(12) 특허협력조약에 의하여 공개된 국제출원

(19) 세계지식재산권기구
국제사무국

(43) 국제공개일
2014 년 6 월 12 일 (12.06.2014)

WIPO | PCT

(10) 국제공개번호
WO 2014/088284 A1

(51) 국제특허분류:
C07D 209/82 (2006.01) *H01L 51/50* (2006.01)
C09K 11/06 (2006.01)

(21) 국제출원번호: PCT/KR2013/011088

(22) 국제출원일: 2013 년 12 월 3 일 (03.12.2013)

(25) 출원언어: 한국어

(26) 공개언어: 한국어

(30) 우선권정보:
10-2012-0141364 2012 년 12 월 6 일 (06.12.2012) KR
10-2013-0133883 2013 년 11 월 6 일 (06.11.2013) KR

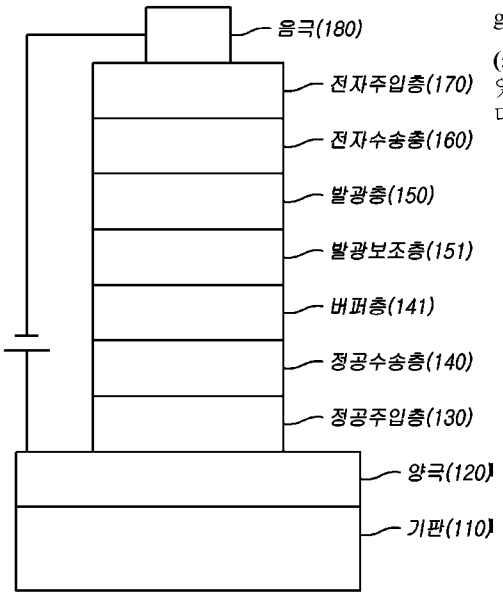
(71) 출원인: **덕산하이메탈(주) (DUKSAN HIGH METAL CO., LTD.)** [KR/KR]; 683-804 울산시 북구 연암동 597-3, Ulsan (KR).

(72) 발명자: **이범성 (LEE, Bumsung)**; 331-220 충청남도 천안시 서북구 백석동 백석마을 아이파크 112 동 2101 호, Chungcheongnam-do (KR). **최연희 (CHOI, Yeonhee)**; 331-836 충청남도 천안시 서북구 성거읍 천흥리 438 번지 신비텔 9 동 405 호, Chungcheongnam-do (KR). **김대성 (KIM, Daesung)**; 449-709 경기도 용인시 처인구 김량장동 현대아파트 101-601, Gyeonggi-do (KR). **문성윤 (MUN, Soungyun)**; 448-170 경기도 용인시 수지구 풍덕천동 664 번지 초입마을 동아아파트 111 동 810 호, Gyeonggi-do (KR). **박정철 (PARK, Jungcheol)**; 331-816 충청남도 천안시 서북구 직산읍 삼은리 395 번지 직산 코아루아파트 105 동 706 호, Chungcheongnam-do (KR). **소기호 (SO, Kiho)**; 331-836 충청남도 천안시 서북구 성거읍 천흥리 438-5 번지 신비텔 11 동 202 호, Chungcheongnam-do (KR). **윤진호 (YUN, Jinho)**; 331-836 충청남도 천안시 서북구 성거읍 천흥리 438-8 번지 신비텔 12 동 201 호, Chungcheongnam-do (KR). **오대환 (OH, Daehwan)**; 331-836 충청남

[다음 쪽 계속]

(54) **Title**: COMPOUND FOR ORGANIC ELECTRONIC ELEMENT, ORGANIC ELECTRONIC ELEMENT USING SAME, AND ELECTRONIC DEVICE THEREWITH

(54) **발명의 명칭** : 유기전기 소자용 화합물, 이를 이용한 유기전기소자 및 그 전자 장치



110 ... Substrate
120 ... Anode
130 ... Hole injection layer
140 ... Hole transport layer
141 ... Buffer layer
150 ... Light-emitting layer
151 ... Auxiliary light-emitting layer
160 ... Electron transport layer
170 ... Electron injection layer
180 ... Cathode

(57) **Abstract**: Provided are a novel compound allowing the luminous efficiency, stability, and service life of an element to be improved, an organic electronic element using the compound, and an electronic device comprising the organic electronic element.

(57) **요약서**: 본 발명은 소자의 발광효율, 안정성 및 수명을 향상시킬 수 있는 신규 화합물 및 이를 이용한 유기전기소자, 그 전자 장치를 제공한다.

WO 2014/088284 A1

도 천안시 서북구 성거읍 천흥리 438-8 번지 신비텔 13 동 202 호, Chungcheongnam-do (KR). **여승원 (YEO, Seungwon)**; 300-382 대전시 동구 판암 1 동 신한미리내아파트 103 동 1205 호, Daejeon (KR).

(74) **대리인**: **특허법인다울 (DAWOOL PATENT AND LAW FIRM)** 등; 135-913 서울시 강남구 봉은사로 224 혜전빌딩 5 층, Seoul (KR).

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

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

공개:

— 국제조사보고서와 함께 (조약 제 21 조(3))

명세서

발명의 명칭: 유기전기 소자용 화합물, 이를 이용한 유기전기소자 및 그 전자 장치

기술분야

[1] 본 발명은 유기전기소자용 화합물, 이를 이용한 유기전기소자 및 그 전자 장치에 관한 것이다.

배경기술

[2] 일반적으로 유기 발광 현상이란 유기 물질을 이용하여 전기에너지를 빛 에너지로 전환시켜주는 현상을 말한다. 유기 발광 현상을 이용하는 유기전기소자는 통상 양극과 음극 및 이 사이에 유기물층을 포함하는 구조를 가진다. 여기서 유기물 층은 유기전기소자의 효율과 안정성을 높이기 위하여 각기 다른 물질로 구성된 다층의 구조로 이루어진 경우가 많으며, 예컨대 정공주입층, 정공수송층, 발광층, 전자수송층 및 전자주입층 등으로 이루어질 수 있다.

[3] 유기전기소자에서 유기물층으로 사용되는 재료는 기능에 따라, 발광 재료와 전하수송 재료, 예컨대 정공주입 재료, 정공수송 재료, 전자수송 재료, 전자주입 재료 등으로 분류될 수 있다.

[4] 유기 전기 발광소자에 있어 가장 문제시되는 것은 수명과 효율인데, 디스플레이가 대면적화되면서 이러한 효율이나 수명 문제는 반드시 해결해야되는 상황이다.

[5] 효율과 수명, 구동전압 등은 서로 연관이 있으며, 효율이 증가되면 상대적으로 구동전압이 떨어지고, 구동전압이 떨어지면서 구동시 발생되는 주울열(Joule heating)에 의한 유기물질의 결정화가 적어져 결과적으로 수명이 높아지는 경향을 나타낸다.

[6] 하지만 상기 유기물층을 단순히 개선한다고 하여 효율을 극대화시킬 수는 없다. 왜냐하면 각 유기물층 간의 에너지 준위 및 T1 값, 물질의 고유특성(이동도, 계면특성 등) 등이 최적의 조합을 이루었을 때 긴 수명과 높은 효율을 동시에 달성할 수 있기 때문이다.

[7] 또한, 최근 유기 전기 발광소자에 있어 정공수송층에서의 발광 문제를 해결하기 위해서는 반드시 정공수송층과 발광층 사이에 발광보조층이 존재하여야 하며, 각각의 발광층(R, G, B)에 따른 서로 다른 발광 보조층의 개발이 필요한 시점이다.

[8] 일반적으로 전자수송층에서 발광층으로 전자(electron)가 전달되고 정공(hole)이 정공수송층에서 발광층으로 전달되어 재조합(recombination)에 의해 엑시톤(exciton)이 생성된다.

[9] 하지만 정공수송층에 사용되는 물질의 경우 낮은 HOMO 값을 가져야 하기

때문에 대부분 낮은 T1 값을 가지며, 이로 인해 발광층에서 생성된 엑시톤(exciton)이 정공수송층으로 넘어가게 되어 결과적으로 발광층 내 전하 불균형(charge unbalance)을 초래하여 정공수송층 내 또는 정공수송층 계면에서 발광하게 되어 유기전기소자의 색순도 저하, 효율 및 수명 감소 현상이 나타나게 된다.

[10] 또한, 정공 이동도(hole mobility)가 빠른 물질을 사용하여 구동전압을 낮출 수 있으나 정공 이동도(hole mobility)가 전자 이동도(electron mobility) 보다 빨라 발광층 내 전하 불균형(charge unbalance)을 초래하여 유기전기소자의 색순도 및 효율이 저하되고 수명이 짧아지는 문제점이 발생하게 된다.

[11] 따라서 높은 T1 값을 가지며, 정공 수송층 HOMO 에너지 준위와 발광층의 HOMO 에너지 준위 사이의 HOMO 준위를 갖는 발광보조층이 개발이 절실히 요구된다.

[12] 한편, 유기전기소자의 수명단축 원인 중 하나인 양극전극(ITO)으로부터 금속 산화물이 유기층으로 침투확산되는 것을 지연시키면서, 소자 구동시 발생되는 주울열(Joule heating)에 대해서도 안정된 특성, 즉 높은 유리 전이 온도를 갖는 정공 주입층 재료에 대한 개발이 필요하다. 정공수송층 재료의 낮은 유리전이 온도는 소자 구동시, 박막 표면의 균일도를 저하시키는 특성이 있는바, 이는 소자수명에 큰 영향을 미치는 것으로 보고되고 있다. 또한, OLED 소자는 주로 증착 방법에 의해 형성되는데, 증착시 오랫동안 견딜 수 있는 재료, 즉 내열특성이 강한 재료 개발이 필요한 실정이다.

[13] 즉, 유기전기소자가 갖는 우수한 특징들을 충분히 발휘하기 위해서는 소자 내 유기물층을 이루는 물질, 예컨대 정공주입 물질, 정공수송 물질, 발광 물질, 전자수송 물질, 전자주입 물질, 발광보조층 물질 등이 안정하고 효율적인 재료에 의하여 뒷받침되는 것이 선행되어야 하나, 아직까지 안정되고 효율적인 유기전기소자용 유기물층 재료의 개발이 충분히 이루어지지 않은 상태이다. 따라서, 새로운 재료의 개발이 계속 요구되고 있으며, 특히 발광보조층과 정공수송층의 재료에 대한 개발이 절실히 요구되고 있다.

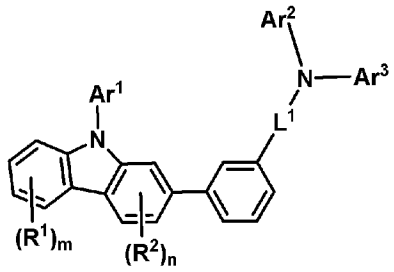
발명의 상세한 설명

기술적 과제

[14] 본 발명은 OLED 정공수송 물질로 널리 사용되고 있는 카바졸 코어에 비선형(non-linear)의 연결기(아민기와 결합시 꺾인 구조)를 사용하고, 또한 카바졸의 질소(N)에 벌키(bulky)한 치환기를 도입하여, 높은 T1값과 넓은 밴드 갭(wide band gab)을 가지며 전하 균형(charge balance)이 우수하여, 소자의 높은 발광효율, 낮은 구동전압, 고내열성, 색순도 및 수명을 향상시킬 수 있는 화합물, 이를 이용한 유기전기소자 및 그 전자장치를 제공하는 것을 목적으로 한다.

과제 해결 수단

[15] 일 측면에서, 본 발명은 하기 화학식으로 표시되는 화합물을 제공한다.

[16] 

[17] 다른 측면에서, 본 발명은 상기 화학식으로 표시되는 화합물을 이용한 유기전기소자 및 그 전자장치를 제공한다.

발명의 효과

[18] 본 발명에 따른 화합물을 이용함으로써 소자의 높은 발광효율, 낮은 구동전압, 고내열성을 달성할 수 있고, 소자의 색순도 및 수명을 크게 향상시킬 수 있다.

도면의 간단한 설명

[19] 도 1은 본 발명에 따른 유기전기발광소자의 예시도이다.

발명의 실시를 위한 형태

[20] 이하, 본 발명의 실시예를 첨부된 도면을 참조하여 상세하게 설명한다.

[21] 각 도면의 구성요소들에 참조부호를 부가함에 있어서, 동일한 구성요소들에 대해서는 비록 다른 도면상에 표시되더라도 가능한 한 동일한 부호를 가지도록 하고 있음에 유의해야 한다. 또한, 본 발명을 설명함에 있어, 관련된 공지 구성 또는 기능에 대한 구체적인 설명이 본 발명의 요지를 흐릴 수 있다고 판단되는 경우에는 그 상세한 설명은 생략한다.

[22] 또한, 본 발명의 구성 요소를 설명하는 데 있어서, 제 1, 제 2, A, B, (a),(b) 등의 용어를 사용할 수 있다. 이러한 용어는 그 구성 요소를 다른 구성 요소와 구별하기 위한 것일 뿐, 그 용어에 의해 해당 구성 요소의 본질이나 차례 또는 순서 등이 한정되지 않는다. 어떤 구성 요소가 다른 구성요소에 "연결", "결합" 또는 "접속"된다고 기재된 경우, 그 구성 요소는 그 다른 구성요소에 직접적으로 연결되거나 또는 접속될 수 있지만, 각 구성 요소 사이에 또 다른 구성 요소가 "연결", "결합" 또는 "접속"될 수도 있다고 이해되어야 할 것이다.

[23] 본 명세서 및 첨부된 청구의 범위에서 사용된 바와 같이, 달리 언급하지 않는 한, 하기 용어의 의미는 하기와 같다.

[24] 본 명세서에서 사용된 용어 "할로" 또는 "할로겐"은 다른 설명이 없는 한 불소(F), 브롬(Br), 염소(Cl) 또는 요오드(I)이다.

[25] 본 발명에 사용된 용어 "알킬" 또는 "알킬기"는 다른 설명이 없는 한 1 내지 60의 탄소수의 단일결합을 가지며, 직쇄 알킬기, 분지쇄 알킬기, 사이클로알킬(지환족)기, 알킬-치환된 사이클로알킬기, 사이클로알킬-치환된 알킬기를 비롯한 포화 지방족 작용기의 라디칼을 의미한다.

[26] 본 발명에 사용된 용어 "할로알킬기" 또는 "할로겐알킬기"는 다른 설명이 없는 한 할로겐으로 치환된 알킬기를 의미한다.

[27] 본 발명에 사용된 용어 "헤테로알킬기"는 알킬기를 구성하는 탄소 원자 중 하나 이상이 헤테로원자로 대체된 것을 의미한다.

[28] 본 발명에 사용된 용어 "알켄일기" 또는 "알킨일기"는 다른 설명이 없는 한 각각 2 내지 60의 탄소수의 이중결합 또는 삼중결합을 가지며, 직쇄형 또는 측쇄형 사슬기를 포함하며, 여기에 제한되는 것은 아니다.

[29] 본 발명에 사용된 용어 "시클로알킬"은 다른 설명이 없는 한 3 내지 60의 탄소수를 갖는 고리를 형성하는 알킬을 의미하며, 여기에 제한되는 것은 아니다.

[30] 본 발명에 사용된 용어 "알콕실기", "알콕시기", 또는 "알킬옥시기"는 산소 라디칼이 부착된 알킬기를 의미하며, 다른 설명이 없는 한 1 내지 60의 탄소수를 가지며, 여기에 제한되는 것은 아니다.

[31] 본 발명에 사용된 용어 "알켄옥실기", "알켄옥시기", "알켄일옥실기", 또는 "알켄일옥시기"는 산소 라디칼이 부착된 알켄일기를 의미하며, 다른 설명이 없는 한 2 내지 60의 탄소수를 가지며, 여기에 제한되는 것은 아니다.

[32] 본 발명에 사용된 용어 "아릴옥실기" 또는 "아릴옥시기"는 산소 라디칼이 부착된 아릴기를 의미하며, 다른 설명이 없는 한 6 내지 60의 탄소수를 가지며, 여기에 제한되는 것은 아니다.

[33] 본 발명에 사용된 용어 "아릴기" 및 "아릴렌기"는 다른 설명이 없는 한 각각 6 내지 60의 탄소수를 가지며, 이에 제한되는 것은 아니다. 본 발명에서 아릴기 또는 아릴렌기는 단일 고리 또는 다중 고리의 방향족을 의미하며, 이웃한 치환기가 결합 또는 반응에 참여하여 형성된 방향족 고리를 포함한다. 예컨대, 아릴기는 페닐기, 비페닐기, 플루오렌기, 스파이로플루오렌기일 수 있다.

[34] 접두사 "아릴" 또는 "아르"는 아릴기로 치환된 라디칼을 의미한다. 예를 들어 아릴알킬기는 아릴기로 치환된 알킬기이며, 아릴알켄일기는 아릴기로 치환된 알켄일기이며, 아릴기로 치환된 라디칼은 본 명세서에서 설명한 탄소수를 가진다.

[35] 또한 접두사가 연속으로 명명되는 경우 먼저 기재된 순서대로 치환기가 나열되는 것을 의미한다. 예를 들어, 아릴알콕시기의 경우 아릴기로 치환된 알콕시기를 의미하며, 알콕실카르보닐기의 경우 알콕실기로 치환된 카르보닐기를 의미하며, 또한 아릴카르보닐알켄일기의 경우 아릴카르보닐기로 치환된 알켄일기를 의미하며 여기서 아릴카르보닐기는 아릴기로 치환된 카르보닐기이다.

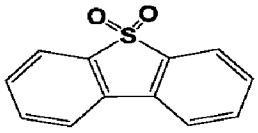
[36] 본 명세서에서 사용된 용어 "헤테로알킬"은 다른 설명이 없는 한 하나 이상의 헤테로원자를 포함하는 알킬을 의미한다. 본 발명에 사용된 용어 "헤테로아릴기" 또는 "헤테로아릴렌기"는 다른 설명이 없는 한 각각 하나 이상의 헤테로원자를 포함하는 탄소수 2 내지 60의 아릴기 또는 아릴렌기를 의미하며, 여기에 제한되는 것은 아니며, 단일 고리 및 다중 고리 중 적어도 하나를 포함하며, 이웃한 작용기기가 결합하여 형성될 수도 있다.

[37] 본 발명에 사용된 용어 "헤테로고리기"는 다른 설명이 없는 한 하나 이상의

헤테로원자를 포함하고, 2 내지 60의 탄소수를 가지며, 단일 고리 및 다중 고리 중 적어도 하나를 포함하며, 헤테로지방족 고리 및 헤테로방향족 고리를 포함한다. 이웃한 작용기가 결합하여 형성될 수도 있다.

[38] 본 명세서에서 사용된 용어 "헤테로원자"는 다른 설명이 없는 한 N, O, S, P 또는 Si를 나타낸다.

[39] 또한 "헤테로고리기"는, 고리를 형성하는 탄소 대신 SO_2를 포함하는 고리도 포함할 수 있다. 예컨대, "헤테로고리기"는 다음 화합물을 포함한다.

[40] 

[41] 다른 설명이 없는 한, 본 발명에 사용된 용어 "지방족"은 탄소수 1 내지 60의 지방족 탄화수소를 의미하며, "지방족고리"는 탄소수 3 내지 60의 지방족 탄화수소 고리를 의미한다.

[42] 다른 설명이 없는 한, 본 발명에 사용된 용어 "고리"는 탄소수 3 내지 60의 지방족고리 또는 탄소수 6 내지 60의 방향족고리 또는 탄소수 2 내지 60의 헤테로고리 또는 이들의 조합으로 이루어진 융합 고리를 말하며, 포화 또는 불포화 고리를 포함한다.

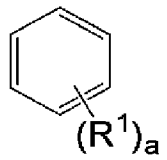
[43] 전술한 헤테로화합물 이외의 그 밖의 다른 헤테로화합물 또는 헤테로라디칼은 하나 이상의 헤테로원자를 포함하며, 여기에 제한되는 것은 아니다.

[44] 다른 설명이 없는 한, 본 발명에 사용된 용어 "카르보닐"이란 -COR'로 표시되는 것이며, 여기서 R'은 수소, 탄소수 1 내지 20 의 알킬기, 탄소수 6 내지 30 의 아릴기, 탄소수 3 내지 30의 사이클로알킬기, 탄소수 2 내지 20의 알켄일기, 탄소수 2 내지 20의 알킨일기, 또는 이들의 조합인 것이다.

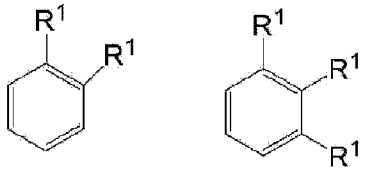
[45] 다른 설명이 없는 한, 본 발명에 사용된 용어 "에테르"란 -R-O-R'로 표시되는 것이며, 여기서 R 또는 R'은 각각 서로 독립적으로 수소, 탄소수 1 내지 20의 알킬기, 탄소수 6 내지 30의 아릴기, 탄소수 3 내지 30의 사이클로알킬기, 탄소수 2 내지 20의 알켄일기, 탄소수 2 내지 20의 알킨일기, 또는 이들의 조합인 것이다.

[46] 또한 명시적인 설명이 없는 한, 본 발명에서 사용된 용어 "치환 또는 비치환된"에서 "치환"은 중수소, 할로겐, 아미노기, 니트릴기, 니트로기, C_1~C_{20}의 알킬기, C_1~C_{20}의 알콕실기, C_1~C_{20}의 알킬아민기, C_1~C_{20}의 알킬티오펜기, C_6~C_{20}의 아릴티오펜기, C_2~C_{20}의 알켄일기, C_2~C_{20}의 알킨일기, C_3~C_{20}의 시클로알킬기, C_6~C_{20}의 아릴기, 중수소로 치환된 C_6~C_{20}의 아릴기, C_8~C_{20}의 아릴알켄일기, 실란기, 붕소기, 게르마늄기, 및 C_2~C_{20}의 헤테로고리기로 이루어진 군으로부터 선택되는 1개 이상의 치환기로 치환됨을 의미하며, 이들 치환기에 제한되는 것은 아니다.

[47] 또한 명시적인 설명이 없는 한, 본 발명에서 사용되는 화학식은 하기 화학식의 지수 정의에 의한 치환기 정의와 동일하게 적용된다.

[48] 

[49] 여기서, a가 0의 정수인 경우 치환기 R^1은 부존재하며, a가 1의 정수인 경우 하나의 치환기 R^1은 벤젠 고리를 형성하는 탄소 중 어느 하나의 탄소에 결합하며, a가 2 또는 3의 정수인 경우 각각 다음과 같이 결합하며 이때 R^1은 서로 동일하거나 다를 수 있으며, a가 4 내지 6의 정수인 경우 이와 유사한 방식으로 벤젠 고리의 탄소에 결합하며, 한편 벤젠 고리를 형성하는 탄소에 결합된 수소의 표시는 생략한다.

[50] 

(a=2) (a=3)

[51] 도 1은 본 발명에 일 실시예에 따른 유기전기소자에 대한 예시도이다.

[52] 도 1을 참조하면, 본 발명에 따른 유기전기소자(100)는 기판(110) 상에 형성된 제 1전극(120), 제 2전극(180) 및 제 1전극(110)과 제 2전극(180) 사이에 본 발명에 따른 화합물을 포함하는 유기물층을 구비한다. 이때, 제 1전극(120)은 애노드(양극)이고, 제 2전극(180)은 캐소드(음극)일 수 있으며, 인버트형의 경우에는 제 1전극이 캐소드이고 제 2전극이 애노드일 수 있다.

[53] 유기물층은 제 1전극(120) 상에 순차적으로 정공주입층(130), 정공수송층(140), 발광층(150), 전자수송층(160) 및 전자주입층(170)을 포함할 수 있다. 이때, 발광층(150)을 제외한 나머지 층들이 형성되지 않을 수 있다. 정공저지층, 전자저지층, 발광보조층(151), 버퍼층(141) 등을 더 포함할 수도 있고, 전자수송층(160) 등이 정공저지층의 역할을 할 수도 있을 것이다.

[54] 또한, 미도시하였지만, 본 발명에 따른 유기전기소자는 제 1전극과 제 2전극 중 적어도 일면 중 상기 유기물층과 반대되는 일면에 형성된 보호층 또는 광효율 개선층(Capping layer)을 더 포함할 수 있다.

[55] 상기 유기물층에 적용되는 본 발명에 따른 화합물은 정공주입층(130), 정공수송층(140), 전자수송층(160), 전자주입층(170), 발광층(150)의 호스트 또는 도펀트 또는 광효율 개선층의 재료로 사용될 수 있을 것이다. 바람직하게는, 본 발명의 화합물은 발광층(150), 정공수송층(140) 및/또는 발광보조층(151)으로 사용될 수 있을 것이다.

[56] 한편, 동일한 코어일지라도 어느 위치에 어느 치환기를 결합시키냐에 따라 밴드갭(band gap), 전기적 특성, 계면 특성 등이 달라질 수 있으므로, 코어의 선택 및 이에 결합된 서브(sub)-치환체의 조합도 아주 중요하며, 특히 각 유기물층

간의 에너지 준위 및 T1 값, 물질의 고유특성(이동도, 계면특성 등) 등이 최적의 조합을 이루었을 때 긴 수명과 높은 효율을 동시에 달성할 수 있다.

[57] 이미 설명한 것과 같이, 최근 유기 전기 발광소자에 있어 정공수송층에서의 발광 문제를 해결하기 위해서는 정공수송층과 발광층 사이에 발광보조층이 형성하는 것이 바람직하며, 각각의 발광층(R, G, B)에 따른 서로 다른 발광 보조층의 개발이 필요한 시점이다. 한편, 발광보조층의 경우 정공수송층 및 발광층(호스트)과의 상호관계를 파악해야하므로 유사한 코어를 사용하더라도 사용되는 유기물층이 달라지면 그 특징을 유추하기는 매우 어려울 것이다.

[58] 따라서, 본 발명에서는 화학식 1로 표시되는 화합물을 사용하여 발광층 또는 발광보조층을 형성함으로써 각 유기물층 간의 에너지 레벨(level) 및 T1 값, 물질의 고유특성(mobility, 계면특성 등) 등을 최적화하여 유기전기소자의 수명 및 효율을 동시에 향상시킬 수 있다.

[59] 본 발명의 일 실시예에 따른 유기전기발광소자는 PVD(physical vapor deposition) 방법을 이용하여 제조될 수 있다. 예컨대, 기판 상에 금속 또는 전도성을 가지는 금속 산화물 또는 이들의 합금을 증착시켜 양극(120)을 형성하고, 그 위에 정공주입층(130), 정공수송층(140), 발광층(150), 전자수송층(160) 및 전자주입층(170)을 포함하는 유기물층을 형성한 후, 그 위에 음극(180)으로 사용할 수 있는 물질을 증착시킴으로써 제조될 수 있다.

[60] 또한, 유기물층은 다양한 고분자 소재를 사용하여 증착법이 아닌 용액 공정 또는 솔벤트 프로세스(solvent process), 예컨대 스핀코팅 공정, 노즐 프린팅 공정, 잉크젯 프린팅 공정, 슬롯코팅 공정, 딥코팅 공정, 롤투롤 공정, 닥터 블레이딩 공정, 스크린 프린팅 공정, 또는 열 전사법 등의 방법에 의하여 더 적은 수의 층으로 제조할 수 있다. 본 발명에 따른 유기물층은 다양한 방법으로 형성될 수 있으므로, 그 형성방법에 의해 본 발명의 권리범위가 제한되는 것은 아니다.

[61] 본 발명에 따른 유기전기소자는 사용되는 재료에 따라 전면 발광형, 후면 발광형 또는 양면 발광형일 수 있다.

[62] WOLED(White Organic Light Emitting Device)는 고해상도 실현이 용이하고 공정성이 우수한 한편, 기존의 LCD의 칼라필터 기술을 이용하여 제조될 수 있는 이점이 있다. 주로 백라이트 장치로 사용되는 백색 유기발광소자에 대한 다양한 구조들이 제안되고 특허화되고 있다. 대표적으로, R(Red), G(Green), B(Blue) 발광부들을 상호평면적으로 병렬배치(side-by-side) 방식, R, G, B 발광층이 상하로 적층되는 적층(stacking) 방식이 있고, 청색(B) 유기발광층에 의한 전계발광과 이로부터의 광을 이용하여 무기형광체의 자발광(photo-luminescence)을 이용하는 색변환물질(color conversion material, CCM) 방식 등이 있는데, 본 발명은 이러한 WOLED에도 적용될 수 있을 것이다.

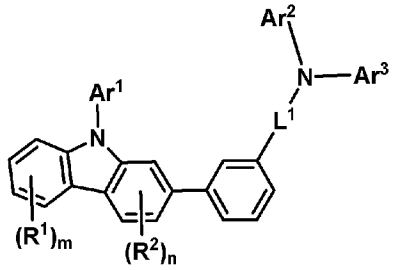
[63] 또한, 본 발명에 따른 유기전기소자는 유기전기발광소자(OLED), 유기태양전지, 유기감광체(OPC), 유기트랜지스터(유기 TFT), 단색 또는 백색 조명용 소자 중 하나일 수 있다.

[64] 본 발명의 다른 실시예는 상술한 본 발명의 유기전기소자를 포함하는 디스플레이장치와, 이 디스플레이장치를 제어하는 제어부를 포함하는 전자장치를 포함할 수 있다. 이때, 전자장치는 현재 또는 장래의 유무선 통신단말일 수 있으며, 휴대폰 등의 이동 통신 단말기, PDA, 전자사전, PMP, 리모콘, 네비게이션, 게임기, 각종 TV, 각종 컴퓨터 등 모든 전자장치를 포함한다.

[65] 이하, 본 발명의 일 측면에 따른 화합물에 대하여 설명한다.

[66] 본 발명의 일측면에 따른 화합물은 하기 화학식 1로 표시된다.

[67] <화학식 1>

[68] 

[69] 상기 화학식 1에서, m은 1 내지 4의 정수이며, n은 1 내지 3의 정수이며,

[70] 상기 화학식 1에서, R^1 및 R^2는 서로 독립적으로 수소; 중수소; 삼중수소; 할로겐; C_6~C_{60}의 아릴기; 플루오렌일기; O, N, S, Si 및 P 중 적어도 하나의 헤테로 원자를 포함하는 C_2~C_{60}의 헤테로고리기; C_1~C_{50}의 알킬기; C_2~C_{20}의 알켄일기; -L^2-N(Ar^2)(Ar^3); C_1~C_{30}의 알콕실기; 및 C_6~C_{30}의 아릴옥실기;로 이루어진 군에서 선택된다. 예컨데, R^1 및 R^2는 서로 독립적으로 수소, 페닐, 나프틸 등일 수 있다.

[71] 상기 화학식 1에서, Ar^1은 플루오렌일기; C_6~C_{60}의 아릴기; C_2~C_{20}의 알켄일기; O, N, S, Si 및 P 중 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C_2~C_{60}의 헤테로고리기; C_1~C_{50}의 알킬기; -L^2-N(Ar^2)(Ar^3); 및 C_6~C_{60}의 방향족 고리와 C_3~C_{60}의 지방족 고리의 융합고리기;로 이루어진 군에서 선택된다. 예시적으로, Ar^1은 에틸, 페닐, 비페닐, 나프틸, 터페닐, 9,9-디메틸-9H-플루오렌, 9,9-디페닐-9H-플루오렌, 9,9-스파이로-비플루오렌, 피리딘, 이소퀴놀린, 디벤조티오펜, 디벤조퓨란 등일 수 있다.

[72] 상기 화학식 1에서, L^1 및 L^2은 서로 독립적으로 단일결합; C_6~C_{60}의 아릴렌기; 플루오렌일렌기; O, N, S, Si 및 P 중 적어도 하나의 헤테로 원자를 포함하는 C_2~C_{60}의 2가 헤테로고리기; C_3~C_{60}의 지방족고리와 C_6~C_{60}의 방향족고리의 2가 융합고리기; 및 2가의 지방족 탄화수소기;로 이루어진 군에서 선택된다. 예시적으로, L^1 및 L^2은 서로 독립적으로 단일결합, 페닐, 비페닐, 나프틸, 9,9-디메틸-9H-플루오렌, 9,9-디페닐-9H-플루오렌, 디벤조티오펜, 디벤조퓨란 등일 수 있다.

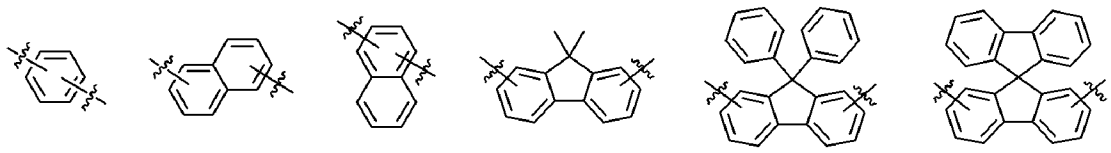
[73] 상기 화학식 1에서, Ar^2및 Ar^3는 서로 독립적으로, C_6~C_{60}의 아릴기; 플루오렌일기; O, N, S, Si 및 P 중 적어도 하나의 헤테로 원자를 포함하는 C_2~C_{60}

의 헤테로고리기; C_1~C_{50}의 알킬기; C_6~C_{60}의 방향족 고리와 C_3~C_{60}의 지방족 고리의 융합고리기; 및 C_2~C_{20}의 알켄일기;로 이루어진 군에서 선택된다. 예시적으로, Ar^2및 Ar^3는 서로 독립적으로 페닐, 비페닐, 터페닐, 나프틸, 페난트렌, 9,9-디메틸-9H-플루오렌, 9,9-디페닐-9H-플루오렌, 9,9-스파이로-디플루오렌, 디벤조티오펜, 디벤조퓨란, 플루오로페닐, 프로페닐-페닐, 피리딘, 이소퀴놀린, 퀴놀린, 메틸페닐, 중수소로 치환된 페닐, 벤조티오펜, 티오펜, 인돌, 벤조퀴놀린 등일 수 있다.

[74] 여기서 상기 아릴기, 헤테로고리기, 플루오렌일기, 알킬기, 알켄일기, 융합고리기, 알콕실기, 아릴옥실기, 아릴렌기, 플루오렌일렌기, 지방족 탄화수소기는 각각 중수소; 할로겐; 실란기; 실록산기; 붕소기; 게르마늄기; 시아노기; 니트로기; -L'-N(R')(R")(여기서 상기 L'은 단일결합; C_6~C_{60}의 아릴렌기; 플루오렌일렌기; O, N, S, Si 및 P 중 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C_2~C_{60}의 헤테로고리기; C_3~C_{60}의 지방족고리와 C_6~C_{60}의방향족고리의 융합고리기; 및 2가의 C_1~C_{60} 지방족 탄화수소기;로 이루어진 군에서 선택되며, 상기 R'및 R"는 서로 독립적으로 C_6~C_{60}의 아릴기; 플루오렌일기; O, N, S, Si 및 P 중 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C_2~C_{60}의 헤테로고리기; C_1~C_{50}의 알킬기 및 C_2~C_{20}의 알켄일기;로 이루어진 군에서 선택됨); C_1~C_{20}의 알킬싸이오기; C_1~C_{20}의 알콕실기; C_1~C_{20}의 알킬기; C_2~C_{20}의 알켄일기; C_2~C_{20}의 알킨일기; C_6~C_{20}의 아릴기; 중수소로 치환된 C_6~C_{20}의 아릴기; 플루오렌일기; C_2~C_{20}의 헤테로고리기; C_3~C_{20}의 시클로알킬기; C_7~C_{20}의 아릴알킬기; 및 C_8~C_{20}의 아릴알켄일기;로 이루어진 군에서 선택된 하나 이상의 치환기로 더 치환될 수 있다.

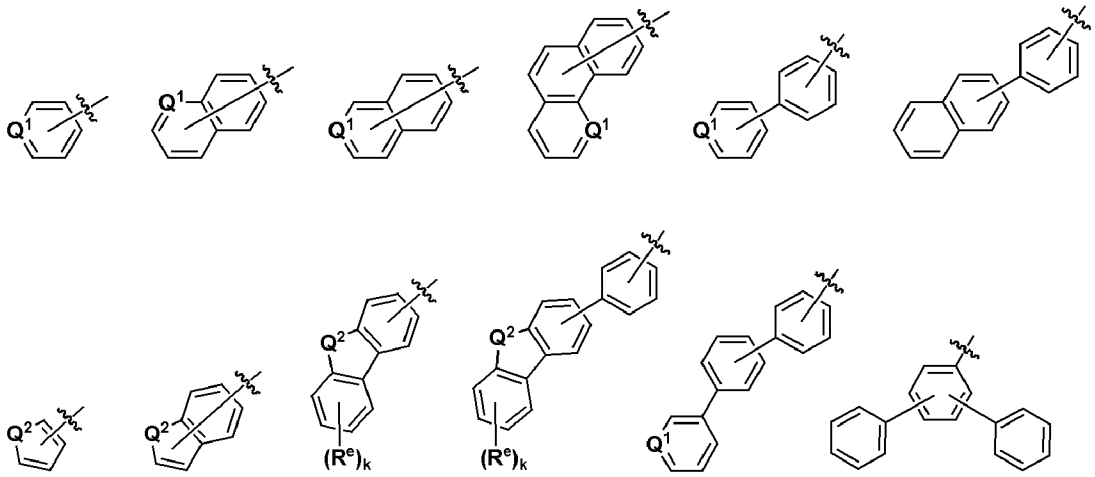
[75] 상기 화학식 1에서, 상기 L^1은 하기 군에서 선택된다.

[76]



[77] 상기 화학식 1에서, 상기 Ar^2와 Ar^3은 서로 독립적으로 하기 군에서 선택된다.

[78]

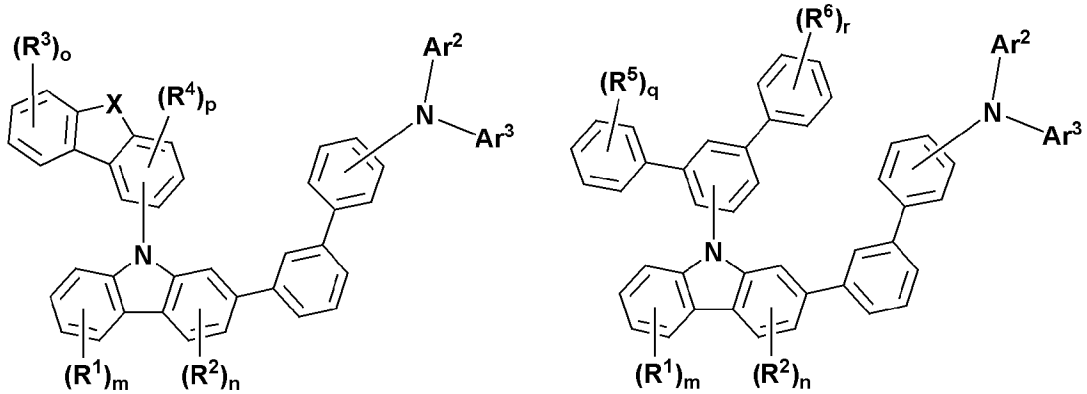


[79] 상기 군에서, Q^1는 $C(R^a)$ 또는 N이며, Q^2는 $C(R^b)(R^c)$, $N(R^d)$, S 또는 O이고, k는 1 내지 4의 정수이며, 상기 R^a 및 R^e는 i) 서로 독립적으로, 수소; 중수소; C_6~C_{60}의 아릴기; O, N, S, Si 및 P 중 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C_2~C_{60}의 헤테로고리기; C_1~C_{50}의 알킬기; C_2~C_{20}의 알켄일기; C_1~C_{30}의 알콕시기; 및 플루오렌일기;로 이루어진 군에서 선택되거나, 또는 ii) 복수의 R^e는 이웃하는 기끼리 각각 결합하여 이들과 결합한 탄소와 함께 방향족고리를 형성할 수 있다.

[80] 또한 상기 R^b 내지 R^d는 i) 서로 독립적으로 C_6~C_{60}의 아릴기; O, N, S, Si 및 P 중 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C_2~C_{60}의 헤테로고리기; C_1~C_{50}의 알킬기; C_2~C_{20}의 알켄일기; C_1~C_{30}의 알콕실기;로 이루어진 군에서 선택되거나, 또는 ii) R^b와 R^c는 서로 결합하여 이들이 결합된 플루오렌과 함께 스파이로(Spiro) 화합물을 형성할 수 있다.

[81] 구체적으로, 상기 화학식 1은 하기 화학식 2 또는 화학식 3으로 표시될 수 있다.

[82] 화학식2 화학식3



[83] 상기 화학식 2 및 화학식 3에서, Ar^2, Ar^3, R^1, R^2, m 및 n은 상기 화학식 1에서 정의된 것과 같이 정의될 수 있다.

[84] 상기 화학식 2에서, 상기 X는 $C(R^f)(R^g)$, S 또는 O이며, 상기 R^f 및 R^g는 i) 서로 독립적으로 C_6~C_{60}의 아릴기; O, N, S, Si 및 P 중 적어도 하나의 헤테로원자를

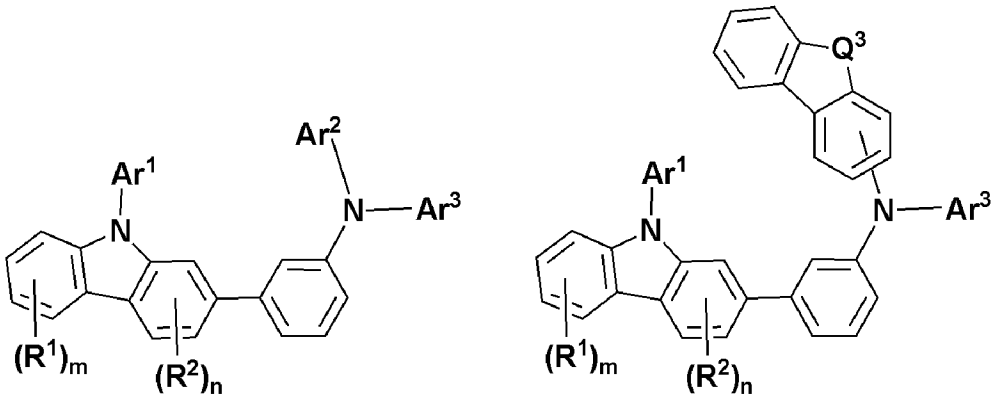
포함하는 C_2~C_{60}의 헤테로고리기; C_1~C_{50}의 알킬기; C_2~C_{20}의 알켄일기; 및 C_1~C_{30}의 알콕실기;로 이루어진 군에서 선택되거나, 또는 ii) R^f와 R^g는 서로 결합하여 이들이 결합된 플루오렌과 함께 스파이로(Spiro) 화합물을 형성할 수 있다.

[85] 상기 화학식 2 및 화학식 3에서, 상기 o는 1 내지 4의 정수이며, 상기 p는 1 내지 3의 정수이며, 상기 q 및 r은 서로 독립적으로 1 내지 5의 정수이다.

[86] 상기 화학식 2 및 화학식 3에서, 상기 R^3 내지 R^6은 i) 서로 독립적으로 수소; 중수소; 삼중수소; 할로겐; C_6~C_{60}의 아릴기; O, N, S, Si 및 P 중 적어도 하나의 헤테로 원자를 포함하는C_2~C_{60}의 헤테로고리기; C_1~C_{50}의 알킬기; C_2~C_{20}의 알켄일기; C_1~C_{30}의 알콕실기; 및 C_6~C_{30}의 아릴옥실기로 이루어진 군에서 선택되거나, 또는 ii) 이웃하는 기끼리 서로 결합하여 이들과 결합한 탄소와 함께 방향족고리를 형성할 수 있다.

[87] 구체적으로, 상기 화학식 1은 하기 화학식 4 또는 화학식 5로 표시될 수 있다.

[88] 화학식4 화학식5

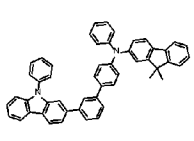


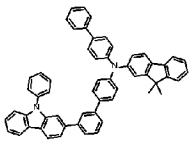
[89] 상기 화학식 4 및 5에서, Ar^1 내지 Ar^3, R^1, R^2, m 및 n은 상기 화학식 1에서 정의된 것과 같이 정의될 수 있다.

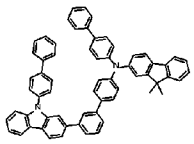
[90] 상기 화학식 5에서, 상기 Q^3은 $C(R^h)(R^i)$, $N(R^j)$, S 또는 O이며, 상기 R^h 내지 R^j는 i) 서로 독립적으로 C_6~C_{60}의 아릴기; O, N, S, Si 및 P 중 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C_2~C_{60}의 헤테로고리기; C_1~C_{50}의 알킬기; C_2~C_{20}의 알켄일기; C_1~C_{30}의 알콕실기;로 이루어진 군에서 선택되거나, 또는 ii) R^h와 R^i는 서로 결합하여 이들이 결합된 플루오렌과 함께 스파이로(Spiro) 화합물을 형성할 수 있다.

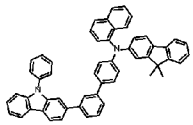
[91] 더욱 구체적으로, 상기 화학식 1 내지 화학식 5는 하기 화합물 중 하나일 수 있다.

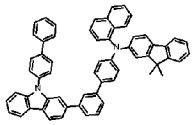
[92]

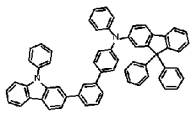

B1

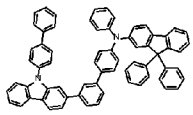

B6

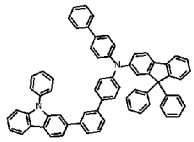

B7

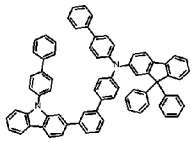

B11

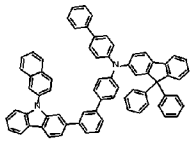

B12

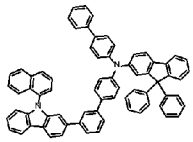

B16

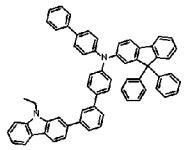

B17

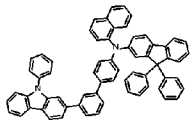

B21

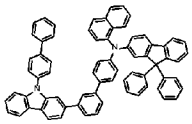

B22

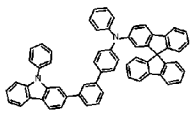

B23

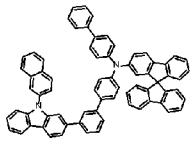

B24

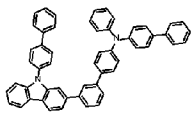

B25

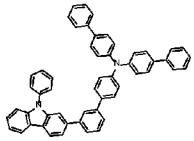

B26

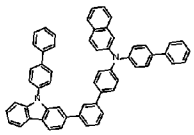

B27

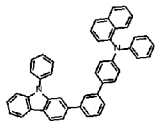

B31


B43

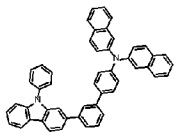

B47


B51

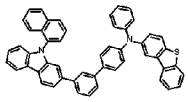

B62


B66

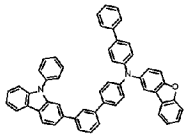
[93]



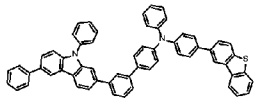
B86



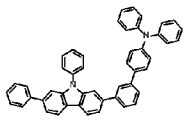
B94



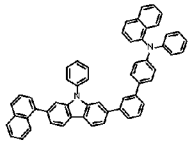
B106



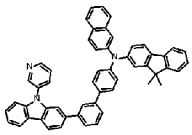
B122



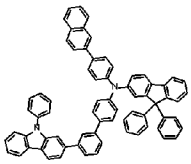
B124



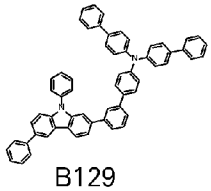
B125



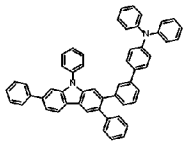
B127



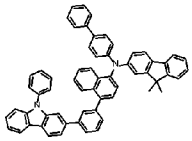
B128



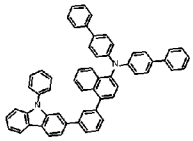
B129



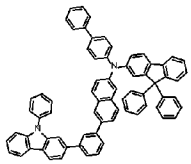
B130



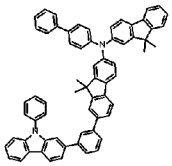
B132



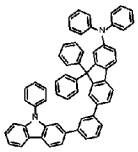
B138



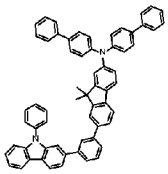
B145



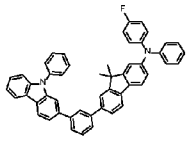
B152



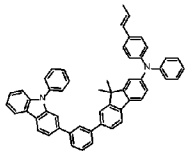
B157



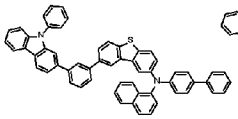
B158



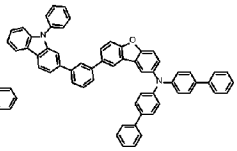
B161



B162

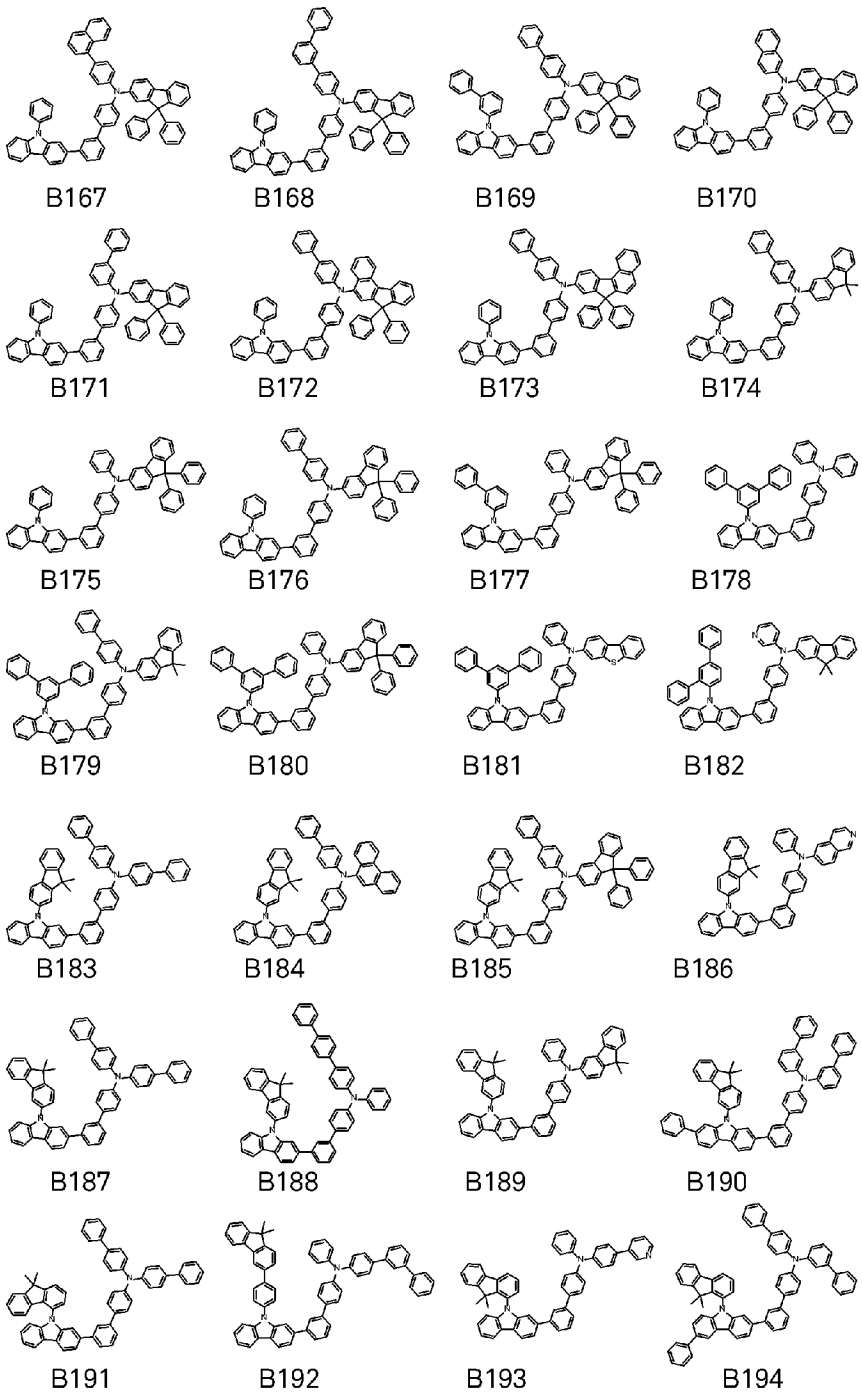


B164

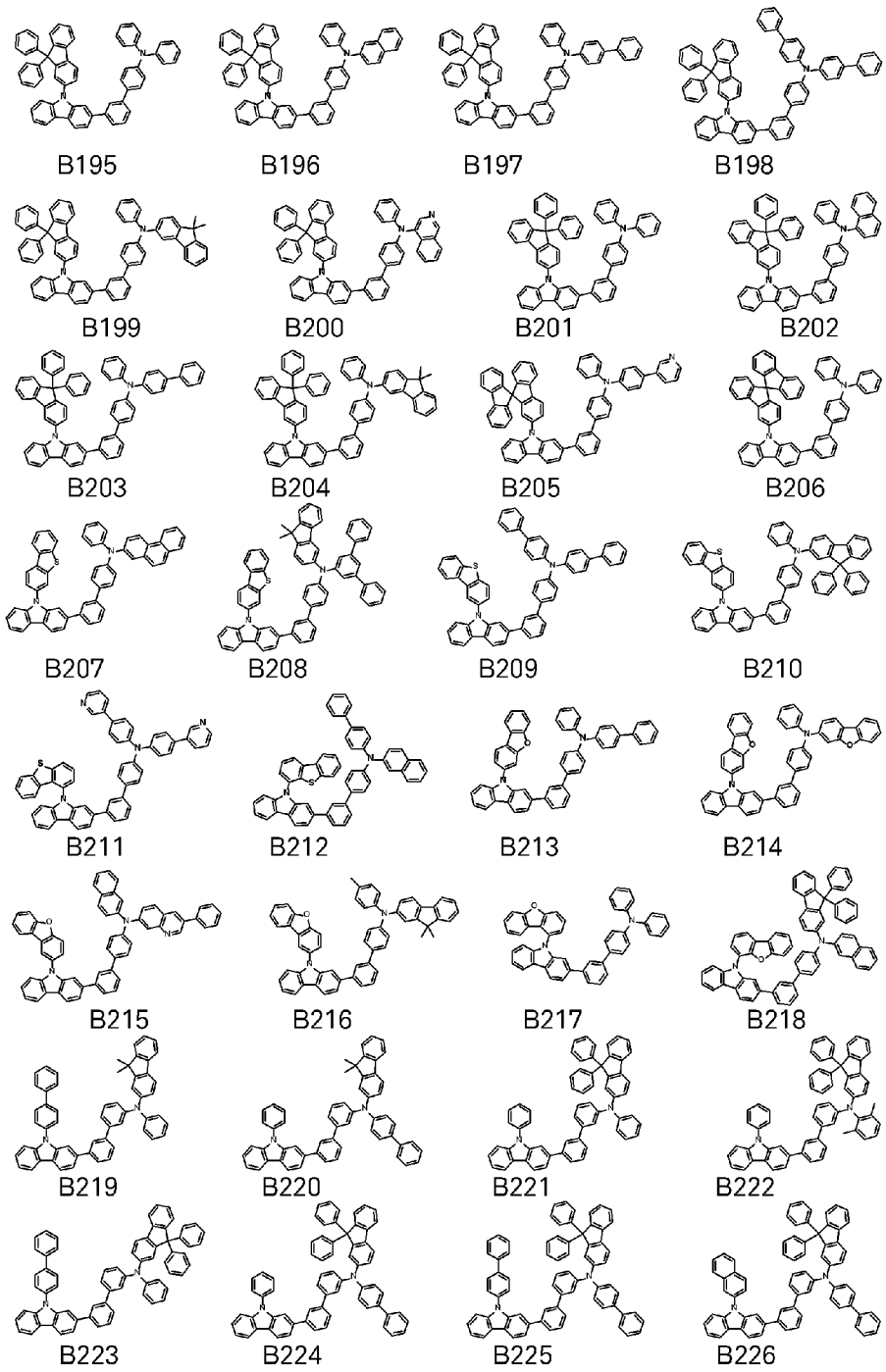


B165

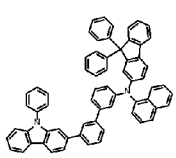
[94]

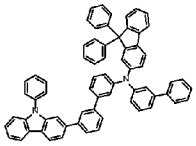

B167
B168
B169
B170
B171
B172
B173
B174
B175
B176
B177
B178
B179
B180
B181
B182
B183
B184
B185
B186
B187
B188
B189
B190
B191
B192
B193
B194

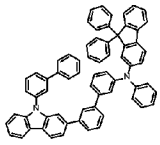
[95]

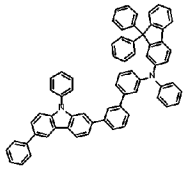

B195
B196
B197
B198
B199
B200
B201
B202
B203
B204
B205
B206
B207
B208
B209
B210
B211
B212
B213
B214
B215
B216
B217
B218
B219
B220
B221
B222
B223
B224
B225
B226

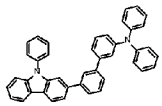
[96]

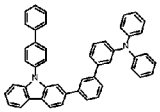

B227

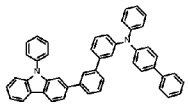

B228

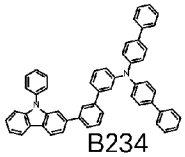

B229

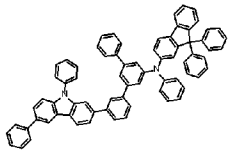

B230

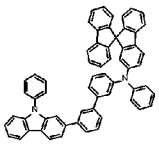

B231

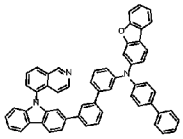

B232

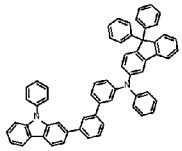

B233

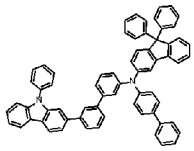

B234

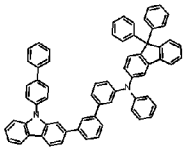

B235

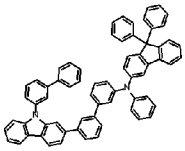

B236

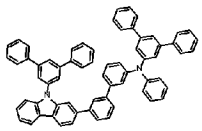

B237

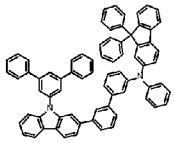

B238

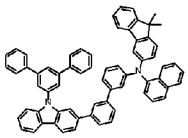

B239

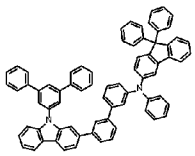

B240

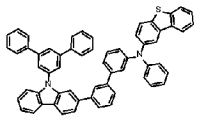

B241

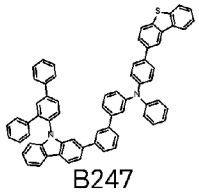

B242

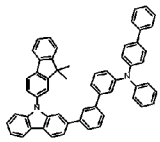

B243

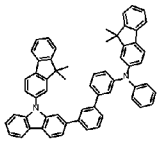

B244

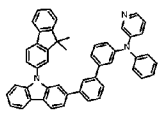

B245

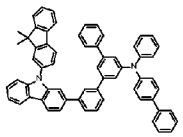

B246

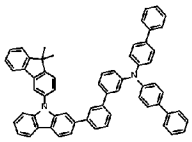

B247

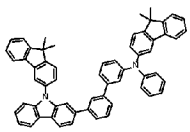

B248

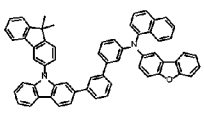

B249


B250

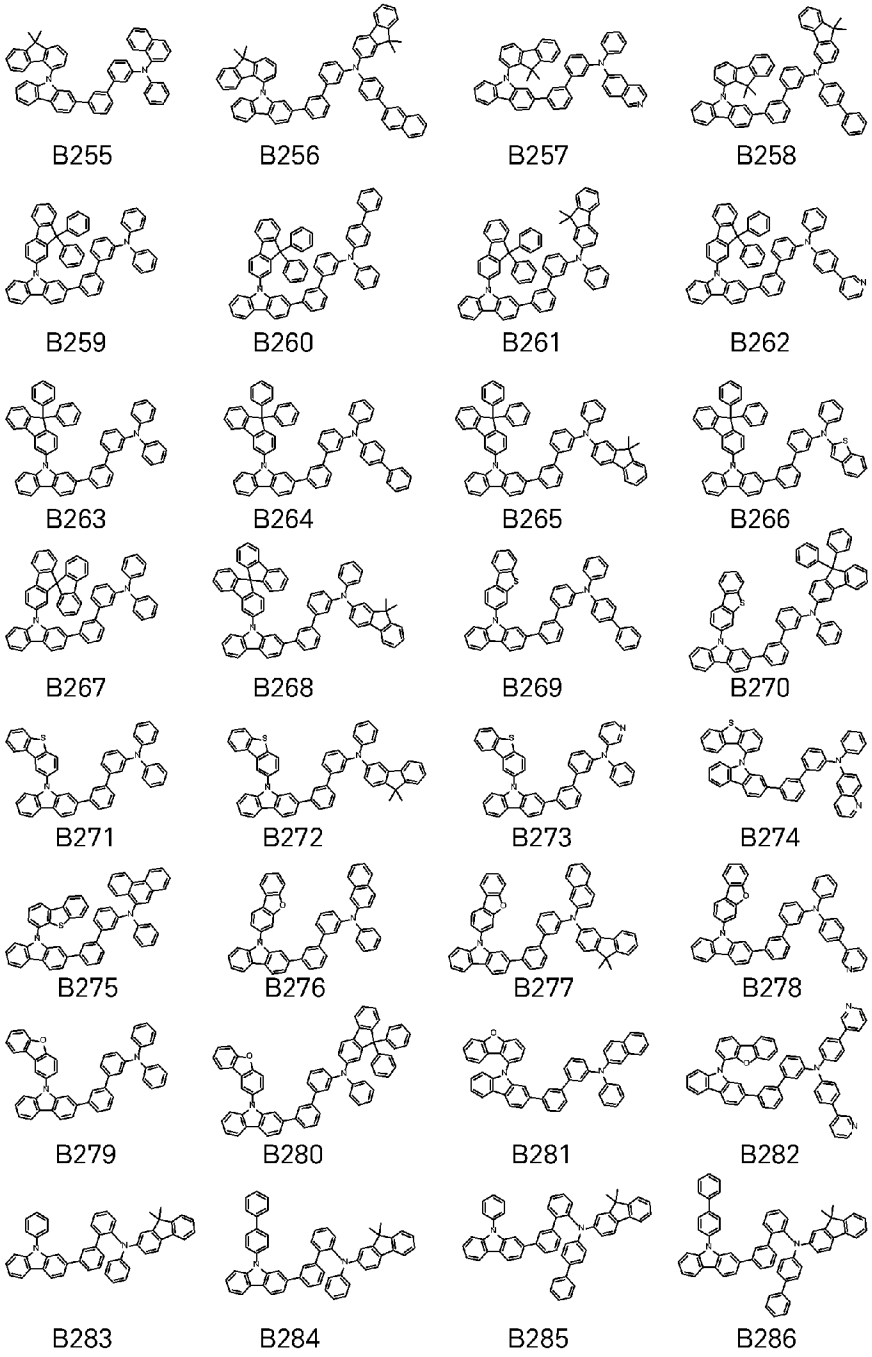

B251


B252

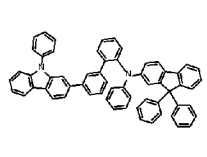

B253


B254

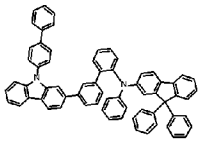
[97]


B255
B256
B257
B258
B259
B260
B261
B262
B263
B264
B265
B266
B267
B268
B269
B270
B271
B272
B273
B274
B275
B276
B277
B278
B279
B280
B281
B282
B283
B284
B285
B286

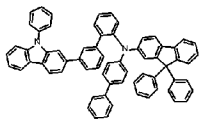
[98]



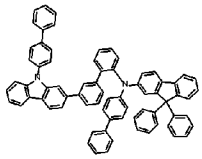
B287



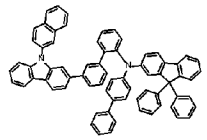
B288



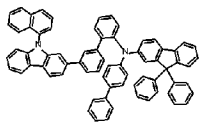
B289



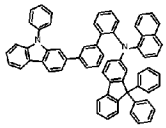
B290



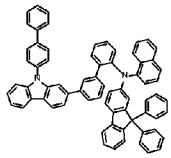
B291



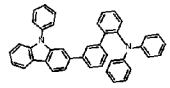
B292



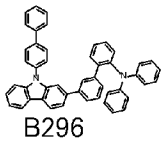
B293



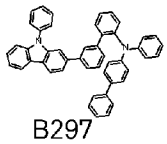
B294



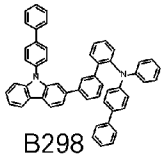
B295



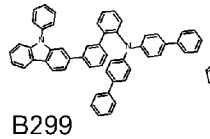
B296



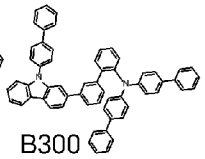
B297



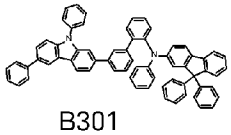
B298



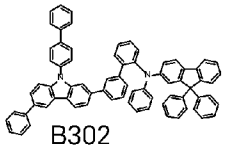
B299



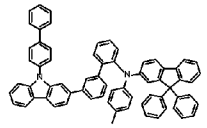
B300



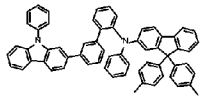
B301



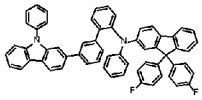
B302



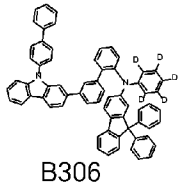
B303



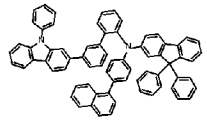
B304



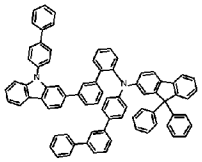
B305



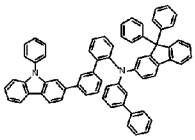
B306



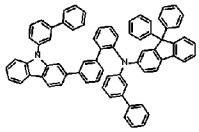
B307



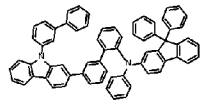
B308



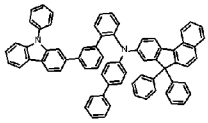
B309



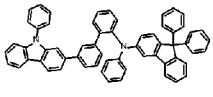
B310



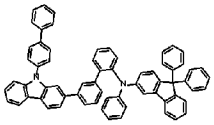
B311



B312

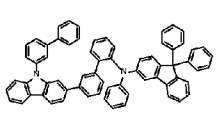


B313

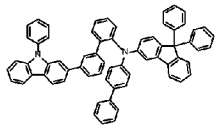


B314

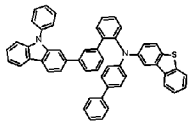
[99]



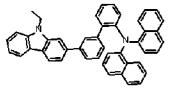
B315



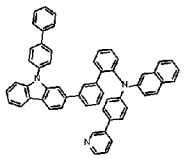
B316



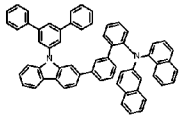
B317



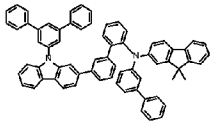
B318



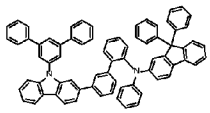
B319



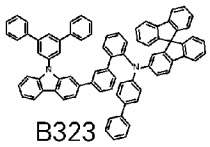
B320



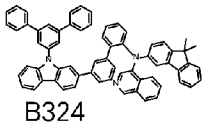
B321



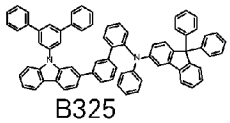
B322



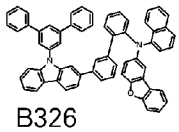
B323



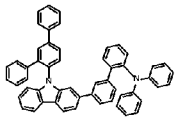
B324



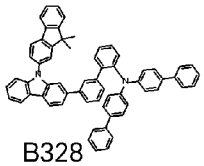
B325



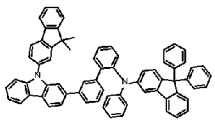
B326



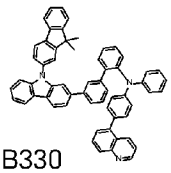
B327



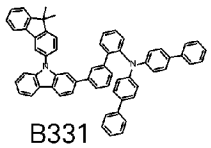
B328



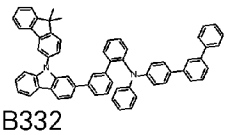
B329



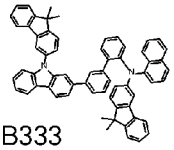
B330



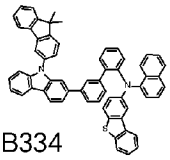
B331



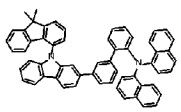
B332



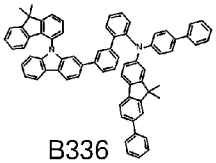
B333



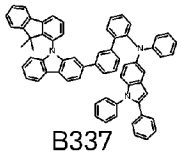
B334



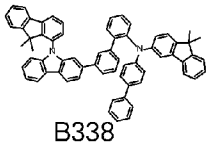
B335



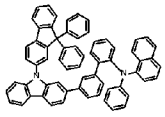
B336



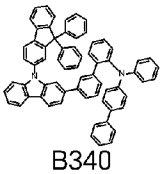
B337



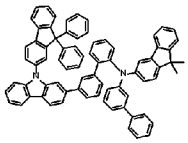
B338



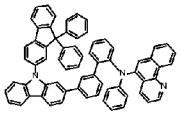
B339



B340

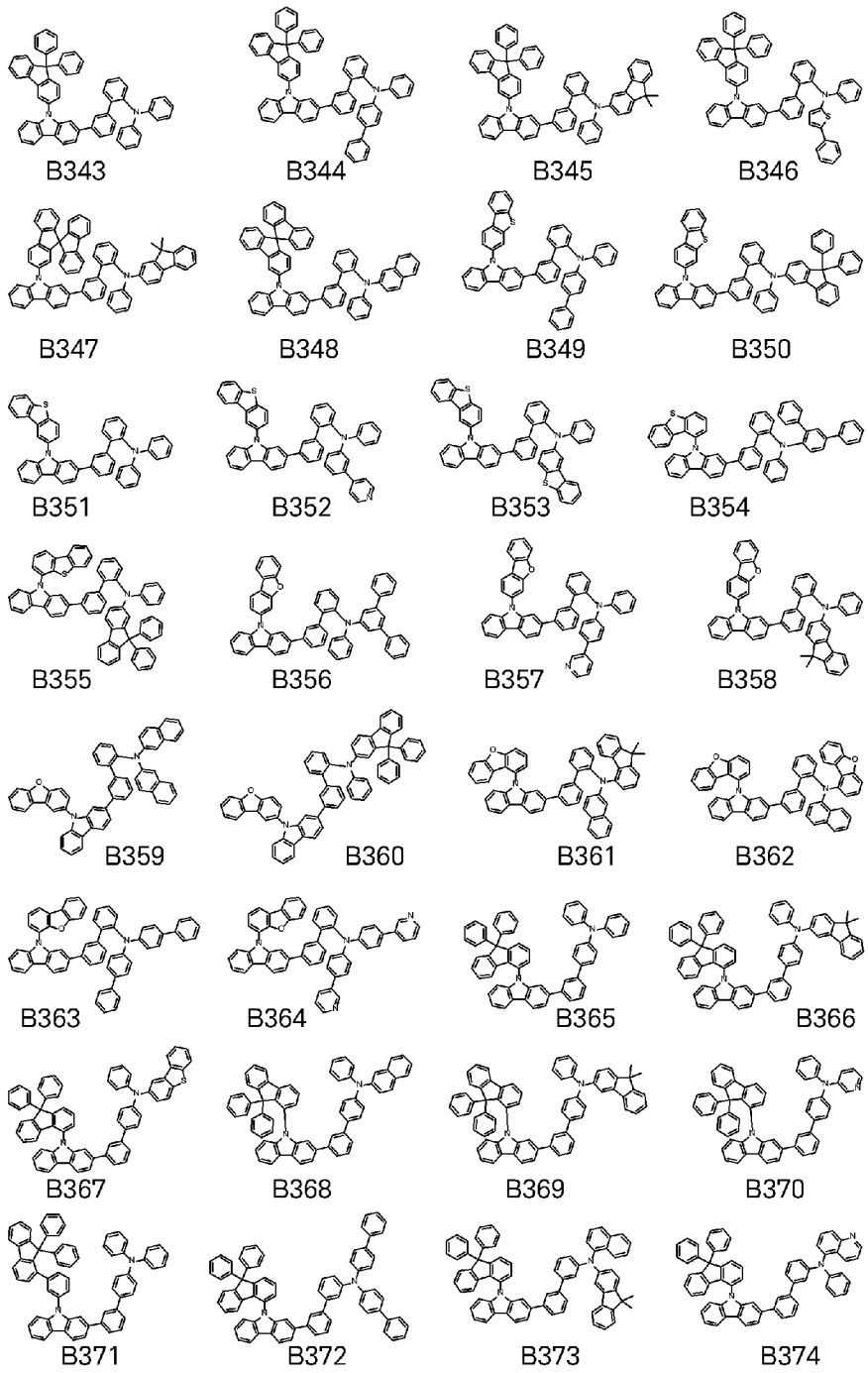


B341

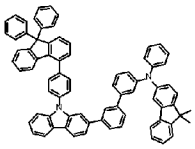


B342

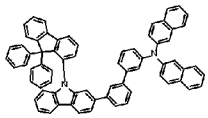
[100]


B343
B344
B345
B346
B347
B348
B349
B350
B351
B352
B353
B354
B355
B356
B357
B358
B359
B360
B361
B362
B363
B364
B365
B366
B367
B368
B369
B370
B371
B372
B373
B374

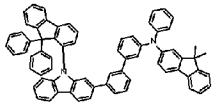
[101]



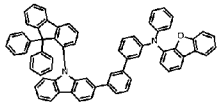
B375



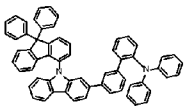
B376



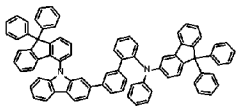
B377



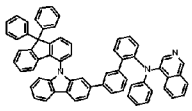
B378



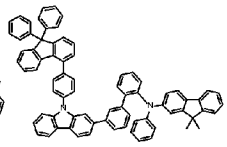
B379



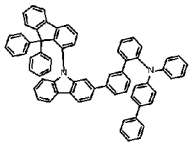
B380



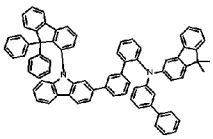
B381



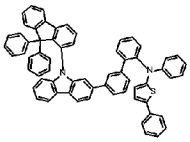
B382



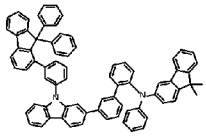
B383



B384

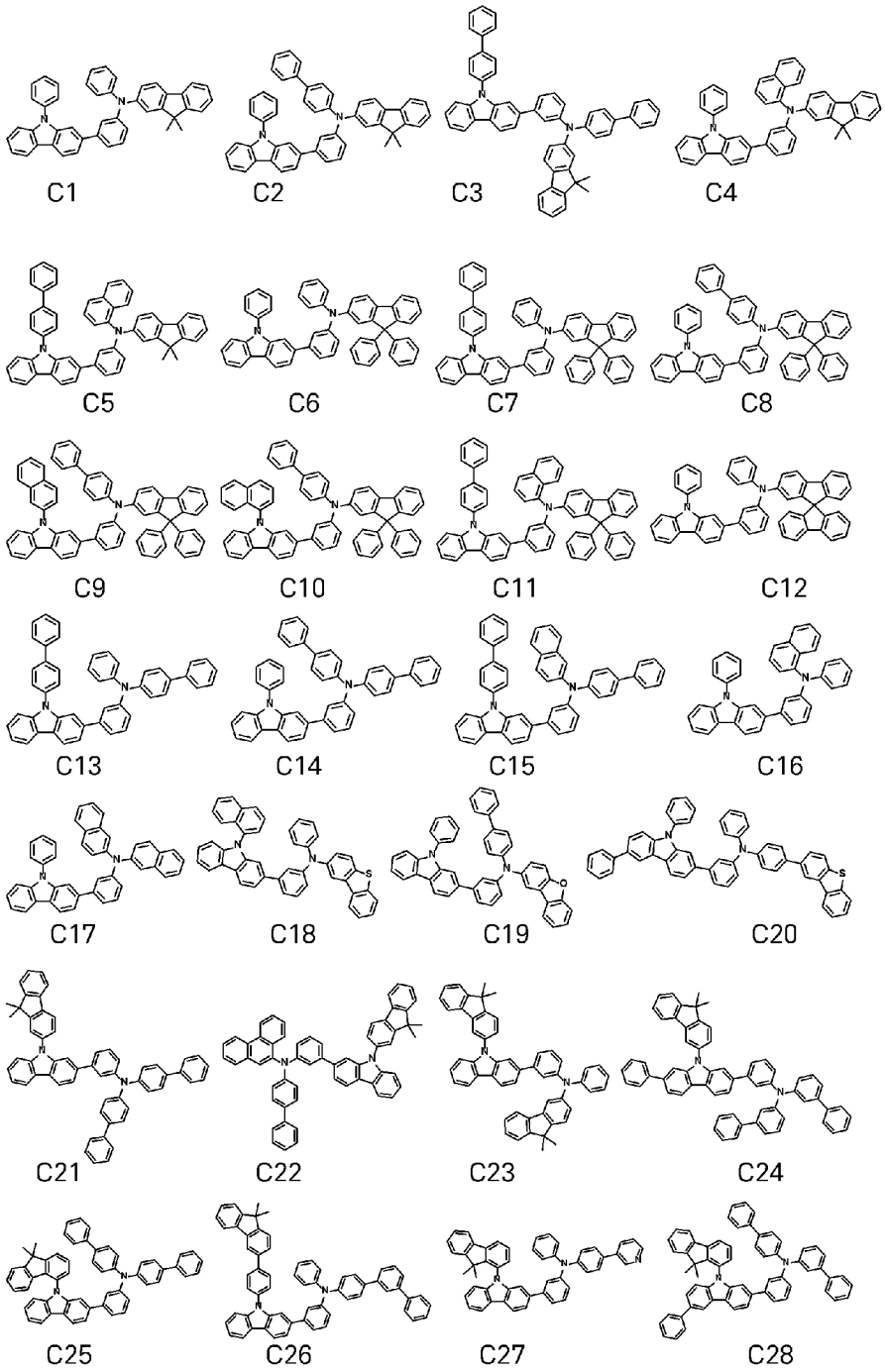


B385

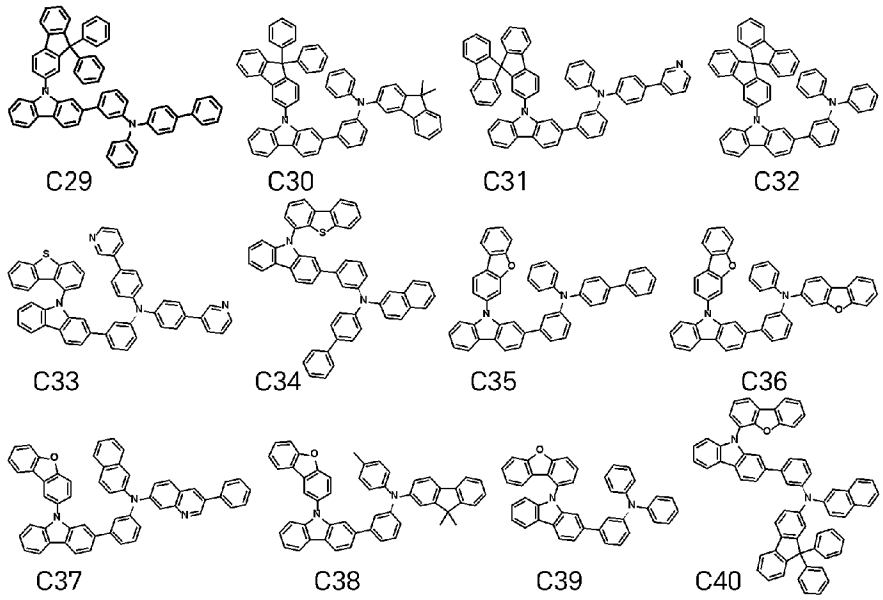


B386

[102]


C1
C2
C3
C4
C5
C6
C7
C8
C9
C10
C11
C12
C13
C14
C15
C16
C17
C18
C19
C20
C21
C22
C23
C24
C25
C26
C27
C28

[103]



[104] 다른 실시예로서, 본 발명은 상기 화학식 1로 표시되는 유기전기소자용 화합물을 제공한다.

[105] 또 다른 실시예에서, 본 발명은 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 함유하는 유기전기소자를 제공한다.

[106] 이때, 유기전기소자는 제 1전극; 제 2전극; 및 상기 제 1전극과 제 2전극 사이에 위치하는 유기물층;을 포함할 수 있으며, 유기물층은 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함할 수 있으며, 화학식 1은 유기물층의 정공주입층, 정공수송층, 발광보조층 또는 발광층 중 적어도 하나의 층에 함유될 수 있을 것이다. 즉, 화학식 1로 표시되는 화합물은 정공주입층, 정공수송층, 발광보조층 또는 발광층의 재료로 사용될 수 있다. 구체적으로, 유기물층에 상기 화학식 2 내지 화학식 5로 표시되는 화합물 중 하나를 포함하는 유기전기소자를 제공하며, 보다 구체적으로, 본 발명은 상기 유기물층에 상기 개별 화학식으로 표시되는 화합물을 포함하는 유기전기소자를 제공한다.

[107] 본 발명의 또 다른 실시예에서, 본 발명은 상기 제 1전극의 일측면 중 상기 유기물층과 반대되는 일측 또는 상기 제 2전극의 일측면 중 상기 유기물층과 반대되는 일측 중 적어도 하나에 형성되는 광효율 개선층을 더 포함하는 유기전기소자를 제공한다.

[108]

[109] 이하에서, 본 발명에 따른 화학식 1로 표시되는 화합물의 합성예 및 유기전기소자의 제조예에 관하여 실시예를 들어 구체적으로 설명하지만, 본 발명이 하기의 실시예로 한정되는 것은 아니다.

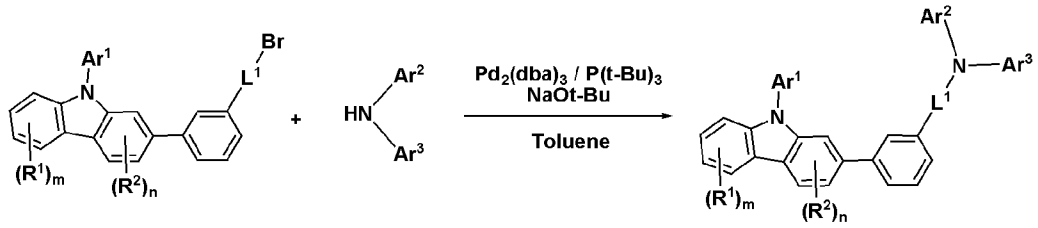
[110]

[111] **합성예**

[112] 본 발명에 따른 화학식 1로 표시되는 화합물(Final Product)은 하기 반응식 1과 같이 Sub 1과 Sub 2를 반응시켜 제조되며, 이에 한정되는 것은 아니다.

[113] <반응식 1>

[114]



Sub 1 Sub 2 Final Product

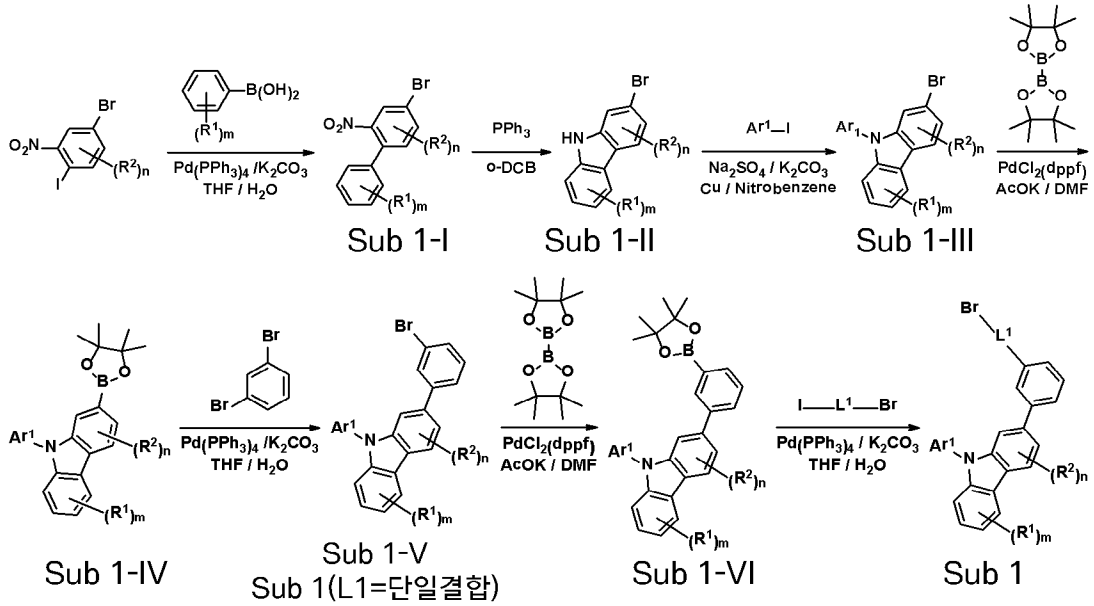
[115] (Ar^1 내지 Ar^3, L^1, R^1, R^2, m 및 n은 상기 화학식 1에서 정의된 것과 동일하며, L^1이 단일결합일 경우 Br은 연결기인 페닐기에 직접 결합된다.)

[116] **I. Sub 1의 합성**

[117] 상기 반응식 1의 Sub 1은 하기 반응식 2의 반응경로에 의해 합성될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[118] <반응식 2>

[119]

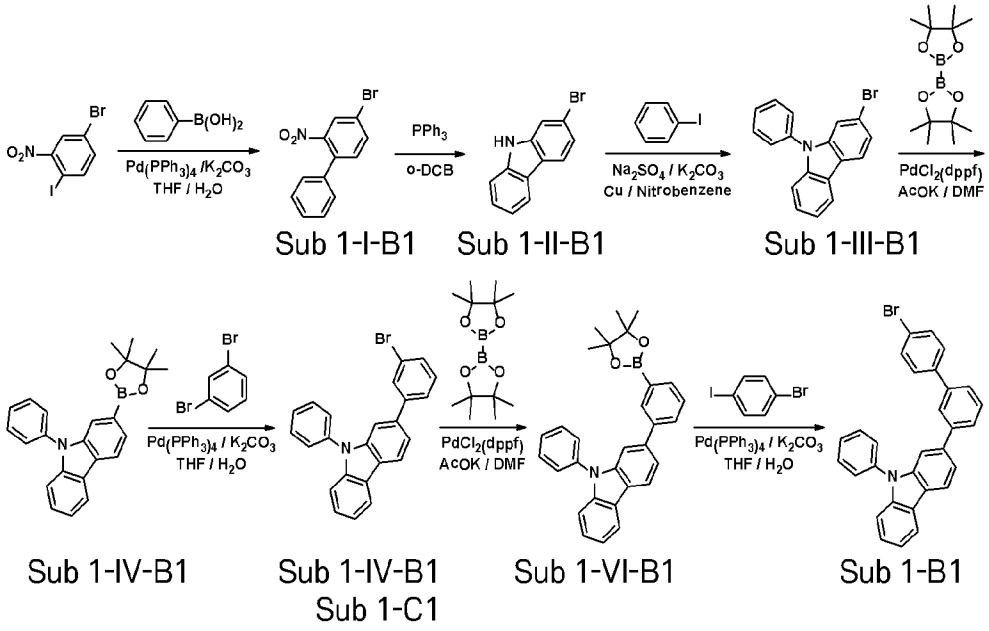


[120] Sub 1에 속하는 구체적 화합물의 합성예는 다음과 같다

[121] **1. Sub 1-B1의 합성**

[122] <반응식 3>

[123]



[124] **(1) Sub 1-I-B1 합성**

[125] 출발물질인 phenylboronic acid (448.56g, 3678.8mmol)를 둥근바닥플라스크에 THF로 녹인 후에, 4-bromo-1-iodo-2-nitrobenzene (1809.43g, 5518.2mmol), $Pd(PPh_3)_4$ (212.56g, 183.9mmol), K_2CO_3 (1525.35g, 11036.5mmol), 물을 첨가하고 80℃에서 교반하였다. 반응이 완료되면 CH_2Cl_2와 물로 추출한 후 유기층을 $MgSO_4$로 건조하고 농축한 후 생성된 화합물을 silicagel column 및 재결정하여 생성물 705.93g (수율: 69%)를 얻었다.

[126] **(2) Sub 1-II-B1 합성**

[127] 상기 합성에서 얻어진 Sub 1-I-B1 (705.93g, 2538.4mmol)을 둥근바닥플라스크에 *o*-dichlorobenzene으로 녹인 후에, triphenylphosphine (1664.49g, 6346mmol)을 첨가하고 200℃에서 교반하였다. 반응이 완료되면 증류를 통해 *o*-dichlorobenzene을 제거하고 CH_2Cl_2와 물로 추출하였다. 유기층을 $MgSO_4$로 건조하고 농축한 후 생성된 화합물을 silicagel column 및 재결정하여 생성물 449.78g (수율: 72%)를 얻었다.

[128] **(3) Sub 1-III-B1 합성**

[129] 상기 합성에서 얻어진 Sub 1-II-B1 (37.19g, 151.1mmol)을 둥근바닥플라스크에 nitrobenzene으로 녹인 후, iodobenzene (46.24g, 226.7mmol), Na_2SO_4 (21.46g, 151.1mmol), K_2CO_3 (20.89g, 151.1mmol), Cu (2.88g, 45.3mmol)를 첨가하고 200℃에서 교반하였다. 반응이 완료되면 증류를 통해 nitrobenzene을 제거하고 CH_2Cl_2와 물로 추출하였다. 유기층을 $MgSO_4$로 건조하고 농축한 후 생성된 화합물을 silicagel column 및 재결정하여 생성물 38.47g (수율: 79%)를 얻었다.

[130] **(4) Sub 1-IV-B1 합성**

[131] 상기 합성에서 얻어진 Sub 1-III-B1 (38.47g, 119.4mmol)을 둥근바닥플라스크에 DMF로 녹인 후에, Bis(pinacolato)diboron (33.35g, 131.3mmol), $Pd(dppf)Cl_2$ (2.93g,

3.6mmol), KOAc(35.15g, 358.2mmol)를 첨가하고 90℃에서 교반하였다. 반응이 완료되면 증류를 통해 DMF를 제거하고 CH_2Cl_2와 물로 추출하였다. 유기층을 $MgSO_4$로 건조하고 농축한 후 생성된 화합물을 silicagel column 및 재결정하여 생성물 37.48g (수율: 85%)를 얻었다.

[132] **(5) Sub 1-V-B1(Sub 1-C1) 합성**

[133] 상기 합성에서 얻어진 Sub 1-IV-B1 (37.48g, 101.5mmol)을 둥근바닥플라스크에 THF로 녹인 후에, 1,3-dibromobenzene (35.92g, 152.3mmol), $Pd(PPh_3)_4$ (5.86g, 5.1mmol), K_2CO_3 (42.09g, 304.5mmol), 물을 첨가하고 80℃에서 교반하였다. 반응이 완료되면 CH_2Cl_2와 물로 추출한 후 유기층을 $MgSO_4$로 건조하고 농축한 후 생성된 화합물을 silicagel column 및 재결정하여 생성물 30.32g (수율: 75%)를 얻었다.

[134] **(6) Sub 1-VI-B1 합성**

[135] 상기 합성에서 얻어진 Sub 1-V-B1 (30.32g, 76.1mmol)을 둥근바닥플라스크에 DMF로 녹인 후에, Bis(pinacolato)diboron (21.26g, 83.7mmol), $Pd(dppf)Cl_2$ (1.87g, 2.3mmol), KOAc(22.41g, 228.4mmol)를 첨가하고 90℃에서 교반하였다. 반응이 완료되면 증류를 통해 DMF를 제거하고 CH_2Cl_2와 물로 추출하였다. 유기층을 $MgSO_4$로 건조하고 농축한 후 생성된 화합물을 silicagel column 및 재결정하여 생성물 28.48g (수율: 84%)를 얻었다.

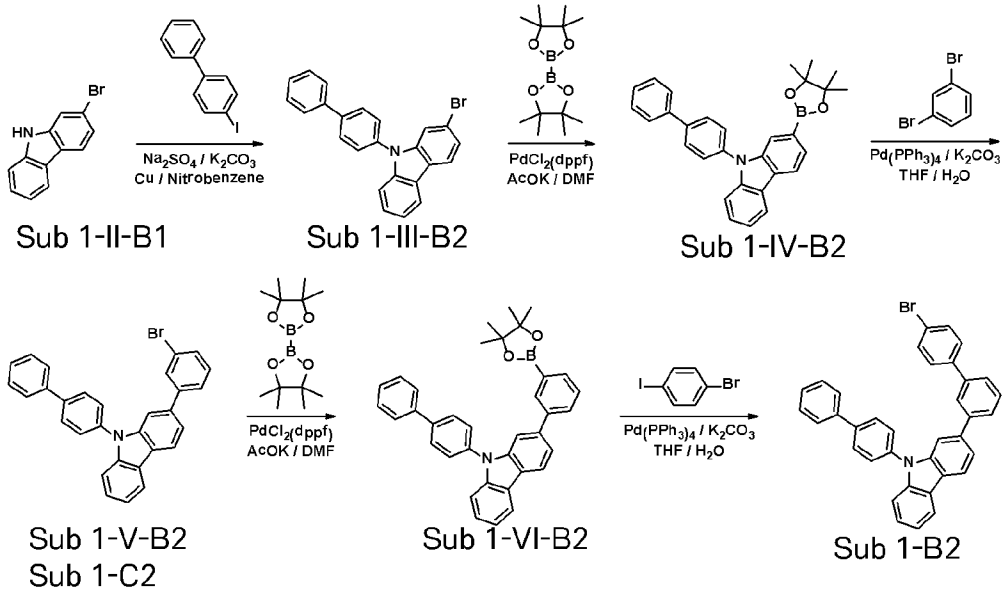
[136] **(7) Sub 1-B1 합성**

[137] 상기 합성에서 얻어진 Sub 1-VI-B1 (7.16g, 16.1mmol)를 둥근바닥플라스크에 THF로 녹인 후에, 1-bromo-4-iodobenzene (6.82g, 24.1mmol), $Pd(PPh_3)_4$ (0.93g, 0.8mmol), K_2CO_3 (6.67g, 48.2mmol), 물을 첨가하고 80℃에서 교반하였다. 반응이 완료되면 CH_2Cl_2와 물로 추출한 후 유기층을 $MgSO_4$로 건조하고 농축한 후 생성된 화합물을 silicagel column 및 재결정하여 생성물 6.33g (수율: 83%)를 얻었다.

[138] **2. Sub 1-B2의 합성**

[139] <반응식 4>

[140]



[141] **(1) Sub 1-III-B2 합성**

[142] 상기 합성에서 얻어진 Sub 1-II-B1 (30.72g, 124.8mmol)에 4-iodo-1,1'-biphenyl (52.45g, 187.2mmol), Na_2SO_4 (17.73g, 124.8mmol), K_2CO_3 (17.25g, 124.8mmol), Cu (2.38g, 37.4mmol), nitrobenzene을 상기 Sub 1-III-B1 합성법을 사용하여 생성물 36.29g (수율: 73%)를 얻었다.

[143] **(2) Sub 1-IV-B2 합성**

[144] 상기 합성에서 얻어진 Sub 1-III-B2 (36.29g, 91.1mmol)에 Bis(pinacolato)diboron (25.45g, 100.2mmol), $Pd(dppf)Cl_2$ (2.23g, 2.7mmol), KOAc(26.83g, 273.3mmol), DMF를 상기 Sub 1-IV-B1 합성법을 사용하여 생성물 33.68g (수율: 83%)를 얻었다.

[145] **(3) Sub 1-V-B2(Sub 1-C2) 합성**

[146] 상기 합성에서 얻어진 Sub 1-IV-B2 (33.68g, 75.6mmol)에 1,3-dibromobenzene (26.76g, 113.4mmol), $Pd(PPh_3)_4$ (4.37g, 3.8mmol), K_2CO_3 (31.36g, 226.9mmol), THF, 물을 상기 Sub 1-V-B1 합성법을 사용하여 생성물 26.91g (수율: 75%)를 얻었다.

[147] **(4) Sub 1-VI-B2 합성**

[148] 상기 합성에서 얻어진 Sub 1-V-B2 (26.91g, 56.7mmol)에 Bis(pinacolato)diboron (15.85g, 62.4mmol), $Pd(dppf)Cl_2$ (1.39g, 1.7mmol), KOAc(16.7g, 170.2mmol), DMF를 상기 Sub 1-VI-B1 합성법을 사용하여 생성물 24.55g (수율: 83%)를 얻었다.

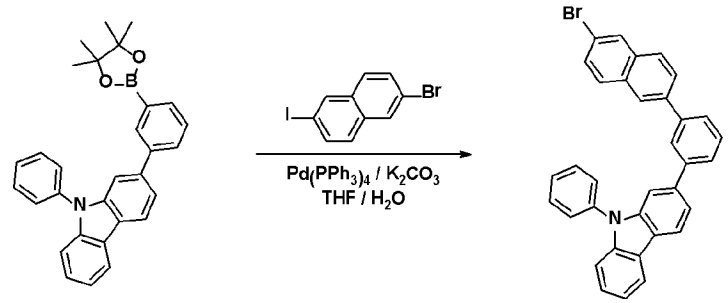
[149] **(5) Sub 1-B2 합성**

[150] 상기 합성에서 얻어진 Sub 1-VI-B2 (12.93g, 24.8mmol)에 1-bromo-4-iodobenzene (10.52g, 37.2mmol), $Pd(PPh_3)_4$ (1.43g, 1.2mmol), K_2CO_3 (10.28g, 74.4mmol), THF, 물을 상기 Sub 1-B1 합성법을 사용하여 생성물 10.78g (수율: 79%)를 얻었다.

[151] **3. Sub 1-B14의 합성**

[152] <반응식 5>

[153]

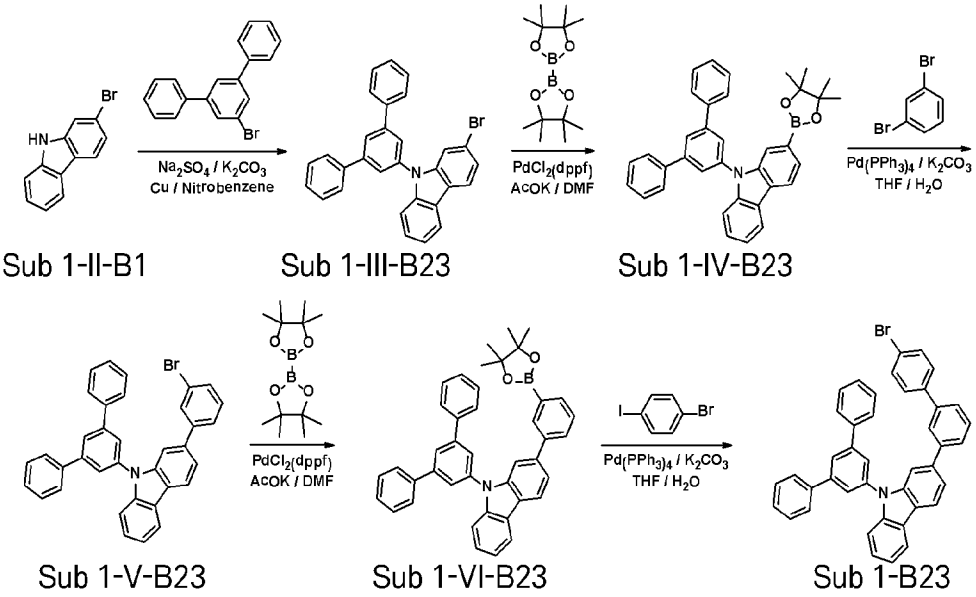


[154] 상기 합성에서 얻어진 Sub 1-VI-B1 (7.65g, 17.2mmol)에 2-bromo-6-iodonaphthalene (8.58g, 25.8mmol), $Pd(PPh_3)_4$ (0.99g, 0.9mmol), K_2CO_3 (7.12g, 51.5mmol), THF, 물을 상기 Sub 1-B1 합성법을 사용하여 생성물 6.85g (수율: 76%)를 얻었다.

[155] **4. Sub 1-B23의 합성**

[156] <반응식 6>

[157]



[158] **(1) Sub 1-III-B23 합성**

[159] 상기 합성에서 얻어진 Sub 1-II-B1 (59.34g, 241.1mmol)에 5'-bromo-1,1':3',1''-terphenyl (111.83g, 361.7mmol), Na_2SO_4 (34.25g, 241.1mmol), K_2CO_3 (33.33g, 241.1mmol), Cu (4.6g, 72.3mmol), nitrobenzene을 상기 Sub 1-III-B1 합성법을 사용하여 생성물 75.49g (수율: 66%)를 얻었다.

[160] **(2) Sub 1-IV-B23 합성**

[161] 상기 합성에서 얻어진 Sub 1-III-B23 (75.49g, 159.1mmol)에 Bis(pinacolato)diboron (44.45g, 175mmol), $Pd(dppf)Cl_2$ (3.9g, 4.8mmol), KOAc (46.85g, 477.4mmol), DMF를 상기 Sub 1-IV-B1 합성법을 사용하여 생성물 64.72g (수율: 78%)를 얻었다.

[162] **(3) Sub 1-V-B23 합성**

[163] 상기 합성에서 얻어진 Sub 1-IV-B23 (64.72g, 124.1mmol)에 1,3-dibromobenzene (43.92g, 186.2mmol), $Pd(PPh_3)_4$ (7.17g, 6.2mmol), K_2CO_3 (51.46g, 372.3mmol), THF, 물을 상기 Sub 1-V-B1 합성법을 사용하여 생성물 49.19g (수율: 72%)를 얻었다.

[164] **(4) Sub 1-VI-B23 합성**

[165] 상기 합성에서 얻어진 Sub 1-V-B23 (49.19g, 89.4mmol)에 Bis(pinacolato)diboron (24.96g, 98.3mmol), $Pd(dppf)Cl_2$ (2.19g, 2.7mmol), KOAc(26.31g, 268.1mmol), DMF를 상기 Sub 1-VI-B1 합성법을 사용하여 생성물 42.72g (수율: 80%)를 얻었다.

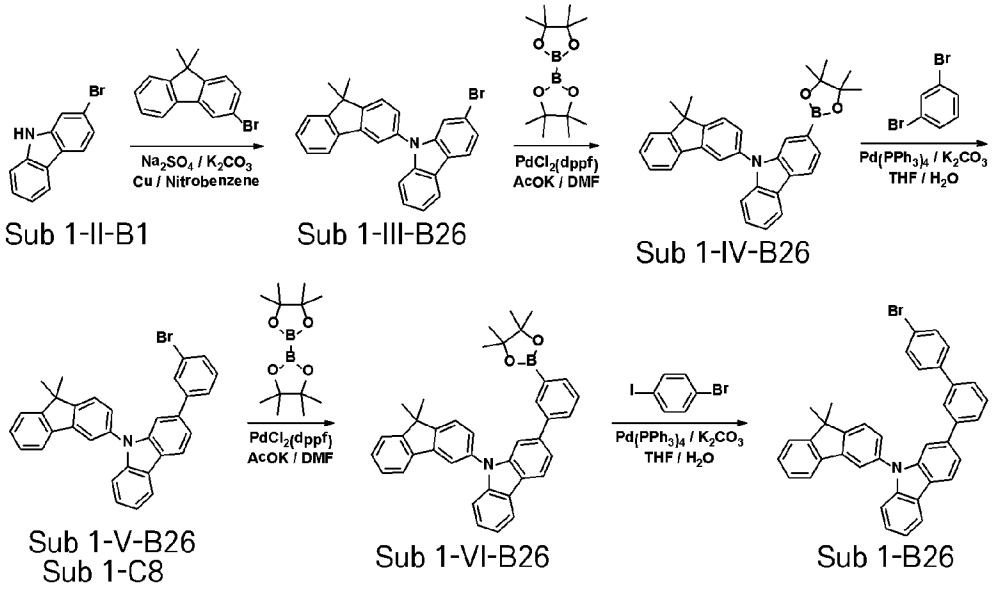
[166] **(5) Sub 1-B23 합성**

[167] 상기 합성에서 얻어진 Sub 1-VI-B23 (12.61g, 21.1mmol)에 1-bromo-4-iodobenzene (8.95g, 31.7mmol), $Pd(PPh_3)_4$ (1.22g, 1.1mmol), K_2CO_3 (8.75g, 63.3mmol), THF, 물을 상기 Sub 1-B1 합성법을 사용하여 생성물 8.46g (수율: 64%)를 얻었다.

[168] **5. Sub 1-B26의 합성**

[169] <반응식 7>

[170]



[171] **(1) Sub 1-III-B26 합성**

[172] 상기 합성에서 얻어진 Sub 1-II-B1 (41.89g, 170.2mmol)에 3-bromo-9,9-dimethyl-9*H*-fluorene (69.75g, 255.3mmol), Na_2SO_4 (24.18g, 170.2mmol), K_2CO_3 (23.53g, 170.2mmol), Cu (3.25g, 51.1mmol), nitrobenzene을 상기 Sub 1-III-B1 합성법을 사용하여 생성물 55.96g (수율: 75%)를 얻었다.

[173] **(2) Sub 1-IV-B26 합성**

[174] 상기 합성에서 얻어진 Sub 1-III-B26 (55.96g, 127.7mmol)에 Bis(pinacolato)diboron (35.66g, 140.4mmol), $Pd(dppf)Cl_2$ (3.13g, 3.8mmol), KOAc (37.58g, 383mmol), DMF를 상기 Sub 1-IV-B1 합성법을 사용하여 생성물 52.05g (수율: 84%)를 얻었다.

[175] **(3) Sub 1-V-B26(Sub 1-C8) 합성**

[176] 상기 합성에서 얻어진 Sub 1-IV-B26 (52.05g, 107.2mmol)에 1,3-dibromobenzene (37.94g, 160.8mmol), $Pd(PPh_3)_4$ (6.2g, 5.4mmol), K_2CO_3 (44.46g, 321.7mmol), THF, 물을 상기 Sub 1-V-B1 합성법을 사용하여 생성물 39.72g (수율: 72%)를 얻었다.

[177] **(4) Sub 1-VI-B26 합성**

[178] 상기 합성에서 얻어진 Sub 1-V-B26 (39.72g, 77.2mmol)에 Bis(pinacolato)diboron (21.57g, 84.9mmol), $Pd(dppf)Cl_2$ (1.89g, 2.3mmol), KOAc(22.73g, 231.6mmol), DMF를 상기 Sub 1-VI-B1 합성법을 사용하여 생성물 36.85g (수율: 85%)를 얻었다.

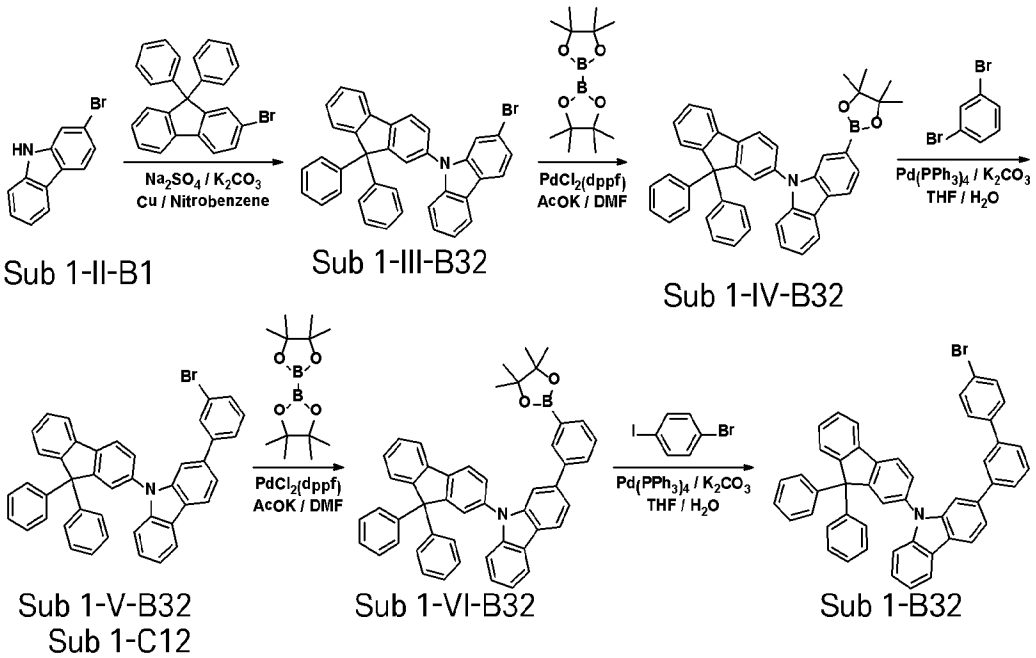
[179] **(5) Sub 1-B26 합성**

[180] 상기 합성에서 얻어진 Sub 1-VI-B26 (9.87g, 17.6mmol)에 1-bromo-4-iodobenzene (7.46g, 26.4mmol), $Pd(PPh_3)_4$ (1.02g, 0.9mmol), K_2CO_3 (7.29g, 52.7mmol), THF, 물을 상기 Sub 1-B1 합성법을 사용하여 생성물 8.41g (수율: 81%)를 얻었다.

[181] **6. Sub 1-B32의 합성**

[182] <반응식 8>

[183]



[184] **(1) Sub 1-III-B32 합성**

[185] 상기 합성에서 얻어진 Sub 1-II-B1 (72.54g, 294.8mmol)에 2-bromo-9,9-diphenyl-9*H*-fluorene (175.67g, 442.1mmol), Na_2SO_4 (41.87g, 294.8mmol), K_2CO_3 (40.74g, 294.8mmol), Cu (5.62g, 88.4mmol), nitrobenzene을 상기 Sub 1-III-B1 합성법을 사용하여 생성물 97.82g (수율: 59%)를 얻었다.

[186] **(2) Sub 1-IV-B32 합성**

[187] 상기 합성에서 얻어진 Sub 1-III-B32 (97.82g, 173.9mmol)에 Bis(pinacolato)diboron (48.58g, 191.3mmol), $Pd(dppf)Cl_2$ (4.26g, 5.2mmol), KOAc

(51.2g, 521.7mmol), DMF를 상기 Sub 1-IV-B1 합성법을 사용하여 생성물 83.74g (수율: 79%)를 얻었다.

[188] **(3) Sub 1-V-B32(Sub 1-C12) 합성**

[189] 상기 합성에서 얻어진 Sub 1-IV-B32 (83.74g, 137.4mmol)에 1,3-dibromobenzene (48.61g, 206.1mmol), $Pd(PPh_3)_4$ (7.94g, 6.9mmol), K_2CO_3 (56.96g, 412.1mmol), THF, 물을 상기 Sub 1-V-B1 합성법을 사용하여 생성물 64.04g (수율: 73%)를 얻었다.

[190] **(4) Sub 1-VI-B32 합성**

[191] 상기 합성에서 얻어진 Sub 1-V-B32 (64.04g, 100.3mmol)에 Bis(pinacolato)diboron (28.01g, 110.3mmol), $Pd(dppf)Cl_2$ (2.46g, 3mmol), KOAc (29.53g, 300.9mmol), DMF를 상기 Sub 1-VI-B1 합성법을 사용하여 생성물 52.26g (수율: 76%)를 얻었다.

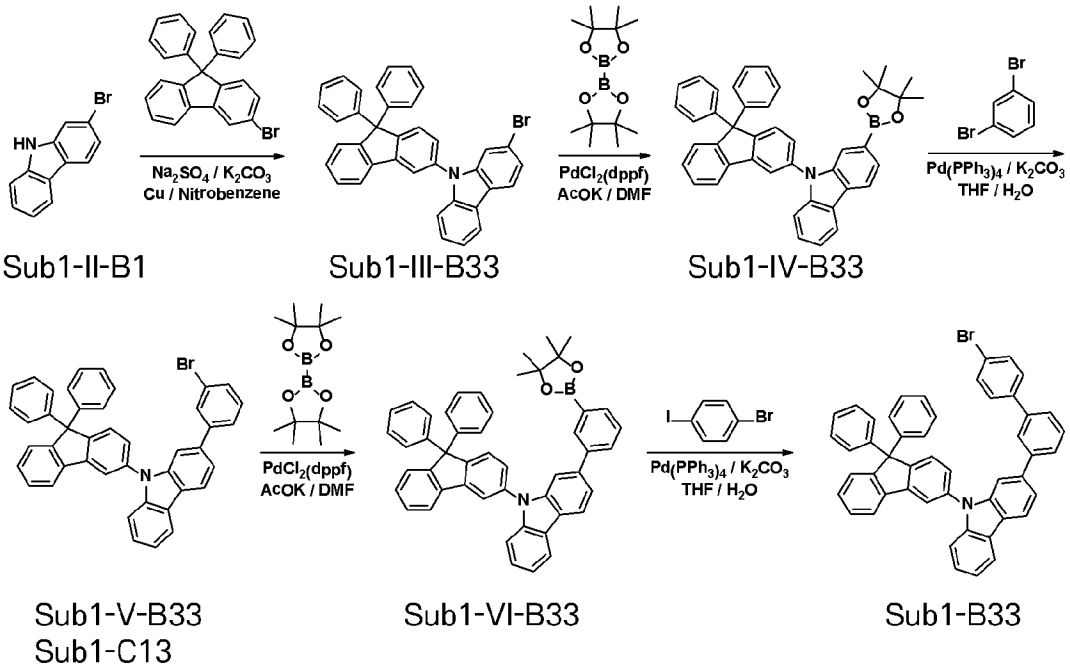
[192] **(5) Sub 1-B32 합성**

[193] 상기 합성에서 얻어진 Sub 1-VI-B32 (17.43g, 25.4mmol)에 1-bromo-4-iodobenzene (10.79g, 38.1mmol), $Pd(PPh_3)_4$ (1.47g, 1.3mmol), K_2CO_3 (10.54g, 76.3mmol), THF, 물을 상기 Sub 1-B1 합성법을 사용하여 생성물 11.08g (수율: 61%)를 얻었다.

[194] **7. Sub 1-B33의 합성**

[195] <반응식 9>

[196]



[197] **(1) Sub 1-III-B33 합성**

[198] 상기 합성에서 얻어진 Sub 1-II-B1 (67.82g, 275.6mmol)에 3-bromo-9,9-diphenyl-9*H*-fluorene (164.24g, 413.4mmol), Na_2SO_4 (39.14g, 275.6mmol), K_2CO_3 (38.09g, 275.6mmol), Cu (5.25g, 82.7mmol), nitrobenzene을 상기 Sub 1-III-B1 합성법을 사용하여 생성물 96.11g (수율: 62%)를 얻었다.

[199] **(2) Sub 1-IV-B33 합성**

[200] 상기 합성에서 얻어진 Sub 1-III-B33 (96.11g, 170.9mmol)에 Bis(pinacolato)diboron (47.73g, 187.9mmol), $Pd(dppf)Cl_2$ (4.19g, 5.1mmol), KOAc (50.31g, 512.6mmol), DMF를 상기 Sub 1-IV-B1 합성법을 사용하여 생성물 79.15g (수율: 76%)를 얻었다.

[201] **(3) Sub 1-V-B33(Sub 1-C13) 합성**

[202] 상기 합성에서 얻어진 Sub 1-IV-B33 (79.15g, 129.8mmol)에 1,3-dibromobenzene (45.95g, 194.8mmol), $Pd(PPh_3)_4$ (7.5g, 6.5mmol), K_2CO_3 (53.84g, 389.5mmol), THF, 물을 상기 Sub 1-V-B1 합성법을 사용하여 생성물 58.87g (수율: 71%)를 얻었다.

[203] **(4) Sub 1-VI-B33 합성**

[204] 상기 합성에서 얻어진 Sub 1-V-B33 (58.87g, 92.2mmol)에 Bis(pinacolato)diboron (25.75g, 101.4mmol), $Pd(dppf)Cl_2$ (2.26g, 2.8mmol), KOAc(27.14g, 276.6mmol), DMF를 상기 Sub 1-VI-B1 합성법을 사용하여 생성물 48.67g (수율: 77%)를 얻었다.

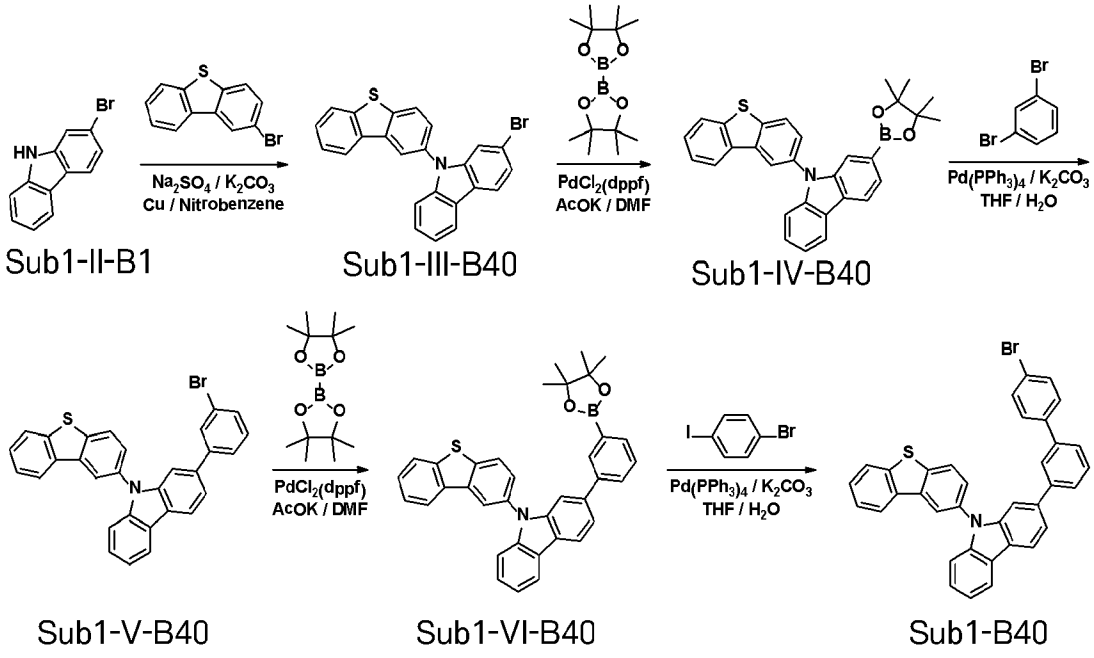
[205] **(5) Sub 1-B33 합성**

[206] 상기 합성에서 얻어진 Sub 1-VI-B33 (14.61g, 21.3mmol)에 1-bromo-4-iodobenzene (9.04g, 32mmol), $Pd(PPh_3)_4$ (1.23g, 1.1mmol), K_2CO_3 (8.83g, 63.9mmol), THF, 물을 상기 Sub 1-B1 합성법을 사용하여 생성물 9.75g (수율: 64%)를 얻었다.

[207] **8. Sub 1-B40의 합성**

[208] <반응식 10>

[209]



[210] **(1) Sub 1-III-B40 합성**

[211] 상기 합성에서 얻어진 Sub 1-II-B1 (53.61g, 217.8mmol)에 2-bromodibenzo[*b*,*d*

]thiophene (85.99g, 326.8mmol), Na_2SO_4 (30.94g, 217.8mmol), K_2CO_3 (30.11g, 217.8mmol), Cu (4.15g, 65.4mmol), nitrobenzene을 상기 Sub 1-III-B1 합성법을 사용하여 생성물 66.25g (수율: 71%)를 얻었다.

[212] **(2) Sub 1-IV-B40 합성**

[213] 상기 합성에서 얻어진 Sub 1-III-B40 (66.25g, 154.7mmol)에 Bis(pinacolato)diboron (43.2g, 170.1mmol), Pd(dppf)Cl_2 (3.79g, 4.6mmol), KOAc (45.54g, 464mmol), DMF를 상기 Sub 1-IV-B1 합성법을 사용하여 생성물 58.82g (수율: 80%)를 얻었다.

[214] **(3) Sub 1-V-B40 합성**

[215] 상기 합성에서 얻어진 Sub 1-IV-B40 (58.82g, 123.7mmol)에 1,3-dibromobenzene (43.78g, 185.6mmol), Pd(PPh_3)$_4$ (7.15g, 6.2mmol), K_2CO_3 (51.3g, 371.2mmol), THF, 물을 상기 Sub 1-V-B1 합성법을 사용하여 생성물 47.43g (수율: 76%)를 얻었다.

[216] **(4) Sub 1-VI-B40 합성**

[217] 상기 합성에서 얻어진 Sub 1-V-B40 (47.43g, 94mmol)에 Bis(pinacolato)diboron (26.26g, 103.4mmol), Pd(dppf)Cl_2 (2.3g, 2.8mmol), KOAc(27.68g, 282.1mmol), DMF를 상기 Sub 1-VI-B1 합성법을 사용하여 생성물 42.52g (수율: 82%)를 얻었다.

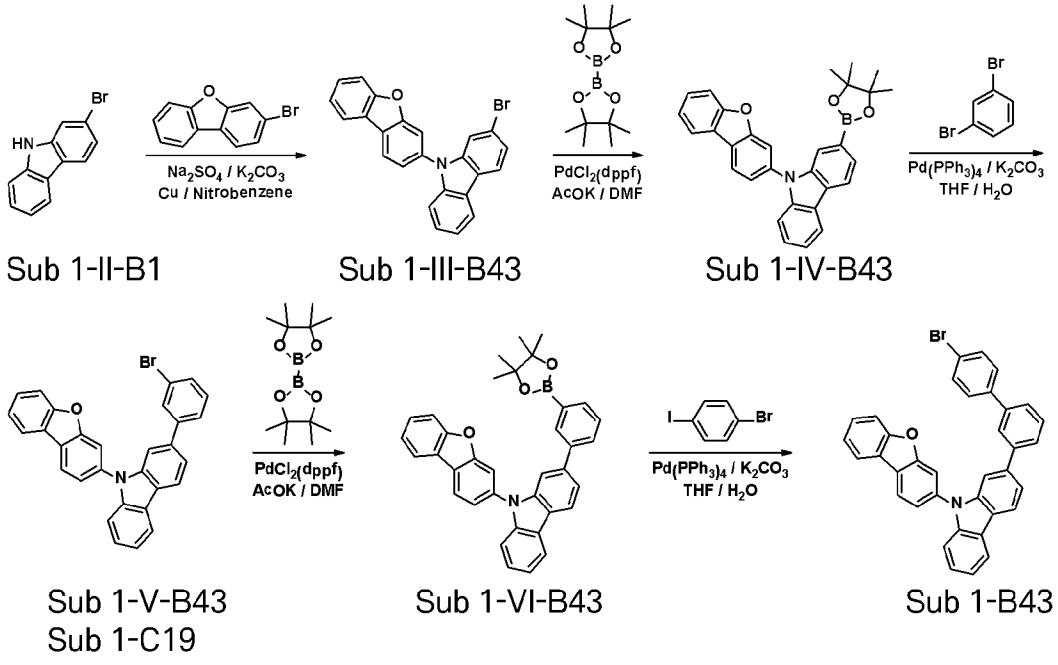
[218] **(5) Sub 1-B40 합성**

[219] 상기 합성에서 얻어진 Sub 1-VI-B40 (9.54g, 17.3mmol)에 1-bromo-4-iodobenzene (7.34g, 25.9mmol), Pd(PPh_3)$_4$ (1g, 0.9mmol), K_2CO_3 (7.17g, 51.9mmol), THF, 물을 상기 Sub 1-B1 합성법을 사용하여 생성물 7.73g (수율: 77%)를 얻었다.

[220] **9. Sub 1-B43의 합성**

[221] <반응식 11>

[222]



[223] **(1) Sub 1-III-B43 합성**

[224] 상기 합성에서 얻어진 Sub 1-II-B1 (50.34g, 204.6mmol)에 3-bromodibenzo[*b*,*d*]furan (75.81g, 306.8mmol), Na_2SO_4 (29.05g, 204.6mmol), K_2CO_3 (28.27g, 204.6mmol), Cu (3.9g, 61.4mmol), nitrobenzene을 상기 Sub 1-III-B1 합성법을 사용하여 생성물 64.94g (수율: 77%)를 얻었다.

[225] **(2) Sub 1-IV-B43 합성**

[226] 상기 합성에서 얻어진 Sub 1-III-B43 (64.94g, 157.5mmol)에 Bis(pinacolato)diboron (44g, 173.3mmol), Pd(dppf)Cl_2 (3.86g, 4.7mmol), KOAc (46.38g, 472.5mmol), DMF를 상기 Sub 1-IV-B1 합성법을 사용하여 생성물 62.22g (수율: 86%)를 얻었다.

[227] **(3) Sub 1-V-B43(Sub 1-C19) 합성**

[228] 상기 합성에서 얻어진 Sub 1-IV-B43 (62.22g, 135.5mmol)에 1,3-dibromobenzene (47.93g, 203.2mmol), Pd(PPh_3)$_4$ (7.83g, 6.8mmol), K_2CO_3 (56.16g, 406.4mmol), THF, 물을 상기 Sub 1-V-B1 합성법을 사용하여 생성물 46.97g (수율: 71%)를 얻었다.

[229] **(4) Sub 1-VI-B43 합성**

[230] 상기 합성에서 얻어진 Sub 1-V-B43 (46.97g, 96.2mmol)에 Bis(pinacolato)diboron (26.87g, 105.8mmol), Pd(dppf)Cl_2 (2.36g, 2.9mmol), KOAc(28.32g, 288.5mmol), DMF를 상기 Sub 1-VI-B1 합성법을 사용하여 생성물 40.68g (수율: 79%)를 얻었다.

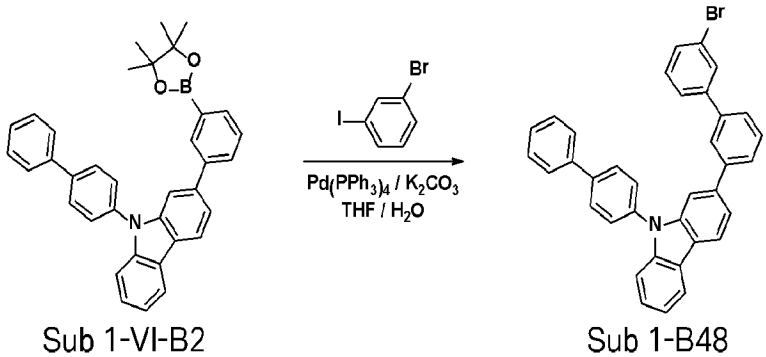
[231] **(5) Sub 1-B43 합성**

[232] 상기 합성에서 얻어진 Sub 1-VI-B43 (11.05g, 20.6mmol)에 1-bromo-4-iodobenzene (8.76g, 31mmol), Pd(PPh_3)$_4$ (1.19g, 1mmol), K_2CO_3 (8.56g, 61.9mmol), THF, 물을 상기 Sub 1-B1 합성법을 사용하여 생성물 9.2g (수율: 79%)를 얻었다.

[233] **10. Sub 1-B48의 합성**

[234] <반응식 12>

[235]

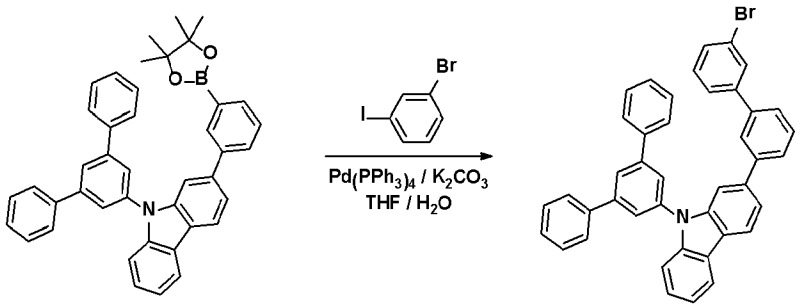


[236] 상기 합성에서 얻어진 Sub 1-VI-B2 (9.86g, 18.9mmol)에 1-bromo-3-iodobenzene (8.02g, 28.4mmol), Pd(PPh_3)$_4$ (1.09g, 0.9mmol), K_2CO_3 (7.84g, 56.7mmol), THF, 물을 상기 Sub 1-B1 합성법을 사용하여 생성물 7.91g (수율: 76%)를 얻었다.

[237] **11. Sub 1-B54의 합성**

[238] <반응식 13>

[239]



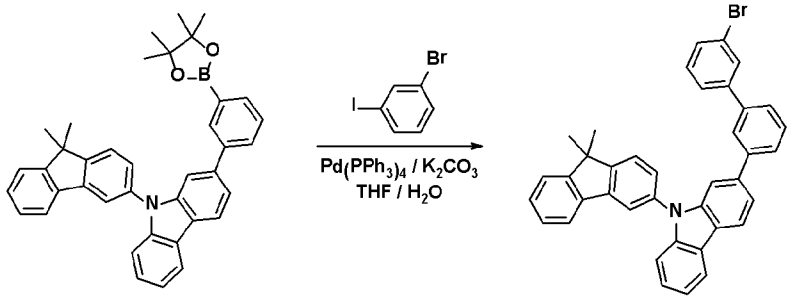
Sub 1-VI-B23 Sub 1-B54

[240] 상기 합성에서 얻어진 Sub 1-VI-B23 (12.68g, 21.2mmol)에 1-bromo-3-iodobenzene (9g, 31.8mmol), $Pd(PPh_3)_4$ (1.23g, 1.1mmol), K_2CO_3 (8.8g, 63.7mmol), THF, 물을 상기 Sub 1-B1 합성법을 사용하여 생성물 8.24g (수율: 62%)를 얻었다.

[241] **12. Sub 1-B58의 합성**

[242] <반응식 14>

[243]



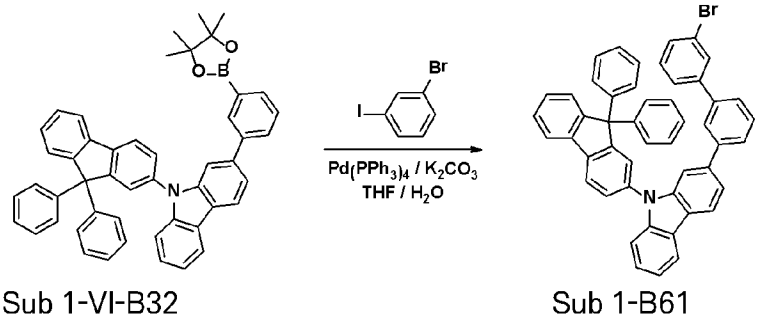
Sub 1-VI-B26 Sub 1-B5

[244] 상기 합성에서 얻어진 Sub 1-VI-B26 (12.17g, 21.7mmol)에 1-bromo-3-iodobenzene (9.2g, 32.5mmol), $Pd(PPh_3)_4$ (1.25g, 1.1mmol), K_2CO_3 (8.99g, 65mmol), THF, 물을 상기 Sub 1-B1 합성법을 사용하여 생성물 9.34g (수율: 73%)를 얻었다.

[245] **13. Sub 1-B61의 합성**

[246] <반응식 15>

[247]



Sub 1-VI-B32 Sub 1-B61

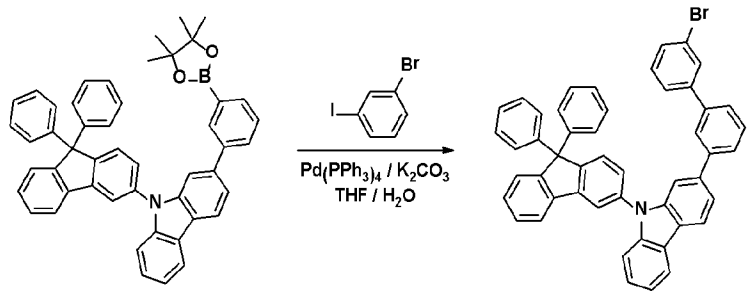
[248] 상기 합성에서 얻어진 Sub 1-VI-B32 (16.92g, 24.7mmol)에 1-bromo-3-iodobenzene (10.47g, 37mmol), $Pd(PPh_3)_4$ (1.43g, 1.2mmol), K_2CO_3

(10.23g, 74mmol), THF, 물을 상기 Sub 1-B1 합성법을 사용하여 생성물 10.05g (수율: 57%)를 얻었다.

[249] **14. Sub 1-B62의 합성**

[250] <반응식 16>

[251]



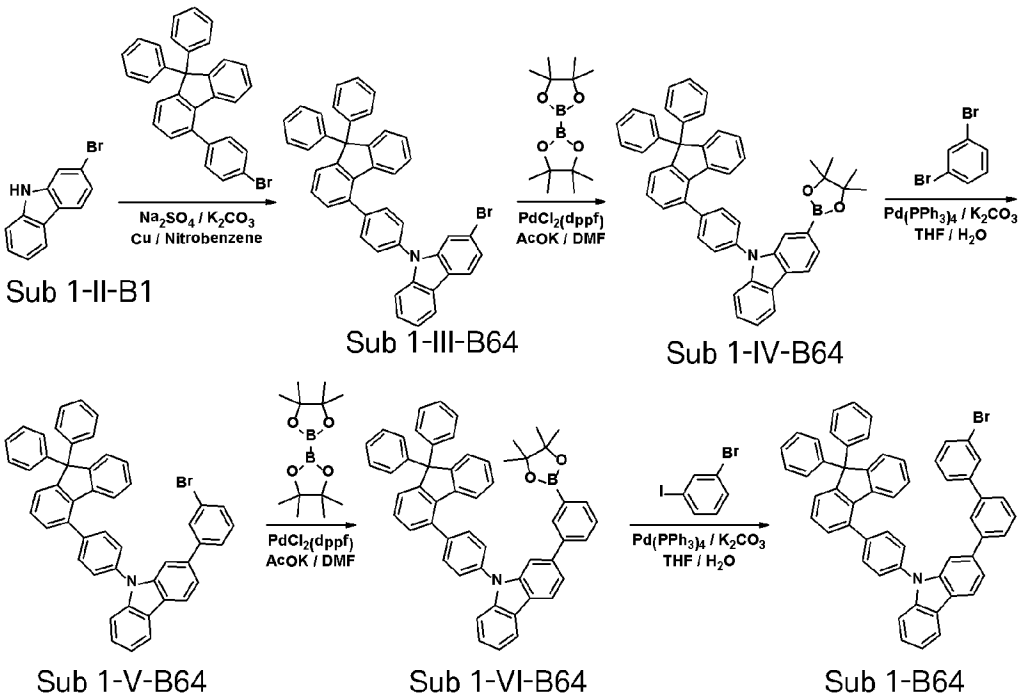
Sub 1-VI-B33 Sub 1-B62

[252] 상기 합성에서 얻어진 Sub 1-VI-B33 (16.64g, 24.3mmol)에 1-bromo-3-iodobenzene (10.3g, 36.4mmol), $Pd(PPh_3)_4$ (1.4g, 1.2mmol), K_2CO_3 (10.06g, 72.8mmol), THF, 물을 상기 Sub 1-B1 합성법을 사용하여 생성물 10.41g (수율: 60%)를 얻었다.

[253] **15. Sub 1-B64의 합성**

[254] <반응식 17>

[255]



Sub 1-II-B1 Sub 1-III-B64 Sub 1-IV-B64

Sub 1-V-B64 Sub 1-VI-B64 Sub 1-B64

[256] **(1) Sub 1-III-B64 합성**

[257] 상기 합성에서 얻어진 Sub 1-II-B1 (30.46g, 123.8mmol)에 4-(4-bromophenyl)-9,9-diphenyl-9*H*-fluorene (87.89g, 185.7mmol), Na_2SO_4 (17.58g, 123.8mmol), K_2CO_3 (17.11g, 123.8mmol), Cu (2.36g, 37.1mmol), nitrobenzene을 상기 Sub 1-III-B1 합성법을 사용하여 생성물 41.89g (수율: 53%)를 얻었다.

[258] **(2) Sub 1-IV-B64 합성**

[259] 상기 합성에서 얻어진 Sub 1-III-B64 (41.89g, 65.6mmol)에 Bis(pinacolato)diboron (18.32g, 72.2mmol), $Pd(dppf)Cl_2$ (1.61g, 2mmol), KOAc(19.31g, 196.8mmol), DMF를 상기 Sub 1-IV-B1 합성법을 사용하여 생성물 36.88g (수율: 82%)를 얻었다.

[260] **(3) Sub 1-V-B64 합성**

[261] 상기 합성에서 얻어진 Sub 1-IV-B64 (36.88g, 53.8mmol)에 1,3-dibromobenzene (19.03g, 80.7mmol), $Pd(PPh_3)_4$ (3.11g, 2.7mmol), K_2CO_3 (22.3g, 161.4mmol), THF, 물을 상기 Sub 1-V-B1 합성법을 사용하여 생성물 24.99g (수율: 65%)를 얻었다.

[262] **(4) Sub 1-VI-B64 합성**

[263] 상기 합성에서 얻어진 Sub 1-V-B64 (24.99g, 35mmol)에 Bis(pinacolato)diboron (9.77g, 38.5mmol), $Pd(dppf)Cl_2$ (0.86g, 1mmol), KOAc(10.29g, 104.9mmol), DMF를 상기 Sub 1-VI-B1 합성법을 사용하여 생성물 21.31g (수율: 80%)를 얻었다.

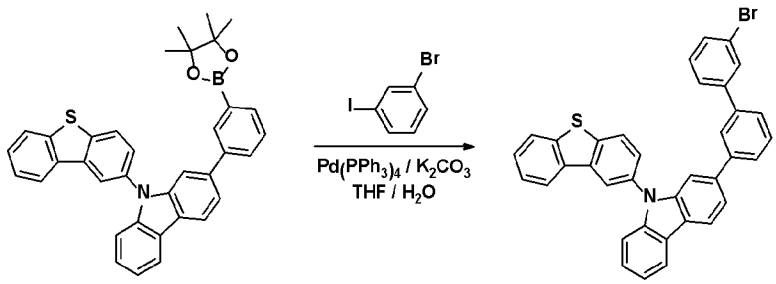
[264] **(5)Sub 1-B64 합성**

[265] 상기 합성에서 얻어진 Sub 1-VI-B64 (19.88g, 26.1mmol)에 1-bromo-4-iodobenzene (11.07g, 39.1mmol), $Pd(PPh_3)_4$ (1.51g, 1.3mmol), K_2CO_3 (10.82g, 78.3mmol), THF, 물을 상기 Sub 1-B1 합성법을 사용하여 생성물 10.73g (수율: 52%)를 얻었다.

[266] **16. Sub 1-B69의 합성**

[267] <반응식 18>

[268]



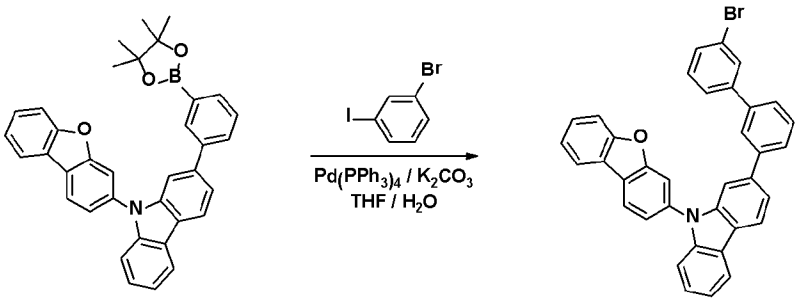
Sub 1-VI-B40 Sub 1-B69

[269] 상기 합성에서 얻어진 Sub 1-VI-B40 (14.29g, 25.9mmol)에 1-bromo-3-iodobenzene (11g, 38.9mmol), $Pd(PPh_3)_4$ (1.5g, 1.3mmol), K_2CO_3 (10.74g, 77.7mmol), THF, 물을 상기 Sub 1-B1 합성법을 사용하여 생성물 11.88g (수율: 79%)를 얻었다.

[270] **17. Sub 1-B72의 합성**

[271] <반응식 19>

[272]



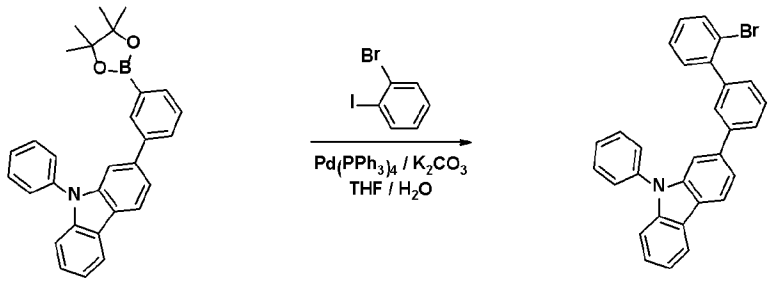
Sub 1-VI-B43 Sub 1-B72

[273] 상기 합성에서 얻어진 Sub 1-VI-B43 (14.17g, 26.5mmol)에 1-bromo-3-iodobenzene (11.23g, 39.7mmol), $Pd(PPh_3)_4$ (1.53g, 1.3mmol), K_2CO_3 (10.97g, 79.4mmol), THF, 물을 상기 Sub 1-B1 합성법을 사용하여 생성물 10.61g (수율: 71%)를 얻었다.

[274] **18. Sub 1-B76의 합성**

[275] <반응식 20>

[276]



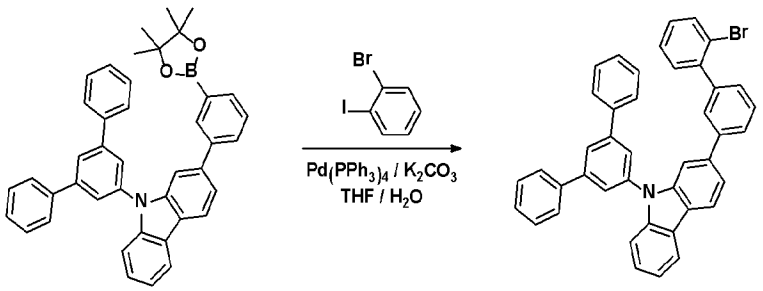
Sub 1-VI-B1 Sub 1-B76

[277] 상기 합성에서 얻어진 Sub 1-VI-B1 (11.32g, 25.4mmol)에 1-bromo-2-iodobenzene (10.79g, 38.1mmol), $Pd(PPh_3)_4$ (1.47g, 1.3mmol), K_2CO_3 (10.54g, 76.3mmol), THF, 물을 상기 Sub 1-B1 합성법을 사용하여 생성물 7.11g (수율: 59%)를 얻었다.

[278] **19. Sub 1-B84의 합성**

[279] <반응식 21>

[280]



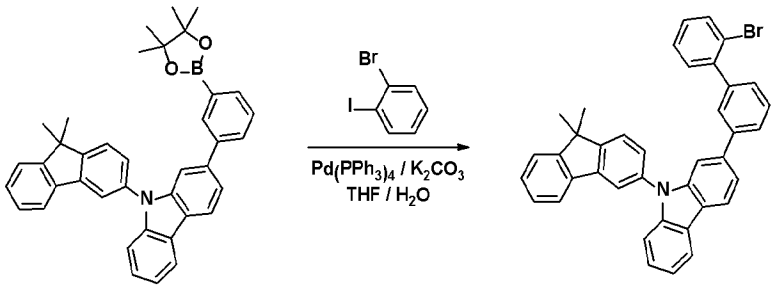
Sub 1-VI-B23 Sub 1-B84

[281] 상기 합성에서 얻어진 Sub 1-VI-B23 (16.14g, 27mmol)에 1-bromo-2-iodobenzene (11.46g, 40.5mmol), $Pd(PPh_3)_4$ (1.56g, 1.4mmol), K_2CO_3 (11.2g, 81mmol), THF, 물을 상기 Sub 1-B1 합성법을 사용하여 생성물 8.97g (수율: 53%)를 얻었다.

[282] **20. Sub 1-B87의 합성**

[283] <반응식 22>

[284]



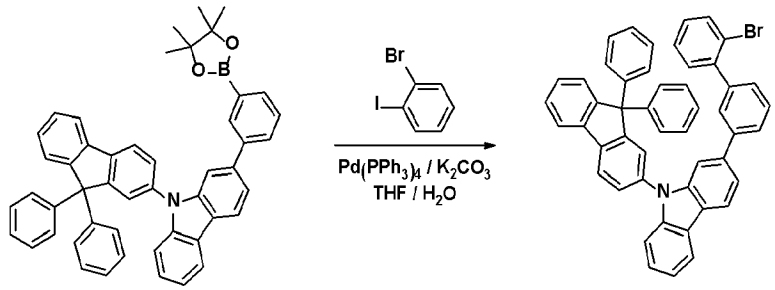
Sub 1-VI-B26 Sub 1-B87

[285] 상기 합성에서 얻어진 Sub 1-VI-B26 (12.67g, 22.6mmol)에 1-bromo-2-iodobenzene (9.57g, 33.8mmol), $Pd(PPh_3)_4$ (1.3g, 1.1mmol), K_2CO_3 (9.36g, 67.7mmol), THF, 물을 상기 Sub 1-B1 합성법을 사용하여 생성물 8.13g (수율: 61%)를 얻었다.

[286] **21. Sub 1-B90의 합성**

[287] <반응식 23>

[288]



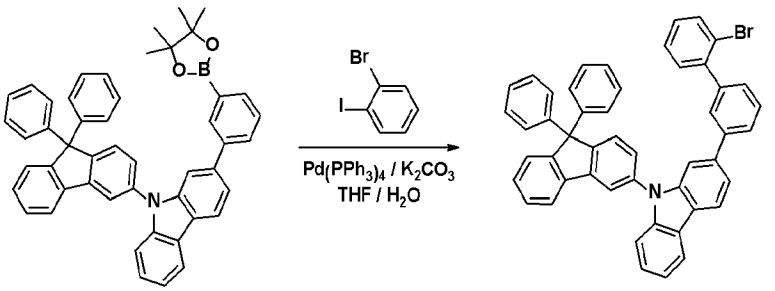
Sub 1-VI-B32 Sub 1-B90

[289] 상기 합성에서 얻어진 Sub 1-VI-B32 (17.39g, 25.4mmol)에 1-bromo-2-iodobenzene (10.76g, 38mmol), $Pd(PPh_3)_4$ (1.47g, 1.3mmol), K_2CO_3 (10.52g, 76.1mmol), THF, 물을 상기 Sub 1-B1 합성법을 사용하여 생성물 10.15g (수율: 56%)를 얻었다.

[290] **22. Sub 1-B91의 합성**

[291] <반응식 24>

[292]



Sub 1-VI-B33 Sub 1-B91

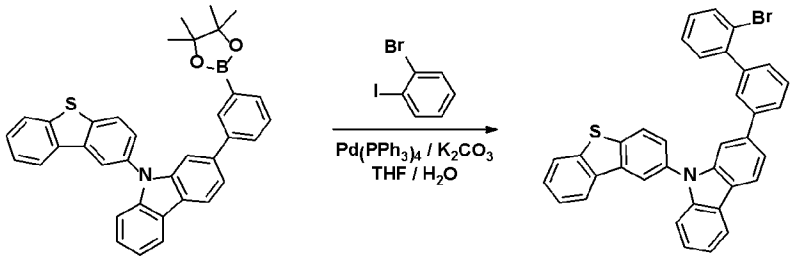
[293] 상기 합성에서 얻어진 Sub 1-VI-B33 (15.63g, 22.8mmol)에 1-bromo-2-iodobenzene (9.67g, 34.2mmol), $Pd(PPh_3)_4$ (1.32g, 1.1mmol), K_2CO_3

(9.45g, 68.4mmol), THF, 물을 상기 Sub 1-B1 합성법을 사용하여 생성물 9.78g (수율: 60%)를 얻었다.

[294] **23. Sub 1-B99의 합성**

[295] <반응식 25>

[296]



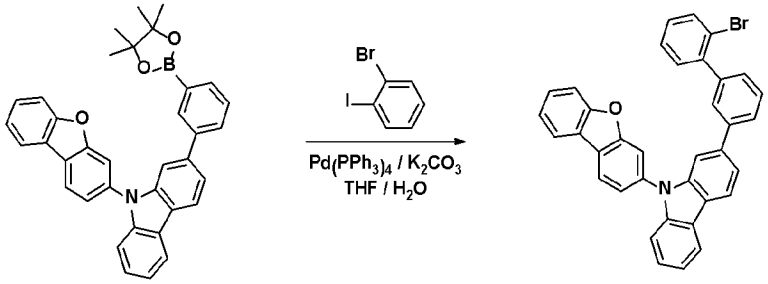
Sub 1-VI-B40 Sub 1-B99

[297] 상기 합성에서 얻어진 Sub 1-VI-B40 (17.08g, 31mmol)에 1-bromo-2-iodobenzene (13.14g, 46.5mmol), $Pd(PPh_3)_4$ (1.79g, 1.5mmol), K_2CO_3 (12.84g, 92.9mmol), THF, 물을 상기 Sub 1-B1 합성법을 사용하여 생성물 10.25g (수율: 57%)를 얻었다.

[298] **24. Sub 1-B102의 합성**

[299] <반응식 26>

[300]

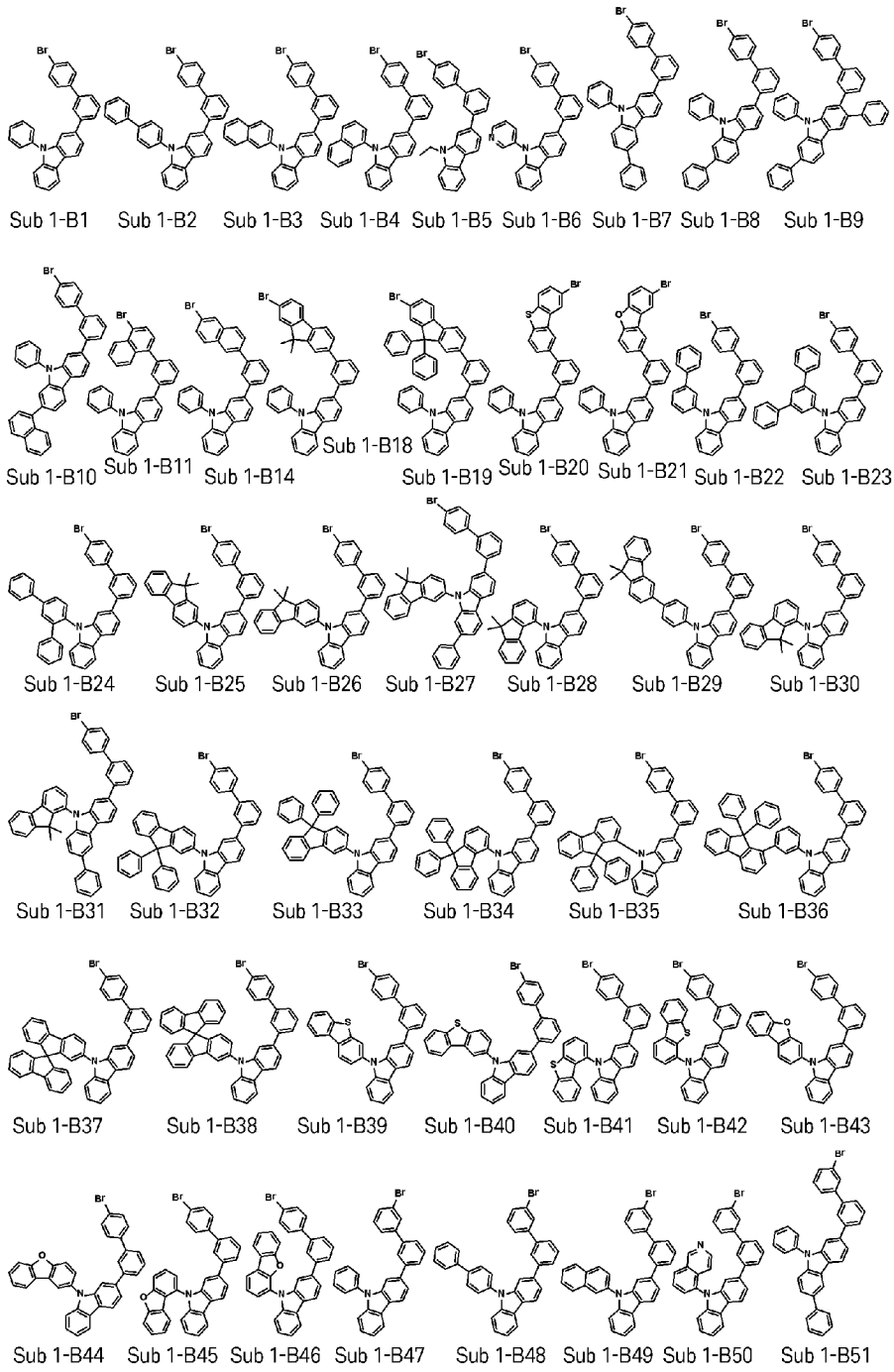


Sub 1-VI-B43 Sub 1-B102

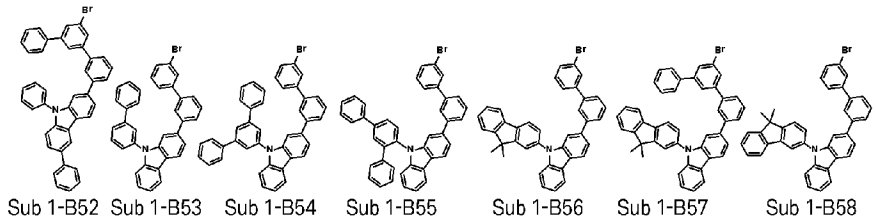
[301] 상기 합성에서 얻어진 Sub 1-VI-B43 (13.96g, 26.1mmol)에 1-bromo-2-iodobenzene (11.06g, 39.1mmol), $Pd(PPh_3)_4$ (1.51g, 1.3mmol), K_2CO_3 (10.81g, 78.2mmol), THF, 물을 상기 Sub 1-B1 합성법을 사용하여 생성물 9.12g (수율: 62%)를 얻었다.

[302] 한편, Sub 1의 예시는 아래와 같으나 이에 한정되는 것은 아니며, 이들의 FD-MS는 하기 표 1과 같다.

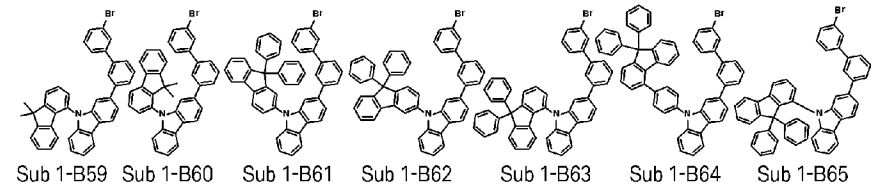
[303]


Sub 1-B1
Sub 1-B2
Sub 1-B3
Sub 1-B4
Sub 1-B5
Sub 1-B6
Sub 1-B7
Sub 1-B8
Sub 1-B9
Sub 1-B10
Sub 1-B11
Sub 1-B14
Sub 1-B18
Sub 1-B19
Sub 1-B20
Sub 1-B21
Sub 1-B22
Sub 1-B23
Sub 1-B24
Sub 1-B25
Sub 1-B26
Sub 1-B27
Sub 1-B28
Sub 1-B29
Sub 1-B30
Sub 1-B31
Sub 1-B32
Sub 1-B33
Sub 1-B34
Sub 1-B35
Sub 1-B36
Sub 1-B37
Sub 1-B38
Sub 1-B39
Sub 1-B40
Sub 1-B41
Sub 1-B42
Sub 1-B43
Sub 1-B44
Sub 1-B45
Sub 1-B46
Sub 1-B47
Sub 1-B48
Sub 1-B49
Sub 1-B50
Sub 1-B51

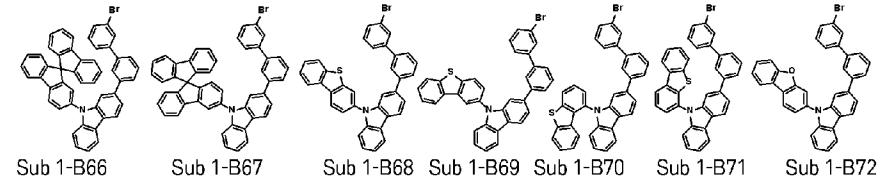
[304]



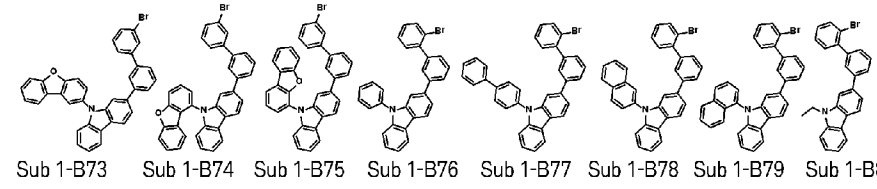
Sub 1-B52 Sub 1-B53 Sub 1-B54 Sub 1-B55 Sub 1-B56 Sub 1-B57 Sub 1-B58



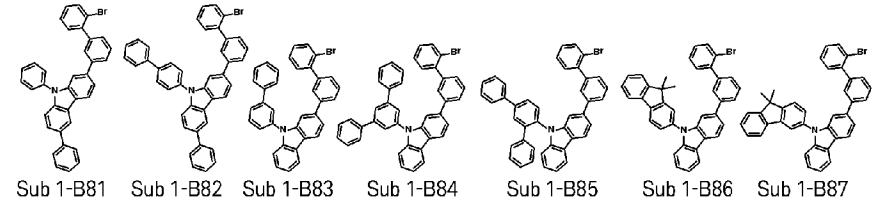
Sub 1-B59 Sub 1-B60 Sub 1-B61 Sub 1-B62 Sub 1-B63 Sub 1-B64 Sub 1-B65



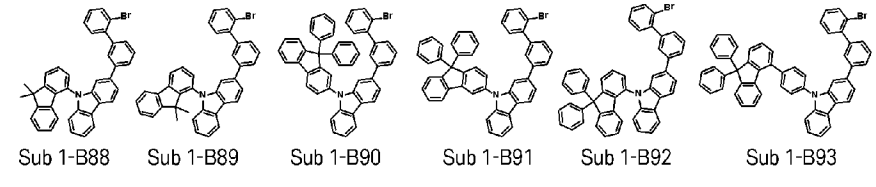
Sub 1-B66 Sub 1-B67 Sub 1-B68 Sub 1-B69 Sub 1-B70 Sub 1-B71 Sub 1-B72



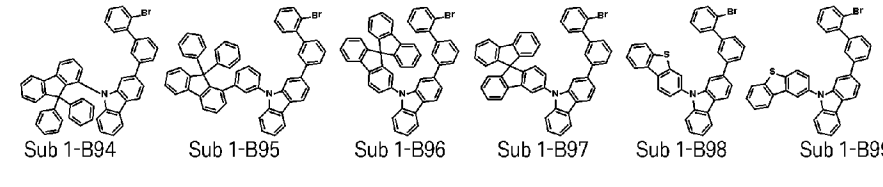
Sub 1-B73 Sub 1-B74 Sub 1-B75 Sub 1-B76 Sub 1-B77 Sub 1-B78 Sub 1-B79 Sub 1-B80



Sub 1-B81 Sub 1-B82 Sub 1-B83 Sub 1-B84 Sub 1-B85 Sub 1-B86 Sub 1-B87

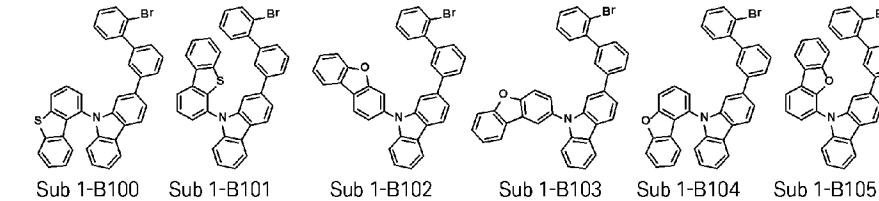


Sub 1-B88 Sub 1-B89 Sub 1-B90 Sub 1-B91 Sub 1-B92 Sub 1-B93



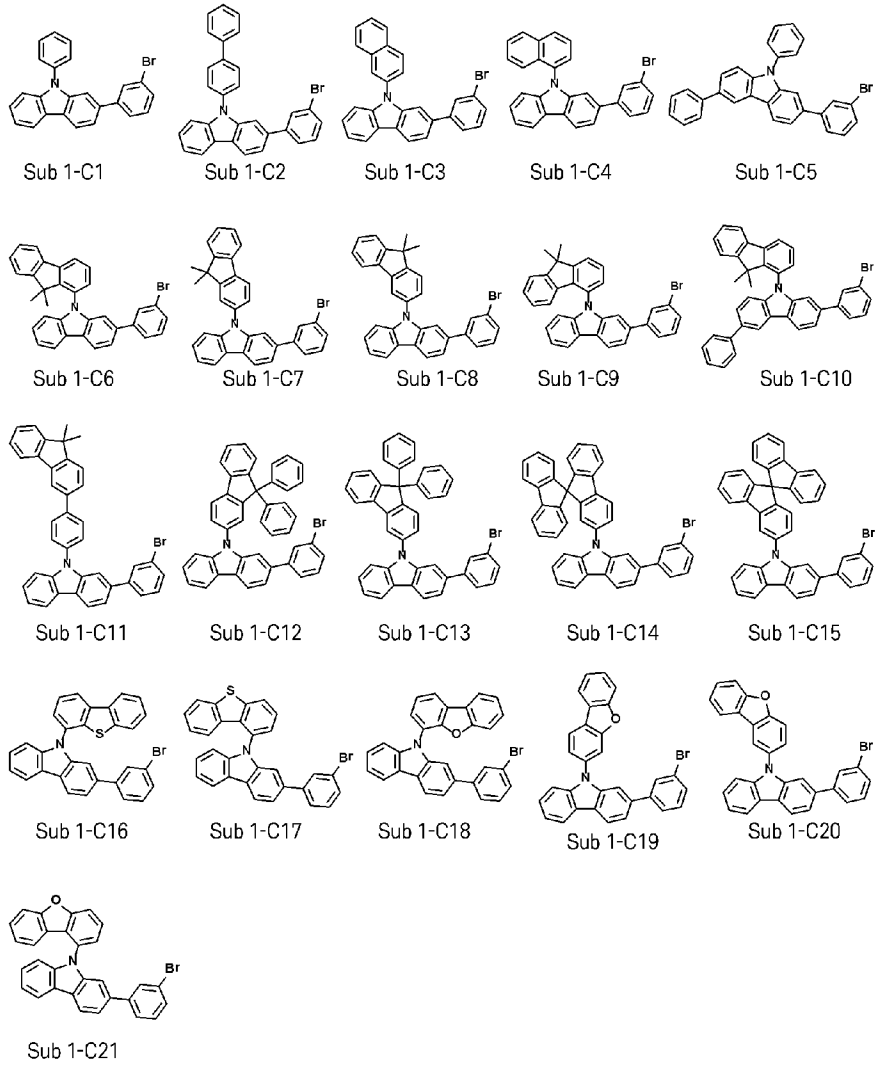
Sub 1-B94 Sub 1-B95 Sub 1-B96 Sub 1-B97 Sub 1-B98 Sub 1-B99

[305]



Sub 1-B100 Sub 1-B101 Sub 1-B102 Sub 1-B103 Sub 1-B104 Sub 1-B105

[306]


Sub 1-C1
Sub 1-C2
Sub 1-C3
Sub 1-C4
Sub 1-C5
Sub 1-C6
Sub 1-C7
Sub 1-C8
Sub 1-C9
Sub 1-C10
Sub 1-C11
Sub 1-C12
Sub 1-C13
Sub 1-C14
Sub 1-C15
Sub 1-C16
Sub 1-C17
Sub 1-C18
Sub 1-C19
Sub 1-C20
Sub 1-C21

[307] [표 1]

[308]

화합물	FD-MS	화합물	FD-MS
Sub1-B1	m/z=473.08($C_{30}H_{20}BrN$=474.39)	Sub1-B2	m/z=549.11($C_{36}H_{24}BrN$=550.49)
Sub1-B3	m/z=523.09($C_{34}H_{22}BrN$=524.45)	Sub1-B4	m/z=523.09($C_{34}H_{22}BrN$=524.45)
Sub1-B5	m/z=425.08($C_{26}H_{20}BrN$=426.35)	Sub1-B6	m/z=474.07($C_{29}H_{19}BrN_2$=475.38)
Sub1-B7	m/z=549.11($C_{36}H_{24}BrN$=550.49)	Sub1-B8	m/z=549.11($C_{36}H_{24}BrN$=550.49)
Sub1-B9	m/z=625.14($C_{42}H_{28}BrN$=626.58)	Sub1-B10	m/z=599.12($C_{40}H_{26}BrN$=600.55)
Sub1-B11	m/z=523.09($C_{34}H_{22}BrN$=524.45)	Sub1-B14	m/z=523.09($C_{34}H_{22}BrN$=524.45)
Sub1-B18	m/z=589.14($C_{39}H_{28}BrN$=590.55)	Sub1-B19	m/z=713.17($C_{49}H_{37}BrN$=714.69)
Sub1-B20	m/z=579.07($C_{36}H_{22}BrNS$=580.54)	Sub1-B21	m/z=563.09($C_{36}H_{22}BrNO$=564.47)
Sub1-B22	m/z=549.11($C_{36}H_{24}BrN$=550.49)	Sub1-B23	m/z=625.14($C_{42}H_{28}BrN$=626.58)
Sub1-B24	m/z=625.14($C_{42}H_{28}BrN$=626.58)	Sub1-B25	m/z=589.14($C_{39}H_{28}BrN$=590.55)
Sub1-B26	m/z=589.14($C_{39}H_{28}BrN$=590.55)	Sub1-B27	m/z=665.17($C_{45}H_{32}BrN$=666.65)
Sub1-B28	m/z=589.14($C_{39}H_{28}BrN$=590.55)	Sub1-B29	m/z=665.17($C_{45}H_{32}BrN$=666.65)
Sub1-B30	m/z=589.14($C_{39}H_{28}BrN$=590.55)	Sub1-B31	m/z=665.17($C_{45}H_{32}BrN$=666.65)
Sub1-B32	m/z=713.17($C_{49}H_{32}BrN$=714.69)	Sub1-B33	m/z=713.17($C_{49}H_{32}BrN$=714.69)
Sub1-B34	m/z=713.17($C_{49}H_{32}BrN$=714.69)	Sub1-B35	m/z=713.17($C_{49}H_{32}BrN$=714.69)
Sub1-B36	m/z=789.20($C_{55}H_{36}BrN$=790.79)	Sub1-B37	m/z=711.16($C_{49}H_{30}BrN$=712.67)
Sub1-B38	m/z=711.16($C_{49}H_{30}BrN$=712.67)	Sub1-B39	m/z=579.07($C_{36}H_{22}BrNS$=580.54)
Sub1-B40	m/z=579.07($C_{36}H_{22}BrNS$=580.54)	Sub1-B41	m/z=579.07($C_{36}H_{22}BrNS$=580.54)
Sub1-B42	m/z=579.07($C_{36}H_{22}BrNS$=580.54)	Sub1-B43	m/z=563.09($C_{36}H_{22}BrNO$=564.47)
Sub1-B44	m/z=563.09($C_{36}H_{22}BrNO$=564.47)	Sub1-B45	m/z=563.09($C_{36}H_{22}BrNO$=564.47)
Sub1-B46	m/z=563.09($C_{36}H_{22}BrNO$=564.47)	Sub1-B47	m/z=473.08($C_{30}H_{20}BrN$=474.39)
Sub1-B48	m/z=549.11($C_{36}H_{24}BrN$=550.49)	Sub1-B49	m/z=523.09($C_{34}H_{22}BrN$=524.45)
Sub1-B50	m/z=524.09($C_{33}H_{21}BrN_2$=525.44)	Sub1-B51	m/z=549.11($C_{36}H_{24}BrN$=550.49)
Sub1-B52	m/z=625.14($C_{42}H_{28}BrN$=626.58)	Sub1-B53	m/z=549.11($C_{36}H_{24}BrN$=550.49)
Sub1-B54	m/z=625.14($C_{42}H_{28}BrN$=626.58)	Sub1-B55	m/z=625.14($C_{42}H_{28}BrN$=626.58)
Sub1-B56	m/z=589.14($C_{39}H_{28}BrN$=590.55)	Sub1-B57	m/z=665.17($C_{45}H_{32}BrN$=666.65)
Sub1-B58	m/z=589.14($C_{39}H_{28}BrN$=590.55)	Sub1-B59	m/z=589.14($C_{39}H_{28}BrN$=590.55)
Sub1-B60	m/z=589.14($C_{39}H_{28}BrN$=590.55)	Sub1-B61	m/z=713.17($C_{49}H_{32}BrN$=714.69)
Sub1-B62	m/z=713.17($C_{49}H_{32}BrN$=714.69)	Sub1-B63	m/z=713.17($C_{49}H_{32}BrN$=714.69)
Sub1-B64	m/z=789.20($C_{55}H_{36}BrN$=790.79)	Sub1-B65	m/z=713.17($C_{49}H_{32}BrN$=714.69)
Sub1-B66	m/z=711.16($C_{49}H_{30}BrN$=712.67)	Sub1-B67	m/z=711.16($C_{49}H_{30}BrN$=712.67)
Sub1-B68	m/z=579.07($C_{36}H_{22}BrNS$=580.54)	Sub1-B69	m/z=579.07($C_{36}H_{22}BrNS$=580.54)
Sub1-B70	m/z=579.07($C_{36}H_{22}BrNS$=580.54)	Sub1-B71	m/z=579.07($C_{36}H_{22}BrNS$=580.54)
Sub1-B72	m/z=563.09($C_{36}H_{22}BrNO$=564.47)	Sub1-B73	m/z=563.09($C_{36}H_{22}BrNO$=564.47)
Sub1-B74	m/z=563.09($C_{36}H_{22}BrNO$=564.47)	Sub1-B75	m/z=563.09($C_{36}H_{22}BrNO$=564.47)
Sub1-B76	m/z=473.08($C_{30}H_{20}BrN$=474.39)	Sub1-B77	m/z=549.11($C_{36}H_{24}BrN$=550.49)

[309]

Sub1-B78	m/z=523.09($C_{34}H_{22}BrN$=524.45)	Sub1-B79	m/z=523.09($C_{34}H_{22}BrN$=524.45)
Sub1-B80	m/z=425.08($C_{26}H_{20}BrN$=426.35)	Sub1-B81	m/z=549.11($C_{36}H_{24}BrN$=550.49)
Sub1-B82	m/z=625.14($C_{42}H_{28}BrN$=626.58)	Sub1-B83	m/z=549.11($C_{36}H_{24}BrN$=550.49)
Sub1-B84	m/z=625.14($C_{42}H_{28}BrN$=626.58)	Sub1-B85	m/z=625.14($C_{42}H_{28}BrN$=626.58)
Sub1-B86	m/z=589.14($C_{39}H_{28}BrN$=590.55)	Sub1-B87	m/z=589.14($C_{39}H_{28}BrN$=590.55)
Sub1-B88	m/z=589.14($C_{39}H_{28}BrN$=590.55)	Sub1-B89	m/z=589.14($C_{39}H_{28}BrN$=590.55)
Sub1-B90	m/z=713.17($C_{49}H_{32}BrN$=714.69)	Sub1-B91	m/z=713.17($C_{49}H_{32}BrN$=714.69)
Sub1-B92	m/z=713.17($C_{49}H_{32}BrN$=714.69)	Sub1-B93	m/z=789.20($C_{55}H_{36}BrN$=790.79)
Sub1-B94	m/z=713.17($C_{49}H_{32}BrN$=714.69)	Sub1-B95	m/z=789.20($C_{55}H_{36}BrN$=790.79)
Sub1-B96	m/z=711.16($C_{49}H_{30}BrN$=712.67)	Sub1-B97	m/z=711.16($C_{49}H_{30}BrN$=712.67)
Sub1-B98	m/z=579.07($C_{36}H_{22}BrNS$=580.54)	Sub1-B99	m/z=579.07($C_{36}H_{22}BrNS$=580.54)
Sub1-B100	m/z=579.07($C_{36}H_{22}BrNS$=580.54)	Sub1-B101	m/z=579.07($C_{36}H_{22}BrNS$=580.54)
Sub1-B102	m/z=563.09($C_{36}H_{22}BrNO$=564.47)	Sub1-B103	m/z=563.09($C_{36}H_{22}BrNO$=564.47)
Sub1-B104	m/z=563.09($C_{36}H_{22}BrNO$=564.47)	Sub1-B105	m/z=563.09($C_{36}H_{22}BrNO$=564.47)
Sub1-C1	m/z=397.05($C_{24}H_{16}BrN$=398.29)	Sub1-C2	m/z=473.08($C_{30}H_{20}BrN$=474.39)
Sub1-C3	m/z=447.06($C_{28}H_{18}BrN$=448.35)	Sub1-C4	m/z=447.06($C_{28}H_{18}BrN$=448.35)
Sub1-C5	m/z=473.08($C_{30}H_{20}BrN$=474.39)	Sub1-C6	m/z=513.11($C_{33}H_{24}BrN$=514.45)
Sub1-C7	m/z=513.11($C_{33}H_{24}BrN$=514.45)	Sub1-C8	m/z=513.11($C_{33}H_{24}BrN$=514.45)
Sub1-C9	m/z=513.11($C_{33}H_{24}BrN$=514.45)	Sub1-C10	m/z=589.14($C_{39}H_{28}BrN$=590.55)
Sub1-C11	m/z=589.14($C_{39}H_{28}BrN$=590.55)	Sub1-C12	m/z=637.14($C_{43}H_{28}BrN$=638.59)
Sub1-C13	m/z=637.14($C_{43}H_{28}BrN$=638.59)	Sub1-C14	m/z=635.12($C_{43}H_{26}BrN$=636.58)
Sub1-C15	m/z=635.12($C_{43}H_{26}BrN$=636.58)	Sub1-C16	m/z=503.03($C_{30}H_{18}BrNS$=504.44)
Sub1-C17	m/z=503.03($C_{30}H_{18}BrNS$=504.44)	Sub1-C18	m/z=487.06($C_{30}H_{18}BrNO$=488.37)
Sub1-C19	m/z=487.06($C_{30}H_{18}BrNO$=488.37)	Sub1-C20	m/z=487.06($C_{30}H_{18}BrNO$=488.37)
Sub1-C21	m/z=487.06($C_{30}H_{18}BrNO$=488.37)		

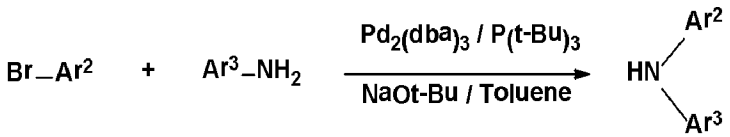
[310]

[311] **II. Sub 2의 합성**

[312] 상기 반응식 1의 Sub 2는 하기 반응식 27의 반응경로에 의해 합성될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[313] <반응식 27>

[314]



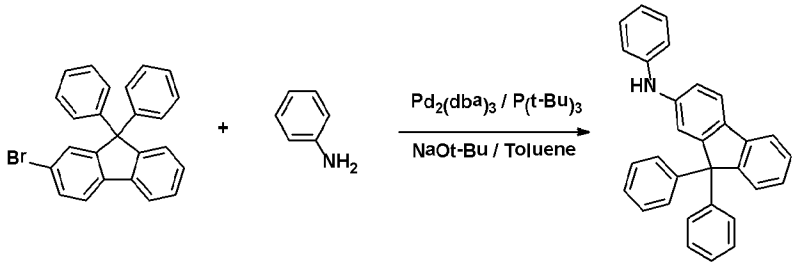
Sub 2

[315] Sub 2에 속하는 구체적 화합물의 합성예는 다음과 같다.

[316] **1. Sub 2-6의 합성**

[317] <반응식 28>

[318]



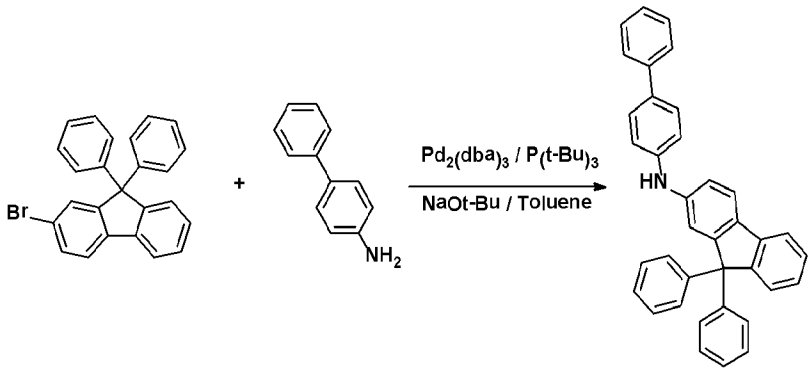
Sub 2-6

[319] 출발물질인 2-bromo-9,9-diphenyl-9*H*-fluorene (35.27g, 88.8mmol)을 둥근바닥플라스크에 toluene으로 녹인 후에, aniline (16.53g, 177.5mmol), $Pd_2(dba)_3$ (2.44g, 2.7mmol), 50% P(*t*-Bu)$_3$ (3.5ml, 7.1mmol), NaO*t*-Bu (25.6g, 266.3mmol)을 첨가하고 40℃에서 교반하였다. 반응이 완료되면 CH_2Cl_2와 물로 추출한 후 유기층을 $MgSO_4$로 건조하고 농축한 후 생성된 화합물을 silicagel column 및 재결정하여 생성물 27.27g (수율: 75%)를 얻었다.

[320] **2. Sub 2-7의 합성**

[321] <반응식 29>

[322]



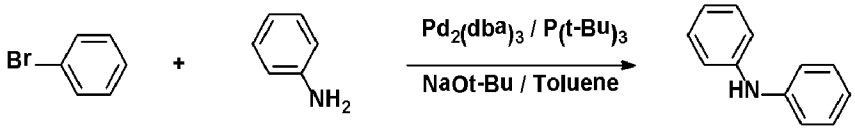
Sub 2-7

[323] 출발물질인 2-bromo-9,9-diphenyl-9*H*-fluorene (11.89g, 29.9mmol)에 [1,1'-biphenyl]-4-amine (10.13g, 59.9mmol), $Pd_2(dba)_3$ (0.82g, 0.9mmol), 50% P(*t*-Bu)$_3$ (1.2ml, 2.4mmol), NaO*t*-Bu (8.63g, 89.8mmol), toluene을 상기 Sub 2-6 합성법을 사용하여 생성물 11.04g (수율: 76%)를 얻었다.

[324] **3. Sub 2-13의 합성**

[325] <반응식 30>

[326]



Sub 2-13

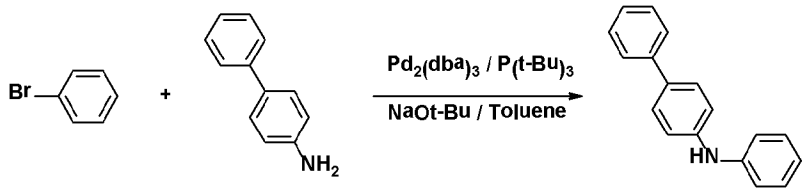
[327] 출발물질인 bromobenzene (11.16g, 71.1mmol)에 aniline (13.24g, 142.2mmol), $Pd_2(dba)_3$ (1.95g, 2.1mmol), 50% P(*t*-Bu)$_3$ (2.8ml, 5.7mmol), NaO*t*-Bu (20.49g, 213.2mmol), toluene을 상기 Sub 2-6 합성법을 사용하여 생성물 9.62g (수율:

80%)를 얻었다.

[328] **4. Sub 2-16 의 합성**

[329] <반응식 31>

[330]



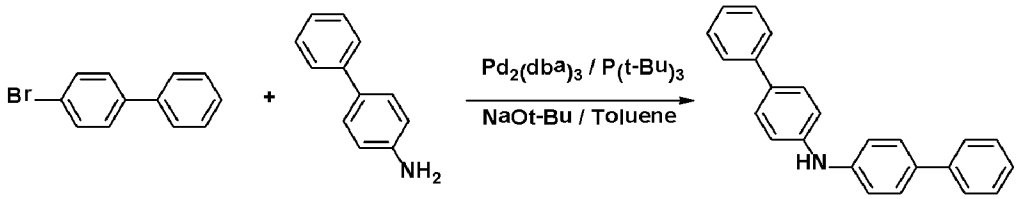
Sub 2-16

[331] 출발물질인 bromobenzene (7.61g, 48.5mmol)에 [1,1'-biphenyl]-4-amine (16.4g, 96.9mmol), $Pd_2(dba)_3$ (1.33g, 1.5mmol), 50% P(*t*-Bu)$_3$ (1.9ml, 3.9mmol), NaO*t*-Bu (13.97g, 145.4mmol), toluene을 상기 Sub 2-6 합성법을 사용하여 생성물 9.87g (수율: 83%)를 얻었다.

[332] **5. Sub 2-17의 합성**

[333] <반응식 32>

[334]



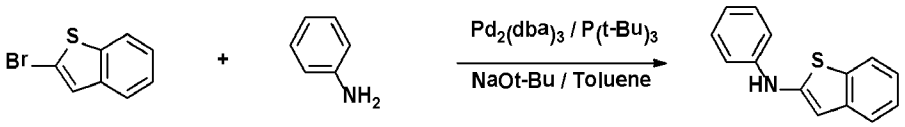
Sub 2-17

[335] 출발물질인 4-bromo-1,1'-biphenyl (9.74g, 41.8mmol)에 [1,1'-biphenyl]-4-amine (14.14g, 83.6mmol), $Pd_2(dba)_3$ (1.15g, 1.3mmol), 50% P(*t*-Bu)$_3$ (1.6ml, 3.3mmol), NaO*t*-Bu (12.05g, 125.4mmol), toluene을 상기 Sub 2-6 합성법을 사용하여 생성물 1061g (수율: 79%)를 얻었다.

[336] **6.Sub 2-39의 합성**

[337] <반응식 33>

[338]



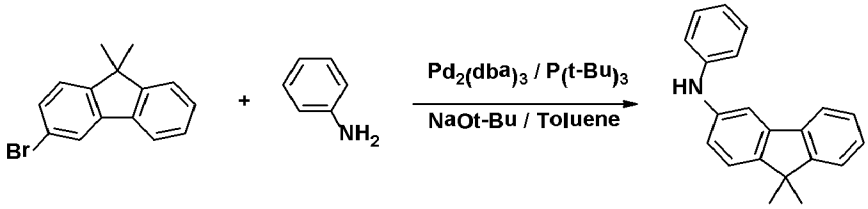
Sub 2-39

[339] 출발물질인 2-bromobenzo[*b*]thiophene (8.92g, 41.9mmol)에 aniline (7.8g, 83.7mmol), $Pd_2(dba)_3$ (1.15g, 1.3mmol), 50% P(*t*-Bu)$_3$ (1.6ml, 3.3mmol), NaO*t*-Bu (12.07g, 125.6mmol), toluene을 상기 Sub 2-6 합성법을 사용하여 생성물 6.51g (수율: 69%)를 얻었다.

[340] **7. Sub 2-67의 합성**

[341] <반응식 34>

[342]



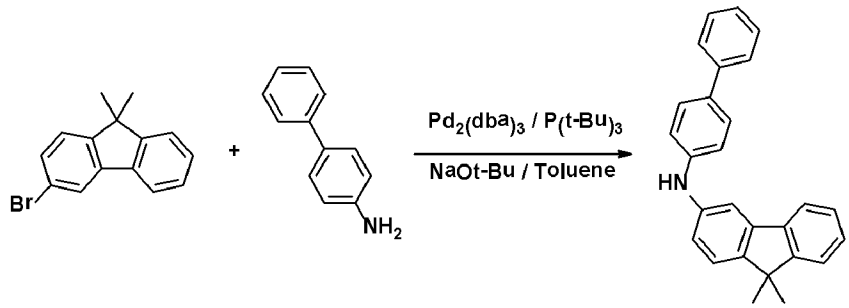
Sub 2-67

[343] 출발물질인 3-bromo-9,9-dimethyl-9*H*-fluorene (16.33g, 59.8mmol)에 aniline (11.13g, 119.6mmol), $Pd_2(dba)_3$ (1.64g, 1.8mmol), 50% P(*t*-Bu)$_3$ (2.3ml, 4.8mmol), NaO*t*-Bu (17.24g, 179.3mmol), toluene을 상기 Sub 2-6 합성법을 사용하여 생성물 14.33g (수율: 84%)를 얻었다.

[344] **8. Sub 2-68의 합성**

[345] <반응식 35>

[346]



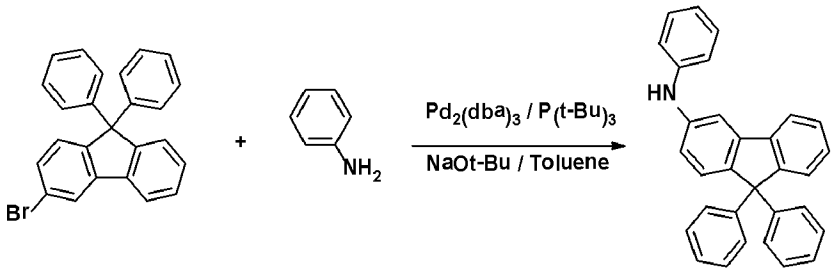
Sub 2-68

[347] 출발물질인 3-bromo-9,9-dimethyl-9*H*-fluorene (8.09g, 29.6mmol)에 [1,1'-biphenyl]-4-amine (10.02g, 59.2mmol), $Pd_2(dba)_3$ (0.81g, 0.9mmol), 50% P(*t*-Bu)$_3$ (1.2ml, 2.4mmol), NaO*t*-Bu (8.54g, 88.8mmol), toluene을 상기 Sub 2-6 합성법을 사용하여 생성물 8.78g (수율: 82%)를 얻었다.

[348] **9. Sub 2-72의 합성**

[349] <반응식 36>

[350]



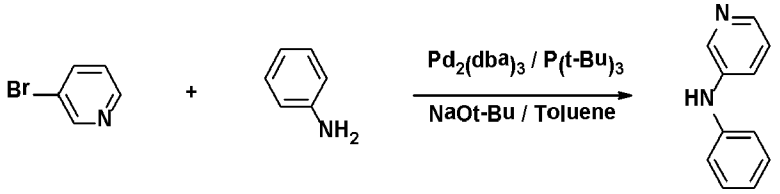
Sub 2-72

[351] 출발물질인 3-bromo-9,9-diphenyl-9*H*-fluorene (11.67g, 29.4mmol)에 aniline (5.47g, 58.7mmol), $Pd_2(dba)_3$ (0.81g, 0.9mmol), 50% P(*t*-Bu)$_3$ (1.1ml, 2.3mmol), NaO*t*-Bu (8.47g, 88.1mmol), toluene을 상기 Sub 2-6 합성법을 사용하여 생성물 9.02g (수율: 75%)를 얻었다.

[352] **10. Sub 2-77의 합성**

[353] <반응식 37>

[354]



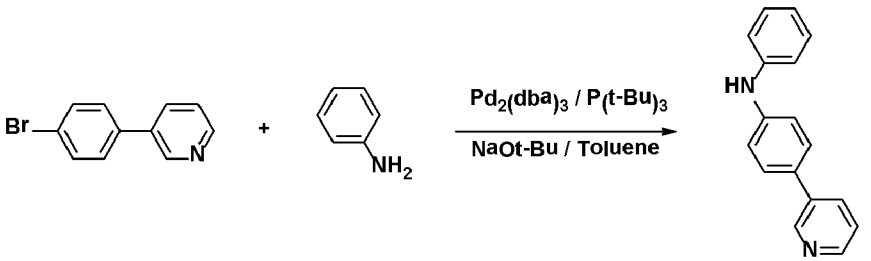
Sub 2-77

[355] 출발물질인 3-bromopyridine (10.41g, 65.9mmol)에 aniline (12.27g, 131.8mmol), $Pd_2(dba)_3$ (1.81g, 2mmol), 50% P(*t*-Bu)$_3$ (2.6ml, 5.3mmol), NaO*t*-Bu (19g, 197.7mmol), toluene을 상기 Sub 2-6 합성법을 사용하여 생성물 7.51g (수율: 67%)를 얻었다.

[356] **11. Sub 2-78의 합성**

[357] <반응식 38>

[358]



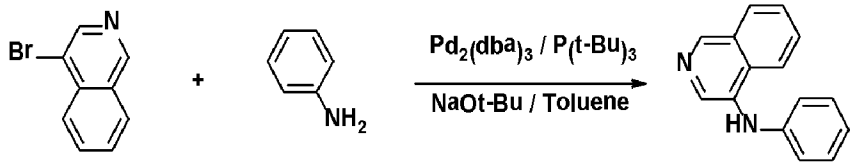
Sub 2-78

[359] 출발물질인 3-(4-bromophenyl)pyridine (10.98g, 46.9mmol)에 aniline (8.74g, 93.8mmol), $Pd_2(dba)_3$ (1.29g, 1.4mmol), 50% P(*t*-Bu)$_3$ (1.8ml, 3.8mmol), NaO*t*-Bu (13.52g, 140.7mmol), toluene을 상기 Sub 2-6 합성법을 사용하여 생성물 7.97g (수율: 69%)를 얻었다.

[360] **12. Sub 2-82의 합성**

[361] <반응식 39>

[362]



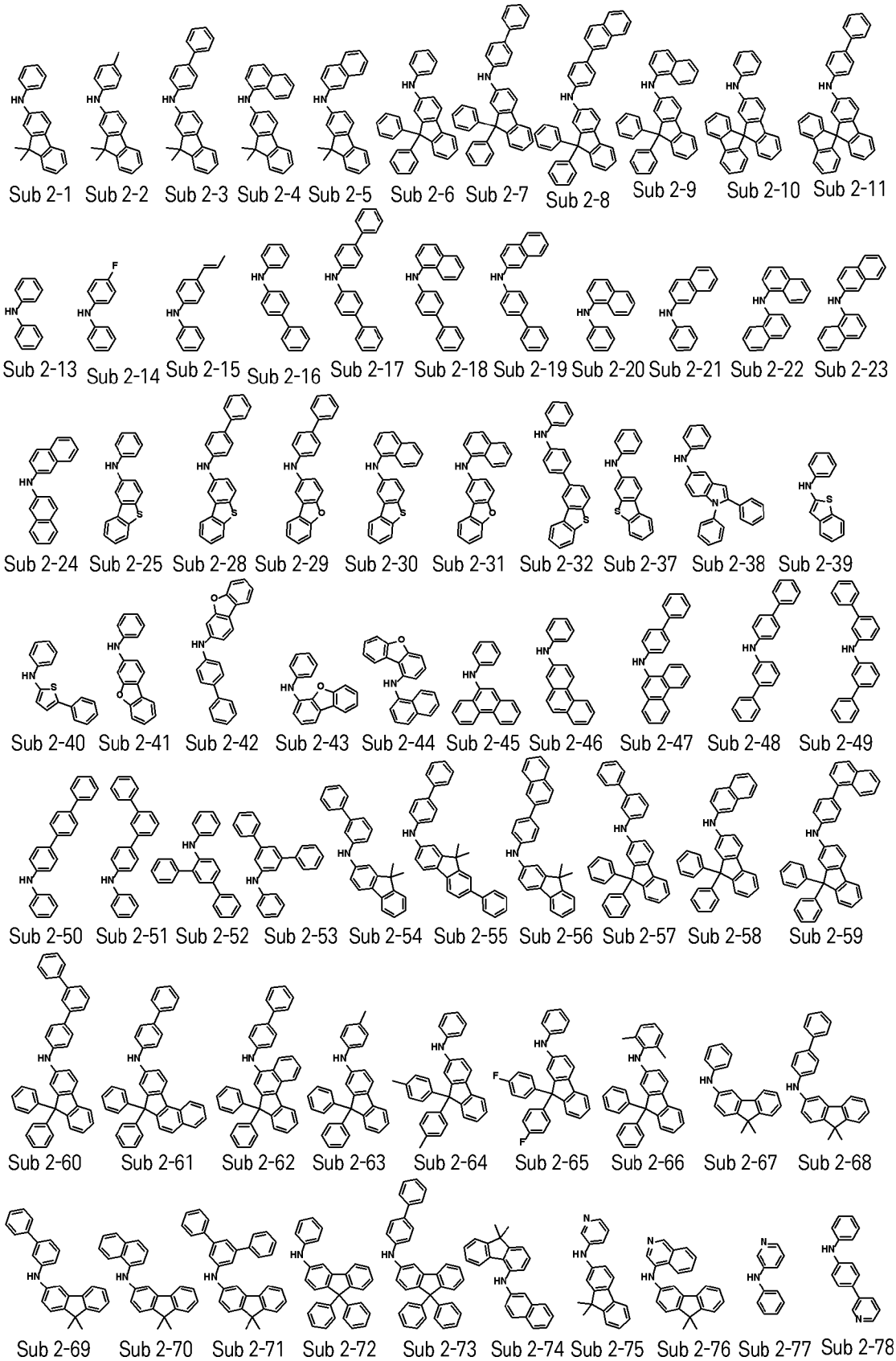
Sub 2-82

[363] 출발물질인 4-bromoisoquinoline (9.83g, 47.2mmol)에 aniline (8.8g, 94.5mmol), $Pd_2(dba)_3$ (1.3g, 1.4mmol), 50% P(*t*-Bu)$_3$ (1.8ml, 3.8mmol), NaO*t*-Bu (13.62g, 141.7mmol), toluene을 상기 Sub 2-6 합성법을 사용하여 생성물 6.24g (수율: 60%)를 얻었다.

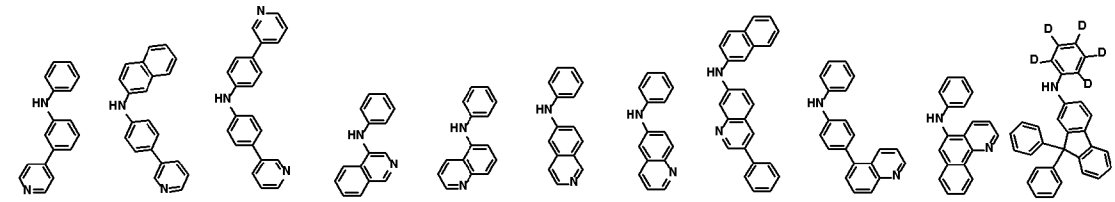
[364] 한편, Sub 2의 예시는 아래와 같으나 이에 한정되는 것은 아니며, 이들의

FD-MS는 하기 표 2와 같다.

[365]



[366]



Sub 2-79 Sub 2-80 Sub 2-81 Sub 2-82 Sub 2-83 Sub 2-84 Sub 2-85 Sub 2-86 Sub 2-87 Sub 2-88 Sub 2-89

[367] [표 2]

[368]

화합물	FD-MS	화합물	FD-MS
Sub 2-1	m/z=285.15($C_{21}H_{19}N$=285.38)	Sub 2-2	m/z=299.17($C_{22}H_{21}N$=299.41)
Sub 2-3	m/z=361.18($C_{27}H_{23}N$=361.48)	Sub 2-4	m/z=335.17($C_{25}H_{21}N$=335.44)
Sub 2-5	m/z=335.17($C_{25}H_{21}N$=335.44)	Sub 2-6	m/z=409.18($C_{31}H_{23}N$=409.52)
Sub 2-7	m/z=485.21($C_{37}H_{27}N$=485.62)	Sub 2-8	m/z=535.23($C_{41}H_{29}N$=535.68)
Sub 2-9	m/z=459.20($C_{35}H_{25}N$=459.58)	Sub 2-10	m/z=407.17($C_{31}H_{21}N$=407.51)
Sub 2-11	m/z=483.20($C_{37}H_{25}N$=483.60)	Sub 2-13	m/z=169.09($C_{12}H_{11}N$=169.22)
Sub 2-14	m/z=187.08($C_{12}H_{10}FN$=187.21)	Sub 2-15	m/z=209.12($C_{15}H_{15}N$=209.29)
Sub 2-16	m/z=245.12($C_{18}H_{15}N$=245.32)	Sub 2-17	m/z=321.15($C_{24}H_{19}N$=321.41)
Sub 2-18	m/z=295.14($C_{22}H_{17}N$=295.38)	Sub 2-19	m/z=295.14($C_{22}H_{17}N$=295.38)
Sub 2-20	m/z=219.10($C_{16}H_{13}N$=219.28)	Sub 2-21	m/z=219.10($C_{16}H_{13}N$=219.28)
Sub 2-22	m/z=269.12($C_{20}H_{15}N$=269.34)	Sub 2-23	m/z=269.12($C_{20}H_{15}N$=269.34)
Sub 2-24	m/z=269.12($C_{20}H_{15}N$=269.34)	Sub 2-25	m/z=275.08($C_{18}H_{13}NS$=275.37)
Sub 2-28	m/z=351.11($C_{24}H_{17}NS$=351.46)	Sub 2-29	m/z=335.13($C_{24}H_{17}NO$=335.40)
Sub 2-30	m/z=325.09($C_{22}H_{15}NS$=325.43)	Sub 2-31	m/z=309.12($C_{22}H_{15}NO$=309.36)
Sub 2-32	m/z=351.11($C_{24}H_{17}NS$=351.46)	Sub 2-37	m/z=275.08($C_{18}H_{13}NS$=275.37)
Sub 2-38	m/z=360.16($C_{26}H_{20}N_2$=360.45)	Sub 2-39	m/z=225.06($C_{14}H_{11}NS$=225.31)
Sub 2-40	m/z=251.08($C_{16}H_{13}NS$=251.35)	Sub 2-41	m/z=259.10($C_{18}H_{13}NO$=259.30)
Sub 2-42	m/z=335.13($C_{24}H_{17}NO$=335.40)	Sub 2-43	m/z=259.10($C_{18}H_{13}NO$=259.30)
Sub 2-44	m/z=309.12($C_{22}H_{15}NO$=309.36)	Sub 2-45	m/z=269.12($C_{20}H_{15}N$=269.34)
Sub 2-46	m/z=269.12($C_{20}H_{15}N$=269.34)	Sub 2-47	m/z=345.15($C_{26}H_{19}N$=345.44)
Sub 2-48	m/z=321.15($C_{24}H_{19}N$=321.41)	Sub 2-49	m/z=321.15($C_{24}H_{19}N$=321.41)
Sub 2-50	m/z=321.15($C_{24}H_{19}N$=321.41)	Sub 2-51	m/z=321.15($C_{24}H_{19}N$=321.41)
Sub 2-52	m/z=321.15($C_{24}H_{19}N$=321.41)	Sub 2-53	m/z=321.15($C_{24}H_{19}N$=321.41)
Sub 2-54	m/z=361.18($C_{27}H_{23}N$=361.48)	Sub 2-55	m/z=437.21($C_{33}H_{27}N$=437.57)
Sub 2-56	m/z=411.20($C_{31}H_{25}N$=411.54)	Sub 2-57	m/z=485.21($C_{37}H_{27}N$=485.62)
Sub 2-58	m/z=459.20($C_{35}H_{25}N$=459.58)	Sub 2-59	m/z=535.23($C_{41}H_{29}N$=535.68)
Sub 2-60	m/z=561.25($C_{43}H_{31}N$=561.71)	Sub 2-61	m/z=535.23($C_{41}H_{29}N$=535.68)
Sub 2-62	m/z=535.23($C_{41}H_{29}N$=535.68)	Sub 2-63	m/z=423.20($C_{32}H_{25}N$=423.55)
Sub 2-64	m/z=437.21($C_{33}H_{27}N$=437.57)	Sub 2-65	m/z=445.16($C_{31}H_{21}F_2N$=445.50)
Sub 2-66	m/z=437.21($C_{33}H_{27}N$=437.57)	Sub 2-67	m/z=285.15($C_{21}H_{19}N$=285.38)
Sub 2-68	m/z=361.18($C_{27}H_{23}N$=361.48)	Sub 2-69	m/z=361.18($C_{27}H_{23}N$=361.48)
Sub 2-70	m/z=335.17($C_{25}H_{21}N$=335.44)	Sub 2-71	m/z=437.21($C_{33}H_{27}N$=437.57)
Sub 2-72	m/z=409.18($C_{31}H_{23}N$=409.52)	Sub 2-73	m/z=485.21($C_{37}H_{27}N$=485.62)
Sub 2-74	m/z=335.17($C_{25}H_{21}N$=335.44)	Sub 2-75	m/z=286.15($C_{20}H_{18}N_2$=286.37)
Sub 2-76	m/z=336.16($C_{24}H_{20}N_2$=336.43)	Sub 2-77	m/z=170.08($C_{11}H_{10}N_2$=170.21)
Sub 2-78	m/z=246.12($C_{17}H_{14}N_2$=246.31)	Sub 2-79	m/z=246.12($C_{17}H_{14}N_2$=246.31)

[369]

Sub 2-80	m/z=296.13($C_{21}H_{16}N_2$=296.37)	Sub 2-81	m/z=323.14($C_{22}H_{17}N_3$=323.39)
Sub 2-82	m/z=220.10($C_{15}H_{12}N_2$=220.27)	Sub 2-83	m/z=220.10($C_{15}H_{12}N_2$=220.27)
Sub 2-84	m/z=220.10($C_{15}H_{12}N_2$=220.27)	Sub 2-85	m/z=220.10($C_{15}H_{12}N_2$=220.27)
Sub 2-86	m/z=346.15($C_{25}H_{18}N_2$=346.42)	Sub 2-87	m/z=296.13($C_{21}H_{16}N_2$=296.37)
Sub 2-88	m/z=270.12($C_{19}H_{14}N_2$=270.33)	Sub 2-89	m/z=414.21($C_{31}H_{18}D_5N$=414.55)

[370]

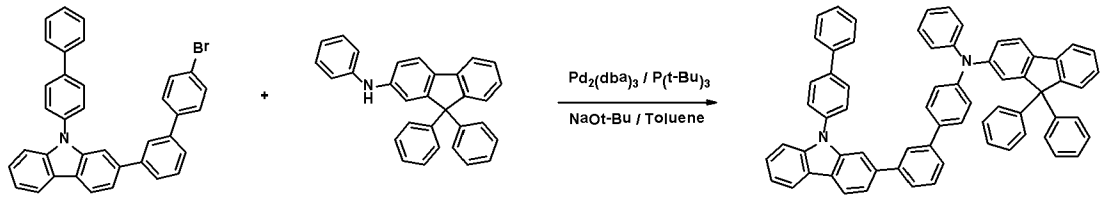
[371] **III. 최종생성물 (Final Product)의 합성**

[372] Sub 2 (1당량)를 둥근바닥플라스크에 toluene으로 녹인 후에, Sub 1 (1.2당량), $Pd_2(dba)_3$ (0.03당량), P(*t*-Bu)$_3$ (0.08당량), NaO*t*-Bu (3당량)을 첨가하고 100℃에서 교반하였다. 반응이 완료되면 CH_2Cl_2와 물로 추출한 후 유기층을 $MgSO_4$로 건조하고 농축한 후 생성된 화합물을 silicagel column 및 재결정하여 최종 생성물(Final Product)를 얻었다.

[373] **1. Product B17의 합성**

[374] <반응식 40>

[375]



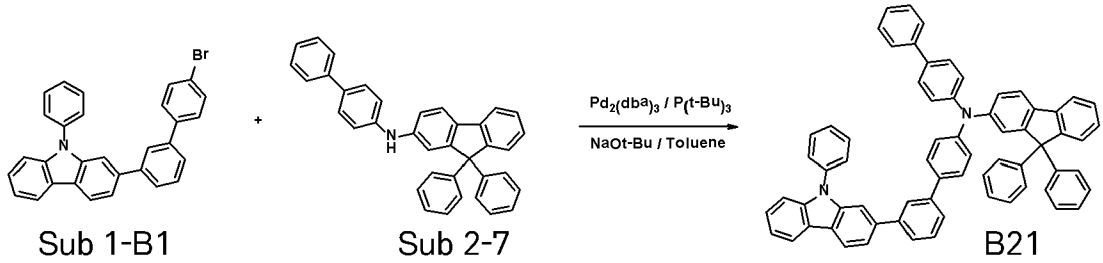
Sub 1-B2 Sub 2-6 B17

[376] 상기 합성에서 얻어진 Sub 2-6 (6.39g, 15.6mmol)을 둥근바닥플라스크에 toluene으로 녹인 후에, Sub 1-B2 (10.31g, 18.7mmol), $Pd_2(dba)_3$ (0.43g, 0.5mmol), 50% P(*t*-Bu)$_3$ (0.6ml, 1.2mmol), NaO*t*-Bu (4.5g, 46.8mmol)을 첨가하고 100°C에서 교반하였다. 반응이 완료되면 CH_2Cl_2와 물로 추출한 후 유기층을 $MgSO_4$로 건조하고 농축한 후 생성된 화합물을 silicagel column 및 재결정하여 생성물 9.46g (수율: 69%)를 얻었다.

[377] **2. Product B21의 합성**

[378] <반응식 41>

[379]



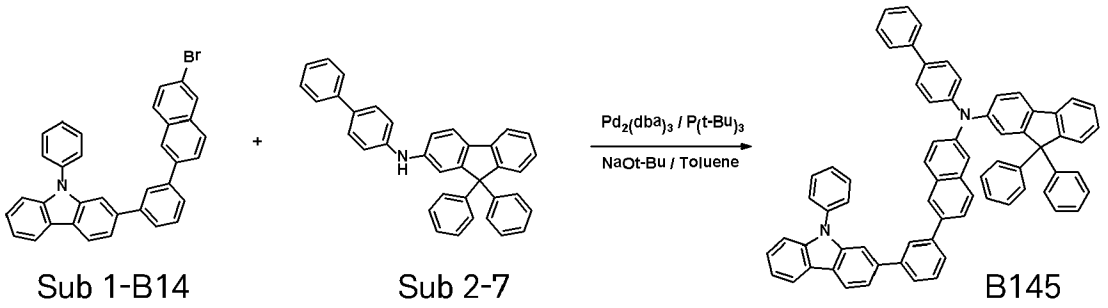
Sub 1-B1 Sub 2-7 B21

[380] 상기 합성에서 얻어진 Sub 2-7 (5.18g, 10.7mmol)에 Sub 1-B1 (6.07g, 12.8mmol), $Pd_2(dba)_3$ (0.29g, 0.3mmol), 50% P(*t*-Bu)$_3$ (0.4ml, 0.9mmol), NaO*t*-Bu (3.08g, 32mmol), toluene을 상기 Product B17 합성법을 사용하여 생성물 7.22g (수율: 77%)를 얻었다.

[381] **3. Product B145의 합성**

[382] <반응식 42>

[383]



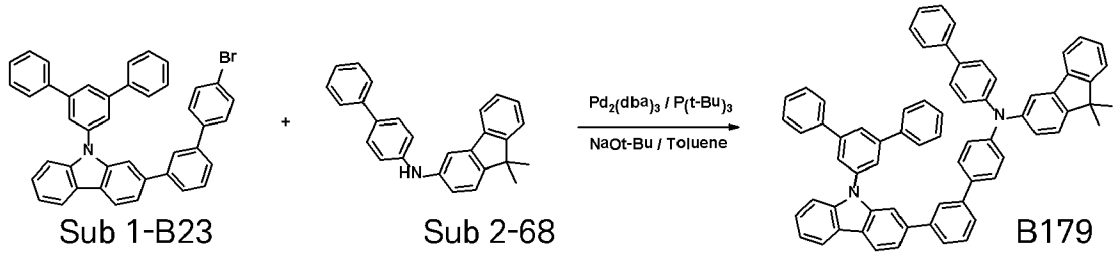
Sub 1-B14 Sub 2-7 B145

[384] 상기 합성에서 얻어진 Sub 2-7 (4.96g, 10.2mmol)에 Sub 1-B14 (6.43g, 12.3mmol), $Pd_2(dba)_3$ (0.28g, 0.3mmol), 50% P(*t*-Bu)$_3$ (0.4ml, 0.8mmol), NaO*t*-Bu (2.94g, 30.6mmol), toluene을 상기 Product B17 합성법을 사용하여 생성물 6.83g (수율: 72%)를 얻었다.

[385] **4. Product B179의 합성**

[386] <반응식 43>

[387]



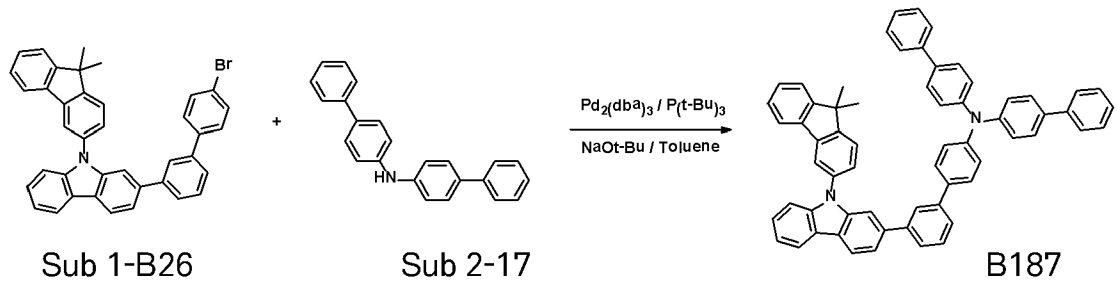
Sub 1-B23 Sub 2-68 B179

[388] 상기 합성에서 얻어진 Sub 2-68 (3.91g, 10.8mmol)에 Sub 1-B23 (8.13g, 13mmol), $Pd_2(dba)_3$ (0.3g, 0.3mmol), 50% P(*t*-Bu)$_3$ (0.4ml, 0.9mmol), NaO*t*-Bu (3.12g, 32.4mmol), toluene을 상기 Product B17 합성법을 사용하여 생성물 6.18g (수율: 63%)를 얻었다.

[389] **5. Product B187의 합성**

[390] <반응식 44>

[391]



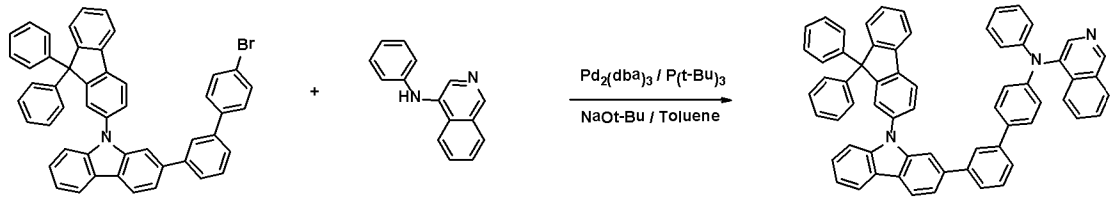
Sub 1-B26 Sub 2-17 B187

[392] 상기 합성에서 얻어진 Sub 2-17 (3.64g, 11.3mmol)에 Sub 1-B26 (8.03g, 13.6mmol), $Pd_2(dba)_3$ (0.31g, 0.3mmol), 50% P(*t*-Bu)$_3$ (0.4ml, 0.9mmol), NaO*t*-Bu (3.27g, 34mmol), toluene을 상기 Product B17 합성법을 사용하여 생성물 7.06g (수율: 75%)를 얻었다.

[393] **6. Product B200의 합성**

[394] <반응식 45>

[395]



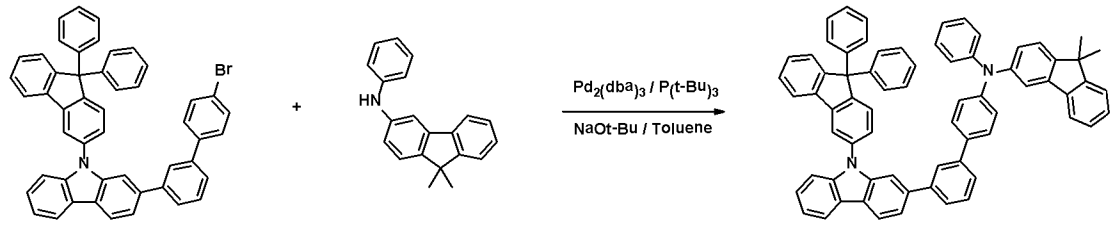
Sub 1-B32 Sub 2-82 B200

[396] 상기 합성에서 얻어진 Sub 2-82 (2.76g, 12.5mmol)에 Sub 1-B32 (10.75g, 15mmol), $Pd_2(dba)_3$ (0.34g, 0.4mmol), 50% P(*t*-Bu)$_3$ (0.5ml, 1mmol), NaO*t*-Bu (3.61g, 37.6mmol), toluene을 상기 Product B17 합성법을 사용하여 생성물 6.21g (수율: 58%)를 얻었다.

[397] **7. Product B204의 합성**

[398] <반응식 46>

[399]



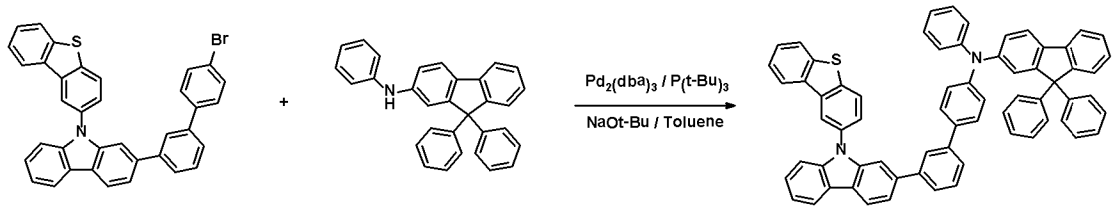
Sub 1-B33 Sub 2-67 B204

[400] 상기 합성에서 얻어진 Sub 2-67 (3.07g, 10.8mmol)에 Sub 1-B33 (9.23g, 12.9mmol), $Pd_2(dba)_3$ (0.3g, 0.3mmol), 50% P(*t*-Bu)$_3$ (0.4ml, 0.9mmol), NaO*t*-Bu (3.1g, 32.3mmol), toluene을 상기 Product B17 합성법을 사용하여 생성물 6.62g (수율: 67%)를 얻었다.

[401] **8. Product B210의 합성**

[402] <반응식 47>

[403]



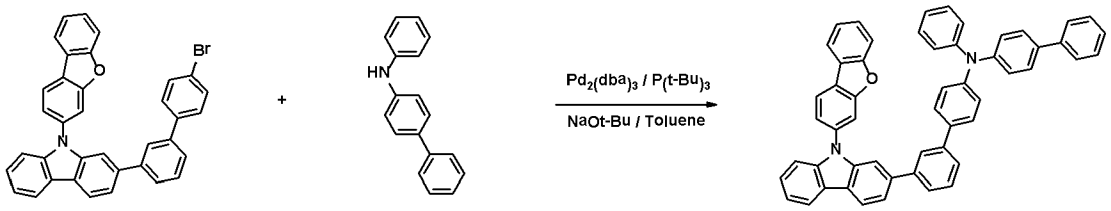
Sub 1-B40 Sub 2-6 B210

[404] 상기 합성에서 얻어진 Sub 2-6 (4.28g, 10.5mmol)에 Sub 1-B40 (7.28g, 12.5mmol), $Pd_2(dba)_3$ (0.29g, 0.3mmol), 50% P(*t*-Bu)$_3$ (0.4ml, 0.8mmol), NaO*t*-Bu (3.01g, 31.4mmol), toluene을 상기 Product B17 합성법을 사용하여 생성물 6.75g (수율: 71%)를 얻었다.

[405] **9. Product B213의 합성**

[406] <반응식 48>

[407]



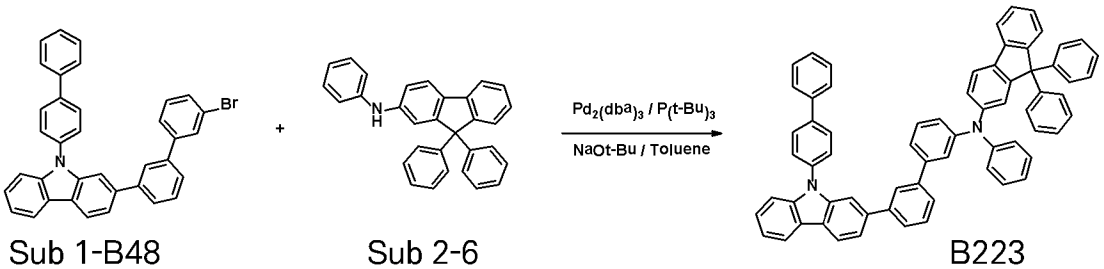
Sub 1-B43 Sub 2-16 B213

[408] 상기 합성에서 얻어진 Sub 2-16 (3.15g, 12.8mmol)에 Sub 1-B43 (8.7g, 15.4mmol), $Pd_2(dba)_3$ (0.35g, 0.4mmol), 50% P(*t*-Bu)$_3$ (0.5ml, 1mmol), NaO*t*-Bu (3.7g, 38.5mmol), toluene을 상기 Product B17 합성법을 사용하여 생성물 6.93g (수율: 74%)를 얻었다.

[409] **10. Product B223의 합성**

[410] <반응식 49>

[411]



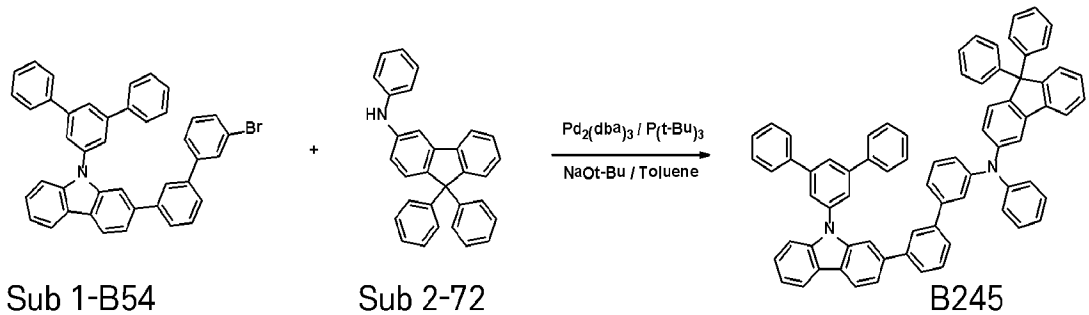
Sub 1-B48 Sub 2-6 B223

[412] 상기 합성에서 얻어진 Sub 2-6 (4.47g, 10.9mmol)에 Sub 1-B48 (7.21g, 13.1mmol), $Pd_2(dba)_3$ (0.3g, 0.3mmol), 50% P(*t*-Bu)$_3$ (0.4ml, 0.9mmol), NaO*t*-Bu (3.15g, 32.7mmol), toluene을 상기 Product B17 합성법을 사용하여 생성물 7.2g (수율: 75%)를 얻었다.

[413] **11. Product B245의 합성**

[414] <반응식 50>

[415]



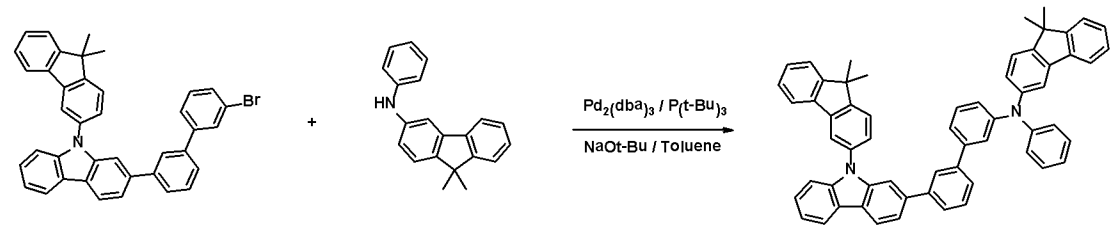
Sub 1-B54 Sub 2-72 B245

[416] 상기 합성에서 얻어진 Sub 2-72 (4.32g, 10.5mmol)에 Sub 1-B54 (7.93g, 12.7mmol), $Pd_2(dba)_3$ (0.29g, 0.3mmol), 50% P(*t*-Bu)$_3$ (0.4ml, 0.8mmol), NaO*t*-Bu (3.04g, 31.6mmol), toluene을 상기 Product B17 합성법을 사용하여 생성물 6.35g (수율: 63%)를 얻었다.

[417] **12. Product B253의 합성**

[418] <반응식 51>

[419]



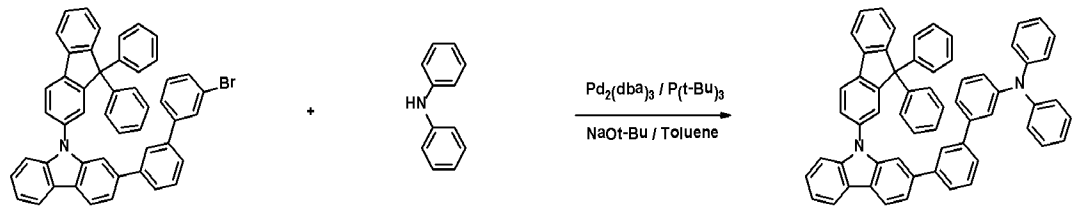
Sub 1-B58 Sub 2-67 B253

[420] 상기 합성에서 얻어진 Sub 2-67 (3.56g, 12.5mmol)에 Sub 1-B58 (8.84g, 15mmol), $Pd_2(dba)_3$ (0.34g, 0.4mmol), 50% P(*t*-Bu)$_3$ (0.5ml, 1mmol), NaO*t*-Bu (3.6g, 37.4mmol), toluene을 상기 Product B17 합성법을 사용하여 생성물 7.44g (수율: 75%)를 얻었다.

[421] **13. Product B259의 합성**

[422] <반응식 52>

[423]



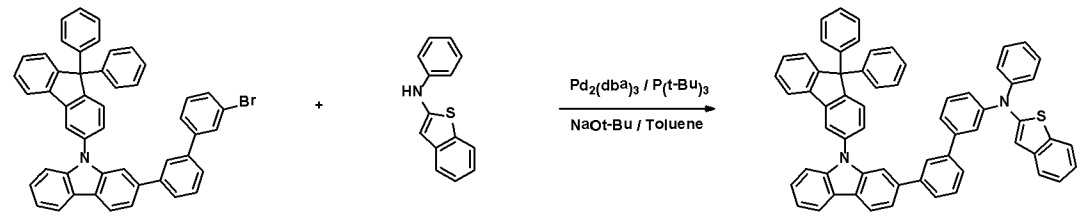
Sub 1-B61 Sub 2-13 B259

[424] 상기 합성에서 얻어진 Sub 2-13 (1.88g, 11.1mmol)에 Sub 1-B61 (9.53g, 13.3mmol), $Pd_2(dba)_3$ (0.31g, 0.3mmol), 50% P(*t*-Bu)$_3$ (0.4ml, 0.9mmol), NaO*t*-Bu (3.2g, 33.3mmol), toluene을 상기 Product B17 합성법을 사용하여 생성물 6.96g (수율: 78%)를 얻었다.

[425] **14. Product B266의 합성**

[426] <반응식 53>

[427]



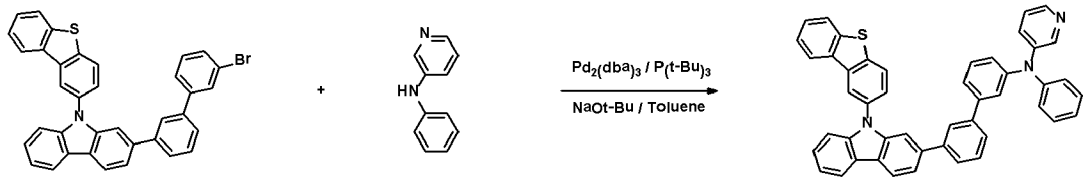
Sub 1-B62 Sub 2-39 B266

[428] 상기 합성에서 얻어진 Sub 2-39 (2.56g, 11.4mmol)에 Sub 1-B62 (9.74g, 13.6mmol), $Pd_2(dba)_3$ (0.31g, 0.3mmol), 50% P(*t*-Bu)$_3$ (0.4ml, 0.9mmol), NaO*t*-Bu (3.28g, 34.1mmol), toluene을 상기 Product B17 합성법을 사용하여 생성물 6.54g (수율: 67%)를 얻었다.

[429] **15. Product B273의 합성**

[430] <반응식 54>

[431]



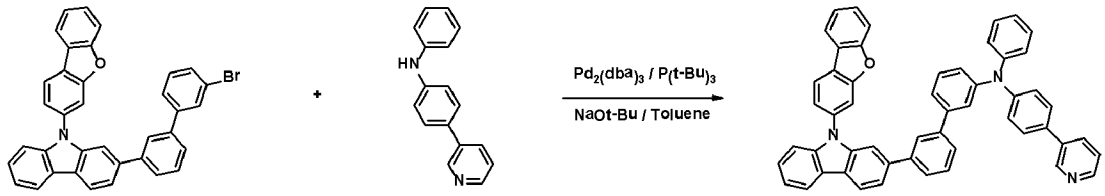
Sub 1-B69 Sub 2-77 B273

[432] 상기 합성에서 얻어진 Sub 2-77 (2.83g, 16.6mmol)에 Sub 1-B69 (11.58g, 20mmol), $Pd_2(dba)_3$ (0.46g, 0.5mmol), 50% P(*t*-Bu)$_3$ (0.6ml, 1.3mmol), NaO*t*-Bu (4.79g, 49.9mmol), toluene을 상기 Product B17 합성법을 사용하여 생성물 6.79g (수율: 61%)를 얻었다.

[433] **16. Product B278의 합성**

[434] <반응식 55>

[435]



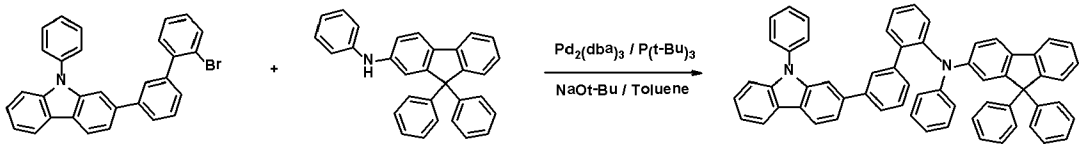
Sub 1-B72 Sub 2-78 B278

[436] 상기 합성에서 얻어진 Sub 2-78 (3.71g, 15.1mmol)에 Sub 1-B72 (10.2g, 18.1mmol), $Pd_2(dba)_3$ (0.41g, 0.5mmol), 50% P(*t*-Bu)$_3$ (0.6ml, 1.2mmol), NaO*t*-Bu (4.34g, 45.2mmol), toluene을 상기 Product B17 합성법을 사용하여 생성물 6.93g (수율: 63%)를 얻었다.

[437] **17. Product B287의 합성**

[438] <반응식 56>

[439]



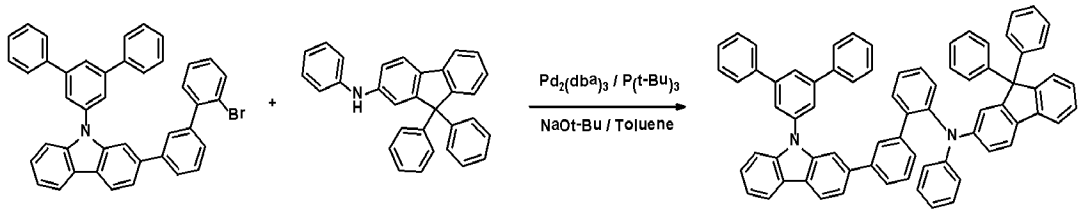
Sub 1-B76 Sub 2-6 B287

[440] 상기 합성에서 얻어진 Sub 2-6 (4.97g, 12.1mmol)에 Sub 1-B76 (6.91g, 14.6mmol), $Pd_2(dba)_3$ (0.33g, 0.4mmol), 50% P(*t*-Bu)$_3$ (0.5ml, 1mmol), NaO*t*-Bu 3.5g, 36.4mmol), toluene을 상기 Product B17 합성법을 사용하여 생성물 6.33g (수율: 65%)를 얻었다.

[441] **18. Product B322의 합성**

[442] <반응식 57>

[443]



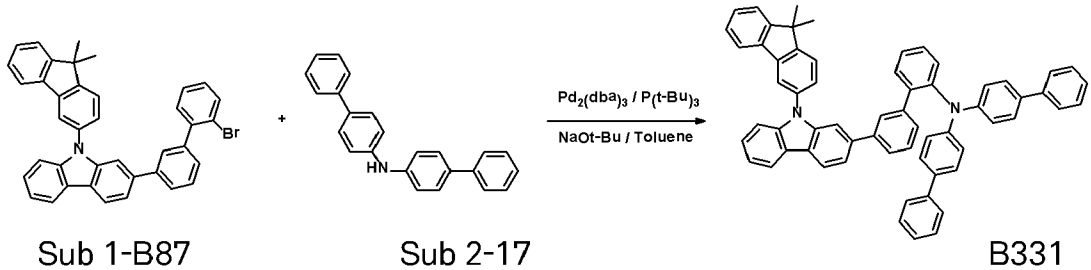
Sub 1-B84 Sub 2-6 B322

[444] 상기 합성에서 얻어진 Sub 2-6 (4.72g, 11.5mmol)에 Sub 1-B84 (8.67g, 13.8mmol), $Pd_2(dba)_3$ (0.32g, 0.3mmol), 50% P(*t*-Bu)$_3$ (0.4ml, 0.9mmol), NaO*t*-Bu (3.32g, 34.6mmol), toluene을 상기 Product B17 합성법을 사용하여 생성물 6.61g (수율: 60%)를 얻었다.

[445] **19. Product B331의 합성**

[446] <반응식 58>

[447]



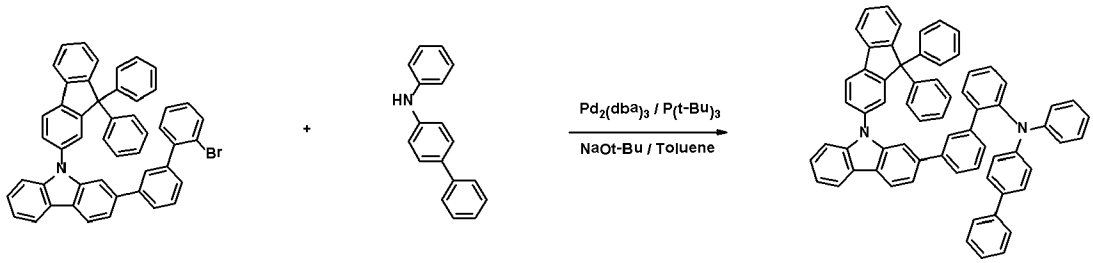
Sub 1-B87 Sub 2-17 B331

[448] 상기 합성에서 얻어진 Sub 2-17 (3.59g, 11.2mmol)에 Sub 1-B87 (7.92g, 13.4mmol), $Pd_2(dba)_3$ (0.31g, 0.3mmol), 50% P(*t*-Bu)$_3$ (0.4ml, 0.9mmol), NaO*t*-Bu (3.22g, 33.5mmol), toluene을 상기 Product B17 합성법을 사용하여 생성물 6.31g (수율: 68%)를 얻었다.

[449] **20. Product B340의 합성**

[450] <반응식 59>

[451]



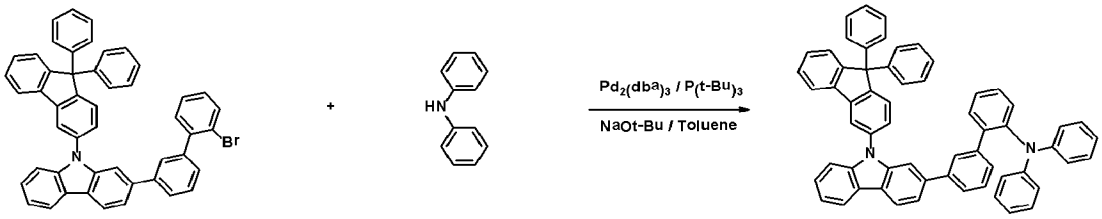
Sub 1-B90 Sub 2-16 B340

[452] 상기 합성에서 얻어진 Sub 2-16 (2.82g, 11.5mmol)에 Sub 1-B90 (9.86g, 13.8mmol), $Pd_2(dba)_3$ (0.32g, 0.3mmol), 50% P(*t*-Bu)$_3$ (0.4ml, 0.9mmol), NaO*t*-Bu (3.31g, 34.5mmol), toluene을 상기 Product B17 합성법을 사용하여 생성물 6.37g (수율: 63%)를 얻었다.

[453] **21. Product B343의 합성**

[454] <반응식 60>

[455]



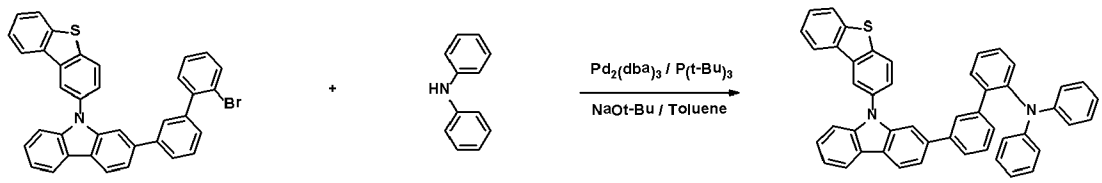
Sub 1-B91 Sub 2-13 B343

[456] 상기 합성에서 얻어진 Sub 2-13 (1.86g, 11mmol)에 Sub 1-B91 (9.43g, 13.2mmol), $Pd_2(dba)_3$ (0.3g, 0.3mmol), 50% P(*t*-Bu)$_3$ (0.4ml, 0.9mmol), NaO*t*-Bu (3.17g, 33mmol), toluene을 상기 Product B17 합성법을 사용하여 생성물 6.27g (수율: 71%)를 얻었다.

[457] **22. Product B351의 합성**

[458] <반응식 61>

[459]



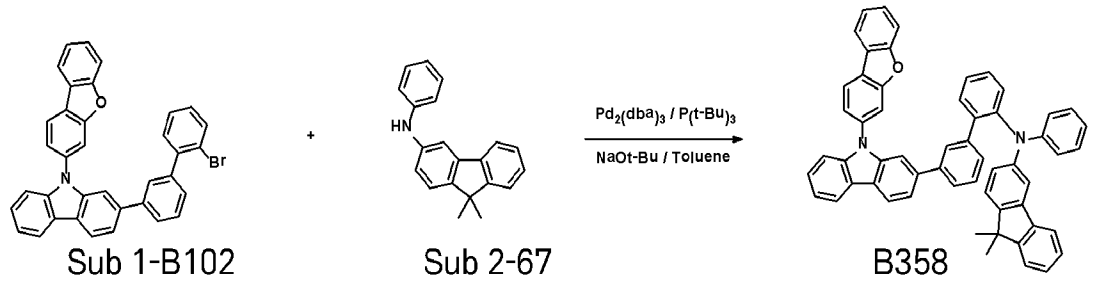
Sub 1-B99 Sub 2-13 B351

[460] 상기 합성에서 얻어진 Sub 2-13 (2.41g, 14.2mmol)에 Sub 1-B99 (9.92g, 17.1mmol), $Pd_2(dba)_3$ (0.39g, 0.4mmol), 50% P(*t*-Bu)$_3$ (0.6ml, 1.1mmol), NaO*t*-Bu (4.11g, 42.7mmol), toluene을 상기 Product B17 합성법을 사용하여 생성물 6.48g (수율: 68%)를 얻었다.

[461] **23. Product B358의 합성**

[462] <반응식 62>

[463]



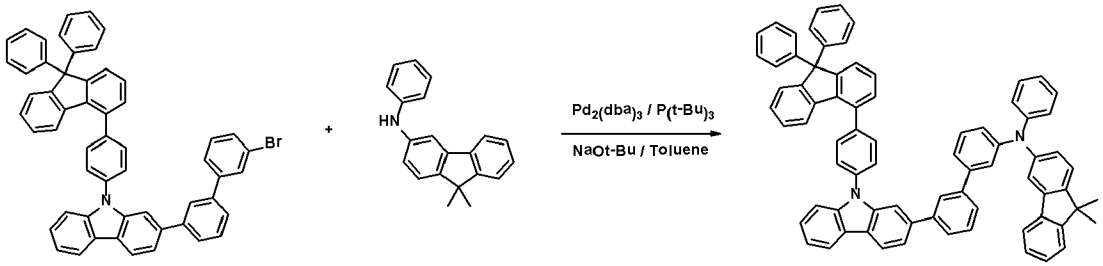
Sub 1-B102 Sub 2-67 B358

[464] 상기 합성에서 얻어진 Sub 2-67 (3.78g, 13.2mmol)에 Sub 1-B102 (8.97g, 15.9mmol), $Pd_2(dba)_3$ (0.36g, 0.4mmol), 50% P(*t*-Bu)$_3$ (0.5ml, 1.1mmol), NaO*t*-Bu (3.82g, 39.7mmol), toluene을 상기 Product B17 합성법을 사용하여 생성물 6.31g (수율: 62%)를 얻었다.

[465] **24. Product B375의 합성**

[466] <반응식 63>

[467]



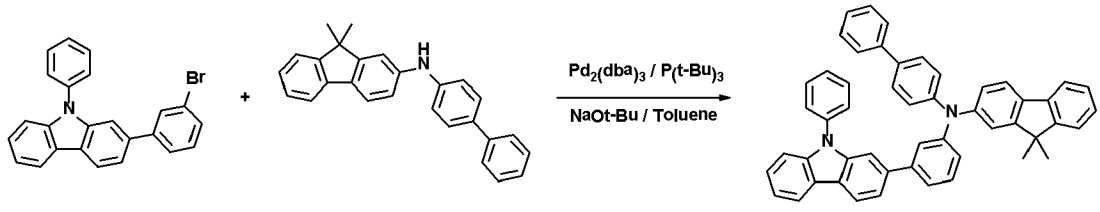
Sub 1-B64 Sub 2-67 B375

[468] 상기 합성에서 얻어진 Sub 2-67 (3.11g, 10.9mmol)에 Sub 1-B64 (10.34g, 13.1mmol), $Pd_2(dba)_3$ (0.3g, 0.3mmol), 50% P(*t*-Bu)$_3$ (0.4ml, 0.9mmol), NaO*t*-Bu (3.14g, 32.7mmol), toluene을 상기 Product B17 합성법을 사용하여 생성물 6.18g (수율: 57%)를 얻었다.

[469] **25. Product C2의 합성**

[470] <반응식 64>

[471]



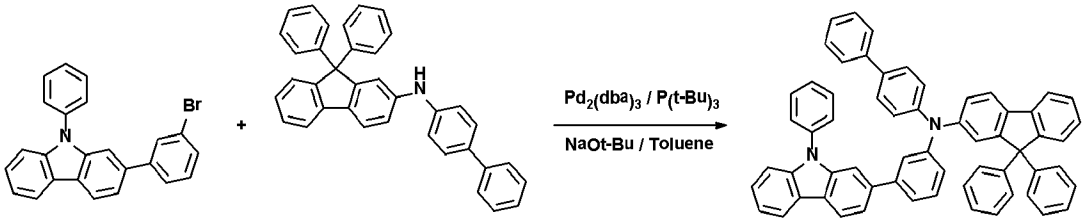
Sub 1-C1 Sub 2-3 C2

[472] 상기 합성에서 얻어진 Sub 2-3 (6g, 16.6mmol)에 Sub 1-C1 (7.93g, 19.9mmol), $Pd_2(dba)_3$ (1.21g, 1.3mmol), 50% P(*t*-Bu)$_3$ (0.7ml, 1.66mmol), NaO*t*-Bu (73.03g, 49.8mmol), toluene을 상기 Product B17 합성법을 사용하여 생성물 7.54g (수율: 67%)를 얻었다.

[473] **26. Product C8의 합성**

[474] <반응식 65>

[475]



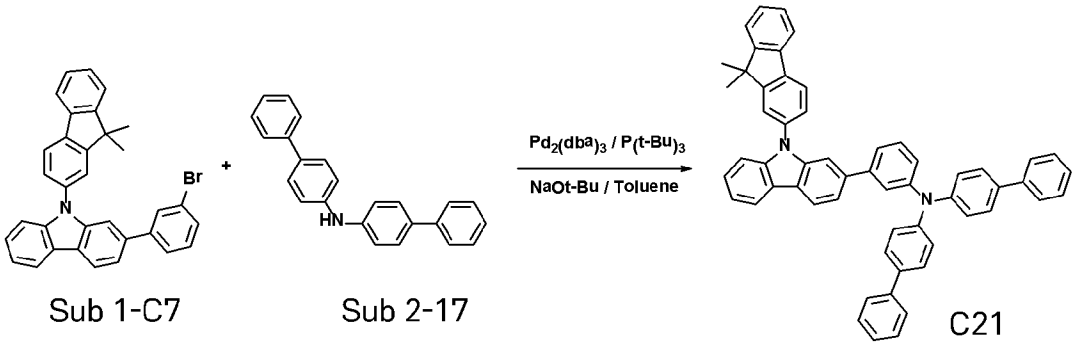
Sub 1-C1 Sub 2-7 C8

[476] 상기 합성에서 얻어진 Sub 2-7 (5.18g, 10.7mmol)에 Sub 1-C1 (5.1g, 12.8mmol), $Pd_2(dba)_3$ (0.29g, 0.3mmol), 50% P(*t*-Bu)$_3$ (0.4ml, 0.9mmol), NaO*t*-Bu (3.08g, 32mmol), toluene을 상기 Product B17 합성법을 사용하여 생성물 6.34g (수율: 74%)를 얻었다.

[477] **27. Product C21합성예**

[478] <반응식 66>

[479]

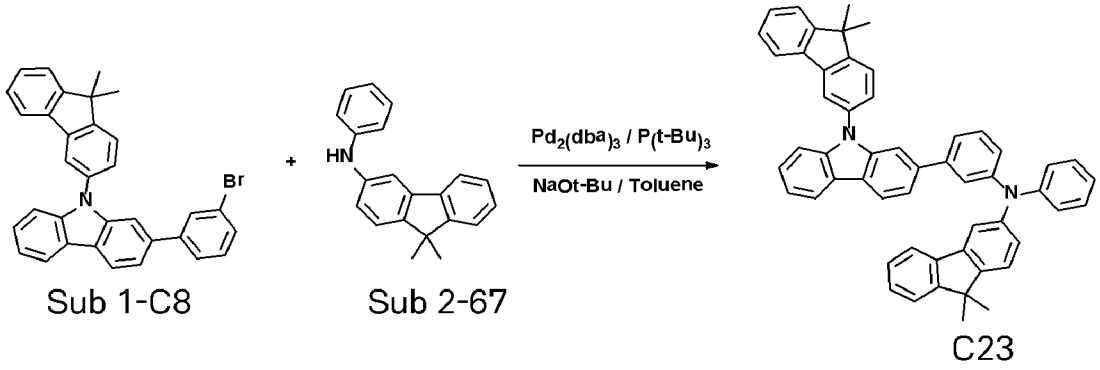


[480] 상기 합성에서 얻어진 Sub 2-17 (3.59g, 11.2mmol)에 Sub 1-C7 (6.9g, 13.4mmol), $Pd_2(dba)_3$ (0.31g, 0.3mmol), 50% P(*t*-Bu)$_3$ (0.4ml, 0.9mmol), NaO*t*-Bu (3.22g, 33.5mmol), toluene을 상기 Product B17 합성법을 사용하여 생성물 6g (수율: 71%)를 얻었다.

[481] **28. Product C23의 합성**

[482] <반응식 67>

[483]



[484] 상기 합성에서 얻어진 Sub 2-67 (3.56g, 12.5mmol)에 Sub 1-C8 (7.7g, 15mmol), $Pd_2(dba)_3$ (0.34g, 0.4mmol), 50% P(*t*-Bu)$_3$ (0.5ml, 1mmol), NaO*t*-Bu (3.6g, 37.4mmol), toluene을 상기 Product B17 합성법을 사용하여 생성물 6.82g (수율: 76%)를 얻었다.

[485] 한편, 상기와 같은 합성예에 따라 제조된 본 발명의 화합물 B1~B386, C1~C40의 FD-MS 값은 하기 표 3과 같다.

[486] [표 3]

[487]

화합물	FD-MS	화합물	FD-MS
B1	m/z=678.30($C_{51}H_{38}N_2$=678.86)	B6	m/z=754.33($C_{57}H_{42}N_2$=754.96)
B7	m/z=830.37($C_{63}H_{46}N_2$=831.05)	B11	m/z=728.32($C_{55}H_{40}N_2$=728.92)
B12	m/z=804.35($C_{61}H_{44}N_2$=805.02)	B16	m/z=802.33($C_{61}H_{42}N_2$=803.00)
B17	m/z=878.37($C_{67}H_{46}N_2$=879.10)	B21	m/z=878.37($C_{67}H_{46}N_2$=879.10)
B22	m/z=954.40($C_{73}H_{50}N_2$=955.19)	B23	m/z=928.38($C_{71}H_{48}N_2$=929.15)
B24	m/z=928.38($C_{71}H_{48}N_2$=929.15)	B25	m/z=830.37($C_{63}H_{46}N_2$=831.05)
B26	m/z=852.35($C_{65}H_{44}N_2$=853.06)	B27	m/z=928.38($C_{71}H_{48}N_2$=929.15)
B31	m/z=800.32($C_{61}H_{40}N_2$=800.98)	B43	m/z=926.37($C_{71}H_{46}N_2$=927.14)
B47	m/z=714.30($C_{54}H_{38}N_2$=714.89)	B51	m/z=714.30($C_{54}H_{38}N_2$=714.89)
B62	m/z=764.32($C_{58}H_{40}N_2$=764.95)	B66	m/z=612.26($C_{46}H_{32}N_2$=612.76)
B86	m/z=662.27($C_{50}H_{34}N_2$=662.82)	B94	m/z=718.24($C_{52}H_{34}N_2S$=718.90)
B106	m/z=728.28($C_{54}H_{36}N_2O$=728.88)	B122	m/z=820.29($C_{60}H_{40}N_2S$=821.04)
B124	m/z=638.27($C_{48}H_{34}N_2$=638.80)	B125	m/z=738.30($C_{56}H_{38}N_2$=738.91)
B127	m/z=729.31($C_{54}H_{39}N_3$=729.91)	B128	m/z=928.38($C_{71}H_{48}N_2$=929.15)
B129	m/z=790.33($C_{60}H_{42}N_2$=790.99)	B130	m/z=714.30($C_{54}H_{38}N_2$=714.89)
B132	m/z=804.35($C_{61}H_{44}N_2$=805.02)	B138	m/z=764.32($C_{58}H_{40}N_2$=764.95)
B145	m/z=928.38($C_{71}H_{48}N_2$=929.15)	B152	m/z=870.40($C_{66}H_{50}N_2$=871.12)
B157	m/z=802.33($C_{61}H_{42}N_2$=803.00)	B158	m/z=830.37($C_{63}H_{46}N_2$=831.05)
B161	m/z=696.29($C_{51}H_{37}FN_2$=696.85)	B162	m/z=718.33($C_{54}H_{42}N_2$=718.92)
B164	m/z=794.28($C_{58}H_{38}N_2S$=795.00)	B165	m/z=804.31($C_{60}H_{40}N_2O$=804.97)
B167	m/z=928.38($C_{71}H_{48}N_2$=929.15)	B168	m/z=954.40($C_{73}H_{50}N_2$=955.19)
B169	m/z=954.40($C_{73}H_{50}N_2$=955.19)	B170	m/z=852.35($C_{65}H_{44}N_2$=853.06)
B171	m/z=878.37($C_{67}H_{46}N_2$=879.10)	B172	m/z=928.38($C_{71}H_{48}N_2$=929.15)
B173	m/z=928.38($C_{71}H_{48}N_2$=929.15)	B174	m/z=754.33($C_{57}H_{42}N_2$=754.96)
B175	m/z=802.33($C_{61}H_{42}N_2$=803.00)	B176	m/z=878.37($C_{67}H_{46}N_2$=879.10)
B177	m/z=878.37($C_{67}H_{46}N_2$=879.10)	B178	m/z=714.30($C_{54}H_{38}N_2$=714.89)
B179	m/z=906.40($C_{69}H_{50}N_2$=907.15)	B180	m/z=954.40($C_{73}H_{50}N_2$=955.19)
B181	m/z=820.29($C_{60}H_{40}N_2S$=821.04)	B182	m/z=831.36($C_{62}H_{45}N_3$=832.04)
B183	m/z=830.37($C_{63}H_{46}N_2$=831.05)	B184	m/z=854.37($C_{65}H_{46}N_2$=855.07)
B185	m/z=994.43($C_{76}H_{54}N_2$=995.26)	B186	m/z=729.31($C_{54}H_{39}N_3$=729.91)
B187	m/z=830.37($C_{63}H_{46}N_2$=831.05)	B188	m/z=830.37($C_{63}H_{46}N_2$=831.05)
B189	m/z=794.37($C_{60}H_{46}N_2$=795.02)	B190	m/z=906.40($C_{69}H_{50}N_2$=907.15)
B191	m/z=830.37($C_{63}H_{46}N_2$=831.05)	B192	m/z=906.40($C_{69}H_{50}N_2$=907.15)
B193	m/z=755.33($C_{56}H_{41}N_3$=755.94)	B194	m/z=906.40($C_{69}H_{50}N_2$=907.15)
B195	m/z=802.33($C_{61}H_{42}N_2$=803.00)	B196	m/z=852.35($C_{65}H_{44}N_2$=853.06)
B197	m/z=878.37($C_{67}H_{46}N_2$=879.10)	B198	m/z=954.40($C_{73}H_{50}N_2$=955.19)

[488]

B199	m/z=918.40($C_{70}H_{50}N_2$=919.16)	B200	m/z=853.35($C_{64}H_{43}N_3$=854.05)
B201	m/z=802.33($C_{61}H_{42}N_2$=803.00)	B202	m/z=852.35($C_{65}H_{44}N_2$=853.06)
B203	m/z=878.37($C_{67}H_{46}N_2$=879.10)	B204	m/z=918.40($C_{70}H_{50}N_2$=919.16)
B205	m/z=877.35($C_{66}H_{43}N_3$=878.07)	B206	m/z=800.32($C_{61}H_{40}N_2$=800.98)
B207	m/z=768.26($C_{56}H_{36}N_2S$=768.96)	B208	m/z=936.35($C_{69}H_{48}N_2S$=937.20)
B209	m/z=820.29($C_{60}H_{40}N_2S$=821.04)	B210	m/z=908.32($C_{67}H_{44}N_2S$=909.14)
B211	m/z=822.28($C_{58}H_{38}N_4S$=823.01)	B212	m/z=794.28($C_{58}H_{38}N_2S$=795.00)
B213	m/z=728.28($C_{54}H_{36}N_2O$=728.88)	B214	m/z=742.26($C_{54}H_{34}N_2O_2$=742.86)
B215	m/z=829.31($C_{61}H_{39}N_3O$=829.98)	B216	m/z=782.33($C_{58}H_{42}N_2O$=782.97)
B217	m/z=652.25($C_{48}H_{32}N_2O$=652.78)	B218	m/z=942.36($C_{71}H_{46}N_2O$=943.14)
B219	m/z=754.33($C_{57}H_{42}N_2$=754.96)	B220	m/z=754.33($C_{57}H_{42}N_2$=754.96)
B221	m/z=802.33($C_{61}H_{42}N_2$=803.00)	B222	m/z=830.37($C_{63}H_{46}N_2$=831.05)
B223	m/z=878.37($C_{67}H_{46}N_2$=879.10)	B224	m/z=878.37($C_{67}H_{46}N_2$=879.10)
B225	m/z=954.40($C_{73}H_{50}N_2$=955.19)	B226	m/z=928.38($C_{71}H_{48}N_2$=929.15)
B227	m/z=852.35($C_{65}H_{44}N_2$=853.06)	B228	m/z=878.37($C_{67}H_{46}N_2$=879.10)
B229	m/z=878.37($C_{67}H_{46}N_2$=879.10)	B230	m/z=878.37($C_{67}H_{46}N_2$=879.10)
B231	m/z=562.24($C_{42}H_{30}N_2$=562.70)	B232	m/z=638.27($C_{48}H_{34}N_2$=638.80)
B233	m/z=638.27($C_{48}H_{34}N_2$=638.80)	B234	m/z=714.30($C_{54}H_{38}N_2$=714.89)
B235	m/z=954.40($C_{73}H_{50}N_2$=955.19)	B236	m/z=800.32($C_{61}H_{40}N_2$=800.98)
B237	m/z=779.29($C_{57}H_{37}N_3O$=779.92)	B238	m/z=802.33($C_{61}H_{42}N_2$=803.00)
B239	m/z=878.37($C_{67}H_{46}N_2$=879.10)	B240	m/z=878.37($C_{67}H_{46}N_2$=879.10)
B241	m/z=878.37($C_{67}H_{46}N_2$=879.10)	B242	m/z=866.37($C_{66}H_{46}N_2$=867.08)
B243	m/z=954.40($C_{73}H_{50}N_2$=955.19)	B244	m/z=880.38($C_{67}H_{48}N_2$=881.11)
B245	m/z=954.40($C_{73}H_{50}N_2$=955.19)	B246	m/z=820.29($C_{60}H_{40}N_2S$=821.04)
B247	m/z=896.32($C_{66}H_{44}N_2S$=897.13)	B248	m/z=754.33($C_{57}H_{42}N_2$=754.96)
B249	m/z=794.37($C_{60}H_{46}N_2$=795.02)	B250	m/z=679.30($C_{50}H_{37}N_3$=679.85)
B251	m/z=830.37($C_{63}H_{46}N_2$=831.05)	B252	m/z=830.37($C_{63}H_{46}N_2$=831.05)
B253	m/z=794.37($C_{60}H_{46}N_2$=795.02)	B254	m/z=818.33($C_{61}H_{42}N_2O$=819.00)
B255	m/z=728.32($C_{55}H_{40}N_2$=728.92)	B256	m/z=920.41($C_{70}H_{52}N_2$=921.18)
B257	m/z=729.31($C_{54}H_{39}N_3$=729.91)	B258	m/z=870.40($C_{66}H_{50}N_2$=871.12)
B259	m/z=802.33($C_{61}H_{42}N_2$=803.00)	B260	m/z=878.37($C_{67}H_{46}N_2$=879.10)
B261	m/z=918.40($C_{70}H_{50}N_2$=919.16)	B262	m/z=879.36($C_{66}H_{45}N_3$=880.08)
B263	m/z=802.33($C_{61}H_{42}N_2$=803.00)	B264	m/z=878.37($C_{67}H_{46}N_2$=879.10)
B265	m/z=918.40($C_{70}H_{50}N_2$=919.16)	B266	m/z=858.31($C_{63}H_{42}N_2S$=859.09)
B267	m/z=800.32($C_{61}H_{40}N_2$=800.98)	B268	m/z=916.38($C_{70}H_{48}N_2$=917.14)
B269	m/z=744.26($C_{54}H_{36}N_2S$=744.94)	B270	m/z=908.32($C_{67}H_{44}N_2S$=909.14)
B271	m/z=668.23($C_{48}H_{32}N_2S$=668.85)	B272	m/z=784.29($C_{57}H_{40}N_2S$=785.01)
B273	m/z=669.22($C_{47}H_{31}N_3S$=669.83)	B274	m/z=719.24($C_{51}H_{33}N_3S$=719.89)
B275	m/z=768.26($C_{56}H_{36}N_2S$=768.96)	B276	m/z=702.27($C_{52}H_{34}N_2O$=702.84)

[489]

B277	m/z=818.33($C_{61}H_{42}N_2O$=819.00)	B278	m/z=729.28($C_{53}H_{35}N_3O$=729.86)
B279	m/z=652.25($C_{48}H_{32}N_2O$=652.78)	B280	m/z=892.35($C_{67}H_{44}N_2O$=893.08)
B281	m/z=702.27($C_{52}H_{34}N_2O$=702.84)	B282	m/z=806.30($C_{58}H_{38}N_4O$=806.95)
B283	m/z=678.30($C_{51}H_{38}N_2$=678.86)	B284	m/z=754.33($C_{57}H_{47}N_2$=754.96)
B285	m/z=754.33($C_{57}H_{42}N_2$=754.96)	B286	m/z=830.37($C_{63}H_{46}N_2$=831.05)
B287	m/z=802.33($C_{61}H_{42}N_2$=803.00)	B288	m/z=878.37($C_{67}H_{46}N_2$=879.10)
B289	m/z=878.37($C_{67}H_{46}N_2$=879.10)	B290	m/z=954.40($C_{73}H_{50}N_2$=955.19)
B291	m/z=928.38($C_{71}H_{48}N_2$=929.15)	B292	m/z=928.38($C_{71}H_{48}N_2$=929.15)
B293	m/z=852.35($C_{65}H_{44}N_2$=853.06)	B294	m/z=928.38($C_{71}H_{48}N_2$=929.15)
B295	m/z=562.24($C_{42}H_{30}N_2$=562.70)	B296	m/z=638.27($C_{48}H_{34}N_2$=638.80)
B297	m/z=638.27($C_{48}H_{34}N_2$=638.80)	B298	m/z=714.30($C_{54}H_{38}N_2$=714.89)
B299	m/z=714.30($C_{54}H_{38}N_2$=714.89)	B300	m/z=790.33($C_{60}H_{42}N_2$=790.99)
B301	m/z=878.37($C_{67}H_{46}N_2$=879.10)	B302	m/z=954.40($C_{73}H_{50}N_2$=955.19)
B303	m/z=892.38($C_{68}H_{48}N_2$=893.12)	B304	m/z=830.37($C_{63}H_{46}N_2$=831.05)
B305	m/z=838.32($C_{61}H_{40}F_2N_2$=838.98)	B306	m/z=883.40($C_{67}H_{41}D_5N_2$=884.13)
B307	m/z=928.38($C_{71}H_{48}N_2$=929.15)	B308	m/z=1030.43($C_{79}H_{54}N_2$=1031.29)
B309	m/z=878.37($C_{67}H_{46}N_2$=879.10)	B310	m/z=954.40($C_{73}H_{50}N_2$=955.19)
B311	m/z=878.37($C_{67}H_{46}N_2$=879.10)	B312	m/z=928.38($C_{71}H_{48}N_2$=929.15)
B313	m/z=802.33($C_{61}H_{42}N_2$=803.00)	B314	m/z=878.37($C_{67}H_{46}N_2$=879.10)
B315	m/z=878.37($C_{67}H_{46}N_2$=879.10)	B316	m/z=878.37($C_{67}H_{46}N_2$=879.10)
B317	m/z=744.26($C_{54}H_{36}N_2S$=744.94)	B318	m/z=614.27($C_{46}H_{34}N_2$=614.78)
B319	m/z=765.31($C_{57}H_{39}N_3$=765.94)	B320	m/z=814.33($C_{62}H_{42}N_2$=815.01)
B321	m/z=906.40($C_{69}H_{50}N_2$=907.15)	B322	m/z=954.40($C_{73}H_{50}N_2$=955.19)
B323	m/z=1028.41($C_{79}H_{52}N_2$=1029.27)	B324	m/z=881.38($C_{66}H_{47}N_3$=882.10)
B325	m/z=954.40($C_{73}H_{50}N_2$=955.19)	B326	m/z=854.33($C_{64}H_{42}N_2O$=855.03)
B327	m/z=714.30($C_{54}H_{38}N_2$=714.89)	B328	m/z=830.37($C_{63}H_{46}N_2$=831.05)
B329	m/z=918.40($C_{70}H_{50}N_2$=919.16)	B330	m/z=805.35($C_{60}H_{43}N_3$=806.00)
B331	m/z=830.37($C_{63}H_{46}N_2$=831.05)	B332	m/z=830.37($C_{63}H_{46}N_2$=831.05)
B333	m/z=844.38($C_{64}H_{48}N_2$=845.08)	B334	m/z=834.31($C_{61}H_{42}N_2S$=835.06)
B335	m/z=778.33($C_{59}H_{42}N_2$=778.98)	B336	m/z=946.43($C_{72}H_{54}N_2$=947.21)
B337	m/z=869.38($C_{65}H_{47}N_3$=870.09)	B338	m/z=870.40($C_{66}H_{50}N_2$=871.12)
B339	m/z=852.35($C_{65}H_{44}N_2$=853.06)	B340	m/z=878.37($C_{67}H_{46}N_2$=879.10)
B341	m/z=994.43($C_{76}H_{54}N_2$=995.26)	B342	m/z=903.36($C_{68}H_{45}N_3$=904.10)
B343	m/z=802.33($C_{61}H_{42}N_2$=803.00)	B344	m/z=878.37($C_{67}H_{46}N_2$=879.10)
B345	m/z=918.40($C_{70}H_{50}N_2$=919.16)	B346	m/z=884.32($C_{65}H_{44}N_2S$=885.12)
B347	m/z=916.38($C_{70}H_{48}N_2$=917.14)	B348	m/z=850.33($C_{65}H_{42}N_2$=851.04)
B349	m/z=744.26($C_{54}H_{36}N_2S$=744.94)	B350	m/z=908.32($C_{67}H_{44}N_2S$=909.14)
B351	m/z=668.23($C_{48}H_{32}N_2S$=668.85)	B352	m/z=745.26($C_{53}H_{35}N_3S$=745.93)
B353	m/z=774.22($C_{54}H_{34}N_2S_2$=774.99)	B354	m/z=820.29($C_{60}H_{40}N_2S$=821.04)

[490]

B355	m/z=908.32($C_{67}H_{44}N_2S$=909.14)	B356	m/z=804.31($C_{60}H_{40}N_2O$=804.97)
B357	m/z=729.28($C_{53}H_{35}N_3O$=729.86)	B358	m/z=768.31($C_{57}H_{40}N_2O$=768.94)
B359	m/z=752.28($C_{56}H_{36}N_2O$=752.90)	B360	m/z=892.35($C_{67}H_{44}N_2O$=893.08)
B361	m/z=818.33($C_{61}H_{42}N_2O$=819.00)	B362	m/z=792.28($C_{58}H_{36}N_2O_2$=792.92)
B363	m/z=804.31($C_{60}H_{40}N_2O$=804.97)	B364	m/z=806.30($C_{58}H_{38}N_4O$=806.95)
B365	m/z=802.33($C_{61}H_{42}N_2$=803.00)	B366	m/z=918.40($C_{70}H_{50}N_2$=919.16)
B367	m/z=908.32($C_{67}H_{44}N_2S$=909.14)	B368	m/z=852.35($C_{65}H_{44}N_2$=853.06)
B369	m/z=918.40($C_{70}H_{50}N_2$=919.16)	B370	m/z=803.33($C_{60}H_{41}N_3$=803.99)
B371	m/z=878.37($C_{67}H_{46}N_2$=879.10)	B372	m/z=954.40($C_{73}H_{50}N_2$=955.19)
B373	m/z=968.41($C_{74}H_{52}N_2$=969.22)	B374	m/z=853.35($C_{64}H_{43}N_3$=854.05)
B375	m/z=994.43($C_{76}H_{54}N_2$=995.26)	B376	m/z=902.37($C_{69}H_{46}N_2$=903.12)
B377	m/z=918.40($C_{70}H_{50}N_2$=919.16)	B378	m/z=892.35($C_{67}H_{44}N_2O$=893.08)
B379	m/z=802.33($C_{61}H_{42}N_2$=803.00)	B380	m/z=1042.43($C_{80}H_{54}N_2$=1043.30)
B381	m/z=853.35($C_{64}H_{43}N_3$=854.05)	B382	m/z=994.43($C_{76}H_{54}N_2$=995.26)
B383	m/z=878.37($C_{67}H_{46}N_2$=879.10)	B384	m/z=994.43($C_{76}H_{54}N_2$=995.26)
B385	m/z=884.32($C_{65}H_{44}N_2S$=885.12)	B386	m/z=994.43($C_{76}H_{54}N_2$=995.26)
C1	m/z=602.27($C_{45}H_{34}N_2$=602.76)	C2	m/z=678.30($C_{51}H_{38}N_2$=678.86)
C3	m/z=754.33($C_{57}H_{42}N_2$=754.96)	C4	m/z=652.29($C_{49}H_{36}N_2$=652.82)
C5	m/z=728.32($C_{55}H_{40}N_2$=728.92)	C6	m/z=726.30($C_{55}H_{38}N_2$=726.90)
C7	m/z=802.33($C_{61}H_{42}N_2$=803.00)	C8	m/z=802.33($C_{61}H_{42}N_2$=803.00)
C9	m/z=852.35($C_{65}H_{44}N_2$=853.06)	C10	m/z=852.35($C_{65}H_{44}N_2$=853.06)
C11	m/z=852.35($C_{65}H_{44}N_2$=853.06)	C12	m/z=724.29($C_{55}H_{36}N_2$=724.89)
C13	m/z=638.27($C_{48}H_{34}N_2$=638.80)	C14	m/z=638.27($C_{48}H_{34}N_2$=638.80)
C15	m/z=688.29($C_{52}H_{36}N_2$=688.86)	C16	m/z=536.23($C_{40}H_{28}N_2$=536.66)
C17	m/z=586.24($C_{44}H_{30}N_2$=586.72)	C18	m/z=642.21($C_{46}H_{30}N_2S$=642.81)
C19	m/z=652.25($C_{48}H_{32}N_2O$=652.78)	C20	m/z=744.26($C_{54}H_{36}N_2S$=744.94)
C21	m/z=754.33($C_{57}H_{42}N_2$=754.96)	C22	m/z=778.33($C_{59}H_{42}N_2$=778.98)
C23	m/z=718.33($C_{54}H_{42}N_2$=718.92)	C24	m/z=830.37($C_{63}H_{46}N_2$=831.05)
C25	m/z=754.33($C_{57}H_{42}N_2$=754.96)	C26	m/z=830.37($C_{63}H_{46}N_2$=831.05)
C27	m/z=679.30($C_{50}H_{37}N_3$=679.85)	C28	m/z=830.37($C_{63}H_{46}N_2$=831.05)
C29	m/z=802.33($C_{61}H_{42}N_2$=803.00)	C30	m/z=842.37($C_{64}H_{46}N_2$=843.06)
C31	m/z=801.31($C_{60}H_{39}N_3$=801.97)	C32	m/z=724.29($C_{55}H_{36}N_2$=724.89)
C33	m/z=746.25($C_{52}H_{34}N_4S$=746.92)	C34	m/z=718.24($C_{52}H_{34}N_2S$=718.90)
C35	m/z=652.25($C_{48}H_{32}N_2O$=652.78)	C36	m/z=666.23($C_{48}H_{30}N_2O_2$=666.76)
C37	m/z=753.28($C_{55}H_{35}N_3O$=753.89)	C38	m/z=706.30($C_{52}H_{38}N_2O$=706.87)
C39	m/z=576.22($C_{42}H_{28}N_2O$=576.68)	C40	m/z=866.33($C_{65}H_{42}N_2O$=867.04)

[491]

[492] 한편, 상기에서는 화학식 1로 표시되는 본 발명의 예시적 합성예를 설명하였지만, 이들은 모두 Suzuki cross-coupling 반응, Ullmann 반응, Miyaura boration 반응 및 Buchwald-Hartwig cross coupling 반응 등에 기초한 것으로

구체적 합성예에 명시된 치환기 이외에 화학식 1에 정의된 다른 치환기(R^1, R^2, L^1, Ar^1, Ar^2, Ar^3 등의 치환기)가 결합되더라도 상기 반응이 진행된다는 것을 당업자라면 쉽게 이해할 수 있을 것이다.

[493] 예컨대, 반응식 2에서 출발물질 -> Sub 1-I, Sub 1-IV -> Sub 1-V, Sub 1-VI -> Sub 1 로의 반응 등은 모두 Suzuki cross-coupling 반응에 기초한 것이고, 반응식 2에서 Sub 1-II -> Sub 1-III 반응은 Ullmann 반응에 기초한 것이며, 반응식 2에서 Sub 1-III -> Sub 1-IV, Sub 1-V -> Sub 1-VI 등은 Miyaura boration 반응에 기초한 것이며, 반응식 27에서 출발물질 -> Sub 2, Product 합성 반응식(반응식 40 내지 반응식 67)은 Buchwald-Hartwig cross coupling 반응에 기초한 것으로, 이들에 구체적으로 명시되지 않은 치환기가 결합되더라도 상기 반응들이 진행할 것이다.

[494]

[495] 유기전기소자의 제조평가

[496] **[실시예 I-1] 그린유기전기발광소자(정공수송층)**

[497] 본 발명의 화합물을 정공수송층 물질로 사용하여 통상적인 방법에 따라 유기전기발광소자를 제작하였다. 먼저, 유기 기판에 형성된 ITO층(양극) 상에 4,4',4"-Tris[2-naphthyl(phenyl)amino]triphenylamine (이하 "2-TNATA"로 약기함)을 60nm 두께로 진공증착하여 정공주입층을 형성한 후, 상기 정공주입층 상에 본 발명의 화합물 B1을 60nm 두께로 진공증착하여 정공수송층을 형성하였다. 이어서, 상기 정공수송층 상에 4,4'-N,N'-dicarbazole-biphenyl (이하 "CBP"로 약기함)을 호스트로, tris(2-phenylpyridine)-iridium (이하 "$Ir(ppy)_3$"으로 약기함)을 도판트로 하여 90:10 중량비로 도핑하여 30nm 두께로 진공증착하여 발광층을 형성하였다. 이어서, 상기 발광층 상에 (1,1'-비스페닐)-4-올레이토)비스(2-메틸-8-퀴놀린올레이토)알루미늄(이하 "BAlq"로 약기함)을 10nm 두께로 진공증착하여 정공저지층을 형성하고, 상기 정공저지층 상에 트리스(8-퀴놀리놀)알루미늄 (이하 "Alq_3"로 약기함)을 40nm 두께로 진공증착하여 전자수송층을 형성하였다. 이후, 할로젠화 알칼리 금속인 LiF를 0.2nm 두께로 증착하여 전자주입층을 형성하고, 이어서 Al을 150nm의 두께로 증착하여 음극을 형성함으로써 유기전기발광소자를 제조하였다.

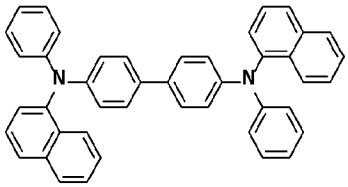
[498] **[실시예 I-2] 내지 [실시예 I-300] 그린유기전기발광소자(정공수송층)**

[499] 정공수송층 물질로 본 발명의 화합물 B1 대신 하기 표 4에 기재된 본 발명의 화합물 B6 내지 C40을 사용한 점을 제외하고는 실시예 I-1과 동일한 방법으로 유기전기발광소자를 제작하였다.

[500] **[비교예 1]**

[501] 정공수송층 물질로 본 발명의 화합물 B1 대신 하기 비교화합물 1을 사용한 것을 제외하고는 상기 실시예 I-1과 동일한 방법으로 유기전기발광소자를 제작하였다.

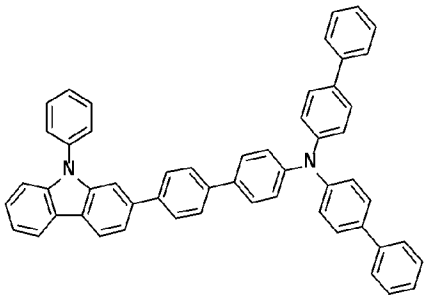
[502] <비교화합물 1>

[503] 

[504] **[비교예 2]**

[505] 정공수송층 물질로 본 발명의 화합물 B1 대신 하기 비교화합물 2를 사용한 것을 제외하고는 상기 실시예 I-1과 동일한 방법으로 유기전기발광소자를 제작하였다.

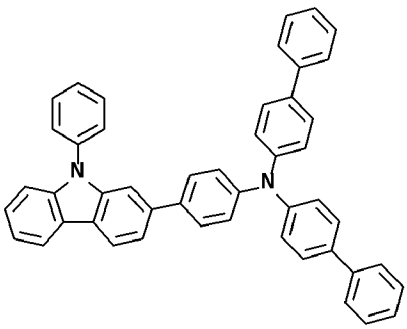
[506] <비교화합물 2>

[507] 

[508] **[비교예 3]**

[509] 정공수송층 물질로 본 발명의 화합물 B1 대신 하기 비교화합물 3을 사용한 것을 제외하고는 상기 실시예 I-1과 동일한 방법으로 유기전기발광소자를 제작하였다.

[510] <비교화합물 3>

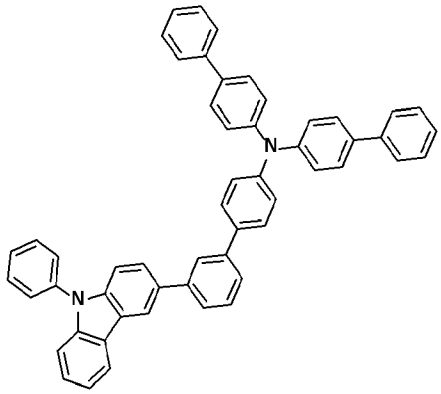
[511] 

[512] **[비교예 4]**

[513] 정공수송층 물질로 본 발명의 화합물 B1 대신 하기 비교화합물 4를 사용한 것을 제외하고는 상기 실시예 I-1과 동일한 방법으로 유기전기발광소자를 제작하였다.

[514] <비교화합물 4>

[515]

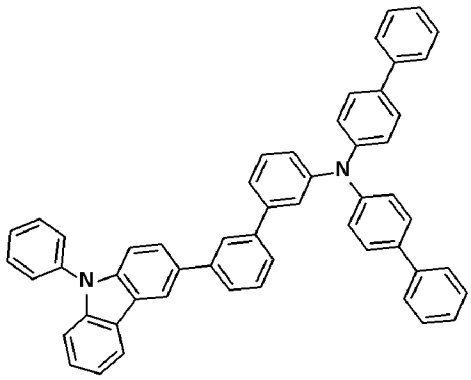


[516] **[비교예 5]**

[517] 정공수송층 물질로 본 발명의 화합물 B1 대신 하기 비교화합물 5를 사용한 것을 제외하고는 상기 실시예 I-1과 동일한 방법으로 유기전기발광소자를 제작하였다.

[518] <비교화합물 5>

[519]

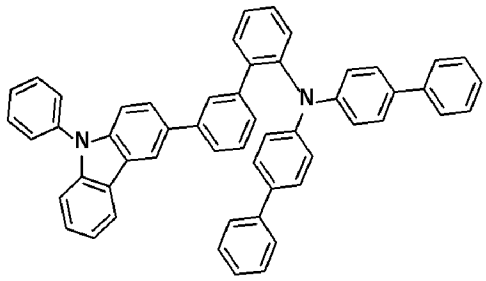


[520] **[비교예 6]**

[521] 정공수송층 물질로 본 발명의 화합물 B1 대신 하기 비교화합물 6을 사용한 것을 제외하고는 상기 실시예 I-1과 동일한 방법으로 유기전기발광소자를 제작하였다.

[522] <비교화합물 6>

[523]



[524] 본 발명의 실시예 I-1 내지 실시예 I-300, 비교예 1 내지 비교예 6에 의해 제조된 유기전기발광소자들에 순바이어스 직류전압을 가하여 포토리서치(photoresearch)사의 PR-650으로 전기발광(EL) 특성을 측정하였으며, 그 측정결과 5000cd/㎡ 기준 휘도에서 맥사이언스사에서 제조된 수명 측정

장비를 통해 T95수명을 측정하였으며, 그 측정 결과는 하기 표 4와 같다.

[525] [표 4]

[526]

	화합물	Voltage (V)	Current Density(mA/㎠)	Brightness (cd/㎡)	Efficiency (cd/A)	Lifetime T(95)	CIE	
							x	y
비교예(1)	비교화합물1	6.0	20.8	5000	24.0	53.0	0.33	0.61
비교예(2)	비교화합물2	5.7	18.0	5000	27.8	82.3	0.33	0.62
비교예(3)	비교화합물3	5.6	18.4	5000	27.2	83.4	0.33	0.62
비교예(4)	비교화합물4	5.2	15.3	5000	32.7	123.7	0.33	0.62
비교예(5)	비교화합물5	4.9	15.1	5000	33.0	125.8	0.33	0.62
비교예(6)	비교화합물6	5.2	14.8	5000	33.8	138.7	0.33	0.61
실시예(I-1)	화합물(B1)	5.1	14.4	5000	34.6	149.7	0.33	0.61
실시예(I-2)	화합물(B6)	5.1	13.7	5000	36.4	152.9	0.33	0.61
실시예(I-3)	화합물(B7)	5.2	14.3	5000	35.1	153.3	0.33	0.61
실시예(I-4)	화합물(B11)	4.9	14.0	5000	35.6	156.2	0.33	0.62
실시예(I-5)	화합물(B12)	5.2	14.7	5000	33.9	150.5	0.33	0.62
실시예(I-6)	화합물(B16)	5.3	14.3	5000	35.0	160.3	0.33	0.62
실시예(I-7)	화합물(B17)	5.0	14.0	5000	35.7	150.4	0.33	0.62
실시예(I-8)	화합물(B21)	5.0	13.2	5000	38.0	166.6	0.33	0.62
실시예(I-9)	화합물(B22)	5.1	13.7	5000	36.4	158.7	0.33	0.62
실시예(I-10)	화합물(B23)	5.0	14.1	5000	35.3	155.7	0.33	0.61
실시예(I-11)	화합물(B24)	5.1	14.0	5000	35.8	152.8	0.33	0.61
실시예(I-12)	화합물(B25)	5.1	13.9	5000	35.9	160.4	0.33	0.61
실시예(I-13)	화합물(B26)	5.1	13.5	5000	37.0	157.3	0.33	0.62
실시예(I-14)	화합물(B27)	5.3	14.1	5000	35.6	158.9	0.33	0.61
실시예(I-15)	화합물(B31)	5.3	14.4	5000	34.7	148.7	0.33	0.61
실시예(I-16)	화합물(B43)	5.3	14.9	5000	33.5	134.6	0.33	0.61
실시예(I-17)	화합물(B47)	5.3	15.0	5000	33.4	131.6	0.33	0.61
실시예(I-18)	화합물(B51)	5.1	13.8	5000	36.2	156.4	0.33	0.61
실시예(I-19)	화합물(B62)	5.3	14.5	5000	34.5	146.4	0.33	0.61
실시예(I-20)	화합물(B66)	5.1	14.5	5000	34.6	145.5	0.33	0.61
실시예(I-21)	화합물(B86)	5.1	14.7	5000	33.9	146.9	0.33	0.62
실시예(I-22)	화합물(B94)	5.2	15.2	5000	32.8	131.8	0.33	0.62
실시예(I-23)	화합물(B106)	5.0	14.2	5000	35.3	155.8	0.33	0.62
실시예(I-24)	화합물(B122)	5.1	15.1	5000	33.0	136.4	0.33	0.61
실시예(I-25)	화합물(B124)	5.1	14.8	5000	33.8	135.3	0.33	0.61
실시예(I-26)	화합물(B125)	5.3	14.7	5000	34.0	136.8	0.33	0.61
실시예(I-27)	화합물(B127)	5.2	15.0	5000	33.3	139.2	0.33	0.61
실시예(I-28)	화합물(B128)	5.1	14.8	5000	33.8	134.8	0.33	0.61
실시예(I-29)	화합물(B129)	5.0	15.0	5000	33.4	130.5	0.33	0.61

[527]

실시예(I-30)	화합물(B130)	5.3	15.0	5000	33.4	132.6	0.33	0.61
실시예(I-31)	화합물(B132)	5.0	14.8	5000	33.7	131.9	0.33	0.61
실시예(I-32)	화합물(B138)	5.2	15.2	5000	32.9	133.5	0.33	0.61
실시예(I-33)	화합물(B145)	5.1	15.2	5000	32.9	137.0	0.33	0.62
실시예(I-34)	화합물(B152)	5.0	15.2	5000	33.0	136.0	0.33	0.62
실시예(I-35)	화합물(B157)	5.3	14.7	5000	33.9	139.2	0.33	0.61
실시예(I-36)	화합물(B158)	5.3	15.3	5000	32.7	139.1	0.33	0.62
실시예(I-37)	화합물(B161)	5.2	14.8	5000	33.9	140.0	0.33	0.62
실시예(I-38)	화합물(B162)	5.2	14.9	5000	33.6	136.7	0.33	0.62
실시예(I-39)	화합물(B164)	5.2	14.8	5000	33.7	139.7	0.33	0.61
실시예(I-40)	화합물(B165)	5.2	14.8	5000	33.9	133.3	0.33	0.61
실시예(I-41)	화합물(B167)	5.0	14.7	5000	34.1	148.7	0.33	0.61
실시예(I-42)	화합물(B168)	5.2	14.5	5000	34.4	148.9	0.33	0.62
실시예(I-43)	화합물(B169)	5.0	13.9	5000	35.9	160.5	0.33	0.62
실시예(I-44)	화합물(B170)	5.2	14.4	5000	34.7	140.2	0.33	0.61
실시예(I-45)	화합물(B171)	5.1	14.5	5000	34.4	143.6	0.33	0.62
실시예(I-46)	화합물(B172)	5.2	14.7	5000	34.1	145.9	0.33	0.62
실시예(I-47)	화합물(B173)	5.1	14.6	5000	34.3	147.8	0.33	0.61
실시예(I-48)	화합물(B174)	5.0	14.0	5000	35.8	156.2	0.33	0.62
실시예(I-49)	화합물(B175)	4.9	14.0	5000	35.8	154.5	0.33	0.61
실시예(I-50)	화합물(B176)	5.0	13.9	5000	36.0	155.8	0.33	0.62
실시예(I-51)	화합물(B177)	5.1	13.6	5000	36.6	156.5	0.33	0.62
실시예(I-52)	화합물(B178)	5.1	14.5	5000	34.5	144.7	0.33	0.62
실시예(I-53)	화합물(B179)	5.1	14.0	5000	35.7	160.7	0.33	0.62
실시예(I-54)	화합물(B180)	5.0	14.0	5000	35.6	153.6	0.33	0.62
실시예(I-55)	화합물(B181)	5.3	14.6	5000	34.2	144.8	0.33	0.61
실시예(I-56)	화합물(B182)	5.2	15.0	5000	33.4	141.0	0.33	0.61
실시예(I-57)	화합물(B183)	5.0	14.2	5000	35.2	153.1	0.33	0.61
실시예(I-58)	화합물(B184)	5.1	14.5	5000	34.5	149.5	0.33	0.61
실시예(I-59)	화합물(B185)	5.3	14.5	5000	34.4	151.1	0.33	0.62
실시예(I-60)	화합물(B186)	5.2	14.9	5000	33.6	136.7	0.33	0.61
실시예(I-61)	화합물(B187)	5.0	13.8	5000	36.2	151.6	0.33	0.61
실시예(I-62)	화합물(B188)	5.2	14.0	5000	35.6	153.6	0.33	0.61
실시예(I-63)	화합물(B189)	5.2	14.2	5000	35.2	161.4	0.33	0.61
실시예(I-64)	화합물(B190)	5.0	14.0	5000	35.6	153.8	0.33	0.61
실시예(I-65)	화합물(B191)	4.9	14.6	5000	34.3	150.6	0.33	0.62
실시예(I-66)	화합물(B192)	5.3	15.1	5000	33.1	133.0	0.33	0.61
실시예(I-67)	화합물(B193)	5.3	15.1	5000	33.2	131.7	0.33	0.62
실시예(I-68)	화합물(B194)	4.9	14.6	5000	34.2	143.6	0.33	0.61

[528]

실시예(I-69)	화합물(B195)	5.0	13.7	5000	36.5	159.7	0.33	0.61
실시예(I-70)	화합물(B196)	4.9	13.8	5000	36.2	156.3	0.33	0.62
실시예(I-71)	화합물(B197)	4.9	13.2	5000	37.9	164.8	0.33	0.61
실시예(I-72)	화합물(B198)	5.0	13.6	5000	36.7	151.5	0.33	0.61
실시예(I-73)	화합물(B199)	5.2	14.0	5000	35.7	161.7	0.33	0.62
실시예(I-74)	화합물(B200)	5.0	14.5	5000	34.5	145.6	0.33	0.62
실시예(I-75)	화합물(B201)	5.2	13.4	5000	37.2	163.2	0.33	0.62
실시예(I-76)	화합물(B202)	5.1	13.3	5000	37.6	160.7	0.33	0.61
실시예(I-77)	화합물(B203)	5.0	13.5	5000	37.1	160.3	0.33	0.61
실시예(I-78)	화합물(B204)	5.2	13.8	5000	36.3	150.3	0.33	0.61
실시예(I-79)	화합물(B205)	5.3	15.2	5000	32.8	130.5	0.33	0.61
실시예(I-80)	화합물(B206)	5.2	14.7	5000	34.1	144.6	0.33	0.61
실시예(I-81)	화합물(B207)	4.9	14.6	5000	34.2	148.3	0.33	0.61
실시예(I-82)	화합물(B208)	5.3	14.3	5000	34.9	146.7	0.33	0.62
실시예(I-83)	화합물(B209)	5.0	14.4	5000	34.8	145.0	0.33	0.62
실시예(I-84)	화합물(B210)	5.0	14.3	5000	34.9	150.3	0.33	0.62
실시예(I-85)	화합물(B211)	5.0	15.2	5000	33.0	130.3	0.33	0.61
실시예(I-86)	화합물(B212)	5.0	14.6	5000	34.3	150.3	0.33	0.61
실시예(I-87)	화합물(B213)	5.2	14.4	5000	34.8	151.7	0.33	0.61
실시예(I-88)	화합물(B214)	5.0	14.5	5000	34.5	151.8	0.33	0.61
실시예(I-89)	화합물(B215)	5.1	15.1	5000	33.2	135.7	0.33	0.62
실시예(I-90)	화합물(B216)	5.0	15.3	5000	32.8	132.0	0.33	0.62
실시예(I-91)	화합물(B217)	5.1	14.7	5000	34.1	147.6	0.33	0.62
실시예(I-92)	화합물(B218)	4.9	14.4	5000	34.7	150.3	0.33	0.61
실시예(I-93)	화합물(B219)	4.9	14.3	5000	34.9	159.9	0.33	0.62
실시예(I-94)	화합물(B220)	5.0	13.9	5000	36.0	157.2	0.33	0.62
실시예(I-95)	화합물(B221)	5.0	13.8	5000	36.3	151.2	0.33	0.62
실시예(I-96)	화합물(B222)	5.1	13.7	5000	36.4	152.0	0.33	0.61
실시예(I-97)	화합물(B223)	5.1	13.3	5000	37.6	165.2	0.33	0.62
실시예(I-98)	화합물(B224)	5.3	13.8	5000	36.2	156.6	0.33	0.62
실시예(I-99)	화합물(B225)	4.9	13.8	5000	36.1	161.0	0.33	0.61
실시예(I-100)	화합물(B226)	5.1	13.8	5000	36.3	158.9	0.33	0.62
실시예(I-101)	화합물(B227)	5.0	13.8	5000	36.1	150.6	0.33	0.61
실시예(I-102)	화합물(B228)	5.2	13.7	5000	36.5	150.7	0.33	0.61
실시예(I-103)	화합물(B229)	5.0	13.7	5000	36.5	151.7	0.33	0.61
실시예(I-104)	화합물(B230)	5.1	14.2	5000	35.2	154.9	0.33	0.61
실시예(I-105)	화합물(B231)	5.1	13.5	5000	37.0	152.7	0.33	0.61
실시예(I-106)	화합물(B232)	5.2	13.8	5000	36.2	156.6	0.33	0.62
실시예(I-107)	화합물(B233)	5.3	13.8	5000	36.3	152.5	0.33	0.61

[529]

실시예(I-108)	화합물(B234)	5.3	13.6	5000	36.7	150.0	0.33	0.61
실시예(I-109)	화합물(B235)	5.2	14.4	5000	34.8	148.0	0.33	0.62
실시예(I-110)	화합물(B236)	5.2	14.2	5000	35.3	150.3	0.33	0.62
실시예(I-111)	화합물(B237)	5.0	14.6	5000	34.3	140.4	0.33	0.61
실시예(I-112)	화합물(B238)	5.2	13.8	5000	36.2	156.3	0.33	0.61
실시예(I-113)	화합물(B239)	4.9	13.7	5000	36.6	161.5	0.33	0.62
실시예(I-114)	화합물(B240)	5.0	13.4	5000	37.4	163.5	0.33	0.61
실시예(I-115)	화합물(B241)	5.3	13.3	5000	37.6	163.1	0.33	0.61
실시예(I-116)	화합물(B242)	5.1	14.0	5000	35.7	150.2	0.33	0.62
실시예(I-117)	화합물(B243)	5.0	14.0	5000	35.8	157.5	0.33	0.61
실시예(I-118)	화합물(B244)	5.1	14.0	5000	35.6	155.6	0.33	0.61
실시예(I-119)	화합물(B245)	5.2	14.2	5000	35.1	150.8	0.33	0.62
실시예(I-120)	화합물(B246)	5.0	14.1	5000	35.4	155.2	0.33	0.62
실시예(I-121)	화합물(B247)	5.1	14.0	5000	35.8	150.8	0.33	0.62
실시예(I-122)	화합물(B248)	5.1	13.7	5000	36.6	151.7	0.33	0.62
실시예(I-123)	화합물(B249)	5.1	14.2	5000	35.3	157.8	0.33	0.61
실시예(I-124)	화합물(B250)	5.2	14.5	5000	34.5	142.8	0.33	0.62
실시예(I-125)	화합물(B251)	4.9	14.3	5000	35.0	157.2	0.33	0.62
실시예(I-126)	화합물(B252)	5.1	13.4	5000	37.2	161.7	0.33	0.62
실시예(I-127)	화합물(B253)	5.2	13.8	5000	36.2	152.0	0.33	0.62
실시예(I-128)	화합물(B254)	5.0	13.7	5000	36.5	156.9	0.33	0.61
실시예(I-129)	화합물(B255)	5.2	14.0	5000	35.7	156.5	0.33	0.62
실시예(I-130)	화합물(B256)	5.1	14.0	5000	35.8	156.9	0.33	0.61
실시예(I-131)	화합물(B257)	5.0	14.6	5000	34.3	147.5	0.33	0.61
실시예(I-132)	화합물(B258)	5.1	14.2	5000	35.1	157.2	0.33	0.61
실시예(I-133)	화합물(B259)	5.2	13.5	5000	37.1	164.4	0.33	0.61
실시예(I-134)	화합물(B260)	4.9	13.3	5000	37.6	165.1	0.33	0.62
실시예(I-135)	화합물(B261)	5.1	13.8	5000	36.2	155.1	0.33	0.62
실시예(I-136)	화합물(B262)	5.1	14.3	5000	35.0	154.8	0.33	0.62
실시예(I-137)	화합물(B263)	5.3	13.1	5000	38.3	166.6	0.33	0.62
실시예(I-138)	화합물(B264)	4.9	13.0	5000	38.4	165.3	0.33	0.61
실시예(I-139)	화합물(B265)	5.3	13.4	5000	37.4	165.0	0.33	0.61
실시예(I-140)	화합물(B266)	5.0	13.9	5000	35.9	161.9	0.33	0.61
실시예(I-141)	화합물(B267)	4.9	14.0	5000	35.7	158.5	0.33	0.61
실시예(I-142)	화합물(B268)	5.3	14.0	5000	35.6	155.7	0.33	0.62
실시예(I-143)	화합물(B269)	5.0	14.0	5000	35.6	156.7	0.33	0.62
실시예(I-144)	화합물(B270)	5.0	14.1	5000	35.4	152.3	0.33	0.61
실시예(I-145)	화합물(B271)	5.0	14.2	5000	35.2	150.3	0.33	0.61
실시예(I-146)	화합물(B272)	4.9	14.2	5000	35.3	160.9	0.33	0.62

[530]

실시예(I-147)	화합물(B273)	5.3	14.5	5000	34.5	144.8	0.33	0.62
실시예(I-148)	화합물(B274)	4.9	14.3	5000	34.9	142.1	0.33	0.62
실시예(I-149)	화합물(B275)	5.1	14.2	5000	35.2	152.3	0.33	0.62
실시예(I-150)	화합물(B276)	5.3	14.0	5000	35.7	156.8	0.33	0.62
실시예(I-151)	화합물(B277)	5.0	14.2	5000	35.1	153.0	0.33	0.61
실시예(I-152)	화합물(B278)	5.1	14.3	5000	34.8	145.2	0.33	0.62
실시예(I-153)	화합물(B279)	5.3	14.1	5000	35.4	160.9	0.33	0.62
실시예(I-154)	화합물(B280)	5.2	14.1	5000	35.5	153.6	0.33	0.61
실시예(I-155)	화합물(B281)	5.0	14.2	5000	35.1	157.4	0.33	0.61
실시예(I-156)	화합물(B282)	5.0	14.6	5000	34.2	152.0	0.33	0.62
실시예(I-157)	화합물(B283)	4.9	13.6	5000	36.8	161.9	0.33	0.62
실시예(I-158)	화합물(B284)	5.0	13.8	5000	36.1	156.8	0.33	0.61
실시예(I-159)	화합물(B285)	5.2	13.4	5000	37.3	166.5	0.33	0.61
실시예(I-160)	화합물(B286)	5.2	13.3	5000	37.6	161.0	0.33	0.62
실시예(I-161)	화합물(B287)	5.2	12.9	5000	38.7	166.5	0.33	0.62
실시예(I-162)	화합물(B288)	5.2	13.3	5000	37.7	161.2	0.33	0.61
실시예(I-163)	화합물(B289)	5.1	13.2	5000	37.9	163.5	0.33	0.61
실시예(I-164)	화합물(B290)	4.9	13.4	5000	37.2	164.8	0.33	0.62
실시예(I-165)	화합물(B291)	5.3	13.2	5000	37.9	166.2	0.33	0.61
실시예(I-166)	화합물(B292)	5.1	13.1	5000	38.0	165.6	0.33	0.61
실시예(I-167)	화합물(B293)	5.2	13.4	5000	37.4	160.6	0.33	0.62
실시예(I-168)	화합물(B294)	5.0	13.2	5000	37.8	164.4	0.33	0.62
실시예(I-169)	화합물(B295)	5.1	13.4	5000	37.3	160.2	0.33	0.61
실시예(I-170)	화합물(B296)	5.3	13.2	5000	37.8	162.6	0.33	0.61
실시예(I-171)	화합물(B297)	5.0	13.2	5000	37.9	162.8	0.33	0.62
실시예(I-172)	화합물(B298)	5.0	13.2	5000	38.0	164.7	0.33	0.62
실시예(I-173)	화합물(B299)	5.0	13.2	5000	37.8	166.4	0.33	0.62
실시예(I-174)	화합물(B300)	5.3	13.4	5000	37.4	165.3	0.33	0.61
실시예(I-175)	화합물(B301)	5.2	13.7	5000	36.4	161.2	0.33	0.62
실시예(I-176)	화합물(B302)	5.1	13.5	5000	36.9	161.5	0.33	0.62
실시예(I-177)	화합물(B303)	5.2	14.2	5000	35.1	159.5	0.33	0.61
실시예(I-178)	화합물(B304)	4.9	14.2	5000	35.2	152.5	0.33	0.62
실시예(I-179)	화합물(B305)	5.2	14.3	5000	35.0	158.4	0.33	0.61
실시예(I-180)	화합물(B306)	5.2	14.2	5000	35.2	153.3	0.33	0.62
실시예(I-181)	화합물(B307)	4.9	13.9	5000	36.1	153.4	0.33	0.61
실시예(I-182)	화합물(B308)	5.2	13.8	5000	36.3	158.8	0.33	0.61
실시예(I-183)	화합물(B309)	4.9	13.9	5000	36.0	161.5	0.33	0.62
실시예(I-184)	화합물(B310)	4.9	13.5	5000	37.1	162.0	0.33	0.62
실시예(I-185)	화합물(B311)	5.0	13.2	5000	37.9	162.1	0.33	0.62

[531]

실시예(I-186)	화합물(B312)	5.3	13.7	5000	36.5	153.7	0.33	0.62
실시예(I-187)	화합물(B313)	5.0	13.5	5000	37.2	165.6	0.33	0.62
실시예(I-188)	화합물(B314)	5.0	13.2	5000	38.0	160.9	0.33	0.62
실시예(I-189)	화합물(B315)	5.3	12.8	5000	38.9	164.6	0.33	0.61
실시예(I-190)	화합물(B316)	5.1	13.1	5000	38.2	166.0	0.33	0.62
실시예(I-191)	화합물(B317)	4.9	13.7	5000	36.6	151.5	0.33	0.62
실시예(I-192)	화합물(B318)	5.3	14.0	5000	35.7	152.6	0.33	0.61
실시예(I-193)	화합물(B319)	5.0	14.2	5000	35.3	151.9	0.33	0.61
실시예(I-194)	화합물(B320)	5.2	13.7	5000	36.6	157.1	0.33	0.62
실시예(I-195)	화합물(B321)	5.1	13.9	5000	36.0	155.2	0.33	0.61
실시예(I-196)	화합물(B322)	5.0	13.6	5000	36.6	155.7	0.33	0.62
실시예(I-197)	화합물(B323)	4.9	13.9	5000	36.0	154.2	0.33	0.61
실시예(I-198)	화합물(B324)	5.1	14.2	5000	35.2	153.8	0.33	0.61
실시예(I-199)	화합물(B325)	5.0	13.7	5000	36.5	155.6	0.33	0.61
실시예(I-200)	화합물(B326)	5.1	13.8	5000	36.2	156.3	0.33	0.62
실시예(I-201)	화합물(B327)	4.9	13.8	5000	36.2	152.3	0.33	0.62
실시예(I-202)	화합물(B328)	5.1	13.4	5000	37.3	165.8	0.33	0.61
실시예(I-203)	화합물(B329)	5.0	13.8	5000	36.1	161.8	0.33	0.62
실시예(I-204)	화합물(B330)	5.1	14.1	5000	35.6	152.5	0.33	0.62
실시예(I-205)	화합물(B331)	5.2	12.8	5000	39.0	165.1	0.33	0.62
실시예(I-206)	화합물(B332)	5.2	13.2	5000	37.8	164.6	0.33	0.61
실시예(I-207)	화합물(B333)	5.2	13.1	5000	38.2	165.1	0.33	0.61
실시예(I-208)	화합물(B334)	5.1	13.2	5000	37.9	160.5	0.33	0.61
실시예(I-209)	화합물(B335)	5.2	13.8	5000	36.1	152.3	0.33	0.61
실시예(I-210)	화합물(B336)	5.0	13.8	5000	36.2	153.3	0.33	0.62
실시예(I-211)	화합물(B337)	5.2	14.2	5000	35.1	154.2	0.33	0.61
실시예(I-212)	화합물(B338)	5.0	13.6	5000	36.8	152.4	0.33	0.61
실시예(I-213)	화합물(B339)	5.2	12.8	5000	39.0	164.6	0.33	0.61
실시예(I-214)	화합물(B340)	5.0	12.9	5000	38.6	164.1	0.33	0.61
실시예(I-215)	화합물(B341)	5.0	13.4	5000	37.4	165.0	0.33	0.62
실시예(I-216)	화합물(B342)	5.1	13.9	5000	36.1	160.8	0.33	0.62
실시예(I-217)	화합물(B343)	5.2	12.5	5000	40.1	169.1	0.33	0.62
실시예(I-218)	화합물(B344)	5.0	12.4	5000	40.2	167.1	0.33	0.62
실시예(I-219)	화합물(B345)	5.3	12.9	5000	38.9	166.5	0.33	0.61
실시예(I-220)	화합물(B346)	5.3	13.2	5000	37.9	163.2	0.33	0.62
실시예(I-221)	화합물(B347)	5.1	13.7	5000	36.5	154.0	0.33	0.61
실시예(I-222)	화합물(B348)	5.3	13.9	5000	36.0	151.4	0.33	0.61
실시예(I-223)	화합물(B349)	5.2	13.5	5000	37.1	150.3	0.33	0.61
실시예(I-224)	화합물(B350)	5.1	13.6	5000	36.6	150.7	0.33	0.62

[532]

실시예(I-225)	화합물(B351)	5.0	13.7	5000	36.5	156.8	0.33	0.61
실시예(I-226)	화합물(B352)	4.9	13.9	5000	36.0	152.7	0.33	0.62
실시예(I-227)	화합물(B353)	5.0	13.5	5000	37.0	156.0	0.33	0.61
실시예(I-228)	화합물(B354)	5.2	13.8	5000	36.1	151.3	0.33	0.61
실시예(I-229)	화합물(B355)	4.9	13.8	5000	36.3	158.6	0.33	0.61
실시예(I-230)	화합물(B356)	5.2	13.7	5000	36.6	157.9	0.33	0.61
실시예(I-231)	화합물(B357)	5.1	14.0	5000	35.7	161.5	0.33	0.61
실시예(I-232)	화합물(B358)	5.1	13.8	5000	36.4	156.8	0.33	0.61
실시예(I-233)	화합물(B359)	5.2	13.6	5000	36.8	155.4	0.33	0.62
실시예(I-234)	화합물(B360)	4.9	13.5	5000	37.0	156.9	0.33	0.62
실시예(I-235)	화합물(B361)	5.2	13.8	5000	36.3	155.8	0.33	0.62
실시예(I-236)	화합물(B362)	5.1	13.7	5000	36.5	158.1	0.33	0.62
실시예(I-237)	화합물(B363)	5.0	13.5	5000	37.1	157.6	0.33	0.61
실시예(I-238)	화합물(B364)	5.1	14.2	5000	35.1	155.4	0.33	0.62
실시예(I-239)	화합물(B365)	5.1	15.0	5000	33.3	132.0	0.33	0.62
실시예(I-240)	화합물(B366)	5.0	14.8	5000	33.7	139.4	0.33	0.62
실시예(I-241)	화합물(B367)	5.2	14.9	5000	33.5	134.2	0.33	0.61
실시예(I-242)	화합물(B368)	5.3	15.0	5000	33.4	136.1	0.33	0.62
실시예(I-243)	화합물(B369)	5.2	15.2	5000	32.9	134.8	0.33	0.61
실시예(I-244)	화합물(B370)	5.1	15.1	5000	33.2	133.7	0.33	0.61
실시예(I-245)	화합물(B371)	5.3	15.1	5000	33.0	130.4	0.33	0.61
실시예(I-246)	화합물(B372)	5.1	14.3	5000	35.0	139.6	0.33	0.62
실시예(I-247)	화합물(B373)	5.1	14.7	5000	34.0	144.9	0.33	0.62
실시예(I-248)	화합물(B374)	5.4	14.6	5000	34.4	145.3	0.33	0.61
실시예(I-249)	화합물(B375)	5.1	14.6	5000	34.2	150.0	0.33	0.61
실시예(I-250)	화합물(B376)	5.0	14.7	5000	33.9	143.8	0.33	0.62
실시예(I-251)	화합물(B377)	5.1	14.6	5000	34.4	146.5	0.33	0.61
실시예(I-252)	화합물(B378)	5.0	14.3	5000	35.0	144.5	0.33	0.62
실시예(I-253)	화합물(B379)	5.3	14.0	5000	35.8	160.2	0.33	0.62
실시예(I-254)	화합물(B380)	5.1	14.0	5000	35.7	154.5	0.33	0.61
실시예(I-255)	화합물(B381)	5.1	14.1	5000	35.5	159.2	0.33	0.62
실시예(I-256)	화합물(B382)	5.3	14.0	5000	35.8	145.5	0.33	0.62
실시예(I-257)	화합물(B383)	5.2	14.3	5000	34.9	147.8	0.33	0.61
실시예(I-258)	화합물(B384)	5.2	13.8	5000	36.2	150.5	0.33	0.61
실시예(I-259)	화합물(B385)	5.3	14.0	5000	35.6	151.7	0.33	0.62
실시예(I-260)	화합물(B386)	5.2	14.0	5000	35.7	145.4	0.33	0.61
실시예(I-261)	화합물(C1)	5.1	13.0	5000	38.4	149.6	0.33	0.61
실시예(I-262)	화합물(C2)	5.2	14.3	5000	34.9	147.4	0.33	0.61
실시예(I-263)	화합물(C3)	5.1	13.7	5000	36.6	149.8	0.33	0.61

[533]

실시예(I-264)	화합물(C4)	5.2	14.8	5000	33.8	138.2	0.33	0.62
실시예(I-265)	화합물(C5)	5.2	13.5	5000	37.1	148.4	0.33	0.61
실시예(I-266)	화합물(C6)	5.3	14.8	5000	33.8	140.9	0.33	0.62
실시예(I-267)	화합물(C7)	5.2	14.0	5000	35.8	136.0	0.33	0.61
실시예(I-268)	화합물(C8)	5.0	14.4	5000	34.8	152.0	0.33	0.61
실시예(I-269)	화합물(C9)	5.3	14.9	5000	33.5	147.2	0.33	0.61
실시예(I-270)	화합물(C10)	5.2	13.5	5000	37.2	145.7	0.33	0.61
실시예(I-271)	화합물(C11)	5.1	13.7	5000	36.5	138.7	0.33	0.61
실시예(I-272)	화합물(C12)	5.3	14.9	5000	33.6	149.1	0.33	0.61
실시예(I-273)	화합물(C13)	5.2	13.4	5000	37.3	138.9	0.33	0.62
실시예(I-274)	화합물(C14)	5.1	13.9	5000	36.0	149.7	0.33	0.62
실시예(I-275)	화합물(C15)	5.1	14.3	5000	35.0	137.7	0.33	0.62
실시예(I-276)	화합물(C16)	5.2	14.9	5000	33.6	146.2	0.33	0.62
실시예(I-277)	화합물(C17)	5.0	13.5	5000	37.1	135.4	0.33	0.61
실시예(I-278)	화합물(C18)	5.3	14.3	5000	35.1	148.6	0.33	0.62
실시예(I-279)	화합물(C19)	5.1	14.0	5000	35.6	147.0	0.33	0.62
실시예(I-280)	화합물(C20)	5.1	14.6	5000	34.2	149.6	0.33	0.62
실시예(I-281)	화합물(C21)	5.1	13.4	5000	37.2	140.0	0.33	0.61
실시예(I-282)	화합물(C22)	5.2	14.4	5000	34.6	147.1	0.33	0.62
실시예(I-283)	화합물(C23)	5.3	13.6	5000	36.9	143.7	0.33	0.61
실시예(I-284)	화합물(C24)	5.1	13.0	5000	38.5	141.8	0.33	0.61
실시예(I-285)	화합물(C25)	5.1	14.6	5000	34.2	140.2	0.33	0.61
실시예(I-286)	화합물(C26)	5.1	13.9	5000	36.0	146.8	0.33	0.62
실시예(I-287)	화합물(C27)	5.0	14.2	5000	35.3	145.9	0.33	0.62
실시예(I-288)	화합물(C28)	5.3	14.3	5000	34.9	142.1	0.33	0.61
실시예(I-289)	화힙물(C29)	5.1	13.4	5000	37.4	137.1	0.33	0.61
실시예(I-290)	화합물(C30)	5.3	13.1	5000	38.1	146.0	0.33	0.61
실시예(I-291)	화합물(C31)	5.1	13.3	5000	37.6	139.8	0.33	0.62
실시예(I-292)	화합물(C32)	5.0	13.6	5000	36.8	147.9	0.33	0.61
실시예(I-293)	화합물(C33)	5.1	14.2	5000	35.3	135.8	0.33	0.62
실시예(I-294)	화합물(C34)	5.1	13.0	5000	38.4	142.8	0.33	0.61
실시예(I-295)	화합물(C35)	5.1	14.1	5000	35.3	143.0	0.33	0.61
실시예(I-296)	화합물(C36)	5.3	13.0	5000	38.4	147.8	0.33	0.61
실시예(I-297)	화합물(C37)	5.2	13.3	5000	37.6	148.1	0.33	0.61
실시예(I-298)	화합물(C38)	5.0	14.8	5000	33.8	145.0	0.33	0.61
실시예(I-299)	화합물(C39)	5.3	14.1	5000	35.4	147.0	0.33	0.61
실시예(I-300)	화합물(C40)	5.0	14.1	5000	35.5	135.3	0.33	0.62

[534]

[535] 상기 표 4의 결과로부터 알 수 있듯이, 본 발명의 화합물을 정공수송층의 재료로 사용한 유기전기발광소자는 비교화합물 1 내지 비교화합물 6을 정공수송층의 재료로 사용한 유기전기발광소자에 비해 비교적 구동전압이 낮고, 발광효율이 향상되었을 뿐만 아니라 수명 등이 현저히 개선되었다.

[536] 이와 같은 결과는 특히, 본 발명의 화합물(연결기가 비선형 형태; non-linear type)과 비교화합물(연결기가 선형 형태; linear type)의 비교를 통해 연결기의 결합유형(선형 형태 또는 비선형 형태)에 따라 결과가 상이하게 나타나는 것을 보여준다.

[537] 카바졸과 아민(-NAr^2Ar^3)을 연결해주는 연결기의 위치가 para(선형 형태; linear type)위치인 경우보다 meta(비선형 형태; non-linear type)위치로 왔을 때 깊은 HOMO 에너지 레벨과 높은 T1 값 및 높은 열 안정성을 보였고, 이는 본 발명 화합물이 비교화합물 2 및 비교화합물 3에 비해 구동전압, 효율 및 수명에서 개선된 결과로 나타났다.

[538] meta로 꺽인 유형(비선형 형태; non-linear type)의 연결기는 para 유형(선형 형태; linear type)의 연결기보다 컨쥬게이션 길이(conjugation length)가 짧아지며, 이로 인해 밴드 갭(band gap)이 넓어지고, 높은 T1 값을 가지게 된다.

[539] 따라서 meta로 꺽인 유형(비선형 형태; non-linear type)의 연결기는 높은 T1 값으로 전자를 블로킹하는 능력을 향상시킴과 동시에 깊은 HOMO 에너지 레벨로 인해 정공이 발광층으로 원활하게 수송되어 결과적으로 엑시톤이 발광층 내에 더욱 쉽게 생성되면서 효율이 향상되는 것으로 판단된다. 또한 높은 열 안정성을 갖게되어 이로 인해 수명이 늘어나는 것을 확인할 수 있다.

[540] 또한 카바졸 백본(backbone)에 직접 연결되는 연결기의 위치가 2번으로 치환된 본 발명 화합물이 3번으로 치환된 비교화합물 4 내지 비교화합물 6에 비해 짧은 컨쥬게이션 길이(conjugation length)를 나타내어 효율과 수명 측면에서 상기 설명한 바와 같이, 좀 더 개선된 결과를 나타낸다.

[541] 앞에서 설명한 특성(깊은 HOMO 에너지 레벨, 높은 T1값, 높은 열 안정성)들을 종합해보면 카바졸과 아민(-NAr^2Ar^3) 사이에 있는 연결기의 결합위치에 따라 밴드 갭 및 전기적 특성, 계면 특성 등이 크게 변화될 수 있다는 것을 보여주며 이는 소자의 성능향상에 주요 인자로 작용한다는 것을 확인할 수 있다.

[542] 또한 정공수송층의 경우에는 발광층(호스트)과의 상호관계를 파악해야 하는바, 유사한 코어를 사용하더라도 본 발명에 따른 화합물이 사용된 정공수송층에서 나타내는 특징을 유추하는 것은 통상의 기술자라 하더라도 매우 어려울 것이다.

[543]

[544] **[실시예 Ⅱ-1] 블루유기전기발광소자(발광보조층)**

[545] 본 발명의 화합물을 발광보조층 물질로 사용하여 통상적인 방법에 따라 유기전기발광소자를 제작하였다. 먼저, 유기 기판에 형성된 ITO층(양극) 상에 2-TNATA를 60nm 두께로 진공증착하여 정공주입층을 형성한 후, 상기 정공주입층 상에 N,N'-Bis(1-naphthalenyl)-N,N'-bis-phenyl-(1,1'-biphenyl)-4,4'-diamine (이하 "NPB"로 약기함)을 60nm 두께로 진공증착하여 정공수송층을 형성하였다. 이어서, 상기 정공수송층 상에 본 발명의 화합물 B6을 20nm 두께로

진공증착하여 발광보조층을 형성한 후, 상기 발광보조층 상에 9,10-Di(2-naphthyl)anthracene (이하 "ADN"이라 약기함)을 호스트로, BD-052X(Idemitsu kosan 제조)을 도판트로 하여 93:7 중량비로 도핑하여 30nm 두께로 진공증착하여 발광층을 형성하였다. 이어서, 상기 발광층 상에 BAlq를 10nm 두께로 진공증착하여 정공저지층을 형성하고, 상기 정공저지층 상에 Alq_3을 40nm 두께로 진공증착하여 전자수송층을 형성하였다. 이후, 할로젠화 알칼리 금속인 LiF를 0.2nm 두께로 증착하여 전자주입층을 형성하고, 이어서 Al을 150nm의 두께로 증착하여 음극을 형성함으로써 유기전기발광소자를 제조하였다.

[546] **[실시예 Ⅱ-2] 내지 [실시예 Ⅱ-86] 블루유기전기발광소자(발광보조층)**

[547] 발광보조층 물질로 본 발명의 화합물 B6 대신 하기 표 5에 기재된 본 발명의 화합물 B7 내지 B386을 사용한 점을 제외하고는 실시예 II-1과 동일한 방법으로 유기전기발광소자를 제작하였다.

[548] **[비교예 7]**

[549] 발광보조층 물질로 본 발명의 화합물 B6 대신 상기 비교화합물 2를 사용한 것을 제외하고는 상기 실시예 II-1과 동일한 방법으로 유기전기발광소자를 제작하였다.

[550] **[비교예 8]**

[551] 발광보조층 물질로 본 발명의 화합물 B6 대신 상기 비교화합물 4를 사용한 것을 제외하고는 상기 실시예 II-1과 동일한 방법으로 유기전기발광소자를 제작하였다.

[552] **[비교예 9]**

[553] 발광보조층 물질로 본 발명의 화합물 B6 대신 상기 비교화합물 5를 사용한 것을 제외하고는 상기 실시예 II-1과 동일한 방법으로 유기전기발광소자를 제작하였다.

[554] **[비교예 10]**

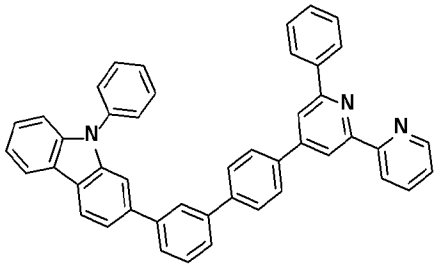
[555] 발광보조층 물질로 본 발명의 화합물 B6 대신 상기 비교화합물 6를 사용한 것을 제외하고는 상기 실시예 II-1과 동일한 방법으로 유기전기발광소자를 제작하였다.

[556] **[비교예 11]**

[557] 발광보조층 물질로 본 발명의 화합물 B6 대신 하기 비교화합물 7를 사용한 것을 제외하고는 상기 실시예 II-1과 동일한 방법으로 유기전기발광소자를 제작하였다.

[558] <비교화합물 7>

[559]



[560] **[비교예 12]**

[561] 발광보조층을 형성하지 않은 점을 제외하고는 상기 실시예 II-1과 동일한 방법으로 유기전기발광소자를 제작하였다.

[562] 본 발명의 실시예 II-1 내지 실시예 II-86, 비교예 7 내지 비교예 12에 의해 제조된 유기전기발광소자들에 순바이어스 직류전압을 가하여 포토리서치(photoresearch)사의 PR-650으로 전기발광(EL) 특성을 측정하였으며, 그 측정결과 500cd/㎡ 기준 휘도에서 맥사이언스사에서 제조된 수명 측정 장비를 통해 T95수명을 측정하였으며, 그 측정 결과는 하기 표 5와 같다.

[563] [표 5]

[564]

	화합물	Voltage (V)	Current Density (mA/㎠)	Brightness (cd/㎡)	Efficiency (cd/A)	Lifetime T(95)	CIE	
							x	y
비교예(7)	비교화합물 2	5.1	10.6	500.0	4.7	85.6	0.14	0.12
비교예(8)	비교화합물 4	5.2	8.2	500.0	6.1	122.2	0.14	0.12
비교예(9)	비교화합물 5	5.1	7.9	500.0	6.3	129.3	0.14	0.11
비교예(10)	비교화합물 6	5.1	7.1	500.0	7.0	133.4	0.14	0.12
비교예(11)	비교화합물 7	5.5	11.9	500.0	4.2	75.7	0.14	0.12
비교예(12)	-	5.0	14.3	500.0	3.5	56.4	0.14	0.15
실시예(II-1)	화합물(B6)	5.1	6.4	500.0	7.9	139.7	0.14	0.12
실시예(II-2)	화합물(B7)	5.0	6.7	500.0	7.5	133.1	0.14	0.11
실시예(II-3)	화합물(B11)	5.2	6.5	500.0	7.7	140.2	0.14	0.11
실시예(II-4)	화합물(B12)	5.0	6.7	500.0	7.5	131.0	0.14	0.12
실시예(II-5)	화합물(B17)	5.1	5.8	500.0	8.6	143.6	0.14	0.11
실시예(II-6)	화합물(B21)	5.1	5.9	500.0	8.4	144.5	0.14	0.11
실시예(II-7)	화합물(B22)	5.2	6.3	500.0	8.0	138.1	0.14	0.12
실시예(II-8)	화합물(B23)	5.1	6.5	500.0	7.8	136.3	0.14	0.11
실시예(II-9)	화합물(B24)	5.2	6.4	500.0	7.8	137.0	0.14	0.11
실시예(II-10)	화합물(B25)	5.3	6.4	500.0	7.9	138.2	0.14	0.11
실시예(II-11)	화합물(B26)	5.1	6.2	500.0	8.0	138.8	0.14	0.12
실시예(II-12)	화합물(B27)	5.1	6.4	500.0	7.9	138.4	0.14	0.11
실시예(II-13)	화합물(B47)	5.1	6.9	500.0	7.3	130.1	0.14	0.11
실시예(II-14)	화합물(B51)	5.1	6.1	500.0	8.2	135.0	0.14	0.11
실시예(II-15)	화합물(B106)	5.0	6.4	500.0	7.9	142.2	0.14	0.11
실시예(II-16)	화합물(B128)	5.2	6.7	500.0	7.4	131.0	0.14	0.12
실시예(II-17)	화합물(B129)	5.2	7.0	500.0	7.1	127.6	0.14	0.12
실시예(II-18)	화합물(B132)	5.2	7.1	500.0	7.0	131.0	0.14	0.11
실시예(II-19)	화합물(B138)	5.0	7.0	500.0	7.2	129.1	0.14	0.11
실시예(II-20)	화합물(B145)	5.0	7.1	500.0	7.0	129.5	0.14	0.11
실시예(II-21)	화합물(B157)	5.2	7.3	500.0	6.9	128.4	0.14	0.12
실시예(II-22)	화합물(B158)	5.2	7.1	500.0	7.0	128.0	0.14	0.12
실시예(II-23)	화합물(B164)	5.3	7.1	500.0	7.0	127.5	0.14	0.11
실시예(II-24)	화합물(B165)	5.1	7.0	500.0	7.1	130.2	0.14	0.11
실시예(II-25)	화합물(B167)	5.2	6.8	500.0	7.4	130.3	0.14	0.12
실시예(II-26)	화합물(B168)	5.3	6.7	500.0	7.4	128.8	0.14	0.11
실시예(II-27)	화합물(B169)	5.3	6.5	500.0	7.7	138.3	0.14	0.11
실시예(II-28)	화합물(B171)	5.2	7.0	500.0	7.1	133.9	0.14	0.11
실시예(II-29)	화합물(B175)	5.1	6.7	500.0	7.4	140.1	0.14	0.12

[565]

실시예(II-30)	화합물(B176)	5.2	6.6	500.0	7.6	133.1	0.14	0.12
실시예(II-31)	화합물(B177)	5.1	6.1	500.0	8.2	141.2	0.14	0.11
실시예(II-32)	화합물(B179)	5.2	6.5	500.0	7.7	141.9	0.14	0.12
실시예(II-33)	화합물(B183)	5.1	6.6	500.0	7.6	139.1	0.14	0.11
실시예(II-34)	화합물(B187)	5.1	6.1	500.0	8.2	142.9	0.14	0.12
실시예(II-35)	화합물(B195)	5.1	6.4	500.0	7.9	141.7	0.14	0.12
실시예(II-36)	화합물(B197)	5.2	6.1	500.0	8.3	144.8	0.14	0.12
실시예(II-37)	화합물(B198)	5.0	6.3	500.0	7.9	141.5	0.14	0.12
실시예(II-38)	화합물(B203)	5.2	6.0	500.0	8.3	145.0	0.14	0.11
실시예(II-39)	화합물(B204)	5.1	6.3	500.0	7.9	136.6	0.14	0.11
실시예(II-40)	화합물(B206)	5.0	6.7	500.0	7.4	128.8	0.14	0.12
실시예(II-41)	화합물(B210)	5.2	7.1	500.0	7.1	133.8	0.14	0.12
실시예(II-42)	화합물(B213)	5.1	6.8	500.0	7.3	131.3	0.14	0.11
실시예(II-43)	화합물(B219)	5.2	6.6	500.0	7.6	136.9	0.14	0.12
실시예(II-44)	화합물(B220)	5.1	6.1	500.0	8.3	142.1	0.14	0.12
실시예(II-45)	화합물(B221)	5.1	6.1	500.0	8.2	145.6	0.14	0.11
실시예(II-46)	화합물(B222)	5.0	6.0	500.0	8.3	147.1	0.14	0.11
실시예(II-47)	화합물(B223)	5.1	5.8	500.0	8.6	150.7	0.14	0.11
실시예(II-48)	화합물(B224)	5.1	6.4	500.0	7.9	145.3	0.14	0.11
실시예(II-49)	화합물(B225)	5.0	6.2	500.0	8.0	139.0	0.14	0.12
실시예(II-50)	화합물(B226)	5.0	6.2	500.0	8.1	141.7	0.14	0.12
실시예(II-51)	화합물(B227)	5.2	6.1	500.0	8.2	142.5	0.14	0.11
실시예(II-52)	화합물(B228)	5.0	6.1	500.0	8.2	143.6	0.14	0.11
실시예(II-53)	화합물(B229)	5.0	6.0	500.0	8.3	144.5	0.14	0.12
실시예(II-54)	화합물(B232)	5.1	6.2	500.0	8.1	146.5	0.14	0.11
실시예(II-55)	화합물(B234)	5.1	6.1	500.0	8.1	142.3	0.14	0.12
실시예(II-56)	화합물(B238)	5.1	6.1	500.0	8.2	142.1	0.14	0.12
실시예(II-57)	화합물(B239)	5.0	6.2	500.0	8.0	148.5	0.14	0.11
실시예(II-58)	화합물(B240)	5.0	6.0	500.0	8.3	146.7	0.14	0.12
실시예(II-59)	화합물(B241)	5.1	5.9	500.0	8.5	140.4	0.14	0.12
실시예(II-60)	화합물(B245)	5.3	6.7	500.0	7.5	135.3	0.14	0.11
실시예(II-61)	화합물(B248)	5.2	6.1	500.0	8.1	139.0	0.14	0.11
실시예(II-62)	화합물(B252)	5.2	5.9	500.0	8.5	141.7	0.14	0.12
실시예(II-63)	화합물(B259)	5.2	6.0	500.0	8.3	139.2	0.14	0.11
실시예(II-64)	화합물(B260)	5.2	5.9	500.0	8.5	139.1	0.14	0.12
실시예(II-65)	화합물(B264)	5.1	5.9	500.0	8.5	150.8	0.14	0.12
실시예(II-66)	화합물(B267)	5.2	6.5	500.0	7.7	134.1	0.14	0.11
실시예(II-67)	화합물(B271)	5.1	6.6	500.0	7.6	136.7	0.14	0.11
실시예(II-68)	화합물(B276)	5.1	6.6	500.0	7.6	135.9	0.14	0.12

[566]

실시예(II-69)	화합물(B285)	5.0	6.0	500.0	8.3	152.1	0.14	0.11
실시예(II-70)	화합물(B287)	5.1	5.7	500.0	8.7	154.0	0.14	0.12
실시예(II-71)	화합물(B289)	5.1	5.8	500.0	8.5	153.5	0.14	0.12
실시예(II-72)	화합물(B293)	5.2	6.0	500.0	8.4	152.4	0.14	0.12
실시예(II-73)	화합물(B296)	5.0	5.8	500.0	8.6	151.7	0.14	0.12
실시예(II-74)	화합물(B297)	5.1	5.9	500.0	8.5	148.9	0.14	0.12
실시예(II-75)	화합물(B299)	5.0	6.1	500.0	8.2	150.5	0.14	0.12
실시예(II-76)	화합물(B311)	5.1	5.9	500.0	8.5	152.6	0.14	0.12
실시예(II-77)	화합물(B322)	5.1	6.2	500.0	8.0	145.6	0.14	0.12
실시예(II-78)	화합물(B328)	5.1	5.9	500.0	8.4	154.4	0.14	0.12
실시예(II-79)	화합물(B331)	5.1	5.6	500.0	8.9	150.9	0.14	0.11
실시예(II-80)	화합물(B340)	5.1	5.6	500.0	9.0	154.0	0.14	0.12
실시예(II-81)	화합물(B343)	5.0	5.4	500.0	9.2	156.6	0.14	0.12
실시예(II-82)	화합물(B348)	5.2	6.4	500.0	7.8	142.4	0.14	0.12
실시예(II-83)	화합물(B351)	5.1	6.2	500.0	8.0	144.5	0.14	0.12
실시예(II-84)	화합물(B363)	5.1	6.1	500.0	8.3	144.4	0.14	0.11
실시예(II-85)	화합물(B372)	5.0	6.6	500.0	7.6	133.1	0.14	0.12
실시예(II-86)	화합물(B386)	5.2	6.5	500.0	7.7	136.3	0.14	0.12

[567]

[568] **[실시예 III-1] 그린유기전기발광소자(발광보조층)**

[569] 본 발명의 화합물을 발광보조층 물질로 사용하여 통상적인 방법에 따라 유기전기발광소자를 제작하였다. 먼저, 유기 기판에 형성된 ITO층(양극) 상에 2-TNATA를 60nm 두께로 진공증착하여 정공주입층을 형성한 후, 상기 정공주입층 상에 NPB를 60nm 두께로 진공증착하여 정공수송층을 형성하였다. 이어서, 상기 정공수송층 상에 본 발명의 화합물 B6을 20nm 두께로 진공증착하여 발광보조층을 형성한 후, 상기 발광보조층 상에 CBP를 호스트로, $Ir(ppy)_3$을 도판트로 하여 90:10 중량비로 도핑하여 30nm 두께로 진공증착하여 발광층을 형성하였다. 이어서, 상기 발광층 상에 BAlq를 10nm 두께로 진공증착하여 정공저지층을 형성하고, 상기 정공저지층 상에 Alq_3을 40nm 두께로 진공증착하여 전자수송층을 형성하였다. 이후, 할로젠화 알칼리 금속인 LiF를 0.2nm 두께로 증착하여 전자주입층을 형성하고, 이어서 Al을 150nm의 두께로 증착하여 음극을 형성함으로써 유기전기발광소자를 제조하였다.

[570] **[실시예 III-2] 내지 [실시예 III-136] 그린유기전기발광소자(발광보조층)**

[571] 발광보조층 물질로 본 발명의 화합물 B6 대신 하기 표 6에 기재된 본 발명의 화합물 B7 내지 C16을 사용한 점을 제외하고는 실시예 III-1과 동일한 방법으로 유기전기발광소자를 제작하였다.

[572] **[비교예 13]**

[573] 발광보조층 물질로 본 발명의 화합물 B6 대신 상기 비교화합물 2를 사용한 것을 제외하고는 상기 실시예 III-1과 동일한 방법으로 유기전기발광소자를

제작하였다.

[574] **[비교예 14]**

[575] 발광보조층 물질로 본 발명의 화합물 B6 대신 상기 비교화합물 3을 사용한 것을 제외하고는 상기 실시예 III-1과 동일한 방법으로 유기전기발광소자를 제작하였다.

[576] **[비교예 15]**

[577] 발광보조층 물질로 본 발명의 화합물 B6 대신 상기 비교화합물 4를 사용한 것을 제외하고는 상기 실시예 III-1과 동일한 방법으로 유기전기발광소자를 제작하였다.

[578] **[비교예 16]**

[579] 발광보조층 물질로 본 발명의 화합물 B6 대신 상기 비교화합물 5를 사용한 것을 제외하고는 상기 실시예 III-1과 동일한 방법으로 유기전기발광소자를 제작하였다.

[580] **[비교예 17]**

[581] 발광보조층 물질로 본 발명의 화합물 B6 대신 상기 비교화합물 6을 사용한 것을 제외하고는 상기 실시예 III-1과 동일한 방법으로 유기전기발광소자를 제작하였다.

[582] **[비교예 18]**

[583] 발광보조층 물질로 본 발명의 화합물 B6 대신 상기 비교화합물 7을 사용한 것을 제외하고는 상기 실시예 III-1과 동일한 방법으로 유기전기발광소자를 제작하였다.

[584] **[비교예 19]**

[585] 발광보조층을 형성하지 않은 것을 제외하고는 상기 실시예 III-1과 동일한 방법으로 유기전기발광소자를 제작하였다.

[586] 본 발명의 실시예 III-1 내지 실시예 III-136, 비교예 13 내지 비교예 19에 의해 제조된 유기전기발광소자들에 순바이어스 직류전압을 가하여 포토리서치(photoresearch)사의 PR-650으로 전기발광(EL) 특성을 측정하였으며, 그 측정결과 5000cd/㎡ 기준 휘도에서 맥사이언스사에서 제조된 수명 측정 장비를 통해 T95수명을 측정하였으며, 그 측정 결과는 하기 표 6과 같다.

[587] [표 6]

[588]

	화합물	Voltage (V)	Current Density (mA/㎠)	Brightness (cd/㎡)	Efficiency (cd/A)	Lifetime T(95)	CIE	
							x	y
비교예(13)	비교화합물 2	6.0	14.5	5000	34.5	92.8	0.33	0.62
비교예(14)	비교화합물 3	6.0	13.6	5000	36.9	91.5	0.33	0.62
비교예(15)	비교화합물 4	6.0	11.5	5000	43.3	156.8	0.33	0.61
비교예(16)	비교화합물 5	5.9	11.4	5000	43.7	162.0	0.33	0.61
비교예(17)	비교화합물 6	5.9	11.1	5000	44.9	168.0	0.33	0.62
비교예(18)	비교화합물 7	6.2	15.0	5000	33.4	77.6	0.33	0.62
비교예(19)	-	6.0	20.8	5000	24.0	53.0	0.33	0.61
실시예(III-1)	화합물(B6)	5.9	10.1	5000	49.3	180.3	0.33	0.61
실시예(III-2)	화합물(B7)	5.9	10.3	5000	48.5	176.5	0.33	0.62
실시예(III-3)	화합물(B11)	5.9	10.3	5000	48.7	173.8	0.33	0.61
실시예(III-4)	화합물(B12)	5.9	10.6	5000	47.1	167.2	0.33	0.61
실시예(III-5)	화합물(B17)	5.8	9.7	5000	51.4	188.1	0.33	0.61
실시예(III-6)	화합물(B21)	6.0	9.9	5000	50.4	183.9	0.33	0.62
실시예(III-7)	화합물(B22)	5.9	10.2	5000	48.9	181.6	0.33	0.62
실시예(III-8)	화합물(B23)	5.9	10.3	5000	48.6	176.9	0.33	0.62
실시예(III-9)	화합물(B24)	5.9	10.3	5000	48.4	172.6	0.33	0.61
실시예(III-10)	화합물(B25)	5.8	10.2	5000	48.8	177.9	0.33	0.61
실시예(III-11)	화합물(B26)	5.8	10.1	5000	49.4	180.6	0.33	0.62
실시예(III-12)	화합물(B27)	6.0	10.4	5000	48.0	171.1	0.33	0.62
실시예(III-13)	화합물(B47)	5.8	10.6	5000	47.4	173.8	0.33	0.61
실시예(III-14)	화합물(B51)	5.7	10.0	5000	49.8	181.1	0.33	0.62
실시예(III-15)	화합물(B106)	5.9	10.3	5000	48.7	171.0	0.33	0.61
실시예(III-16)	화합물(B128)	6.0	10.7	5000	46.8	173.3	0.33	0.61
실시예(III-17)	화합물(B129)	5.9	10.9	5000	45.7	158.4	0.33	0.61
실시예(III-18)	화합물(B132)	5.9	10.9	5000	46.0	162.0	0.33	0.61
실시예(III-19)	화합물(B138)	5.9	10.9	5000	45.9	164.0	0.33	0.61
실시예(III-20)	화합물(B145)	5.9	10.8	5000	46.5	163.3	0.33	0.61
실시예(III-21)	화합물(B157)	5.8	11.0	5000	45.5	160.0	0.33	0.62
실시예(III-22)	화합물(B158)	5.8	11.0	5000	45.6	164.9	0.33	0.61
실시예(III-23)	화합물(B164)	5.8	10.9	5000	46.0	156.9	0.33	0.61
실시예(III-24)	화합물(B165)	5.8	10.8	5000	46.5	157.5	0.33	0.61
실시예(III-25)	화합물(B167)	5.8	10.5	5000	47.7	174.5	0.33	0.62
실시예(III-26)	화합물(B168)	5.8	10.5	5000	47.6	168.5	0.33	0.61
실시예(III-27)	화합물(B169)	5.9	10.4	5000	48.0	170.0	0.33	0.61
실시예(III-28)	화합물(B171)	5.8	10.7	5000	46.8	173.3	0.33	0.61

[589]

실시예(III-29)	화합물(B172)	5.9	10.6	5000	47.0	166.6	0.33	0.62
실시예(III-30)	화합물(B173)	6.0	10.6	5000	47.3	171.1	0.33	0.61
실시예(III-31)	화합물(B174)	5.8	10.3	5000	48.6	178.9	0.33	0.61
실시예(III-32)	화합물(B175)	5.9	10.5	5000	47.8	179.9	0.33	0.62
실시예(III-33)	화합물(B176)	6.0	10.4	5000	47.9	171.1	0.33	0.62
실시예(III-34)	화합물(B177)	6.0	10.2	5000	49.0	180.7	0.33	0.62
실시예(III-35)	화합물(B178)	5.7	10.6	5000	47.2	166.1	0.33	0.61
실시예(III-36)	화합물(B179)	5.9	10.3	5000	48.4	175.6	0.33	0.62
실시예(III-37)	화합물(B182)	5.8	10.8	5000	46.2	160.6	0.33	0.61
실시예(III-38)	화합물(B183)	5.8	10.4	5000	48.0	178.5	0.33	0.62
실시예(III-39)	화합물(B187)	5.8	10.2	5000	49.2	181.0	0.33	0.61
실시예(III-40)	화합물(B192)	5.8	10.8	5000	46.1	162.9	0.33	0.61
실시예(III-41)	화합물(B195)	5.9	10.1	5000	49.6	180.5	0.33	0.61
실시예(III-42)	화합물(B197)	5.7	9.8	5000	50.9	187.0	0.33	0.62
실시예(III-43)	화합물(B198)	5.9	10.1	5000	49.5	181.5	0.33	0.62
실시예(III-44)	화합물(B200)	5.8	10.7	5000	46.6	165.2	0.33	0.62
실시예(III-45)	화합물(B203)	5.9	9.8	5000	50.9	184.8	0.33	0.62
실시예(III-46)	화합물(B204)	5.8	10.1	5000	49.3	180.6	0.33	0.61
실시예(III-47)	화합물(B206)	5.8	10.5	5000	47.6	170.5	0.33	0.62
실시예(III-48)	화합물(B210)	6.0	10.5	5000	47.7	166.6	0.33	0.62
실시예(III-49)	화합물(B213)	5.9	10.7	5000	46.9	174.2	0.33	0.62
실시예(III-50)	화합물(B217)	5.9	10.5	5000	47.7	174.0	0.33	0.62
실시예(III-51)	화합물(B219)	6.0	10.1	5000	49.7	179.7	0.33	0.61
실시예(III-52)	화합물(B220)	5.9	10.0	5000	50.1	185.2	0.33	0.61
실시예(III-53)	화합물(B221)	5.8	9.9	5000	50.4	184.8	0.33	0.62
실시예(III-54)	화합물(B222)	5.9	10.0	5000	50.2	187.5	0.33	0.61
실시예(III-55)	화합물(B223)	6.0	9.5	5000	52.6	198.2	0.33	0.61
실시예(III-56)	화합물(B224)	5.9	10.0	5000	50.1	183.1	0.33	0.61
실시예(III-57)	화합물(B225)	5.7	9.8	5000	51.0	186.4	0.33	0.61
실시예(III-58)	화합물(B226)	5.8	9.9	5000	50.6	182.5	0.33	0.62
실시예(III-59)	화합물(B227)	5.7	9.9	5000	50.7	181.8	0.33	0.62
실시예(III-60)	화합물(B228)	5.8	9.8	5000	50.9	184.1	0.33	0.61
실시예(III-61)	화합물(B229)	5.7	10.0	5000	49.9	187.8	0.33	0.62
실시예(III-62)	화합물(B232)	5.7	9.9	5000	50.4	185.3	0.33	0.62
실시예(III-63)	화합물(B234)	5.8	10.0	5000	49.9	181.5	0.33	0.62
실시예(III-64)	화합물(B238)	5.8	10.0	5000	49.9	187.7	0.33	0.62
실시예(III-65)	화합물(B239)	5.8	10.0	5000	50.2	182.6	0.33	0.61
실시예(III-66)	화합물(B240)	5.7	9.6	5000	52.1	191.4	0.33	0.62
실시예(III-67)	화합물(B241)	5.7	9.8	5000	51.2	190.6	0.33	0.61

[590]

실시예(III-68)	화합물(B245)	6.0	10.1	5000	49.4	179.4	0.33	0.62
실시예(III-69)	화합물(B248)	5.8	9.8	5000	50.9	182.2	0.33	0.61
실시예(III-70)	화합물(B252)	6.0	9.8	5000	51.2	191.5	0.33	0.61
실시예(III-71)	화합물(B253)	5.9	9.9	5000	50.6	180.7	0.33	0.61
실시예(III-72)	화합물(B255)	5.9	10.1	5000	49.7	178.9	0.33	0.62
실시예(III-73)	화합물(B259)	5.9	9.7	5000	51.6	190.5	0.33	0.62
실시예(III-74)	화합물(B260)	5.8	9.6	5000	52.0	190.1	0.33	0.62
실시예(III-75)	화합물(B264)	5.7	9.5	5000	52.6	196.6	0.33	0.62
실시예(III-76)	화합물(B266)	6.0	10.2	5000	49.2	184.0	0.33	0.62
실시예(III-77)	화합물(B267)	5.8	10.1	5000	49.6	176.2	0.33	0.61
실시예(III-78)	화합물(B271)	5.8	10.2	5000	48.9	183.2	0.33	0.62
실시예(III-79)	화합물(B273)	5.9	10.3	5000	48.7	165.8	0.33	0.61
실시예(III-80)	화합물(B276)	6.0	10.1	5000	49.3	176.6	0.33	0.61
실시예(III-81)	화합물(B277)	5.8	10.1	5000	49.3	178.5	0.33	0.62
실시예(III-82)	화합물(B278)	5.9	10.3	5000	48.7	172.2	0.33	0.61
실시예(III-83)	화합물(B285)	5.9	9.7	5000	51.6	199.2	0.33	0.62
실시예(III-84)	화합물(B287)	5.7	9.5	5000	52.6	201.9	0.33	0.61
실시예(III-85)	화합물(B288)	5.8	9.6	5000	51.9	196.3	0.33	0.61
실시예(III-86)	화합물(B289)	5.7	9.7	5000	51.5	195.1	0.33	0.61
실시예(III-87)	화합물(B290)	5.9	9.7	5000	51.5	195.6	0.33	0.62
실시예(III-88)	화합물(B293)	5.8	9.7	5000	51.7	194.6	0.33	0.62
실시예(III-89)	화합물(B296)	5.9	9.6	5000	51.9	190.8	0.33	0.61
실시예(III-90)	화합물(B297)	5.7	9.8	5000	51.1	191.0	0.33	0.62
실시예(III-91)	화합물(B299)	5.9	9.7	5000	51.6	199.9	0.33	0.62
실시예(III-92)	화합물(B303)	5.7	10.1	5000	49.3	178.3	0.33	0.61
실시예(III-93)	화합물(B304)	5.8	10.1	5000	49.7	177.6	0.33	0.62
실시예(III-94)	화합물(B305)	6.0	10.2	5000	49.2	182.9	0.33	0.62
실시예(III-95)	화합물(B306)	6.0	10.2	5000	48.9	174.7	0.33	0.61
실시예(III-96)	화합물(B308)	5.9	9.8	5000	50.8	190.7	0.33	0.61
실시예(III-97)	화합물(B309)	6.0	10.0	5000	50.2	189.3	0.33	0.61
실시예(III-98)	화합물(B310)	5.8	9.7	5000	51.6	193.6	0.33	0.62
실시예(III-99)	화합물(B311)	5.8	9.7	5000	51.4	198.2	0.33	0.62
실시예(III-100)	화합물(B313)	5.9	9.7	5000	51.5	191.6	0.33	0.62
실시예(III-101)	화합물(B314)	5.7	9.4	5000	53.0	201.0	0.33	0.62
실시예(III-102)	화합물(B315)	5.7	9.5	5000	52.6	200.2	0.33	0.62
실시예(III-103)	화합물(B316)	5.9	9.7	5000	51.8	190.7	0.33	0.61
실시예(III-104)	화합물(B317)	5.8	9.8	5000	51.0	192.3	0.33	0.62
실시예(III-105)	화합물(B320)	6.0	10.0	5000	50.1	190.5	0.33	0.61
실시예(III-106)	화합물(B322)	5.9	10.0	5000	50.2	192.4	0.33	0.62

[591]

실시예(III-107)	화합물(B325)	5.7	9.9	5000	50.5	187.9	0.33	0.61
실시예(III-108)	화합물(B327)	5.8	9.8	5000	50.8	194.1	0.33	0.62
실시예(III-109)	화합물(B328)	5.8	9.7	5000	51.3	197.3	0.33	0.61
실시예(III-110)	화합물(B331)	5.9	9.6	5000	52.2	200.2	0.33	0.61
실시예(III-111)	화합물(B340)	5.9	9.4	5000	53.0	200.7	0.33	0.61
실시예(III-112)	화합물(B343)	5.9	9.4	5000	53.3	202.7	0.33	0.61
실시예(III-113)	화합물(B344)	5.9	9.3	5000	53.7	202.7	0.33	0.62
실시예(III-114)	화합물(B348)	5.9	9.8	5000	50.9	186.6	0.33	0.62
실시예(III-115)	화합물(B351)	5.8	9.9	5000	50.6	188.4	0.33	0.62
실시예(III-116)	화합물(B358)	5.9	10.0	5000	49.9	189.4	0.33	0.62
실시예(III-117)	화합물(B363)	6.0	9.9	5000	50.5	192.4	0.33	0.61
실시예(III-118)	화합물(B372)	5.9	10.5	5000	47.7	175.0	0.33	0.61
실시예(III-119)	화합물(B375)	5.9	10.2	5000	49.2	171.6	0.33	0.62
실시예(III-120)	화합물(B386)	5.8	10.2	5000	49.2	182.5	0.33	0.61
실시예(III-121)	화합물(C1)	5.9	9.3	5000	53.6	186.3	0.33	0.62
실시예(III-122)	화합물(C2)	5.8	9.3	5000	53.9	190.2	0.33	0.61
실시예(III-123)	화합물(C3)	5.8	9.7	5000	51.6	186.5	0.33	0.61
실시예(III-124)	화합물(C4)	5.9	9.8	5000	51.2	193.3	0.33	0.61
실시예(III-125)	화합물(C5)	5.7	9.7	5000	51.4	189.3	0.33	0.61
실시예(III-126)	화합물(C6)	5.9	9.6	5000	52.3	188.1	0.33	0.62
실시예(III-127)	화합물(C7)	5.9	9.7	5000	51.5	185.8	0.33	0.62
실시예(III-128)	화합물(C8)	5.7	9.3	5000	53.6	187.8	0.33	0.62
실시예(III-129)	화합물(C9)	5.9	9.6	5000	51.8	190.8	0.33	0.62
실시예(III-130)	화합물(C10)	5.8	10.5	5000	47.6	190.6	0.33	0.61
실시예(III-131)	화합물(C11)	5.8	9.8	5000	51.0	185.9	0.33	0.61
실시예(III-132)	화합물(C12)	5.9	10.0	5000	49.9	193.4	0.33	0.62
실시예(III-133)	화합물(C13)	5.8	10.3	5000	48.7	187.5	0.33	0.61
실시예(III-134)	화합물(C14)	5.8	9.7	5000	51.8	191.5	0.33	0.61
실시예(III-135)	화합물(C15)	5.8	10.4	5000	48.1	194.1	0.33	0.62
실시예(III-136)	화합물(C16)	5.9	9.3	5000	53.7	186.5	0.33	0.62

[592]

[593] **[실시예 IV-1] 레드유기전기발광소자(발광보조층)**

[594] 본 발명의 화합물을 발광보조층 물질로 사용하여 통상적인 방법에 따라 유기전기발광소자를 제작하였다. 먼저, 유기 기판에 형성된 ITO층(양극) 상에 2-TNATA를 60nm 두께로 진공증착하여 정공주입층을 형성한 후, 상기 정공주입층 상에 NPB를 60nm 두께로 진공증착하여 정공수송층을 형성하였다. 이어서, 상기 정공수송층 상에 본 발명의 화합물 B1을 20nm 두께로 진공증착하여 발광보조층을 형성한 후, 상기 발광보조층 상에 CBP를 호스트로, bis-(1-phenylisoquinolyl)iridium(III)acetylacetonate (이하 "$(piq)_2Ir(acac)$"로 약기함)을 도판트로 하여 95:5 중량비로 도핑하여 30nm 두께로 진공증착하여 발광층을 형성하였다. 이어서, 상기 발광층 상에 BAlq를 10nm 두께로

진공증착하여 정공저지층을 형성하고, 상기 정공저지층 상에 Alq_3을 40nm 두께로 진공증착하여 전자수송층을 형성하였다. 이후, 할로젠화 알칼리 금속인 LiF를 0.2nm 두께로 증착하여 전자주입층을 형성하고, 이어서 Al을 150nm의 두께로 증착하여 음극을 형성함으로써 유기전기발광소자를 제조하였다.

[595] **[실시예 IV-2] 내지 [실시예 IV-135] 레드유기전기발광소자(발광보조층)**

[596] 발광보조층 물질로 본 발명의 화합물 B1 대신 표 7에 기재된 본 발명의 화합물 B6 내지 B386를 사용한 점을 제외하고는 실시예 IV-1과 동일한 방법으로 유기전기발광소자를 제작하였다.

[597] **[비교예 20]**

[598] 발광보조층 물질로 본 발명의 화합물 B1 대신 상기 비교화합물 2를 사용한 것을 제외하고는 상기 실시예 IV-1과 동일한 방법으로 유기전기발광소자를 제작하였다.

[599] **[비교예 21]**

[600] 발광보조층 물질로 본 발명의 화합물 B1 대신 상기 비교화합물 4를 사용한 것을 제외하고는 상기 실시예 IV-1과 동일한 방법으로 유기전기발광소자를 제작하였다.

[601] **[비교예 22]**

[602] 발광보조층 물질로 본 발명의 화합물 B1 대신 상기 비교화합물 5를 사용한 것을 제외하고는 상기 실시예 IV-1과 동일한 방법으로 유기전기발광소자를 제작하였다.

[603] **[비교예 23]**

[604] 발광보조층 물질로 본 발명의 화합물 B1 대신 상기 비교화합물 6을 사용한 것을 제외하고는 상기 실시예 IV-1과 동일한 방법으로 유기전기발광소자를 제작하였다.

[605] **[비교예 24]**

[606] 발광보조층 물질로 본 발명의 화합물 B1 대신 상기 비교화합물 7을 사용한 것을 제외하고는 상기 실시예 IV-1과 동일한 방법으로 유기전기발광소자를 제작하였다.

[607] **[비교예 25]**

[608] 발광보조층을 형성하지 않은 것을 제외하고는 상기 실시예 IV-1과 동일한 방법으로 유기전기발광소자를 제작하였다.

[609] 본 발명의 실시예 IV-1 내지 실시예 IV-135, 비교예 20 내지 비교예 25에 의해 제조된 유기전기발광소자들에 순바이어스 직류전압을 가하여 포토리서치(photoresearch)사의 PR-650으로 전기발광(EL) 특성을 측정하였으며, 그 측정결과 2500cd/㎡ 기준 휘도에서 맥사이언스사에서 제조된 수명 측정 장비를 통해 T95수명을 측정하였으며, 그 측정 결과는 하기 표 7과 같다.

[610] [표 7]

[611]

	화합물	Voltage (V)	Current Density (mA/㎠)	Brightness (cd/㎡)	Efficiency (cd/A)	Lifetime T(95)	CIE	
							x	y
비교예(20)	비교화합물 2	6.5	27.5	2500	9.1	84.7	0.66	0.32
비교예(21)	비교화합물 4	6.6	20.8	2500	12.0	120.1	0.66	0.32
비교예(22)	비교화합물 5	6.6	20.0	2500	12.5	129.5	0.66	0.32
비교예(23)	비교화합물 6	6.7	19.5	2500	12.8	137.6	0.66	0.32
비교예(24)	비교화합물 7	7.0	29.9	2500	8.3	81.8	0.66	0.32
비교예(25)	-	7.0	33.3	2500	7.5	66.8	0.66	0.32
실시예(IV-1)	화합물(B1)	6.7	19.3	2500	13.0	143.8	0.66	0.32
실시예(IV-2)	화합물(B6)	6.6	18.4	2500	13.6	142.5	0.66	0.32
실시예(IV-3)	화합물(B7)	6.7	19.4	2500	12.9	150.9	0.66	0.32
실시예(IV-4)	화합물(B11)	6.8	19.1	2500	13.1	141.1	0.66	0.32
실시예(IV-5)	화합물(B12)	6.7	19.0	2500	13.2	147.8	0.66	0.32
실시예(IV-6)	화합물(B17)	6.7	16.8	2500	14.9	159.5	0.66	0.32
실시예(IV-7)	화합물(B21)	6.7	17.2	2500	14.5	157.3	0.66	0.32
실시예(IV-8)	화합물(B22)	6.6	17.8	2500	14.1	150.7	0.66	0.32
실시예(IV-9)	화합물(B23)	6.5	18.2	2500	13.8	149.5	0.66	0.32
실시예(IV-10)	화합물(B24)	6.6	17.6	2500	14.2	151.2	0.66	0.32
실시예(IV-11)	화합물(B25)	6.7	19.7	2500	12.7	137.5	0.66	0.33
실시예(IV-12)	화합물(B26)	6.5	18.6	2500	13.5	140.1	0.66	0.32
실시예(IV-13)	화합물(B47)	6.7	19.3	2500	12.9	151.2	0.66	0.32
실시예(IV-14)	화합물(B51)	6.6	18.8	2500	13.3	150.5	0.66	0.32
실시예(IV-15)	화합물(B62)	6.7	19.0	2500	13.2	146.0	0.66	0.32
실시예(IV-16)	화합물(B106)	6.6	19.6	2500	12.8	136.5	0.67	0.33
실시예(IV-17)	화합물(B128)	6.8	19.0	2500	13.2	144.5	0.66	0.32
실시예(IV-18)	화합물(B129)	6.8	19.1	2500	13.1	143.0	0.66	0.32
실시예(IV-19)	화합물(B132)	6.7	19.4	2500	12.9	144.1	0.67	0.33
실시예(IV-20)	화합물(B138)	6.6	18.9	2500	13.2	140.8	0.67	0.33
실시예(IV-21)	화합물(B145)	6.6	19.3	2500	13.0	140.9	0.66	0.32
실시예(IV-22)	화합물(B157)	6.5	19.0	2500	13.2	143.2	0.67	0.33
실시예(IV-23)	화합물(B158)	6.6	18.8	2500	13.3	137.9	0.66	0.33
실시예(IV-24)	화합물(B164)	6.5	19.1	2500	13.1	140.0	0.67	0.32
실시예(IV-25)	화합물(B165)	6.6	19.3	2500	13.0	138.5	0.66	0.33
실시예(IV-26)	화합물(B167)	6.7	19.2	2500	13.0	141.2	0.66	0.32
실시예(IV-27)	화합물(B168)	6.6	19.0	2500	13.2	147.3	0.66	0.32
실시예(IV-28)	화합물(B169)	6.6	18.4	2500	13.6	140.7	0.66	0.32
실시예(IV-29)	화합물(B170)	6.6	19.4	2500	12.9	145.0	0.66	0.32

[612]

실시예(IV-30)	화합물(B171)	6.8	19.0	2500	13.2	144.1	0.66	0.32
실시예(IV-31)	화합물(B172)	6.6	18.8	2500	13.3	143.9	0.66	0.32
실시예(IV-32)	화합물(B173)	6.8	18.9	2500	13.2	141.5	0.66	0.32
실시예(IV-33)	화합물(B174)	6.6	18.7	2500	13.4	151.1	0.66	0.32
실시예(IV-34)	화합물(B175)	6.7	18.6	2500	13.4	147.1	0.66	0.32
실시예(IV-35)	화합물(B176)	6.5	18.6	2500	13.5	151.1	0.66	0.32
실시예(IV-36)	화합물(B177)	6.6	17.9	2500	14.0	153.4	0.66	0.32
실시예(IV-37)	화합물(B178)	6.7	18.8	2500	13.3	147.1	0.66	0.32
실시예(IV-38)	화합물(B179)	6.7	18.6	2500	13.4	140.8	0.66	0.32
실시예(IV-39)	화합물(B180)	6.6	18.2	2500	13.7	151.0	0.66	0.32
실시예(IV-40)	화합물(B181)	6.8	19.3	2500	13.0	149.7	0.66	0.32
실시예(IV-41)	화합물(B182)	6.8	19.2	2500	13.0	142.6	0.66	0.33
실시예(IV-42)	화합물(B183)	6.7	18.1	2500	13.8	147.6	0.66	0.32
실시예(IV-43)	화합물(B184)	6.8	19.5	2500	12.8	144.6	0.66	0.32
실시예(IV-44)	화합물(B187)	6.5	17.5	2500	14.3	152.7	0.66	0.32
실시예(IV-45)	화합물(B188)	6.5	18.6	2500	13.4	145.7	0.66	0.32
실시예(IV-46)	화합물(B190)	6.5	18.2	2500	13.7	141.8	0.66	0.32
실시예(IV-47)	화합물(B191)	6.6	19.3	2500	12.9	147.3	0.66	0.32
실시예(IV-48)	화합물(B192)	6.8	19.0	2500	13.1	137.7	0.66	0.32
실시예(IV-49)	화합물(B194)	6.7	19.0	2500	13.2	142.6	0.66	0.32
실시예(IV-50)	화합물(B195)	6.6	17.8	2500	14.1	150.4	0.66	0.32
실시예(IV-51)	화합물(B197)	6.5	17.0	2500	14.7	156.0	0.66	0.32
실시예(IV-52)	화합물(B198)	6.6	18.1	2500	13.8	151.1	0.66	0.32
실시예(IV-53)	화합물(B200)	6.7	19.0	2500	13.1	149.8	0.66	0.32
실시예(IV-54)	화합물(B203)	6.6	17.3	2500	14.4	158.2	0.66	0.32
실시예(IV-55)	화합물(B204)	6.7	18.0	2500	13.9	152.3	0.66	0.32
실시예(IV-56)	화합물(B206)	6.7	19.3	2500	13.0	144.0	0.66	0.32
실시예(IV-57)	화합물(B208)	6.6	19.5	2500	12.9	148.5	0.66	0.32
실시예(IV-58)	화합물(B210)	6.6	19.3	2500	13.0	144.1	0.66	0.32
실시예(IV-59)	화합물(B213)	6.7	19.0	2500	13.2	142.6	0.66	0.32
실시예(IV-60)	화합물(B217)	6.7	19.0	2500	13.1	141.3	0.66	0.32
실시예(IV-61)	화합물(B219)	6.7	17.9	2500	13.9	156.2	0.66	0.32
실시예(IV-62)	화합물(B220)	6.6	17.5	2500	14.3	150.5	0.66	0.32
실시예(IV-63)	화합물(B221)	6.5	17.5	2500	14.3	159.1	0.66	0.32
실시예(IV-64)	화합물(B222)	6.7	17.2	2500	14.5	159.7	0.66	0.32
실시예(IV-65)	화합물(B223)	6.5	15.9	2500	15.7	169.9	0.66	0.32
실시예(IV-66)	화합물(B224)	6.5	17.1	2500	14.6	151.3	0.66	0.32
실시예(IV-67)	화합물(B225)	6.7	17.4	2500	14.3	149.2	0.66	0.32
실시예(IV-68)	화합물(B226)	6.6	17.1	2500	14.6	159.3	0.66	0.32

[613]

실시예(IV-69)	화합물(B227)	6.7	17.4	2500	14.4	151.3	0.66	0.32
실시예(IV-70)	화합물(B228)	6.6	17.6	2500	14.2	149.6	0.66	0.32
실시예(IV-71)	화합물(B229)	6.6	17.2	2500	14.5	152.2	0.66	0.32
실시예(IV-72)	화합물(B232)	6.6	17.4	2500	14.4	159.3	0.66	0.32
실시예(IV-73)	화합물(B234)	6.7	17.1	2500	14.6	155.3	0.66	0.32
실시예(IV-74)	화합물(B236)	6.7	17.4	2500	14.3	149.3	0.66	0.32
실시예(IV-75)	화합물(B238)	6.6	17.3	2500	14.4	159.6	0.66	0.32
실시예(IV-76)	화합물(B239)	6.5	17.2	2500	14.5	153.5	0.66	0.32
실시예(IV-77)	화합물(B240)	6.6	16.8	2500	14.9	162.1	0.66	0.32
실시예(IV-78)	화합물(B241)	6.6	16.9	2500	14.8	162.2	0.66	0.32
실시예(IV-79)	화합물(B245)	6.6	18.0	2500	13.9	153.8	0.66	0.32
실시예(IV-80)	화합물(B248)	6.7	17.5	2500	14.3	158.1	0.66	0.32
실시예(IV-81)	화합물(B251)	6.6	17.9	2500	14.0	150.9	0.66	0.32
실시예(IV-82)	화합물(B252)	6.6	17.0	2500	14.7	160.2	0.66	0.32
실시예(IV-83)	화합물(B253)	6.7	17.1	2500	14.6	155.1	0.66	0.32
실시예(IV-84)	화합물(B255)	6.8	17.9	2500	14.0	160.2	0.66	0.32
실시예(IV-85)	화합물(B259)	6.6	16.4	2500	15.2	162.1	0.66	0.32
실시예(IV-86)	화합물(B260)	6.6	16.9	2500	14.8	159.6	0.66	0.32
실시예(IV-87)	화합물(B264)	6.6	16.3	2500	15.4	167.3	0.66	0.32
실시예(IV-88)	화합물(B266)	6.7	18.1	2500	13.8	157.3	0.66	0.32
실시예(IV-89)	화합물(B267)	6.7	17.9	2500	14.0	155.3	0.66	0.32
실시예(IV-90)	화합물(B271)	6.6	18.2	2500	13.7	149.4	0.66	0.32
실시예(IV-91)	화합물(B273)	6.7	18.5	2500	13.5	144.9	0.66	0.33
실시예(IV-92)	화합물(B276)	6.8	17.5	2500	14.3	149.1	0.66	0.32
실시예(IV-93)	화합물(B277)	6.8	17.6	2500	14.2	151.6	0.66	0.32
실시예(IV-94)	화합물(B278)	6.8	18.5	2500	13.5	139.5	0.67	0.32
실시예(IV-95)	화합물(B279)	6.7	18.2	2500	13.7	155.7	0.66	0.32
실시예(IV-96)	화합물(B285)	6.6	16.2	2500	15.5	168.2	0.66	0.32
실시예(IV-97)	화합물(B287)	6.6	15.8	2500	15.8	168.8	0.66	0.32
실시예(IV-98)	화합물(B288)	6.7	14.9	2500	16.8	177.8	0.66	0.32
실시예(IV-99)	화합물(B289)	6.6	16.1	2500	15.5	166.9	0.66	0.32
실시예(IV-100)	화합물(B290)	6.6	16.1	2500	15.6	164.8	0.66	0.32
실시예(IV-101)	화합물(B293)	6.7	16.5	2500	15.1	164.2	0.66	0.32
실시예(IV-102)	화합물(B296)	6.6	16.1	2500	15.6	163.2	0.66	0.32
실시예(IV-103)	화합물(B297)	6.5	16.2	2500	15.4	166.5	0.66	0.32
실시예(IV-104)	화합물(B299)	6.5	16.1	2500	15.5	168.9	0.66	0.32
실시예(IV-105)	화합물(B303)	6.6	17.2	2500	14.5	151.0	0.67	0.32
실시예(IV-106)	화합물(B304)	6.8	17.5	2500	14.3	149.9	0.67	0.32
실시예(IV-107)	화합물(B305)	6.8	17.6	2500	14.2	149.6	0.67	0.33

[614]

실시예(IV-108)	화합물(B306)	6.7	17.4	2500	14.4	160.7	0.67	0.32
실시예(IV-109)	화합물(B308)	6.7	17.0	2500	14.7	165.6	0.66	0.32
실시예(IV-110)	화합물(B309)	6.6	16.4	2500	15.2	166.1	0.66	0.32
실시예(IV-111)	화합물(B310)	6.6	16.5	2500	15.2	168.4	0.66	0.32
실시예(IV-112)	화합물(B311)	6.5	16.1	2500	15.6	167.7	0.66	0.32
실시예(IV-113)	화합물(B313)	6.6	16.4	2500	15.2	159.2	0.66	0.32
실시예(IV-114)	화합물(B314)	6.6	16.0	2500	15.6	164.0	0.66	0.32
실시예(IV-115)	화합물(B315)	6.6	15.9	2500	15.7	171.8	0.66	0.32
실시예(IV-116)	화합물(B316)	6.6	15.7	2500	15.9	172.7	0.66	0.32
실시예(IV-117)	화합물(B317)	6.8	16.8	2500	14.8	159.4	0.66	0.32
실시예(IV-118)	화합물(B320)	6.8	17.1	2500	14.6	163.6	0.66	0.32
실시예(IV-119)	화합물(B322)	6.7	16.6	2500	15.0	158.2	0.66	0.32
실시예(IV-120)	화합물(B325)	6.6	16.7	2500	15.0	169.2	0.66	0.32
실시예(IV-121)	화합물(B327)	6.8	16.5	2500	15.2	169.7	0.66	0.32
실시예(IV-122)	화합물(B328)	6.6	16.5	2500	15.2	164.7	0.66	0.32
실시예(IV-123)	화합물(B331)	6.6	15.6	2500	16.0	168.1	0.66	0.32
실시예(IV-124)	화합물(B340)	6.7	15.9	2500	15.7	170.6	0.66	0.32
실시예(IV-125)	화합물(B343)	6.6	15.5	2500	16.1	176.3	0.66	0.32
실시예(IV-126)	화합물(B344)	6.6	15.2	2500	16.4	173.9	0.66	0.32
실시예(IV-127)	화합물(B348)	6.7	17.0	2500	14.7	165.0	0.66	0.32
실시예(IV-128)	화합물(B351)	6.7	16.7	2500	15.0	163.5	0.66	0.32
실시예(IV-129)	화합물(B354)	6.8	16.9	2500	14.8	158.5	0.66	0.32
실시예(IV-130)	화합물(B358)	6.6	16.5	2500	15.2	166.6	0.66	0.32
실시예(IV-131)	화합물(B363)	6.8	16.6	2500	15.1	158.5	0.66	0.32
실시예(IV-132)	화합물(B365)	6.6	19.6	2500	12.7	138.8	0.66	0.33
실시예(IV-133)	화합물(B372)	6.6	18.2	2500	13.8	152.6	0.66	0.33
실시예(IV-134)	화합물(B375)	6.7	18.6	2500	13.5	142.8	0.67	0.33
실시예(IV-135)	화합물(B386)	6.6	17.0	2500	14.7	162.8	0.66	0.32

[615]

[616] 상기 표 5 내지 표 7의 결과로부터 알 수 있듯이, 본 발명의 화합물을 발광보조층의 재료로 사용한 유기전기발광소자는 비교예 7 내지 비교예 25의 유기전기발광소자에 비해 발광효율이 향상되고 수명이 현저히 개선되었다.

[617] 연결기가 선형(linear) 형태인 비교화합물 2를 발광보조층으로 사용했을 경우에도 비선형(non-linear) 형태의 본 발명 화합물보다 낮은 효율과 낮은 수명을 나타내는 것을 확인할 수 있다. 또한 연결기가 본 발명 화합물과 동일하게 비선형(non-linear) 형태의 구조이며 메인 치환기가 아민기(-NAr^2Ar^3)가 아닌 헤테로고리기인 비교화합물 7의 경우 역시 낮은 효율 및 낮은 수명을 나타낸다. 이는 아민기(-NAr^2Ar^3) 대신에 헤테로고리기를 도입한 경우 낮은 T1값을 가지며, 이로 인해 소자구동시 발광층 내부에서 발광이 이루어지는 것이 아니라 발광층과 발광보조층 계면에서 발광이 이루어지기 때문인 것으로 판단된다.

[618] 상기 표 4에서 meta 위치로 꺽인 연결기를 카바졸 백본(backbone)에 2번 위치로 치환시키는 것은 정공수송층 뿐만 아니라 발광보조층(청색 형광, 녹색 인광, 적색 인광)에서 소자의 성능향상에 주요 인자로 작용하여 비슷한 경향성을 나타낸다.

[619] 이는 카바졸 백본(backbone)에 직접 연결되는 연결기의 위치가 2번으로 치환된 본 발명 화합물이 3번으로 치환된 비교화합물 4 내지 비교화합물 6에 비해 발광효율 및 수명 측면에서 개선된 결과를 나타내는 것으로부터 확인할 수 있다.

[620] 본 발명 화합물의 또 다른 특징으로는 연결기 L^1이 아민(-NAr^2Ar^3)과 연결되는 결합각이 작을수록 보다 넓은 밴드갭과 높은 T1 값을 나타내는 것으로, 이러한 결과는 meta 및 para위치로 결합되어 있는 화합물보다 ortho위치로 결합되어 있는 화합물이 더 높은 발광효율을 나타내는 것으로 확인할 수 있다. 또한 ortho위치로 결합되어 있는 화합물은 비교적 낮은 증착 온도를 가지기 때문에 발광효율의 향상 뿐만 아니라 공정시간의 단축과 동시에 열적 손상을 감소시켜 수명을 개선 시키는 효과도 기대할 수 있다.

[621] 마지막으로 발광보조층으로 사용한 본 발명 화합물은 카바졸의 질소(N)에 벌키(bulky)한 치환기를 도입 시 구조적으로 좀 더 뒤틀린(twisted) 구조 형태를 만들면서 발광보조층 내 물질 간의 패킹 밀도(packing density)를 낮추고 정공이동도(hole mobility)를 조절하여 발광층 내에 전하 균형(charge balance)을 이루는 것을 용이하게 만들어 결과적으로 높은 발광효율을 나타내는 것을 확인할 수 있다.

[622] 이상의 설명은 본 발명을 예시적으로 설명한 것에 불과한 것으로, 본 발명이 속하는 기술분야에서 통상의 지식을 가지는 자라면 본 발명의 본질적인 특성에서 벗어나지 않는 범위에서 다양한 변형이 가능할 것이다. 따라서, 본 명세서에 개시된 실시예들은 본 발명을 한정하기 위한 것이 아니라 설명하기 위한 것이고, 이러한 실시예에 의하여 본 발명의 사상과 범위가 한정되는 것은 아니다. 본 발명의 보호범위는 아래의 청구범위에 의하여 해석되어야 하며, 그와 동등한 범위 내에 있는 모든 기술은 본 발명의 권리범위에 포함하는 것으로 해석되어야 할 것이다.

[623] [부호의 설명]

[624] 100: 유기전기소자 110: 기판

[625] 120: 제 1전극 130: 정공주입층

[626] 140: 정공수송층 141: 버퍼층

[627] 150: 발광층 151: 발광보조층

[628] 160: 전자수송층 170: 전자주입층

[629] 180: 제 2전극

[630]

[631] **CROSS-REFERENCE TO RELATED APPLICATION**

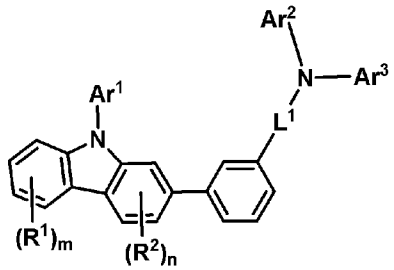
[632] 본 특허출원은 2012년 12월 06일 한국에 출원한 특허출원번호 제

10-2012-0141364 호 및 2013년 11월 06일 한국에 출원한 특허출원번호 제 10-2013-0133883 호에 대해 미국 특허법 119(a)조 (35 U.S.C § 119(a))에 따라 우선권을 주장하며, 그 모든 내용은 참고문헌으로 본 특허출원에 병합된다. 아울러, 본 특허출원은 미국 이외에 국가에 대해서도 위와 동일한 이유로 우선권을 주장하면 그 모든 내용은 참고문헌으로 본 특허출원에 병합된다.

청구범위

[청구항 1] 하기 화학식 1로 표시되는 화합물.

<화학식 1>



[상기 화학식 1에서,

m은 1 내지 4의 정수이며,

n은 1 내지 3의 정수이며,

R^1 및 R^2는 서로 독립적으로 수소; 중수소; 삼중수소; 할로겐; C_6~C_{60}의 아릴기; 플루오렌일기; O, N, S, Si 및 P 중 적어도 하나의 헤테로 원자를 포함하는 C_2~C_{60}의 헤테로고리기; C_1~C_{50}의 알킬기; C_2~C_{20}의 알켄일기; $-L^2-N(Ar^2)(Ar^3)$; C_1~C_{30}의 알콕실기; 및 C_6~C_{30}의 아릴옥실기;로 이루어진 군에서 선택되며,

Ar^1은 플루오렌일기; C_6~C_{60}의 아릴기; C_2~C_{20}의 알켄일기; O, N, S, Si 및 P 중 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C_2~C_{60}의 헤테로고리기; C_1~C_{50}의 알킬기; $-L^2-N(Ar^2)(Ar^3)$; 및 C_6~C_{60}의 방향족 고리와 C_3~C_{60}의 지방족 고리의 융합고리기;로 이루어진 군에서 선택되며,

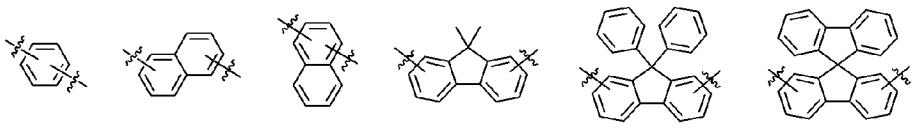
L^1 및 L^2은 서로 독립적으로 단일결합; C_6~C_{60}의 아릴렌기; 플루오렌일렌기; O, N, S, Si 및 P 중 적어도 하나의 헤테로 원자를 포함하는 C_2~C_{60}의 2가 헤테로고리기; C_3~C_{60}의 지방족고리와 C_6~C_{60}의 방향족고리의 2가 융합고리기; 및 2가의 지방족 탄화수소기;로 이루어진 군에서 선택되며,

Ar^2및 Ar^3는 서로 독립적으로, C_6~C_{60}의 아릴기; 플루오렌일기; O, N, S, Si 및 P 중 적어도 하나의 헤테로 원자를 포함하는 C_2~C_{60}의 헤테로고리기; C_1~C_{50}의 알킬기; C_6~C_{60}의 방향족 고리와 C_3~C_{60}의 지방족 고리의 융합고리기; 및 C_2~C_{20}의 알켄일기;로 이루어진 군에서 선택된다.

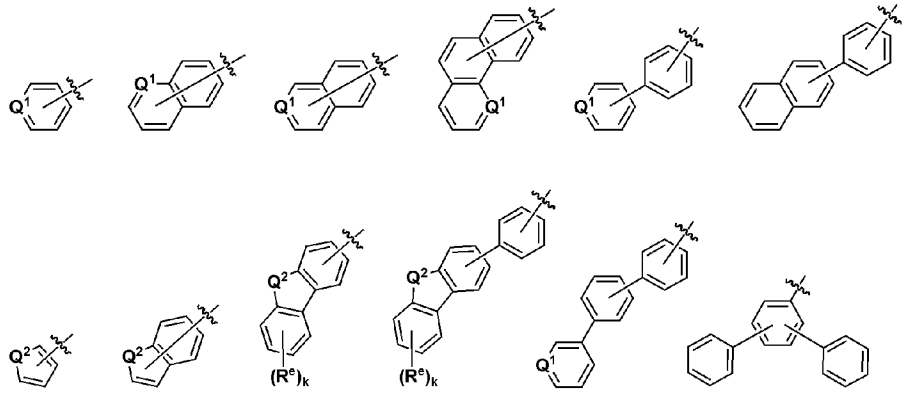
여기서 상기 아릴기, 헤테로고리기, 플루오렌일기, 알킬기, 알켄일기, 융합고리기, 알콕실기, 아릴옥실기, 아릴렌기, 플루오렌일렌기, 지방족 탄화수소기가 하나 이상의 치환기로 더 치환되는 경우에는 각각 중수소; 할로겐; 실란기; 실록산기; 붕소기; 게르마늄기; 시아노기; 니트로기; -L'-N(R')(R")(여기서

상기 L'은 단일결합; C_6~C_{60}의 아릴렌기; 플루오렌일렌기; O, N, S, Si 및 P 중 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C_2~C_{60}의 헤테로고리기; C_3~C_{60}의 지방족고리와 C_6~C_{60}의방향족고리의 융합고리기; 및 2가의 C_1~C_{60} 지방족 탄화수소기;로 이루어진 군에서 선택되며, 상기 R'및 R"는 서로 독립적으로 C_6~C_{60}의 아릴기; 플루오렌일기; O, N, S, Si 및 P 중 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C_2~C_{60}의 헤테로고리기; C_1~C_{50}의 알킬기; 및 C_2~C_{20}의 알켄일기;로 이루어진 군에서 선택됨); C_1~C_{20}의 알킬싸이오기; C_1~C_{20}의 알콕실기; C_1~C_{20}의 알킬기; C_2~C_{20}의 알켄일기; C_2~C_{20}의 알킨일기; C_6~C_{20}의 아릴기; 중수소로 치환된 C_6~C_{20}의 아릴기; 플루오렌일기; C_2~C_{20}의 헤테로고리기; C_3~C_{20}의 시클로알킬기; C_7~C_{20}의 아릴알킬기; 및 C_8~C_{20}의 아릴알켄일기;로 이루어진 군에서 선택된 하나 이상의 치환기로 더 치환된다.]

[청구항 2] 제 1항에 있어서,
상기 L^1은 하기 군에서 선택되는 것을 특징으로 하는 화합물.



[청구항 3] 제 1항에 있어서,
상기 Ar^2와 Ar^3은 서로 독립적으로 하기 군에서 선택되는 것을 특징으로 하는 화합물.

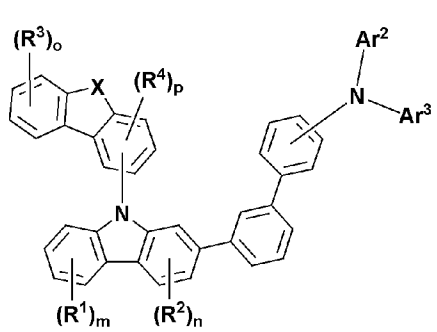


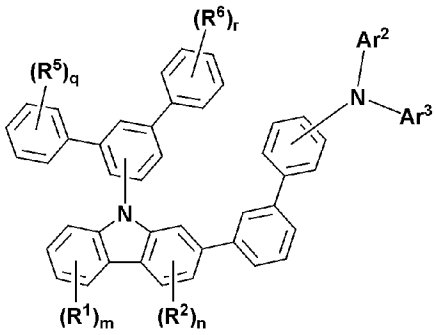
[상기 화학식에서,
Q^1는 $C(R^a)$ 또는 N이며,
Q^2는 $C(R^b)(R^c)$, $N(R^d)$, S 또는 O이며,
k는 1 내지 4의 정수이며,
상기 R^a 및 R^e는 i) 서로 독립적으로, 수소; 중수소; C_6~C_{60}의 아릴기; O, N, S, Si 및 P 중 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C_2~C_{60}의 헤테로고리기; C_1~C_{50}의 알킬기; C_2~C_{20}의 알켄일기; C_1~C

30의 알콕시기; 및 플루오렌일기;로 이루어진 군에서 선택되거나, 또는 ii) 복수의 R^e는 이웃하는 기끼리 각각 결합하여 이들과 결합한 탄소와 함께 방향족고리를 형성하며,
상기 R^b 내지 R^d는 i) 서로 독립적으로 C_6~C_{60}의 아릴기; O, N, S, Si 및 P 중 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C_2~C_{60}의 헤테로고리기; C_1~C_{50}의 알킬기; C_2~C_{20}의 알켄일기; C_1~C_{30}의 알콕실기;로 이루어진 군에서 선택되거나, 또는 ii) R^b와 R^c는 서로 결합하여 이들이 결합된 플루오렌과 함께 스파이로(Spiro) 화합물을 형성한다.]

[청구항 4] 제 1항에 있어서,
하기 화학식 2 또는 화학식 3으로 표시되는 것을 특징으로 하는 화합물.

화학식2 화학식3





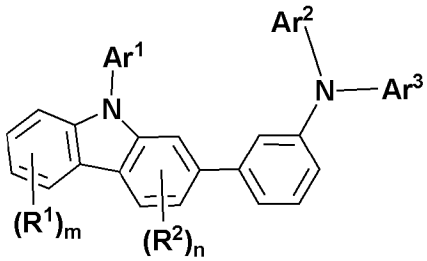
[상기 화학식 2 및 화학식 3에서,
Ar^2, Ar^3, R^1, R^2, m 및 n은 제 1항에서 정의된 것과 동일하며,
X는 $C(R^f)(R^g)$, S 또는 O이며,
상기 R^f 및 R^g는 i) 서로 독립적으로 C_6~C_{60}의 아릴기; O, N, S, Si 및 P 중 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C_2~C_{60}의 헤테로고리기; C_1~C_{50}의 알킬기; C_2~C_{20}의 알켄일기; 및 C_1~C_{30}의 알콕실기;로 이루어진 군에서 선택되거나, 또는 ii) R^f와 R^g는 서로 결합하여 이들이 결합된 플루오렌과 함께 스파이로(Spiro) 화합물을 형성하며,
o는 1 내지 4의 정수이며,
p는 1 내지 3의 정수이며,
q 및 r은 서로 독립적으로 1 내지 5의 정수이며,
R^3 내지 R^6은 i) 서로 독립적으로 수소; 중수소; 삼중수소; 할로겐; C_6~C_{60}의 아릴기; O, N, S, Si 및 P 중 적어도 하나의 헤테로 원자를 포함하는C_2~C_{60}의 헤테로고리기; C_1~C_{50}의 알킬기; C_2~C_{20}의 알켄일기; C_1~C_{30}의 알콕실기; 및 C_6~C_{30}의 아릴옥실기;로

이루어진 군에서 선택되거나, 또는 ii) 이웃하는 기끼리 서로 결합하여 이들과 결합한 탄소와 함께 방향족고리를 형성한다.]

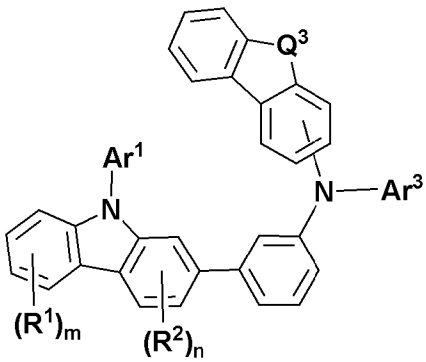
[청구항 5] 제 1항에 있어서,

하기 화학식 4 또는 화학식 5로 표시되는 것을 특징으로 하는 화합물.

화학식4



화학식5



[상기 화학식 4 및 5에서,

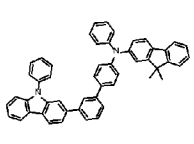
Ar^1 내지 Ar^3, R^1, R^2, m 및 n은 제 1항에서 정의된 것과 동일하며,

Q^3은 $C(R^h)(R^i)$, $N(R^j)$, S 또는 O이며,

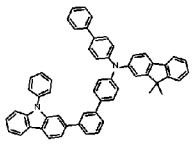
상기 R^h 내지 R^j는 i) 서로 독립적으로 C_6~C_{60}의 아릴기; O, N, S, Si 및 P 중 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C_2~C_{60}의 헤테로고리기; C_1~C_{50}의 알킬기; C_2~C_{20}의 알켄일기; C_1~C_{30}의 알콕실기;로 이루어진 군에서 선택되거나, 또는 ii) R^h와 R^i는 서로 결합하여 이들이 결합된 플루오렌과 함께 스파이로(Spiro) 화합물을 형성한다.]

[청구항 6] 제 1 항에 있어서,

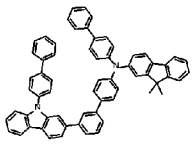
하기 화합물 중 하나인 것을 특징으로 하는 화합물.



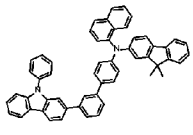
B1



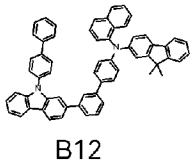
B6



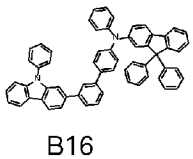
B7



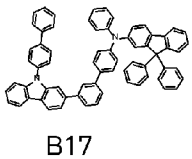
B11



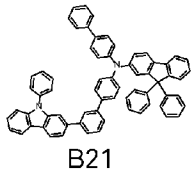
B12



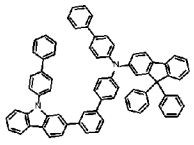
B16



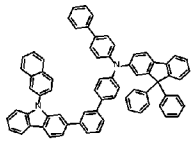
B17



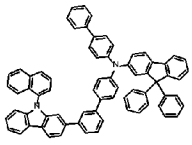
B21



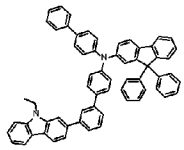
B22



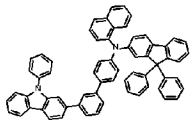
B23



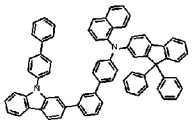
B24



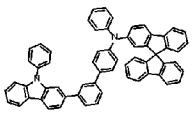
B25



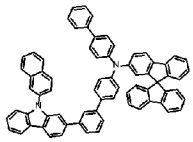
B26



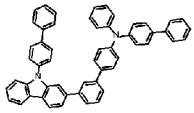
B27



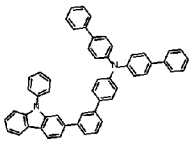
B31



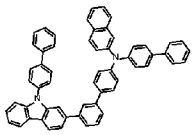
B43



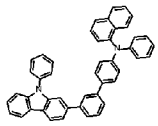
B47



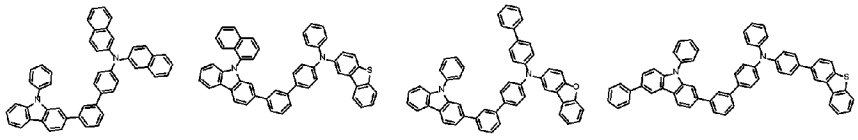
B51



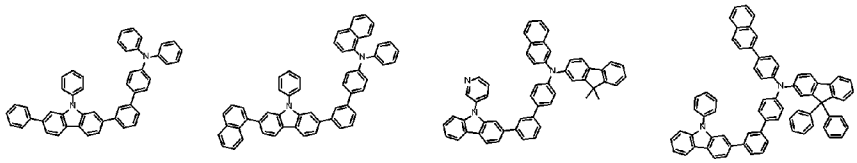
B62



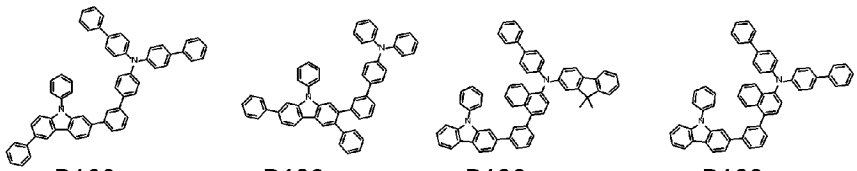
B66



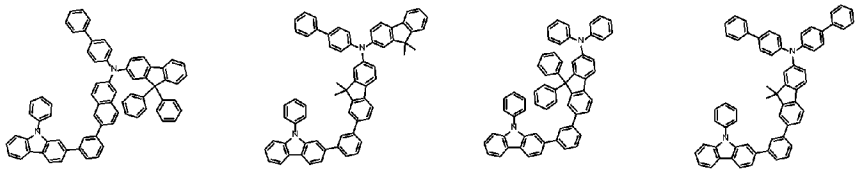
B86 B94 B106 B122



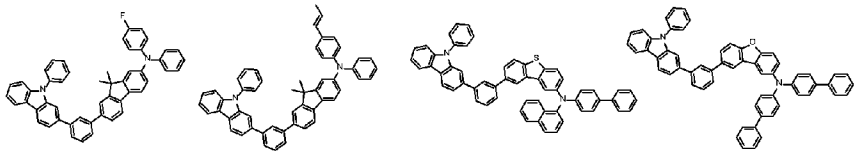
B124 B125 B127 B128



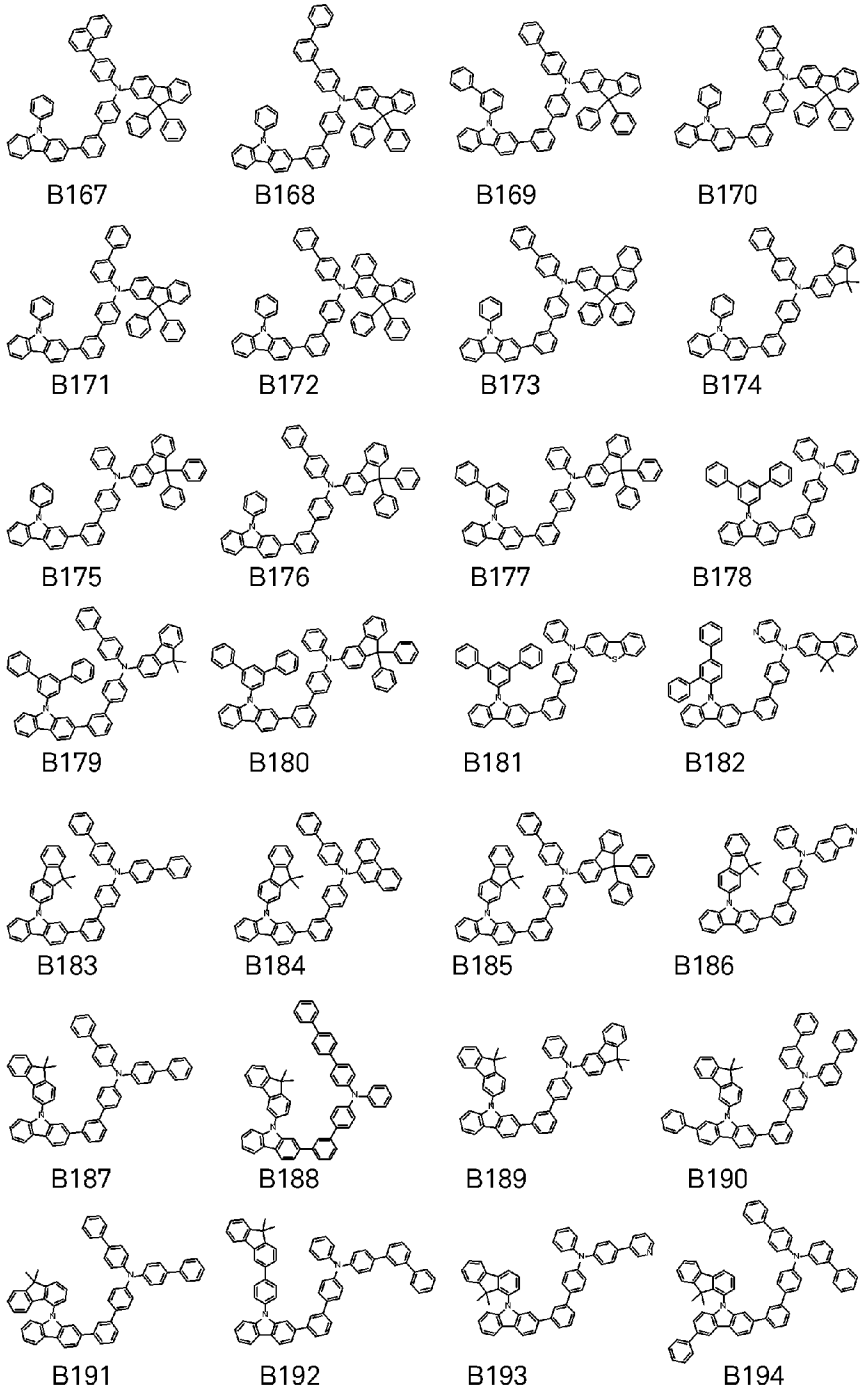
B129 B130 B132 B138

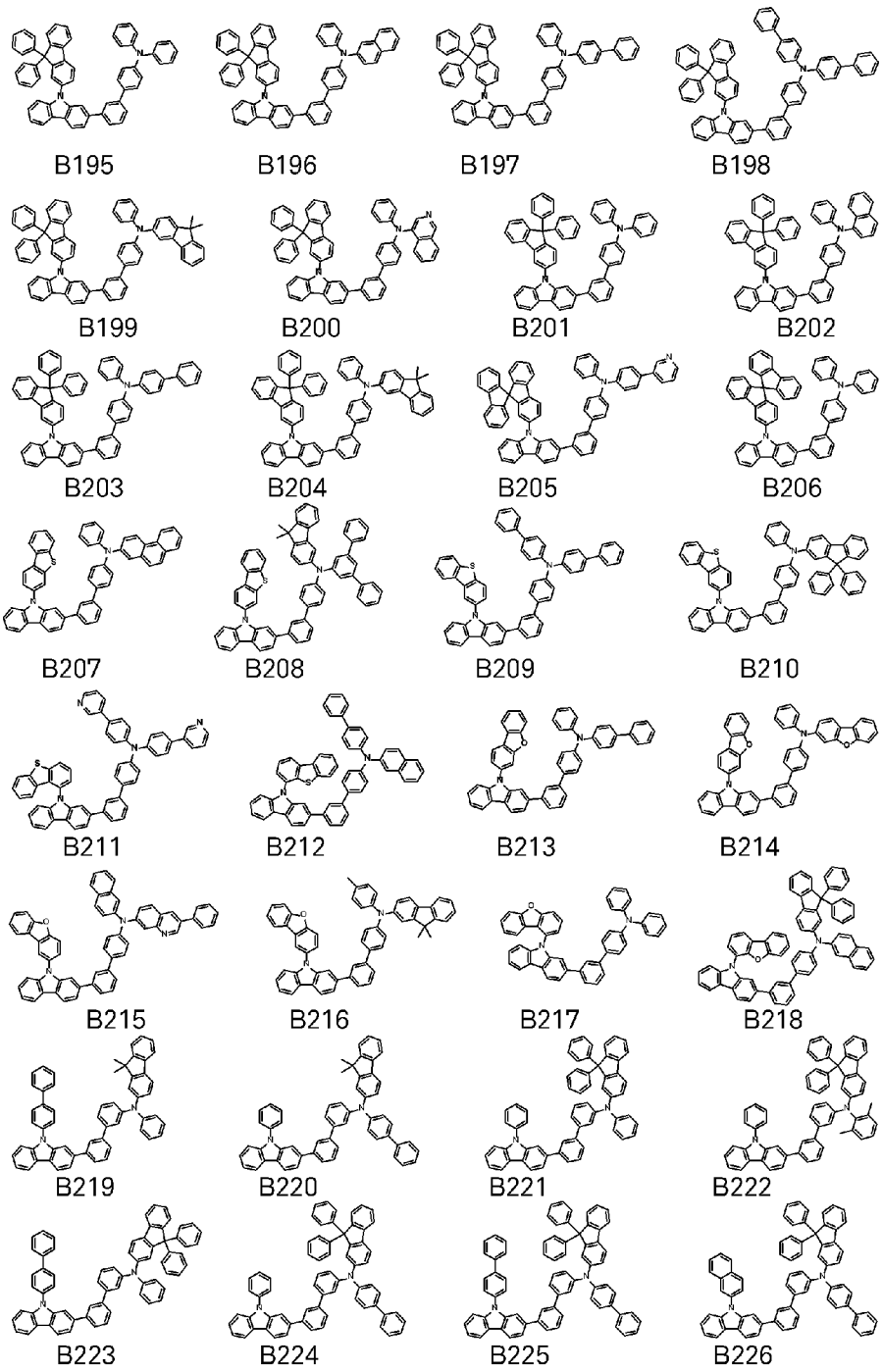


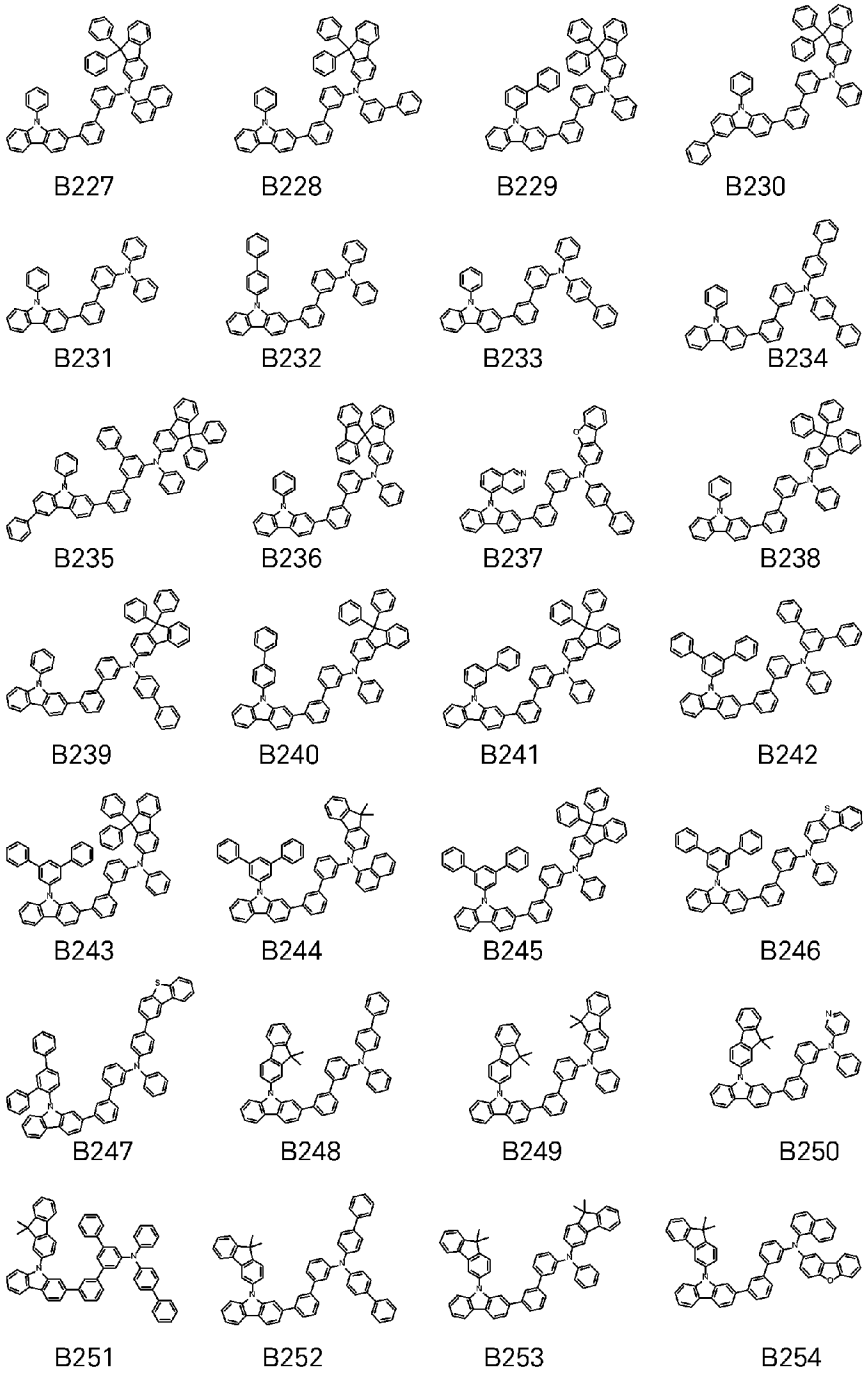
B145 B152 B157 B158

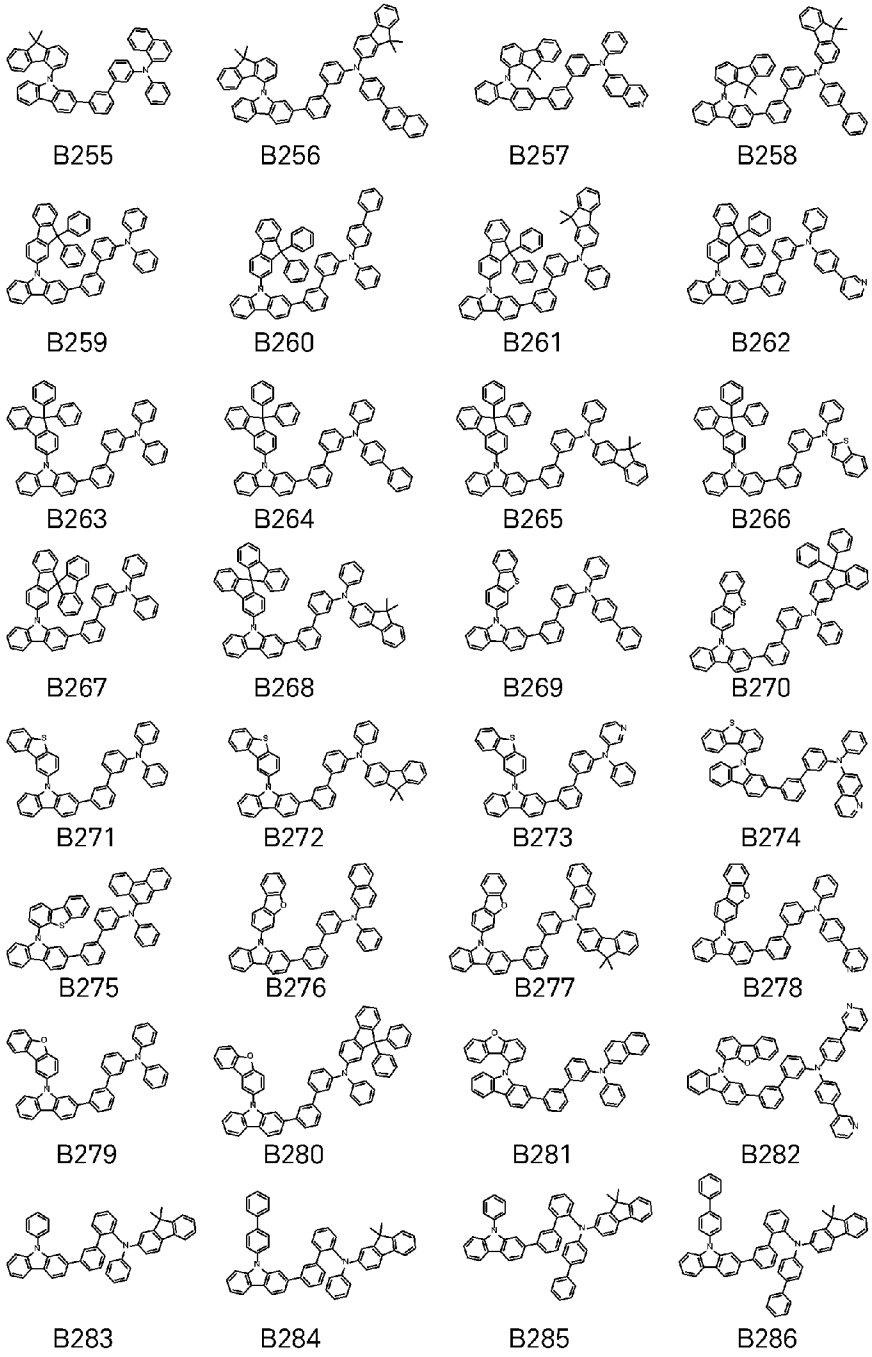


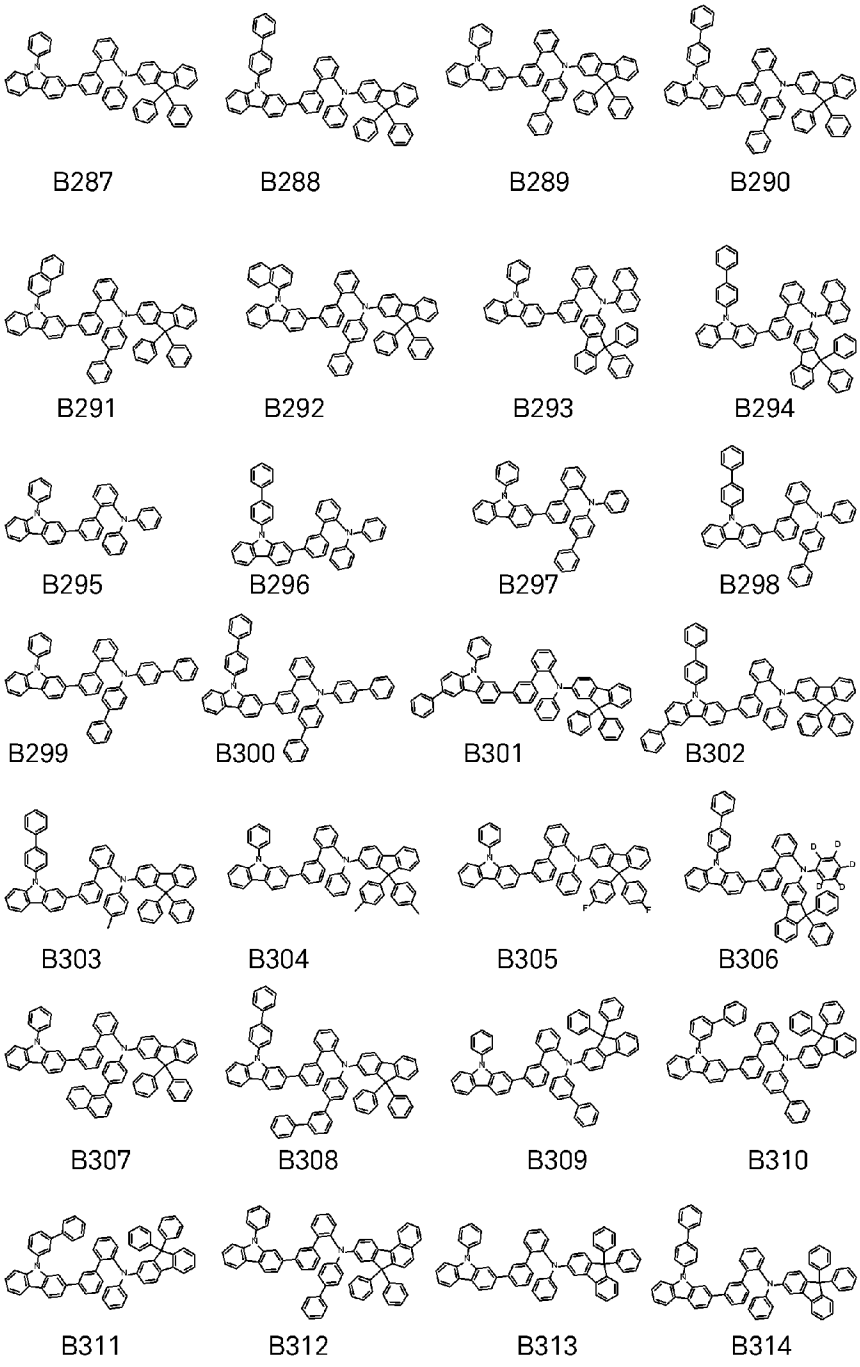
B161 B162 B164 B165

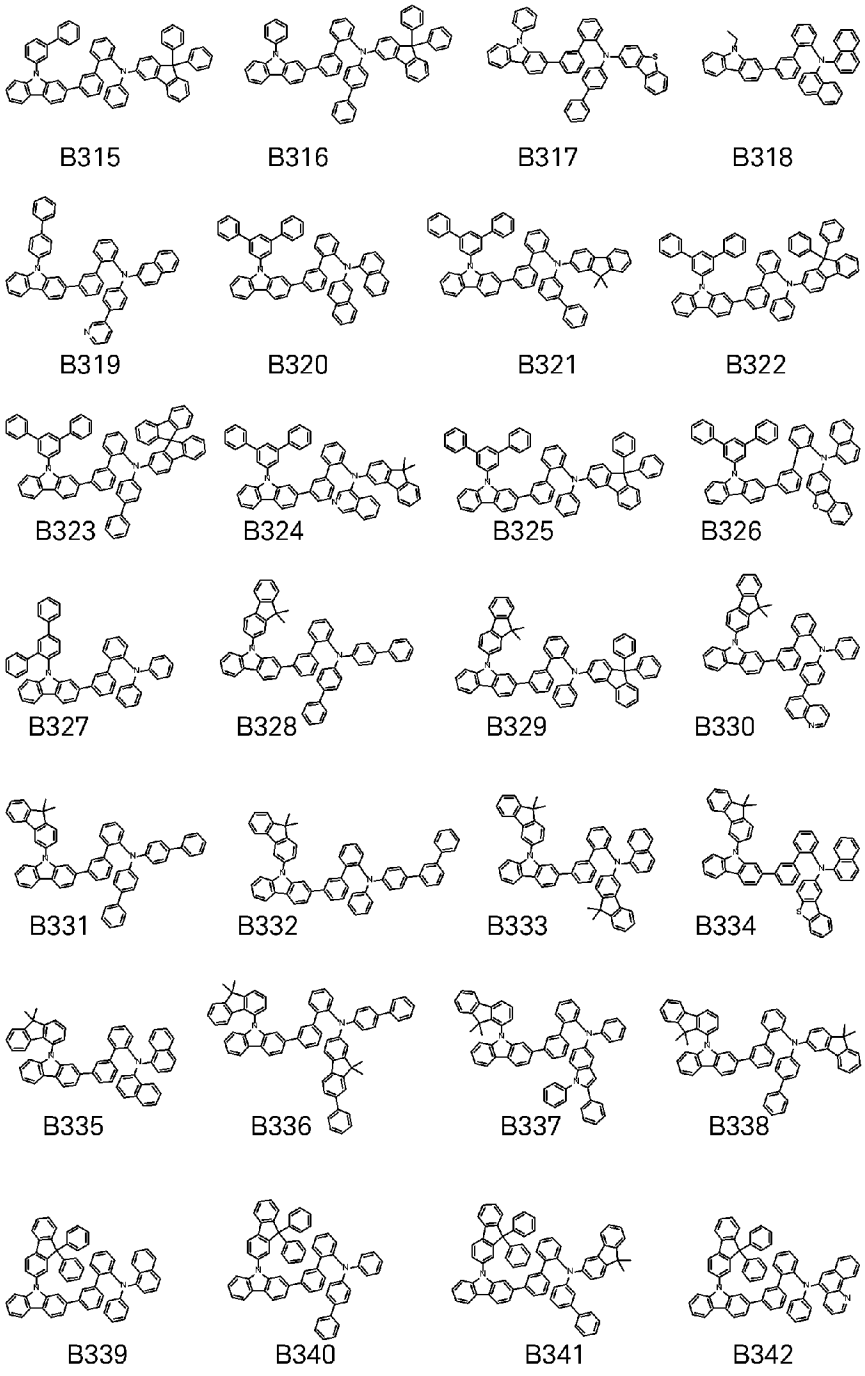

B167
B168
B169
B170
B171
B172
B173
B174
B175
B176
B177
B178
B179
B180
B181
B182
B183
B184
B185
B186
B187
B188
B189
B190
B191
B192
B193
B194

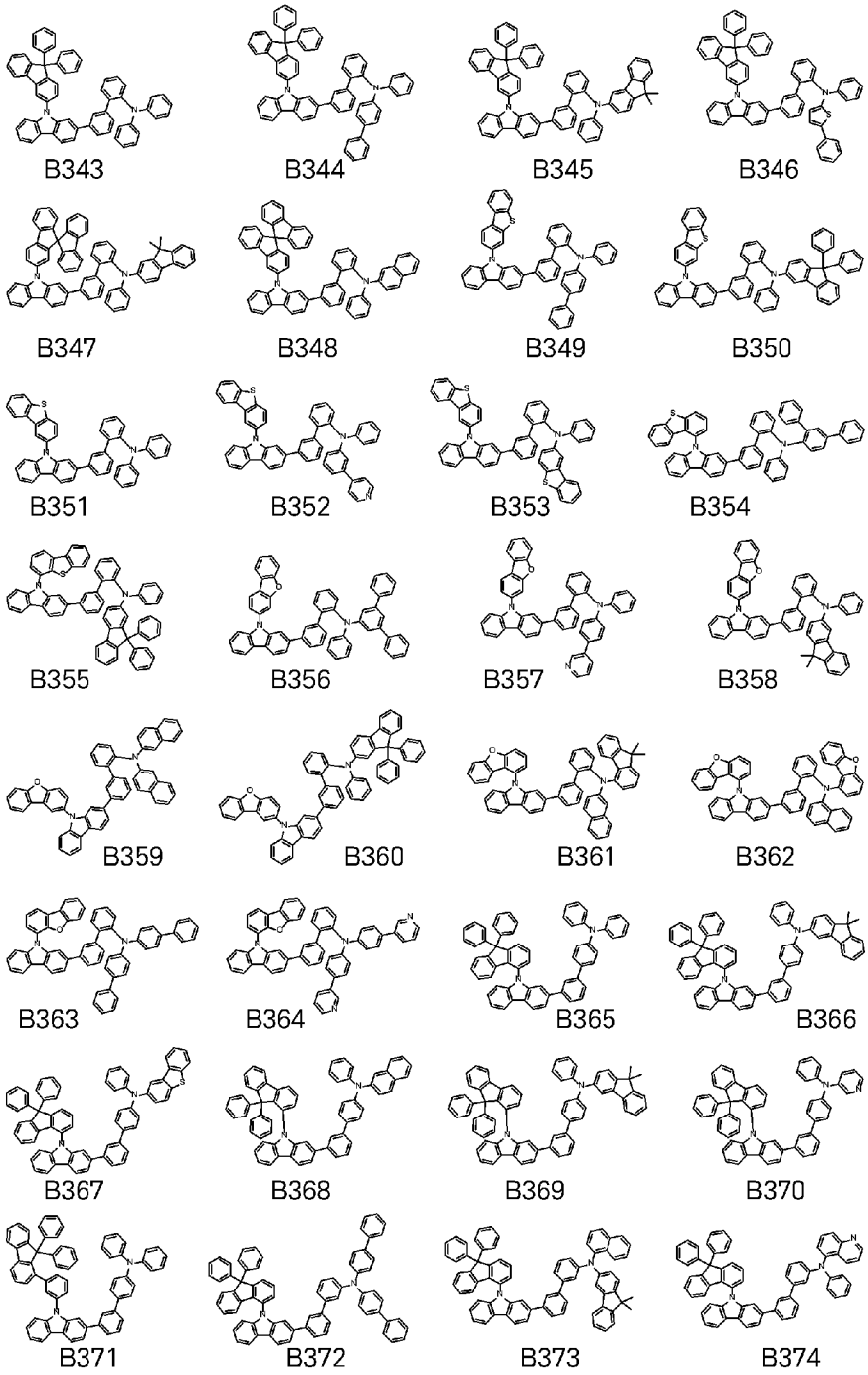

B195
B196
B197
B198
B199
B200
B201
B202
B203
B204
B205
B206
B207
B208
B209
B210
B211
B212
B213
B214
B215
B216
B217
B218
B219
B220
B221
B222
B223
B224
B225
B226

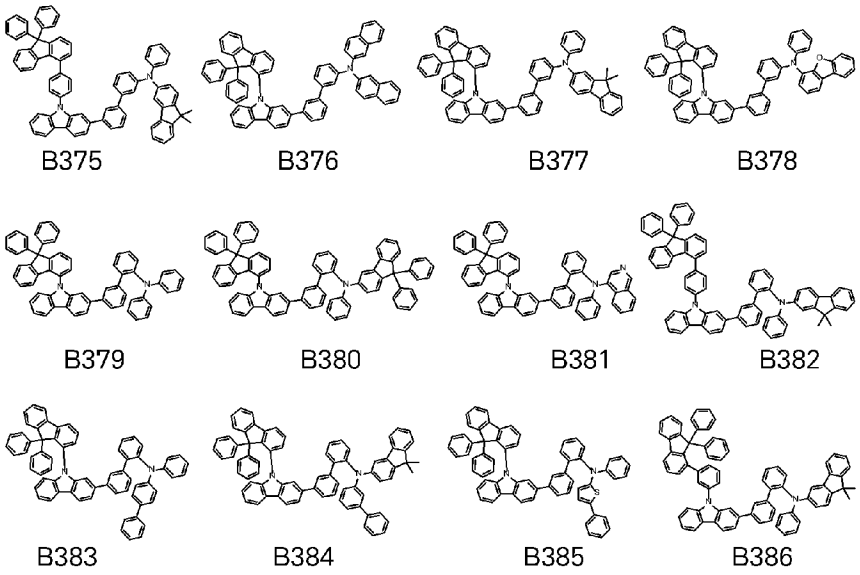

B227
B228
B229
B230
B231
B232
B233
B234
B235
B236
B237
B238
B239
B240
B241
B242
B243
B244
B245
B246
B247
B248
B249
B250
B251
B252
B253
B254

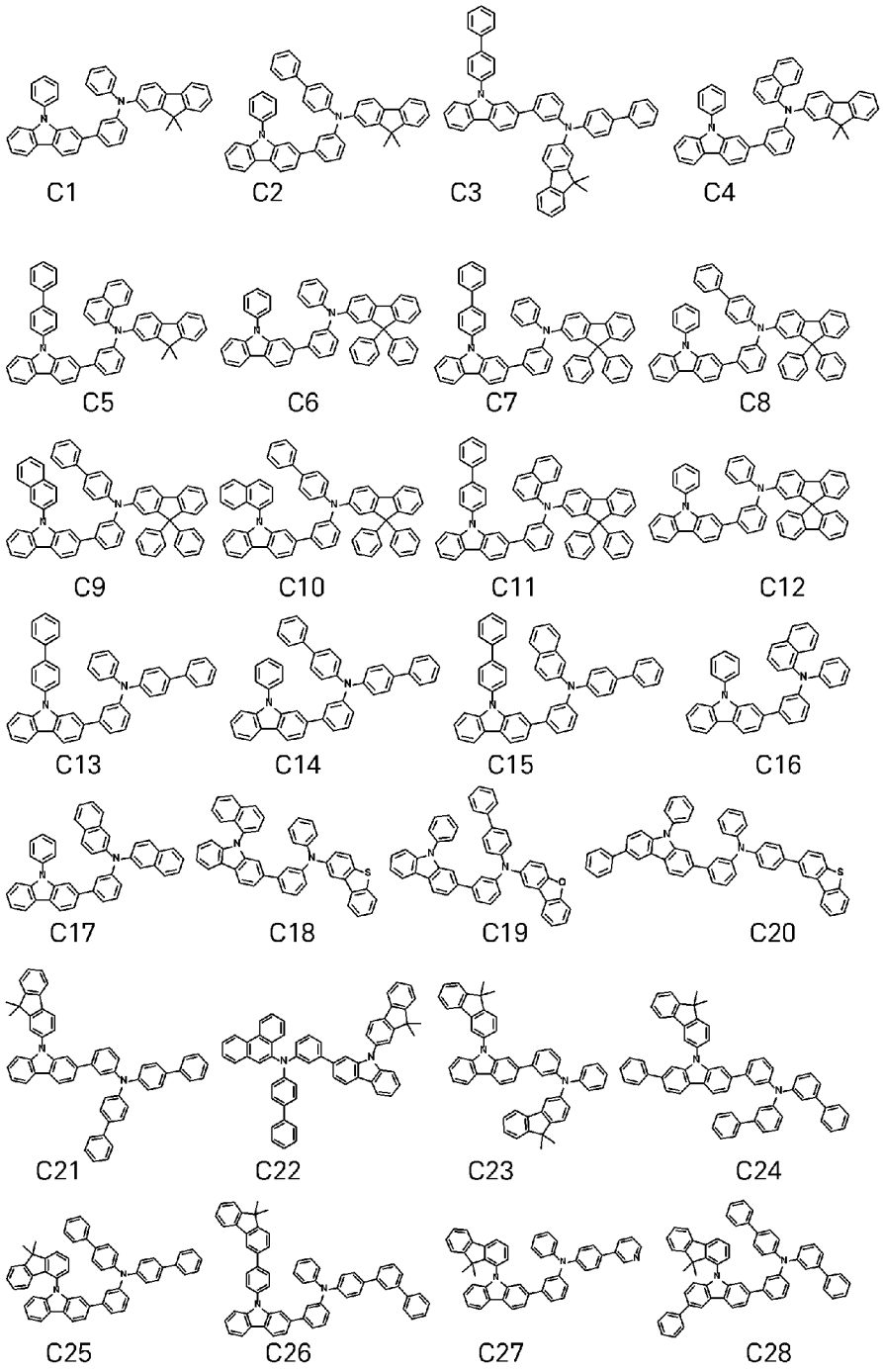

B255
B256
B257
B258
B259
B260
B261
B262
B263
B264
B265
B266
B267
B268
B269
B270
B271
B272
B273
B274
B275
B276
B277
B278
B279
B280
B281
B282
B283
B284
B285
B286

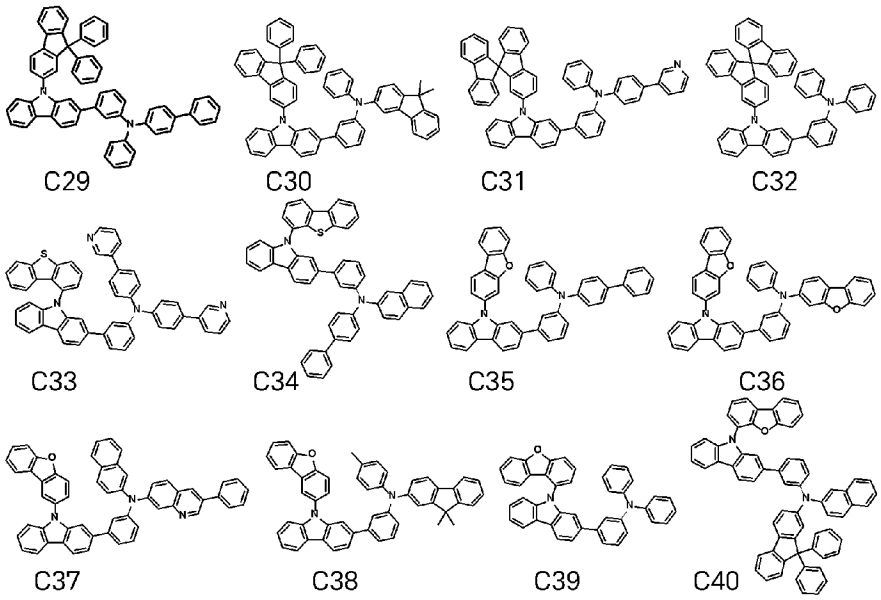

B287
B288
B289
B290
B291
B292
B293
B294
B295
B296
B297
B298
B299
B300
B301
B302
B303
B304
B305
B306
B307
B308
B309
B310
B311
B312
B313
B314


B315
B316
B317
B318
B319
B320
B321
B322
B323
B324
B325
B326
B327
B328
B329
B330
B331
B332
B333
B334
B335
B336
B337
B338
B339
B340
B341
B342


B343
B344
B345
B346
B347
B348
B349
B350
B351
B352
B353
B354
B355
B356
B357
B358
B359
B360
B361
B362
B363
B364
B365
B366
B367
B368
B369
B370
B371
B372
B373
B374


B375
B376
B377
B378
B379
B380
B381
B382
B383
B384
B385
B386


C1
C2
C3
C4
C5
C6
C7
C8
C9
C10
C11
C12
C13
C14
C15
C16
C17
C18
C19
C20
C21
C22
C23
C24
C25
C26
C27
C28



[청구항 7] 제 1항의 화합물을 포함하는 유기전기소자.

[청구항 8] 제 7항에 있어서,
제 1전극; 제 2전극; 및 상기 제 1전극과 제 2전극 사이에 위치하는 유기물층;을 포함하며, 상기 화합물이 상기 유기물층에 함유되는 것을 특징으로 하는 유기전기소자.

[청구항 9] 제 8항에 있어서,
상기 화합물은 상기 유기물층의 정공주입층, 정공수송층, 발광보조층 또는 발광층 중 적어도 하나의 층에 함유되는 것을 특징으로 하는 유기전기소자.

[청구항 10] 제 8 항에 있어서,
상기 제 1전극과 제 2전극의 일면 중 상기 유기물층과 반대되는 적어도 일면에 형성되는 광효율 개선층을 더 포함하는 것을 특징으로 하는 유기전기소자.

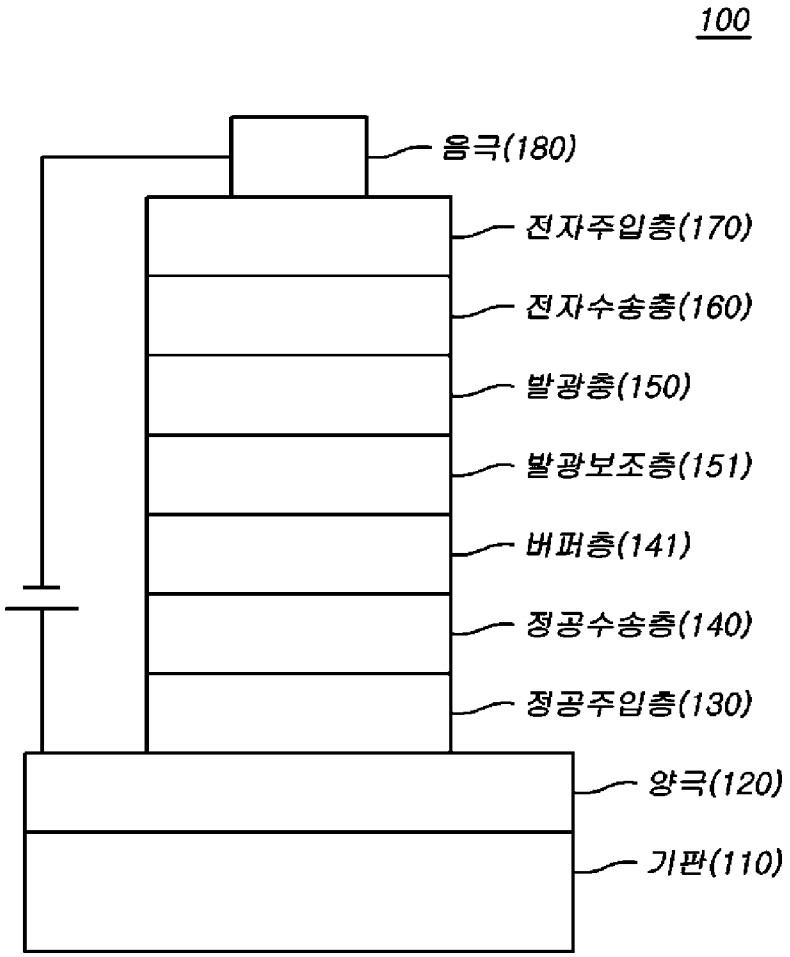
[청구항 11] 제 8항에 있어서,
상기 유기물층은 스핀코팅 공정, 노즐 프린팅 공정, 잉크젯 프린팅 공정, 슬롯코팅 공정, 딥코팅 공정 또는 롤투롤 공정에 의해 형성되는 것을 특징으로 하는 유기전기소자.

[청구항 12] 제 7항의 유기전기소자를 포함하는 디스플레이장치; 및
상기 디스플레이장치를 구동하는 제어부;를 포함하는 전자장치.

[청구항 13] 제 12항에 있어서,
상기 유기전기소자는 유기전기발광소자(OLED), 유기태양전지, 유기감광체(OPC), 유기트랜지스터(유기 TFT), 및 단색 또는 백색 조명용 소자 중 적어도 하나인 것을 특징으로 하는 전자장치.

WO 2014/088284 PCT/KR2013/011088

[Fig. 1]



INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.
PCT/KR2013/011088

A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER

C07D 209/82(2006.01)i, C09K 11/06(2006.01)i, H01L 51/50(2006.01)i

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

B. FIELDS SEARCHED

Minimum documentation searched (classification system followed by classification symbols)

C07D 209/82; C09K 11/06; H01L 51/50

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

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

eKOMPASS (KIPO internal) & Keywords: carbazole, N-aryl, bipolar, light emitting, OLED

C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
A	KR 10-2010-0033265 A (LG CHEM. LTD.) 29 March 2010 See claims 1, 9 and 11-12; paragraph [70]	1-13
A	JP 2008-195841 A (TORAY IND INC) 28 August 2008 See paragraphs [1], [2], [8], [9] and [28]-[32]; claims 1-5	1-13
A	JP 2008-078362 A (TORAY IND INC) 03 April 2008 See paragraphs [1], [2], [8], [9] and [28]-[33]; claims 1-5	1-13
A	KR 10-2012-0100031 A (DUKSAN HIGH METAL CO., LTD.) 12 September 2012 See the entire document	1-13

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

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

Date of the actual completion of the international search	Date of mailing of the international search report
25 FEBRUARY 2014 (25.02.2014)	**25 FEBRUARY 2014 (25.02.2014)**

Name and mailing address of the ISA/KR
Korean Intellectual Property Office
Government Complex-Daejeon, 189 Seonsa-ro, Daejeon 302-701, Republic of Korea
Facsimile No. 82-42-472-7140

Authorized officer

Telephone No.

INTERNATIONAL SEARCH REPORT
Information on patent family members

International application No.
PCT/KR2013/011088

Patent document cited in search report	Publication date	Patent family member	Publication date
KR 10-2010-0033265 A	29/03/2010	NONE	
JP 2008-195841 A	28/08/2008	NONE	
JP 2008-078362 A	03/04/2008	JP 4830750 B2	07/12/2011
KR 10-2012-0100031 A	12/09/2012	NONE	

국 제 조 사 보 고 서

국제출원번호
PCT/KR2013/011088

A. 발명이 속하는 기술분류(국제특허분류(IPC))

C07D 209/82(2006.01)i, C09K 11/06(2006.01)i, H01L 51/50(2006.01)i

B. 조사된 분야

조사된 최소문헌(국제특허분류를 기재)
C07D 209/82; C09K 11/06; H01L 51/50

조사된 기술분야에 속하는 최소문헌 이외의 문헌
한국등록실용신안공보 및 한국공개실용신안공보: 조사된 최소문헌란에 기재된 IPC
일본등록실용신안공보 및 일본공개실용신안공보: 조사된 최소문헌란에 기재된 IPC

국제조사에 이용된 전산 데이터베이스(데이터베이스의 명칭 및 검색어(해당하는 경우))
eKOMPASS(특허청 내부 검색시스템) & 키워드: carbazole, N-aryl, bipolar, light emitting, OLED

C. 관련 문헌

카테고리*	인용문헌명 및 관련 구절(해당하는 경우)의 기재	관련 청구항
A	KR 10-2010-0033265 A (주식회사 엘지화학) 2010.03.29 청구항 1, 9, 11-12항; 식별번호 [70]	1-13
A	JP 2008-195841 A (TORAY IND INC) 2008.08.28 식별번호 [1], [2], [8], [9], [28]-[32]; 청구항 1-5항	1-13
A	JP 2008-078362 A (TORAY IND INC) 2008.04.03 식별번호 [1], [2], [8], [9], [28]-[33]; 청구항 1-5항	1-13
A	KR 10-2012-0100031 A (덕산하이메탈(주)) 2012.09.12 문헌전체	1-13

☐ 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

"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
2014년 02월 25일 (25.02.2014)	2014년 02월 25일 (25.02.2014)

ISA/KR의 명칭 및 우편주소
대한민국 특허청
(302-701) 대전광역시 서구 청사로 189,
4동 (둔산동, 정부대전청사)
팩스 번호 +82-42-472-7140

심사관
강형석
전화번호 +82-42-481-3329

국제조사보고서
대응특허에 관한 정보

국제출원번호
PCT/KR2013/011088

국제조사보고서에서 인용된 특허문헌	공개일	대응특허문헌	공개일
KR 10-2010-0033265 A	2010/03/29	없음	
JP 2008-195841 A	2008/08/28	없음	
JP 2008-078362 A	2008/04/03	JP 4830750 B2	2011/12/07
KR 10-2012-0100031 A	2012/09/12	없음	