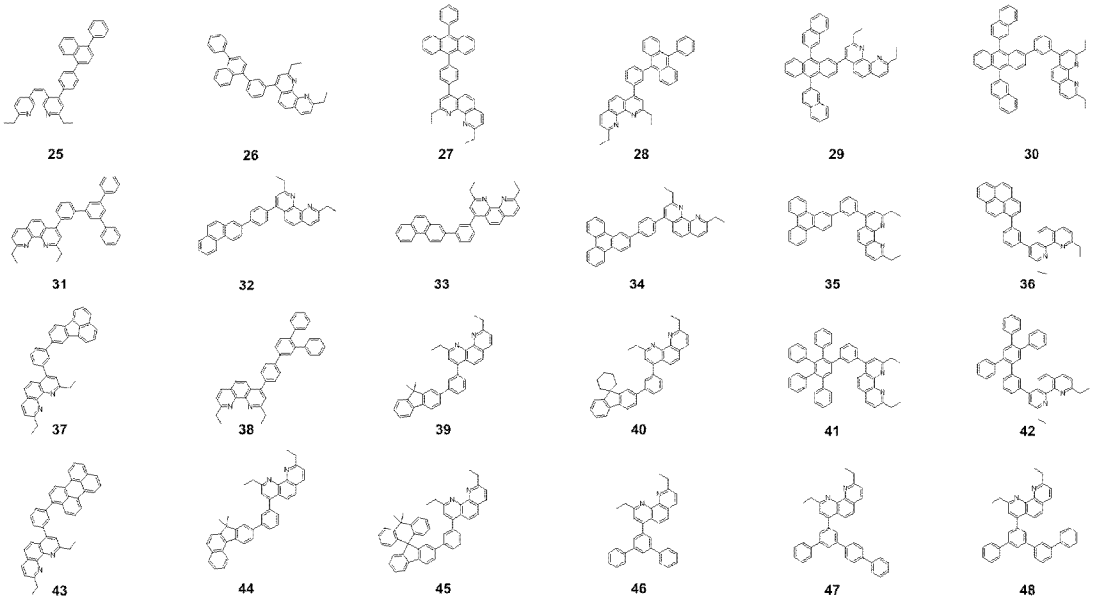
[115] 상기 Ar_2 내지 Ar_8의 히드라지노기, 히드라조노기, 알킬기, 알케닐기, 알키닐기, 시클로알킬기, 헤테로시클로알킬기, 시클로알케닐기, 헤테로시클로알케닐기, 아릴기, 헤테로아릴기, 알킬옥시기, 아릴옥시기, 알킬실릴기, 아릴실릴기, 알킬보론기, 아릴보론기, 아릴포스핀기, 아릴포스핀옥사이드기 및 아릴아민기는각각 독립적으로 중수소, 할로겐기, 히드록시기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기(amidino group), 히드라지노기(hydrazino group), 히드라조노기(hydrazono group), C_1~C_{60}의 알킬기, C_2~C_{60}의 알케닐기, C_2~C_{60}의 알키닐기, C_3~C_{60}의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 60개의 헤테로시클로알킬기, C_3~C_{60}의 시클로알케닐기, 핵원자수 3 내지 60개의 헤테로시클로알케닐기,C_6~C_{60}의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기, C_1~C_{60}의 알킬옥시기, C_6~C_{60}의 아릴옥시기, C_1~C_{60}의 알킬실릴기, C_6~C_{60}의 아릴실릴기, C_1~C_{40}의 알킬보론기, C_6~C_{60}의 아릴보론기, C_6~C_{60}의 아릴포스핀기, C_6~C_{60}의 아릴포스핀옥사이드기 및 C_6~C_{60}의 아릴아민기로1종 이상의 치환기로 치환 또는 비치환되며, 이때 상기 치환기가 복수인 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이하다.

[116] 전술한 본 발명에 따른 화학식 1로 표시되는 화합물은 하기 화합물 1 내지 화합물 186 중 어느 하나로 구체화될 수 있다. 그러나, 본 발명에 따른 화학식 1로 표시되는 화합물이 하기 예시된 것들에 의해 한정되는 것은 아니다.

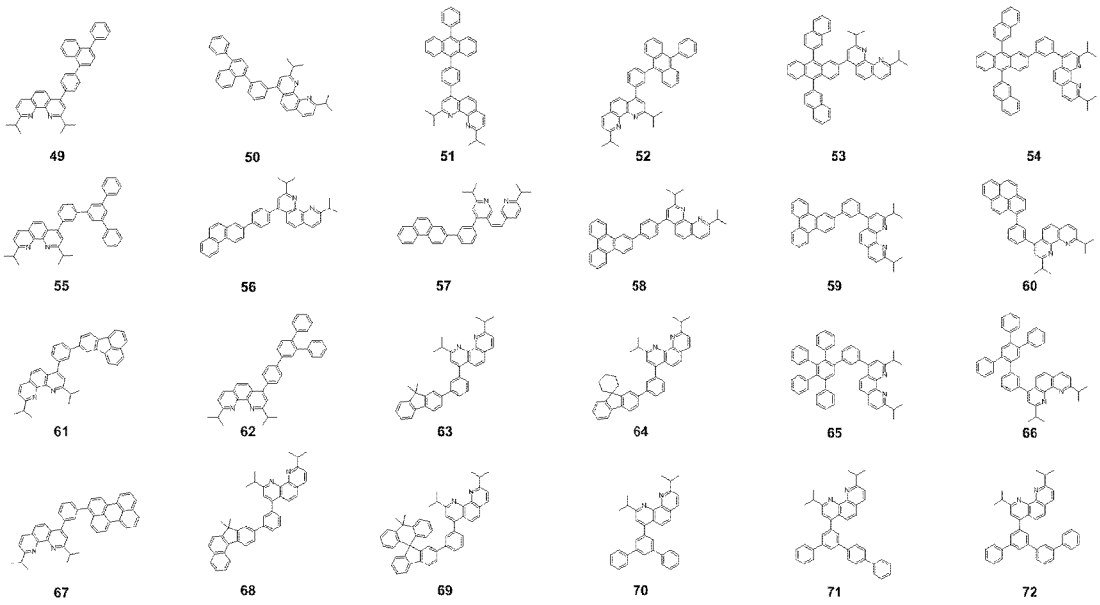
[117]



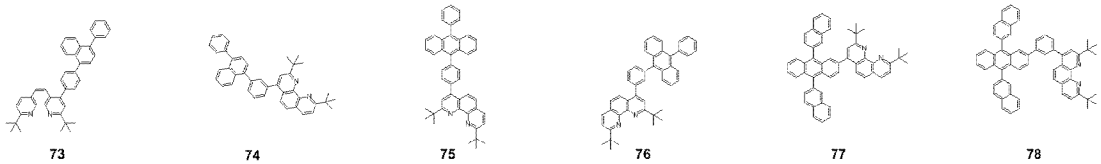
[118]


25
26
27
28
29
30
31
32
33
34
35
36
37
38
39
40
41
42
43
44
45
46
47
48

[119]


49
50
51
52
53
54
55
56
57
58
59
60
61
62
63
64
65
66
67
68
69
70
71
72

[120]


73

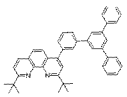
74

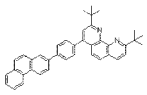
75

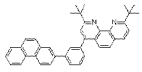
76

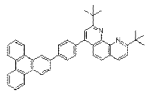
77

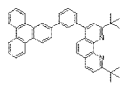
78

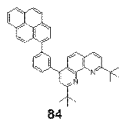

79

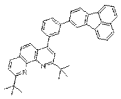

80

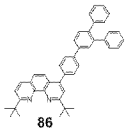

81

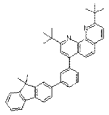

82

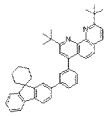

83

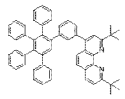

84

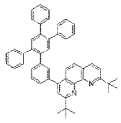

85

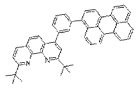

86

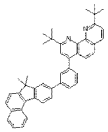

87

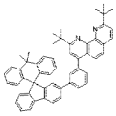

88

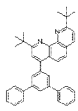

89

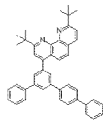

90

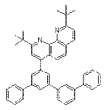

91


92

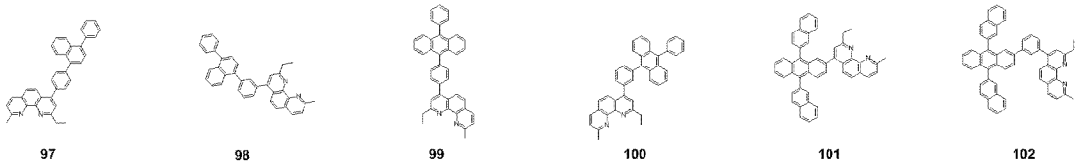

93


94


95


96

[121]


97

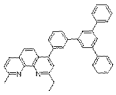
98

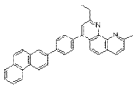
99

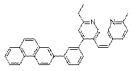
100

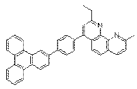
101

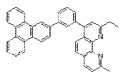
102

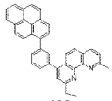

103

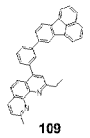

104

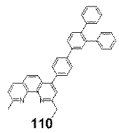

105

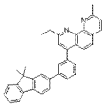

106

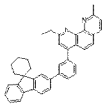

107


108


109


110


111


112

113

114

115

116

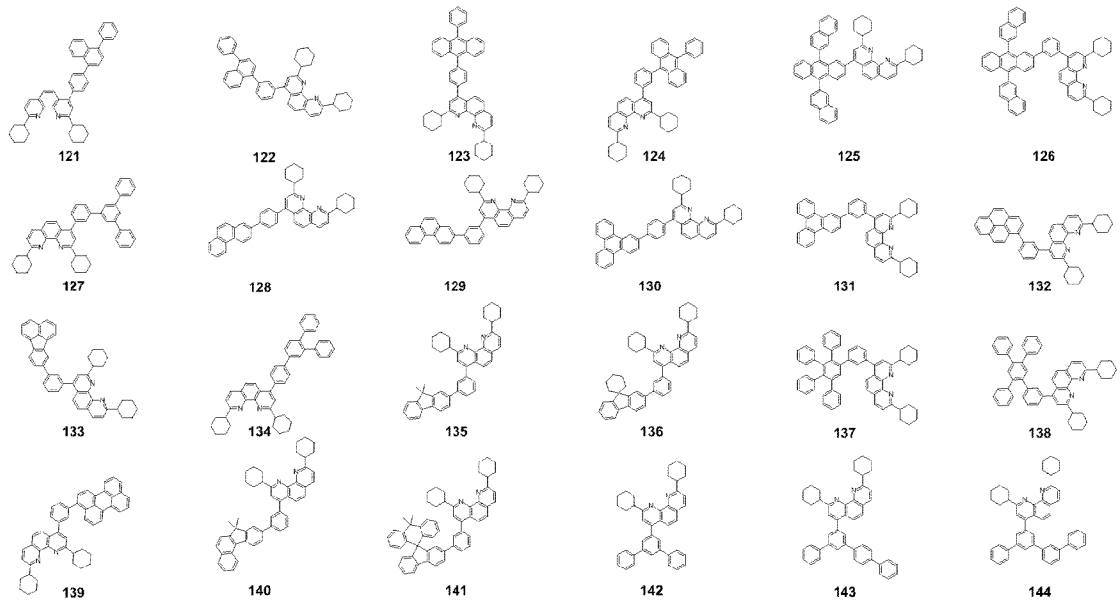
117

118

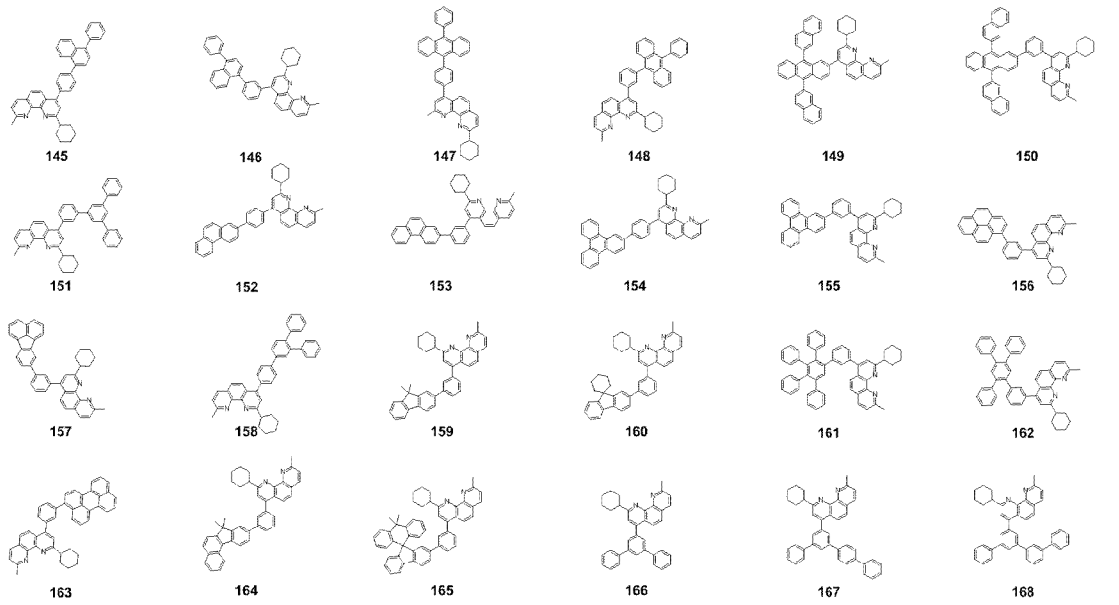
119

120

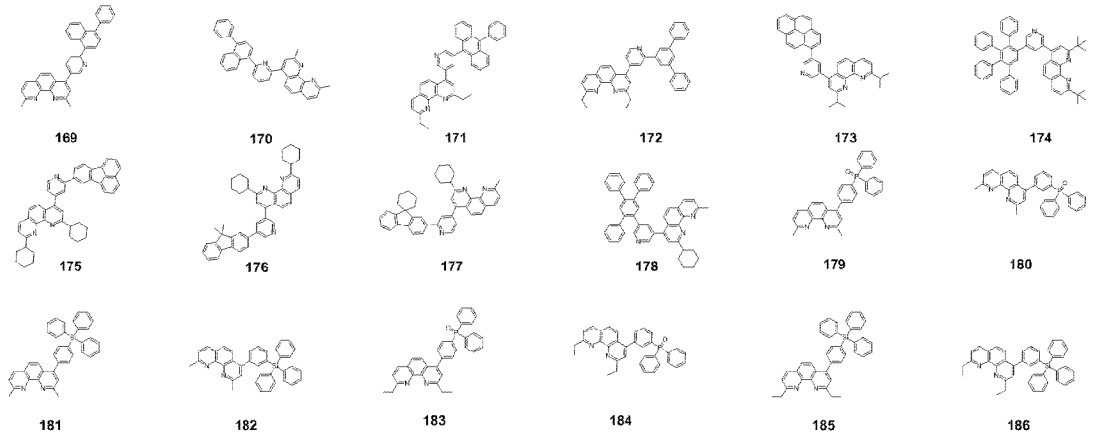
[122]



[123]



[124]



[125] 본 발명에서 "알킬"은 탄소수 1 내지 40의 직쇄 또는 측쇄의 포화 탄화수소에서 유래되는 1가의 치환기를 의미한다. 이의 예로는 메틸, 에틸, 프로필, 이소부틸,

sec-부틸, 펜틸, iso-아밀, 헥실 등이 있는데, 이에 한정되지는 않는다.

[126] 본 발명에서 "알케닐(alkenyl)"은 탄소-탄소 이중 결합을 1개 이상 가진 탄소수 2 내지 40의 직쇄 또는 측쇄의 불포화 탄화수소에서 유래되는 1가의 치환기를 의미한다. 이의 예로는 비닐(vinyl), 알릴(allyl), 이소프로펜일(isopropenyl), 2-부텐일(2-butenyl) 등이 있는데, 이에 한정되지는 않는다.

[127] 본 발명에서 "알키닐(alkynyl)"은 탄소-탄소 삼중 결합을 1개 이상 가진 탄소수 2 내지 40의 직쇄 또는 측쇄의 불포화 탄화수소에서 유래되는 1가의 치환기를 의미한다. 이의 예로는 에티닐(ethynyl), 2-프로파닐(2-propynyl) 등이 있는데, 이에 한정되지는 않는다.

[128] 본 발명에서 "시클로알킬"은 탄소수 3 내지 40의 모노사이클릭 또는 폴리사이클릭 비-방향족 탄화수소로부터 유래된 1가의 치환기를 의미한다. 이러한 사이클로알킬의 예로는 사이클로프로필, 사이클로펜틸, 사이클로헥실, 노르보닐(norbornyl), 아다만틴(adamantine) 등이 있는데, 이에 한정되지는 않는다.

[129] 본 발명에서 "헤테로시클로알킬"은 핵원자수 3 내지 40의 비-방향족 탄화수소로부터 유래된 1가의 치환기를 의미하며, 고리 중 하나 이상의 탄소, 바람직하게는 1 내지 3개의 탄소가 N, O, S 또는 Se와 같은 헤테로 원자로 치환된다. 이러한 헤테로시클로알킬의 예로는 모르폴린, 피페라진 등이 있는데, 이에 한정되지는 않는다.

[130] 본 발명에서 "아릴"은 단독 고리 또는 2이상의 고리가 조합된 탄소수 6 내지 60의 방향족 탄화수소로부터 유래된 1가의 치환기를 의미한다. 또한, 2 이상의 고리가 서로 단순 부착(pendant)되거나 축합된 형태도 포함될 수 있다. 이러한 아릴의 예로는 페닐, 나프틸, 페난트릴, 안트릴 등이 있는데, 이에 한정되지는 않는다.

[131] 본 발명에서 "헤테로아릴"은 핵원자수 5 내지 60의 모노헤테로사이클릭 또는 폴리헤테로사이클릭 방향족 탄화수소로부터 유래된 1가의 치환기를 의미한다. 이때, 고리 중 하나 이상의 탄소, 바람직하게는 1 내지 3개의 탄소가 N, O, S 또는 Se와 같은 헤테로원자로 치환된다. 또한, 2 이상의 고리가 서로 단순 부착(pendant)되거나 축합된 형태도 포함될 수 있고, 나아가 아릴기와의축합된 형태도 포함될 수 있다. 이러한 헤테로아릴의 예로는 피리딜, 피라지닐, 피리미디닐, 피리다지닐, 트리아지닐과 같은 6-원 모노사이클릭 고리, 페녹사티에닐(phenoxathienyl), 인돌리지닐(indolizinyl), 인돌릴(indolyl), 퓨리닐(purinyl), 퀴놀릴(quinolyl), 벤조티아졸(benzothiazole), 카바졸릴(carbazolyl)과 같은 폴리사이클릭 고리 및 2-퓨라닐, N-이미다졸릴, 2-이속사졸릴, 2-피리디닐, 2-피리미디닐 등이 있는데, 이에 한정되지는 않는다.

[132] 본 발명에서 "알킬옥시"는 R'O-로 표시되는 1가의 치환기로, 상기 R'는 탄소수 1 내지 40의 알킬을 의미하며, 직쇄(linear), 측쇄(branched) 또는 사이클릭(cyclic) 구조를 포함할 수 있다. 이러한 알킬옥시의 예로는 메톡시, 에톡시, n-프로폭시,

1-프로폭시, t-부톡시, n-부톡시, 펜톡시 등이 있는데, 이에 한정되지는 않는다.

[133] 본 발명에서 "아릴옥시"는 RO-로 표시되는 1가의 치환기로, 상기 R은 탄소수 5 내지 40의 아릴을 의미한다. 이러한 아릴옥시의 예로는 페닐옥시, 나프틸옥시, 디페닐옥시 등이 있는데, 이에 한정되지는 않는다.

[134] 본 발명에서 "알킬실릴"은 탄소수 1 내지 40의 알킬로 치환된 실릴을 의미하며, 모노-뿐만 아니라 디-, 트리-알킬실릴을 포함한다. 또, "아릴실릴"은 탄소수 5 내지 60의 아릴로 치환된 실릴을 의미하고, 모노-뿐만 아니라 디-, 트리-아릴실릴 등의 폴리아릴실릴을 포함한다.

[135] 본 발명에서 "알킬보론기"는 탄소수 1 내지 40의 알킬로 치환된 보론기를 의미하며, "아릴보론기"는 탄소수 6 내지 60의 아릴로 치환된 보론기를 의미한다.

[136] 본 발명에서 "알킬포스피닐기"는 탄소수 1 내지 40의 알킬로 치환된 포스핀기를 의미하고, 모노- 뿐만 아니라 디-알킬포스피닐기를 포함한다. 또, 본 발명에서 "아릴포스피닐기"는 탄소수 6 내지 60의 모노아릴 또는 디아릴로 치환된 포스핀기를 의미하고, 모노- 뿐만 아니라 디-아릴포스피닐기를 포함한다.

[137] 본 발명에서 "아릴아민"은 탄소수 6 내지 60의 아릴로 치환된 아민을 의미하며, 모노-뿐만 아니라 디-아릴아민를 포함한다.

[138] 본 발명에서 "헤테로아릴아민"은 핵원자수 5 내지 60의헤테로아릴로 치환된 아민을 의미하며, 모노-뿐만 아니라 디-헤테로아릴아민를 포함한다.

[139] 본발명에서 (아릴)(헤테로아릴)아민은 탄소수 6 내지 60의 아릴 및 핵원자수 5 내지 60의헤테로아릴로 치환된 아민을 의미한다.

[140] 본 발명에서 "축합고리"는 탄소수 3 내지 40의 축합지방족 고리, 탄소수 6 내지 60의 축합 방향족 고리, 핵원자수 3 내지 60의축합헤테로지방족 고리, 핵원자수 5 내지 60의축합헤테로방향족 고리 또는 이들의 조합된 형태를 의미한다.

[141]

[142] <유기 전계 발광 소자>

[143] 한편, 본 발명은 전술한 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하는 유기 전계 발광 소자(이하, '유기 EL 소자')를 제공한다.

[144] 도 1 내지 도 4는 본 발명의 제1 내지 제4 실시 형태에 따른 유기 전계 발광 소자를 개략적으로 나타낸 단면도이다.

[145] 이하, 도 1 내지 도 3을 참고하여, 본 발명의 제1 내지 제3 실시 형태에 따른 유기 전계 발광 소자에 대해 상세히 설명한다.

[146] 도 1 내지 도 3에 도시된 바와 같이, 본 발명에 따른 유기 전계 발광 소자는 애노드(anode)(100), 캐소드(cathode)(200) 및 상기 애노드와 캐소드 사이에 개재(介在)된 1층 이상의 유기물층(300)을 포함하며, 상기 1층 이상의 유기물층 중 적어도 하나는 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함한다. 이때, 상기 화합물은 단독으로 사용되거나, 또는 2 이상이 혼합되어 사용될 수 있다.

[147] 상기 1층 이상의 유기물층(300)은 정공 주입층(310), 정공 수송층(320),

발광층(330), 전자 수송 보조층(360), 전자 수송층(340), 및 전자 주입층(350) 중 어느 하나 이상을 포함할 수 있고, 이 중에서 적어도 하나의 유기물층(300)은 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함한다. 구체적으로, 상기 화학식 1의 화합물을 포함하는 유기물층은 전자수송층(340)일 수 있다. 즉, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 전자수송층 물질로 유기 전계 발광 소자에 포함된다. 이러한 유기 전계 발광 소자에서, 전자는 상기 화학식 1의 화합물 때문에, 캐소드 또는 전자주입층에서 전자수송층으로 용이하게 주입되고, 또한 전자수송층에서 발광층으로 빠르게 이동할 수 있기 때문에, 발광층에서의 정공과 전자의 결합력이 높다. 그러므로, 본 발명의 유기 전계 발광 소자는 발광효율, 전력효율, 휘도 등이 우수하다. 게다가, 상기 화학식 1의 화합물은 열적 안정성, 전기화학적 안정성이 우수하여, 유기 전계 발광 소자의 성능을 향상시킬 수 있다.

[148] 이와 같은 화학식 1의 화합물은 단독으로 사용되거나, 또는 당 분야에 공지된 전자수송층 재료와 혼용될 수 있다.

[149] 본 발명에서 상기 화학식 1의 화합물과 혼용될 수 있는 전자수송층 재료는 당 분야에서 통상적으로 공지된 전자수송 물질을 포함한다. 사용 가능한 전자 수송 물질의 비제한적인 예로는 옥사졸계 화합물, 이소옥사졸계 화합물, 트리아졸계 화합물, 이소티아졸(isothiazole)계 화합물, 옥사디아졸계 화합물, 티아다아졸(thiadiazole)계 화합물, 페릴렌(perylene)계 화합물, 알루미늄 착물(예: Alq_3, tris(8-quinolinolato)-aluminium), 갈륨착물(예: Gaq'2OPiv, Gaq'2OAc, 2(Gaq'2)) 등이 있다. 이들을 단독으로 사용하거나 또는 2종 이상 혼용할 수 있다.

[150] 본 발명에서, 상기 화학식 1의 화합물과 전자수송층 재료를 혼용할 경우, 이들의 혼합 비율은 특별히 제한되지 않으며, 당 분야에 공지된 범위 내에서 적절히 조절될 수 있다.

[151] 전술한 본 발명의 유기 전계 발광 소자의 구조는 특별히 한정되지 않으나, 예컨대 기판 위에, 애노드(100), 1층 이상의 유기물층(300) 및 캐소드(200)가 순차적으로 적층될 수 있다(도 1 내지 도 3 참조). 뿐만 아니라, 도시되지 않았지만, 전극과 유기물층 계면에 절연층 또는 접착층이 삽입된 구조일 수 있다.

[152] 일례에 따르면, 유기 전계 발광 소자는 도 1에 도시된 바와 같이, 기판 위에, 애노드(100), 정공주입층(310), 정공수송층(320), 발광층(330), 전자수송층(340) 및 캐소드(200)가 순차적으로 적층된 구조를 가질 수 있다. 선택적으로, 도 2에 도시된 바와 같이, 상기 전자수송층(340)과 캐소드(200) 사이에 전자주입층(350)이 위치할 수 있다. 또한, 상기 발광층(330)과 전자수송층(340) 사이에 전자수송 보조층(360)이 위치할 수 있다(도 3 참조).

[153] 본 발명의 유기 전계 발광 소자는 상기 유기물층(300) 중 적어도 하나[예, 전자수송층(340)]가 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하는 것을 제외하고는, 당 기술 분야에 알려져 있는 재료 및 방법으로 유기물층 및 전극을 형성하여 제조할 수 있다.

[154] 상기 유기물층은 진공 증착법이나 용액 도포법에 의하여 형성될 수 있다. 상기 용액 도포법의 예로는 스핀 코팅, 딥코팅, 닥터 블레이딩, 잉크젯 프린팅 또는 열 전사법 등이 있으나, 이에 한정되지는 않는다.

[155] 본 발명에서 사용 가능한 기판은 특별히 한정되지 않으며, 비제한적인 예로는 실리콘 웨이퍼, 석영, 유리판, 금속판, 플라스틱 필름 및 시트 등이 있다.

[156] 또, 애노드 물질의 예로는 바나듐, 크롬, 구리, 아연, 금과 같은 금속 또는 이들의 합금; 아연산화물, 인듐산화물, 인듐 주석 산화물(ITO), 인듐 아연 산화물(IZO)과 같은 금속 산화물; ZnO:Al 또는 SnO_2:Sb와 같은 금속과 산화물의 조합; 폴리티오펜, 폴리(3-메틸티오펜), 폴리[3,4-(에틸렌-1,2-디옥시)티오펜](PEDT), 폴리피롤 또는 폴리아닐린과 같은 전도성 고분자; 및 카본블랙 등이 있는데, 이에 한정되지는 않는다.

[157] 또, 캐소드 물질의 예로는 마그네슘, 칼슘, 나트륨, 칼륨, 타이타늄, 인듐, 이트륨, 리튬, 가돌리늄, 알루미늄, 은(Ag), 주석, 또는 납과 같은 금속 또는 이들의 합금; 및 LiF/Al 또는 LiO_2/Al과 같은 다층 구조 물질 등이 있는데, 이에 한정되지는 않는다.

[158] 또한, 정공주입층, 정공수송층, 발광층 및 전자 주입층은 특별히 한정되는 것은 아니며, 당 업계에 알려진 통상의 물질을 사용할 수 있다.

[159] 이하, 도 4를 참조하여, 본 발명의 제4 실시 형태에 따른 유기 전계 발광 소자에 대해 설명한다.

[160] 도 4에 도시된 바와 같이, 본 발명의 제4 실시 형태에 따른 유기 전계 발광 소자는 탠덤(tandem)형 소자로, 서로 대향된 애노드(100)와 캐소드(200); 상기 애노드(100)와 캐소드(200) 사이에 개재된 복수의 발광 유닛(400, 500); 및 서로 인접한 발광 유닛들(400, 500) 사이에 개재되고, N형 전하 생성층(610) 및 P형 전하 생성층(620)을 포함하는 전하 생성층(600)을 포함한다. 이때, 상기 N형 전하 생성층(610)이 전술한 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함한다.

[161] 이러한 탠덤형 유기 전계 발광 소자는 발광 유닛이 최소 2개이며, 전하 생성층을 인접한 발광 유닛들 사이에 개재하여 발광 유닛의 수를 늘려 구성할 수 있다.

[162] 일례에 따르면, 복수의 발광 유닛은 제1 발광 유닛(400), 제2 발광 유닛(500), …, 및 제m-1 발광 유닛(m=3 이상의 정수, 구체적으로 3~4)을 포함할 수 있다. 이때, 인접한 발광 유닛들 사이에는 N형 전하 생성층(610) 및 P형 전하 생성층(620)을 포함하는 전하 생성층(600)이 배치되고, 상기 N형 전하 생성층(610)이 전술한 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함한다.

[163] 구체적으로, 본 발명에 따른 유기 전계 발광 소자는 서로 대향된 애노드(100)와 캐소드(200); 상기 애노드(100) 상에 배치된 제1 발광 유닛(400); 상기 제1 발광 유닛(400) 상에 배치된 제2 발광 유닛(500); 상기 제1 및 제2 발광 유닛(400, 500) 사이에 개재되고, N형 전하 생성층(610) 및 P형 전하 생성층(620)을 포함하는 전하 생성층(600)을 포함한다. 이때, 상기 N형 전하 생성층(610)이 전술한 화학식

1로 표시되는 화합물을 포함한다.

[164] 각 발광 유닛(400, 500)은 정공 수송층(410, 510), 발광층(420, 520) 및 전자 수송층(430, 530)을 포함한다. 구체적으로, 제1 발광 유닛(400)은 제1 정공 수송층(410), 제1 발광층(420) 및 제1 전자 수송층(430)을 포함하고, 제2 발광 유닛(500)은 정공 수송층(510), 발광층(520) 및 전자 수송층(530)을 포함할 수 있다. 선택적으로, 상기 제1 발광 유닛(400)은 정공 주입층(440)을 추가적으로 포함할 수 있다.

[165] 상기 정공 수송층(410, 510), 발광층(420, 520), 전자 수송층(430, 530) 및 정공 주입층(440)은 특별히 한정되는 것은 아니며, 당 업계에 알려진 통상의 물질을 사용할 수 있다.

[166] 상기 전하 생성층(Charge Generation Layer, CGL)(600)은 서로 인접한 발광 유닛(400, 500) 사이에 배치됨으로써, 발광 유닛(400, 500) 사이의 전하를 조절하여 전하 균형이 이루어지도록 한다.

[167] 전하 생성층(600)은 제1 발광 유닛(400)과 인접하게 위치하여 제1 발광 유닛(400)에 전자를 공급하는 N형 전하 생성층(610); 및 제2 발광 유닛(500)과 인접하게 위치하여 제2 발광 유닛(500)에 정공을 공급하는 P형 전하 생성층(620)을 포함한다.

[168] 상기 N형 전하 생성층(610)은 전술한 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함한다. 상기 화학식 1의 화합물은 전자 이동성이 우수하여 전자 주입 및 수송 능력이 우수하다. 따라서, 상기 화학식 1의 화합물을 N형 전하 생성층 재료로 유기 전계 발광 소자에 적용할 경우, 소자의 진행성 구동 전압의 증가 및 수명 저하를 방지할 수 있다.

[169] 일례에 따르면, 상기 N형 전하 생성층(610)은 전자 수송 특성을 갖는 하나의 호스트(host)를 포함하고, 상기 하나의 호스트는 상기 화학식 1로 표시되는 화합물이다. 이러한 본 발명의 N형 전하 생성층(610)은 2개의 호스트를 포함하는 N형 전하 생성층과 달리, 공증착을 통해 제조시 공정상의 효율성이 향상될 수 있다.

[170] 상기 N형 전하 생성층(610)은 N형 도펀트를 더 포함할 수 있다.

[171] 본 발명에서 사용 가능한 N형 도펀트는 당 분야에서 일반적으로 N형 전하 생성층에 사용되는 물질이라면, 특별히 한정하지 않으며, 예를 들어 Li, Na, K, Rb, Cs, Fr 등과 같은 알칼리 금속; Be, Mg, Ca, Sr, Ba, Ra 등과 같은 알칼리 토금속; Bi(bismuth), Sb(antimony) 등과 같은 15족 금속; La(lanthanum), Ce(cerium), Pr(preseodyminum), Nd(neodymium), Pm(promethium), Sm(samarium), europium(europium), Gd(gadolinium), Tb(terbium), Dy(dysprosium), Ho(holmium), Er(erbium), Tm(thulium), Yb(ytterbium), Lu(lutetium) 등과 같은 란타나이드계 금속; 및 상기 1종 이상의 금속 화합물 등이 있다. 또한, 전자 공여(electron donor) 특성을 가지며, 적어도 일부의 전자 전하를 유기 호스트(예, 화학식 1의 화물물)에 공여하여 상기 유기 호스트와 전하-전달 착체를 형성할 수 있는 유기

N형 도펀트일 수 있고, 이의 예로는 bis(ethylenedithio)tetrathiafulvalene (BEDT-TTF), Tetrathiafulvalene (TTF) 등이 있다.

[172] 상기 N형 전하 생성층(610)의 두께는 특별히 한정되지 않으며, 예컨대 약 5 내지 30㎚ 범위일 수 있다.

[173] 상기 P형 전하 생성층(620)은 금속 또는 P형이 도핑된 유기 물질로 이루어질 수 있다. 여기서, 상기 금속은 Al, Cu, Fe, Pb, Zn, Au, Pt, W, In, Mo, Ni 및 Ti 등이 있고, 이들은 단독으로 사용되거나, 또는 2개 이상의 합금으로 사용될 수 있다. 또한, 상기 P형이 도핑된 유기 물질에 사용되는 P형 도펀트와 호스트의 물질은 통상적으로 사용되는 물질이라면 특별히 한정되지 않는다. 예를 들면, 상기 P형 도펀트는 F_4-TCNQ(2,3,5,6-tetrafluoro-7,7,8,8-tetracyano-quinodimethane), 요오드, $FeCl_3$, FeF_3 및 $SbCl_5$ 등이 있는데, 이들은 단독으로 사용되거나 2종 이상이 혼합되어 사용될 수 있다. 또, 상기 호스트의 비제한적인 예로는 NPB (N,N'-bis(naphthaen-1-yl)-N,N'-bis(phenyl)-benzidine), TPD(N,N'-bis(3-methylphenyl)N,N'-bis(phenyl)-benzidine) 및 TNB(N,N,N',N'-tetra-naphthalenyl-benzidine) 등이 있는데, 이들은 단독으로 사용되거나 2종 이상이 혼합되어 사용될 수 있다.

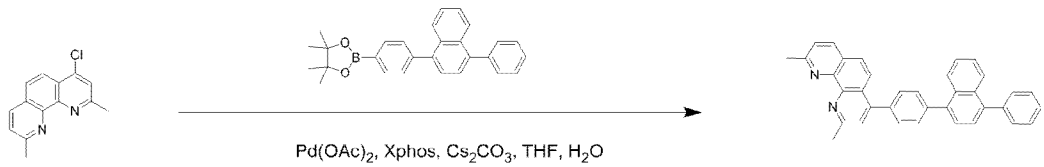
[174] 상기 애노드(100) 및 캐소드(200)에 대한 설명은 전술한 제1~제3 실시 형태 부분에 설명한 바와 동일하기 때문에, 생략한다.

[175]

[176] 이하, 본 발명을 실시예를 통하여 상세히 설명하면 다음과 같다. 단, 하기 실시예는 본 발명을 예시하는 것일 뿐, 본 발명이 하기 실시예에 의해 한정되는 것은 아니다.

[177] **[합성예 1] 화합물 1의 합성**

[178]



1

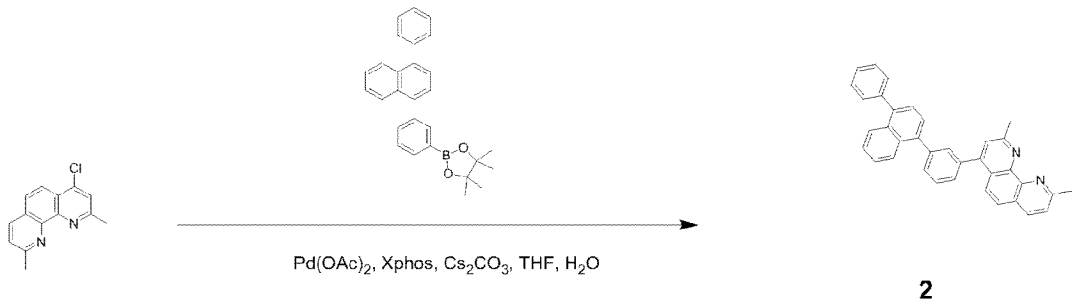
[179] 4-chloro-2,9-dimethyl-1,10-phenanthroline (5 g, 20.6 mmol)와 4,4,5,5-tetramethyl-2-(4-(4-phenylnaphthalen-1-yl)phenyl)-1,3,2-dioxaborolane (8.4 g, 20.6 mmol) 및 $Pd(OAc)_2$(0.2 g, 1.0 mmol), Xphos (1.0g, 2.1 mmol), Cs_2CO_3(13.5 g, 41.3 mmol)을 Toluene 50ml, EtOH 10ml, H_2O 10ml에 넣고 12 시간 동안 가열 환류하였다. 반응 종결 후, 메틸렌클로라이드로 추출하고, $MgSO_4$를 넣고 필터하였다. 필터된 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피를 이용하여 목적 화합물(7.0 g, 수율: 70 %)을 얻었다.

[180] [LCMS] : 487

[181]

[182] **[합성예 2] 화합물 2의 합성**

[183]



2

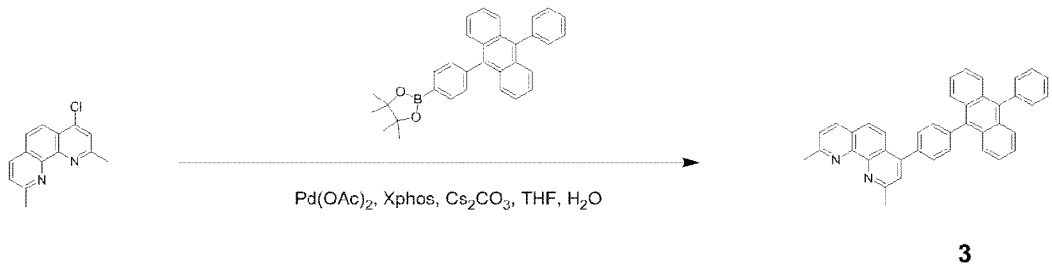
[184] 합성예 1에서 사용된 4,4,5,5-tetramethyl-2-(4-(4-phenylnaphthalen-1-yl)phenyl)-1,3,2-dioxaborolane 대신 4,4,5,5-tetramethyl-2-(4-(4-phenylnaphthalen-1-yl)phenyl)-1,3,2-dioxaborolane을 사용한 것을 제외하고는, [합성예 1]과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물(7.0 g, 수율: 70 %)을 얻었다.

[185] [LCMS] : 487

[186]

[187] **[합성예 3] 화합물 3의 합성**

[188]



3

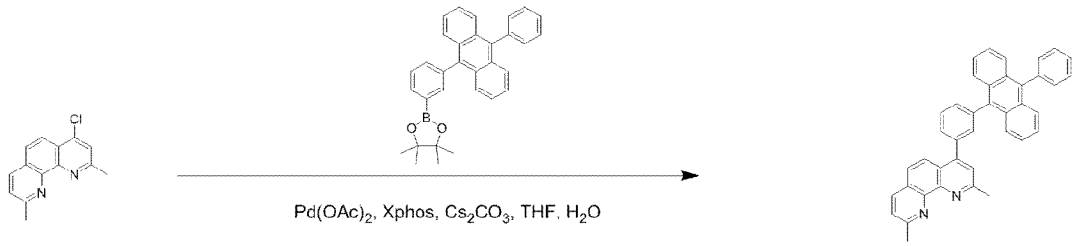
[189] 합성예 1에서 사용된 4,4,5,5-tetramethyl-2-(4-(4-phenylnaphthalen-1-yl)phenyl)-1,3,2-dioxaborolane 대신 4,4,5,5-tetramethyl-2-(4-(10-phenylanthracen-9-yl)phenyl)-1,3,2-dioxaborolane을 사용한 것을 제외하고는, [합성예 1]과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물(8.1 g, 수율: 73 %)을 얻었다.

[190] [LCMS] : 537

[191]

[192] **[합성예 4] 화합물 4의 합성**

[193]



4

[194] 합성예 1에서 사용된 4,4,5,5-tetramethyl-2-(4-(4-phenylnaphthalen-1-yl)phenyl)-1,3,2-dioxaborolane 대신 4,4,5,5-tetramethyl-2-(3-(10-phenylanthracen-9-yl)phenyl)-1,3,2-dioxaborolane을

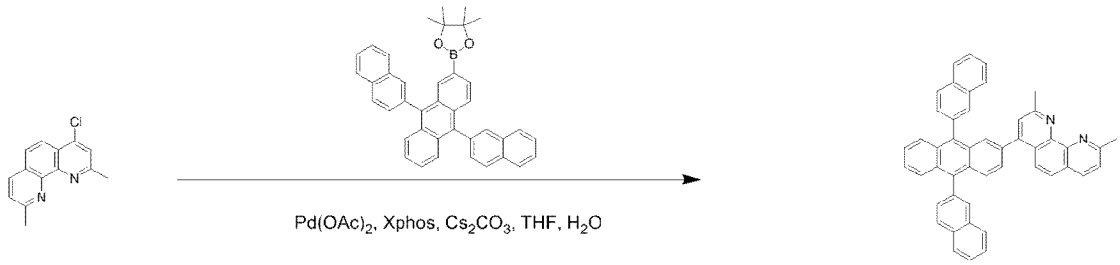
사용한 것을 제외하고는, [합성예 1]과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물(8.1 g, 수율: 73 %)을 얻었다.

[195] [LCMS] : 537

[196]

[197] **[합성예 5] 화합물 5의 합성**

[198]



5

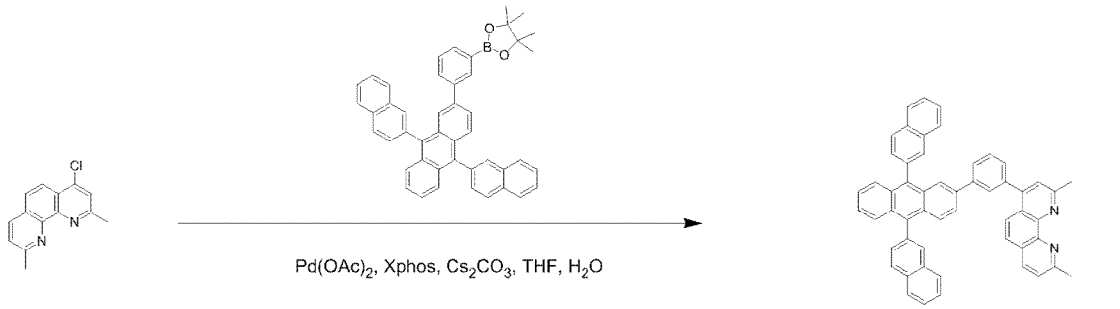
[199] 합성예 1에서 사용된 4,4,5,5-tetramethyl-2-(4-(4-phenylnaphthalen-1-yl)phenyl)-1,3,2-dioxaborolane 대신 2-(9,10-di(naphthalen-2-yl)anthracen-2-yl)-4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolane을 사용한 것을 제외하고는, [합성예 1]과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물(9.6 g, 수율: 73 %)을 얻었다.

[200] [LCMS] : 637

[201]

[202] **[합성예 6] 화합물 6의 합성**

[203]



6

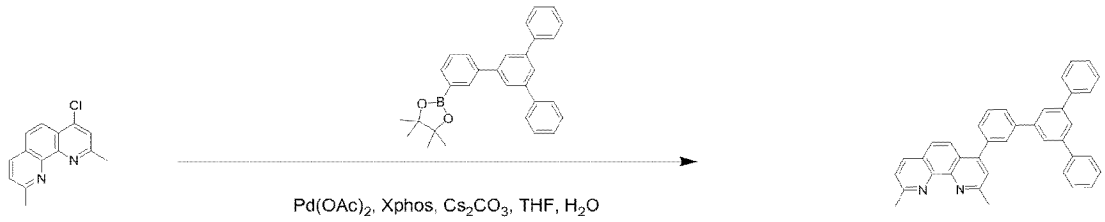
[204] 합성예 1에서 사용된 4,4,5,5-tetramethyl-2-(4-(4-phenylnaphthalen-1-yl)phenyl)-1,3,2-dioxaborolane 대신 2-(3-(9,10-di(naphthalen-2-yl)anthracen-2-yl)phenyl)-4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolane을 사용한 것을 제외하고는, [합성예 1]과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물(10.2 g, 수율: 70 %)을 얻었다.

[205] [LCMS] : 713

[206]

[207] **[합성예 7] 화합물 7의 합성**

[208]



7

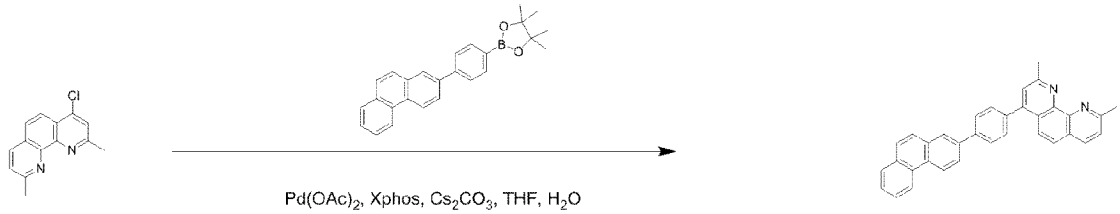
[209] 합성예 1에서 사용된 4,4,5,5-tetramethyl-2-(4-(4-phenylnaphthalen-1-yl)phenyl)-1,3,2-dioxaborolane 대신 4,4,5,5-tetramethyl-2-(5'-phenyl-[1,1':3',1''-terphenyl]-3-yl)-1,3,2-dioxaborolane을 사용한 것을 제외하고는, [합성예 1]과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물(8.0 g, 수율: 75 %)을 얻었다.

[210] [LCMS] : 513

[211]

[212] **[합성예 8] 화합물 8의 합성**

[213]



8

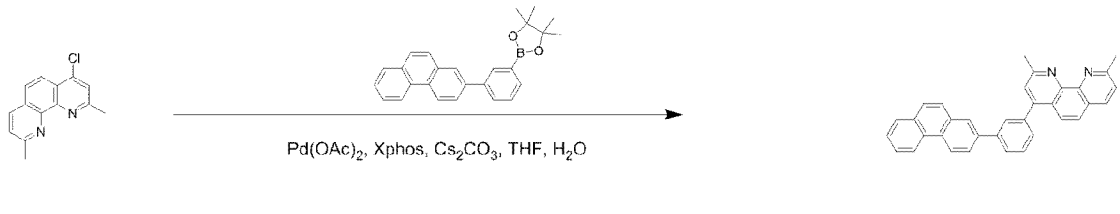
[214] 합성예 1에서 사용된 4,4,5,5-tetramethyl-2-(4-(4-phenylnaphthalen-1-yl)phenyl)-1,3,2-dioxaborolane 대신 4,4,5,5-tetramethyl-2-(4-(phenanthren-2-yl)phenyl)-1,3,2-dioxaborolane을사용한 것을 제외하고는, [합성예 1]과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물(7.0 g, 수율: 74 %)을 얻었다.

[215] [LCMS] : 460

[216]

[217] **[합성예 9] 화합물 9의 합성**

[218]



9

[219] 합성예 1에서 사용된 4,4,5,5-tetramethyl-2-(4-(4-phenylnaphthalen-1-yl)phenyl)-1,3,2-dioxaborolane 대신 4,4,5,5-tetramethyl-2-(3-(phenanthren-2-yl)phenyl)-1,3,2-dioxaborolane을 사용한 것을 제외하고는, [합성예 1]과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물(7.0 g, 수율:

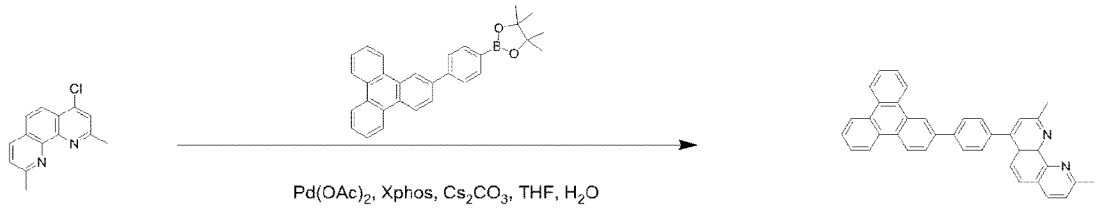
74 %)을 얻었다.

[220] [LCMS] : 460

[221]

[222] **[합성예 10] 화합물 10의 합성**

[223]



10

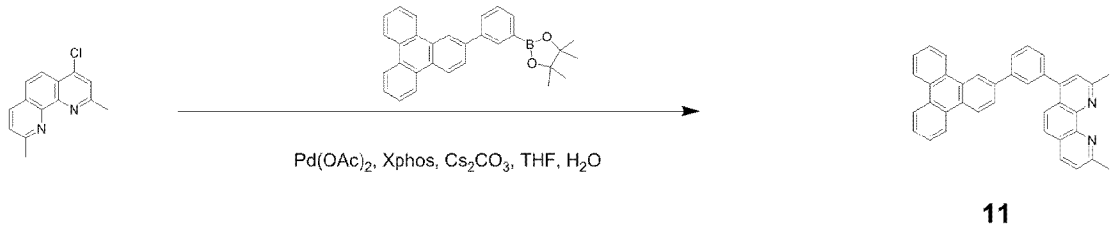
[224] 합성예 1에서 사용된 4,4,5,5-tetramethyl-2-(4-(4-phenylnaphthalen-1-yl)phenyl)-1,3,2-dioxaborolane 대신 4,4,5,5-tetramethyl-2-(3-(triphenylen-2-yl)phenyl)-1,3,2-dioxaborolane을 사용한 것을 제외하고는, [합성예 1]과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물(7.4 g, 수율: 70 %)을 얻었다.

[225] [LCMS] : 511

[226]

[227] **[합성예 11] 화합물 11의 합성**

[228]



11

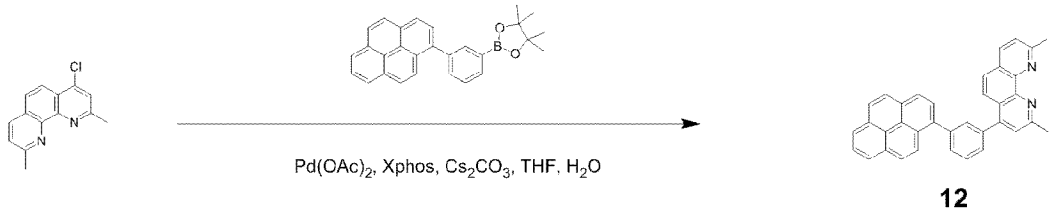
[229] 합성예 1에서 사용된 4,4,5,5-tetramethyl-2-(4-(4-phenylnaphthalen-1-yl)phenyl)-1,3,2-dioxaborolane 대신 4,4,5,5-tetramethyl-2-(4-(triphenylen-2-yl)phenyl)-1,3,2-dioxaborolane을 사용한 것을 제외하고는, [합성예 1]과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물(7.4 g, 수율: 70 %)을 얻었다.

[230] [LCMS] : 511

[231]

[232] **[합성예 12] 화합물 12의 합성**

[233]



12

[234] 합성예 1에서 사용된 4,4,5,5-tetramethyl-2-(4-(4-phenylnaphthalen-1-yl)phenyl)-1,3,2-dioxaborolane 대신

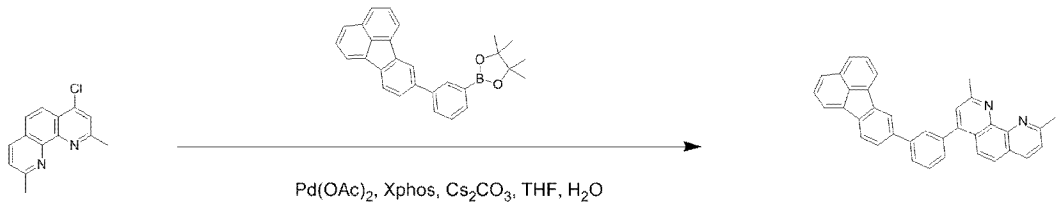
4,4,5,5-tetramethyl-2-(3-(pyren-1-yl)phenyl)-1,3,2-dioxaborolane을 사용한 것을 제외하고는, [합성예 1]과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물(7.0 g, 수율: 70 %)을 얻었다.

[235] [LCMS] : 485

[236]

[237] **[합성예 13] 화합물 13의 합성**

[238]



13

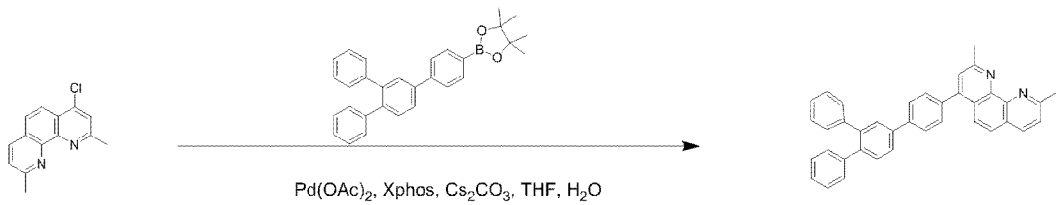
[239] 합성예 1에서 사용된 4,4,5,5-tetramethyl-2-(4-(4-phenylnaphthalen-1-yl)phenyl)-1,3,2-dioxaborolane 대신 2-(3-(fluoranthen-8-yl)phenyl)-4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolane을 사용한 것을 제외하고는, [합성예 1]과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물(6.8 g, 수율: 68 %)을 얻었다.

[240] [LCMS] : 485

[241]

[242] **[합성예 14] 화합물 14의 합성**

[243]



14

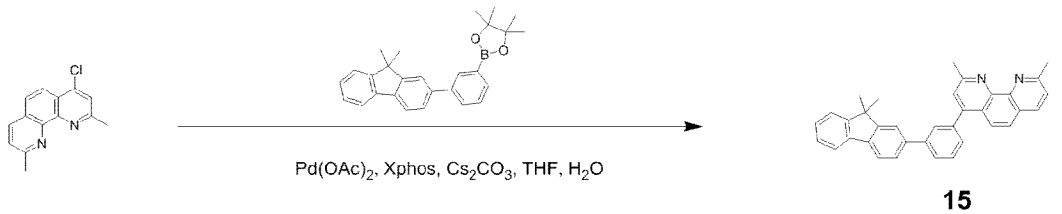
[244] 합성예 1에서 사용된 4,4,5,5-tetramethyl-2-(4-(4-phenylnaphthalen-1-yl)phenyl)-1,3,2-dioxaborolane 대신 4,4,5,5-tetramethyl-2-(4'-phenyl-[1,1':3',1''-terphenyl]-4-yl)-1,3,2-dioxaborolane을 사용한 것을 제외하고는, [합성예 1]과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물(7.0 g, 수율:68 %)을 얻었다.

[245] [LCMS] : 513

[246]

[247] **[합성예 15] 화합물 15의 합성**

[248]



15

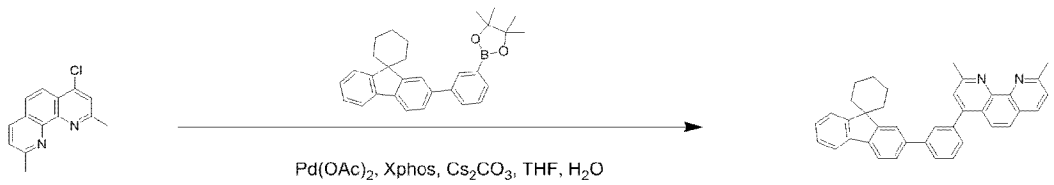
[249] 합성예 1에서 사용된 4,4,5,5-tetramethyl-2-(4-(4-phenylnaphthalen-1-yl)phenyl)-1,3,2-dioxaborolane 대신 2-(3-(9,9-dimethyl-9H-fluoren-2-yl)phenyl)-4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolane을 사용한 것을 제외하고는, [합성예 1]과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물(7.0 g, 수율: 72 %)을 얻었다.

[250] [LCMS] : 477

[251]

[252] **[합성예 16] 화합물 16의 합성**

[253]



16

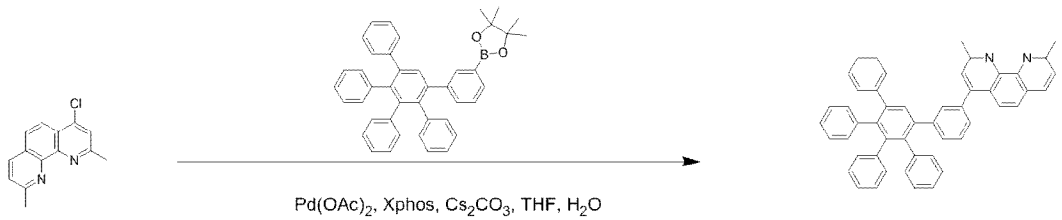
[254] 합성예 1에서 사용된 4,4,5,5-tetramethyl-2-(4-(4-phenylnaphthalen-1-yl)phenyl)-1,3,2-dioxaborolane 대신 4,4,5,5-tetramethyl-2-(3-(spiro[cyclohexane-1,9'-fluoren]-2'-yl)phenyl)-1,3,2-dioxaborolane을 사용한 것을 제외하고는, [합성예 1]과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물(7.8 g, 수율: 74 %)을 얻었다.

[255] [LCMS] : 517

[256]

[257] **[합성예 17] 화합물 17의 합성**

[258]



17

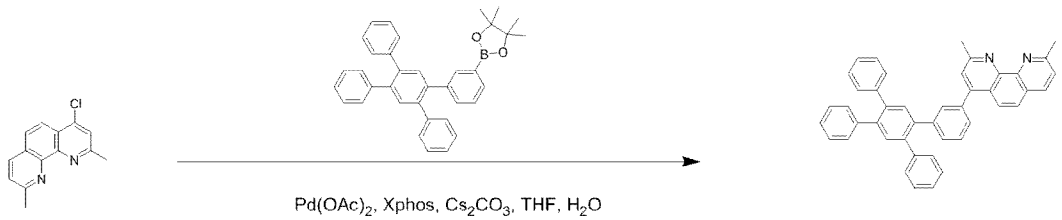
[259] 합성예 1에서 사용된 4,4,5,5-tetramethyl-2-(4-(4-phenylnaphthalen-1-yl)phenyl)-1,3,2-dioxaborolane 대신 4,4,5,5-tetramethyl-2-(3',4',5'-triphenyl-[1,1':2',1''-terphenyl]-3-yl)-1,3,2-dioxaborolane을 사용한 것을 제외하고는, [합성예 1]과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물(9.5 g, 수율: 70 %)을 얻었다.

[260] [LCMS] : 665

[261]

[262] **[합성예 18] 화합물 18의 합성**

[263]



18

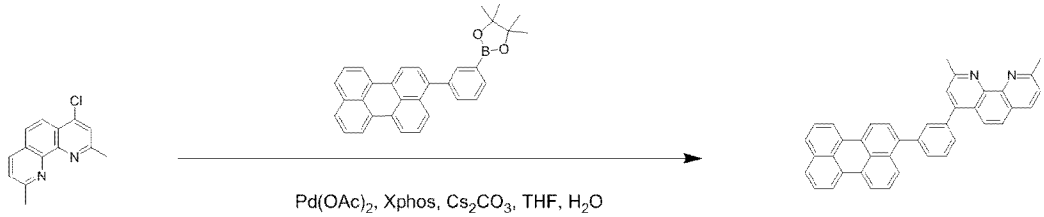
[264] 합성예 1에서 사용된 4,4,5,5-tetramethyl-2-(4-(4-phenylnaphthalen-1-yl)phenyl)-1,3,2-dioxaborolane 대신 2-(4',5'-diphenyl-[1,1':2',1''-terphenyl]-3-yl)-4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolane을 사용한 것을 제외하고는, [합성예 1]과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물(8.3 g, 수율: 69 %)을 얻었다.

[265] [LCMS] : 589

[266]

[267] **[합성예 19] 화합물 19의 합성**

[268]



19

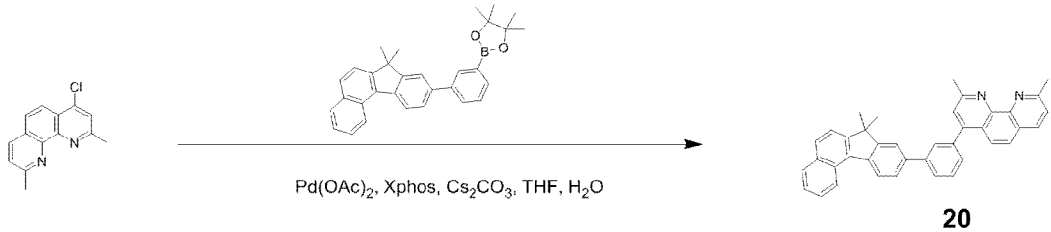
[269] 합성예 1에서 사용된 4,4,5,5-tetramethyl-2-(4-(4-phenylnaphthalen-1-yl)phenyl)-1,3,2-dioxaborolane 대신 4,4,5,5-tetramethyl-2-(3-(perylen-3-yl)phenyl)-1,3,2-dioxaborolane을 사용한 것을 제외하고는, [합성예 1]과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물(7.1 g, 수율: 65 %)을 얻었다.

[270] [LCMS] : 535

[271]

[272] **[합성예 20] 화합물 20의 합성**

[273]



20

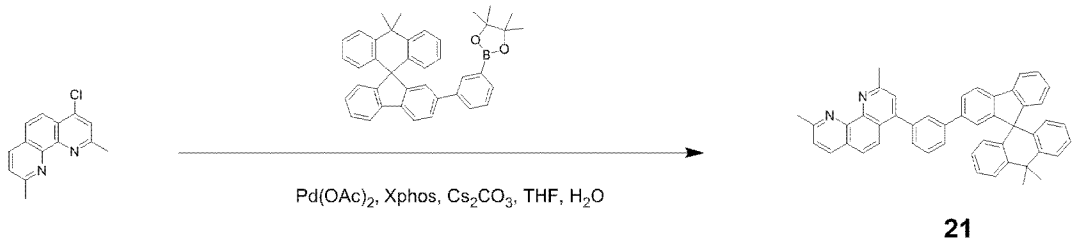
[274] 합성예 1에서 사용된 4,4,5,5-tetramethyl-2-(4-(4-phenylnaphthalen-1-yl)phenyl)-1,3,2-dioxaborolane 대신 2-(3-(7,7-dimethyl-7H-benzo[c]fluoren-9-yl)phenyl)-4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolane을 사용한 것을 제외하고는, [합성예 1]과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물(7.6 g, 수율: 72 %)을 얻었다.

[275] [LCMS] : 527

[276]

[277] **[합성예 21] 화합물 21의 합성**

[278]



21

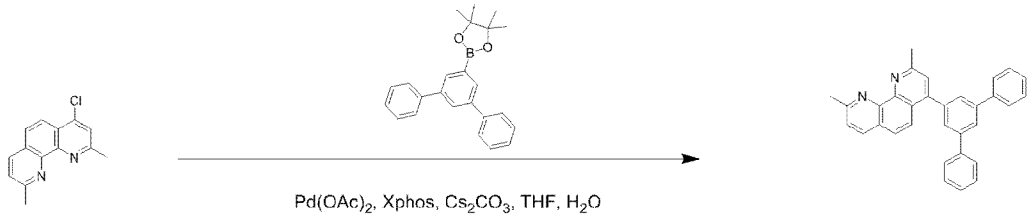
[279] 합성예 1에서 사용된 4,4,5,5-tetramethyl-2-(4-(4-phenylnaphthalen-1-yl)phenyl)-1,3,2-dioxaborolane 대신 2-(3-(7,7-dimethyl-7H-benzo[c]fluoren-9-yl)phenyl)-4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolane을 사용한 것을 제외하고는, [합성예 1]과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물(8.8 g, 수율: 67 %)을 얻었다.

[280] [LCMS] : 641

[281]

[282] **[합성예 22] 화합물 22의 합성**

[283]



22

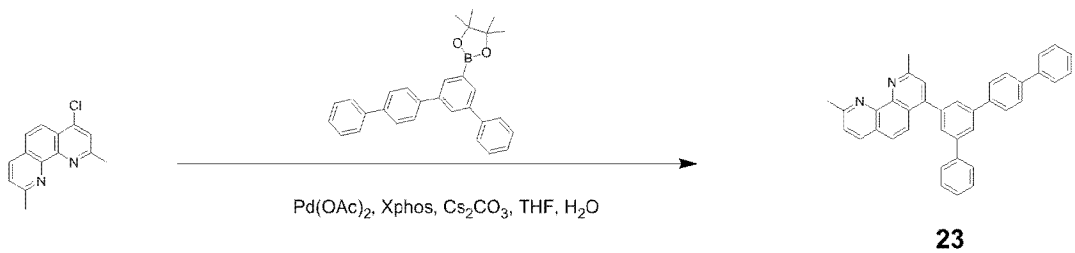
[284] 합성예 1에서 사용된 4,4,5,5-tetramethyl-2-(4-(4-phenylnaphthalen-1-yl)phenyl)-1,3,2-dioxaborolane 대신 2-([1,1':3',1''-terphenyl]-5'-yl)-4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolane을 사용한 것을 제외하고는, [합성예 1]과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물(6.2 g, 수율: 70 %)을 얻었다.

[285] [LCMS] : 437

[286]

[287] **[합성예 23] 화합물 23의 합성**

[288]



23

[289] 합성예 1에서 사용된 4,4,5,5-tetramethyl-2-(4-(4-phenylnaphthalen-1-yl)phenyl)-1,3,2-dioxaborolane 대신

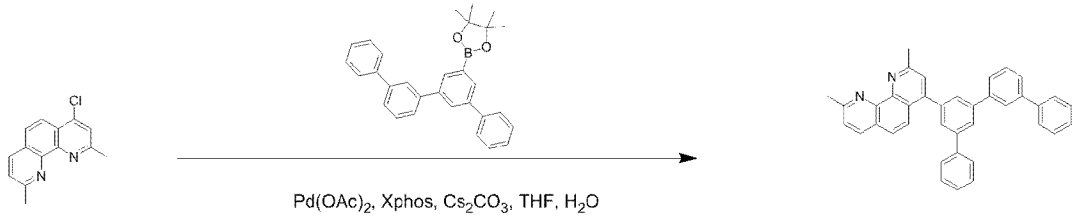
2-([1,1':3',1":4",1"'-quaterphenyl]-5'-yl)-4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolane을 사용한 것을 제외하고는, [합성예 1]과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물(7.4 g, 수율: 70 %)을 얻었다.

[290] [LCMS] : 513

[291]

[292] **[합성예 24] 화합물 24의 합성**

[293]



24

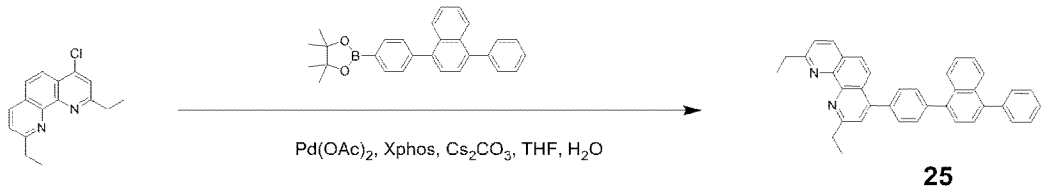
[294] 합성예 1에서 사용된 4,4,5,5-tetramethyl-2-(4-(4-phenylnaphthalen-1-yl)phenyl)-1,3,2-dioxaborolane 대신 2-([1,1':3',1":3",1"'-quaterphenyl]-5'-yl)-4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolane을 사용한 것을 제외하고는, [합성예 1]과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물(6.2 g, 수율: 70 %)을 얻었다.

[295] [LCMS] : 513

[296]

[297] **[합성예 25] 화합물 25의 합성**

[298]



25

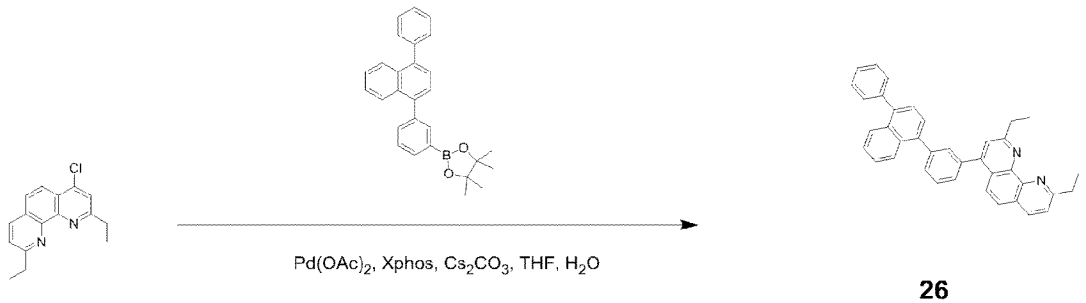
[299] 4-chloro-2,9-diethyl-1,10-phenanthroline (5.6 g, 20.6 mmol), 4,4,5,5-tetramethyl-2-(4-(4-phenylnaphthalen-1-yl)phenyl)-1,3,2-dioxaborolane (8.3 g, 20.6 mmol), $Pd(OAc)_2$ (0.2 g, 1.0 mmol), Xphos (1.0g, 2.1 mmol), 및 Cs_2CO_3 (13.5 g, 41.3 mmol)을 Toluene (50ml), EtOH (10ml), H_2O (10ml)에 넣고 12 시간 동안 가열 환류하였다. 반응 종결 후, 메틸렌클로라이드로 추출하고, $MgSO_4$를 넣고 필터하였다. 필터된 유기층의 용매를 제거한 후, 컬럼크로마토그래피를 이용하여 목적 화합물(7.4 g, 수율: 70 %)을 얻었다.

[300] [LCMS] : 515

[301]

[302] **[합성예 26] 화합물 26의 합성**

[303]



26

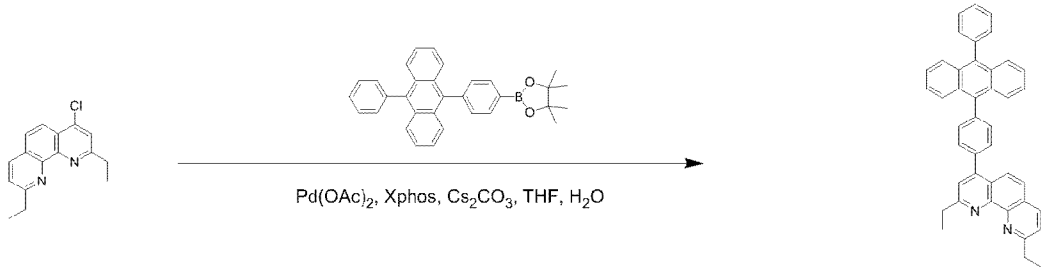
[304] 합성예 25에서 사용된 4,4,5,5-tetramethyl-2-(4-(4-phenylnaphthalen-1-yl)phenyl)-1,3,2-dioxaborolane 대신 4,4,5,5-tetramethyl-2-(3-(4-phenylnaphthalen-1-yl)phenyl)-1,3,2-dioxaborolane을 사용한 것을 제외하고는, [합성예 25]와 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물(7.9 g, 수율: 74 %)을 얻었다.

[305] [LCMS] : 515

[306]

[307] **[합성예 27] 화합물 27의 합성**

[308]



27

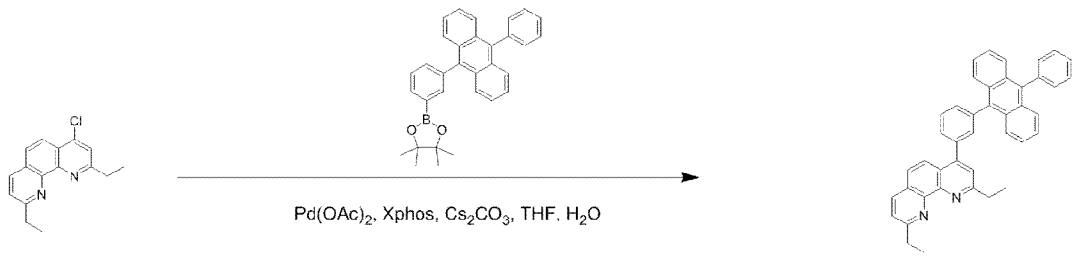
[309] 합성예 25에서 사용된 4,4,5,5-tetramethyl-2-(4-(4-phenylnaphthalen-1-yl)phenyl)-1,3,2-dioxaborolane 대신 4,4,5,5-tetramethyl-2-(4-(10-phenylanthracen-9-yl)phenyl)-1,3,2-dioxaborolane을 사용한 것을 제외하고는, [합성예 25]와 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물(8.9 g, 수율: 76 %)을 얻었다.

[310] [LCMS] : 565

[311]

[312] **[합성예 28] 화합물 28의 합성**

[313]



28

[314] 합성예 25에서 사용된 4,4,5,5-tetramethyl-2-(4-(4-phenylnaphthalen-1-yl)phenyl)-1,3,2-dioxaborolane 대신

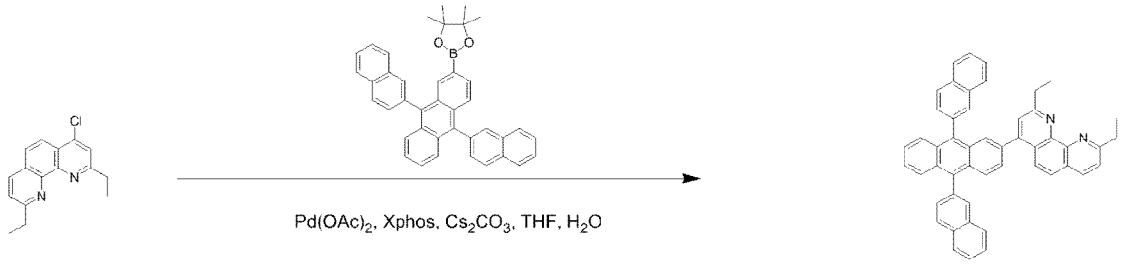
4,4,5,5-tetramethyl-2-(3-(10-phenylanthracen-9-yl)phenyl)-1,3,2-dioxaborolane을 사용한 것을 제외하고는, [합성예 25]과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물(8.2 g, 수율: 71 %)을 얻었다.

[315] [LCMS] : 565

[316]

[317] **[합성예 29] 화합물 29의 합성**

[318]



29

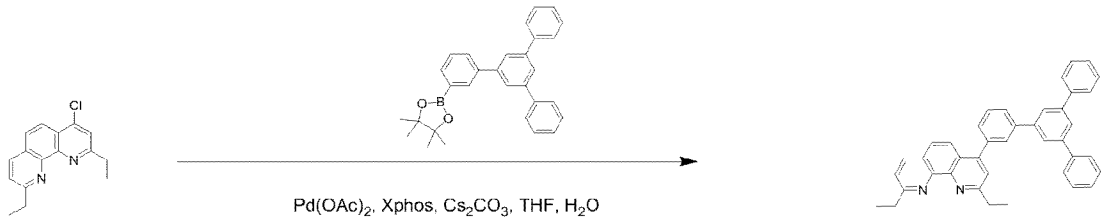
[319] 합성예 25에서 사용된 4,4,5,5-tetramethyl-2-(4-(4-phenylnaphthalen-1-yl)phenyl)-1,3,2-dioxaborolane 대신 2-(9,10-di(naphthalen-2-yl)anthracen-2-yl)-4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolane을 사용한 것을 제외하고는, [합성예 25]와 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물(9.6 g, 수율: 70 %)을 얻었다.

[320] [LCMS] : 665

[321]

[322] **[합성예 30] 화합물 31의 합성**

[323]



31

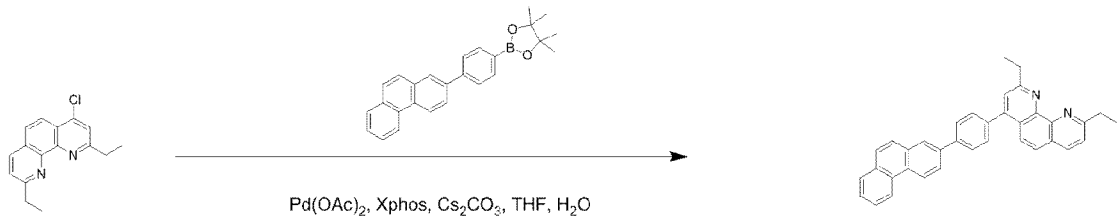
[324] 합성예 25에서 사용된 4,4,5,5-tetramethyl-2-(4-(4-phenylnaphthalen-1-yl)phenyl)-1,3,2-dioxaborolane 대신 4,4,5,5-tetramethyl-2-(5'-phenyl-[1,1':3',1''-terphenyl]-3-yl)-1,3,2-dioxaborolane을 사용한 것을 제외하고는, [합성예 25]와 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물(8.4 g, 수율: 75 %)을 얻었다.

[325] [LCMS] : 541

[326]

[327] **[합성예 31] 화합물 32의 합성**

[328]



32

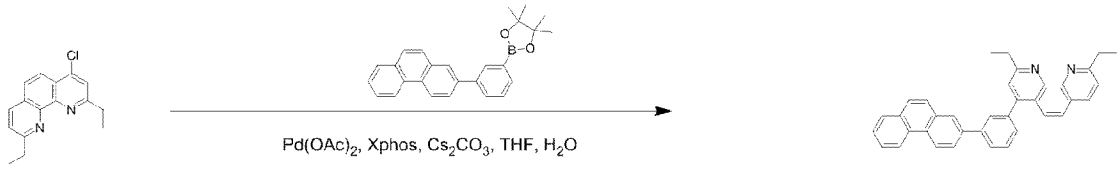
[329] 합성예 25에서 사용된 4,4,5,5-tetramethyl-2-(4-(4-phenylnaphthalen-1-yl)phenyl)-1,3,2-dioxaborolane 대신 반응물로 4,4,5,5-tetramethyl-2-(4-(phenanthren-2-yl)phenyl)-1,3,2-dioxaborolane 을사용한 것을 제외하고는, [합성예 25]과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물(7.0 g, 수율: 70 %)을 얻었다.

[330] [LCMS] : 489

[331]

[332] **[합성예 32] 화합물 33의 합성**

[333]



33

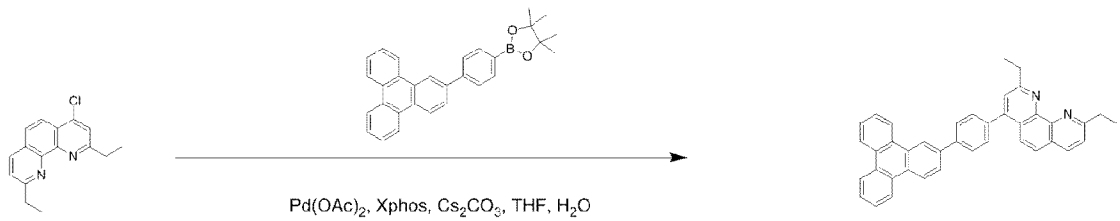
[334] 합성예 25에서 사용된 4,4,5,5-tetramethyl-2-(4-(4-phenylnaphthalen-1-yl)phenyl)-1,3,2-dioxaborolane 대신 4,4,5,5-tetramethyl-2-(3-(phenanthren-2-yl)phenyl)-1,3,2-dioxaborolane을 사용한 것을 제외하고는, [합성예 25]와 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물(7.3 g, 수율: 72%)을 얻었다.

[335] [LCMS] : 489

[336]

[337] **[합성예 33] 화합물 34의 합성**

[338]



34

[339] 합성예 25에서 사용된 4,4,5,5-tetramethyl-2-(4-(4-phenylnaphthalen-1-yl)phenyl)-1,3,2-dioxaborolane 대신 4,4,5,5-tetramethyl-2-(4-(triphenylen-2-yl)phenyl)-1,3,2-dioxaborolane을 사용한 것을 제외하고는, [합성예 25]과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물(7.5 g,

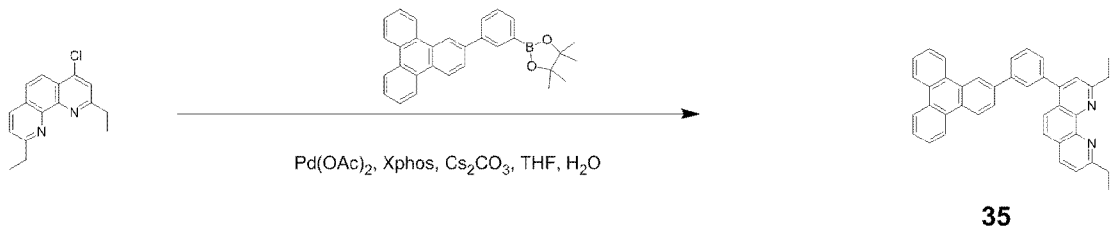
수율: 68 %)을 얻었다.

[340] [LCMS] : 539

[341]

[342] **[합성예 34] 화합물 35의 합성**

[343]



35

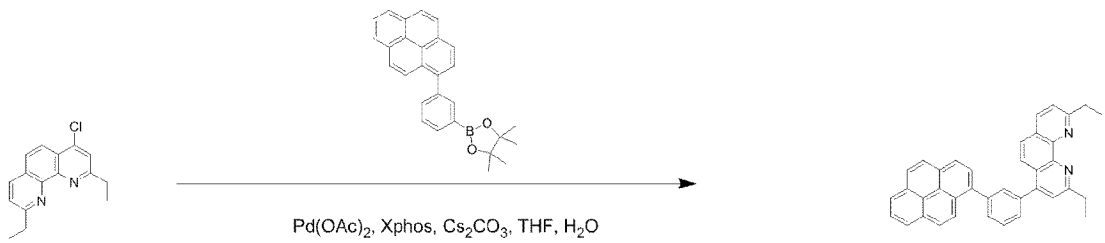
[344] 합성예 25에서 사용된 4,4,5,5-tetramethyl-2-(4-(4-phenylnaphthalen-1-yl)phenyl)-1,3,2-dioxaborolane 대신 4,4,5,5-tetramethyl-2-(3-(triphenylen-2-yl)phenyl)-1,3,2-dioxaborolane을 사용한 것을 제외하고는, [합성예 25]와 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물(8.0 g, 수율: 72 %)을 얻었다.

[345] [LCMS] : 539

[346]

[347] **[합성예 35] 화합물 36의 합성**

[348]



36

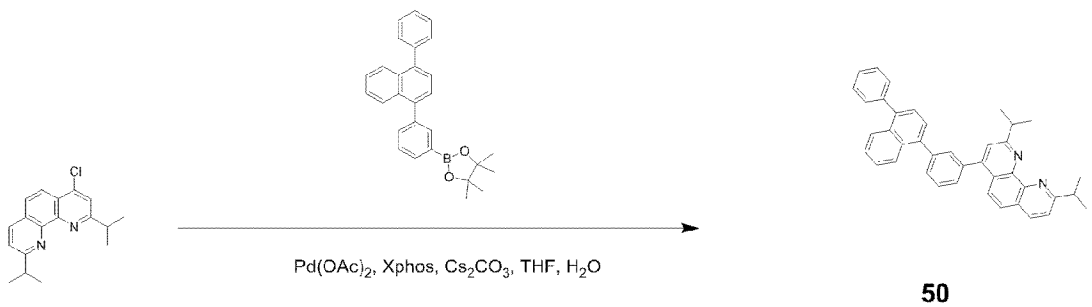
[349] 합성예 25에서 사용된 4,4,5,5-tetramethyl-2-(4-(4-phenylnaphthalen-1-yl)phenyl)-1,3,2-dioxaborolane 대신 4,4,5,5-tetramethyl-2-(3-(pyren-1-yl)phenyl)-1,3,2-dioxaborolane을 사용한 것을 제외하고는, [합성예 25]와 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물(7.9 g, 수율: 75 %)을 얻었다.

[350] [LCMS] : 513

[351]

[352] **[합성예 36] 화합물 50의 합성**

[353]



50

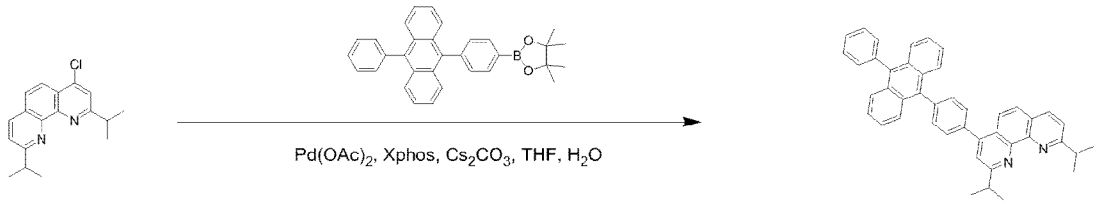
[354] 4-chloro-2,9-diisopropyl-1,10-phenanthroline (6.15 g, 20.6 mmol), 4,4,5,5-tetramethyl-2-(4-(4-phenylnaphthalen-1-yl)phenyl)-1,3,2-dioxaborolane (8.3 g, 20.6 mmol), $Pd(OAc)_2$ (0.2 g, 1.0 mmol), Xphos (1.0g, 2.1 mmol), 및 Cs_2CO_3 (13.5 g, 41.3 mmol)을 Toluene (50ml), EtOH (10ml), H_2O (10ml)에 넣고, 12 시간 동안 가열 환류하였다. 반응 종결 후, 메틸렌클로라이드로 추출하고, $MgSO_4$를 넣고 필터하였다. 필터된 유기층의 용매를 제거한 후, 컬럼크로마토그래피를 이용하여 목적 화합물(7.7 g, 수율: 69 %)을 얻었다.

[355] [LCMS] : 543

[356]

[357] **[합성예 37] 화합물 51의 합성**

[358]



51

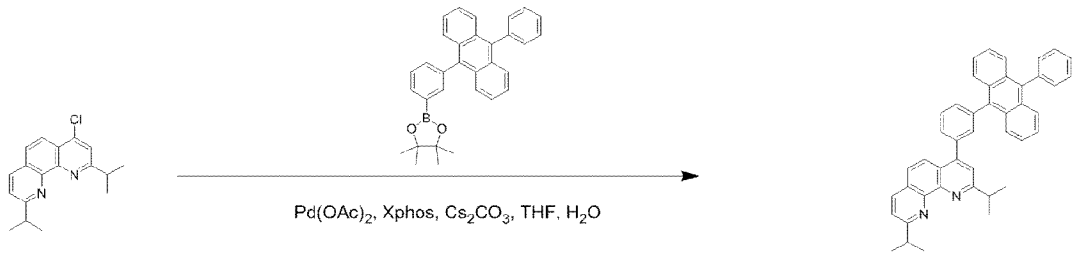
[359] 합성예 36에서 사용된 4,4,5,5-tetramethyl-2-(4-(4-phenylnaphthalen-1-yl)phenyl)-1,3,2-dioxaborolane 대신 4,4,5,5-tetramethyl-2-(4-(10-phenylanthracen-9-yl)phenyl)-1,3,2-dioxaborolane을 사용한 것을 제외하고는, [합성예 36]과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물(8.7 g, 수율: 71 %)을 얻었다.

[360] [LCMS] : 593

[361]

[362] **[합성예 38] 화합물 52의 합성**

[363]



52

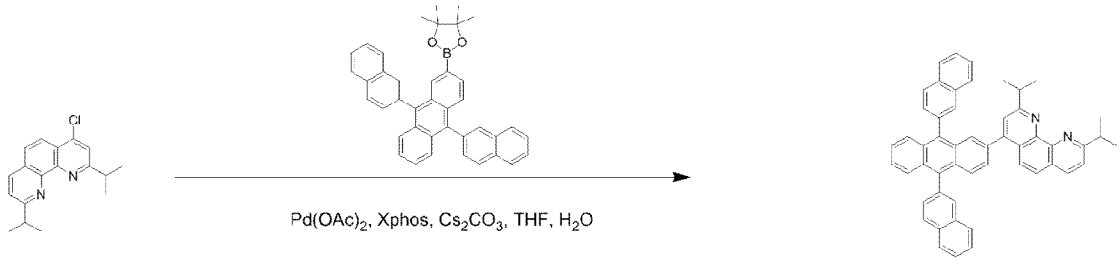
[364] 합성예 36에서 사용된 4,4,5,5-tetramethyl-2-(4-(4-phenylnaphthalen-1-yl)phenyl)-1,3,2-dioxaborolane 대신 4,4,5,5-tetramethyl-2-(3-(10-phenylanthracen-9-yl)phenyl)-1,3,2-dioxaborolane을 사용한 것을 제외하고는, [합성예 36]과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물(8.7 g, 수율: 71 %)을 얻었다.

[365] [LCMS] : 593

[366]

[367] **[합성예 39] 화합물 53의 합성**

[368]



53

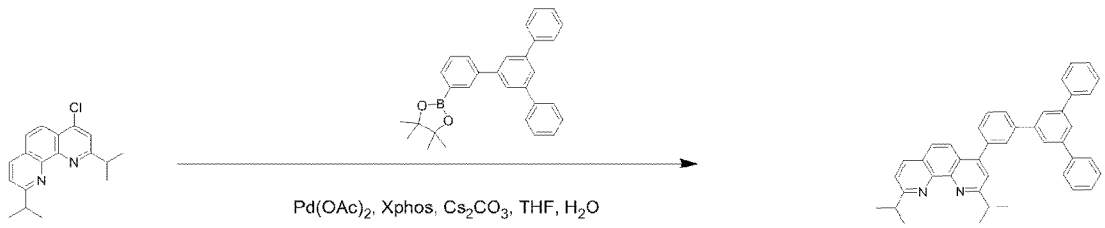
[369] 합성예 36에서 사용된 4,4,5,5-tetramethyl-2-(4-(4-phenylnaphthalen-1-yl)phenyl)-1,3,2-dioxaborolane 대신 2-(9,10-di(naphthalen-2-yl)anthracen-2-yl)-4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolane을 사용한 것을 제외하고는, [합성예 36]과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물(9.6 g, 수율: 67 %)을 얻었다.

[370] [LCMS] : 693

[371]

[372] **[합성예 40] 화합물 55의 합성**

[373]



55

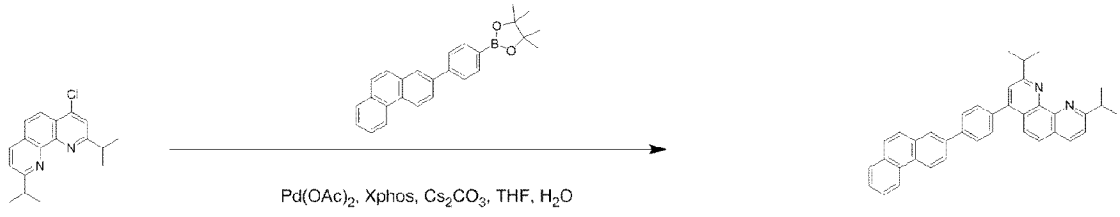
[374] 합성예 36에서 사용된 4,4,5,5-tetramethyl-2-(4-(4-phenylnaphthalen-1-yl)phenyl)-1,3,2-dioxaborolane 대신 4,4,5,5-tetramethyl-2-(5'-phenyl-[1,1':3',1''-terphenyl]-3-yl)-1,3,2-dioxaborolane을 사용한 것을 제외하고는, [합성예 36]과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물(8.1 g, 수율: 69 %)을 얻었다.

[375] [LCMS] : 569

[376]

[377] **[합성예 41] 화합물 56의 합성**

[378]



56

[379] 합성예 36에서 사용된

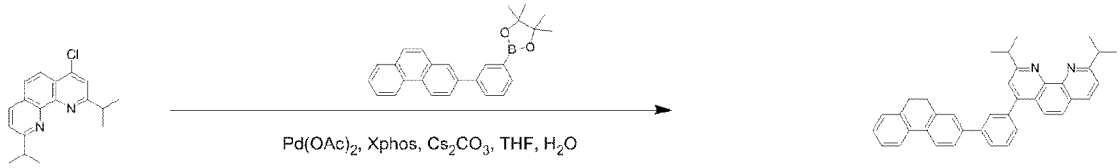
4,4,5,5-tetramethyl-2-(4-(4-phenylnaphthalen-1-yl)phenyl)-1,3,2-dioxaborolane 대신 4,4,5,5-tetramethyl-2-(4-(phenanthren-2-yl)phenyl)-1,3,2-dioxaborolane을 사용한 것을 제외하고는, [합성예 36]과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물(7.1 g, 수율: 67%)을 얻었다.

[380] [LCMS] : 517

[381]

[382] **[합성예 42] 화합물 57의 합성**

[383]



57

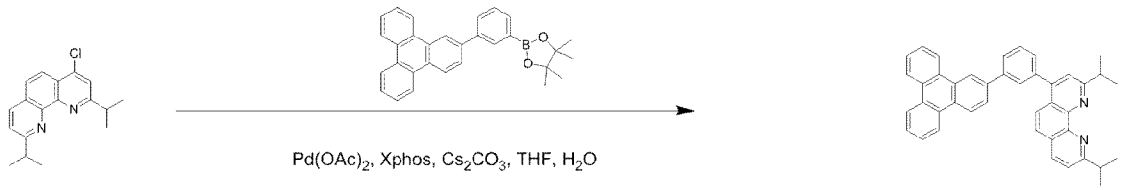
[384] 합성예 36에서 사용된 4,4,5,5-tetramethyl-2-(4-(4-phenylnaphthalen-1-yl)phenyl)-1,3,2-dioxaborolane 대신 4,4,5,5-tetramethyl-2-(3-(phenanthren-2-yl)phenyl)-1,3,2-dioxaborolane을 사용한 것을 제외하고는, [합성예 36]과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물(7.1 g, 수율: 67%)을 얻었다.

[385] [LCMS] : 517

[386]

[387] **[합성예 43] 화합물 59의 합성**

[388]



59

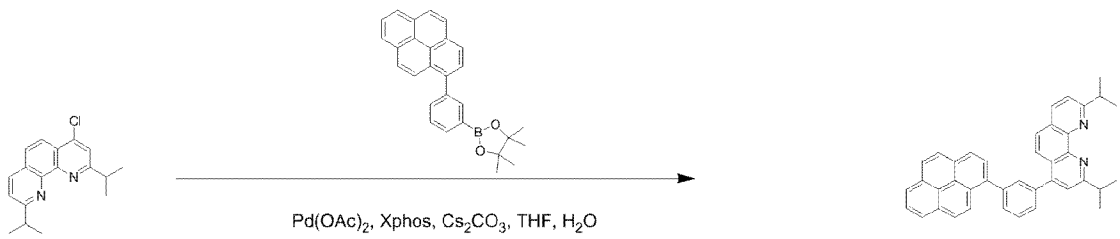
[389] 합성예 36에서 사용된 4,4,5,5-tetramethyl-2-(4-(4-phenylnaphthalen-1-yl)phenyl)-1,3,2-dioxaborolane 대신 4,4,5,5-tetramethyl-2-(3-(triphenylen-2-yl)phenyl)-1,3,2-dioxaborolane을 사용한 것을 제외하고는, [합성예 36]과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물(7.9 g, 수율: 68 %)을 얻었다.

[390] [LCMS] : 567

[391]

[392] **[합성예 44] 화합물 60의 합성**

[393]



60

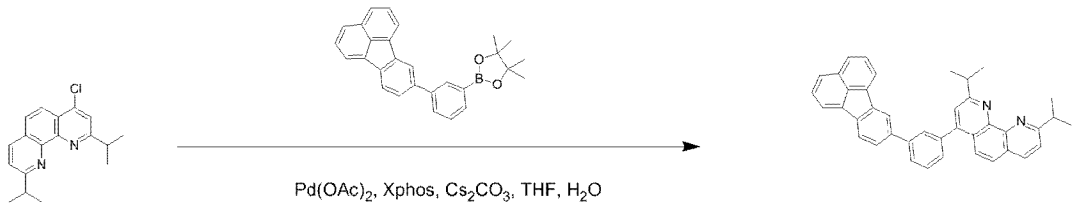
[394] 합성예 36에서 사용된 4,4,5,5-tetramethyl-2-(4-(4-phenylnaphthalen-1-yl)phenyl)-1,3,2-dioxaborolane 대신 4,4,5,5-tetramethyl-2-(3-(pyren-1-yl)phenyl)-1,3,2-dioxaborolane을 사용한 것을 제외하고는, [합성예 36]과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물(7.1 g, 수율: 64 %)을 얻었다.

[395] [LCMS] : 541

[396]

[397] **[합성예 45] 화합물 61의 합성**

[398]



61

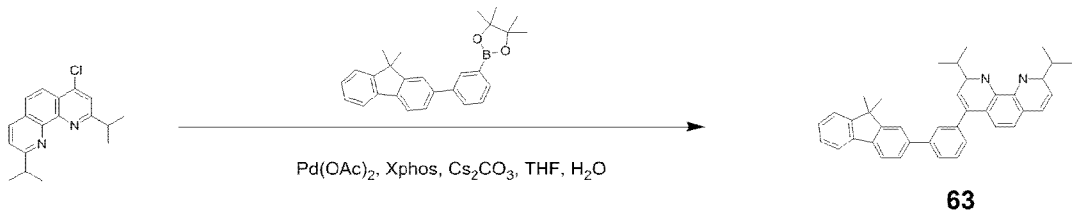
[399] 합성예 36에서 사용된 4,4,5,5-tetramethyl-2-(4-(4-phenylnaphthalen-1-yl)phenyl)-1,3,2-dioxaborolane 대신 2-(3-(fluoranthen-8-yl)phenyl)-4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolane 을 사용한 것을 제외하고는, [합성예 36]과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물(7.9 g, 수율: 71 %)을 얻었다.

[400] [LCMS] : 541

[401]

[402] **[합성예 46] 화합물 63의 합성**

[403]



63

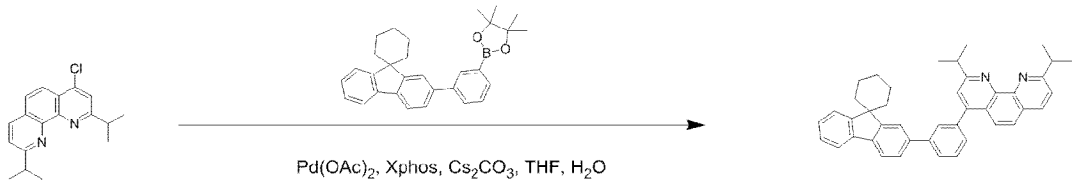
[404] 합성예 36에서 사용된 4,4,5,5-tetramethyl-2-(4-(4-phenylnaphthalen-1-yl)phenyl)-1,3,2-dioxaborolane 대신 2-(3-(9,9-dimethyl-9H-fluoren-2-yl)phenyl)-4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolane을 사용한 것을 제외하고는, [합성예 36]과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물(7.7 g, 수율: 70 %)을 얻었다.

[405] [LCMS] : 533

[406]

[407] **[합성예 47] 화합물 64의 합성**

[408]



64

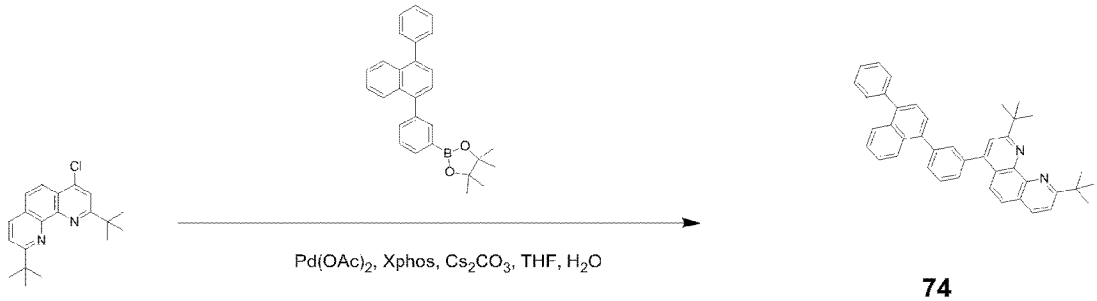
[409] 합성예 36에서 사용된 4,4,5,5-tetramethyl-2-(4-(4-phenylnaphthalen-1-yl)phenyl)-1,3,2-dioxaborolane 대신 4,4,5,5-tetramethyl-2-(3-(spiro[cyclohexane-1,9'-fluoren]-2'-yl)phenyl)-1,3,2-dioxaborolane을 사용한 것을 제외하고는, [합성예 36]과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물(8.0 g, 수율: 68 %)을 얻었다.

[410] [LCMS] : 573

[411]

[412] **[합성예 48] 화합물 74의 합성**

[413]



74

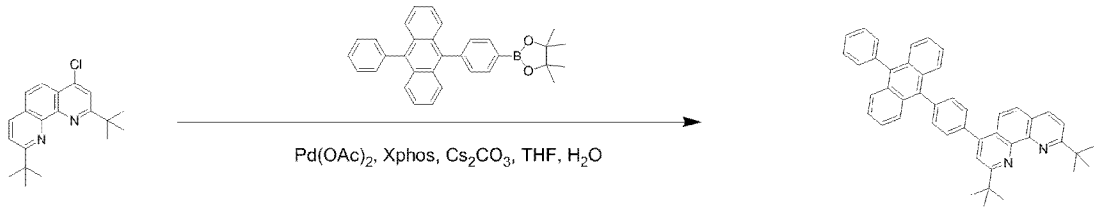
[414] 2,9-di-tert-butyl-4-chloro-1,10-phenanthroline (6.75 g, 20.6 mmol), 4,4,5,5-tetramethyl-2-(3-(4-phenylnaphthalen-1-yl)phenyl)-1,3,2-dioxaborolane (8.3 g, 20.6 mmol), $Pd(OAc)_2$ (0.2 g, 1.0 mmol), Xphos (1.0g, 2.1 mmol), 및 Cs_2CO_3 (13.5 g, 41.3 mmol)을 Toluene (50ml), EtOH (10ml), H_2O (10ml)에 넣고, 12 시간 동안 가열 환류하였다. 반응 종결 후, 메틸렌클로라이드로 추출하고, $MgSO_4$를 넣고 필터하였다. 필터된 유기층의 용매를 제거한 후, 컬럼크로마토그래피를 이용하여 목적 화합물(7.6 g, 수율: 65 %)을 얻었다.

[415] [LCMS] : 571

[416]

[417] **[합성예 49] 화합물 75의 합성**

[418]



75

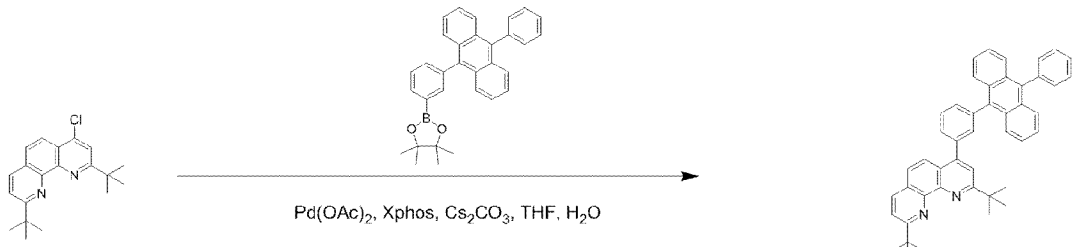
[419] 합성예 48에서 사용된 4,4,5,5-tetramethyl-2-(3-(4-phenylnaphthalen-1-yl)phenyl)-1,3,2-dioxaborolane 대신 4,4,5,5-tetramethyl-2-(4-(10-phenylanthracen-9-yl)phenyl)-1,3,2-dioxaborolane을 사용한 것을 제외하고는, [합성예 48]과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물(8.3 g, 수율: 65 %)을 얻었다.

[420] [LCMS] : 621

[421]

[422] **[합성예 50] 화합물 76의 합성**

[423]



76

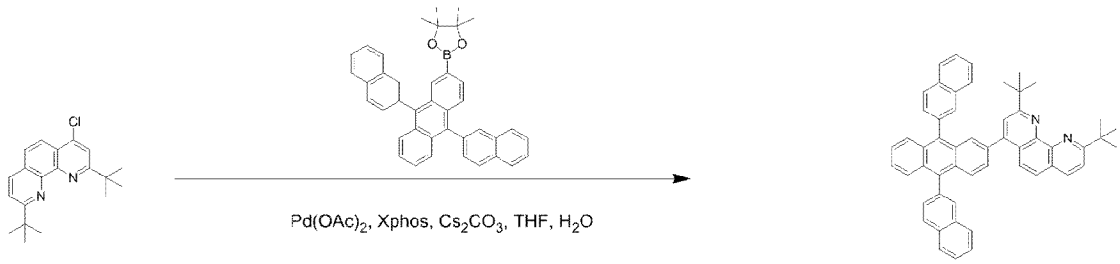
[424] 합성예 48에서 사용된 4,4,5,5-tetramethyl-2-(3-(4-phenylnaphthalen-1-yl)phenyl)-1,3,2-dioxaborolane 대신 4,4,5,5-tetramethyl-2-(3-(10-phenylanthracen-9-yl)phenyl)-1,3,2-dioxaborolane을 사용한 것을 제외하고는, [합성예 48]과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물(8.3 g, 수율: 65 %)을 얻었다.

[425] [LCMS] : 621

[426]

[427] **[합성예 51] 화합물 77의 합성**

[428]



77

[429] 합성예 48에서 사용된 4,4,5,5-tetramethyl-2-(3-(4-phenylnaphthalen-1-yl)phenyl)-1,3,2-dioxaborolane 대신

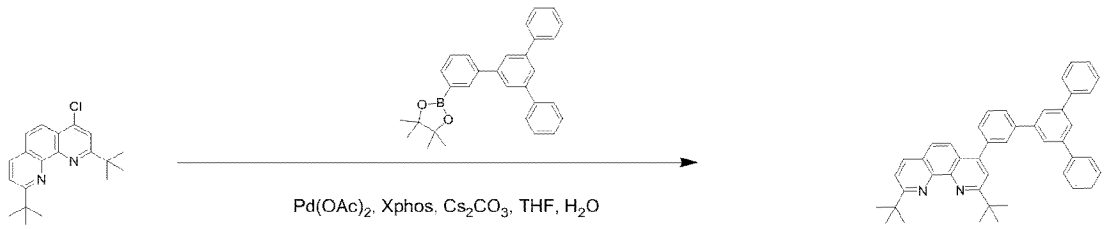
2-(9,10-di(naphthalen-2-yl)anthracen-2-yl)-4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolane을 사용한 것을 제외하고는, [합성예 48]과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물(9.1 g, 수율: 61 %)을 얻었다.

[430] [LCMS] : 9.1

[431]

[432] **[합성예 52] 화합물 79의 합성**

[433]



79

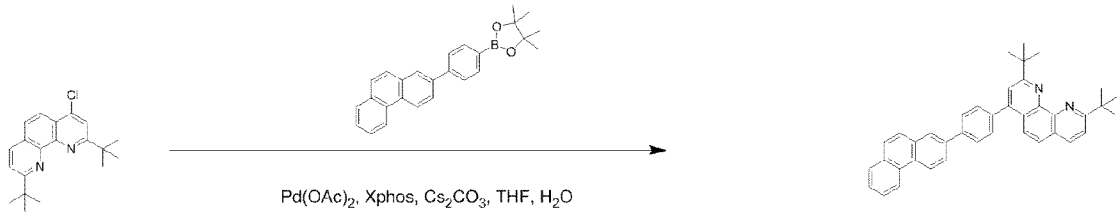
[434] 합성예 48에서 사용된 4,4,5,5-tetramethyl-2-(3-(4-phenylnaphthalen-1-yl)phenyl)-1,3,2-dioxaborolane 대신 4,4,5,5-tetramethyl-2-(5'-phenyl-[1,1':3',1''-terphenyl]-3-yl)-1,3,2-dioxaborolane을 사용한 것을 제외하고는, [합성예 48]과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물(7.9 g, 수율: 64 %)을 얻었다.

[435] [LCMS] : 597

[436]

[437] **[합성예 53] 화합물 80의 합성**

[438]



80

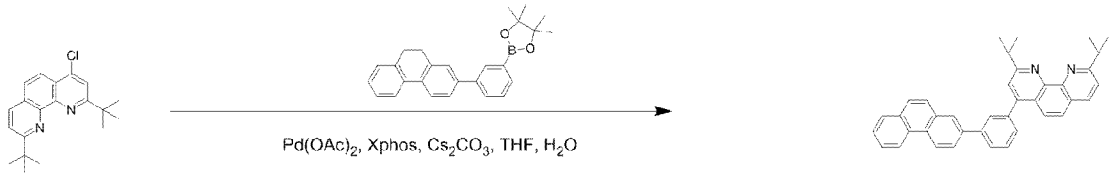
[439] 합성예 48에서 사용된 4,4,5,5-tetramethyl-2-(3-(4-phenylnaphthalen-1-yl)phenyl)-1,3,2-dioxaborolane 대신 4,4,5,5-tetramethyl-2-(4-(phenanthren-2-yl)phenyl)-1,3,2-dioxaborolane을 사용한 것을 제외하고는, [합성예 48]과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물(7.0 g, 수율: 62 %)을 얻었다.

[440] [LCMS] : 545

[441]

[442] **[합성예 54] 화합물 81의 합성**

[443]



81

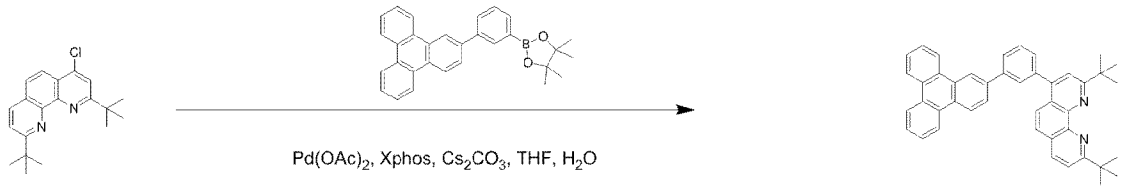
[444] 합성예 48에서 사용된 4,4,5,5-tetramethyl-2-(3-(4-phenylnaphthalen-1-yl)phenyl)-1,3,2-dioxaborolane 대신 4,4,5,5-tetramethyl-2-(3-(phenanthren-2-yl)phenyl)-1,3,2-dioxaborolane을 사용한 것을 제외하고는, [합성예 48]과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물(7.0 g, 수율: 62 %)을 얻었다.

[445] [LCMS] : 545

[446]

[447] **[합성예 55] 화합물 83의 합성**

[448]



83

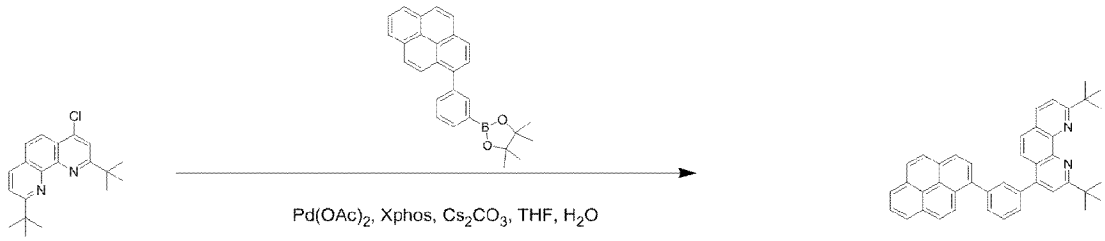
[449] 합성예 48에서 사용된 4,4,5,5-tetramethyl-2-(3-(4-phenylnaphthalen-1-yl)phenyl)-1,3,2-dioxaborolane 대신 4,4,5,5-tetramethyl-2-(3-(triphenylen-2-yl)phenyl)-1,3,2-dioxaborolane을 사용한 것을 제외하고는, [합성예 48]과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물(8.1 g, 수율: 66 %)을 얻었다.

[450] [LCMS] : 595

[451]

[452] **[합성예 56] 화합물 84의 합성**

[453]



84

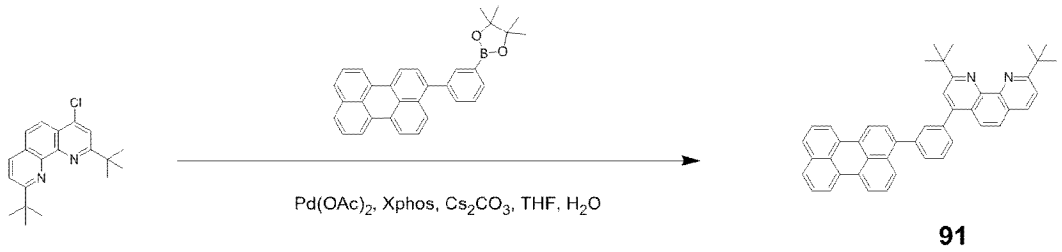
[454] 합성예 48에서 사용된 4,4,5,5-tetramethyl-2-(3-(4-phenylnaphthalen-1-yl)phenyl)-1,3,2-dioxaborolane 대신 4,4,5,5-tetramethyl-2-(3-(pyren-4-yl)phenyl)-1,3,2-dioxaborolane을 사용한 것을 제외하고는, [합성예 48]과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물(7.7 g, 수율: 66 %)을 얻었다.

[455] [LCMS] : 569

[456]

[457] **[합성예 57] 화합물 91의 합성**

[458]



91

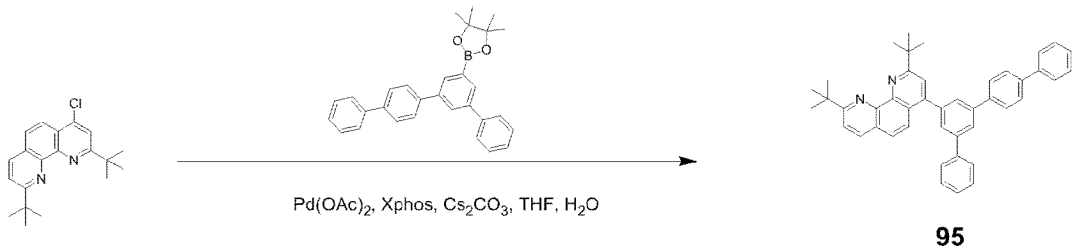
[459] 합성예 48에서 사용된 4,4,5,5-tetramethyl-2-(3-(4-phenylnaphthalen-1-yl)phenyl)-1,3,2-dioxaborolane 대신 4,4,5,5-tetramethyl-2-(3-(perylen-3-yl)phenyl)-1,3,2-dioxaborolane 을 사용한 것을 제외하고는, [합성예 48]과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물(8.9 g, 수율: 70 %)을 얻었다.

[460] [LCMS] : 619

[461]

[462] **[합성예 58] 화합물 95의 합성**

[463]



95

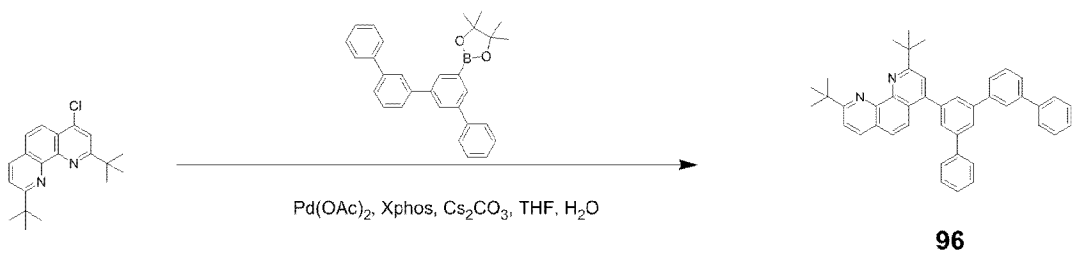
[464] 합성예 48에서 사용된 4,4,5,5-tetramethyl-2-(3-(4-phenylnaphthalen-1-yl)phenyl)-1,3,2-dioxaborolane 대신 2-([1,1':3',1":4",1"'-quaterphenyl]-5'-yl)-4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolane을 사용한 것을 제외하고는, [합성예 48]과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물(8.2 g, 수율: 67 %)을 얻었다.

[465] [LCMS] : 597

[466]

[467] **[합성예 59] 화합물 96의 합성**

[468]



96

[469] 합성예 48에서 사용된 4,4,5,5-tetramethyl-2-(3-(4-phenylnaphthalen-1-yl)phenyl)-1,3,2-dioxaborolane 대신

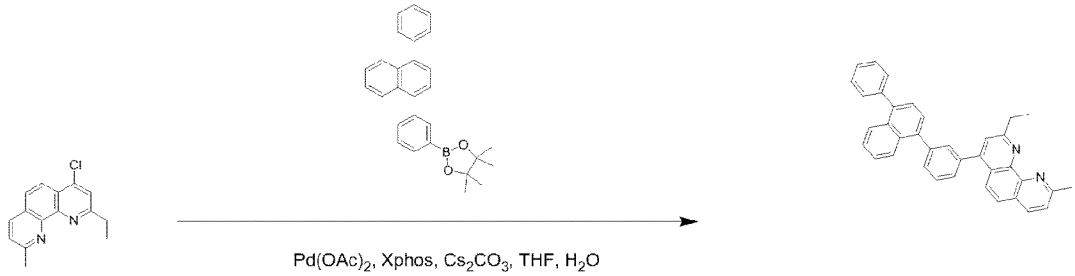
2-([1,1':3',1":3",1"'-quaterphenyl]-5'-yl)-4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolane을 사용한 것을 제외하고는, [합성예 48]과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물(8.2 g, 수율: 67 %)을 얻었다.

[470] [LCMS] : 597

[471]

[472] **[합성예 60] 화합물 98의 합성**

[473]



98

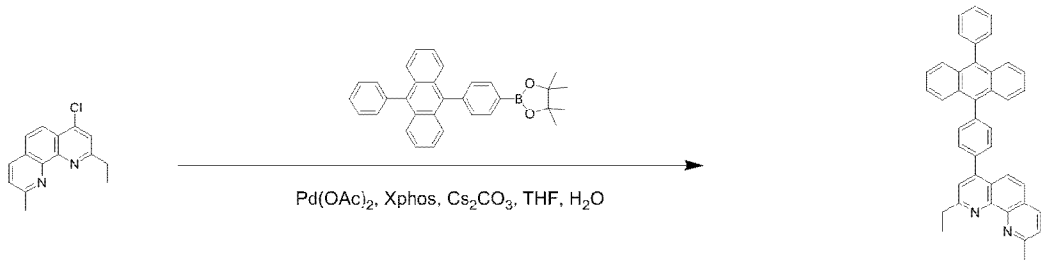
[474] 4-chloro-2-ethyl-9-methyl-1,10-phenanthroline (5.3 g, 20.6 mmol), 4,4,5,5-tetramethyl-2-(3-(4-phenylnaphthalen-1-yl)phenyl)-1,3,2-dioxaborolane (8.3 g, 20.6 mmol), $Pd(OAc)_2$ (0.2 g, 1.0 mmol), Xphos (1.0g, 2.1 mmol), 및 Cs_2CO_3 (13.5 g, 41.3 mmol)을 Toluene (50ml), EtOH (10ml), H_2O (10ml)에 넣고 12 시간 동안 가열 환류하였다. 반응 종결 후, 메틸렌클로라이드로 추출하고, $MgSO_4$를 넣고 필터하였다. 필터된 유기층의 용매를 제거한 후, 컬럼크로마토그래피를 이용하여 목적 화합물(6.6 g, 수율: 64 %)을 얻었다.

[475] [LCMS] : 501

[476]

[477] **[합성예 61] 화합물 99의 합성**

[478]



99

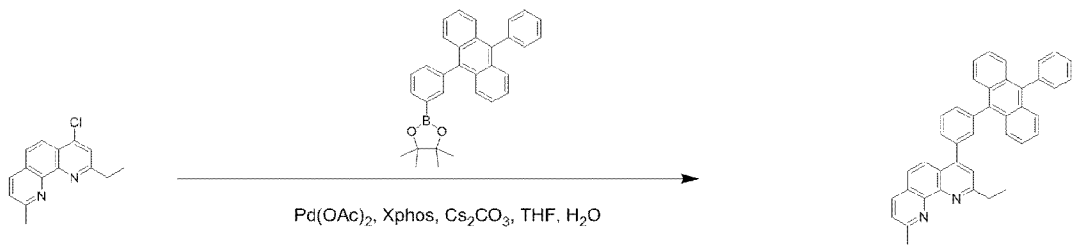
[479] 합성예 60에서 사용된 4,4,5,5-tetramethyl-2-(3-(4-phenylnaphthalen-1-yl)phenyl)-1,3,2-dioxaborolane 대신 4,4,5,5-tetramethyl-2-(4-(10-phenylanthracen-9-yl)phenyl)-1,3,2-dioxaborolane을 사용한 것을 제외하고는, [합성예 60]과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물(7.3 g, 수율: 64 %)을 얻었다.

[480] [LCMS] : 551

[481]

[482] **[합성예 62] 화합물 100의 합성**

[483]



100

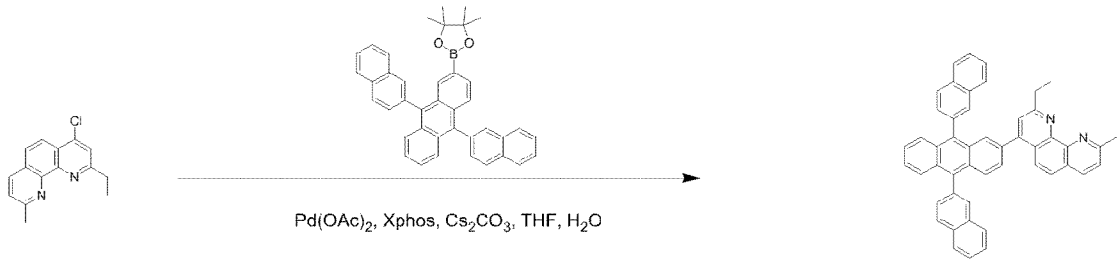
[484] 합성예 60에서 사용된 4,4,5,5-tetramethyl-2-(3-(4-phenylnaphthalen-1-yl)phenyl)-1,3,2-dioxaborolane 대신 4,4,5,5-tetramethyl-2-(3-(10-phenylanthracen-9-yl)phenyl)-1,3,2-dioxaborolane을 사용한 것을 제외하고는, [합성예 60]과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물(7.3 g, 수율: 64 %)을 얻었다.

[485] [LCMS] : 551

[486]

[487] **[합성예 63] 화합물 101의 합성**

[488]



101

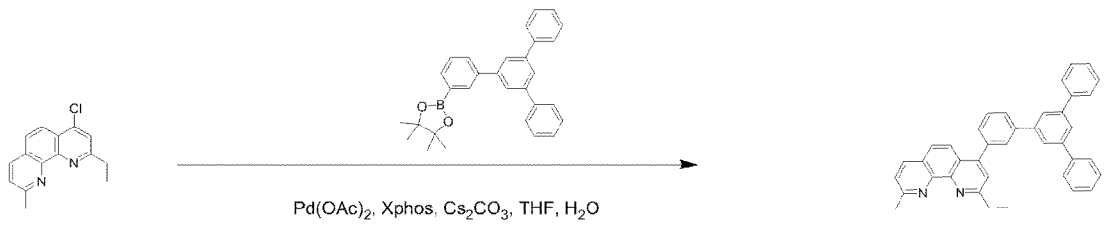
[489] 합성예 60에서 사용된 4,4,5,5-tetramethyl-2-(3-(4-phenylnaphthalen-1-yl)phenyl)-1,3,2-dioxaborolane 대신 2-(9,10-di(naphthalen-2-yl)anthracen-2-yl)-4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolane을 사용한 것을 제외하고는, [합성예 60]과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물(8.0 g, 수율: 60 %)을 얻었다.

[490] [LCMS] : 651

[491]

[492] **[합성예 64] 화합물 103의 합성**

[493]



103

[494] 합성예 60에서 사용된 4,4,5,5-tetramethyl-2-(3-(4-phenylnaphthalen-1-yl)phenyl)-1,3,2-dioxaborolane 대신

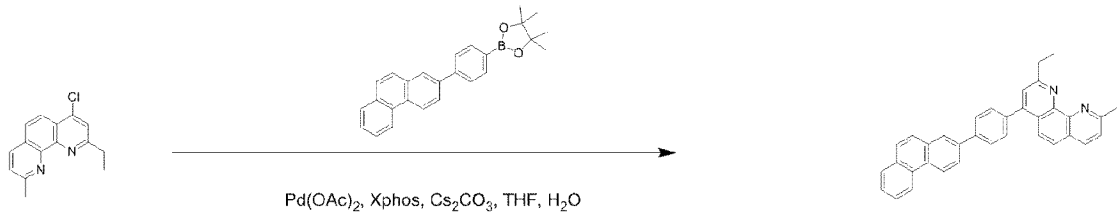
4,4,5,5-tetramethyl-2-(5'-phenyl-[1,1':3',1''-terphenyl]-3-yl)-1,3,2-dioxaborolane을 사용한 것을 제외하고는, [합성예 60]과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물(6.6 g, 수율: 61 %)을 얻었다.

[495] [LCMS] : 527

[496]

[497] **[합성예 65] 화합물 104의 합성**

[498]



104

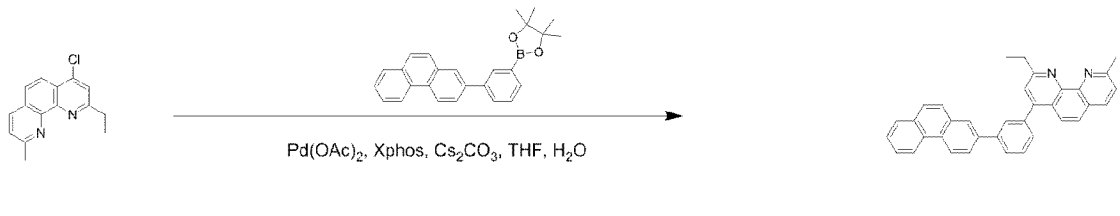
[499] 합성예 60에서 사용된 4,4,5,5-tetramethyl-2-(3-(4-phenylnaphthalen-1-yl)phenyl)-1,3,2-dioxaborolane 대신 4,4,5,5-tetramethyl-2-(4-(phenanthren-2-yl)phenyl)-1,3,2-dioxaborolane을 사용한 것을 제외하고는, [합성예 60]과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물(6.0 g, 수율: 61%)을 얻었다.

[500] [LCMS] : 475

[501]

[502] **[합성예 66] 화합물 105의 합성**

[503]



105

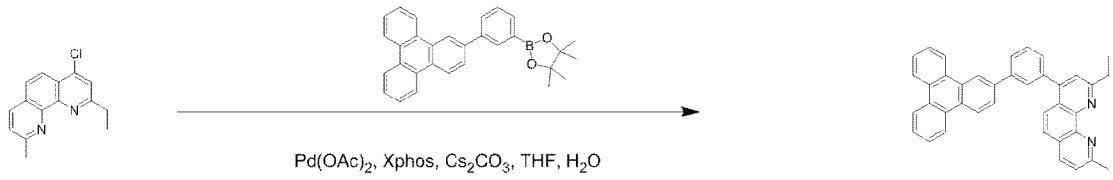
[504] 합성예 60에서 사용된 4,4,5,5-tetramethyl-2-(3-(4-phenylnaphthalen-1-yl)phenyl)-1,3,2-dioxaborolane 대신 4,4,5,5-tetramethyl-2-(3-(phenanthren-2-yl)phenyl)-1,3,2-dioxaborolane을 사용한 것을 제외하고는, [합성예 60]과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물(6.0g, 수율: 61 %)을 얻었다.

[505] [LCMS] : 475

[506]

[507] **[합성예 67] 화합물 107의 합성**

[508]



107

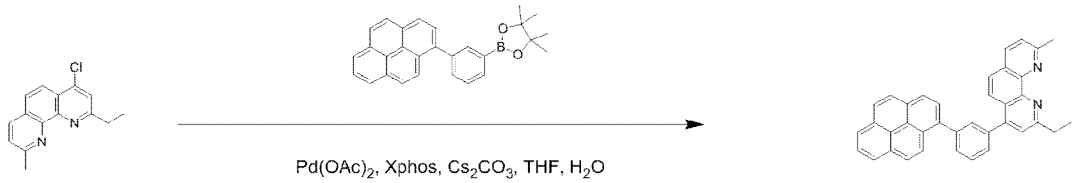
[509] 합성예 60에서 사용된 4,4,5,5-tetramethyl-2-(3-(4-phenylnaphthalen-1-yl)phenyl)-1,3,2-dioxaborolane 대신 4,4,5,5-tetramethyl-2-(3-(triphenylen-2-yl)phenyl)-1,3,2-dioxaborolane을 사용한 것을 제외하고는, [합성예 60]과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물(6.8 g, 수율: 63 %)을 얻었다.

[510] [LCMS] : 525

[511]

[512] **[합성예 68] 화합물 108의 합성**

[513]



108

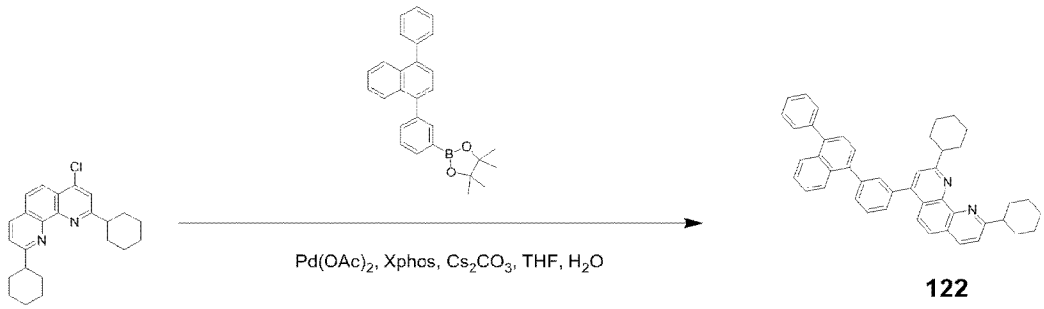
[514] 합성예 60에서 사용된 4,4,5,5-tetramethyl-2-(3-(4-phenylnaphthalen-1-yl)phenyl)-1,3,2-dioxaborolane 대신 4,4,5,5-tetramethyl-2-(3-(pyren-1-yl)phenyl)-1,3,2-dioxaborolane을 사용한 것을 제외하고는, [합성예 60]과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물(6.5 g, 수율: 63 %)을 얻었다.

[515] [LCMS] : 499

[516]

[517] **[합성예 69] 화합물 122의 합성**

[518]



122

[519] 4-chloro-2,9-dicyclohexyl-1,10-phenanthroline (7.8 g, 20.6 mmol)와 4,4,5,5-tetramethyl-2-(4-(4-phenylnaphthalen-1-yl)phenyl)-1,3,2-dioxaborolane (8.4 g, 20.6 mmol) 및 $Pd(OAc)_2$ (0.2 g, 1.0 mmol), Xphos (1.0g, 2.1 mmol), 및 Cs_2CO_3 (13.5 g, 41.3 mmol)을, Toluene (50ml), EtOH (10ml) 및 H_2O (10ml)의 혼합용매에 넣고, 12 시간 동안 가열 환류하였다. 반응 종결 후 메틸렌클로라이드로 추출하고,

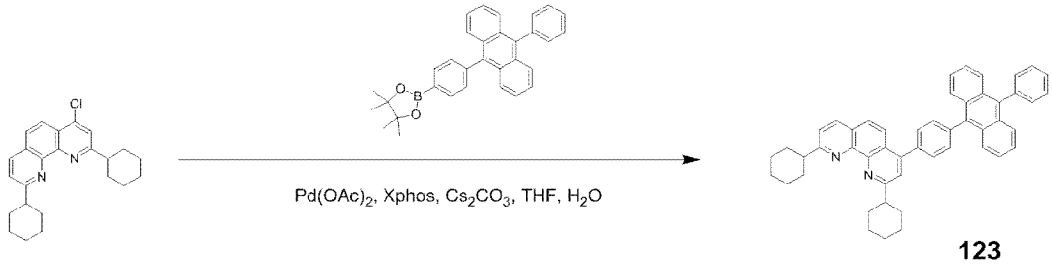
$MgSO_4$를 넣고 필터하였다. 필터된 유기층의 용매를 제거한 후, 컬럼크로마토그래피를 이용하여 목적 화합물(9.0 g, 수율: 70 %)을 얻었다.

[520] [LCMS] :623

[521]

[522] **[합성예 70] 화합물 123의 합성**

[523]



123

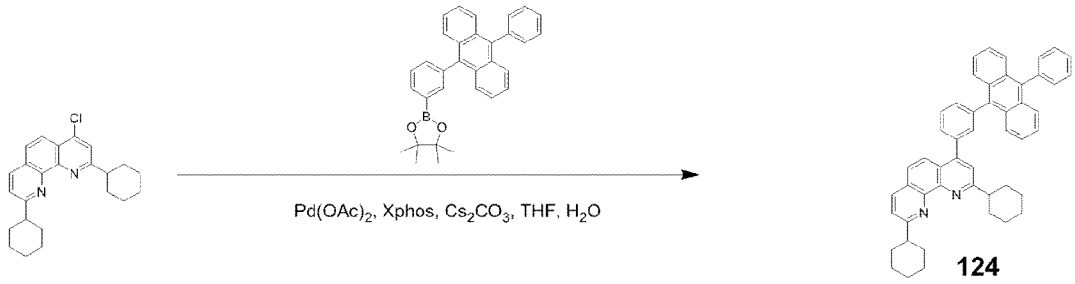
[524] 합성예 69에서 사용된 4,4,5,5-tetramethyl-2-(4-(4-phenylnaphthalen-1-yl)phenyl)-1,3,2-dioxaborolane 대신 4,4,5,5-tetramethyl-2-(4-(10-phenylanthracen-9-yl)phenyl)-1,3,2-dioxaborolane을 사용한 것을 제외하고는, [합성예 69]와 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물(10.1 g, 수율: 73 %)을 얻었다.

[525] [LCMS] :673

[526]

[527] **[합성예 71] 화합물 124의 합성**

[528]



124

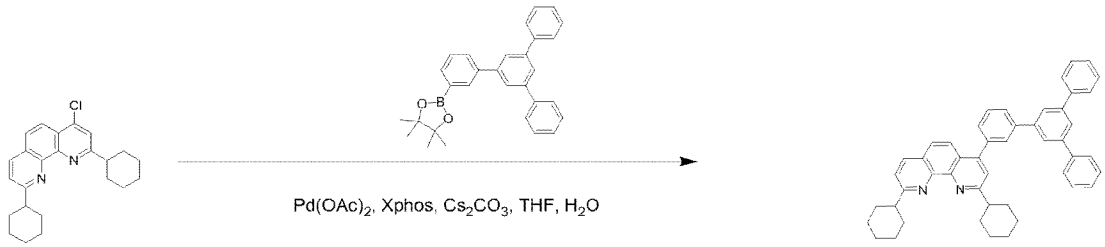
[529] 합성예 69에서 사용된 4,4,5,5-tetramethyl-2-(4-(4-phenylnaphthalen-1-yl)phenyl)-1,3,2-dioxaborolane 대신 4,4,5,5-tetramethyl-2-(3-(10-phenylanthracen-9-yl)phenyl)-1,3,2-dioxaborolane을 사용한 것을 제외하고는, [합성예 69]와 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물(10.1 g, 수율: 73 %)을 얻었다.

[530] [LCMS] : 673

[531]

[532] **[합성예 72] 화합물 127의 합성**

[533]



127

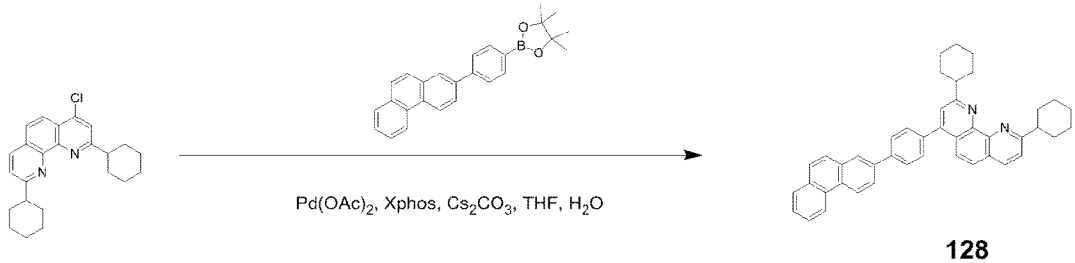
[534] 합성예 69에서 사용된 4,4,5,5-tetramethyl-2-(4-(4-phenylnaphthalen-1-yl)phenyl)-1,3,2-dioxaborolane 대신 4,4,5,5-tetramethyl-2-(5'-phenyl-[1,1':3',1''-terphenyl]-3-yl)-1,3,2-dioxaborolane을 사용한 것을 제외하고는, [합성예 69]와 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물(10.0 g, 수율: 75 %)을 얻었다.

[535] [LCMS] :649

[536]

[537] **[합성예 73] 화합물 128의 합성**

[538]



128

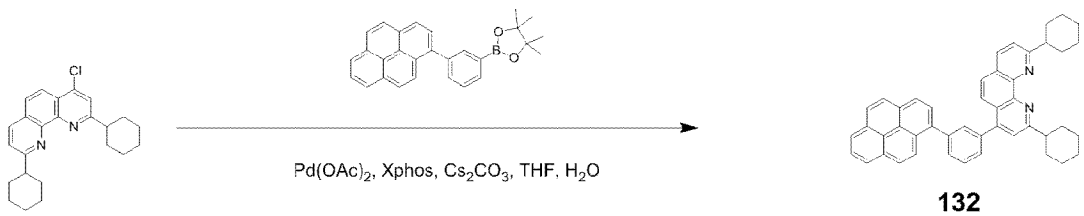
[539] 합성예 69에서 사용된 4,4,5,5-tetramethyl-2-(4-(4-phenylnaphthalen-1-yl)phenyl)-1,3,2-dioxaborolane 대신 4,4,5,5-tetramethyl-2-(4-(phenanthren-2-yl)phenyl)-1,3,2-dioxaborolane 을사용한 것을 제외하고는, [합성예 69]와 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물(9.1 g, 수율: 74 %)을 얻었다.

[540] [LCMS] :597

[541]

[542] **[합성예 74] 화합물 132의 합성**

[543]



132

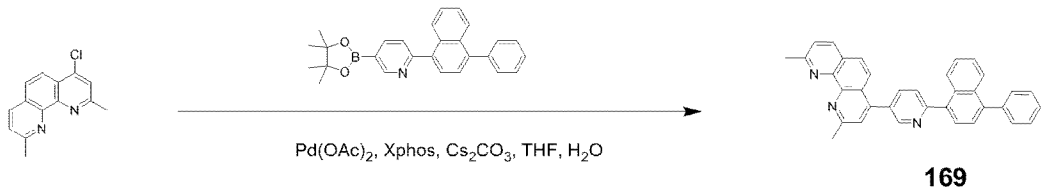
[544] 합성예 69에서 사용된 4,4,5,5-tetramethyl-2-(4-(4-phenylnaphthalen-1-yl)phenyl)-1,3,2-dioxaborolane 대신 4,4,5,5-tetramethyl-2-(3-(pyren-1-yl)phenyl)-1,3,2-dioxaborolane을 사용한 것을 제외하고는, [합성예 69]와 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물(9.0 g, 수율: 70 %)을 얻었다.

[545] [LCMS] :621

[546]

[547] **[합성예 75] 화합물 169의 합성**

[548]



169

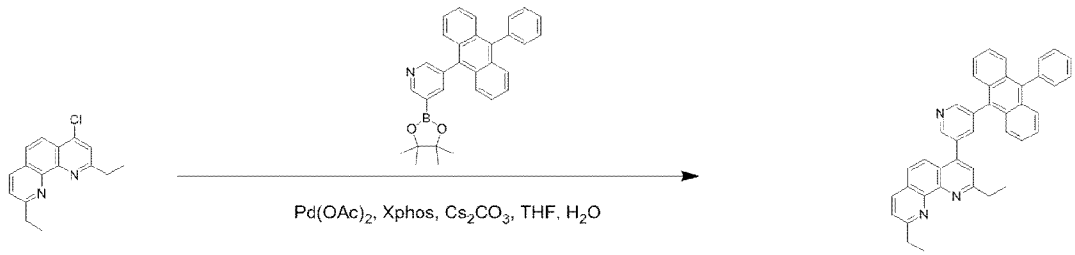
[549] 합성예 1에서 사용된 4,4,5,5-tetramethyl-2-(4-(4-phenylnaphthalen-1-yl)phenyl)-1,3,2-dioxaborolane 대신 2-(4-phenylnaphthalen-1-yl)-5-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)pyridine을 사용한 것을 제외하고는, [합성예 1]과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물(6.3 g, 수율: 63 %)을 얻었다.

[550] [LCMS] :488

[551]

[552] **[합성예 76] 화합물 171의 합성**

[553]



171

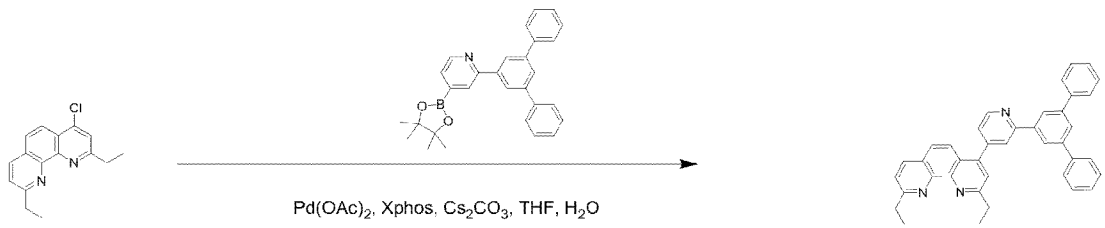
[554] 합성예 25에서 사용된 4,4,5,5-tetramethyl-2-(4-(4-phenylnaphthalen-1-yl)phenyl)-1,3,2-dioxaborolane 대신 3-(10-phenylanthracen-9-yl)-5-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)pyridine을 사용한 것을 제외하고는, [합성예 25]와 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물(7.5 g, 수율: 64 %)을 얻었다.

[555] [LCMS] :566

[556]

[557] **[합성예 77] 화합물 172의 합성**

[558]



172

[559] 합성예 25에서 사용된 4,4,5,5-tetramethyl-2-(4-(4-phenylnaphthalen-1-yl)phenyl)-1,3,2-dioxaborolane 대신

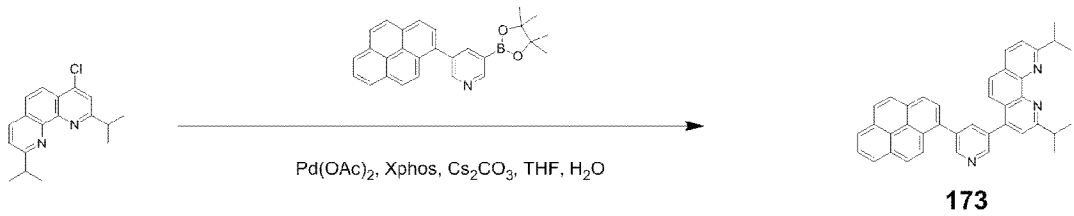
2-([1,1':3',1''-terphenyl]-5'-yl)-4-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)pyridine을 사용한 것을 제외하고는, [합성예 25]와 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물(7.2 g, 수율: 65 %)을 얻었다.

[560] [LCMS] :542

[561]

[562] **[합성예 78] 화합물 173의 합성**

[563]



173

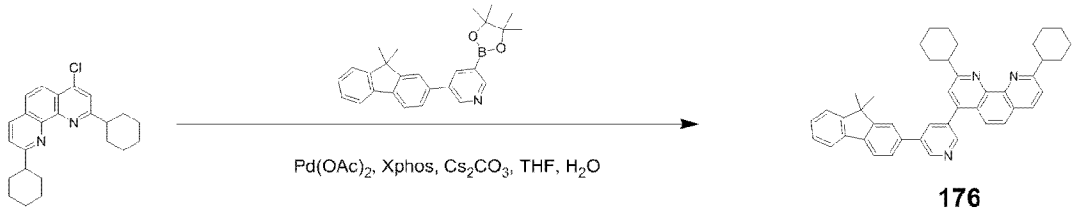
[564] 합성예 36에서 사용된 4,4,5,5-tetramethyl-2-(4-(4-phenylnaphthalen-1-yl)phenyl)-1,3,2-dioxaborolane 대신 3-(pyren-1-yl)-5-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)pyridine을 사용한 것을 제외하고는, [합성예 36]과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물(6.7 g, 수율: 60 %)을 얻었다.

[565] [LCMS] :542

[566]

[567] **[합성예 79] 화합물 176의 합성**

[568]



176

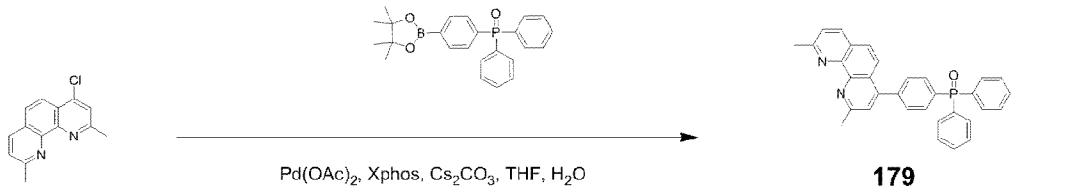
[569] 합성예 69에서 사용된 4,4,5,5-tetramethyl-2-(4-(4-phenylnaphthalen-1-yl)phenyl)-1,3,2-dioxaborolane 대신 3-(9,9-dimethyl-9H-fluoren-2-yl)-5-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)pyridine을 사용한 것을 제외하고는, [합성예 69]와 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물(7.6 g, 수율: 60 %)을 얻었다.

[570] [LCMS] :614

[571]

[572] **[합성예 80] 화합물 179의 합성**

[573]



179

[574] 합성예 1에서 사용된

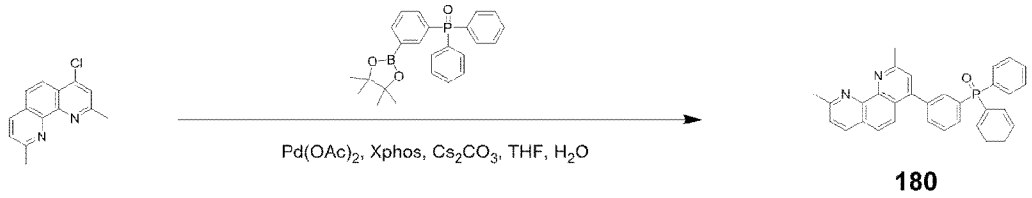
4,4,5,5-tetramethyl-2-(4-(4-phenylnaphthalen-1-yl)phenyl)-1,3,2-dioxaborolane 대신 diphenyl(4-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)phenyl)phosphine oxide을 사용한 것을 제외하고는, [합성예 1]과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물(7.0 g, 수율: 70 %)을 얻었다.

[575] [LCMS] : 485

[576]

[577] **[합성예 81] 화합물 180의 합성**

[578]



180

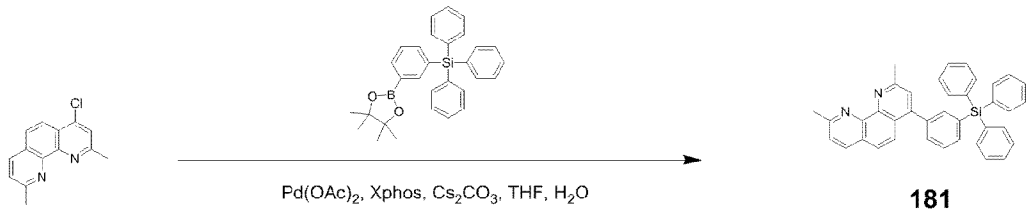
[579] 합성예 1에서 사용된 4,4,5,5-tetramethyl-2-(4-(4-phenylnaphthalen-1-yl)phenyl)-1,3,2-dioxaborolane 대신 diphenyl(3-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)phenyl)phosphine oxide을 사용한 것을 제외하고는, [합성예 1]과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물(7.0 g, 수율: 70 %)을 얻었다.

[580] [LCMS] : 485

[581]

[582] **[합성예 82] 화합물 181의 합성**

[583]



181

[584] 합성예 1에서 사용된 4,4,5,5-tetramethyl-2-(4-(4-phenylnaphthalen-1-yl)phenyl)-1,3,2-dioxaborolane 대신 triphenyl(3-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)phenyl)silane을 사용한 것을 제외하고는, [합성예 1]과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물(7.8 g, 수율: 70 %)을 얻었다.

[585] [LCMS] : 543

[586]

[587] **[실시예 1] - 청색 유기 전계 발광 소자의 제작**

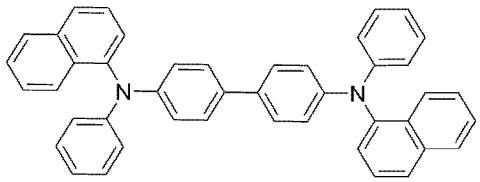
[588] 합성예 1에서 합성된 화합물 1을 통상적으로 알려진 방법으로 고순도 승화정제를 한 후, 하기와 같이 청색 유기 전계 발광 소자를 제작하였다.

[589] 먼저, ITO (Indium tin oxide)가 1500 Å 두께로 박막 코팅된 유리 기판을 증류수 초음파로 세척하였다. 증류수 세척이 끝나면, 이소프로필 알코올, 아세톤, 메탄올 등의 용제로 초음파 세척을 하고 건조시킨 후, UV OZONE 세정기(Power

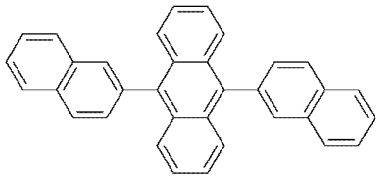
sonic 405, 화신테크)로 이송시킨 다음 UV를 이용하여 상기 기판을 5분간 세정하고 진공 증착기로 기판을 이송하였다.

[590] 상기와 같이 준비된 ITO 투명 전극 위에, DS-205 (㈜두산전자, 80 nm)/NPB (15 nm)/ADN + 5 % DS-405 (㈜두산전자, 30nm)/화합물 1(30 nm)/LiF (1 nm)/Al (200 nm) 순으로 적층하여 유기 전계 발광 소자를 제작하였다. 이때, 사용된 NPB 및 ADN의 구조는 다음과 같다.

[591]



NPB



ADN

[592]

[593] **[실시예 2 내지 82]**

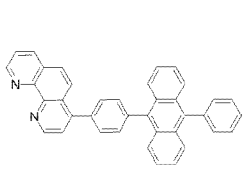
[594] 실시예 1에서 전자 수송층 물질로 사용된 화합물 1 대신 하기 표 1의 화합물을 각각 사용하는 것을 제외하고는, 상기 실시예 1과 동일하게 수행하여 실시예 2~82의 청색 유기 전계 발광 소자를 제작하였다.

[595]

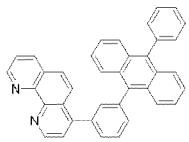
[596] **[비교예 1 내지 8]- 청색 유기 전계 발광 소자의 제작**

[597] 실시예 1에서 전자 수송층 물질로 사용된 화합물 1 대신 하기 화합물 A 내지 화합물 H를 각각 사용하는 것을 제외하고는, 상기 실시예 1과 동일하게 수행하여 비교예 1~8의 청색 유기 전계 발광 소자를 제작하였다.

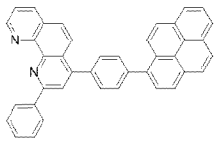
[598]



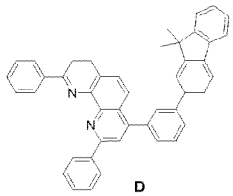
A



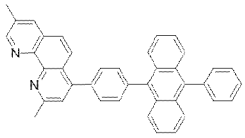
B



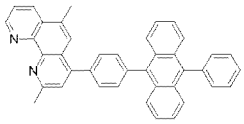
C



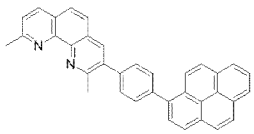
D



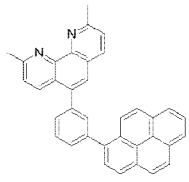
E



F



G



H

[599]

[600] **[평가예 1]**

[601] 실시예 1 내지 82 및 비교예 1 내지 8에서 각각 제작한 청색 유기 전계 발광 소자에 대하여, 전류밀도 10 mA/㎠에서의 구동전압, 전류효율, 발광파장을 측정하였고, 그 결과를 하기 표 1에 나타내었다.

[602] [표1]

샘플	전자 수송층	구동전압(V)	발광피크(nm)	전류효율(cd/A)
실시예 1	화합물 1	3.9	457	8.0
실시예 2	화합물 2	4.1	455	8.0
실시예 3	화합물 3	4.2	455	7.8
실시예 4	화합물 4	4.1	457	8.1
실시예 5	화합물 5	4.2	456	7.9
실시예 6	화합물 6	3.9	457	8.0
실시예 7	화합물 7	4.0	456	7.8
실시예 8	화합물 8	4.1	456	8.1
실시예 9	화합물 9	4.0	456	7.9
실시예 10	화합물 10	4.2	458	8.1
실시예 11	화합물 11	4.0	454	7.9
실시예 12	화합물 12	3.9	454	8.1
실시예 13	화합물 13	4.3	455	7.8
실시예 14	화합물 14	4.0	455	8.0
실시예 15	화합물 15	4.2	457	8.1
실시예 16	화합물 16	4.2	457	7.8
실시예 17	화합물 17	4.1	457	7.8
실시예 18	화합물 18	4.3	455	7.9
실시예 19	화합물 19	4.0	454	7.7
실시예 20	화합물 20	4.2	455	7.7
실시예 21	화합물 21	4.1	455	7.8
실시예 22	화합물 22	4.3	457	7.9
실시예 23	화합물 23	4.0	456	8.0
실시예 24	화합물 24	4.3	457	7.9
실시예 25	화합물 25	4.2	456	8.0
실시예 26	화합물 26	4.1	456	7.7
실시예 27	화합물 27	4.2	456	7.6
실시예 28	화합물 28	4.1	456	7.7
실시예 29	화합물 29	3.9	458	7.8

실시예 30	화합물 31	4.1	454	7.6
실시예 31	화합물 32	4.2	456	7.6
실시예 32	화합물 33	4.2	458	7.8
실시예 33	화합물 34	3.9	458	7.9
실시예 34	화합물 35	4.1	457	7.8
실시예 35	화합물 36	4.1	457	7.9
실시예 36	화합물 50	4.0	457	8.0
실시예 37	화합물 51	3.9	457	8.0
실시예 38	화합물 52	4.1	455	8.0
실시예 39	화합물 53	4.2	455	7.8
실시예 40	화합물 55	4.1	457	7.9
실시예 41	화합물 56	4.2	457	7.9
실시예 42	화합물 57	3.9	457	8.0
실시예 43	화합물 59	4.0	457	7.8
실시예 44	화합물 60	4.1	456	8.1
실시예 45	화합물 61	3.9	458	7.8
실시예 46	화합물 63	4.1	454	7.6
실시예 47	화합물 64	4.1	457	7.9
실시예 48	화합물 74	3.9	454	8.1
실시예 49	화합물 75	4.3	455	7.8
실시예 50	화합물 76	4.0	454	8.0
실시예 51	화합물 77	4.2	457	7.7
실시예 52	화합물 79	4.2	457	7.8
실시예 53	화합물 80	4.1	457	7.8
실시예 54	화합물 81	4.3	455	7.9
실시예 55	화합물 83	4.0	454	7.7
실시예 56	화합물 84	4.2	455	7.7
실시예 57	화합물 91	4.2	458	7.8
실시예 58	화합물 95	4.0	454	7.9
실시예 59	화합물 96	4.1	454	7.8
실시예 60	화합물 98	4.1	457	8.1

실시예 61	화합물 99	4.2	456	7.9
실시예 62	화합물 100	4.1	455	7.9
실시예 63	화합물 101	4.0	456	7.8
실시예 64	화합물 103	4.1	456	8.1
실시예 65	화합물 104	4.0	456	7.9
실시예 66	화합물 105	4.2	458	8.1
실시예 67	화합물 107	4.0	454	7.9
실시예 68	화합물 108	4.0	455	8.0
실시예 69	화합물 122	4.3	455	7.8
실시예 70	화합물 123	4.0	455	8.0
실시예 71	화합물 124	4.2	457	8.1
실시예 72	화합물 127	4.2	457	7.8
실시예 73	화합물 128	4.1	457	7.8
실시예 74	화합물 132	4.3	455	7.9
실시예 75	화합물 169	4.0	454	7.7
실시예 76	화합물 171	4.2	455	7.7
실시예 77	화합물 172	4.3	455	7.9
실시예 78	화합물 173	4.3	455	7.8
실시예 79	화합물 176	4.1	457	7.8
실시예 80	화합물 179	4.1	457	7.9
실시예 81	화합물 180	4.0	457	8.0
실시예 82	화합물 181	4.0	457	8.0
비교예 1	화합물 A	4.9	457	6.0
비교예 2	화합물 B	4.9	457	6.1
비교예 3	화합물 C	4.8	457	6.3
비교예 4	화합물 D	4.7	456	6.5
비교예 5	화합물 E	4.6	457	6.5
비교예 6	화합물 F	4.6	458	6.7
비교예 7	화합물 G	4.9	456	7.0
비교예 8	화합물 H	4.8	459	7.0

[603] 상기 표 1에 나타낸 바와 같이, 2번 및 9번에 알킬기가 치환된 페난트롤린 모이어티를 함유하는 본 발명의 화합물(화합물 1~화합물 181)을 전자 수송층에 사용한 청색 유기 전계 발광 소자(실시예 1 내지 82)는 비(非)치환된 페난트롤린 모이어티를 함유하는 화합물을 전자 수송층에 사용한 유기 전계 발광 소자(비교예 1~2) 및 아릴기가 치환된 페난트롤린 모이어티를 함유한 화합물을 전자 수송층에 사용한 유기 전계 발광 소자(비교예 3~4)에 비하여 구동전압 및 효율이 개선되었다. 또한, 실시예 1~82에 사용된 본 발명의 화합물은 소자 제작 시 아릴기가 치환된 페난트롤린 모이어티를 함유하는 화합물(화합물 C, D)에 비해 승화 온도가 낮아 소자의 열화 현상을 방지할 수 있었다.

[604] 이뿐만 아니라, 2번, 9번에 알킬기가 치환된 페난트롤린 모이어티를 함유하는 본 발명의 화합물은 다른 위치에 알킬기가 치환된 페난트롤린 모이어티를 함유하는 화합물보다 소자 특성을 더 향상시켰다. 한편, 2번, 8번에 알킬기가 치환된 페난트롤린 모이어티를 함유하는 화합물(즉, 화합물 E)를 이용한 비교예 5의 소자, 및 2번, 6번에 알킬기가 치환된 페난트롤린 모이어티를 함유하는 화합물(즉, 화합물 F)을 이용한 비교예 6의 소자는 비치환 혹은 아릴기로 치환된 페난트롤린 모이어티를 함유하는 화합물(즉, 화합물 A~D)을 이용한 비교예 1 내지 4의 소자에 비해 효율 특성이 소폭 개선되었으나, 페난트롤린이 가지는 고유의 활성 사이트(Active site)를 막지 못함으로써 소자의 특성이 크게 개선되지는 못하였다. 이로부터, 알킬기가 도입된 페난트롤린 유도체를 함유하는 화합물이더라도 활성 사이트(Active site)인 2번 및 9번 위치에 알킬기가 치환되어야 물질의 안정성이 유지될 수 있다는 것을 확인할 수 있었다.

[605] 또한, 2번 및 9번에 알킬기가 도입되면서, 4번 위치에 아릴기가 도입된 페난트롤린 모이어티를 함유하는 본 발명의 화합물을 이용한 실시예 1~82의 소자는 2번 및 9번에 알킬기가 도입되고, 4번 이외의 다른 위치(예, 3번 또는 5번 위치)에 아릴기가 도입된 페난트롤린을 함유하는 화합물을 이용한 비교예 7~8의 소자에 비해 구동 전압이 낮고, 발광 효율은 높았다. 이로부터 2번, 9번에 알킬기가 모두 치환된 페난트롤린 모이어티를 갖는 화합물이더라도, 아릴기가 도입되는 위치 역시 소자 특성에 큰 영향을 주었다.

[606]

[607] **[실시예 83] 유기 전계 발광 소자의 제작**

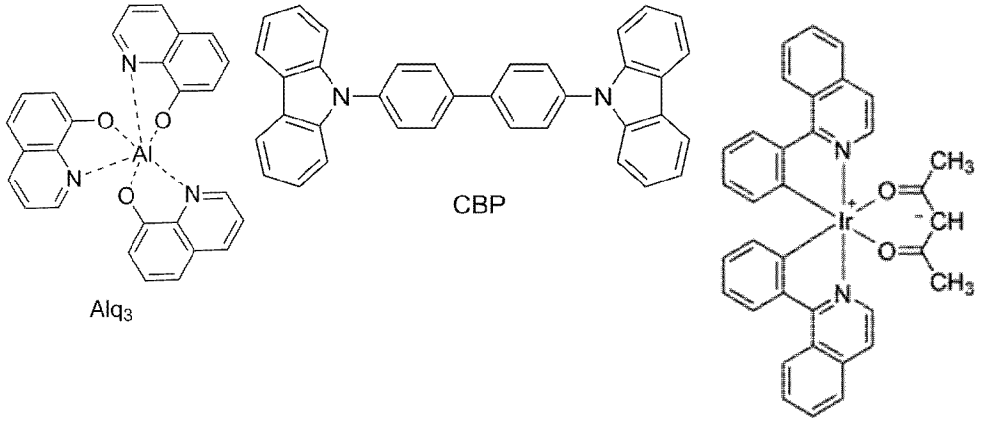
[608] 합성예 1에서 합성된 화합물 1을 통상적으로 알려진 방법으로 고순도 승화정제를 한 후, 하기와 같이 청색 유기 전계 발광 소자를 제작하였다.

[609] 먼저, ITO (Indium tin oxide)가 1500 Å 두께로 박막 코팅된 유리 기판을 증류수 초음파로 세척하였다. 증류수 세척이 끝나면, 이소프로필 알코올, 아세톤, 메탄올 등의 용제로 초음파 세척을 하고 건조시킨 후, UV OZONE 세정기(Power sonic 405, 화신테크)로 이송시킨 다음 UV를 이용하여 상기 기판을 5분간 세정하고 진공 증착기로 기판을 이송하였다.

[610] 상기와 같이 준비된 ITO 투명 전극 위에, DS-205 (㈜두산전자, 80 nm)/NPB (15

nm)/ADN + 5 % DS-405 (㈜두산전자, 30nm)/Alq3 (30 nm)/화합물 1(15 nm) /DS-505 (㈜두산전자, 15 nm) /NPB (15 nm)/CBP + 10 % $(piq)_2Ir(acac)$ (40 nm)/Alq3 (30 nm)/LiF(1 nm)/Al(200 nm) 순으로 적층하여 유기 전계 발광 소자를 제작하였다. 이때 사용된 NPB 및 ADN의 구조는 실시예 1에 기재된 바와 동일하고, Alq_3, CBP 및 $(piq)_2Ir(acac)$의 구조는 다음과 같다.

[611]



[612]

[613] **[실시예 84 내지 164]**

[614] 실시예 83에서 N형 전하생성층 물질로 사용된 화합물 1 대신 하기 표 2의 화합물을 각각 사용하는 것을 제외하고는, 상기 실시예 83과 동일하게 수행하여 실시예 84~164의 청색 유기 전계 발광 소자를 제작하였다.

[615]

[616] **[비교예 9 내지 16] 유기 전계 발광 소자의 제작**

[617] 실시예 83에서 N형 전하생성층 물질로 사용된 화합물 1 대신 화합물 A 내지 화합물 H를 사용하는 것을 제외하고는, 상기 실시예 83과 동일하게 수행하여 비교예 9~16의 유기 전계 발광 소자를 제작하였다. 이때, 사용된 화합물 A 내지 H는 비교예 1 내지 8에 기재된 바와 동일하기 때문에, 생략한다.

[618]

[619] **[평가예 2]**

[620] 실시예 83 내지 164 및 비교예 9 내지 16에서 각각 제작한 유기 전계 발광 소자에 대하여, 전류밀도 10 mA/㎠에서의 구동전압, 전류효율을 측정하였고, 그 결과를 하기 표 2에 나타내었다.

[621] [표2]

샘플	전자 수송층	구동전압(V)	전류효율(cd/A)
실시예 83	화합물 1	8.3	15.9
실시예 84	화합물 2	8.3	15.7
실시예 85	화합물 3	8.2	15.5
실시예 86	화합물 4	8.3	15.9
실시예 87	화합물 5	8.5	15.3
실시예 88	화합물 6	8.3	15.3
실시예 89	화합물 7	8.2	15.7
실시예 90	화합물 8	8.3	15.8
실시예 91	화합물 9	8.2	15.5
실시예 92	화합물 10	8.5	15.3
실시예 93	화합물 11	8.4	15.4
실시예 94	화합물 12	8.2	15.9
실시예 95	화합물 13	8.4	15.7
실시예 96	화합물 14	8.3	15.7
실시예 97	화합물 15	8.2	15.8
실시예 98	화합물 16	8.4	15.5
실시예 99	화합물 17	8.3	15.9
실시예 100	화합물 18	8.4	15.6
실시예 101	화합물 19	8.4	15.8
실시예 102	화합물 20	8.4	15.6
실시예 103	화합물 21	8.3	15.7
실시예 104	화합물 22	8.3	15.5
실시예 105	화합물 23	8.2	15.7
실시예 106	화합물 24	8.3	15.7
실시예 107	화합물 25	8.3	15.7
실시예 108	화합물 26	8.3	15.7
실시예 109	화합물 27	8.2	15.6
실시예 110	화합물 28	8.2	15.6
실시예 111	화합물 29	8.4	15.6

실시예 112	화합물 31	8.3	15.5
실시예 113	화합물 32	8.4	15.6
실시예 114	화합물 33	8.3	15.5
실시예 115	화합물 34	8.4	15.6
실시예 116	화합물 35	8.3	15.5
실시예 117	화합물 36	8.2	15.7
실시예 118	화합물 50	8.3	15.8
실시예 119	화합물 51	8.2	15.5
실시예 120	화합물 52	8.5	15.3
실시예 121	화합물 53	8.4	15.4
실시예 122	화합물 55	8.3	15.5
실시예 123	화합물 56	8.2	15.5
실시예 124	화합물 57	8.2	15.5
실시예 125	화합물 59	8.3	15.4
실시예 126	화합물 60	8.2	15.5
실시예 127	화합물 61	8.3	15.7
실시예 128	화합물 63	8.4	15.2
실시예 129	화합물 64	8.2	15.6
실시예 130	화합물 74	8.3	15.5
실시예 131	화합물 75	8.2	15.4
실시예 132	화합물 76	8.3	15.5
실시예 133	화합물 77	8.5	15.5
실시예 134	화합물 79	8.4	15.4
실시예 135	화합물 80	8.5	15.7
실시예 136	화합물 81	8.4	15.8
실시예 137	화합물 83	8.4	15.6
실시예 138	화합물 84	8.3	15.7
실시예 139	화합물 91	8.4	15.6
실시예 140	화합물 95	8.4	15.7
실시예 141	화합물 96	8.3	15.6
실시예 142	화합물 98	8.5	15.5

실시예 143	화합물 99	8.5	15.4
실시예 144	화합물 100	8.4	15.6
실시예 145	화합물 101	8.5	15.5
실시예 146	화합물 103	8.4	15.4
실시예 147	화합물 104	8.4	15.6
실시예 148	화합물 105	8.4	15.5
실시예 149	화합물 107	8.3	15.4
실시예 150	화합물 108	8.2	15.6
실시예 151	화합물 122	8.3	15.4
실시예 152	화합물 123	8.2	15.5
실시예 153	화합물 124	8.3	15.5
실시예 154	화합물 127	8.3	15.4
실시예 155	화합물 128	8.2	15.7
실시예 156	화합물 132	8.3	15.8
실시예 157	화합물 169	8.3	15.5
실시예 158	화합물 171	8.4	15.4
실시예 159	화합물 172	8.3	15.7
실시예 160	화합물 173	8.5	15.8
실시예 161	화합물 176	8.5	15.5
실시예 162	화합물 179	8.4	15.4
실시예 163	화합물 180	8.4	15.7
실시예 164	화합물 181	8.2	15.8
비교예 9	화합물 A	8.9	13.2
비교예 10	화합물 B	8.9	13.3
비교예 11	화합물 C	8.7	13.9
비교예 12	화합물 D	8.8	13.7
비교예 13	화합물 E	8.5	14.1
비교예 14	화합물 F	8.6	14.4
비교예 15	화합물 G	8.5	14.8
비교예 16	화합물 H	8.5	14.7

[622] 상기 표 2에 나타낸 바와 같이, 2번 및 9번에 알킬기가 치환된 페난트롤린 모이어티를 함유하는 화합물을 N형 전하 생성층에 사용한 청색 유기 전계 발광 소자(실시예 83~164)는 비치환된 페난트롤린 모이어티를 함유하는 화합물을 이용한 유기 전계 발광 소자(비교예 9~10) 및 아릴기가 치환된 페난트롤린 모이어티를 함유하는 화합물을 이용한 유기 전계 발광 소자(비교예 11~12)에 비하여 구동전압 및 효율이 개선되었다. 또한, 실시예 83~164의 소자에서 사용된 본 발명의 화합물은 소자 제작 시 아릴기가 치환된 페난트롤린 모이어티를 함유하는 화합물(화합물 C, D)에 비해 승화 온도가 낮아 소자의 열화 현상을 방지할 수 있었다.

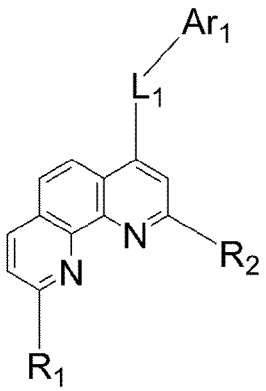
[623] 이뿐만 아니라, 2번, 9번에 알킬기가 치환된 페난트롤린 모이어티를 함유하는 본 발명의 화합물을 N형 전하 생성층 재료로 포함하는 실시예 83~164의 소자는 다른 위치에 알킬기가 치환된 페난트롤린 모이어티를 함유하는 화합물을 이용한 비교예 13~14의 소자에 비해 구동 전압 및 전류 효율 면에서 우수한 성능을 나타내는 것을 알 수 있었다. 한편, 2번, 8번에 알킬기가 치환된 페난트롤린 모이어티를 함유하는 화합물(즉, 화합물 E)를 이용한 비교예 13의 소자, 및 2번, 6번에 알킬기가 치환된 페난트롤린 모이어티를 함유하는 화합물(즉 화합물 F)을 이용한 비교예 14의 소자는 비치환 혹은 아릴기가 치환된 페난트롤린 모이어티를 함유하는 화합물을 이용하는 비교예 9~12의 소자에 비해 효율 특성이 소폭 개선되었으나, 페난트롤린이 가지는 고유의 활성 사이트(Active site)를 막지 못함으로써 소자 특성이 크게 개선되지는 못하였다. 이로부터, 알킬기가 도입된 페난트롤린 유도체를 함유하는 화합물이더라도, 활성 사이트(Active site)인 2번 및 9번 위치에 알킬기가 치환되어야 물질의 열적 안정성이 유지될 수 있다는 것을 확인할 수 있었다.

[624] 또한, 2번 및 9번에 알킬기가 도입되면서, 4번 위치에 아릴기가 도입된 페난트롤린 모이어티를 함유하는 본 발명의 화합물을 이용한 실시예 79~156의 소자는 2번 및 9번에 알킬기가 도입되고, 4번 이외의 다른 위치(예, 3번 또는 5번 위치)에 아릴기가 도입된 페난트롤린을 함유하는 화합물을 이용한 비교예 15~16의 소자에 비해 구동 전압이 낮고, 발광 효율은 높았다. 이로부터, 2번, 9번에 모두 알킬기가 치환된 페난트롤린 모이어티를 갖는 화합물이더라도, 아릴기가 도입되는 위치 역시 소자 특성에 큰 영향을 준다는 것을 확인할 수 있었다.

청구범위

[청구항 1] 하기 화학식 1로 표시되는 유기 화합물:

[화학식 1]



(상기 화학식 1에서,

R_1 및 R_2는 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소, 중수소(D), C_1~C_{60}의 알킬기, C_3~C_{60}의 시클로알킬기 및 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기로 이루어진 군에서 선택되고, 다만 R_1 및 R_2이 모두 수소인 경우를 제외하며,

L_1은 단일결합, C_6~C_{60}의 아릴렌기 및 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴렌기로 이루어진 군에서 선택되며,

Ar_1은 C_6~C_{60}의 아릴기, -P(=O)(R_3)(R_4), 및 -Si(R_5)(R_6)(R_7)로 이루어진 군에서 선택되며,

R_3 내지 R_7은 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로겐기, 히드록시기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기(amidino group), 히드라지노기(hydrazino group), 히드라조노기(hydrazono group), C_1~C_{60}의 알킬기, C_2~C_{60}의 알케닐기, C_2~C_{60}의 알키닐기, C_3~C_{60}의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 60개의 헤테로시클로알킬기, C_3~C_{60}의 시클로알케닐기, 핵원자수 3 내지 60개의 헤테로시클로알케닐기, C_6~C_{60}의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기, C_1~C_{60}의 알킬옥시기, C_6~C_{60}의 아릴옥시기, C_1~C_{60}의 알킬실릴기, C_6~C_{60}의 아릴실릴기, C_1~C_{40}의 알킬보론기, C_6~C_{60}의 아릴보론기, C_6~C_{60}의 아릴포스핀기, C_6~C_{60}의 아릴포스핀옥사이드기 및 C_6~C_{60}의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택되며,

상기 R_1 및 R_2의 알킬기, 시클로아킬기와 헤테로아릴기, 상기 L_1의 아릴렌기와 헤테로아릴렌기, 상기 Ar_1의 아릴기, 및 상기 R_3 내지 R_7의 히드라지노기, 히드라조노기, 알킬기, 알케닐기, 알키닐기, 시클로알킬기, 헤테로시클로알킬기, 시클로알케닐기, 헤테로시클로알케닐기, 아릴기, 헤테로아릴기, 알킬옥시기, 아릴옥시기, 알킬실릴기, 아릴실릴기, 알킬보론기, 아릴보론기, 아릴포스핀기, 아릴포스핀옥사이드기 및

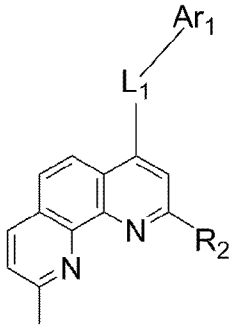
아릴아민기는 각각 독립적으로 중수소, 할로겐기, 히드록시기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기(amidino group), 히드라지노기(hydrazino group), 히드라조노기(hydrazono group), C_1~C_{60}의 알킬기, C_2~C_{60}의 알케닐기, C_2~C_{60}의 알키닐기, C_3~C_{60}의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 60개의 헤테로시클로알킬기, C_3~C_{60}의 시클로알케닐기, 핵원자수 3 내지 60개의 헤테로시클로알케닐기, C_6~C_{60}의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기, C_1~C_{60}의 알킬옥시기, C_6~C_{60}의 아릴옥시기, C_1~C_{60}의 알킬실릴기, C_6~C_{60}의 아릴실릴기, C_1~C_{40}의 알킬보론기, C_6~C_{60}의 아릴보론기, C_6~C_{60}의 아릴포스핀기, C_6~C_{60}의 아릴포스핀옥사이드기 및 C_6~C_{60}의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상의 치환기로 치환 또는 비치환되며, 이때 상기 치환기가 복수인 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이함).

[청구항 2] 제1항에 있어서,
상기 R_1 및 R_2 중 적어도 하나는 C_1~C_{60}의 알킬기 또는 C_3~C_{60}의 시클로알킬기 인, 유기 화합물.

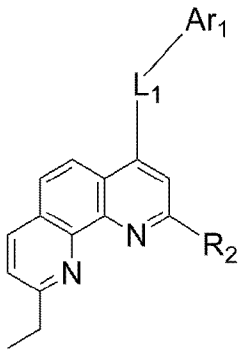
[청구항 3] 제1항에 있어서,
상기 R_1 및 R_2는 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소, C_1~C_{20}의알킬기, 및 C_3~C_{20}의 알킬기로 이루어진 군에서 선택되고,
다만 상기 R_1 및 R_2 중 적어도 하나는 C_1~C_{20}의 알킬기 또는 C_3~C_{20}의 시클로알킬기인, 유기 화합물.

[청구항 4] 제1항에 있어서,
상기 화학식 1로 표시되는 유기 화합물은 하기 화학식 2 내지 6 중 어느 하나로 표시되는 것인, 유기 화합물:

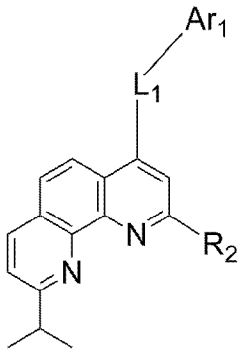
[화학식 2]



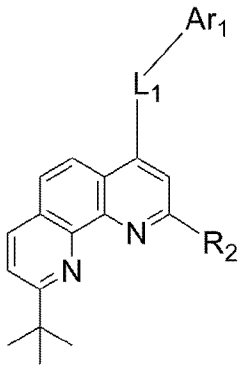
[화학식 3]



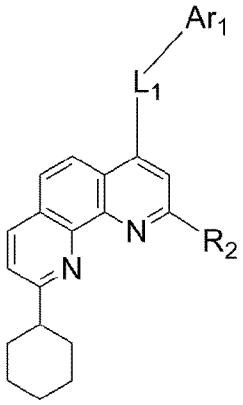
[화학식 4]



[화학식 5]



[화학식 6]



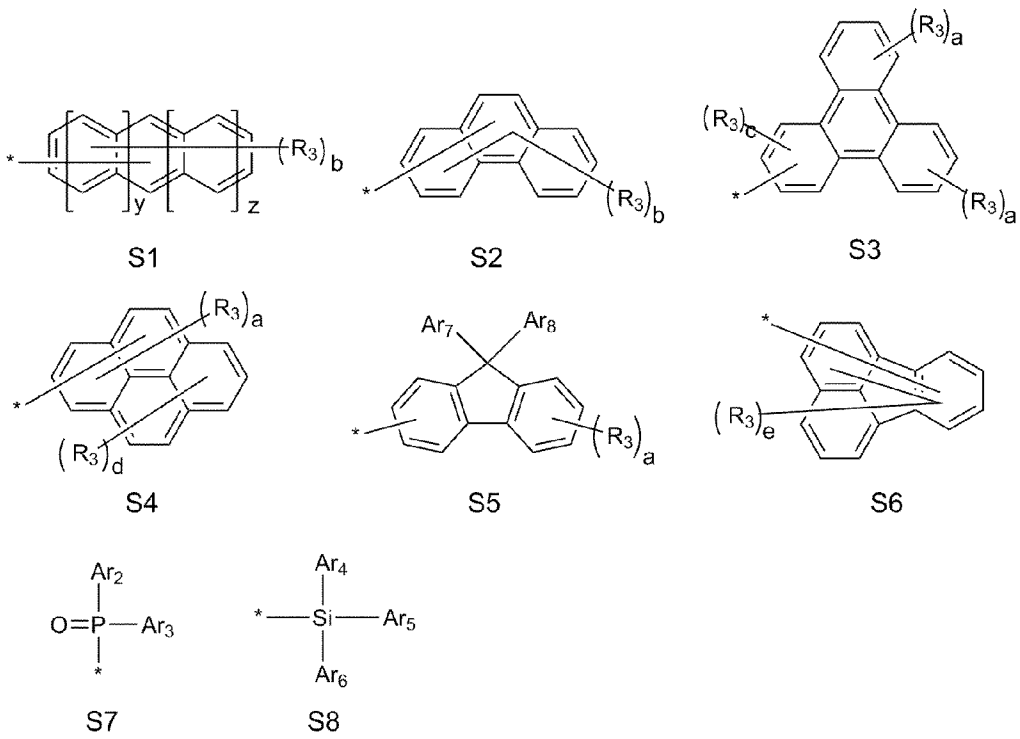
(상기 화학식 2 내지 6에서,

L_1 및 Ar_1은 제1항에 정의된 바와 같고,

R_2는 C_1~C_6의 알킬기 또는 C_3~C_6의 시클로알킬기임).

[청구항 5] 제1항에 있어서,

상기 Ar_1은 하기 화학식 S1 내지 S8로 이루어진 군에서 선택된 어느 하나로 표시되는 치환체인, 유기 화합물:



(상기 화학식 S1~S8에서,

a는 0 내지 4의 정수이고,

b는 0 내지 9의 정수이며,

c는 0 내지 3의 정수이고,

d는 0 내지 5의 정수이며,

e는 0 내지 9의 정수이고,

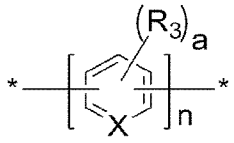
복수의 R_3는 서로 동일하거나 상이하고,

R_3는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로겐기, 히드록시기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기(amidino group), 히드라지노기(hydrazinogroup), 히드라조노기(hydrazono group), C_1~C_{60}의 알킬기, C_2~C_{60}의 알케닐기, C_2~C_{60}의 알키닐기, C_3~C_{60}의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 60개의 헤테로시클로알킬기, C_3~C_{60}의 시클로알케닐기, 핵원자수 3 내지 60개의 헤테로시클로알케닐기,C_6~C_{60}의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기, C_1~C_{60}의 알킬옥시기, C_6~C_{60}의 아릴옥시기, C_1~C_{60}의 알킬실릴기, C_6~C_{60}의 아릴실릴기, C_1~C_{40}의 알킬보론기, C_6~C_{60}의 아릴보론기, C_6~C_{60}의 아릴포스핀기, C_6~C_{60}의 아릴포스핀옥사이드기 및 C_6~C_{60}의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택되며,

y 및 z은 각각 0 또는 1이고,
Ar_2 내지 Ar_8은 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로겐기, 히드록시기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기(amidino group), 히드라지노기(hydrazino group), 히드라조노기(hydrazono group), C_1~C_{60}의 알킬기, C_2~C_{60}의 알케닐기, C_2~C_{60}의 알키닐기, C_3~C_{60}의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 60개의 헤테로시클로알킬기, C_3~C_{60}의 시클로알케닐기, 핵원자수 3 내지 60개의 헤테로시클로알케닐기,C_6~C_{60}의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기, C_1~C_{60}의 알킬옥시기, C_6~C_{60}의 아릴옥시기, C_1~C_{60}의 알킬실릴기, C_6~C_{60}의 아릴실릴기, C_1~C_{40}의 알킬보론기, C_6~C_{60}의 아릴보론기, C_6~C_{60}의 아릴포스핀기, C_6~C_{60}의 아릴포스핀옥사이드기 및 C_6~C_{60}의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택되거나, 또는 인접한 기와 축합하여 축합 고리를 형성할 수 있고,
상기 Ar_2 내지 Ar_8의 히드라지노기, 히드라조노기, 알킬기, 알케닐기, 알키닐기, 시클로알킬기, 헤테로시클로알킬기, 시클로알케닐기, 헤테로시클로알케닐기, 아릴기, 헤테로아릴기, 알킬옥시기, 아릴옥시기, 알킬실릴기, 아릴실릴기, 알킬보론기, 아릴보론기, 아릴포스핀기, 아릴포스핀옥사이드기 및 아릴아민기는각각 독립적으로 중수소, 할로겐기, 히드록시기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기(amidino group), 히드라지노기(hydrazino group), 히드라조노기(hydrazono group), C_1~C_{60}의 알킬기, C_2~C_{60}의 알케닐기, C_2~C_{60}의 알키닐기, C_3~C_{60}의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 60개의 헤테로시클로알킬기, C_3~C_{60}의 시클로알케닐기, 핵원자수 3 내지 60개의 헤테로시클로알케닐기,C_6~C_{60}의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기, C_1~C_{60}의 알킬옥시기, C_6~C_{60}의 아릴옥시기, C_1~C_{60}의 알킬실릴기, C_6~C_{60}의 아릴실릴기, C_1~C_{40}의 알킬보론기, C_6~C_{60}의 아릴보론기, C_6~C_{60}의 아릴포스핀기, C_6~C_{60}의 아릴포스핀옥사이드기 및 C_6~C_{60}의 아릴아민기로1종 이상의 치환기로 치환 또는 비치환되며, 이때 상기 치환기가 복수인 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이함).

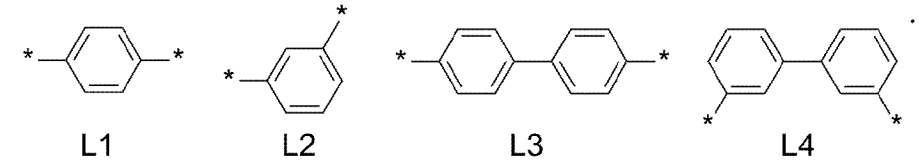
[청구항 6] 제1항에 있어서,
상기 L_1은 C_6~C_{60}의 아릴렌기 또는 핵원자수 5 내지 60개의 N-함유 헤테로아릴렌기인, 유기 화합물.

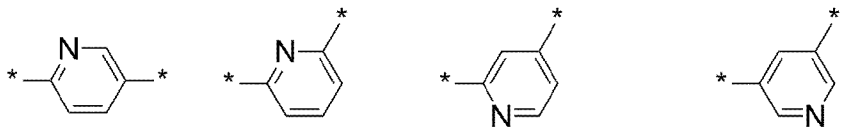
[청구항 7] 제1항에 있어서,
상기 L_1은 하기 화학식 L로 표시되는 링커기인, 유기 화합물:
[화학식 L]



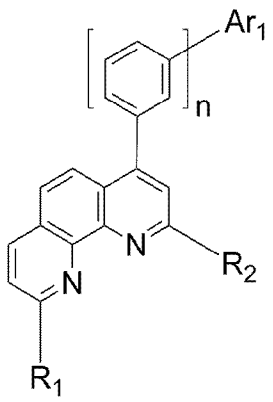
(상기 화학식 L에서,
n은 0 내지 3의 정수이고,
a는 0 내지 4의 정수이며,
X는 C 또는 N이며,
R_3가 복수인 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이하고,
R_3은 수소, 중수소, 할로겐기, 히드록시기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기(amidino group), 히드라지노기(hydrazino group), 히드라조노기(hydrazono group), C_1~C_{60}의 알킬기, C_2~C_{60}의 알케닐기, C_2~C_{60}의 알키닐기, C_3~C_{60}의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 60개의 헤테로시클로알킬기, C_3~C_{60}의 시클로알케닐기, 핵원자수 3 내지 60개의 헤테로시클로알케닐기, C_6~C_{60}의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기, C_1~C_{60}의 알킬옥시기, C_6~C_{60}의 아릴옥시기, C_1~C_{60}의 알킬실릴기, C_6~C_{60}의 아릴실릴기, C_1~C_{40}의 알킬보론기, C_6~C_{60}의 아릴보론기, C_6~C_{60}의 아릴포스핀기, C_6~C_{60}의 아릴포스핀옥사이드기 및 C_6~C_{60}의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택됨).

[청구항 8] 제1항에 있어서,
상기 L_1은 하기 링커기 L1 내지 L8 중 어느 하나인 것인, 유기 화합물:

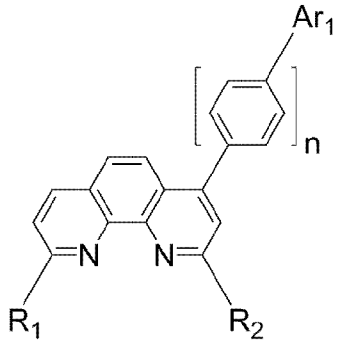




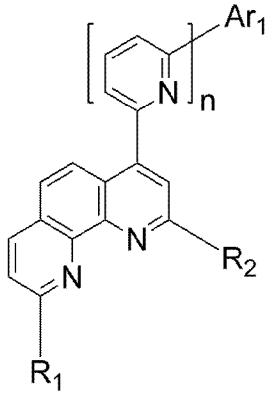
[청구항 9] 제1항에 있어서,
상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 하기 화학식 7 내지 12 중 어느 하나로 표시되는 것인, 화합물:
[화학식 7]



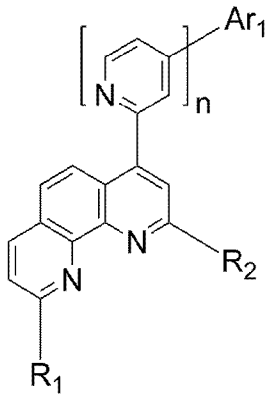
[화학식 8]



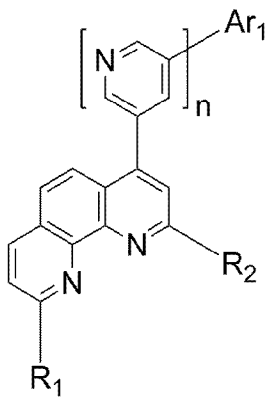
[화학식 9]



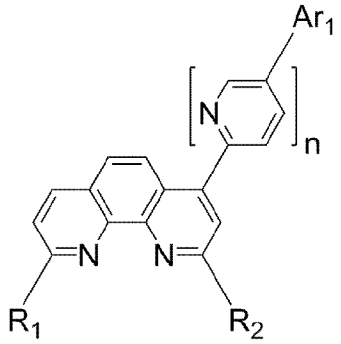
[화학식 10]



[화학식 11]



[화학식 12]

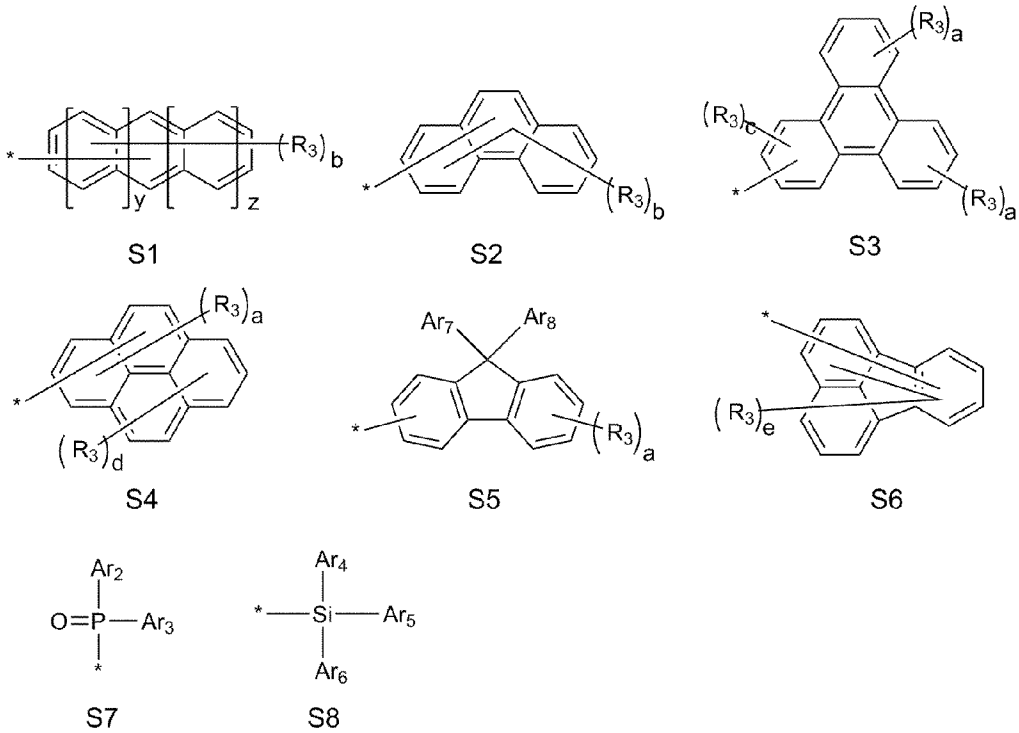


(상기 화학식 7 내지 12에서,

R_1 및 R_2는 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 C_1~C_6의 알킬기 또는 C_3~C_6의 시클로알킬기이고,

n은 0 또는 1이며,

Ar_1은 하기 치환체 S1 내지 S8로 이루어진 군에서 선택된 치환체이며,

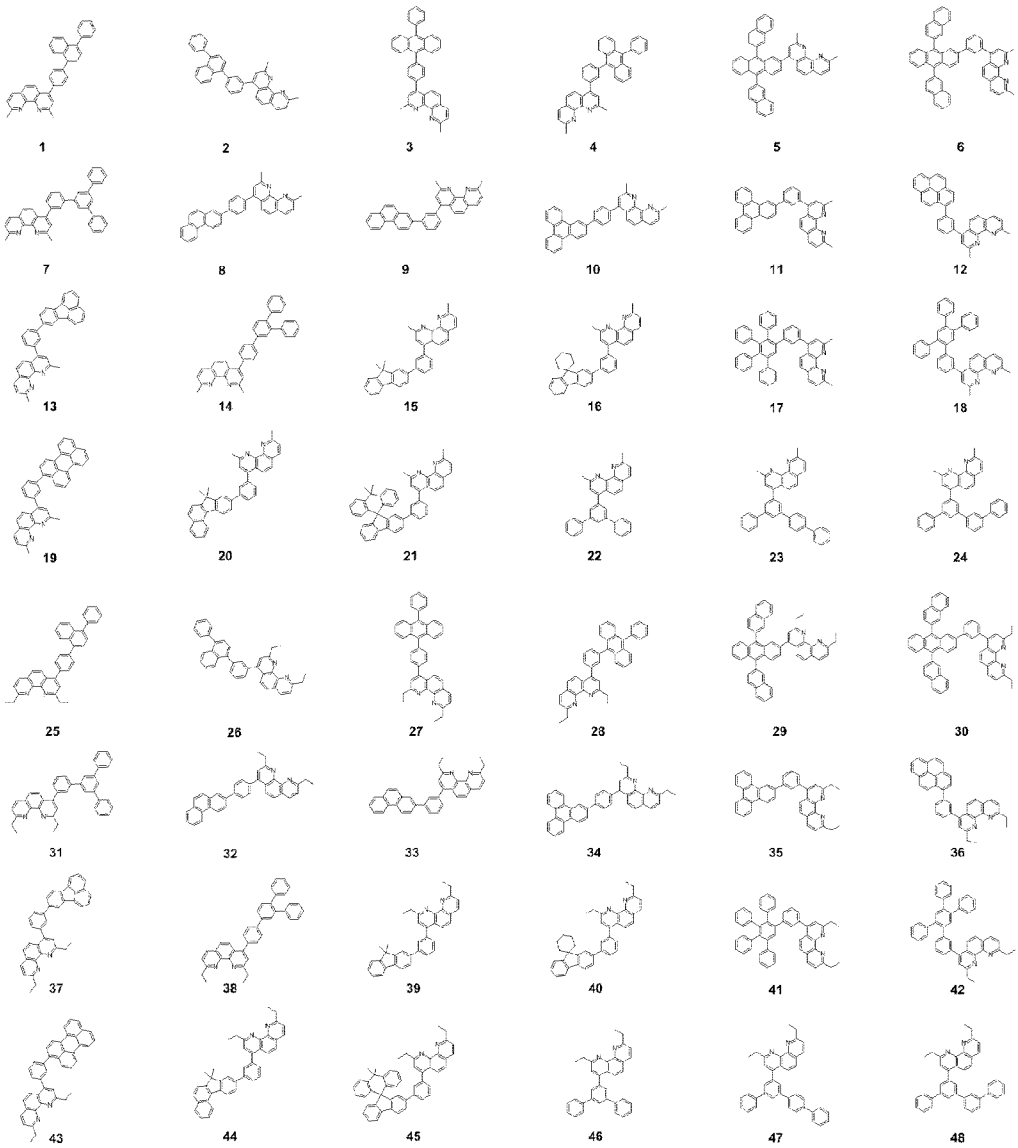


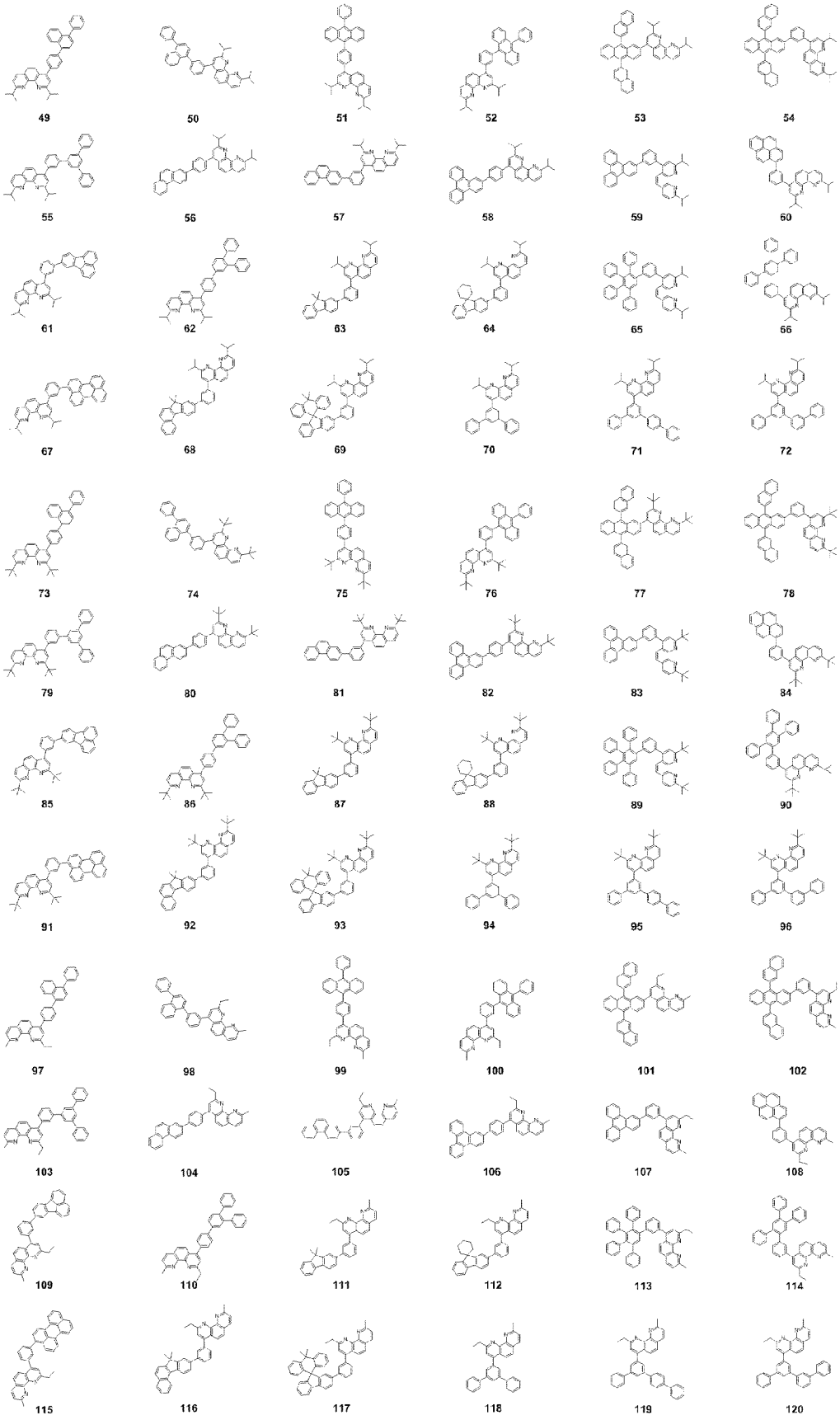
상기 화학식 S1~S8에서,
a는 0 내지 4의 정수이고,
b는 0 내지 9의 정수이며,
c는 0 내지 3의 정수이고,
d는 0 내지 5의 정수이며,
e는 0 내지 9의 정수이고,
복수의 R_3는 서로 동일하거나 상이하고,
R_3는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로겐기, 히드록시기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기(amidino group), 히드라지노기(hydrazinogroup), 히드라조노기(hydrazono group), C_1~C_{60}의 알킬기, C_2~C_{60}의 알케닐기, C_2~C_{60}의 알키닐기, C_3~C_{60}의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 60개의 헤테로시클로알킬기, C_3~C_{60}의 시클로알케닐기, 핵원자수 3 내지 60개의 헤테로시클로알케닐기,C_6~C_{60}의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기, C_1~C_{60}의 알킬옥시기, C_6~C_{60}의 아릴옥시기, C_1~C_{60}의 알킬실릴기, C_6~C_{60}의 아릴실릴기, C_1~C_{40}의 알킬보론기, C_6~C_{60}의 아릴보론기, C_6~C_{60}의 아릴포스핀기, C_6~C_{60}의 아릴포스핀옥사이드기 및 C_6~C_{60}의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택되며,
y 및 z은 각각 0 또는 1이고,
Ar_2 내지 Ar_8은 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로겐기, 히드록시기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기(amidino group), 히드라지노기(hydrazino group), 히드라조노기(hydrazono group), C_1~C_{60}의 알킬기, C_2~C_{60}의 알케닐기, C_2~C_{60}의 알키닐기, C_3~C_{60}의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 60개의 헤테로시클로알킬기, C_3~C_{60}의 시클로알케닐기, 핵원자수 3 내지 60개의 헤테로시클로알케닐기,C_6~C_{60}의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기, C_1~C_{60}의 알킬옥시기, C_6~C_{60}의 아릴옥시기, C_1~C_{60}의 알킬실릴기, C_6~C_{60}의 아릴실릴기, C_1~C_{40}의 알킬보론기, C_6~C_{60}의 아릴보론기, C_6~C_{60}의 아릴포스핀기, C_6~C_{60}의 아릴포스핀옥사이드기 및 C_6~C_{60}의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택되거나, 또는 인접한 기와 축합하여 축합 고리를 형성할 수 있고,
상기 Ar_2 내지 Ar_8의 히드라지노기, 히드라조노기, 알킬기, 알케닐기, 알키닐기, 시클로알킬기, 헤테로시클로알킬기, 시클로알케닐기, 헤테로시클로알케닐기, 아릴기, 헤테로아릴기, 알킬옥시기, 아릴옥시기, 알킬실릴기, 아릴실릴기, 알킬보론기, 아릴보론기, 아릴포스핀기, 아릴포스핀옥사이드기 및 아릴아민기는각각 독립적으로 중수소, 할로겐기, 히드록시기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기(amidino group), 히드라지노기(hydrazino group),

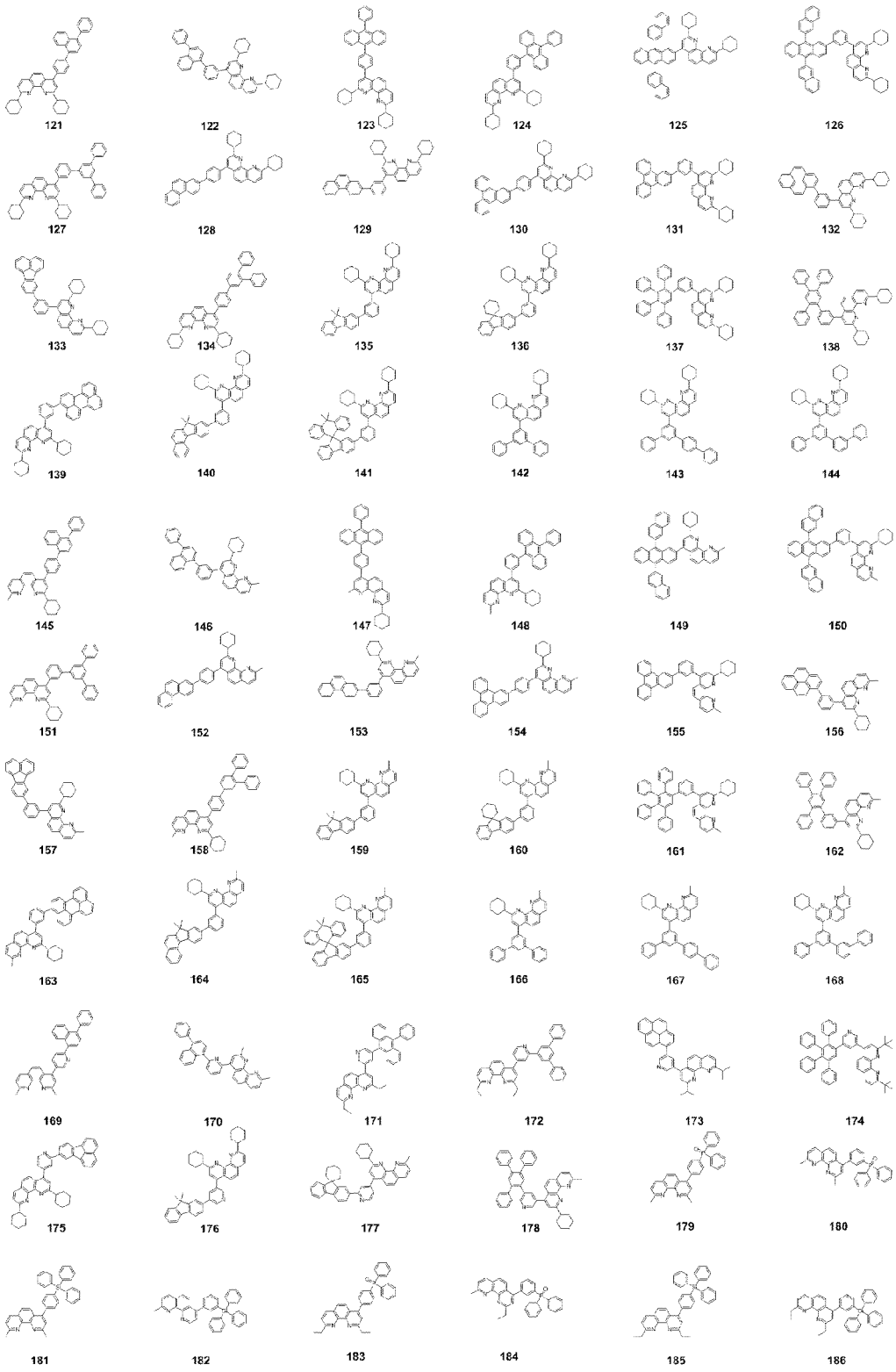
히드라조노기(hydrazono group), C_1~C_{60}의 알킬기, C_2~C_{60}의 알케닐기, C_2~C_{60}의 알키닐기, C_3~C_{60}의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 60개의 헤테로시클로알킬기, C_3~C_{60}의 시클로알케닐기, 핵원자수 3 내지 60개의 헤테로시클로알케닐기,C_6~C_{60}의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기, C_1~C_{60}의 알킬옥시기, C_6~C_{60}의 아릴옥시기, C_1~C_{60}의 알킬실릴기, C_6~C_{60}의 아릴실릴기, C_1~C_{40}의 알킬보론기, C_6~C_{60}의 아릴보론기, C_6~C_{60}의 아릴포스핀기, C_6~C_{60}의 아릴포스핀옥사이드기 및 C_6~C_{60}의 아릴아민기로1종 이상의 치환기로 치환 또는 비치환되며, 이때 상기 치환기가 복수인 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이함).

[청구항 10] 제1항에 있어서,

상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 하기 화합물 1 내지 화합물 186으로 이루어진 군에서 선택된 것인, 화합물:




49
50
51
52
53
54
55
56
57
58
59
60
61
62
63
64
65
66
67
68
69
70
71
72
73
74
75
76
77
78
79
80
81
82
83
84
85
86
87
88
89
90
91
92
93
94
95
96
97
98
99
100
101
102
103
104
105
106
107
108
109
110
111
112
113
114
115
116
117
118
119
120



.

[청구항 11] 애노드; 캐소드; 상기 애노드와 캐소드 사이에 개재(介在)된 1층 이상의 유기물층을 포함하며,
상기 1층 이상의 유기물층 중 적어도 하나는 제1항 내지 제10항 중 어느 한 항에 기재된 유기 화합물을 포함하는 유기 전계 발광 소자.

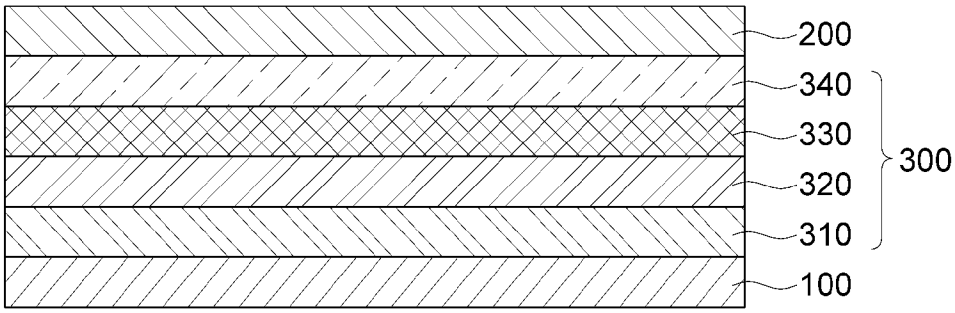
[청구항 12] 제11항에 있어서,
상기 유기 화합물을 포함하는 유기물층은 전자 수송층인, 유기 전계 발광 소자.

[청구항 13] 서로 이격 배향된 애노드와 캐소드;
상기 애노드와 캐소드 사이에 개재된 복수의 발광 유닛; 및
서로 인접한 발광 유닛 사이에 개재된 N형 전하 생성층 및 P형 전하 생성층
을 포함하고,
상기 각 발광 유닛은 정공 수송층, 발광층 및 전자 수송층을 포함하고,
상기 N형 전하 생성층은 제1항 내지 제10항 중 어느 한 항에 기재된 유기 화합물을 포함하는 유기 전계 발광 소자.

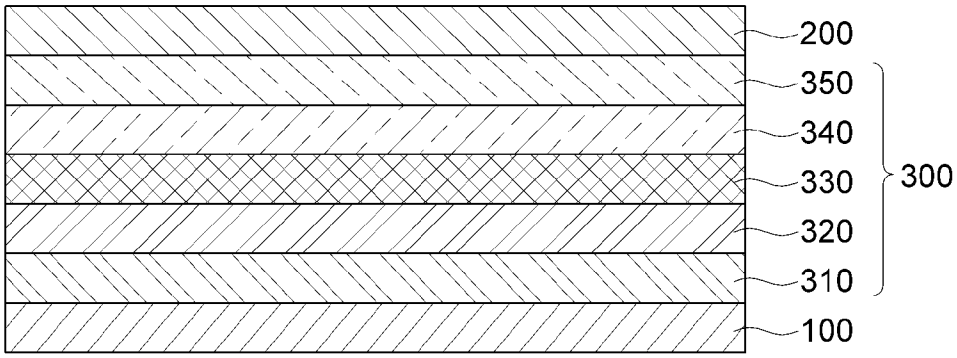
[청구항 14] 제13항에 있어서,
상기 N형 전하 생성층은 전자 수송 특성을 갖는 하나의 호스트(host)를 포함하고,
상기 하나의 호스트는 제1항 내지 제10항 중 어느 한 항에 기재된 유기 화합물인, 유기 전계 발광 소자.

[청구항 15] 제14항에 있어서,
상기 N형 전하 생성층은 N형 도펀트를 더 포함하는 것인, 유기 전계 발광 소자.

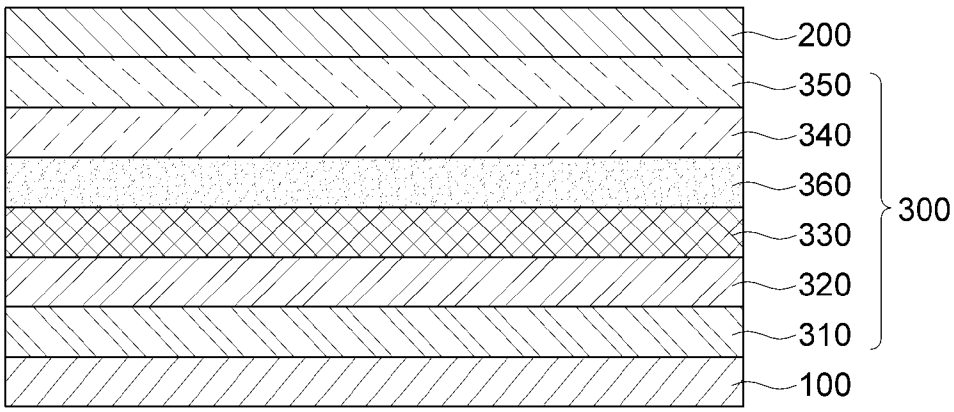
[도1]


200
340
330
320
310
300
100

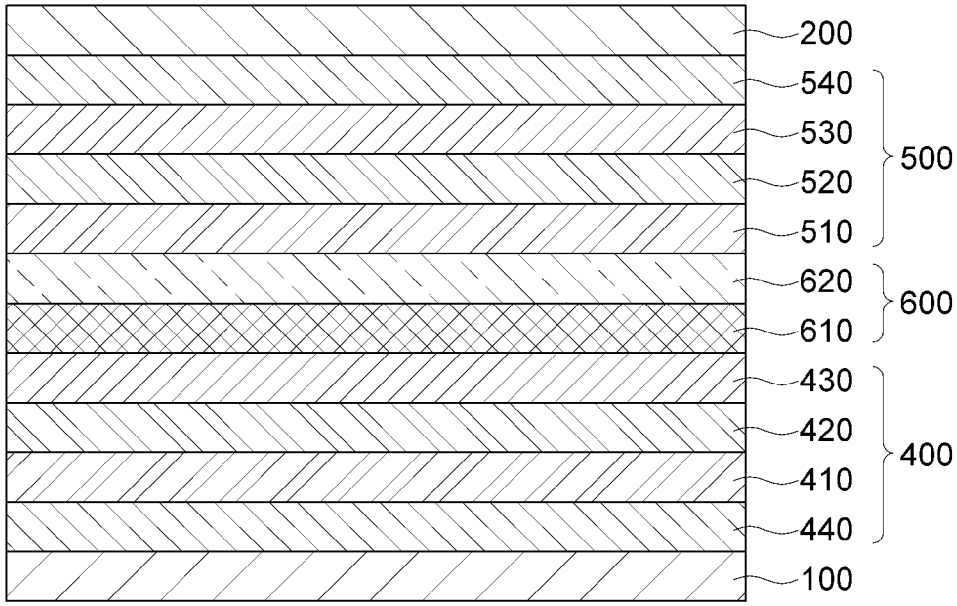
[도2]


200
350
340
330
320
310
300
100

[도3]


200
350
340
360
330
320
310
300
100

[도4]



INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.
PCT/KR2021/008429

A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER

C07D 471/04(2006.01)i; **C07F 7/08**(2006.01)i; **C07F 9/30**(2006.01)i; **H01L 51/00**(2006.01)i; **H01L 51/50**(2006.01)i

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

B. FIELDS SEARCHED

Minimum documentation searched (classification system followed by classification symbols)

C07D 471/04(2006.01); C07D 401/14(2006.01); C07H 21/04(2006.01); C09K 11/06(2006.01); C12Q 1/68(2006.01); H01L 51/00(2006.01); H01L 51/50(2006.01); H01L 51/54(2006.01); H05B 33/14(2006.01)

Documentation searched other than minimum documentation to the extent that such documents are included in the fields searched

Korean utility models and applications for utility models: IPC as above
Japanese utility models and applications for utility models: IPC as above

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

eKOMPASS (KIPO internal), STN (Registry, Caplus), Google & keywords: 페난트롤린(phenanthroline), N형 전하 생성층(N-type charge generation layer), 유기발광소자(organic electroluminescence device, OLED)

C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
X	JP 2004-071380 A (KONICA MINOLTA HOLDINGS INC.) 04 March 2004 (2004-03-04) See claim 1; paragraphs [0069] and [0070]; and page 11, compound 17.	1-12
Y		13-15
Y	KR 10-2020-0037654 A (LG DISPLAY CO., LTD.) 09 April 2020 (2020-04-09) See claims 1-9; and paragraphs [0004] and [0021].	13-15
X	US 2006-0115676 A1 (IGAWA, S. et al.) 01 June 2006 (2006-06-01) See claims 1-8; and page 3, compound H-3.	1-4,6-8,10-12
X	US 5827653 A (SAMMES, P. G. et al.) 27 October 1998 (1998-10-27) See column 31, compound 13.	1-5,7,9
X	COATES, J. et al. Enhancement of luminescence of europium(III)ions in water by use of synergistic chelation. Part 1.1 : 1 and 2 : 1 complexes. J. Chem. Soc. Perkin Trans. 2, 1996, no. 7, pp. 1275-1282. See page 1276, compounds 23 and 24.	1-5,7,9

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

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

Date of the actual completion of the international search	Date of mailing of the international search report
27 October 2021	**27 October 2021**

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

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.
PCT/KR2021/008429

C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
PX	KR 10-2021-0069785 A (SAMSUNG DISPLAY CO., LTD. et al.) 14 June 2021 (2021-06-14) See claims 1-20.	1-12

INTERNATIONAL SEARCH REPORT
Information on patent family members

International application No.
PCT/KR2021/008429

Patent document cited in search report			Publication date (day/month/year)	Patent family member(s)			Publication date (day/month/year)
JP	2004-071380	A	04 March 2004	JP	4103491	B2	18 June 2008
KR	10-2020-0037654	A	09 April 2020	CN	110970570	A	07 April 2020
				EP	3633752	A1	08 April 2020
				US	2020-0106025	A1	02 April 2020
US	2006-0115676	A1	01 June 2006	JP	2006-151866	A	15 June 2006
				US	7517596	B2	14 April 2009
US	5827653	A	27 October 1998	EP	0720659	A1	10 July 1996
				GB	2283095	A	26 April 1995
				JP	09-503660	A	15 April 1997
				WO	95-08642	A1	30 March 1995
KR	10-2021-0069785	A	14 June 2021	CN	112898294	A	04 June 2021
				EP	3831831	A1	09 June 2021
				US	2021-0167296	A1	03 June 2021

국 제 조 사 보 고 서

국제출원번호
PCT/KR2021/008429

A. 발명이 속하는 기술분류(국제특허분류(IPC))

C07D 471/04(2006.01)i; **C07F 7/08**(2006.01)i; **C07F 9/30**(2006.01)i; **H01L 51/00**(2006.01)i; **H01L 51/50**(2006.01)i

B. 조사된 분야

조사된 최소문헌(국제특허분류를 기재)

C07D 471/04(2006.01); C07D 401/14(2006.01); C07H 21/04(2006.01); C09K 11/06(2006.01); C12Q 1/68(2006.01); H01L 51/00(2006.01); H01L 51/50(2006.01); H01L 51/54(2006.01); H05B 33/14(2006.01)

조사된 기술분야에 속하는 최소문헌 이외의 문헌

한국등록실용신안공보 및 한국공개실용신안공보: 조사된 최소문헌란에 기재된 IPC
일본등록실용신안공보 및 일본공개실용신안공보: 조사된 최소문헌란에 기재된 IPC

국제조사에 이용된 전산 데이터베이스(데이터베이스의 명칭 및 검색어(해당하는 경우))

eKOMPASS(특허청 내부 검색시스템), STN(Registry, Caplus), Google & 키워드: 페난트롤린(phenanthroline), N형 전하 생성층(N-type charge generation layer), 유기발광소자(organic electroluminescence device, OLED)

C. 관련 문헌

카테고리*	인용문헌명 및 관련 구절(해당하는 경우)의 기재	관련 청구항
X Y	JP 2004-071380 A (KONICA MINOLTA HOLDINGS INC.) 2004.03.04 청구항 1; 단락 [0069], [0070]; 페이지 11, 화합물 17	1-12 13-15
Y	KR 10-2020-0037654 A (엘지디스플레이 주식회사) 2020.04.09 청구항 1-9; 단락 [0004], [0021]	13-15
X	US 2006-0115676 A1 (IGAWA, S. 등) 2006.06.01 청구항 1-8; 페이지 3, 화합물 H-3	1-4,6-8,10-12
X	US 5827653 A (SAMMES, P. G. 등) 1998.10.27 컬럼 31, 화합물 13	1-5,7,9
X	COATES, J. 등, "Enhancement of luminescence of europium(III)ions in water by use of synergistic chelation. Part 1.1 : 1 and 2 : 1 complexes", J. Chem. Soc. Perkin Trans. 2, 1996, 7호,페이지 1275-1282 페이지 1276, 화합물 23, 24	1-5,7,9

☑ 추가 문헌이 C(계속)에 기재되어 있습니다.

☑ 대응특허에 관한 별지를 참조하십시오.

* 인용된 문헌의 특별 카테고리:

"A" 특별히 관련이 없는 것으로 보이는 일반적인 기술수준을 정의한 문헌
"D" 본 국제출원에서 출원인이 인용한 문헌
"E" 국제출원일보다 빠른 출원일 또는 우선일을 가지나 국제출원일 이후에 공개된 선출원 또는 특허 문헌
"L" 우선권 주장에 의문을 제기하는 문헌 또는 다른 인용문헌의 공개일 또는 다른 특별한 이유(이유를 명시)를 밝히기 위하여 인용된 문헌
"O" 구두 개시, 사용, 전시 또는 기타 수단을 언급하고 있는 문헌
"P" 우선일 이후에 공개되었으나 국제출원일 이전에 공개된 문헌
"T" 국제출원일 또는 우선일 후에 공개된 문헌으로, 출원과 상충하지 않으며 발명의 기초가 되는 원리나 이론을 이해하기 위해 인용된 문헌
"X" 특별한 관련이 있는 문헌. 해당 문헌 하나만으로 청구된 발명의 신규성 또는 진보성이 없는 것으로 본다.
"Y" 특별한 관련이 있는 문헌. 해당 문헌이 하나 이상의 다른 문헌과 조합하는 경우로 그 조합이 당업자에게 자명한 경우 청구된 발명은 진보성이 없는 것으로 본다.
"&" 동일한 대응특허문헌에 속하는 문헌

국제조사의 실제 완료일	국제조사보고서 발송일
2021년10월27일(27.10.2021)	**2021년10월27일(27.10.2021)**

ISA/KR의 명칭 및 우편주소	심사관
대한민국 특허청 **(35208) 대전광역시 서구 청사로 189, 4동 (둔산동, 정부대전청사)**	정다원
팩스 번호 **+82-42-481-8578**	전화번호 **+82-42-481-5373**

국 제 조 사 보 고 서

국제출원번호
PCT/KR2021/008429

C. 관련 문헌

카테고리*	인용문헌명 및 관련 구절(해당하는 경우)의 기재	관련 청구항
PX	KR 10-2021-0069785 A (삼성디스플레이 주식회사 등) 2021.06.14 청구항 1-20	1-12

국 제 조 사 보 고 서
대응특허에 관한 정보

국제출원번호
PCT/KR2021/008429

국제조사보고서에서 인용된 특허문헌	공개일	대응특허문헌	공개일
JP 2004-071380 A	2004/03/04	JP 4103491 B2	2008/06/18
KR 10-2020-0037654 A	2020/04/09	CN 110970570 A	2020/04/07
		EP 3633752 A1	2020/04/08
		US 2020-0106025 A1	2020/04/02
US 2006-0115676 A1	2006/06/01	JP 2006-151866 A	2006/06/15
		US 7517596 B2	2009/04/14
US 5827653 A	1998/10/27	EP 0720659 A1	1996/07/10
		GB 2283095 A	1995/04/26
		JP 09-503660 A	1997/04/15
		WO 95-08642 A1	1995/03/30
KR 10-2021-0069785 A	2021/06/14	CN 112898294 A	2021/06/04
		EP 3831831 A1	2021/06/09
		US 2021-0167296 A1	2021/06/03