

(12) 특허협력조약에 의하여 공개된 국제출원

(19) 세계지식재산권기구
국제사무국

(43) 국제공개일
2015 년 8 월 27 일 (27.08.2015)



(10) 국제공개번호
WO 2015/126090 A1

- (51) 국제특허분류:
C07D 209/82 (2006.01) H01L 51/50 (2006.01)
C09K 11/06 (2006.01)
- (21) 국제출원번호: PCT/KR2015/001362
- (22) 국제출원일: 2015 년 2 월 11 일 (11.02.2015)
- (25) 출원언어: 한국어
- (26) 공개언어: 한국어
- (30) 우선권정보:
10-2014-0018889 2014 년 2 월 19 일 (19.02.2014) KR
10-2014-0072377 2014 년 6 월 13 일 (13.06.2014) KR
- (71) 출원인: 덕산네오룩스 주식회사 (DUK SAN NEOLUX CO., LTD.) [KR/KR]; 331-821 충청남도 천안시 서북구 입장면 쑥골길 21-32, Chungcheongnam-do (KR).
- (72) 발명자: 문성윤 (MUN, Soung Yun); 331-836 충청남도 천안시 서북구 성거읍 천흥 3 길 19-1 신비텔 11 동 204 호, Chungcheongnam-do (KR). 이선희 (LEE, Sun-Hee); 331-978 충청남도 천안시 서북구 성정공원 6 길 23-6, 406 호, Chungcheongnam-do (KR). 박정철 (PARK, Jung

Cheol); 443-751 경기도 수원시 영통구 효원로 363 신매탄위브하늘채아파트 105 동 1804 호, Gyeonggi-do (KR). 김대성 (KIM, DaeSung); 449-924 경기도 용인시 처인구 백옥대로 1068 번길 10 현대아파트 101 동 601, Gyeonggi-do (KR). 이범성 (LEE, Bum Sung); 331-793 충청남도 천안시 서북구 한들 3 로 100 백석마을아이파크아파트 112 동 2101 호, Chungcheongnam-do (KR). 김석현 (KIM, Seok hyun); 463-727 경기도 성남시 분당구 내정로 186 파크타운대림아파트 101 동 1801 호, Gyeonggi-do (KR).

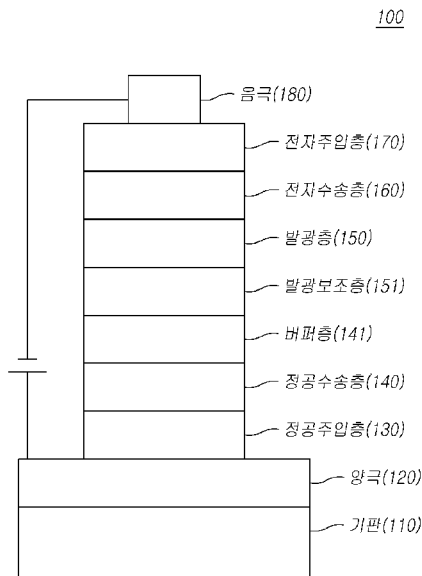
(74) 대리인: 김정은 (KIM, Jeongeun); 135-923 서울시 강남구 테헤란로 16 길 13, 동원빌딩 201 호, Seoul (KR).

(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, LU, LY, MA, MD, ME, MG, MK, MN, MW, MX, MY, MZ, NA, NG, NI, NO, NZ, OM, PA, PE,

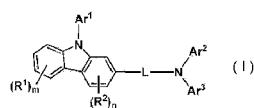
[다음 쪽 계속]

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

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



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



(57) Abstract: A compound represented by chemical formula 1 is disclosed. In addition, disclosed is an organic electronic element comprising: a first electrode; a second electrode; and an organic material layer between the first electrode and the second electrode, wherein the organic material layer includes the compound represented by chemical formula 1. If the organic material layer includes the compound represented by chemical formula 1, the light emitting efficiency, stability and lifespan of the organic electronic element can be improved.

(57) 요약서: 화학식 1 로 표시되는 화합물이 개시된다. 또한, 제 1 전극, 제 2 전극 및 상기 제 1 전극과 상기 제 2 전극 사이의 유기물층을 포함하는 유기전기소자가 개시되며, 이때 상기 유기물층은 화학식 1 로 표시되는 화합물을 포함한다. 유기물층에 화학식 1 로 표시되는 화합물이 포함되면, 유기전기소자의 발광효율, 안정성 및 수명이 향상될 수 있다.



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, ST, SZ, TZ, UG, ZM, ZW), 유라시아 (AM, AZ, BY, KG, KZ, RU, TJ, TM), 유럽 (AL, AT, BE, BG, CH, CY, CZ, DE, DK,

EE, ES, FI, FR, GB, GR, HR, HU, IE, IS, IT, LT, LU, LV, MC, MK, MT, NL, NO, PL, PT, RO, RS, SE, SI, SK, SM, TR), OAPI (BF, BJ, CF, CG, CI, CM, GA, GN, GQ, GW, KM, ML, MR, NE, SN, TD, TG).

공개:

- 국제조사보고서와 함께 (조약 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] 현재 휴대용 디스플레이 시장은 대면적 디스플레이로 그 크기가 증가하고 있는 추세이며, 이로 인해 기존 휴대용 디스플레이에서 요구하던 소비전력보다 더 큰 소비전력이 요구되고 있다. 따라서, 배터리라는 제한적인 전력 공급원을 가지고 있는 휴대용 디스플레이 입장에서는 소비전력이 매우 중요한 요소가 되었고, 효율과 수명 문제 또한 반드시 해결해야 되는 상황이다.
- [5] 효율과 수명, 구동전압 등은 서로 연관이 있으며, 효율이 증가되면 상대적으로 구동전압이 떨어지고, 구동전압이 떨어지면서 구동시 발생하는 주울열(Joule heating)에 의한 유기물질의 결정화가 적어져 결과적으로 수명이 늘어나는 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 위해 정공수송층과 발광층 사이에 발광보조층을 형성하는데, 발광층 화소영역(R, G, B)에 따라 서로 다른 발광 보조층의 개발이 필요한 시점이다.
- [8] 일반적으로, 전자수송층에서 발광층으로 전자가 전달되고 정공이 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 색순도 저하, 효율 감소 및 수명 저하 현상을 나타낸다.
- [10] 또한, 낮은 구동전압을 만들기 위해 정공이동도(hole mobility)가 빠른 물질을 사용할 경우 이로 인해 효율이 감소하는 경향을 나타낸다. 이는 일반적인 유기전기발광소자에서 정공이동도(hole mobility)가 전자이동도(electron mobility)보다 빠르기 때문에 발광층 내의 전하 불균형(charge unbalance)을 초래하여 효율 감소 및 수명 저하 현상이 나타나는 것이다.
- [11] 따라서, 발광보조층은 정공수송층의 문제점 등을 해결할 수 있는 적당한 구동전압을 갖기 위한 정공이동도, 높은 T1(electron block)값, 넓은 밴드갭(wide bandgap)을 갖는 물질로 형성되어야 한다. 이러한 요구사항은 발광보조층 물질의 코어에 대한 구조적 특성만으로 충족되지 않으며, 물질의 코어 및 서브(Sub) 치환기 등의 특성이 모두 적절하게 조합되었을 때 가능하다는 점에서, 유기전기소자의 효율과 수명을 향상시키기 위해, 높은 T1 값, 넓은 밴드갭을 가지는 발광보조층 재료에 대한 개발이 절실히 요구되고 있다.
- [12] 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

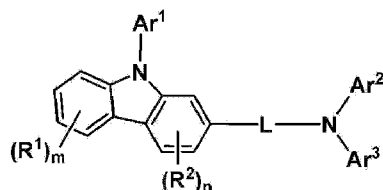
기술적 과제

- [13] 본 발명은 소자의 발광효율, 안정성 및 수명을 향상시킬 수 있는 화합물, 이를 이용한 유기전기소자 및 그 전자장치를 제공하는 것을 목적으로 한다.

과제 해결 수단

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

[15]



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

발명의 효과

- [17] 카바줄 코어에 비선형(non-linear)의 연결기를 사용하여 넓은 밴드갭(wide bandgap)과 높은 T1값을 갖는 본 발명에 따른 화합물을 이용함으로써 소자의 높은 발광효율 및 고내열성을 달성할 수 있고, 소자의 색순도 및 수명을 향상시킬 수 있다.

도면의 간단한 설명

- [18] 도 1은 본 발명에 따른 유기전기발광소자의 예시도이다.
 [19] [부호의 설명]
 [20] 100: 유기전기소자 110: 기판
 [21] 120: 제 1전극 130: 정공주입층
 [22] 140: 정공수송층 141: 버퍼층
 [23] 150: 발광층 151: 발광보조층
 [24] 160: 전자수송층 170: 전자주입층
 [25] 180: 제 2전극

발명의 실시를 위한 형태

- [26] 이하, 본 발명의 실시예를 첨부된 도면을 참조하여 상세하게 설명한다.
- [27] 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.
- [28] 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. 또한, 층, 막, 영역, 판 등의 구성 요소가 다른 구성 요소 "위에" 또는 "상에" 있다고 하는 경우, 이는 다른 구성 요소 "바로 위에" 있는 경우뿐만 아니라 그 중간에 또 다른 구성 요소가 있는 경우도 포함할 수 있다고 이해되어야 할 것이다. 반대로, 어떤 구성 요소가 다른 부분 "바로 위에" 있다고 하는 경우에는 중간에 또 다른 부분이 없는 것을 뜻한다고 이해되어야 할 것이다.
- [29] 본 명세서 및 첨부된 청구의 범위에서 사용된 바와 같이, 달리 언급하지 않는 한, 하기 용어의 의미는 하기와 같다.
- [30] 본 명세서에서 사용된 용어 "할로" 또는 "할로젠"은 다른 설명이 없는 한 불소(F), 브롬(Br), 염소(Cl) 또는 요오드(I)이다.
- [31] 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.

[32] 본 발명에 사용된 용어 "할로알킬기" 또는 "할로젠알킬기"는 다른 설명이 없는 한 할로젠으로 치환된 알킬기를 의미한다.

[33] 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.

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

[35] 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.

[36] 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.

[37] 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.

[38] 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, 스파이로플루오렌기, 스파이로바이플루오렌기일 수 있다.

[39] 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.

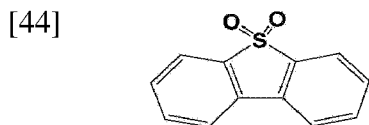
[40] 본 발명에 사용된 용어 "헤테로아릴기" 또는 "헤테로아릴렌기"는 다른 설명이 없는 한 각각 하나 이상의 헤테로원자를 포함하는 탄소수 2 내지 60의 아릴기 또는 아릴렌기를 의미하며, 여기에 제한되는 것은 아니며, 단일 고리 및 다중 고리 중 적어도 하나를 포함하며, 이웃한 작용기기가 결합하여 형성될 수도 있다.

[41] 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.

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

[43] 또한 "헤테로고리기"는, 고리를 형성하는 탄소 대신 SO₂를 포함하는 고리도 포함할 수 있다. 예컨대, "헤테로고리기"는 다음 화합물을 포함한다.



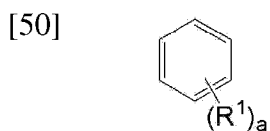
[45] 다른 설명이 없는 한, 본 발명에 사용된 용어 "지방족"은 탄소수 1 내지 60의 지방족 탄화수소를 의미하며, "지방족고리"는 탄소수 3 내지 60의 지방족 탄화수소 고리를 의미한다.

[46] 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.

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

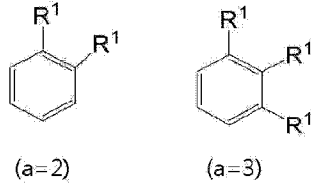
[48] 또한 명시적인 설명이 없는 한, 본 발명에서 사용된 용어 "치환 또는 비치환된"에서 "치환"은 중수소, 할로젠, 아미노기, 니트릴기, 니트로기, C₁-C₂₀의 알킬기, C₁-C₂₀의 알콕실기, C₁-C₂₀의 알킬아민기, C₁-C₂₀의 알킬티오펜기, C₆-C₂₀의 아릴티오펜기, C₂-C₂₀의 알켄일기, C₂-C₂₀의 알킨일기, C₃-C₂₀의 시클로알킬기, C₆-C₂₀의 아릴기, 중수소로 치환된 C₆-C₂₀의 아릴기, C₈-C₂₀의 아릴알켄일기, 실란기, 붕소기, 게르마늄기, 및 C₂-C₂₀의 헤테로고리기로 이루어진 군으로부터 선택되는 1개 이상의 치환기로 치환됨을 의미하며, 이들 치환기에 제한되는 것은 아니다.

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



[51] 여기서, a가 0의 정수인 경우 치환기 R¹은 부존재하며, a가 1의 정수인 경우 하나의 치환기 R¹은 벤젠 고리를 형성하는 탄소 중 어느 하나의 탄소에 결합하며, a가 2 또는 3의 정수인 경우 각각 다음과 같이 결합하며 이때 R¹은 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.

[52]



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

[54] 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.

[55] 유기물층은 제 1전극(120) 상에 순차적으로 정공주입층(130), 정공수송층(140), 발광층(150), 전자수송층(160) 및 전자주입층(170)을 포함할 수 있다. 이때, 이들 층 중 적어도 하나가 생략되거나, 정공저지층, 전자저지층, 발광보조층(151), 버퍼층(141) 등이 더 포함될 수도 있으며, 전자수송층(160) 등이 정공저지층의 역할을 할 수도 있을 것이다.

[56] 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.

[57] 상기 유기물층에 적용되는 본 발명에 따른 화합물은 정공주입층(130), 정공수송층(140), 전자수송층(160), 전자주입층(170), 발광층(150), 광효율 개선층, 발광보조층 등의 재료로 사용될 수 있을 것이다. 일례로, 본 발명의 화합물은 정공수송층(140) 및/또는 발광보조층(151) 재료로 사용될 수 있다.

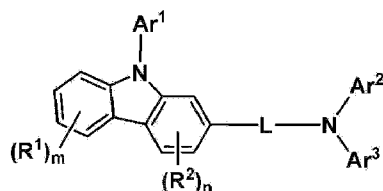
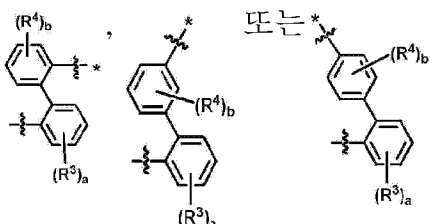
[58] 한편, 동일한 코어일지라도 어느 위치에 어느 치환기를 결합시키냐에 따라 밴드갭(band gap), 전기적 특성, 계면 특성 등이 달라질 수 있으므로, 코어의 선택 및 이에 결합된 서브 치환체의 조합도 아주 중요하며, 특히 각 유기물층 간의 에너지 준위 및 T1 값, 물질의 고유특성(이동도, 계면특성 등) 등이 최적의 조합을 이루었을 때 긴 수명과 높은 효율을 동시에 달성할 수 있다.

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

[60] 따라서, 본 발명에서는 화학식 1로 표시되는 화합물을 사용하여 정공수송층 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.

- [61] 본 발명의 일 실시예에 따른 유기전기발광소자는 증착 방법을 이용하여 제조될 수 있는데, 예컨대 PVD, CVD 등과 같은 증착법을 이용하여 각 층을 형성할 수 있다. 본 발명에 따른 유기전기발광소자는, 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.
- [62] 또한, 유기물층은 다양한 고분자 소재를 사용하여 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 제조될 수 있다. 본 발명에 따른 유기물층은 다양한 방법으로 형성될 수 있으므로, 그 형성방법에 의해 본 발명의 권리범위가 제한되는 것은 아니다.
- [63] 본 발명에 따른 유기전기소자는 사용되는 재료에 따라 전면 발광형, 후면 발광형 또는 양면 발광형일 수 있다.
- [64] 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(stack) 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.
- [65] 또한, 본 발명에 따른 유기전기소자는 유기전기발광소자(OLED), 유기태양전지, 유기감광체(OPC), 유기트랜지스터(유기 TFT), 단색 또는 백색 조명용 소자 중 하나일 수 있다.
- [66] 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.
- [67] 이하, 본 발명의 일 측면에 따른 화합물에 대하여 설명한다.
- [68] 본 발명의 일 측면에 따른 화합물은 하기 화학식 1로 표시된다.
- [69] [화학식 1]

[70]

[71] 상기 화학식 1에서, L은  이다. 여기서, 표시 *는

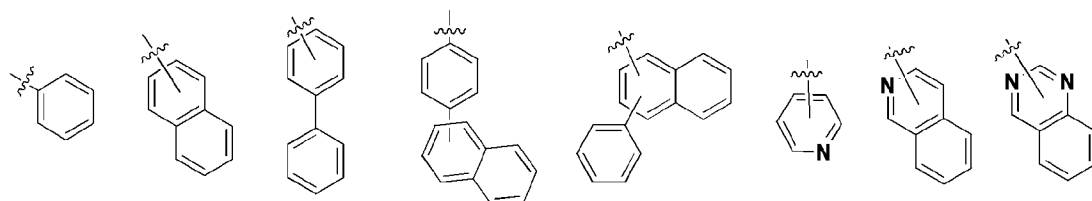
화학식 1 중 아민기의 질소(N)와 결합되는 위치를 나타내며, a 및 b는 각각 0 내지 4의 정수이다. 또한, R³과 R⁴는 서로 독립적으로, i) 중수소; 할로젠; C₆-C₆₀의 아릴기; 플루오렌일기; O, N, S, Si 및 P로 이루어진 군에서 선택된 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C₂-C₆₀의 헤테로고리; C₃-C₆₀의 지방족고리와 C₆-C₆₀의 방향족고리의 융합고리; C₁-C₅₀의 알킬기; C₂-C₂₀의 알켄일기; C₂-C₂₀의 알킨일기; C₁-C₃₀의 알콕실기; C₆-C₃₀의 아릴옥시기; 및 -L'-N(Rᵃ)(Rᵇ);로 이루어진 군에서 선택되거나, 또는 ii) 이웃한 기끼리, 즉 이웃한 R³끼리, 이웃한 R⁴끼리 및/또는 이웃한 R³과 R⁴끼리 서로 결합하여 적어도 하나의 고리를 형성할 수 있으며, 이때 고리를 형성하지 않는 R³과 R⁴는 i)에서 정의된 것과 같다. 이웃한 기끼리 서로 결합하여 형성된 고리는 단환 또는 다환일 수 있으며, C₆-C₆₀의 방향족고리, C₂-C₆₀의 헤테로고리, C₃-C₆₀의 지방족 고리, 또는 이들의 조합으로 이루어진 융합 고리 등일 수 있으며, 포화 또는 불포화 고리일 수 있다.

[72] a가 2이상의 정수인 경우 R³는 서로 같거나 상이할 수 있고, b가 2이상의 정수인 경우 R⁴ 또한 서로 같거나 상이할 수 있다.

[73] 바람직하게는, R³과 R⁴는 수소, C₆-C₁₆의 아릴기, C₅-C₉의 헤테로고리일 수 있으며, 또한 바람직하게는 C₆, C₁₀, C₁₂ 또는 C₁₆의 아릴기, C₅, C₈ 또는 C₉의 헤테로고리일 수 있다.

[74] 또한, 바람직하게는, R³과 R⁴는 서로 독립적으로 하기 구조에서 선택될 수 있다.

[75]

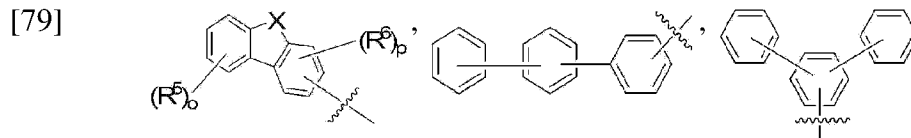


[76] 한편, 상기 R³, R⁴ 및/또는 이웃한 기끼리 서로 결합하여 형성된 고리는 중수소, 할로젠, 실란기, 실록산기, 붕소기, 게르마늄기; 시아노기; 니트로기; C₁-C₂₀의 알킬사이오기; C₁-C₂₀의 알콕실기; C₁-C₂₀의 알킬기; C₂-C₂₀의 알켄일기; C₂-C₂₀의 알킨일기; C₆-C₂₀의 아릴기; 중수소로 치환된 C₆-C₂₀의 아릴기; 플루오렌일기; C₂-C₂₀의 헤테로고리; C₃-C₂₀의 시클로알킬기; C₇-C₂₀의 아릴알킬기; 및 C₈-C₂₀의

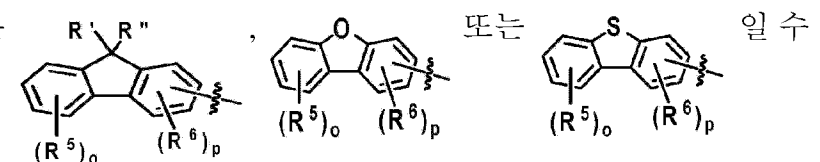
아릴알켄일기;로 이루어진 군에서 선택된 하나 이상의 치환기로 더 치환될 수 있다.

- [77] 상기 화학식 1에서, Ar^1 내지 Ar^3 은 서로 독립적으로, C_6-C_{60} 의 아릴기; 플루오렌일기; O, N, S, Si 및 P로 이루어진 군에서 선택된 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C_2-C_{60} 의 헤테로고리기; C_3-C_{60} 의 지방족고리와 C_6-C_{60} 의 방향족고리의 융합고리기; C_1-C_{50} 의 알킬기; C_2-C_{20} 의 알켄일기; C_2-C_{20} 의 알킨일기; C_1-C_{30} 의 알콕실기; 및 C_6-C_{30} 의 아릴옥시기;로 이루어진 군에서 선택되거나 이들의 조합일 수 있다.

- [78] 바람직하게는, Ar^1 은 하기 구조 중 하나일 수 있다.



- [80] 상기 구조에서, X는 O, S 또는 $C(R')(R'')$ 이고, 여기서 R' 및 R'' 은 서로 독립적으로, 수소; 중수소; 삼중수소; C_6-C_{20} 의 아릴기; C_1-C_{20} 의 알킬기; 및 C_2-C_{20} 의 알켄일기;로 이루어진 군에서 선택되며, R' 및 R'' 은 서로 결합하여 이들이 결합된 탄소와 함께 스파이로 화합물을 형성할 수 있다.

- [81] 바람직하게는, Ar^1 은  일 수

있으며, 여기서 R' 및 R'' , o, p 등과 같은 기호는 상기에서 정의된 것과 동일하다.

- [82] 상기 구조에서, R^5 및 R^6 은 서로 독립적으로, i) 중수소; 삼중수소; 할로겐; C_6-C_{60} 의 아릴기; 플루오렌일기; O, N, S, Si 및 P로 이루어진 군에서 선택된 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C_2-C_{60} 의 헤테로고리기; C_3-C_{60} 의 지방족고리와 C_6-C_{60} 의 방향족고리의 융합고리기; C_1-C_{50} 의 알킬기; C_2-C_{20} 의 알켄일기; C_2-C_{20} 의 알킨일기; C_1-C_{30} 의 알콕실기; 및 C_6-C_{30} 의 아릴옥시기;로 이루어진 군에서 선택되거나, 또는 ii) 이웃한 기끼리 서로 결합하여 적어도 하나의 고리를 형성할 수 있으며, 단 고리를 형성하지 않는 R^5 및 R^6 은 상기 i)에서 정의된 것과 동일하다.

- [83] 예컨대, o와 p가 모두 2인 경우, 이웃한 R^5 기끼리 서로 결합하여 고리를 형성할 수 있고, R^6 은 이웃하더라도 서로 독립적으로 아릴기 또는 헤테로고리기가 될 수 있다. 물론, o가 2 이상의 정수인 경우, 복수의 R^5 는 서로 같거나 상이할 수 있으며, 이웃한 기 중 일부끼리 서로 결합하여 고리를 형성하고, 고리를 형성하지 않는 나머지 기는 상기 정의된 치환기 그룹에서 선택될 수 있다. p가 2 이상의 정수인 경우도 마찬가지이다.

- [84] 바람직하게는, Ar^1 은 C_6-C_{25} 의 아릴기이고, 또한 바람직하게는 C_6-C_{18} 의 아릴기이며, 또한 바람직하게는 C_6 , C_{10} , C_{12} , C_{18} 등의 아릴기일 수 있고 이들은 적어도 하나의 중수소로 치환될 수도 있다. 예컨대, Ar^1 은 페닐기, 나프틸기,

바이페닐릴기, 터페닐기, 바이페닐릴기로 치환된 페닐기 등일 수 있고 이들은 적어도 하나의 중수소로 더 치환될 수 있다.

[85] 또한, 바람직하게는 Ar^1 은 플루오렌일기, 9,9-다이페닐-9H-플루오렌일기 또는 7,7-디페닐-7H-벤조[c]플루오렌일기일 수 있다.

[86] 또한, Ar^1 은 바람직하게는 C_3 - C_{12} 의 헤테로고리기, 더욱 바람직하게는 C_{12} 의 헤테로고리기일 수 있으며, 또한 바람직하게는 디벤조싸이엔일기(dibenzothieryl) 또는 디벤조퓨릴기일 수 있다.

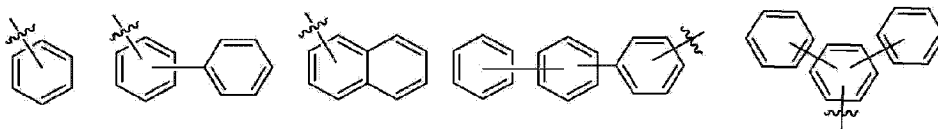
[87] 바람직하게는, Ar^2 및 Ar^3 는 서로 독립적으로 C_6 - C_{25} 의 아릴기이고, 또한 바람직하게는 C_6 - C_{18} 의 아릴기, 더욱 바람직하게는 C_6 , C_{10} , C_{12} , C_{18} 등의 아릴기일 수 있다. 구체적으로, Ar^2 및 Ar^3 는 서로 독립적으로 페닐기, 나프틸기, 바이페닐릴기 또는 터페닐릴기(*p*-터페닐, *m*-터페닐 등을 포함)일 수 있고, 페닐기는 중수소, 메틸기, 메톡실기, *t*-부틸기 등으로 더욱 치환될 수 있다.

[88] 또한, 바람직하게는 Ar^2 및 Ar^3 는 서로 독립적으로, 9,9-다이메틸-9H-플루오렌일기, 9,9-다이페닐-9H-플루오렌일기 또는 9,9'-스파이로바이플루오렌일기 등일 수 있다.

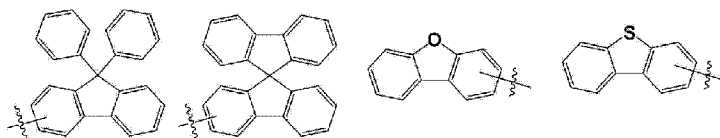
[89] 또한, 바람직하게는 Ar^2 및 Ar^3 는 C_3 - C_{12} 의 헤테로고리기일 수 있고, 구체적으로 페닐로 치환 또는 비치환된 피리미딜기, 디벤조싸이엔일기(dibenzothieryl), 디벤조퓨릴기 등일 수 있다.

[90] 또한, 바람직하게는, Ar^2 및 Ar^3 는 서로 독립적으로 하기 구조에 선택될 수 있다.

[91]



[92]



[93] 바람직하게는, Ar^1 내지 Ar^3 는 서로 독립적으로 중수소, 할로젠, 실란기, 실록산기, 붕소기, 게르마늄기; 시아노기; 니트로기; 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 더욱 치환될 수 있다.

[94] 상기 화학식 1에서, R^1 및 R^2 는 서로 독립적으로, i) 중수소; 할로젠; C_6 - C_{60} 의 아릴기; 플루오렌일기; O, N, S, Si 및 P로 이루어진 군에서 선택된 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C_2 - C_{60} 의 헤테로고리기; C_3 - C_{60} 의 지방족고리와 C_6 - C_{60} 의 방향족고리의 융합고리; C_1 - C_{50} 의 알킬기; C_2 - C_{20} 의 알켄일기; C_2 - C_{20} 의 알킨일기; C_1 - C_{30} 의 알콕실기; C_6 - C_{30} 의 아릴옥시기; 및 $-L'-N(R^a)(R^b)$;로 이루어진 군에서 선택되거나, 또는 ii) 이웃한 기끼리, 즉 이웃한 R^1 끼리, 이웃한 R^2 끼리

- 및/또는 이웃한 R^1 과 R^2 끼리 서로 결합하여 적어도 하나의 고리를 형성할 수 있으며, 이때 고리를 형성하지 않는 R^1 및 R^2 는 i)에서 정의된 것과 같다. 이웃한 기끼리 결합하여 형성된 고리는 C_6 - C_{60} 의 방향족고리, C_2 - C_{60} 의 헤테로고리, C_3 - C_{60} 의 지환족 고리, 또는 이들의 조합으로 이루어진 융합 고리 동일 수 있으며, 단일 고리 또는 다중 고리일 수도 있고 포화 또는 불포화 고리일 수도 있다.
- [95] 또한, 화학식 1에서, m 은 0 내지 4의 정수이고, n 은 0 내지 3의 정수이며, m 이 2이상의 정수인 경우 복수의 R^1 은 서로 같거나 상이할 수 있고, n 이 2이상의 정수인 경우 복수의 R^2 도 서로 같거나 상이할 수 있다.
- [96] 바람직하게는, R^1 은 수소, C_6 - C_{18} 의 아릴기, C_3 - C_{10} 의 헤테로고리기, C_2 - C_5 의 알켄일기 동일 수 있고, 또한 바람직하게는 C_6 의 아릴기, C_3 , C_8 , C_9 , C_{10} 의 헤테로고리기 또는 C_3 의 알켄일기 일 수 있고, 구체적으로 페닐기, 디벤조싸이엔일기, 트리아진일기, 퀴놀릴기, 페닐로 치환 또는 비치환된 퀴나졸릴기, 프로펜일기 동일 수 있다.
- [97] 또한, 바람직하게는 이웃한 R^1 끼리 서로 결합하여 1개 또는 2개의 벤젠링을 형성하여 이들이 결합된 벤젠링과 함께 나프탈렌, 페난트렌 등을 형성할 수 있다.
- [98] 또한, 바람직하게는 이웃한 R^2 끼리 서로 결합하여 1개 또는 2개의 벤젠링을 형성하여 이들이 결합된 벤젠링과 함께 나프탈렌, 페난트렌 등을 형성할 수 있다.
- [99] 한편, R^1 및 R^2 는 서로 독립적으로 중수소, 할로젠, 실란기, 실록산기, 붕소기, 게르마늄기; 시아노기; 니트로기; 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.
- [100] 상기 R^1 내지 R^4 의 $-L^1-N(R^a)(R^b)$ 에서, L^1 은 단일결합; C_6 - C_{60} 의 아릴렌기; 플루오렌일렌기; C_3 - C_{60} 의 지방족고리와 C_6 - C_{60} 의 방향족고리의 융합고리기; 및 O, N, S, Si 및 P로 이루어진 군에서 선택된 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C_2 - C_{60} 의 헤테로고리기;로 이루어진 군에서 선택될 수 있고, R^a 및 R^b 는 서로 독립적으로 C_6 - C_{60} 의 아릴기; 플루오렌일기; C_3 - C_{60} 의 지방족고리와 C_6 - C_{60} 의 방향족고리의 융합고리기; 및 O, N, S, Si 및 P로 이루어진 군에서 선택된 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C_2 - C_{60} 의 헤테로고리기;로 이루어진 군에서 선택될 수 있다.
- [101] 상기 화학식 1에서, 이웃한 R^1 및/또는 이웃한 R^2 끼리 서로 결합하여 고리를 형성할 경우 하기 화학식 2 내지 화학식 10 중에서 하나로 나타낼 수 있다. 하기 화학식 2 내지 화학식 5는 이웃하는 R^1 끼리 서로 결합하여 벤젠링을 형성한 경우의 예이고, 하기 화학식 6 내지 화학식 9는 이웃하는 R^1 끼리 및 이웃한 R^2 끼리 서로 결합하여 벤젠링을 형성한 경우의 예이며, 화학식 10은 이웃한 R^2 끼리

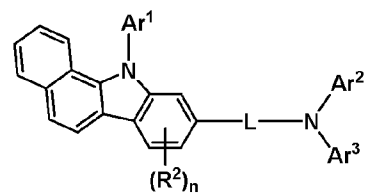
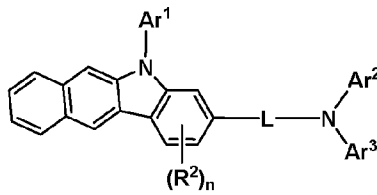
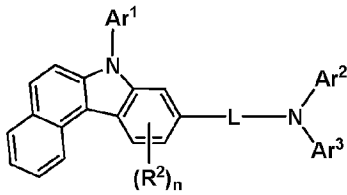
서로 결합하여 벤젠링을 형성한 경우의 예이다.

[102]

<화학식 2>

<화학식 3>

<화학식 4>

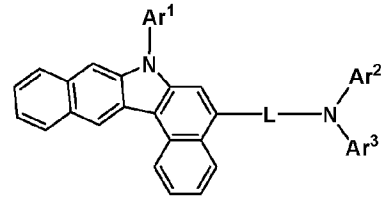
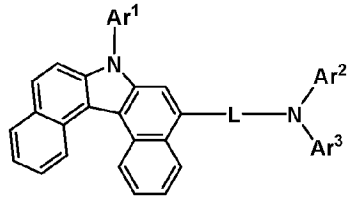
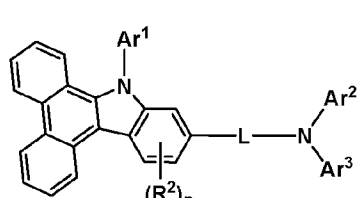


[103]

<화학식 5>

<화학식 6>

<화학식 7>

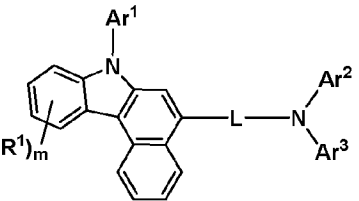
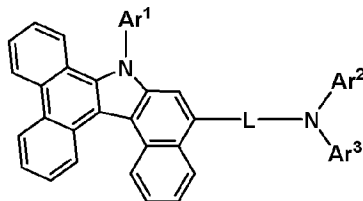
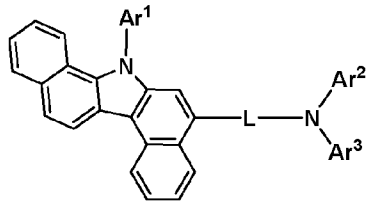


[104]

<화학식 8>

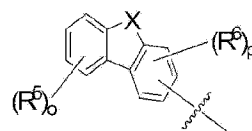
<화학식 9>

<화학식 10>



[105] 상기 화학식 2 내지 화학식 10에서, Ar¹ 내지 Ar³, L, R¹, R², m 및 n은 상기 화학식 1에서 정의된 것과 동일하게 정의될 수 있다.

[106] 바람직하게는, 상기 화학식 1에서, Ar¹이



인 경우, 화학식 1은

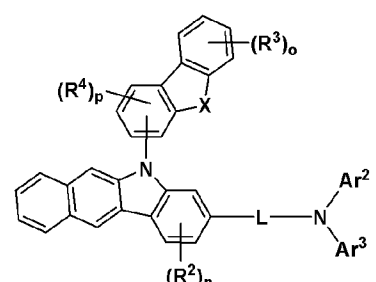
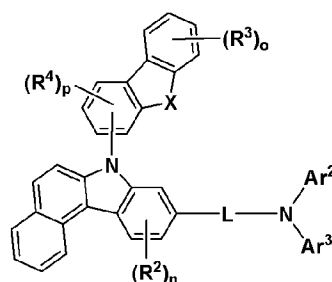
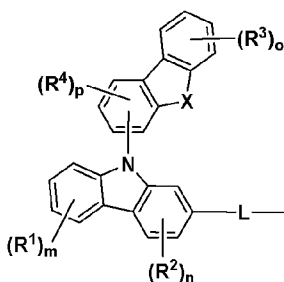
하기 화학식 11 내지 화학식 20 중에서 하나로 표시될 수 있다. 하기 화학식 12 내지 화학식 15는 이웃하는 R¹끼리 서로 결합하여 벤젠링을 형성한 경우의 예이고, 하기 화학식 16 내지 화학식 19는 이웃하는 R¹끼리 및 이웃한 R²끼리 서로 결합하여 벤젠링을 형성한 경우의 예이며, 화학식 20은 이웃한 R²끼리 서로 결합하여 벤젠링을 형성한 경우의 예이다.

[107]

<화학식 11>

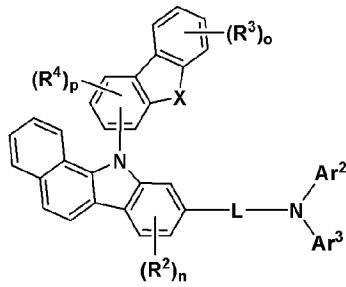
<화학식 12>

<화학식 13>

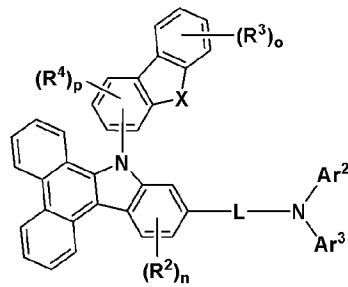


[108]

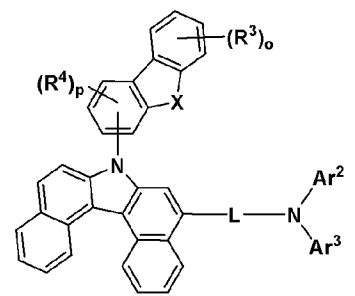
<화학식 14>



<화학식 15>

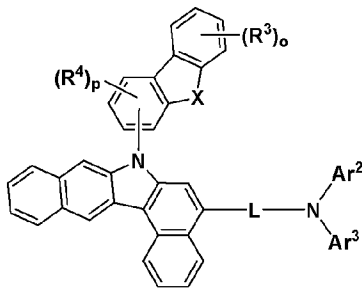


<화학식 16>

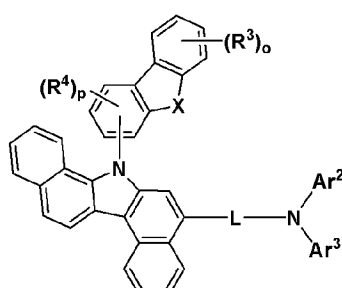


[109]

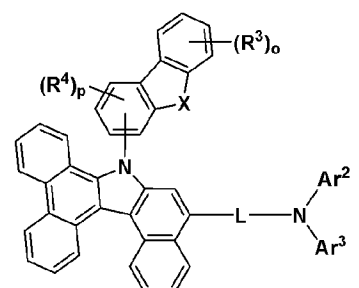
<화학식 17>



<화학식 18>

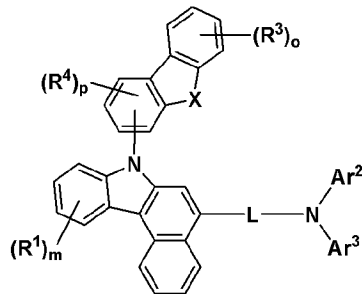


<화학식 19>



[110]

<화학식 20>



[111] 상기 화학식 11 내지 20에서, Ar², Ar³, L, R¹, R², m, n 등은 상기 화학식 1에서 정의된 것과 동일하게 정의될 수 있다.

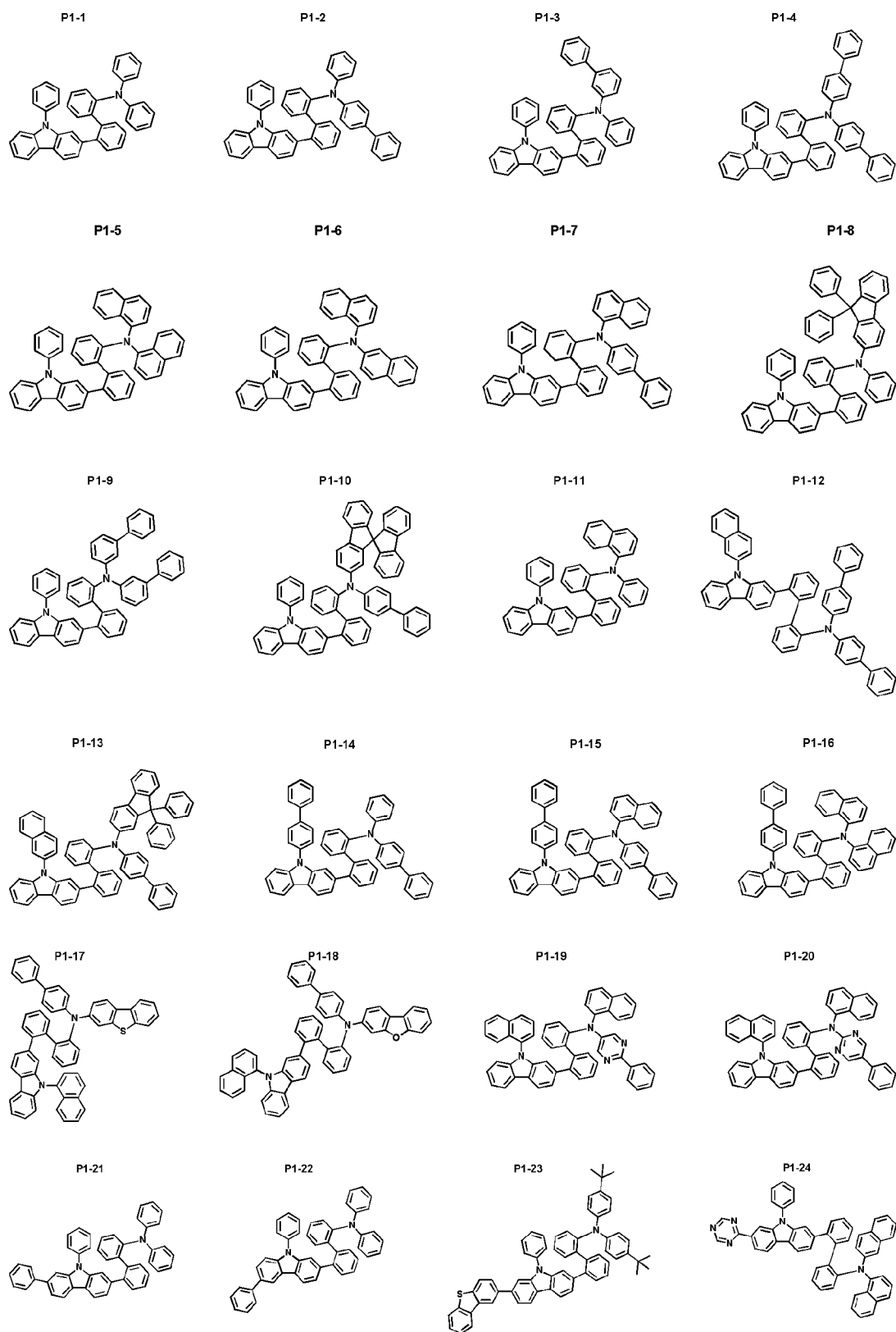
[112] 또한, 상기 화학식 11 내지 20에서, X는 O, S 또는 C(R')(R'')이고, 여기서 R' 및 R''은 서로 독립적으로, 수소; 중수소; 삼중수소; C₆-C₂₀의 아릴기; C₁-C₂₀의 알킬기; 및 C₂-C₂₀의 알켄일기;로 이루어진 군에서 선택되며, R' 및 R''은 서로 결합하여 이들이 결합된 탄소와 함께 스파이로 화합물을 형성할 수 있다.

[113] 또한, 상기 화학식 11 내지 20에서, o는 0 내지 4의 정수이고, p는 0 내지 3의 정수이며, R⁵ 및 R⁶은 서로 독립적으로, i) 중수소; 삼중수소; 할로젠; C₆-C₆₀의 아릴기; 플루오렌일기; O, N, S, Si 및 P로 이루어진 군에서 선택된 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C₂-C₆₀의 헤테로고리; C₃-C₆₀의 지방족고리와 C₆-C₆₀의 방향족고리의 융합고리; C₁-C₅₀의 알킬기; C₂-C₂₀의 알켄일기; C₂-C₂₀의 알킨일기; C₁-C₃₀의 알콕실기; 및 C₆-C₃₀의 아릴옥시기;로 이루어진 군에서 선택되거나, 또는 ii) 이웃한 기끼리 서로 결합하여 적어도 하나의 고리를 형성할 수 있으며, 단 고리를 형성하지 않는 R⁵ 및 R⁶은 상기 i)에서 정의된 것과

동일하다.

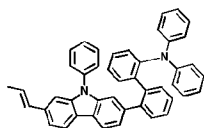
[114] 더욱 구체적으로, 상기 화학식 1 내지 화학식 20으로 표시되는 화합물은 하기 화합물 중 어느 하나일 수 있다.

[115]

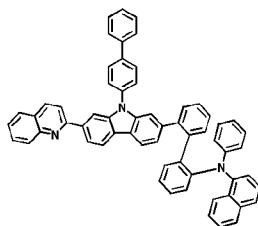


[116]

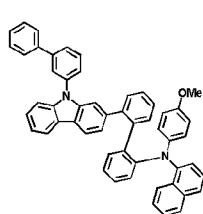
P1-25



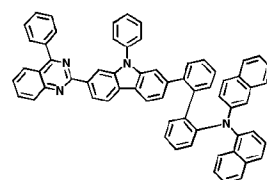
P1-26



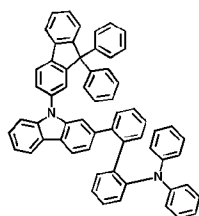
P1-27



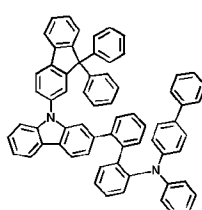
P1-28



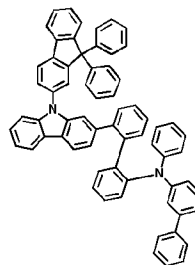
P1-29



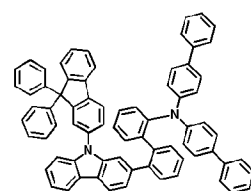
P1-30



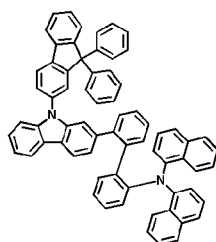
P1-31



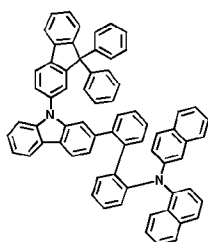
P1-32



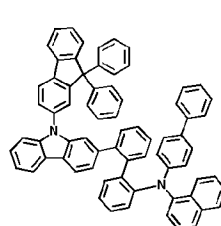
P1-33



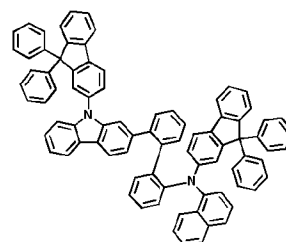
P1-34



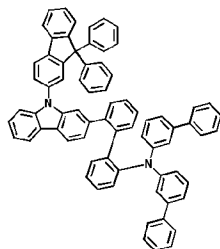
P1-35



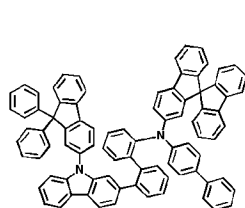
P1-36



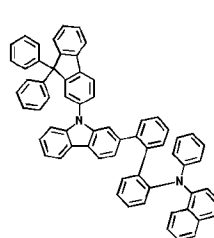
P1-37



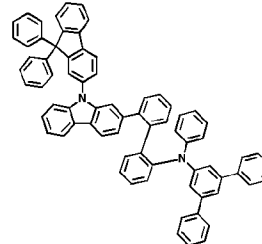
P1-38



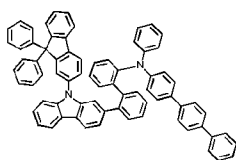
P1-39



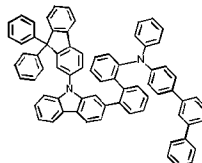
P1-40



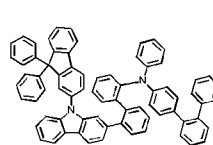
P1-41



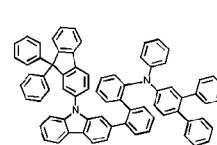
P1-42



P1-43

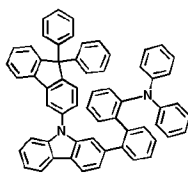


P1-44

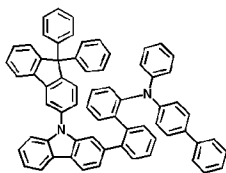


[117]

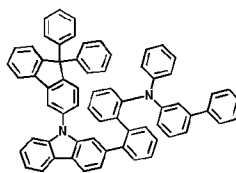
P1-45



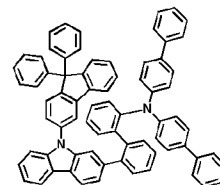
P1-46



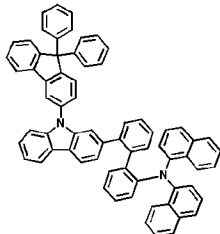
P1-47



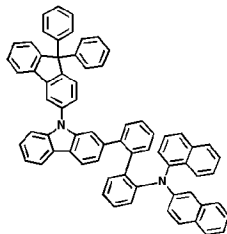
P1-48



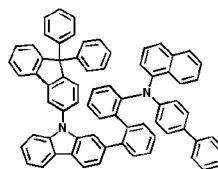
P1-49



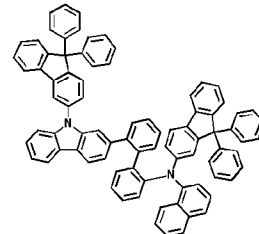
P1-50



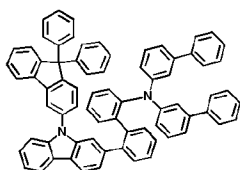
P1-51



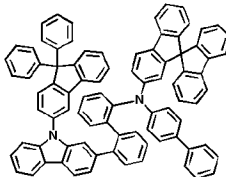
P1-52



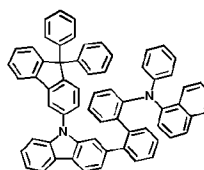
P1-53



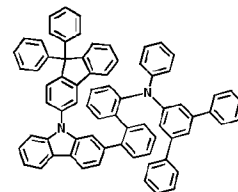
P1-54



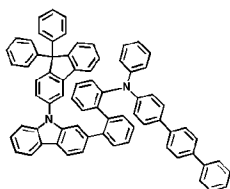
P1-55



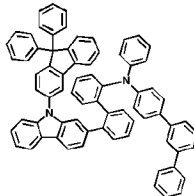
P1-56



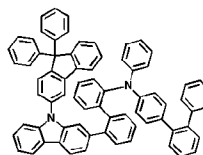
P1-57



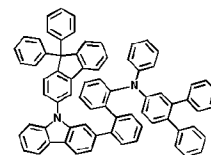
P1-58



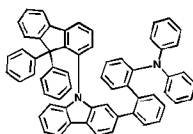
P1-59



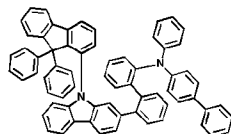
P1-60



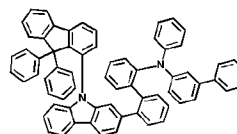
P1-61



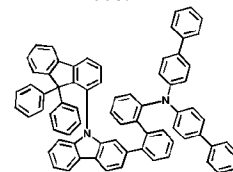
P1-62



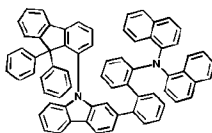
P1-63



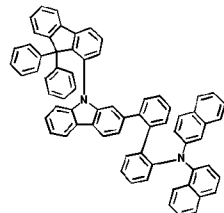
P1-64



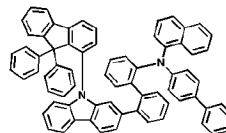
P1-65



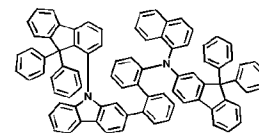
P1-66



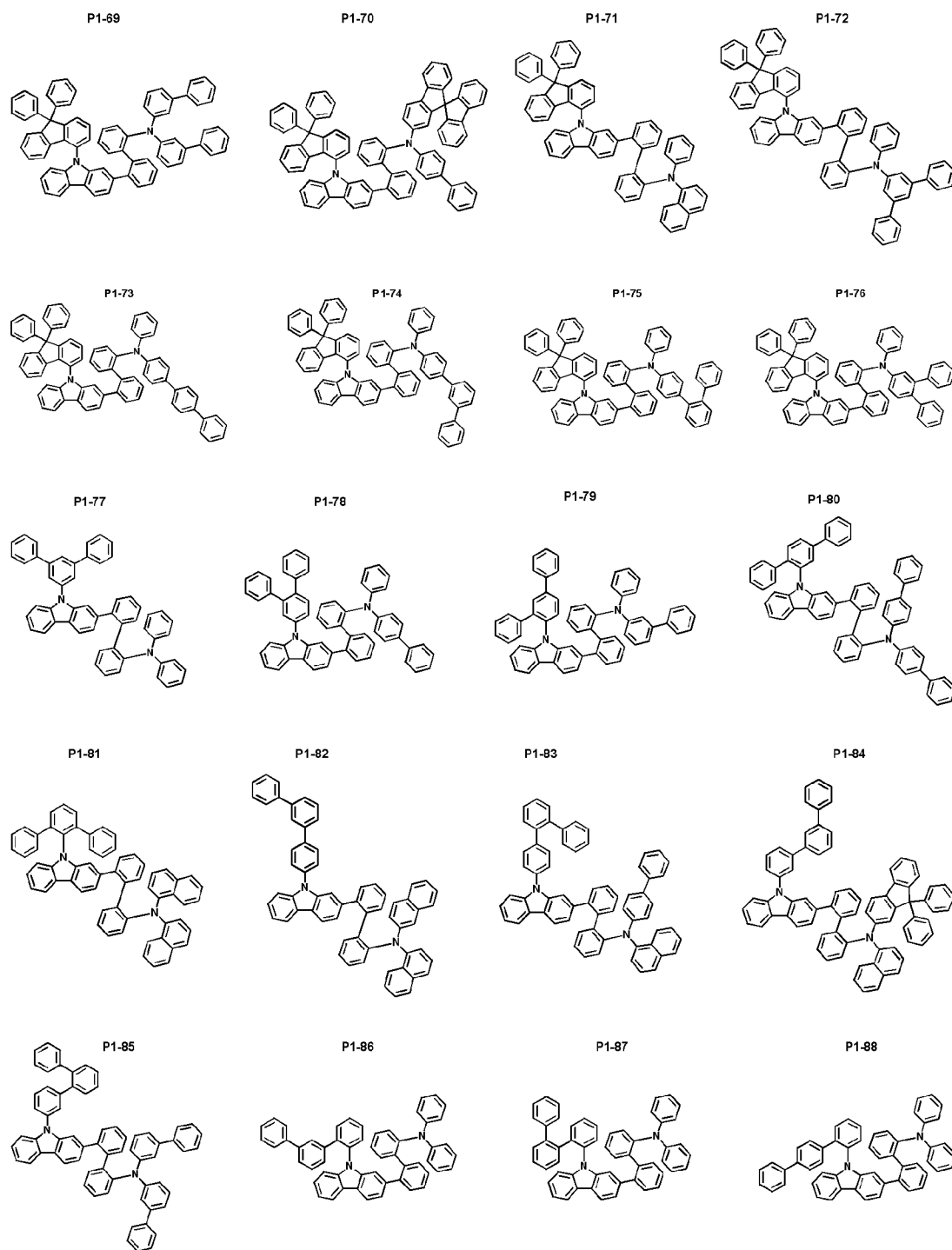
P1-67



P1-68

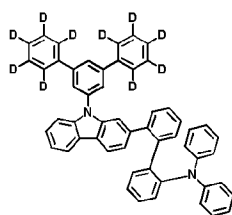


[118]

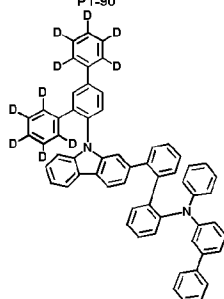


[119]

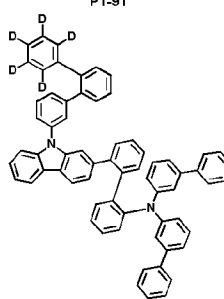
P1-89



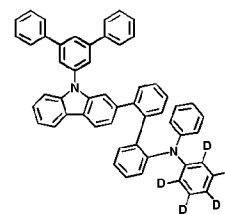
P1-90



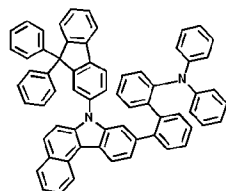
P1-91



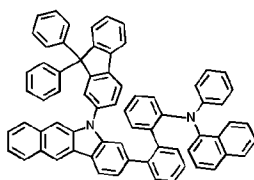
P1-92



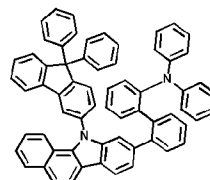
P1-93



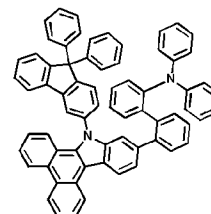
P1-94



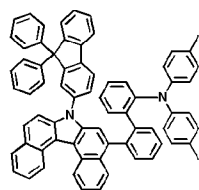
P1-95



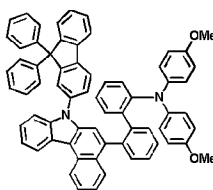
P1-96



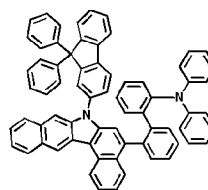
P1-97



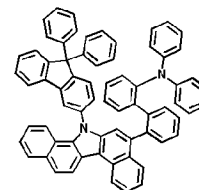
P1-98



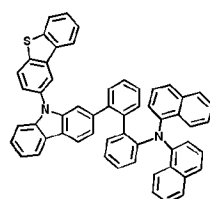
P1-99



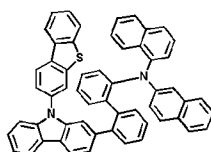
P1-100



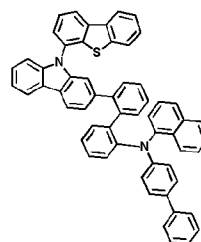
P1-101



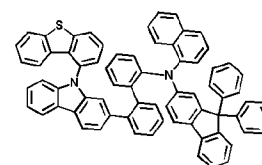
P1-102



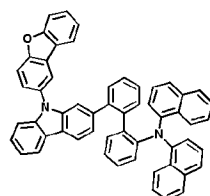
P1-103



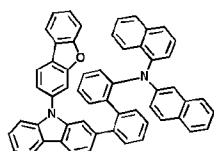
P1-104



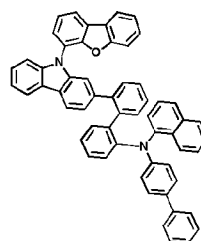
P1-105



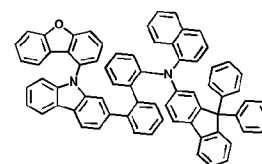
P1-106



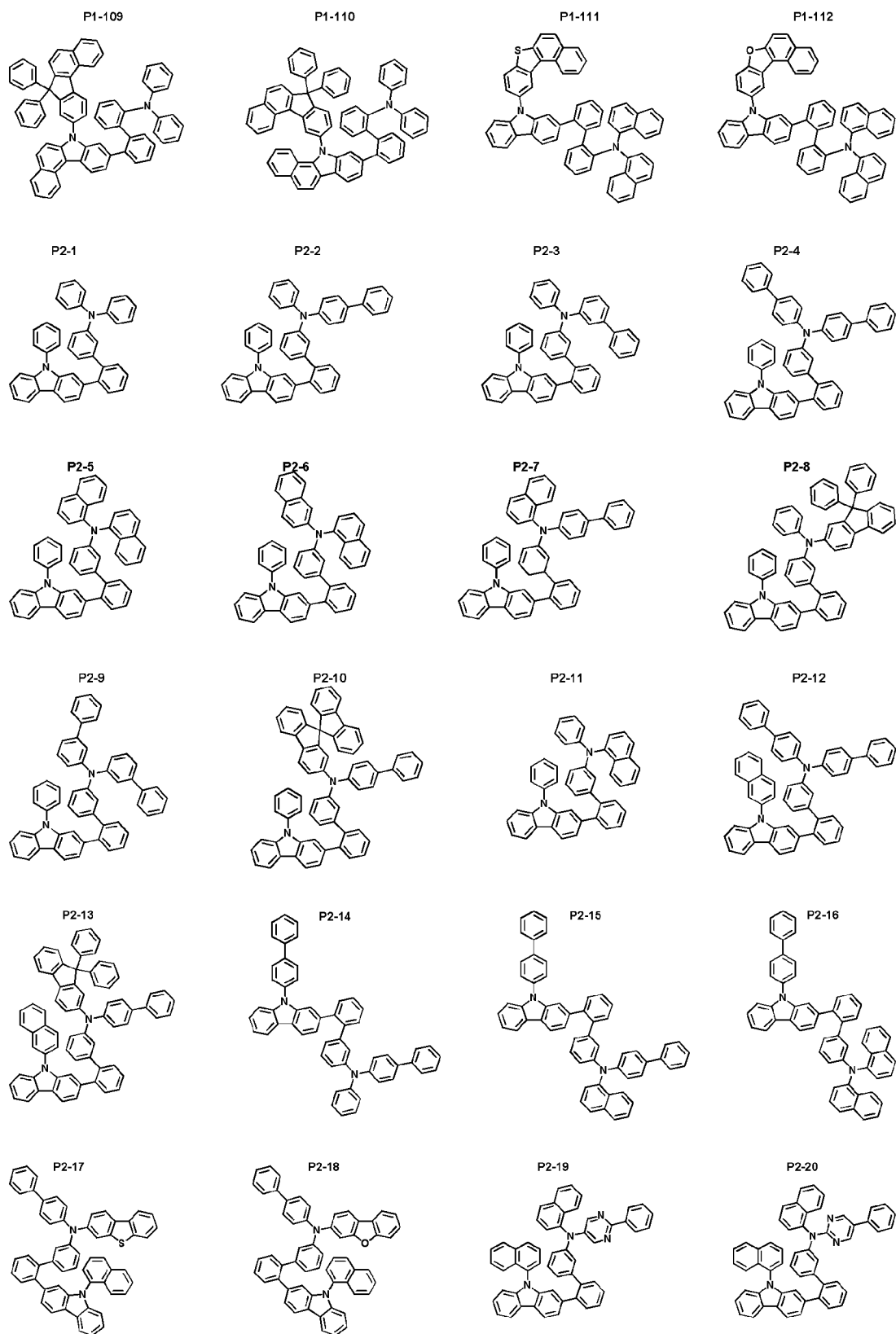
P1-107



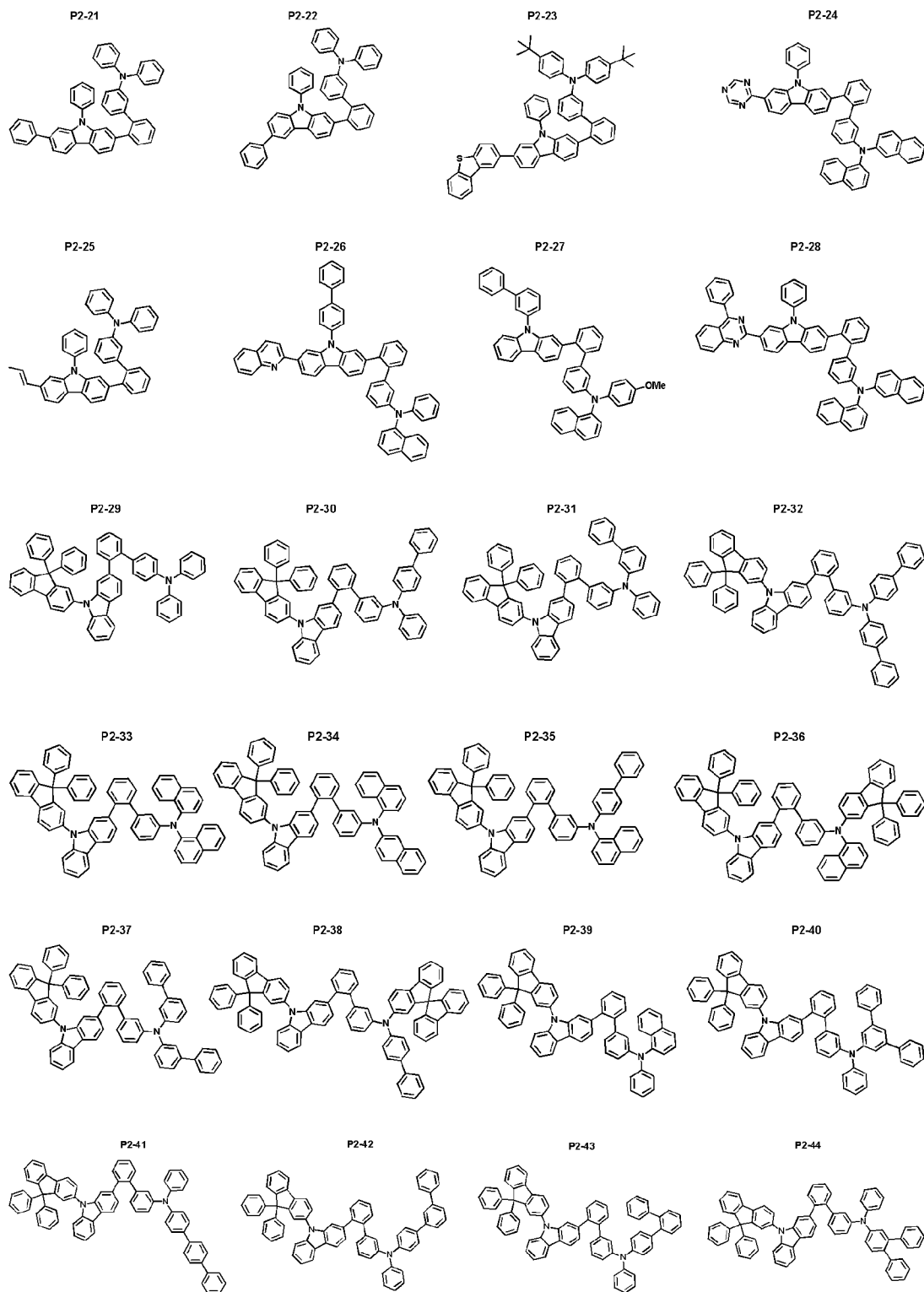
P1-108



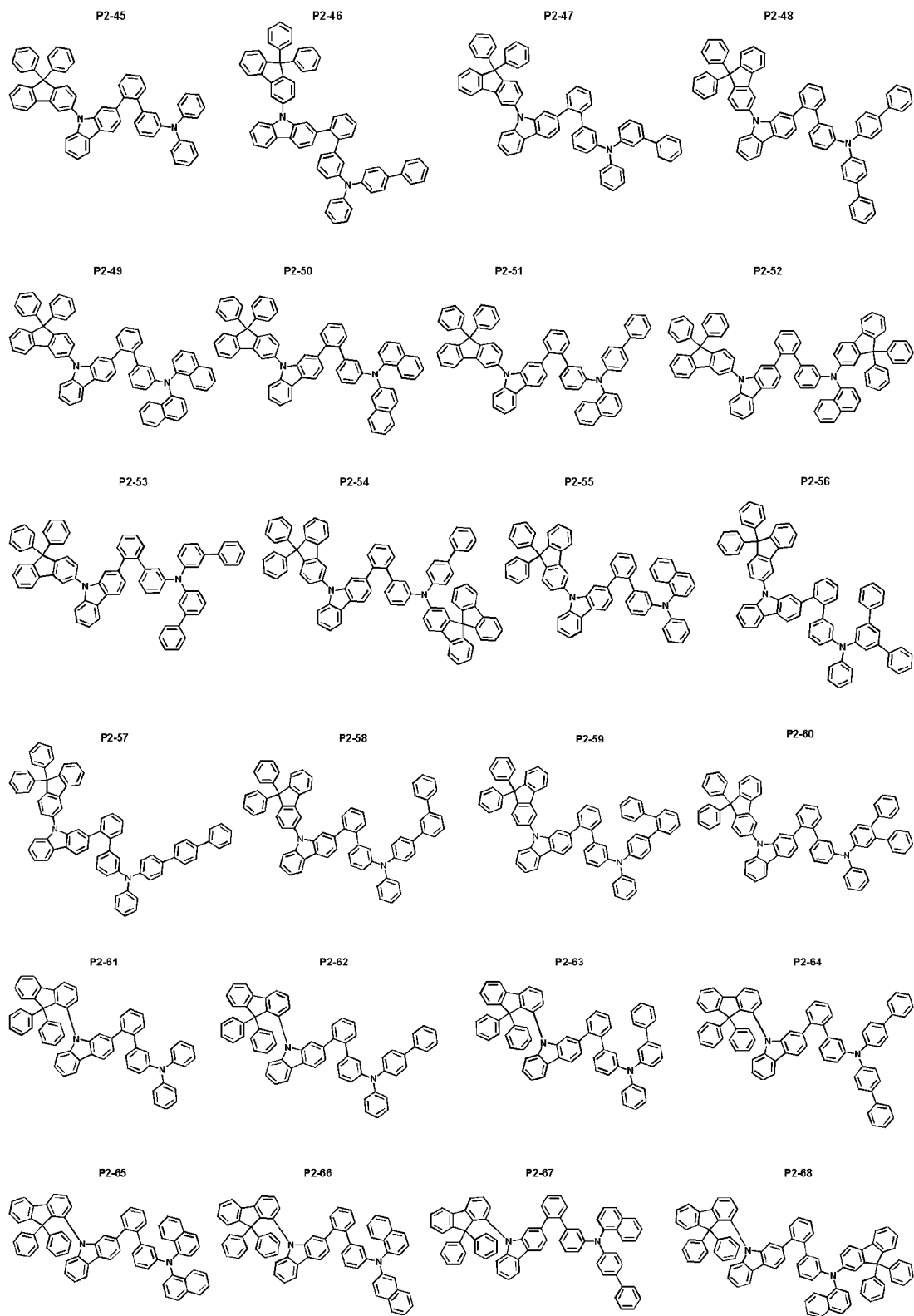
[120]



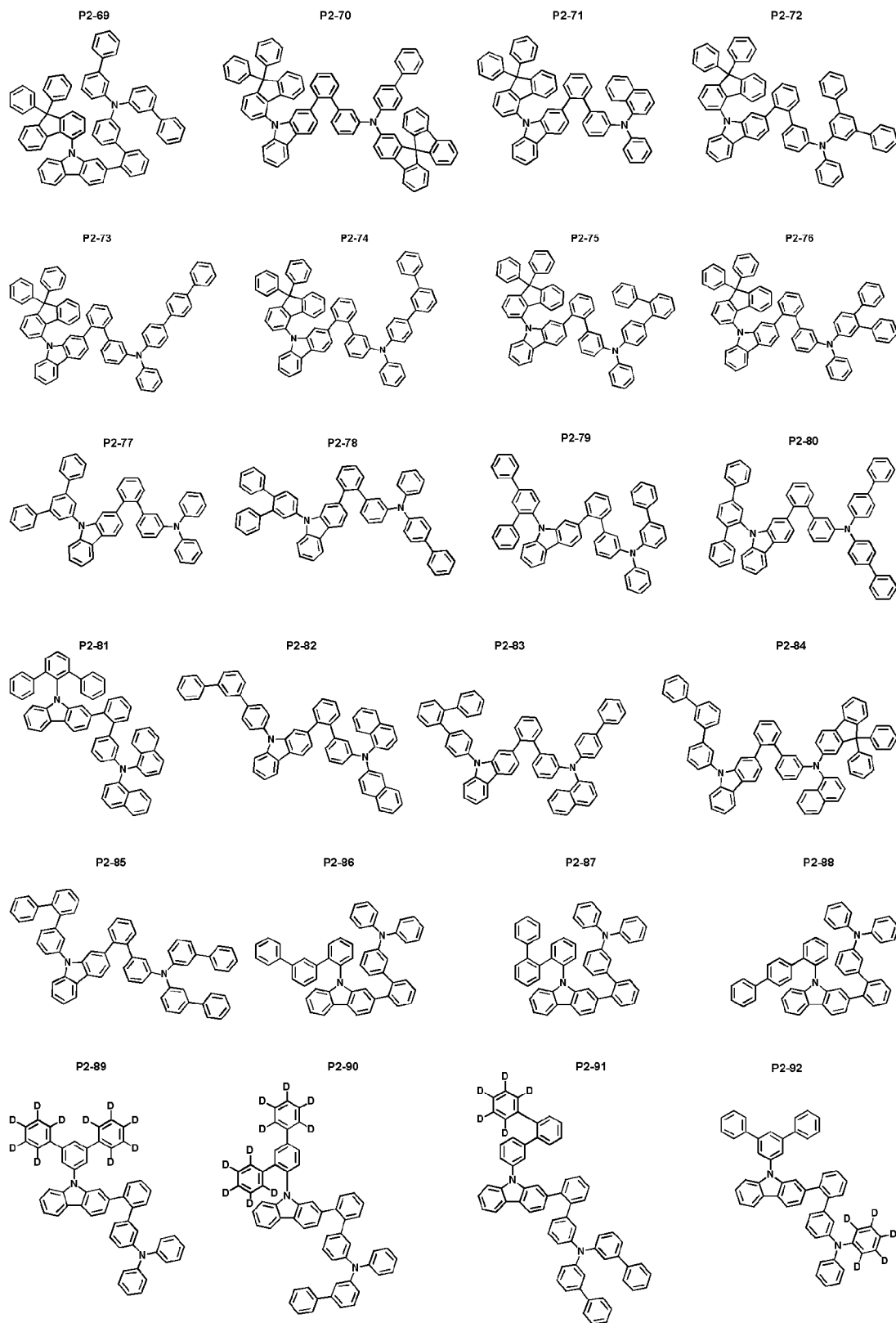
[121]



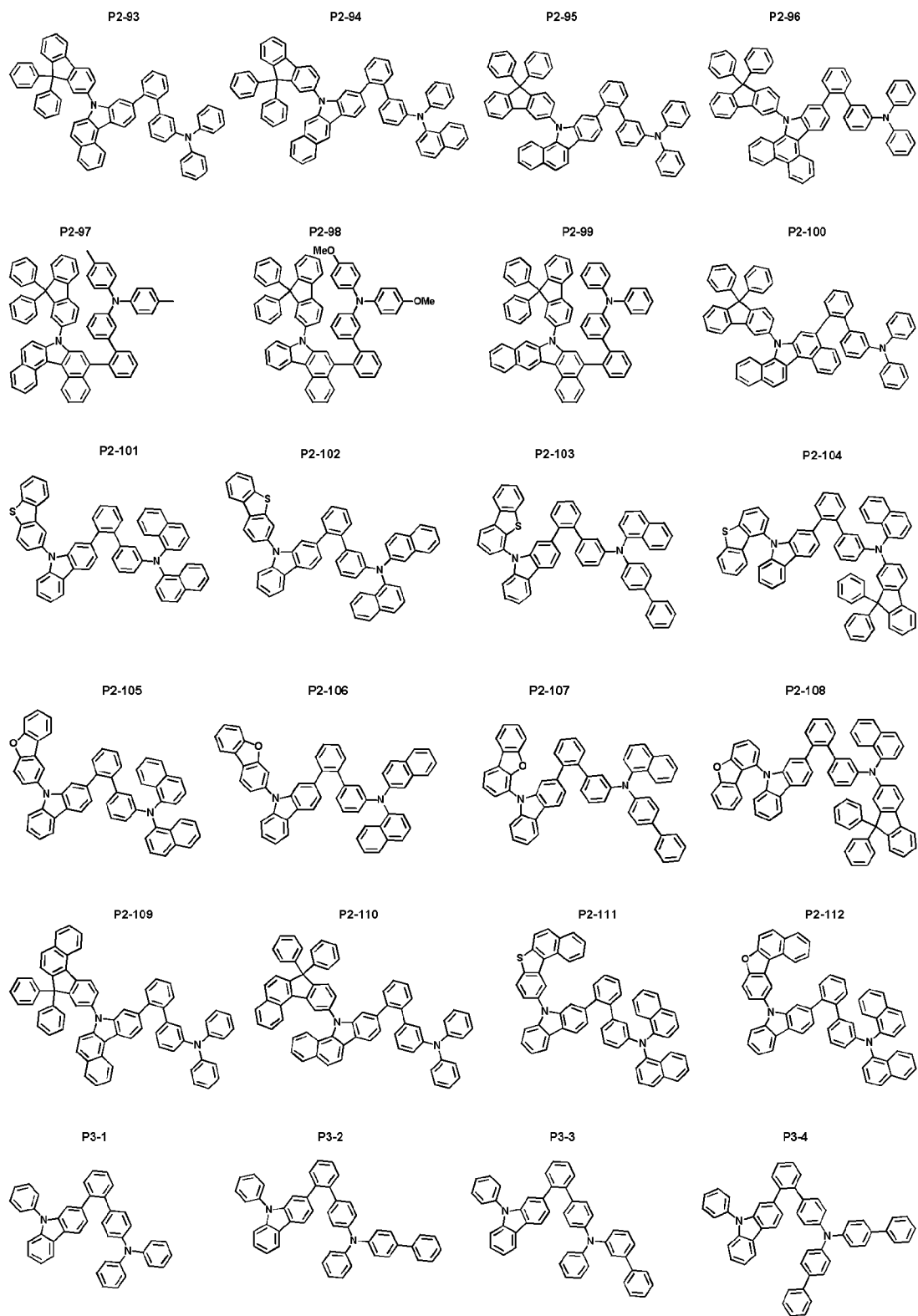
[122]



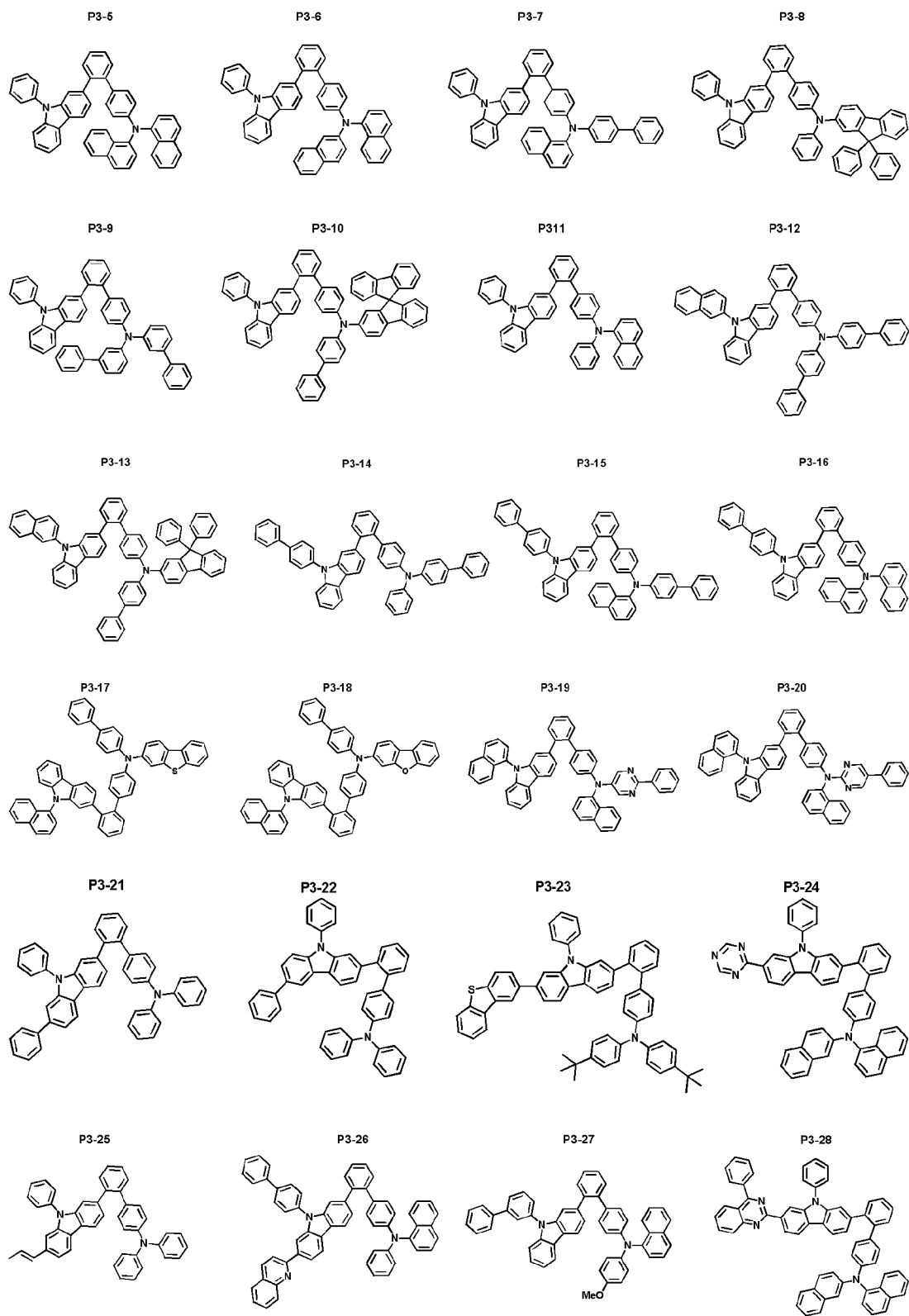
[123]



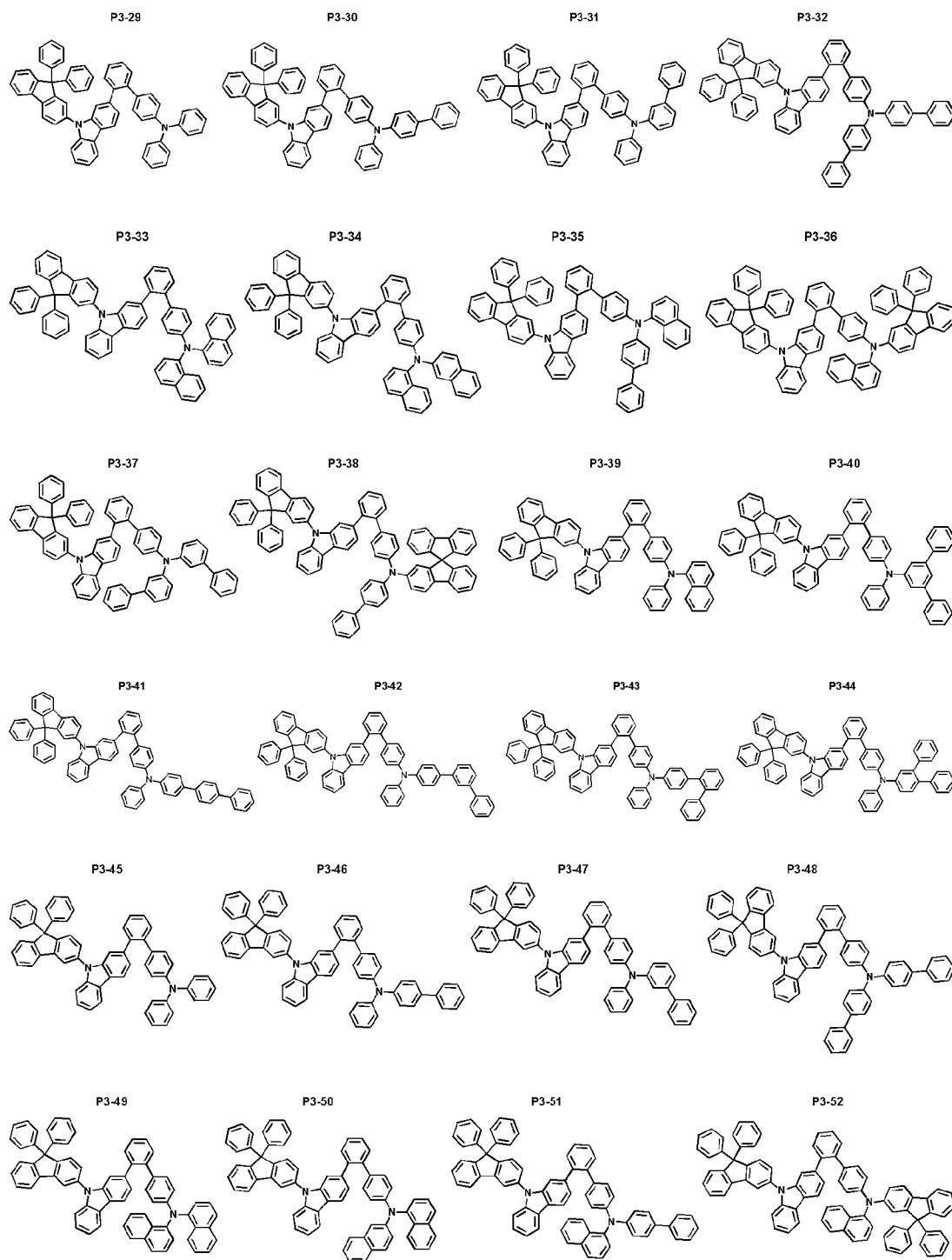
[124]



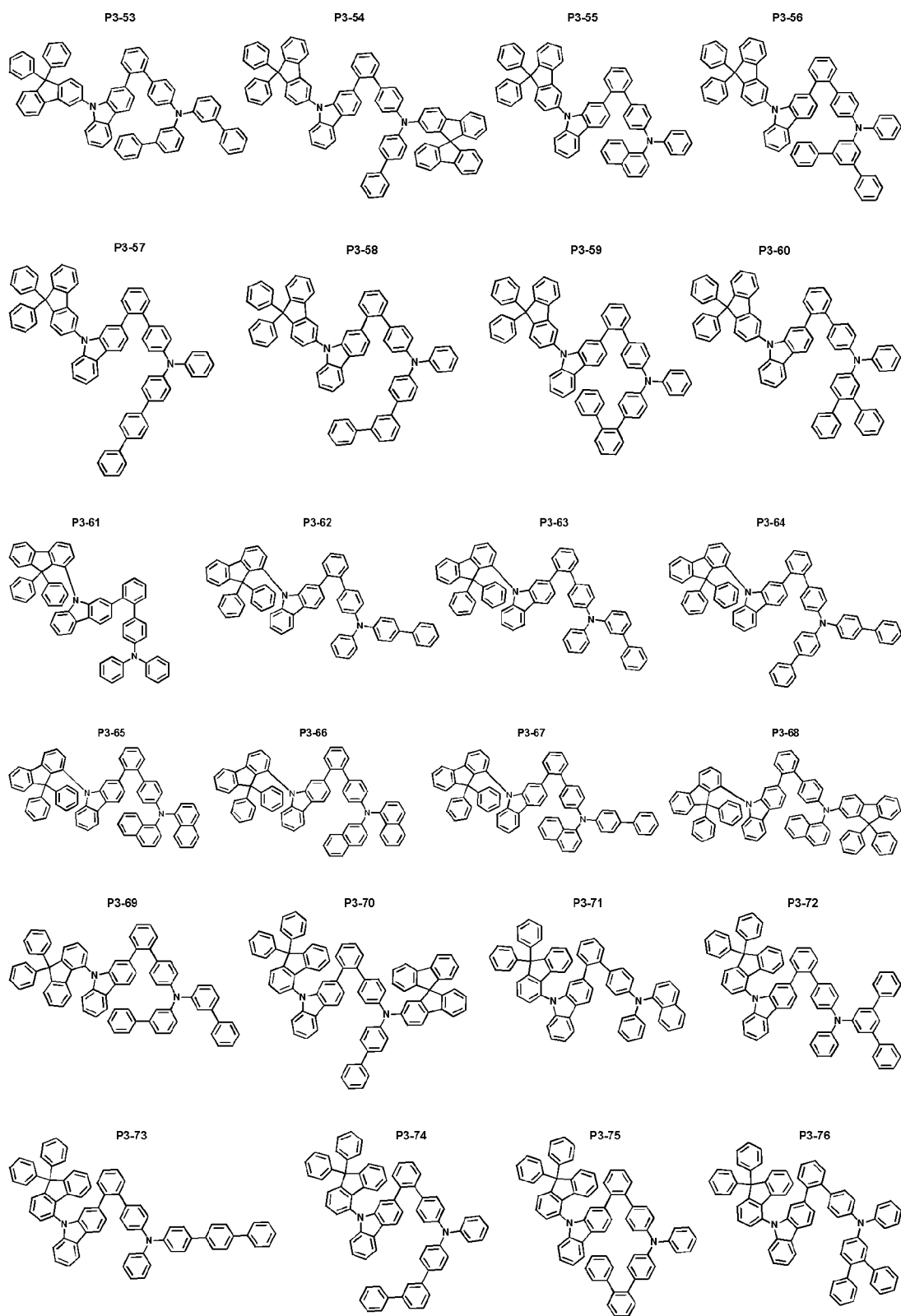
[125]



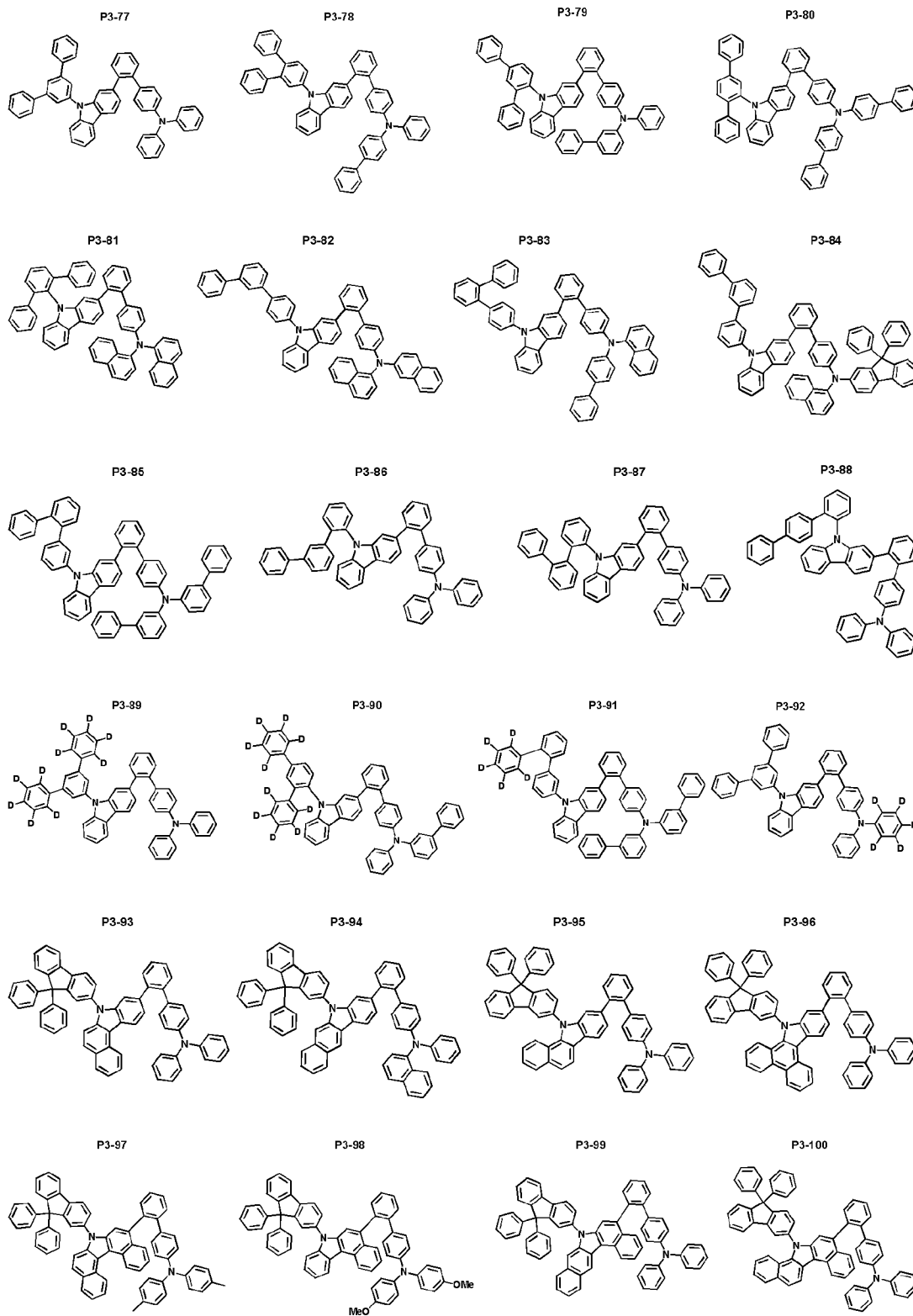
[126]



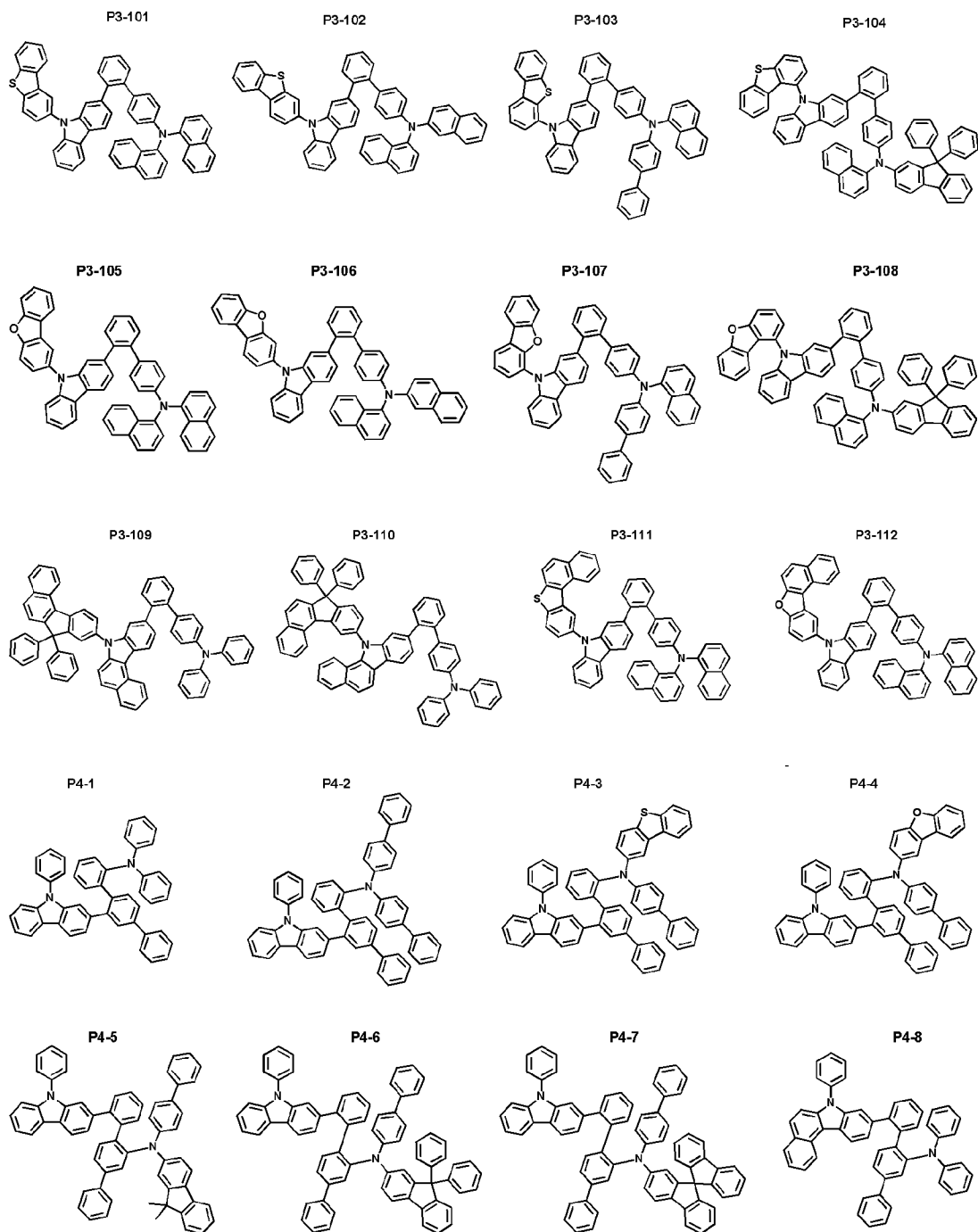
[127]



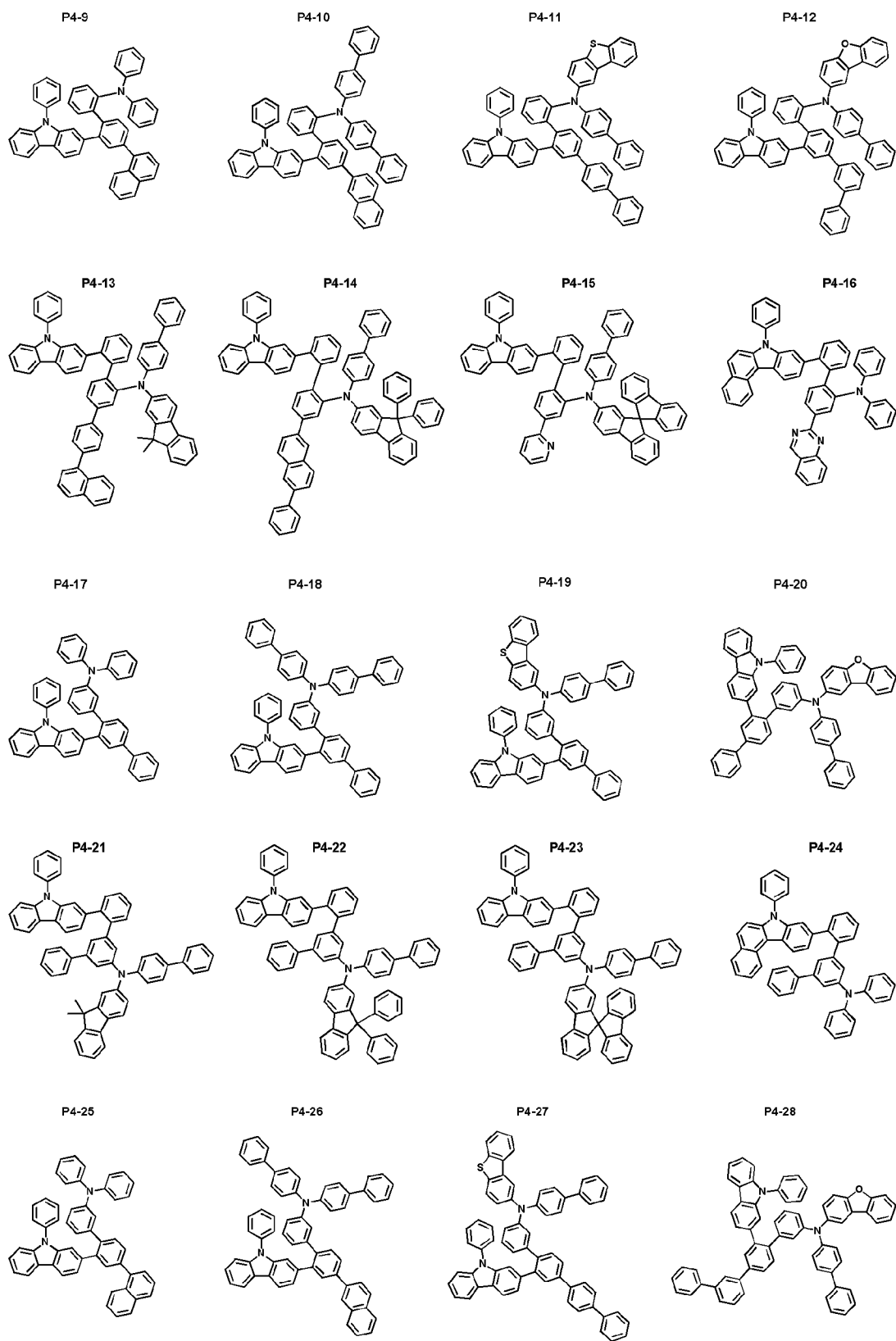
[128]



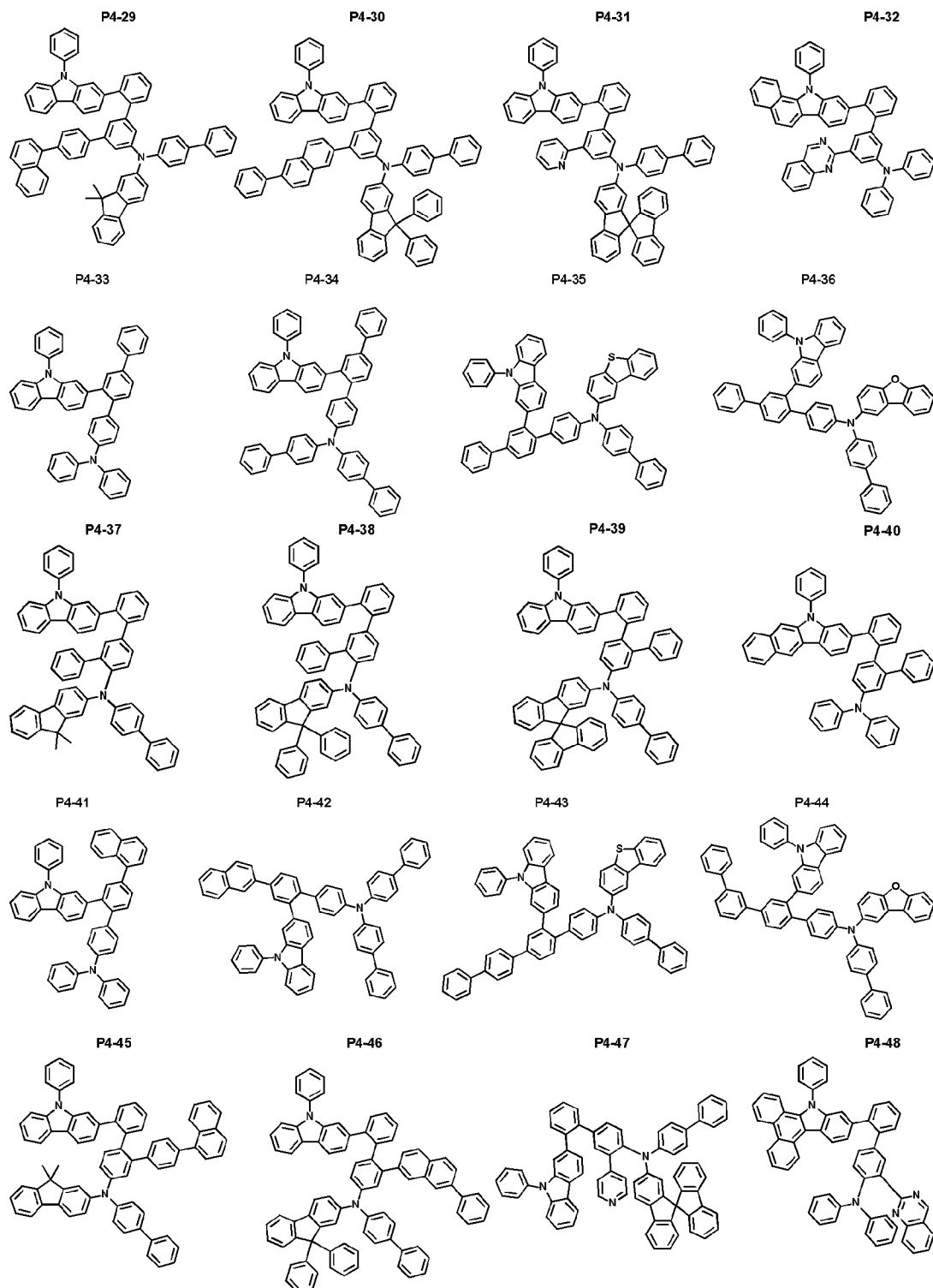
[129]



[130]



[131]



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

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

[134] 이때, 유기전기소자는 제 1전극; 제 2전극; 및 상기 제 1전극과 제2전극 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, 상기 유기물층에 상기 화학식 2 내지 화학식 10으로 표시되는 화합물 중 적어도 하나를 포함하는 유기전기소자를 제공하며, 보다 구체적으로, 상기 유기물층에 상기 화학식 11 내지 화학식 20으로 표시되는 화합물 중 적어도 하나를 포함하는 유기전기소자를 제공하며, 더욱 구체적으로, 상기 유기물층에 상기 개별 화학식 P1-1 내지 P1-112, P2-1 내지 P2-112, P3-1 내지 P3-112, P4-1 내지 P4-48로 표시되는 화합물 중 적어도 하나를 포함하는 유기전기소자를 제공한다. 즉, 상기 유기물층에 포함되거나 유기물층을 형성하는 화합물은 화학식 1로 표시되는 1종의 단독 화합물 또는 2종 이상의 혼합물일 수 있다.

[135] 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.

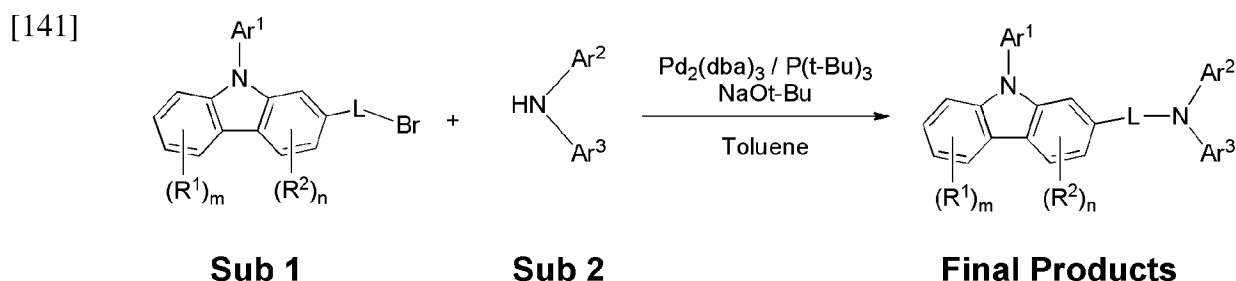
[136] 이하에서, 본 발명에 따른 화학식 1로 표시되는 화합물의 합성에 및 유기전기소자의 제조에 관하여 실시예를 들어 구체적으로 설명하지만, 본 발명이 하기의 실시예로 한정되는 것은 아니다.

[137]

[138] **합성예**

[139] 본 발명에 따른 화합물(final products)은 하기 반응식 1과 같이 sub 1과 sub 2를 반응시켜 제조될 수 있다.

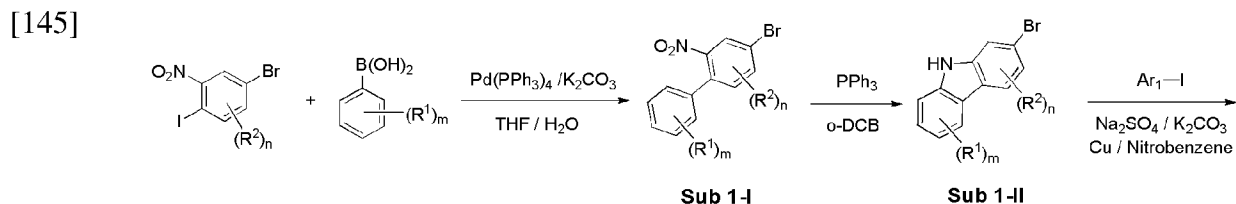
[140] <반응식 1>



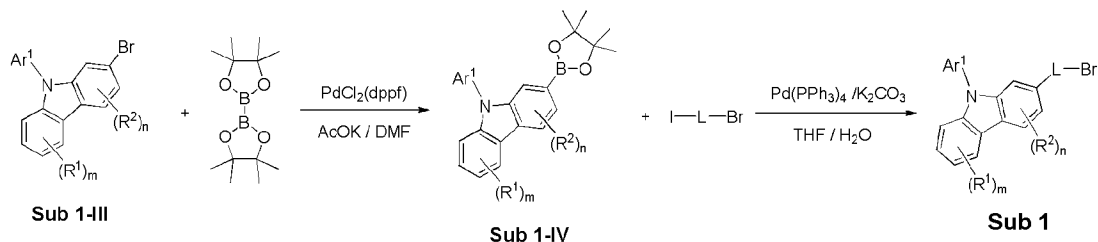
[142] **I. Sub 1의 합성예**

[143] 반응식 1의 sub 1은 하기 반응식 2의 반응경로에 의해 합성될 수 있다.

[144] <반응식 2>



[146]



[147]

1. Sub 1-1의 합성예

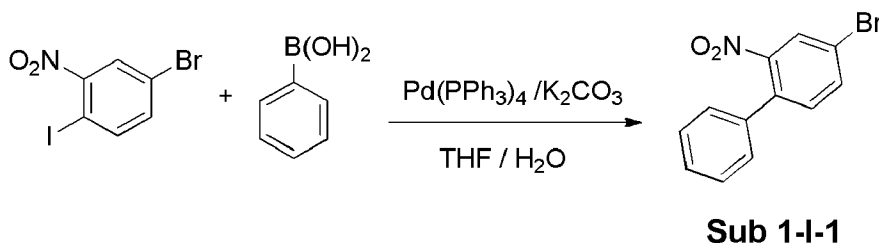
[148]

(1) 중간체 Sub 1-I-1 합성예

[149]

<반응식 3>

[150]



[151]

출발물질인 phenylboronic acid (76.84g, 630.2mmol)를 둥근바닥플라스크에 THF (2780ml)로 녹인 후에, 4-bromo-1-iodo-2-nitrobenzene (309.96g, 945.3mmol), Pd(PPh₃)₄ (36.41g, 31.5mmol), K₂CO₃ (261.3g, 1890.6mmol), 물 (1390ml)을 첨가하고 80°C에서 교반하였다. 반응이 완료되면 CH₂Cl₂와 물로 추출한 후 유기층을 MgSO₄로 건조하고 농축한 후 생성된 화합물을 silicagel column 및 재결정하여 생성물 122.68g (수율: 70%)을 얻었다.

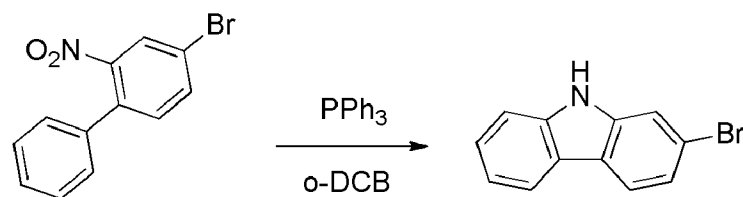
[152]

(2) 중간체 Sub 1-II-1 합성예

[153]

<반응식 4>

[154]



[155]

상기 합성에서 얻어진 Sub 1-I-1 (122.68g, 441.1mmol)을 둥근바닥플라스크에 o-dichlorobenzene (1810ml)으로 녹인 후에, triphenylphosphine (289.26g, 1102.8mmol)을 첨가하고 200°C에서 교반하였다. 반응이 완료되면 증류를 통해 o-dichlorobenzene을 제거하고 CH₂Cl₂와 물로 추출하였다. 유기층을 MgSO₄로 건조하고 농축한 후 생성된 화합물을 silicagel column 및 재결정하여 생성물 80.34g (수율: 74%)을 얻었다.

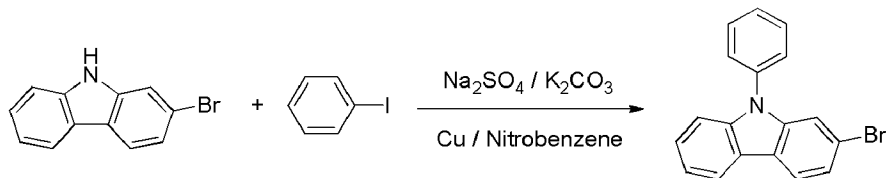
[156]

(3) 중간체 Sub 1-III-1 합성예

[157]

<반응식 5>

[158]

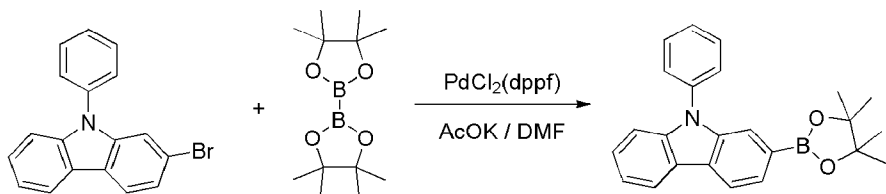
**Sub 1-II-1****Sub 1-III-1**

[159] 상기 합성에서 얻어진 Sub 1-II-1 (80.34g, 326.5mmol)을 둥근바닥플라스크에 nitrobenzene (653ml)으로 녹인 후, iodobenzene (99.9g, 489.7mmol), Na₂SO₄ (46.37g, 326.5mmol), K₂CO₃ (45.12g, 326.5mmol), Cu (6.22g, 97.9mmol)를 첨가하고 200°C에서 교반하였다. 반응이 완료되면 증류를 통해 nitrobenzene을 제거하고 CH₂Cl₂와 물로 추출하였다. 유기층을 MgSO₄로 건조하고 농축한 후 생성된 화합물을 silicagel column 및 재결정하여 생성물 76.78g (수율: 73%)을 얻었다.

[160] (4) 중간체 **Sub 1-IV-1** 합성예

[161] <반응식 6>

[162]

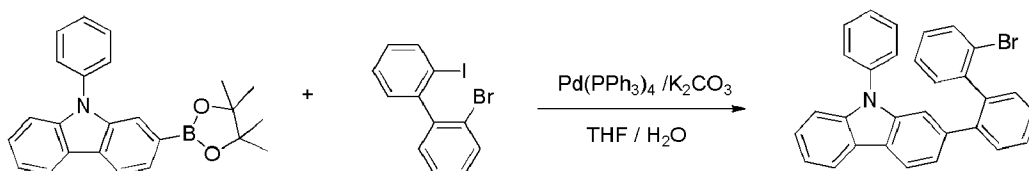
**Sub 1-III-1****Sub 1-IV-1**

[163] 상기 합성에서 얻어진 Sub 1-III-1 (76.78g, 238.3mmol)을 둥근바닥플라스크에 DMF로 녹인 후에, Bis(pinacolato)diboron (66.57g, 262.1mmol), Pd(dppf)Cl₂ (5.84g, 7.1mmol), KOAc (70.16g, 714.9mmol)를 첨가하고 90°C에서 교반하였다. 반응이 완료되면 증류를 통해 DMF를 제거하고 CH₂Cl₂와 물로 추출하였다. 유기층을 MgSO₄로 건조하고 농축한 후 생성된 화합물을 silicagel column 및 재결정하여 생성물 73.92g (수율: 84%)을 얻었다.

[164] (5) **Sub 1-1** 합성

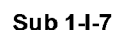
[165] <반응식 7>

[166]

**Sub 1-IV-1****Sub 1-1**

[167] 상기 합성에서 얻어진 Sub 1-IV-1 (73.92g, 200.2mmol)를 둥근바닥플라스크에 THF (880ml)로 녹인 후에, 2-bromo-2'-iodo-1,1'-biphenyl (108g, 300.3mmol), Pd(PPh₃)₄ (11.6g, 10mmol), K₂CO₃ (83g, 600.6mmol), 물 (440ml)을 첨가하고 80°C에서 교반하였다. 반응이 완료되면 CH₂Cl₂와 물로 추출한 후 유기층을

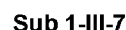
[171]



[175]

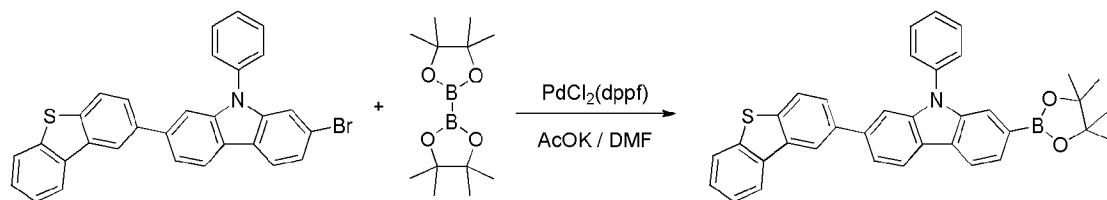


[179]



[182] <반응식 11>

[183]



Sub 1-III-7

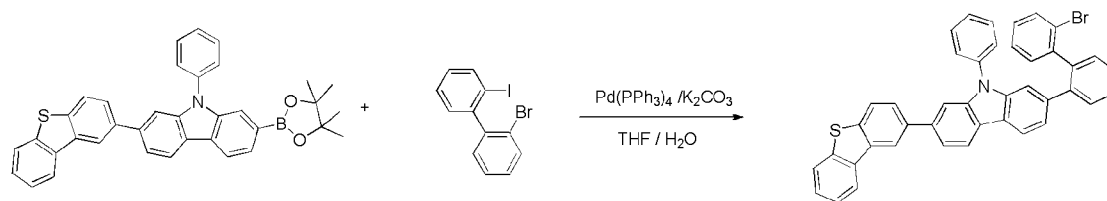
Sub 1-IV-7

[184] 상기 합성에서 얻어진 Sub 1-III-7 (57g, 113mmol), DMF (712ml), Bis(pinacolato)diboron (31.6g, 124.3mmol), Pd(dppf)Cl₂ (2.8g, 3.4mmol), KOAc (33.3g, 339mmol)를 상기 Sub 1-IV-1의 합성예를 이용하여 생성물 49.2g (수율: 79%)을 얻었다.

[185] **(5) Sub 1-7 합성**

[186] <반응식 12>

[187]



Sub 1-IV-7

Sub 1-7

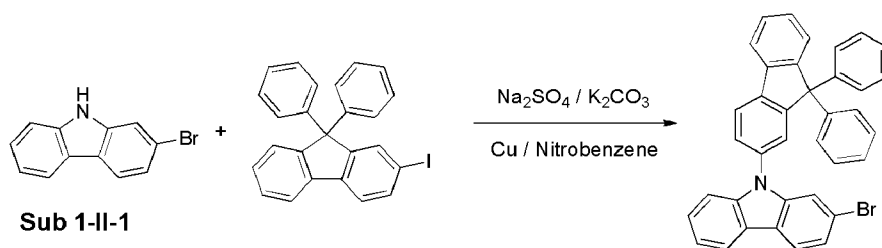
[188] 상기 합성에서 얻어진 Sub 1-IV-7 (49.2g, 89.2mmol)을 둥근바닥플라스크에 THF (392ml)로 녹인 후에, 2-bromo-2'-iodo-1,1'-biphenyl (48.1g, 134mmol), Pd(PPh₃)₄ (5.2g, 4.5mmol), K₂CO₃ (37g, 268mmol), 물 (196ml)을 상기 Sub 1-1의 합성예를 이용하여 생성물 40.4g (수율:69%)을 얻었다.

[189] **3. Sub 1-13의 합성예**

[190] **(1) 중간체 Sub 1-III-13 합성예**

[191] <반응식 13>

[192]



Sub 1-II-1

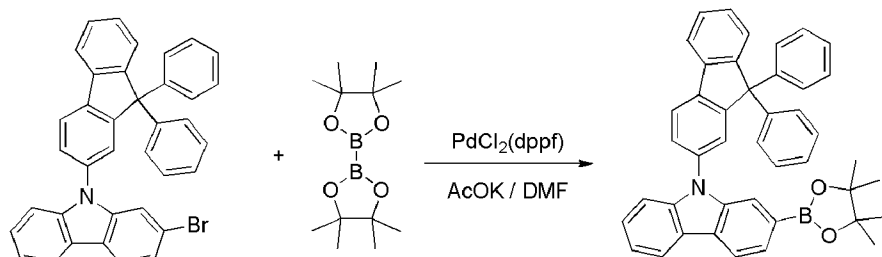
Sub 1-III-13

[193] 상기 합성에서 얻어진 Sub 1-II-1 (70g, 284.4mmol), nitrobenzene (570ml)로 녹인 후, 2-iodo-9,9-diphenyl-9H-fluorene (189.6g, 426.7mmol), Na₂SO₄ (40.4g, 284.4mmol), K₂CO₃ (39.3g, 284.4mmol), Cu (5.42g, 85.3mmol)를 상기 Sub 1-III-1의 합성예를 이용하여 생성물 108.8g (수율: 68%)을 얻었다.

[194] **(2) 중간체 Sub 1-IV-13 합성예**

[195] <반응식 14>

[196]



Sub 1-III-13

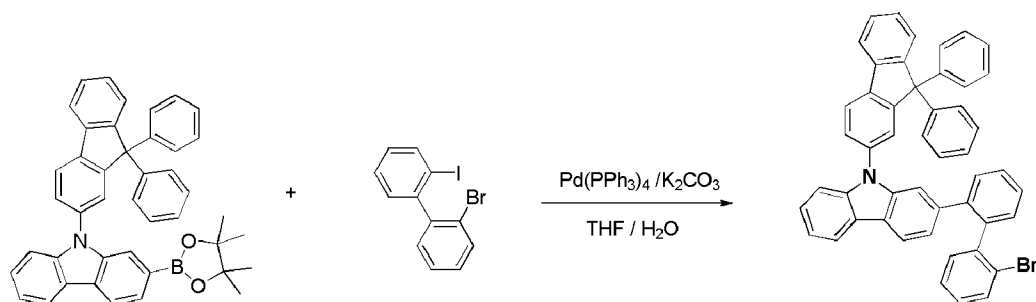
Sub 1-IV-13

[197] 상기 합성에서 얻어진 Sub 1-III-13 (108.8g, 193.4mmol), DMF (1220ml), Bis(pinacolato)diboron (54.0g, 212.76mmol), Pd(dppf)Cl₂ (4.73g, 5.8mmol), KOAc (56.94g, 580.3mmol)를 상기 Sub 1-IV-1의 합성예를 이용하여 생성물 86.1g (수율: 73%)을 얻었다.

[198] **(3) Sub 1-13 합성**

[199] <반응식 15>

[200]



Sub 1-IV-13

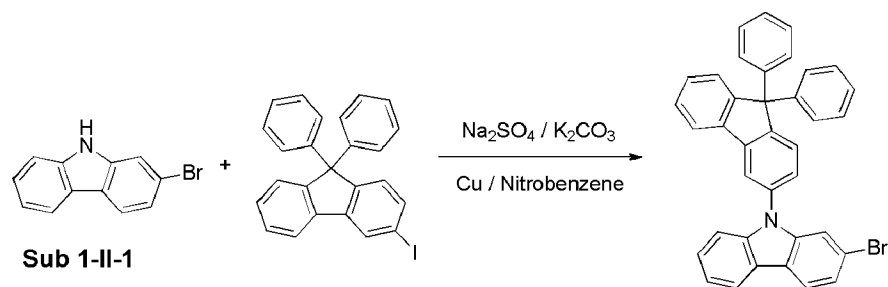
Sub 1-13

[201] 상기 합성에서 얻어진 Sub 1-IV-13 (86.1g, 141.2mmol), THF (620ml), 2-bromo-2'-iodo-1,1'-biphenyl (76.1g, 211.9mmol), Pd(PPh₃)₄ (8.2g, 7.06mmol), K₂CO₃ (58.6g, 423.7mmol), 물 (310ml)을 상기 Sub 1-1의 합성예를 이용하여 생성물 68.6g (수율: 68%)을 얻었다.

[202] **4. Sub 1-14의 합성예**[203] **(1) 중간체 Sub 1-III-14 합성예**

[204] <반응식 16>

[205]



Sub 1-II-1

Sub 1-III-14

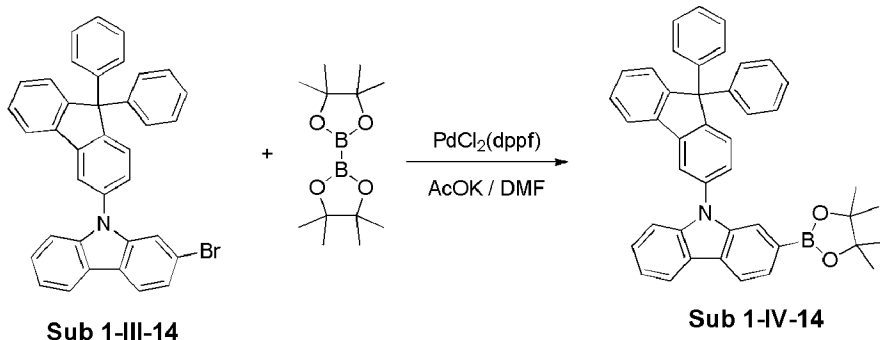
[206] 상기 합성에서 얻어진 Sub 1-II-1 (63g, 255.9mmol), nitrobenzene (512ml), 3-iodo-9,9-diphenyl-9H-fluorene (170.6g, 383.9mmol), Na₂SO₄ (36.4g, 256mmol), K₂

CO₃ (35.4g, 256mmol), Cu (4.88g, 76.8mmol)를 상기 Sub 1-III-1의 합성예를 이용하여 생성물 99.3g (수율: 69%)을 얻었다.

[207] (2) 중간체 Sub 1-IV-14 합성예

[208] <반응식 17>

[209]

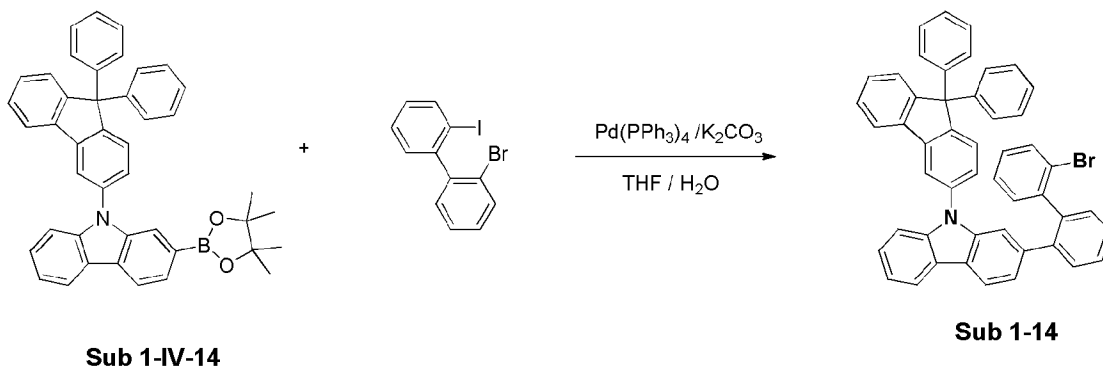


[210] 상기 합성에서 얻어진 Sub 1-III-14 (99.3g, 193.4mmol), DMF (1110ml), Bis(pinacolato)diboron (49.3g, 194.2mmol), Pd(dppf)Cl₂ (4.32g, 5.3mmol), KOAc (52g, 529.6mmol)를 상기 Sub 1-IV-1의 합성예를 이용하여 생성물 80.7g (수율: 75%)을 얻었다.

[211] (3) Sub 1-14 합성

[212] <반응식 18>

[213]



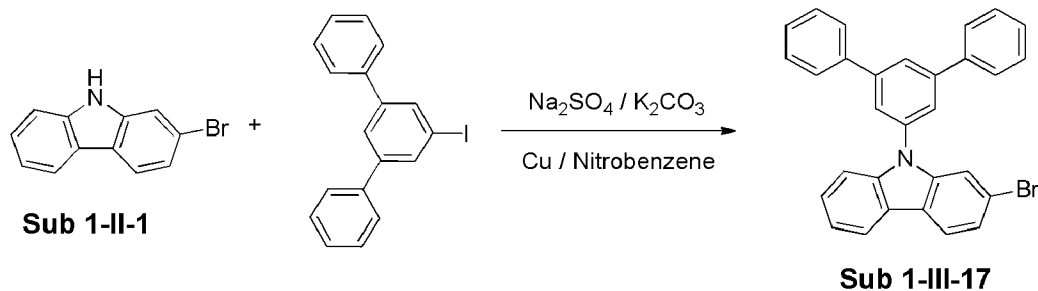
[214] 상기 합성에서 얻어진 Sub 1-IV-14 (80.7g, 132.3mmol), THF (582ml), 2-bromo-2'-iodo-1,1'-biphenyl (71.3g, 198.6mmol), Pd(PPh₃)₄ (7.65g, 6.62mmol), K₂CO₃ (54.9g, 397.2mmol), 물 (291ml)을 상기 Sub 1-1의 합성예를 이용하여 생성물 62.4g (수율: 66%)을 얻었다.

[215] **5. Sub 1-17의 합성예**

[216] (1) 중간체 Sub 1-III-17 합성예

[217] <반응식 19>

[218]

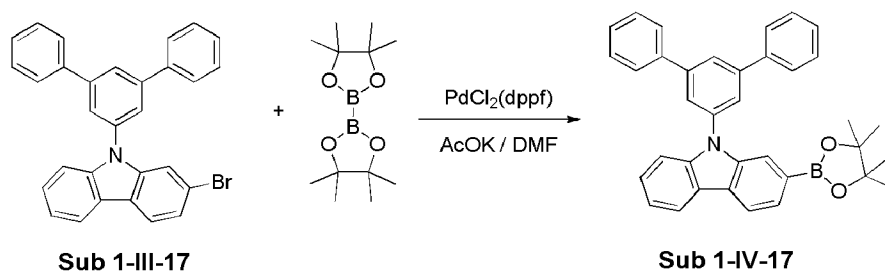


[219] 상기 합성에서 얻어진 Sub 1-II-1 (60g, 244mmol), nitrobenzene (487ml), 5'-iodo-1,1':3,1''-terphenyl (130.3g, 365.7mmol), Na_2SO_4 (34.6g, 244mmol), K_2CO_3 (33.7g, 244mmol), Cu (4.65g, 73.1mmol)를 상기 Sub 1-III-1의 합성예를 이용하여 생성물 82.1g (수율: 71%)을 얻었다.

[220] (2) 중간체 Sub 1-IV-17 합성예

[221] <반응식 20>

[222]

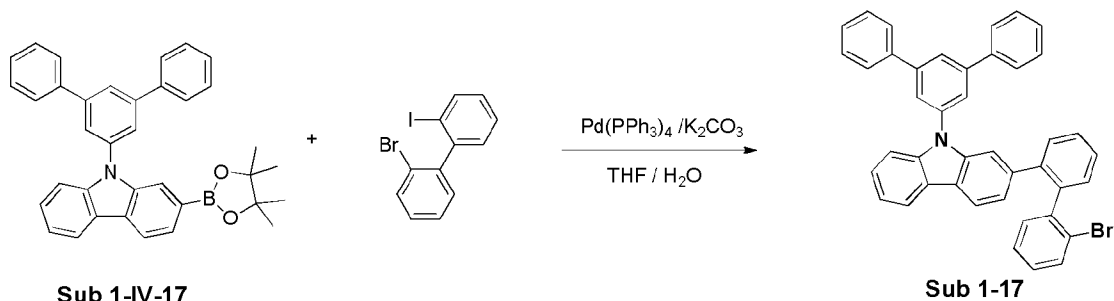


[223] 상기 합성에서 얻어진 Sub 1-III-17 (82.1g, 173.1mmol), DMF (1090ml), Bis(pinacolato)diboron (48.3g, 190.4mmol), $\text{Pd}(\text{dppf})\text{Cl}_2$ (4.24g, 5.2mmol), KOAc (51g, 519.2mmol)를 상기 Sub 1-IV-1의 합성예를 이용하여 생성물 65.9g (수율: 73%)을 얻었다.

[224] (3) Sub 1-17 합성

[225] <반응식 21>

[226]



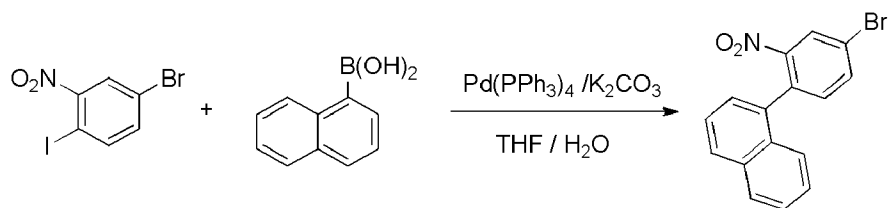
[227] 상기 합성에서 얻어진 Sub 1-IV-17 (65.9g, 126.4mmol), THF (556ml), 2-bromo-2'-iodo-1,1'-biphenyl (68.1g, 190mmol), $\text{Pd}(\text{PPh}_3)_4$ (7.3g, 6.32mmol), K_2CO_3 (52.4g, 319.1mmol), 물 (278ml)을 상기 Sub 1-1의 합성예를 이용하여 생성물 53.1g (수율: 67%)을 얻었다.

[228] **6. Sub 1-32의 합성예**

[229] (1) 중간체 Sub 1-I-32 합성예

[230] <반응식 22>

[231]

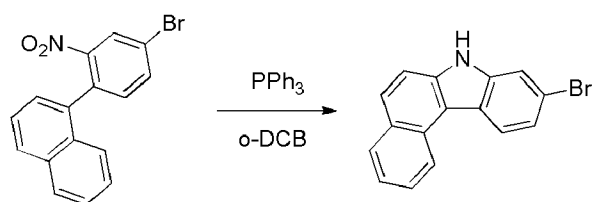
**Sub 1-I-32**

[232] 출발물질인 naphthalen-1-ylboronic acid (70g, 407mmol), THF (1790ml), 4-bromo-1-iodo-2-nitrobenzene (200g, 610.5mmol), Pd(PPh₃)₄ (23.5g, 20.35mmol), K₂CO₃ (168.8g, 1221mmol), 물 (895ml)을 상기 Sub 1-I-1의 합성예를 이용하여 생성물 94.8g (수율: 71%)을 얻었다.

[233] (2) 중간체 **Sub 1-II-32** 합성예

[234] <반응식 23>

[235]

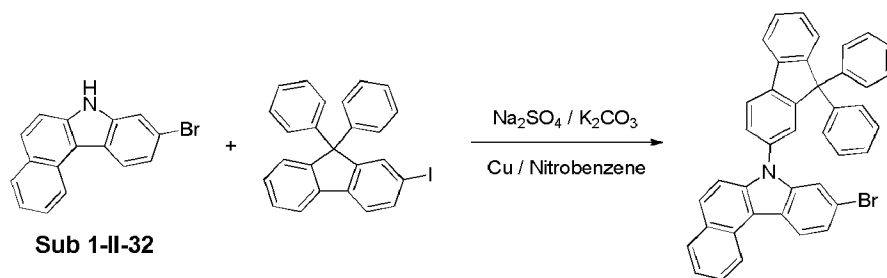
**Sub 1-I-32****Sub 1-II-32**

[236] 상기 합성에서 얻어진 Sub 1-I-32 (94.8g, 288.9mmol), *o*-dichlorobenzene (1184ml), triphenylphosphine (189.4g, 722.2mmol)을 상기 Sub 1-II-1의 합성예를 이용하여 생성물 61.2g (수율: 75%)을 얻었다.

[237] (3) 중간체 **Sub 1-III-32** 합성예

[238] <반응식 24>

[239]

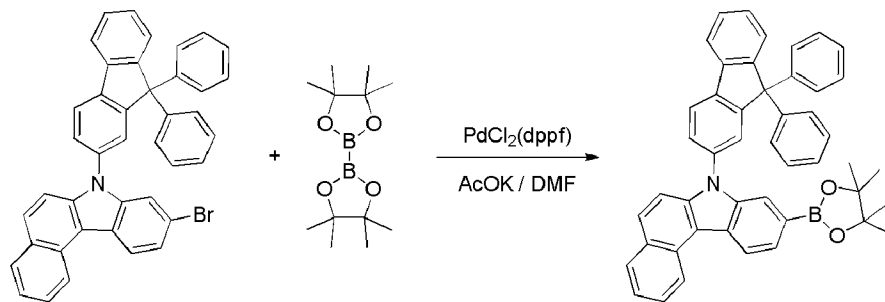
**Sub 1-II-32****Sub 1-III-32**

[240] 상기 합성에서 얻어진 Sub 1-II-32 (61.2g, 206.6mmol), nitrobenzene (413ml), 2-iodo-9,9-diphenyl-9H-fluorene (137.7g, 310mmol), Na₂SO₄ (29.35g, 206.6mmol), K₂CO₃ (28.6g, 206.6mmol), Cu (3.9g, 62mmol)를 상기 Sub 1-III-1의 합성예를 이용하여 생성물 89.86g (수율: 71%)을 얻었다.

[241] (4) 중간체 **Sub 1-IV-32** 합성예

[242] <반응식 25>

[243]

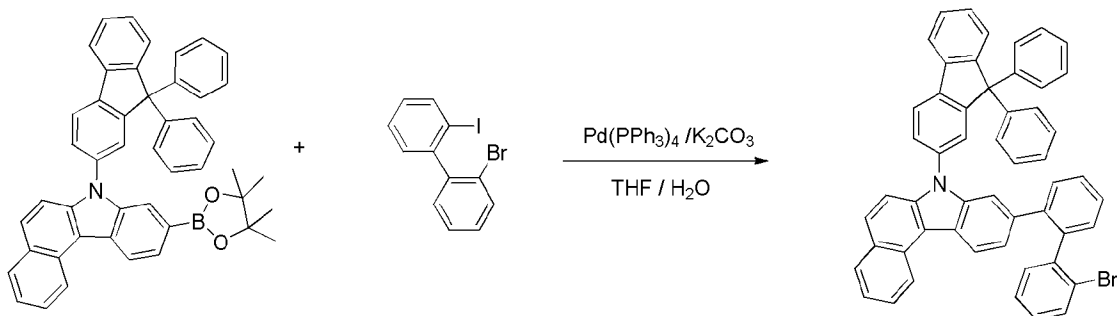
**Sub 1-III-32****Sub 1-IV-32**

[244] 상기 합성에서 얻어진 Sub 1-III-32 (89.86g, 146.7mmol), DMF (924ml), Bis(pinacolato)diboron (41g, 161.4mmol), Pd(dppf)Cl₂ (3.59g, 4.4mmol), KOAc (43.2g, 440.1mmol)를 상기 Sub 1-IV-1의 합성예를 이용하여 생성물 74.5g (수율: 77%)을 얻었다.

[245] **(5) Sub 1-32 합성**

[246] <반응식 26>

[247]

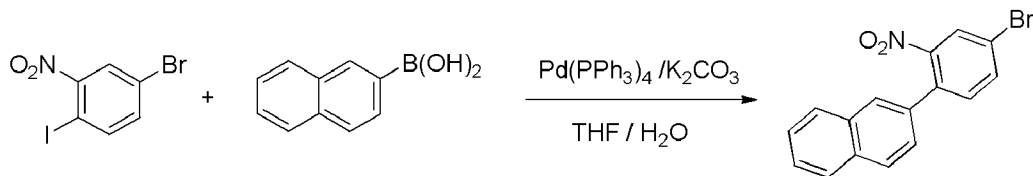
**Sub 1-IV-32****Sub 1-32**

[248] 상기 합성에서 얻어진 Sub 1-IV-32 (74.5g, 112.9mmol)를 둥근바닥플라스크에 THF (496ml)로 녹인 후에, 2-bromo-2'-iodo-1,1'-biphenyl (60.8g, 169.4mmol), Pd(PPh₃)₄ (6.53g, 5.65mmol), K₂CO₃ (46.8g, 338.8mmol), 물 (248ml)을 상기 Sub 1-1의 합성예를 이용하여 생성물 59.6g (수율: 69%)을 얻었다.

[249] **7. Sub 1-34의 합성예**[250] **(1) 중간체 Sub 1-I-34 합성예**

[251] <반응식 27>

[252]

**Sub 1-I-34**

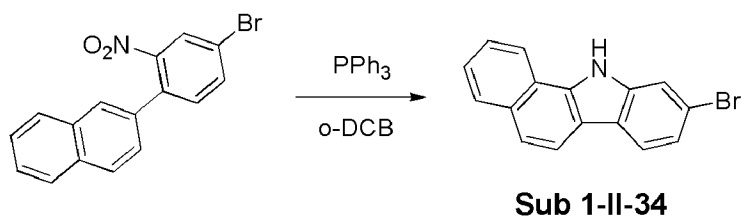
[253] 출발물질인 naphthalen-2-ylboronic acid (70g, 407mmol), THF (1790ml), 4-bromo-1-iodo-2-nitrobenzene (200g, 610.5mmol), Pd(PPh₃)₄ (23.5g, 20.35mmol), K₂CO₃ (168.8g, 1221mmol), 물 (895ml)을 상기 Sub 1-I-1의 합성예를 이용하여

생성물 97.5g (수율: 73%)을 얻었다.

[254] (2) 중간체 **Sub 1-II-34** 합성예

[255] <반응식 28>

[256]

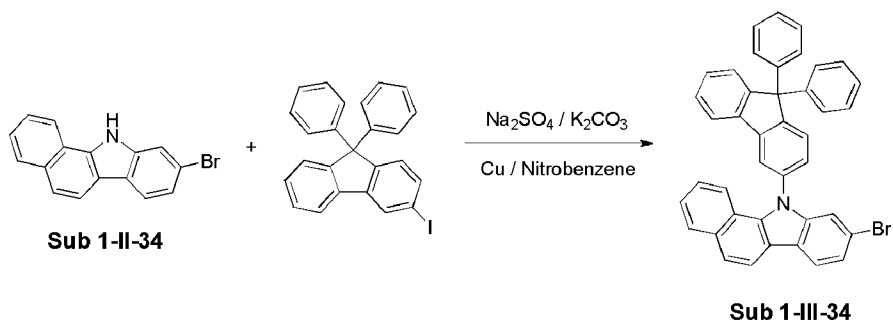


[257] 상기 합성에서 얻어진 Sub 1-I-34 (97.5g, 297.1mmol), *o*-dichlorobenzene (1220ml), triphenylphosphine (194.8g, 742.8mmol)을 상기 Sub 1-II-1의 합성예를 이용하여 생성물 65.1g (수율: 74%)을 얻었다.

[258] (3) 중간체 **Sub 1-III-34** 합성예

[259] <반응식 29>

[260]

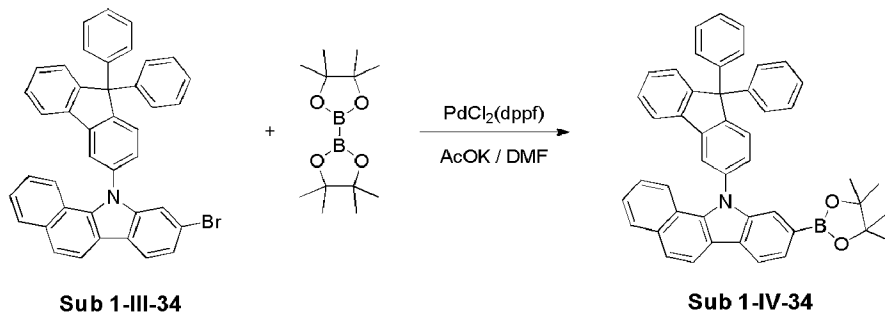


[261] 상기 합성에서 얻어진 Sub 1-II-34 (65.1g, 220mmol), nitrobenzene (440ml), 3-iodo-9,9-diphenyl-9H-fluorene (146.5g, 330mmol), Na₂SO₄ (31.2g, 220mmol), K₂CO₃ (30.4g, 220mmol), Cu (4.2g, 66mmol)를 상기 Sub 1-III-1의 합성예를 이용하여 생성물 95.6g (수율: 71%)을 얻었다.

[262] (4) 중간체 **Sub 1-IV-34** 합성예

[263] <반응식 30>

[264]

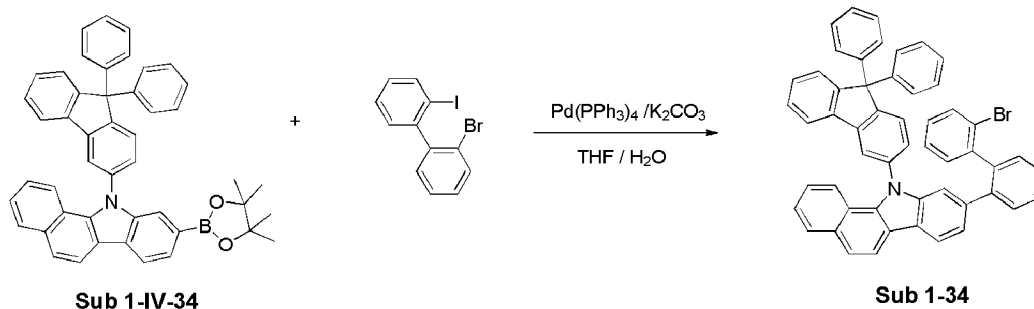


[265] 상기 합성에서 얻어진 Sub 1-III-34 (95.6g, 156.1mmol)를 둥근바닥플라스크에 DMF (980ml)로 녹인 후에, Bis(pinacolato)diboron (43.6g, 171.7mmol), Pd(dppf)Cl₂ (3.82g, 4.7mmol), KOAc (46g, 468.2mmol)를 상기 Sub 1-IV-1의 합성예를 이용하여 생성물 77.2g (수율: 75%)을 얻었다.

[266] (5) Sub 1-34 합성

[267] <반응식 31>

[268]



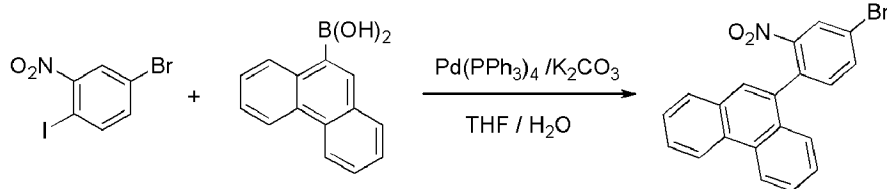
[269] 상기 합성에서 얻어진 Sub 1-IV-34 (77.2g, 117mmol), THF (510ml), 2-bromo-2'-iodo-1,1'-biphenyl (63g, 175.6mmol), Pd(PPh₃)₄ (6.76g, 5.85mmol), K₂CO₃ (48.5g, 351mmol), 물 (255ml)을 상기 Sub 1-1의 합성예를 이용하여 생성물 58.2g (수율:65%)을 얻었다.

[270] **8. Sub 1-35의 합성예**

[271] (1) 중간체 Sub 1-I-35 합성예

[272] <반응식 32>

[273]

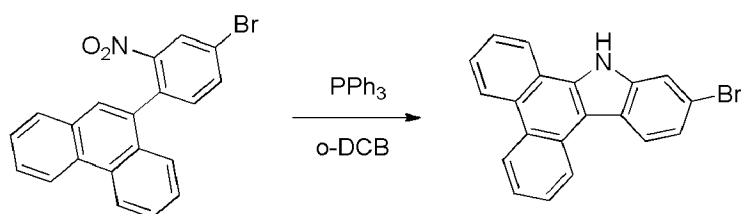


[274] 출발물질인 phenanthren-9-ylboronic acid (70g, 315.2mmol), THF (1388ml), 4-bromo-1-iodo-2-nitrobenzene (155.1g, 472.9mmol), Pd(PPh₃)₄ (18.2g, 15.8mmol), K₂CO₃ (130.7g, 945.7mmol), 물 (694ml)을 상기 Sub 1-I-1의 합성예를 이용하여 생성물 85.8g (수율: 72%)을 얻었다.

[275] (2) 중간체 Sub 1-II-35 합성예

[276] <반응식 33>

[277]

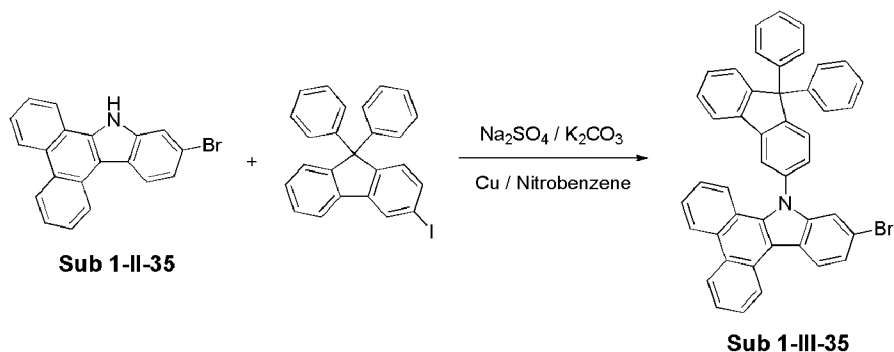


[278] 상기 합성에서 얻어진 Sub 1-I-35 (85.8g, 226.9mmol), o-dichlorobenzene (930ml), triphenylphosphine (148.8g, 567.1mmol)을 상기 Sub 1-II-1의 합성예를 이용하여 생성물 60.5g (수율: 77%)을 얻었다.

[279] (3) 중간체 Sub 1-III-35 합성예

[280] <반응식 34>

[281]

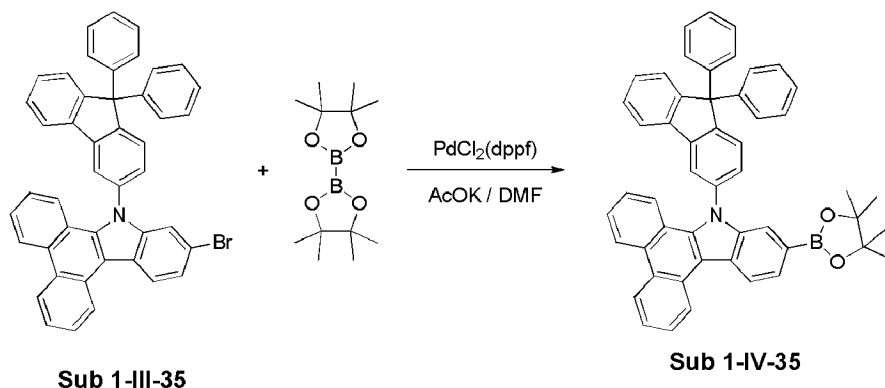


[282] 상기 합성에서 얻어진 Sub 1-II-35 (60.5g, 174.7mmol), nitrobenzene (350ml), 3-iodo-9,9-diphenyl-9H-fluorene (116.5g, 262.1mmol), Na_2SO_4 (24.8g, 174.7mmol), K_2CO_3 (24.2g, 174.7mmol), Cu (3.33g, 52.4mmol)를 상기 Sub 1-III-1의 합성예를 이용하여 생성물 84.5g (수율: 73%)을 얻었다.

[283] (4) 중간체 Sub 1-IV-35 합성예

[284] <반응식 35>

[285]

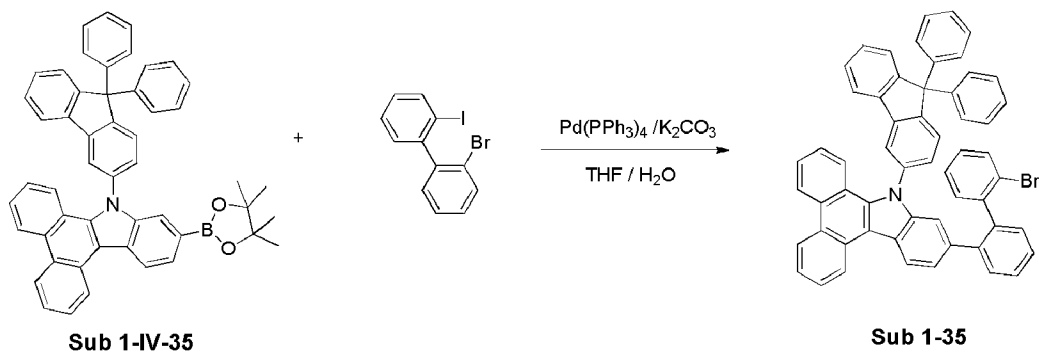


[286] 상기 합성에서 얻어진 Sub 1-III-35 (84.5g, 127.5mmol), DMF (854ml), Bis(pinacolato)diboron (35.6g, 140.3mmol), $\text{Pd}(\text{dppf})\text{Cl}_2$ (3.12g, 3.82mmol), KOAc (37.5g, 382.5mmol)를 상기 Sub 1-IV-1의 합성예를 이용하여 생성물 70.6g (수율: 78%)을 얻었다.

[287] (5) Sub 1-35 합성

[288] <반응식 36>

[289]



[290] 상기 합성에서 얻어진 Sub 1-IV-35 (70.6g, 99.5mmol)를 둥근바닥플라스크에

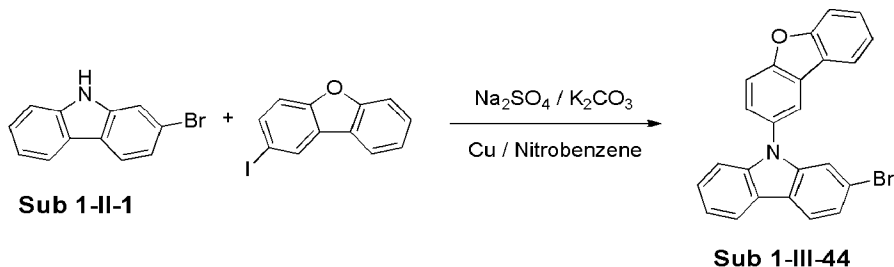
THF (438ml)로 녹인 후에, 2-bromo-2'-iodo-1,1'-biphenyl (53.6g, 149.2mmol), $\text{Pd}(\text{PPh}_3)_4$ (5.75g, 4.97mmol), K_2CO_3 (41.2g, 298.4mmol), 물 (219ml)을 상기 Sub 1-1의 합성예를 이용하여 생성물 55.1g (수율: 68%)을 얻었다.

[291] **9. Sub 1-44의 합성예**

[292] **(1) 중간체 Sub 1-III-44 합성예**

[293] <반응식 37>

[294]

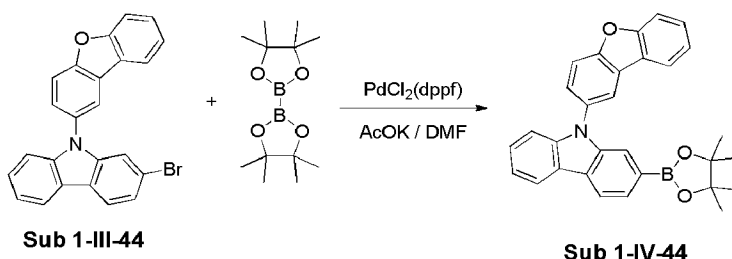


[295] 상기 합성에서 얻어진 Sub 1-II-1 (60g, 244mmol), nitrobenzene (487ml), 2-iododibenzo[b,d]furan (107.6g, 365.7mmol), Na_2SO_4 (34.6g, 244mmol), K_2CO_3 (33.7g, 244mmol), Cu (4.65g, 73.1mmol)를 상기 Sub 1-III-1의 합성예를 이용하여 생성물 68.4g (수율: 68%)을 얻었다.

[296] **(2) 중간체 Sub 1-IV-44 합성예**

[297] <반응식 38>

[298]

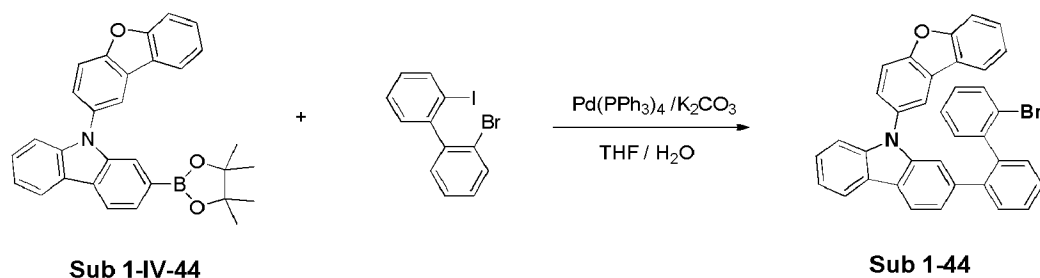


[299] 상기 합성에서 얻어진 Sub 1-III-44 (68.4g, 166mmol), DMF (1045ml), Bis(pinacolato)diboron (46.3g, 182.5mmol), $\text{Pd}(\text{dppf})\text{Cl}_2$ (4.06g, 5mmol), KOAc (48.8g, 497.7mmol)를 상기 Sub 1-IV-1의 합성예를 이용하여 생성물 56.4g (수율: 74%)을 얻었다.

[300] **(3) Sub 1-44 합성**

[301] <반응식 39>

[302]



[303] 상기 합성에서 얻어진 Sub 1-IV-44 (56.4g, 122.8mmol), THF (540ml), 2-bromo-2'-iodo-1,1'-biphenyl (66.1g, 184mmol), $\text{Pd}(\text{PPh}_3)_4$ (7.1g, 6.14mmol), K_2CO_3

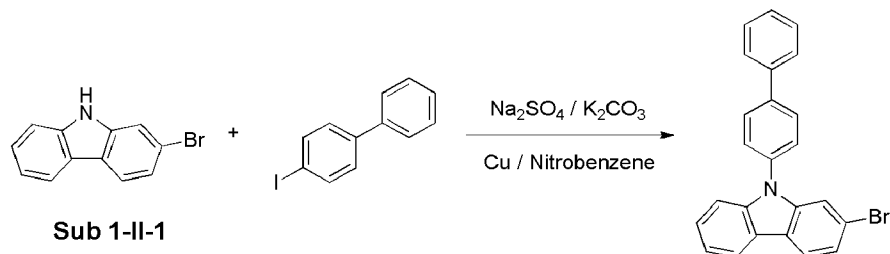
(50.9g, 368.4mmol), 물 (270ml)을 상기 Sub 1-1의 합성예를 이용하여 생성물 47.8g (수율: 69%)을 얻었다.

[304] **10. Sub 1-54의 합성예**

[305] **(1) 중간체 Sub 1-III-54 합성예**

[306] <반응식 40>

[307]

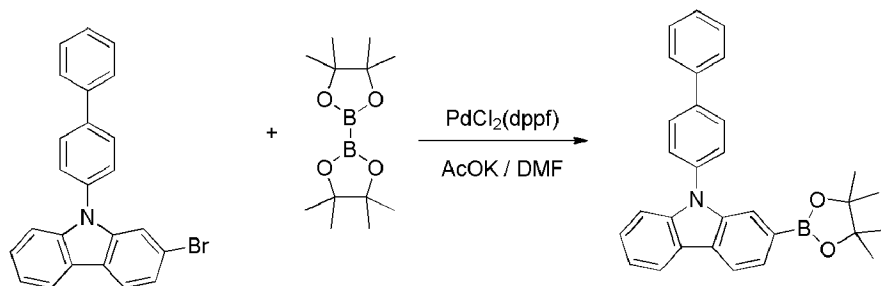


[308] 상기 합성에서 얻어진 Sub 1-II-1 (50g, 203.2mmol), nitrobenzene (406ml), 4-iodo-1,1'-biphenyl (85.4g, 304.7mmol), Na₂SO₄ (28.9g, 203.2mmol), K₂CO₃ (28.1g, 203.2mmol), Cu (3.87g, 61mmol)를 상기 Sub 1-III-1의 합성예를 이용하여 생성물 54.2g (수율: 68%)을 얻었다.

[309] **(2) 중간체 Sub 1-IV-54 합성예**

[310] <반응식 41>

[311]

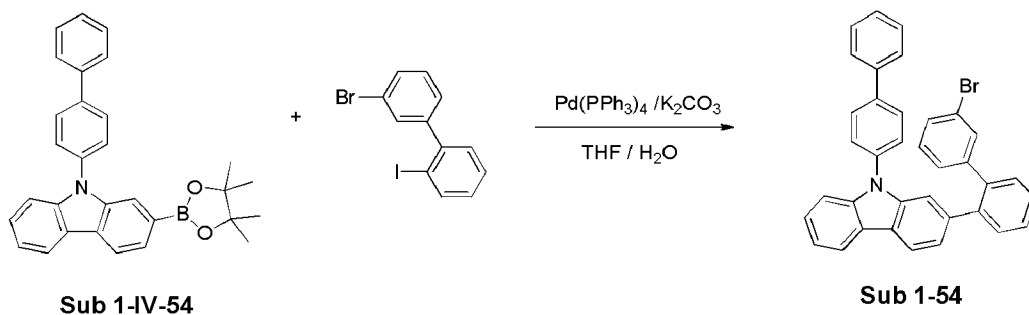


[312] 상기 합성에서 얻어진 Sub 1-III-54 (54.2g, 136.1mmol), DMF (857ml), Bis(pinacolato)diboron (38.0g, 150mmol), Pd(dppf)Cl₂ (3.33g, 4.1mmol), KOAc (40.1g, 408mmol)를 상기 Sub 1-IV-1의 합성예를 이용하여 생성물 42.4g (수율: 70%)을 얻었다.

[313] **(3) Sub 1-54 합성**

[314] <반응식 42>

[315]



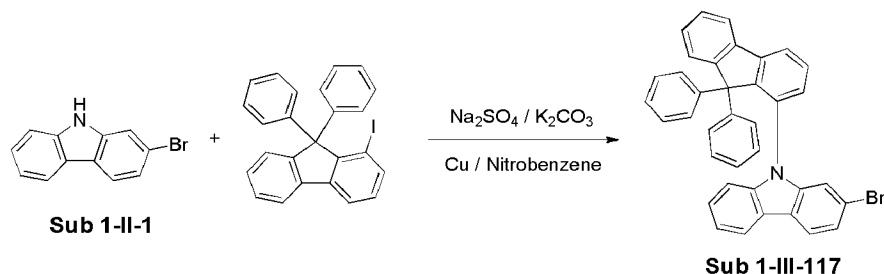
[316] 상기 합성에서 얻어진 Sub 1-IV-54 (42.4g, 95.2mmol), THF (418ml), 3'-bromo-2-iodo-1,1'-biphenyl (51.3g, 142.8mmol), Pd(PPh₃)₄ (5.5g, 4.76mmol), K₂CO₃ (39.5g, 285.6mmol), 물 (209ml)을 상기 Sub 1-1의 합성예를 이용하여 생성물 34.1g (수율: 65%)을 얻었다.

[317] **11. Sub 1-117의 합성예**

[318] **(1) 중간체 Sub 1-III-117 합성예**

[319] <반응식 43>

[320]

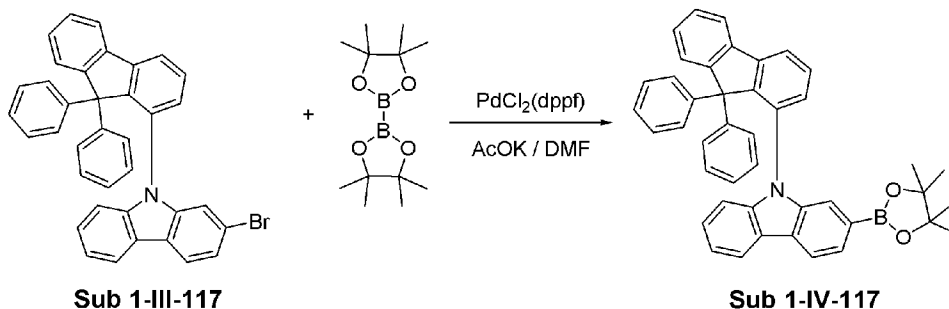


[321] 상기 합성에서 얻어진 Sub 1-II-1 (50g, 203.2mmol), nitrobenzene (406ml), 1-iodo-9,9-diphenyl-9H-fluorene (135.4g, 305mmol), Na₂SO₄ (28.9g, 203.2mmol), K₂CO₃ (28.1g, 203.2mmol), Cu (3.87g, 61mmol)를 상기 Sub 1-III-1의 합성예를 이용하여 생성물 70.9g (수율: 62%)을 얻었다.

[322] **(2) 중간체 Sub 1-IV-117 합성예**

[323] <반응식 44>

[324]

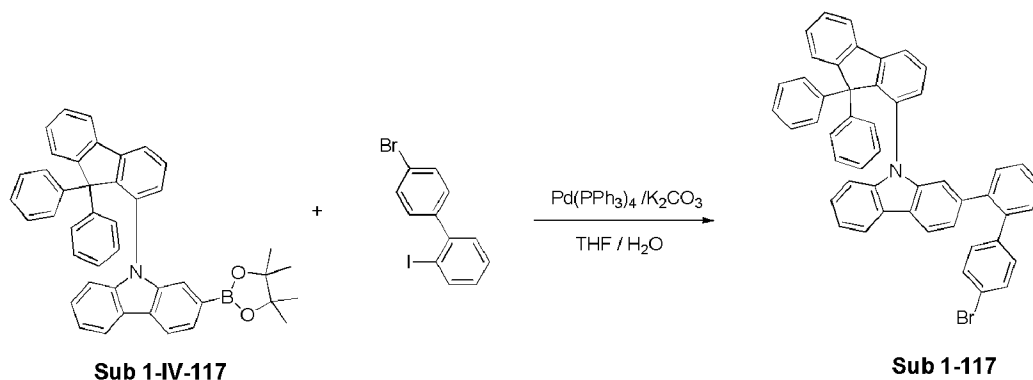


[325] 상기 합성에서 얻어진 Sub 1-III-117 (70.9g, 126mmol), DMF (794ml), Bis(pinacolato)diboron (35.2g, 138.7mmol), Pd(dppf)Cl₂ (3.09g, 3.78mmol), KOAc (37.11g, 378.1mmol)를 상기 Sub 1-IV-1의 합성예를 이용하여 생성물 51.5g (수율: 67%)을 얻었다.

[326] **(3) Sub 1-117 합성**

[327] <반응식 45>

[328]

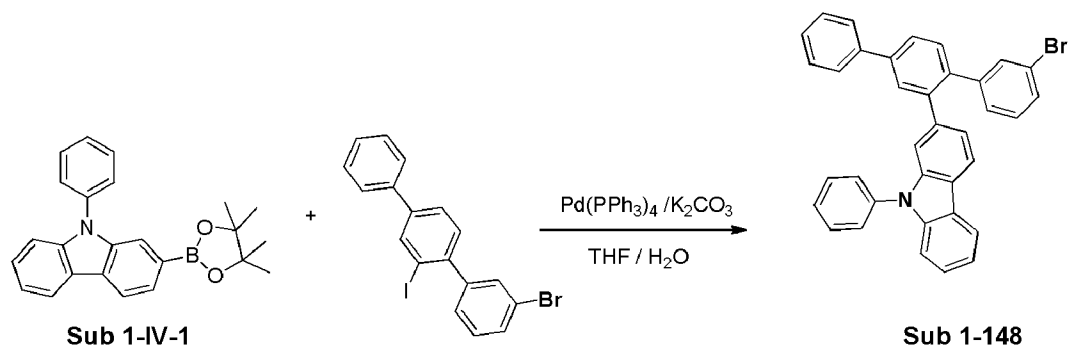


[329] 상기 합성에서 얻어진 Sub 1-IV-117 (51.5g, 84.5mmol), THF (370ml), 4'-bromo-2-iodo-1,1'-biphenyl (45.5g, 126.7mmol), Pd(PPh₃)₄ (4.88g, 4.22mmol), K₂CO₃ (35.03g, 253.5mmol), 물 (185ml)을 상기 Sub 1-1의 합성예를 이용하여 생성물 36.2g (수율: 60%)을 얻었다.

[330] **(4) Sub 1-148 합성**

[331] <반응식 46>

[332]

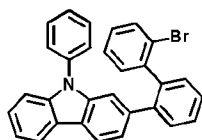


[333] 상기 합성에서 얻어진 Sub 1-IV-1(31.2 g, 84.5 mmol), THF 370 mL, 3-bromo-2'-iodo-1,1':4',1''-terphenyl(55.1g, 126.7 mmol), Pd(PPh₃)₄(4.88 g, 4.22 mmol), K₂CO₃ (35.03 g, 253.5 mmol), 물 185 mL을 Sub 1-1의 실험방법과 동일하게 실험을 하여 생성물 31.6g (수율 : 68%)를 얻었다.

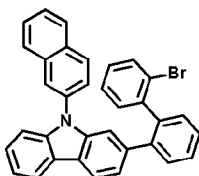
[334] 한편, Sub 1의 예시는 다음과 같으나 이에 한정되는 것은 아니며, 이들의 FD-MS(Field desorption mass spectrometry)는 하기 표 1과 같다.

[335]

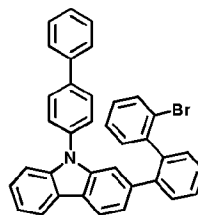
Sub 1-1



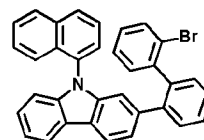
Sub 1-2



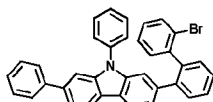
Sub 1-3



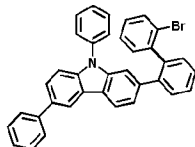
Sub 1-4



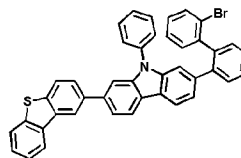
Sub 1-5



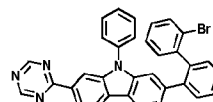
Sub 1-6



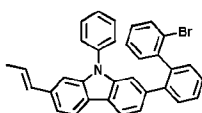
Sub 1-7



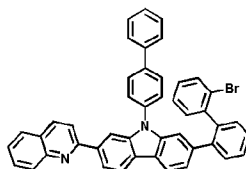
Sub 1-8



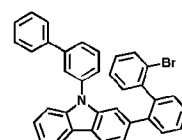
Sub 1-9



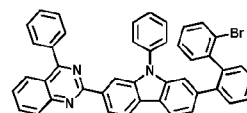
Sub 1-10



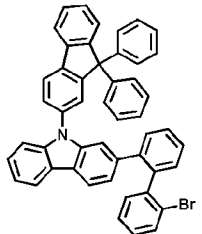
Sub 1-11



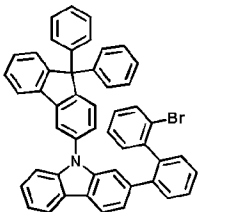
Sub 1-12



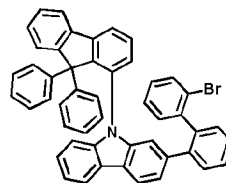
Sub 1-13



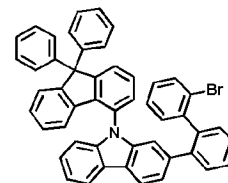
Sub 1-14



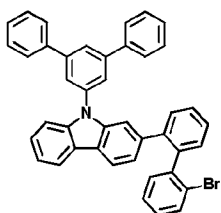
Sub 1-15



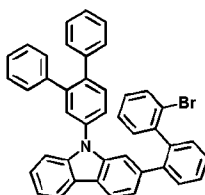
Sub 1-16



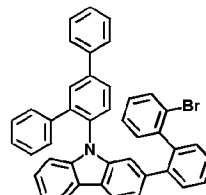
Sub 1-17



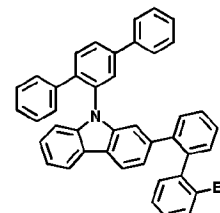
Sub 1-18



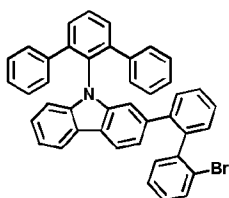
Sub 1-19



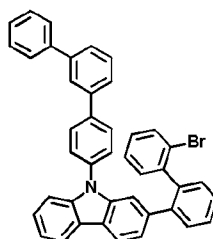
Sub 1-20



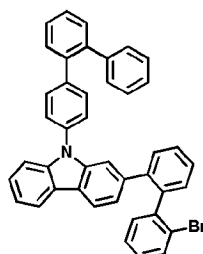
Sub 1-21



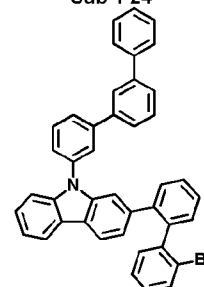
Sub 1-22



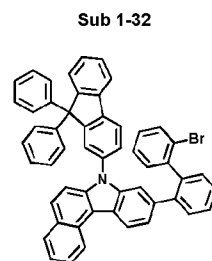
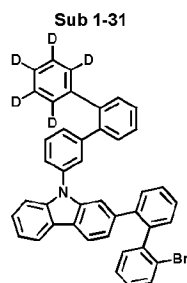
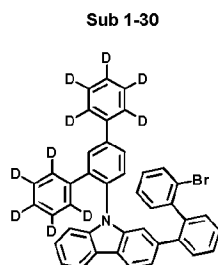
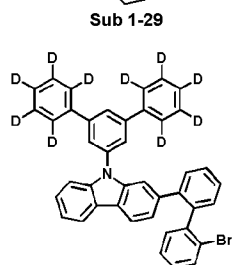
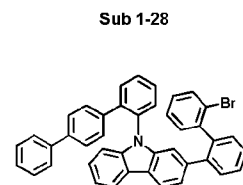
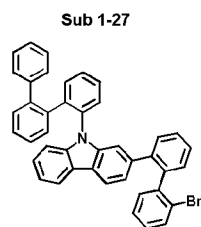
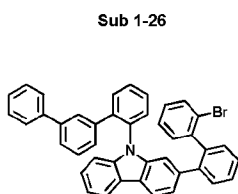
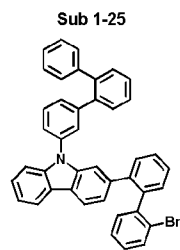
Sub 1-23



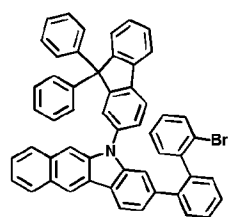
Sub 1-24



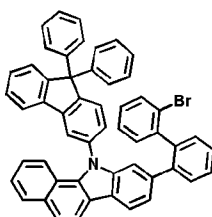
[336]



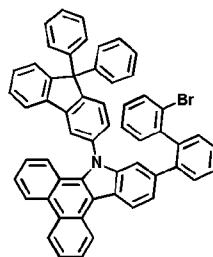
Sub 1-33



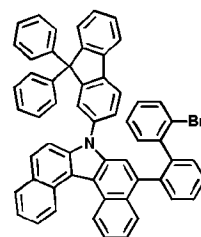
Sub 1-34



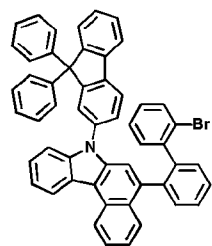
Sub 1-35



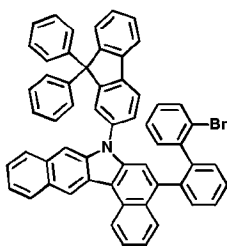
Sub 1-36



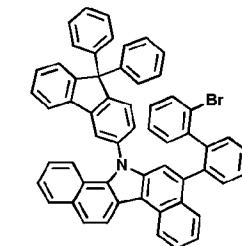
Sub 1-37



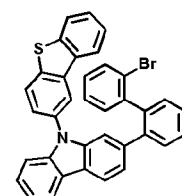
Sub 1-38



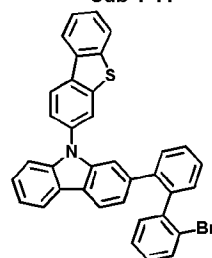
Sub 1-39



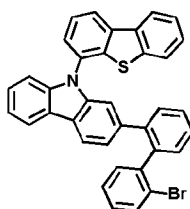
Sub 1-40



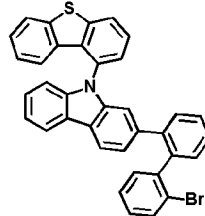
Sub 1-41



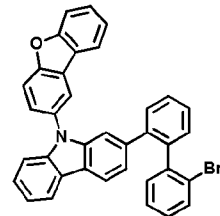
Sub 1-42



Sub 1-43

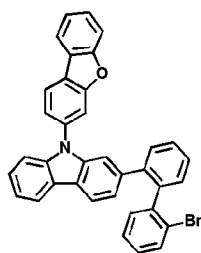


Sub 1-44

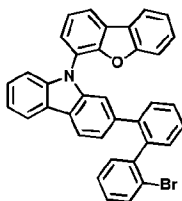


[337]

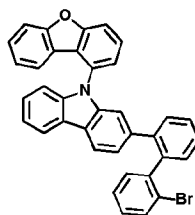
Sub 1-45



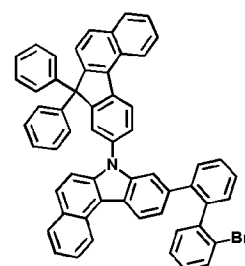
Sub 1-46



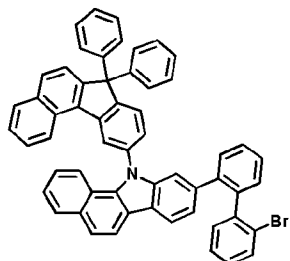
Sub 1-47



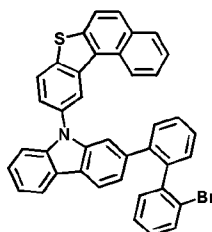
Sub 1-48



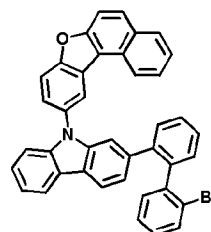
Sub 1-49



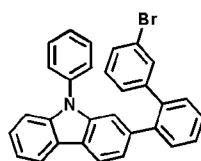
Sub 1-50



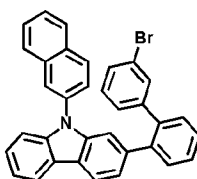
Sub 1-51



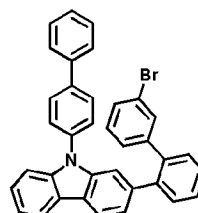
Sub 1-52



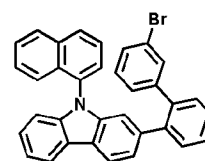
Sub 1-53



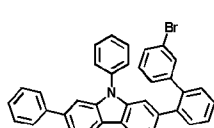
Sub 1-54



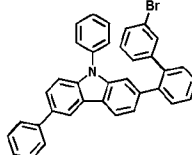
Sub 1-55



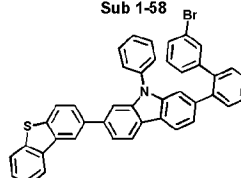
Sub 1-56



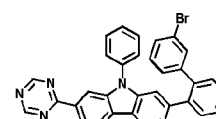
Sub 1-57



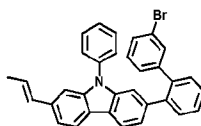
Sub 1-58



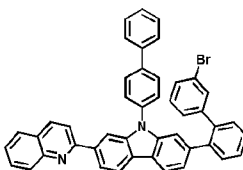
Sub 1-59



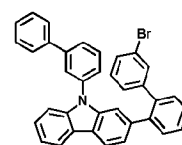
Sub 1-60



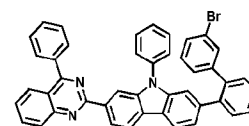
Sub 1-61



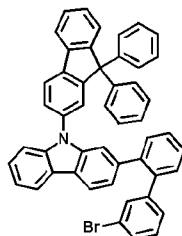
Sub 1-62



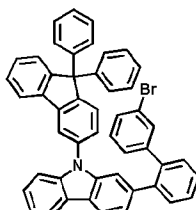
Sub 1-63



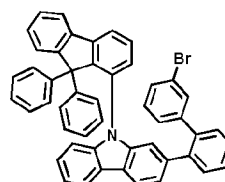
Sub 1-64



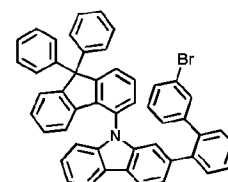
Sub 1-65



Sub 1-66

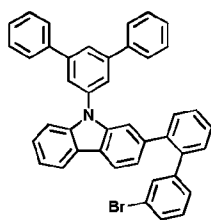


Sub 1-67

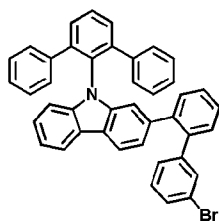


[338]

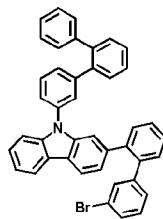
Sub 1-68



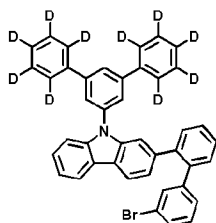
Sub 1-72



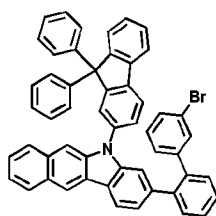
Sub 1-76



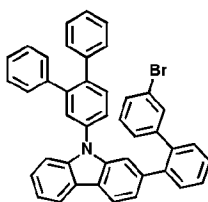
Sub 1-80



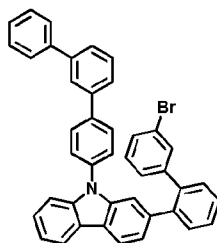
Sub 1-84



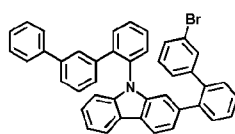
Sub 1-69



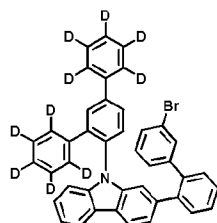
Sub 1-73



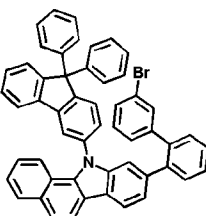
Sub 1-77



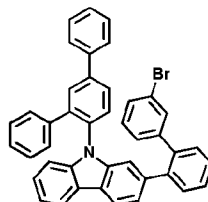
Sub 1-81



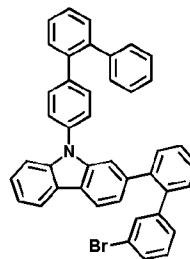
Sub 1-85



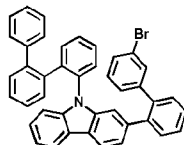
Sub 1-70



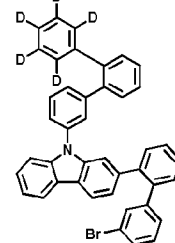
Sub 1-74



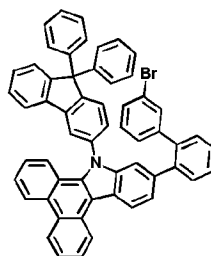
Sub 1-78



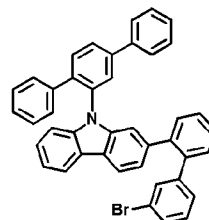
Sub 1-82



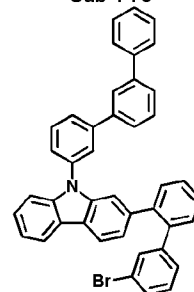
Sub 1-86



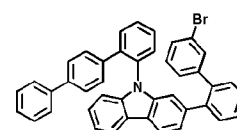
Sub 1-71



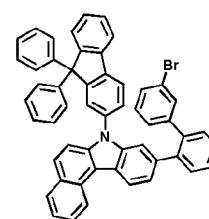
Sub 1-75



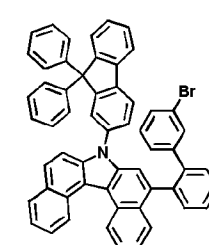
Sub 1-79



Sub 1-83

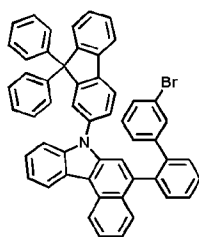


Sub 1-87

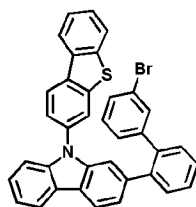


[339]

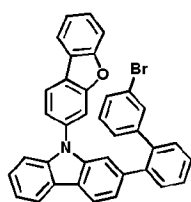
Sub 1-88



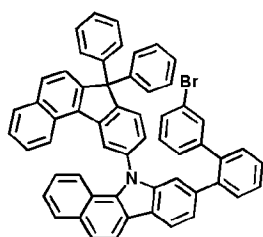
Sub 1-92



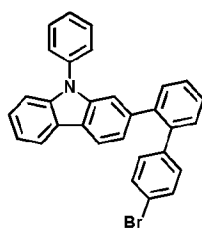
Sub 1-96



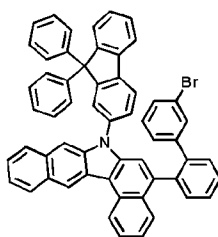
Sub 1-100



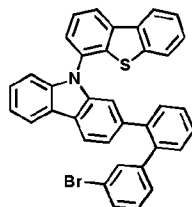
Sub 1-103



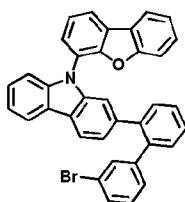
Sub 1-89



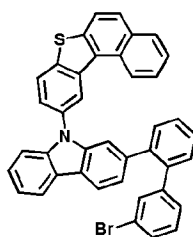
Sub 1-93



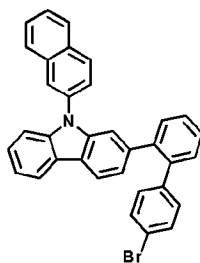
Sub 1-97



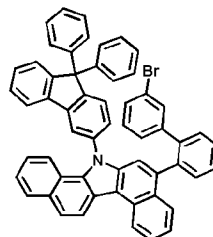
Sub 1-101



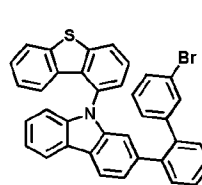
Sub 1-104



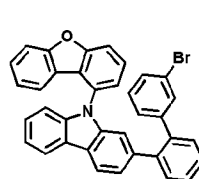
Sub 1-90



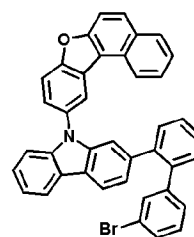
Sub 1-94



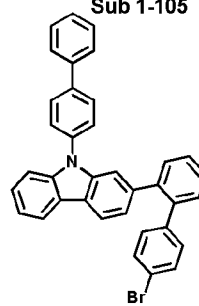
Sub 1-98



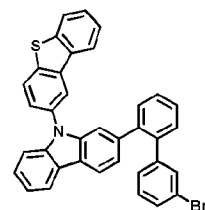
Sub 1-102



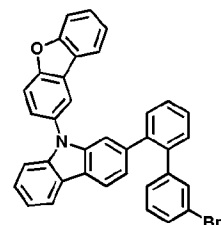
Sub 1-105



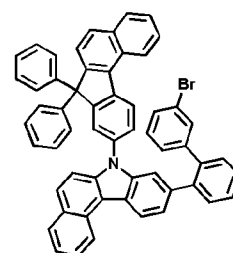
Sub 1-91



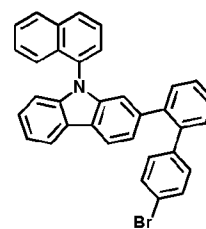
Sub 1-95



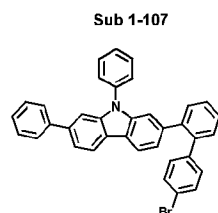
Sub 1-99



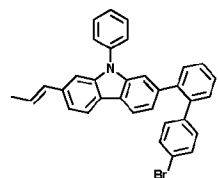
Sub 1-106



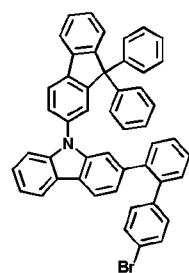
[340]



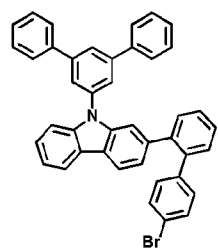
Sub 1-111



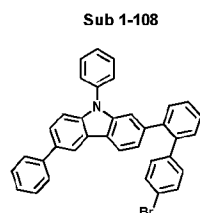
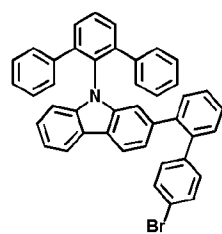
Sub 1-115



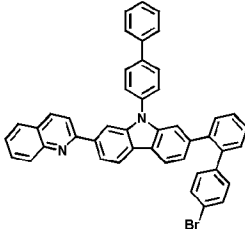
Sub 1-119



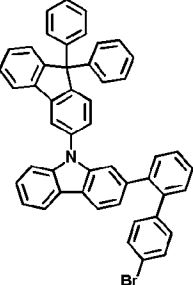
Sub 1-123



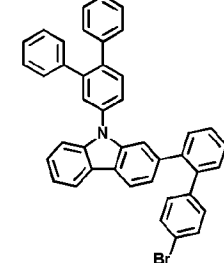
Sub 1-112



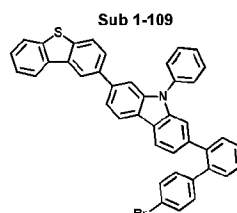
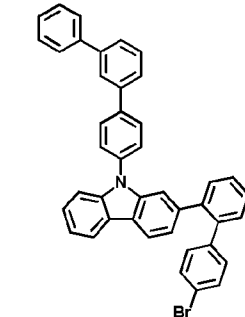
Sub 1-116



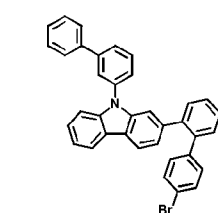
Sub 1-120



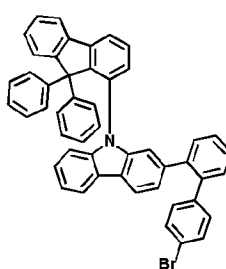
Sub 1-124



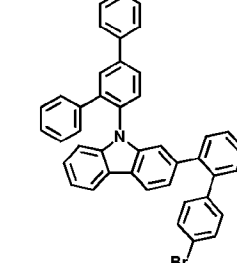
Sub 1-113



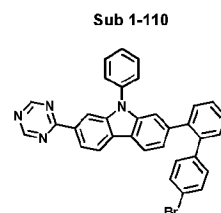
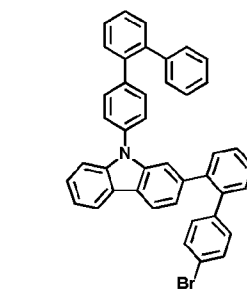
Sub 1-117



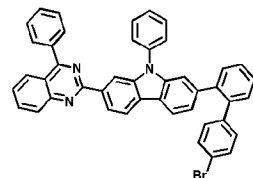
Sub 1-121



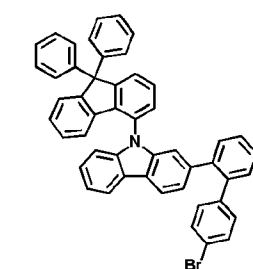
Sub 1-125



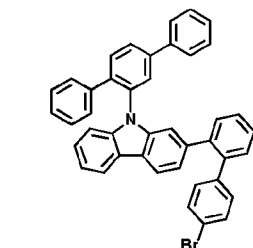
Sub 1-114



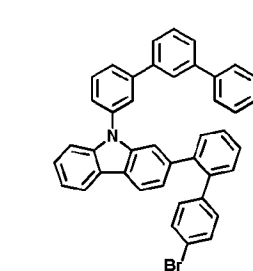
Sub 1-118



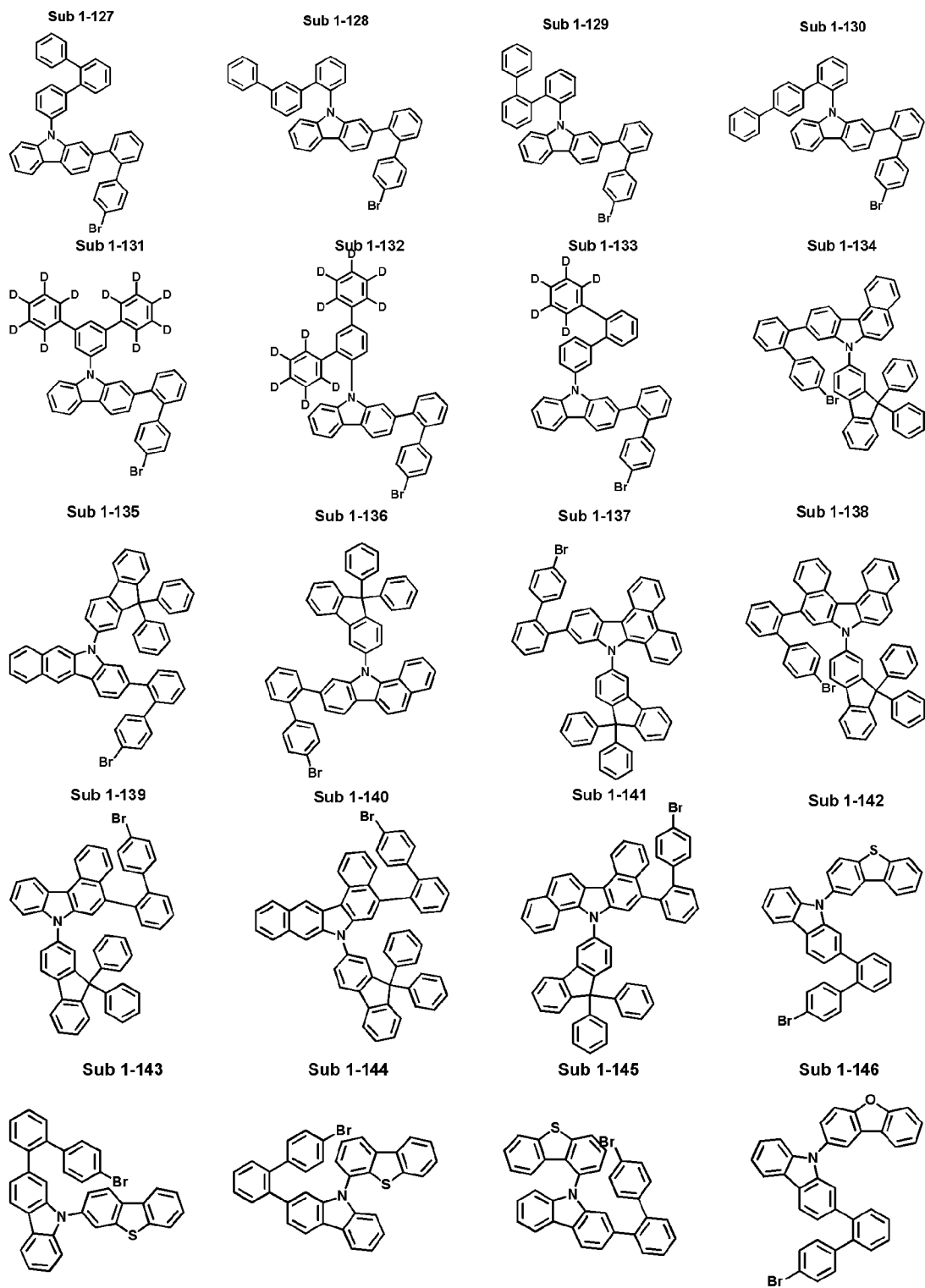
Sub 1-122



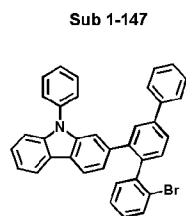
Sub 1-126



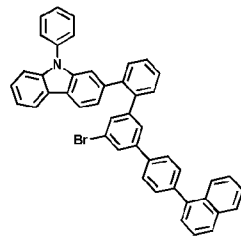
[341]



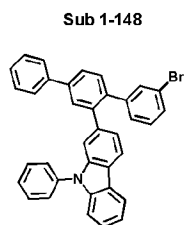
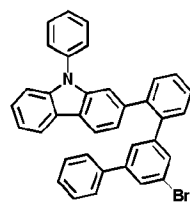
[342]



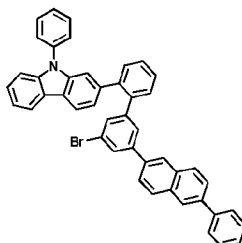
Sub 1-151



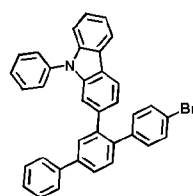
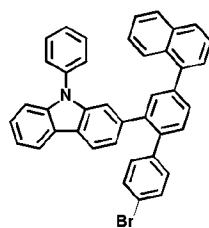
Sub 1-155



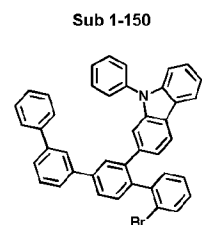
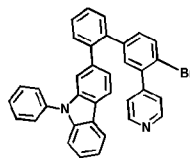
Sub 1-152



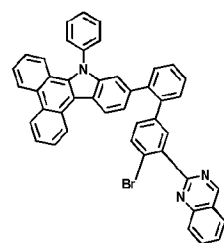
Sub 1-156



Sub 1-153



Sub 1-154



[343]

[표 1]

[344]

화합물	FD-MS	화합물	FD-MS
Sub 1-1	m/z=473.08(C ₃₀ H ₂₀ BrN=474.39)	Sub 1-2	m/z=523.09(C ₃₄ H ₂₂ BrN=524.45)
Sub 1-3	m/z=549.11(C ₃₆ H ₂₄ BrN=550.49)	Sub 1-4	m/z=523.09(C ₃₄ H ₂₂ BrN=524.45)
Sub 1-5	m/z=549.11(C ₃₆ H ₂₄ BrN=550.49)	Sub 1-6	m/z=549.11(C ₃₆ H ₂₄ BrN=550.49)
Sub 1-7	m/z=655.10(C ₄₂ H ₂₆ BrNS=656.63)	Sub 1-8	m/z=552.09(C ₃₃ H ₂₁ BrN ₄ =553.45)
Sub 1-A9	m/z=513.11(C ₃₃ H ₂₄ BrN=514.45)	Sub 1-10	m/z=676.15(C ₄₅ H ₂₉ BrN ₂ =677.63)
Sub 1-11	m/z=549.11(C ₃₆ H ₂₄ BrN=550.49)	Sub 1-12	m/z=677.15(C ₄₄ H ₂₈ BrN ₃ =678.62)
Sub 1-13	m/z=713.17(C ₄₉ H ₃₂ BrN=714.69)	Sub 1-14	m/z=713.17(C ₄₉ H ₃₂ BrN=714.69)
Sub 1-15	m/z=713.17(C ₄₉ H ₃₂ BrN=714.69)	Sub 1-16	m/z=713.17(C ₄₉ H ₃₂ BrN=714.69)
Sub 1-17	m/z=625.14(C ₄₂ H ₂₈ BrN=626.58)	Sub 1-18	m/z=625.14(C ₄₂ H ₂₈ BrN=626.58)
Sub 1-19	m/z=625.14(C ₄₂ H ₂₈ BrN=626.58)	Sub 1-20	m/z=625.14(C ₄₂ H ₂₈ BrN=626.58)
Sub 1-21	m/z=625.14(C ₄₂ H ₂₈ BrN=626.58)	Sub 1-22	m/z=625.14(C ₄₂ H ₂₈ BrN=626.58)
Sub 1-23	m/z=625.14(C ₄₂ H ₂₈ BrN=626.58)	Sub 1-24	m/z=625.14(C ₄₂ H ₂₈ BrN=626.58)
Sub 1-25	m/z=625.14(C ₄₂ H ₂₈ BrN=626.58)	Sub 1-26	m/z=625.14(C ₄₂ H ₂₈ BrN=626.58)
Sub 1-27	m/z=625.14(C ₄₂ H ₂₈ BrN=626.58)	Sub 1-28	m/z=625.14(C ₄₂ H ₂₈ BrN=626.58)
Sub 1-29	m/z=635.20(C ₄₂ H ₁₈ D ₁₀ BrN=636.)	Sub 1-30	m/z=635.20(C ₄₂ H ₁₈ D ₁₀ BrN=636.64)
Sub 1-31	m/z=630.17(C ₄₂ H ₂₃ D ₅ BrN=631.6)	Sub 1-32	m/z=763.19(C ₅₃ H ₃₄ BrN=764.75)
Sub 1-33	m/z=763.19(C ₅₃ H ₃₄ BrN=764.75)	Sub 1-34	m/z=763.19(C ₅₃ H ₃₄ BrN=764.75)
Sub 1-35	m/z=813.20(C ₅₇ H ₃₆ BrN=814.81)	Sub 1-36	m/z=813.20(C ₅₇ H ₃₆ BrN=814.81)
Sub 1-37	m/z=763.19(C ₅₃ H ₃₄ BrN=764.75)	Sub 1-38	m/z=813.20(C ₅₇ H ₃₆ BrN=814.81)
Sub 1-39	m/z=813.20(C ₅₇ H ₃₆ BrN=814.81)	Sub 1-40	m/z=579.07(C ₃₆ H ₂₂ BrNS=580.54)
Sub 1-41	m/z=579.07(C ₃₆ H ₂₂ BrNS=580.54)	Sub 1-42	m/z=579.07(C ₃₆ H ₂₂ BrNS=580.54)
Sub 1-43	m/z=579.07(C ₃₆ H ₂₂ BrNS=580.54)	Sub 1-44	m/z=563.09(C ₃₆ H ₂₂ BrNO=564.47)
Sub 1-45	m/z=563.1(C ₃₆ H ₂₂ BrNO=564.47)	Sub 1-46	m/z=563.09(C ₃₆ H ₂₂ BrNO=564.47)
Sub 1-47	m/z=563.1(C ₃₆ H ₂₂ BrNO=564.47)	Sub 1-48	m/z=813.20(C ₅₇ H ₃₆ BrN=814.81)
Sub 1-49	m/z=813.20(C ₅₇ H ₃₆ BrN=814.81)	Sub 1-50	m/z=629.08(C ₄₀ H ₂₄ BrNS=630.59)
Sub 1-51	m/z=613.10(C ₄₀ H ₂₄ BrNO=614.53)	Sub 1-52	m/z=523.09(C ₃₄ H ₂₂ BrN=524.45)
Sub 1-53	m/z=473.08(C ₃₀ H ₂₀ BrN=474.39)	Sub 1-54	m/z=523.09(C ₃₄ H ₂₂ BrN=524.45)
Sub 1-55	m/z=549.11(C ₃₆ H ₂₄ BrN=550.49)	Sub 1-56	m/z=549.11(C ₃₆ H ₂₄ BrN=550.49)
Sub 1-57	m/z=549.11(C ₃₆ H ₂₄ BrN=550.49)	Sub 1-58	m/z=552.09(C ₃₃ H ₂₁ BrN ₄ =553.45)
Sub 1-59	m/z=655.10(C ₄₂ H ₂₆ BrNS=656.63)	Sub 1-60	m/z=676.15(C ₄₅ H ₂₉ BrN ₂ =677.63)

[345]

Sub 1-61	m/z=513.11(C ₃₃ H ₂₄ BrN=514.45)	Sub 1-62	m/z=677.15(C ₄₄ H ₂₈ BrN ₃ =678.62)
Sub 1-63	m/z=549.11(C ₃₆ H ₂₄ BrN=550.49)	Sub 1-64	m/z=713.17(C ₄₉ H ₃₂ BrN=714.69)
Sub 1-65	m/z=713.17(C ₄₉ H ₃₂ BrN=714.69)	Sub 1-66	m/z=713.17(C ₄₉ H ₃₂ BrN=714.69)
Sub 1-67	m/z=713.17(C ₄₉ H ₃₂ BrN=714.69)	Sub 1-68	m/z=625.14(C ₄₂ H ₂₈ BrN=626.58)
Sub 1-69	m/z=625.14(C ₄₂ H ₂₈ BrN=626.58)	Sub 1-70	m/z=625.14(C ₄₂ H ₂₈ BrN=626.58)
Sub 1-71	m/z=625.14(C ₄₂ H ₂₈ BrN=626.58)	Sub 1-72	m/z=625.14(C ₄₂ H ₂₈ BrN=626.58)
Sub 1-73	m/z=625.14(C ₄₂ H ₂₈ BrN=626.58)	Sub 1-74	m/z=625.14(C ₄₂ H ₂₈ BrN=626.58)
Sub 1-75	m/z=625.14(C ₄₂ H ₂₈ BrN=626.58)	Sub 1-76	m/z=625.14(C ₄₂ H ₂₈ BrN=626.58)
Sub 1-77	m/z=625.14(C ₄₂ H ₂₈ BrN=626.58)	Sub 1-78	m/z=625.14(C ₄₂ H ₂₈ BrN=626.58)
Sub 1-79	m/z=625.14(C ₄₂ H ₂₈ BrN=626.58)	Sub 1-80	m/z=635.20(C ₄₂ H ₁₈ D ₁₀ BrN=636.64)
Sub 1-81	m/z=635.20(C ₄₂ H ₁₈ D ₁₀ BrN=636.)	Sub 1-82	m/z=763.19(C ₅₃ H ₃₄ BrN=764.75)
Sub 1-83	m/z=630.17(C ₄₂ H ₂₃ D ₅ BrN=631.6)	Sub 1-84	m/z=763.19(C ₅₃ H ₃₄ BrN=764.75)
Sub 1-85	m/z=763.19(C ₅₃ H ₃₄ BrN=764.75)	Sub 1-86	m/z=813.20(C ₅₇ H ₃₆ BrN=814.81)
Sub 1-87	m/z=813.20(C ₅₇ H ₃₆ BrN=814.81)	Sub 1-88	m/z=813.20(C ₅₇ H ₃₆ BrN=814.81)
Sub 1-89	m/z=763.19(C ₅₃ H ₃₄ BrN=764.75)	Sub 1-90	m/z=579.07(C ₃₆ H ₂₂ BrNS=580.54)
Sub 1-91	m/z=813.20(C ₅₇ H ₃₆ BrN=814.81)	Sub 1-92	m/z=579.07(C ₃₆ H ₂₂ BrNS=580.54)
Sub 1-93	m/z=579.07(C ₃₆ H ₂₂ BrNS=580.54)	Sub 1-94	m/z=563.09(C ₃₆ H ₂₂ BrNO=564.47)
Sub 1-95	m/z=579.07(C ₃₆ H ₂₂ BrNS=580.54)	Sub 1-96	m/z=563.09(C ₃₆ H ₂₂ BrNO=564.47)
Sub 1-97	m/z=563.1(C ₃₆ H ₂₂ BrNO=564.47)	Sub 1-98	m/z=813.20(C ₅₇ H ₃₆ BrN=814.81)
Sub 1-99	m/z=563.1(C ₃₆ H ₂₂ BrNO=564.47)	Sub 1-100	m/z=629.08(C ₄₀ H ₂₄ BrNS=630.59)
Sub 1-101	m/z=813.20(C ₅₇ H ₃₆ BrN=814.81)	Sub 1-102	m/z=523.09(C ₃₄ H ₂₂ BrN=524.45)
Sub 1-103	m/z=613.10(C ₄₀ H ₂₄ BrNO=614.53)	Sub 1-104	m/z=523.09(C ₃₄ H ₂₂ BrN=524.45)
Sub 1-105	m/z=473.08(C ₃₀ H ₂₀ BrN=474.39)	Sub 1-106	m/z=549.11(C ₃₆ H ₂₄ BrN=550.49)
Sub 1-107	m/z=549.11(C ₃₆ H ₂₄ BrN=550.49)	Sub 1-108	m/z=552.09(C ₃₃ H ₂₁ BrN ₄ =553.45)
Sub 1-109	m/z=549.11(C ₃₆ H ₂₄ BrN=550.49)	Sub 1-110	m/z=676.15(C ₄₅ H ₂₉ BrN ₂ =677.63)
Sub 1-111	m/z=655.10(C ₄₂ H ₂₆ BrNS=656.63)	Sub 1-112	m/z=677.15(C ₄₄ H ₂₈ BrN ₃ =678.62)
Sub 1-113	m/z=513.11(C ₃₃ H ₂₄ BrN=514.45)	Sub 1-114	m/z=713.17(C ₄₉ H ₃₂ BrN=714.69)
Sub 1-115	m/z=549.11(C ₃₆ H ₂₄ BrN=550.49)	Sub 1-116	m/z=713.17(C ₄₉ H ₃₂ BrN=714.69)
Sub 1-117	m/z=713.17(C ₄₉ H ₃₂ BrN=714.69)	Sub 1-118	m/z=625.14(C ₄₂ H ₂₈ BrN=626.58)
Sub 1-119	m/z=713.17(C ₄₉ H ₃₂ BrN=714.69)	Sub 1-120	m/z=625.14(C ₄₂ H ₂₈ BrN=626.58)
Sub 1-121	m/z=625.14(C ₄₂ H ₂₈ BrN=626.58)	Sub 1-122	m/z=625.14(C ₄₂ H ₂₈ BrN=626.58)

[346]

Sub 1-123	m/z=625.14(C ₄₂ H ₂₈ BrN=626.58)	Sub 1-124	m/z=625.14(C ₄₂ H ₂₈ BrN=626.58)
Sub 1-125	m/z=625.14(C ₄₂ H ₂₈ BrN=626.58)	Sub 1-126	m/z=625.14(C ₄₂ H ₂₈ BrN=626.58)
Sub 1-127	m/z=625.14(C ₄₂ H ₂₈ BrN=626.58)	Sub 1-128	m/z=625.14(C ₄₂ H ₂₈ BrN=626.58)
Sub 1-129	m/z=625.14(C ₄₂ H ₂₈ BrN=626.58)	Sub 1-130	m/z=635.20(C ₄₂ H ₁₈ D ₁₀ BrN=636.64)
Sub 1-131	m/z=625.14(C ₄₂ H ₂₈ BrN=626.58)	Sub 1-132	m/z=763.19(C ₅₃ H ₃₄ BrN=764.75)
Sub 1-133	m/z=635.20(C ₄₂ H ₁₈ D ₁₀ BrN=636.)	Sub 1-134	m/z=763.19(C ₅₃ H ₃₄ BrN=764.75)
Sub 1-135	m/z=630.17(C ₄₂ H ₂₃ D ₅ BrN=631.6)	Sub 1-136	m/z=813.20(C ₅₇ H ₃₆ BrN=814.81)
Sub 1-137	m/z=763.19(C ₅₃ H ₃₄ BrN=764.75)	Sub 1-138	m/z=813.20(C ₅₇ H ₃₆ BrN=814.81)
Sub 1-139	m/z=813.20(C ₅₇ H ₃₆ BrN=814.81)	Sub 1-140	m/z=579.07(C ₃₆ H ₂₂ BrNS=580.54)
Sub 1-141	m/z=763.19(C ₅₃ H ₃₄ BrN=764.75)	Sub 1-142	m/z=579.07(C ₃₆ H ₂₂ BrNS=580.54)
Sub 1-143	m/z=813.20(C ₅₇ H ₃₆ BrN=814.81)	Sub 1-144	m/z=563.09(C ₃₆ H ₂₂ BrNO=564.47)
Sub 1-145	m/z=579.07(C ₃₆ H ₂₂ BrNS=580.54)	Sub 1-146	m/z=563.09(C ₃₆ H ₂₂ BrNO=564.47)
Sub 1-147	m/z=549.11(C ₃₆ H ₂₄ BrN=550.49)	Sub 1-148	m/z=549.11(C ₃₆ H ₂₄ BrN=550.49)
Sub 1-149	m/z=549.11(C ₃₆ H ₂₄ BrN=550.49)	Sub 1-150	m/z=625.14(C ₄₂ H ₂₈ BrN=626.58)
Sub 1-151	m/z=675.16(C ₄₆ H ₃₀ BrN=646.64)	Sub 1-152	m/z=675.16(C ₄₆ H ₃₀ BrN=646.64)
Sub 1-153	m/z=550.10(C ₃₅ H ₂₃ BrN ₂ =551.47)	Sub 1-154	m/z=701.15(C ₄₆ H ₂₈ BrN ₃ =702.64)
Sub 1-155	m/z=549.11(C ₃₆ H ₂₄ BrN=550.49)	Sub 1-156	m/z=599.12(C ₄₀ H ₂₆ BrN=600.55)

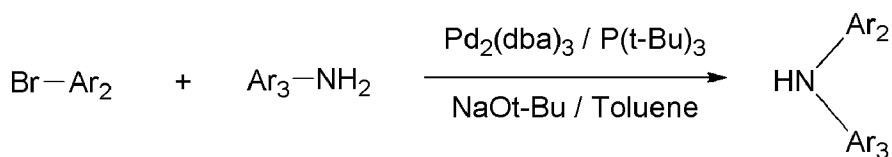
[347]

[348] **II. Sub 2의 합성예**

[349] 상기 반응식 1의 Sub 2는 하기 반응식 46의 반응경로에 의해 합성될 수 있으나 이에 한정되는 것은 아니다.

[350] <반응식 47>

[351]

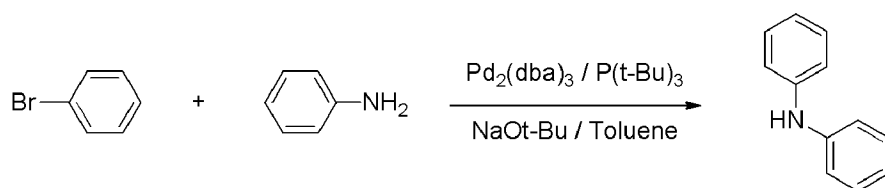
**Sub 2**

[352] Sub 2에 속하는 구체적인 화합물의 합성예는 다음과 같다.

[353] **1. Sub 2-1 합성예**

[354] <반응식 48>

[355]

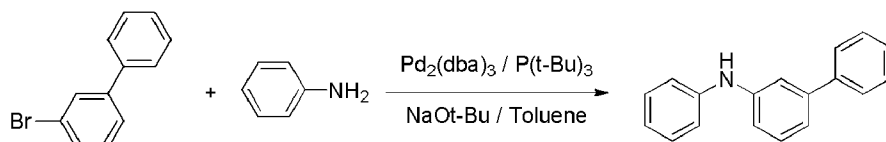
**Sub 2-1**

[356] 등근바닥플라스크에 bromobenzene (37.1g, 236.2mmol)을 넣고 toluene (2200ml)으로 녹인 후 aniline (20g, 214.8mmol), $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (9.83g, 10.7mmol), $\text{P}(t\text{-Bu})_3$ (4.34g, 21.5mmol), NaOt-Bu (62g, 644.3mmol)을 순서대로 첨가하고 100°C 에서 교반하였다. 반응이 완료되면 ether와 물로 추출한 후 유기층을 MgSO_4 로 건조하고 농축한 후 생성된 화합물을 silicagel column 및 재결정하여 생성물 28g (수율: 77%)을 얻었다.

[357] **2. Sub 2-3 합성예**

[358] <반응식 49>

[359]



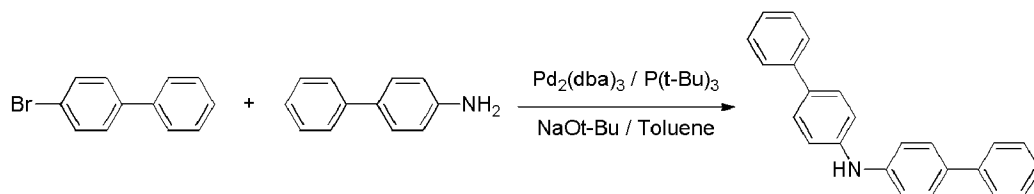
Sub 2-3

[360] 3-bromo-1,1'-biphenyl (55.1g, 236.2mmol), aniline (20g, 214.8mmol), $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (9.83g, 10.7mmol), $\text{P}(t\text{-Bu})_3$ (4.34g, 21.5mmol), NaOt-Bu (62g, 644.3mmol), toluene (2200ml)을 상기 Sub 2-1의 합성예를 이용하여 생성물 41.1g (수율: 78%)을 얻었다.

[361] **3. Sub 2-4 합성예**

[362] <반응식 50>

[363]



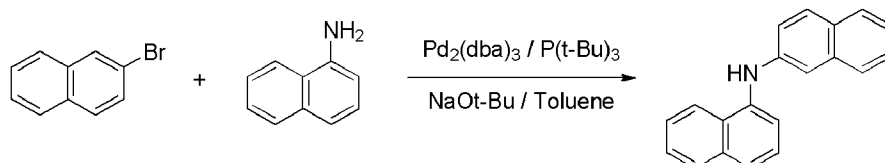
Sub 2-4

[364] 4-bromo-1,1'-biphenyl (37.88g, 162.5mmol), [1,1'-biphenyl]-4-amine (25g, 147.7mmol), $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (6.76g, 7.4mmol), $\text{P}(t\text{-Bu})_3$ (3g, 14.8mmol), NaOt-Bu (66.62g, 693.2mmol), toluene을 상기 Sub 2-1의 합성예를 이용하여 생성물 35.6g (수율: 75%)을 얻었다.

[365] **4. Sub 2-7 합성예**

[366] <반응식 51>

[367]



Sub 2-7

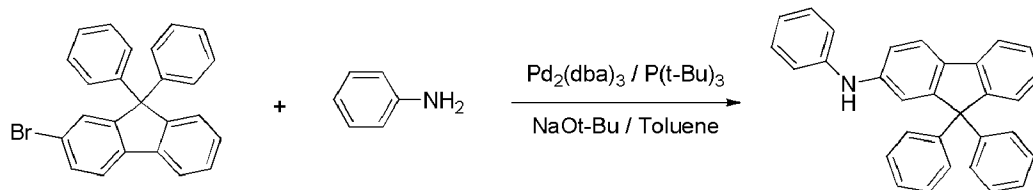
[368] 2-bromonaphthalene(39.8g, 192.1mmol), naphthalen-1-amine (25g, 174.6mmol), $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (8.0g, 8.73mmol), $\text{P}(t\text{-Bu})_3$ (3.53g, 17.5mmol), NaOt-Bu (50.3g, 523.8mmol),

toluene (1800ml)을 상기 Sub 2-1의 합성예를 이용하여 생성물 36.2g (수율: 77%)을 얻었다.

[369] **5. Sub 2-9 합성예**

[370] <반응식 52>

[371]



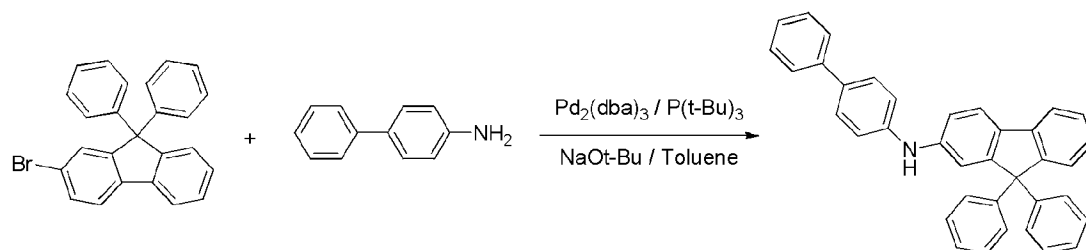
Sub 2-9

[372] 2-bromo-9,9-diphenyl-9H-fluorene (93.9g, 236.2mmol), toluene (2250ml), aniline (20g, 214.8mmol), $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (9.83g, 10.7mmol), $\text{P}(t\text{-Bu})_3$ (4.34g, 21.5mmol), NaOt-Bu (62g, 644.3mmol)을 상기 Sub 2-1의 합성예를 이용하여 생성물 63.3g (수율: 72%)을 얻었다.

[373] **6. Sub 2-12 합성예**

[374] <반응식 53>

[375]



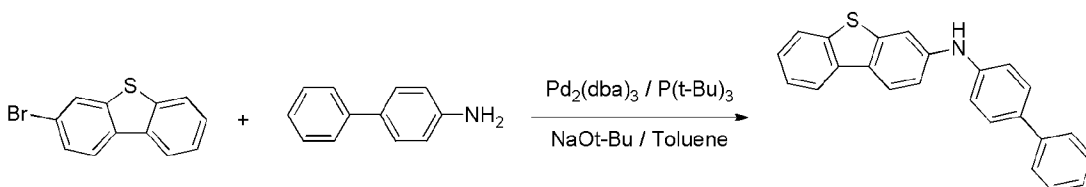
Sub 2-12

[376] 2-bromo-9,9-diphenyl-9H-fluorene (64.6g, 162.5mmol), toluene (1550ml), [1,1'-biphenyl]-4-amine (25g, 147.7mmol), $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (6.76g, 162.5mmol), $\text{P}(t\text{-Bu})_3$ (3g, 14.8mmol), NaOt-Bu (42.6g, 443.2mmol)을 상기 Sub 2-1의 합성예를 이용하여 생성물 53.8g (수율: 75%)을 얻었다.

[377] **7. Sub 2-13 합성예**

[378] <반응식 54>

[379]



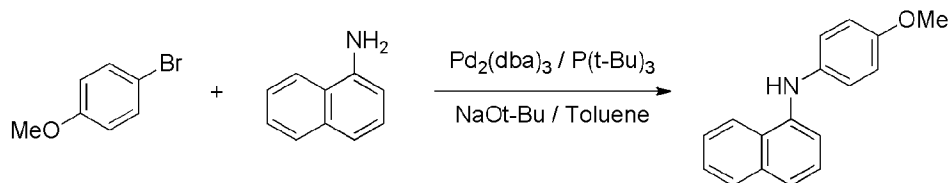
Sub 2-13

[380] 3-bromodibenzo[b,d]thiophene (42.8g, 162.5mmol), toluene (1550ml), [1,1'-biphenyl]-4-amine (25g, 147.7mmol), $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (6.76g, 162.5mmol), $\text{P}(t\text{-Bu})_3$ (3g, 14.8mmol), NaOt-Bu (42.6g, 443.2mmol)을 상기 Sub 2-1의 합성예를 이용하여 생성물 37.9g (수율: 73%)을 얻었다.

[381] **8. Sub 2-17 합성 예**

[382] <반응식 55>

[383]

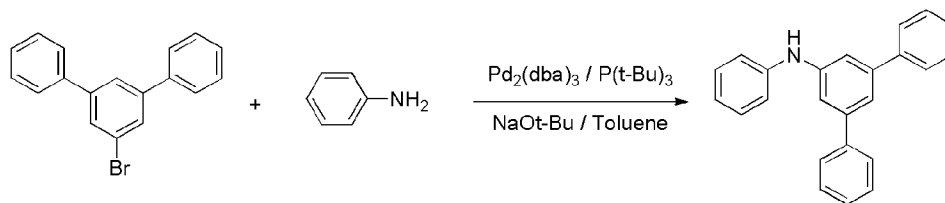
**Sub 2-17**

[384] 1-bromo-4-methoxybenzene (36g, 192.1mmol), naphthalen-1-amine (25g, 174.6mmol), $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (8.0g, 8.73mmol), $\text{P}(\text{t-Bu})_3$ (3.53g, 17.5mmol), NaOt-Bu (50.3g, 523.8mmol), toluene (1800ml)을 상기 Sub 2-1의 합성예를 이용하여 생성물 32.2g (수율: 74%)을 얻었다.

[385] **9. Sub 2-26 합성 예**

[386] <반응식 56>

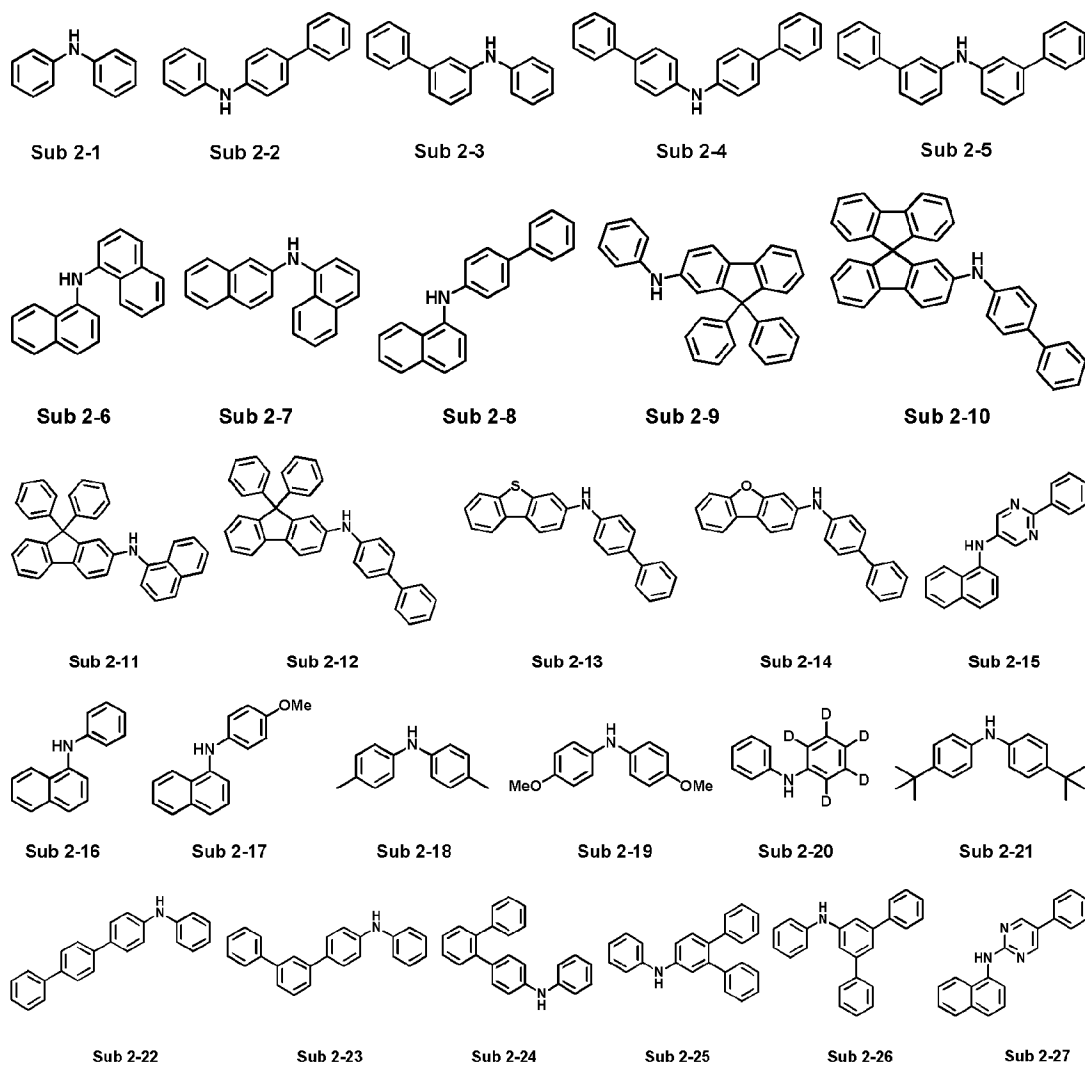
[387]

**Sub 2-26**

[388] 5'-bromo-1,1':3',1''-terphenyl (73.04g, 236.2mmol), aniline (20g, 214.8mmol), $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (9.83g, 10.7mmol), $\text{P}(\text{t-Bu})_3$ (4.34g, 21.5mmol), NaOt-Bu (62g, 644.3mmol), toluene (2250ml)을 상기 Sub 2-1의 합성예를 이용하여 생성물 49g (수율: 71%)을 얻었다.

[389] 한편, Sub 2의 예시는 다음과 같으나 이에 한정되는 것은 아니며, 이들의 FD-MS는 하기 표 2와 같다.

[390]



[391]

[표 2]

[392]

화합물	FD-MS	화합물	FD-MS
Sub 2-1	m/z=169.09(C ₁₂ H ₁₁ N=169.22)	Sub 2-2	m/z=245.12(C ₁₈ H ₁₅ N=245.32)
Sub 2-3	m/z=245.12(C ₁₈ H ₁₅ N=245.32)	Sub 2-4	m/z=321.15(C ₂₄ H ₁₉ N=321.41)
Sub 2-5	m/z=321.15(C ₂₄ H ₁₉ N=321.41)	Sub 2-6	m/z=269.12(C ₂₀ H ₁₅ N=269.34)
Sub 2-7	m/z=269.12(C ₂₀ H ₁₅ N=269.34)	Sub 2-8	m/z=295.14(C ₂₂ H ₁₇ N=295.38)
Sub 2-9	m/z=409.18(C ₃₁ H ₂₃ N=409.52)	Sub 2-10	m/z=483.20(C ₃₇ H ₂₅ N=483.60)
Sub 2-11	m/z=459.20(C ₃₅ H ₂₅ N=459.58)	Sub 2-12	m/z=485.21(C ₃₇ H ₂₇ N=485.62)
Sub 2-13	m/z=351.11(C ₃₄ H ₁₇ NS=351.46)	Sub 2-14	m/z=335.13(C ₂₄ H ₁₇ NO=335.40)
Sub 2-15	m/z=297.13(C ₂₀ H ₁₅ N ₃ =297.35)	Sub 2-16	m/z=219.10(C ₁₆ H ₁₃ N=219.28)
Sub 2-17	m/z=249.12(C ₁₇ H ₁₅ NO=249.31)	Sub 2-18	m/z=197.12(C ₁₄ H ₁₅ N=197.28)
Sub 2-19	m/z=229.11(C ₁₄ H ₁₅ NO ₂ =229.27)	Sub 2-20	m/z=174.12(C ₁₂ H ₆ D ₅ N=174.25)
Sub 2-21	m/z=281.21(C ₂₀ H ₂₇ N=281.44)	Sub 2-22	m/z=321.15(C ₂₄ H ₁₉ N=321.41)
Sub 2-23	m/z=321.15(C ₂₄ H ₁₉ N=321.41)	Sub 2-24	m/z=321.15(C ₂₄ H ₁₉ N=321.41)
Sub 2-25	m/z=321.15(C ₂₄ H ₁₉ N=321.41)	Sub 2-26	m/z=321.15(C ₂₄ H ₁₉ N=321.41)
Sub 2-27	m/z=297.13(C ₂₀ H ₁₅ N ₃ =297.35)		

[393]

[394]

III. 최종생성물(Final Products)의 합성예

[395]

Sub 2 (1 당량)를 둥근바닥플라스크에 toluene으로 녹인 후에, Sub 1 (1.1 당량), Pd₂(dba)₃ (0.05 당량), P(*t*-Bu)₃ (0.1 당량), NaOt-Bu (3 당량)을 첨가하고 100°C에서 교반하였다. 반응이 완료되면 CH₂Cl₂와 물로 추출한 후 유기층을 MgSO₄로 건조하고 농축한 후 생성된 화합물을 silicagel column 및 재결정하여 최종생성물(Final products)을 얻었다.

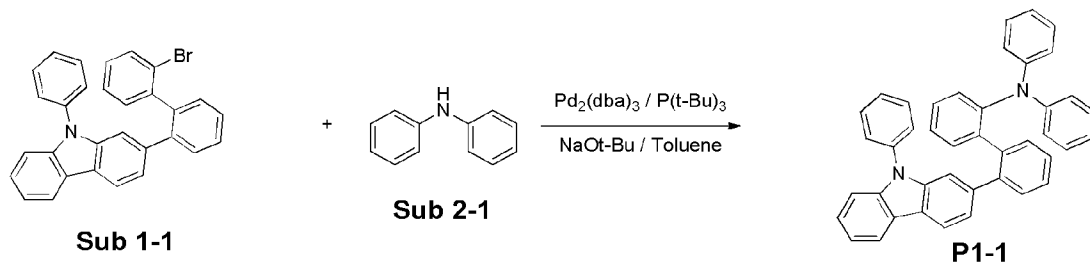
[396]

1. Product P1-1 합성예

[397]

<반응식 57>

[398]



[399]

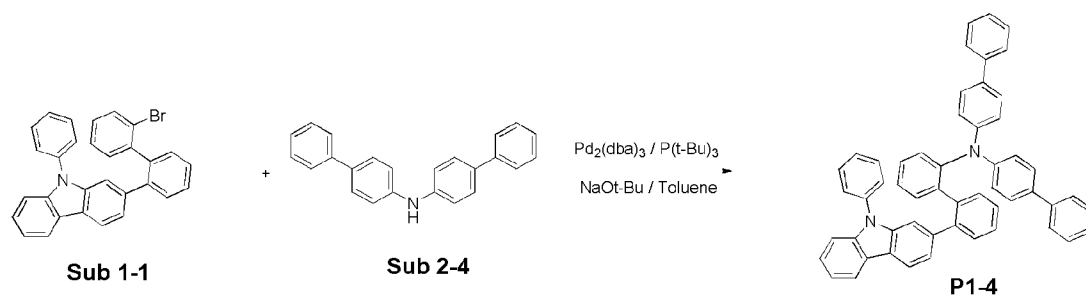
Sub 2-1 (8g, 47.3mmol)을 둥근바닥플라스크에 넣고 toluene (500ml)으로 녹인 후에, Sub 1-1 (24.7g, 52.0mmol), Pd₂(dba)₃ (2.2g, 2.4mmol), P(*t*-Bu)₃ (1g, 4.73mmol), NaOt-Bu (13.6g, 141.8mmol)을 첨가하고 100°C에서 교반하였다. 반응이 완료되면 CH₂Cl₂와 물로 추출한 후 유기층을 MgSO₄로 건조하고 농축한 후 생성된 화합물을 silicagel column 및 재결정하여 생성물 20.2g (수율: 76%)을 얻었다.

[400]

2. Product P1-4 합성예

[401] <반응식 58>

[402]

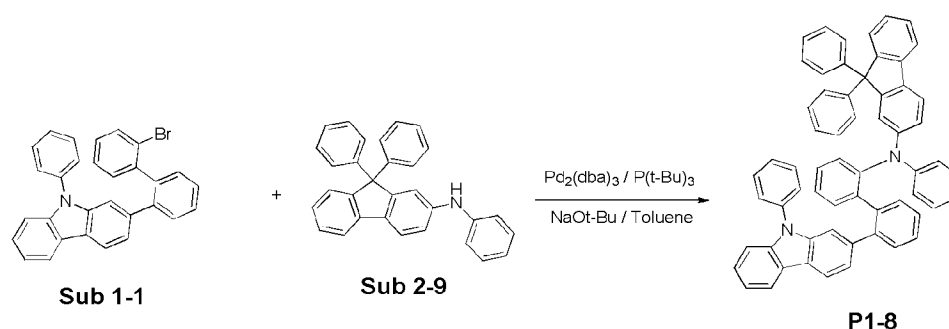


[403] Sub 2-4 (8g, 24.9mmol)에 Sub 1-1 (13g, 27.4mmol), $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (1.14g, 1.24mmol), $\text{P}(\text{t-Bu})_3$ (0.5g, 2.49mmol), NaOt-Bu (7.17g, 74.7mmol), toluene (265ml)을 상기 Product P1-1의 합성예를 이용하여 생성물 13g (수율: 73%)을 얻었다.

[404] **3. Product P1-8 합성예**

[405] <반응식 59>

[406]

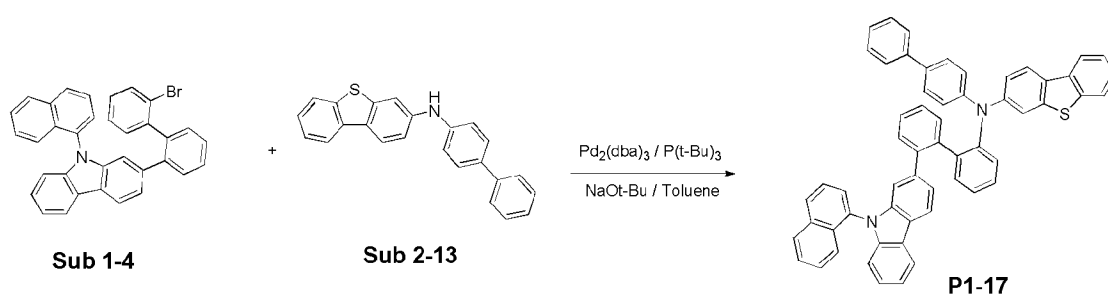


[407] Sub 2-9 (10g, 24.4mmol)에 Sub 1-1 (12.7g, 26.9mmol), $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (1.12g, 1.22mmol), $\text{P}(\text{t-Bu})_3$ (0.5g, 2.44mmol), NaOt-Bu (7.04g, 73.3mmol), toluene (260ml)을 상기 Product P1-1의 합성예를 이용하여 생성물 15.1g (수율: 77%)을 얻었다.

[408] **4. Product P1-17 합성예**

[409] <반응식 60>

[410]

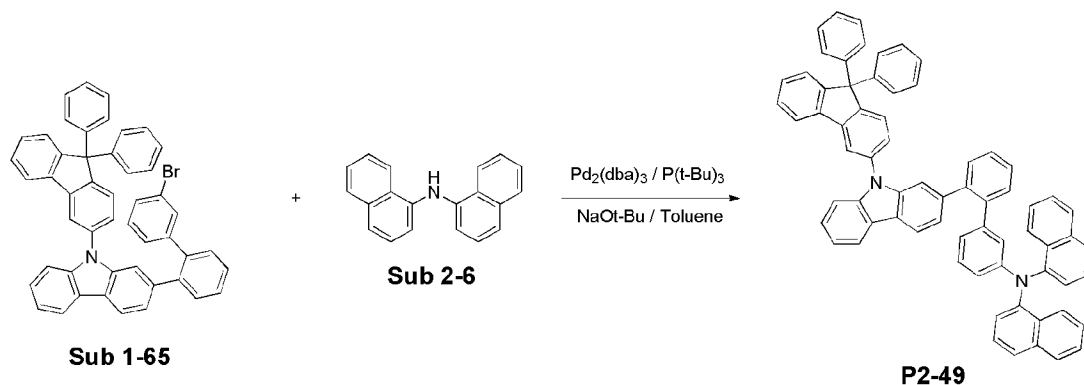


[411] Sub 2-13 (10g, 28.5mmol)에 Sub 1-1 (16.4g, 31.3mmol), $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (1.3g, 1.42mmol), $\text{P}(\text{t-Bu})_3$ (0.6g, 2.85mmol), NaOt-Bu (8.2g, 85.4mmol), toluene (300ml)을 상기 Product P1-1의 합성예를 이용하여 생성물 16.1g (수율: 71%)을 얻었다.

[412] **5. Product P2-49 합성예**

[413] <반응식 61>

[414]

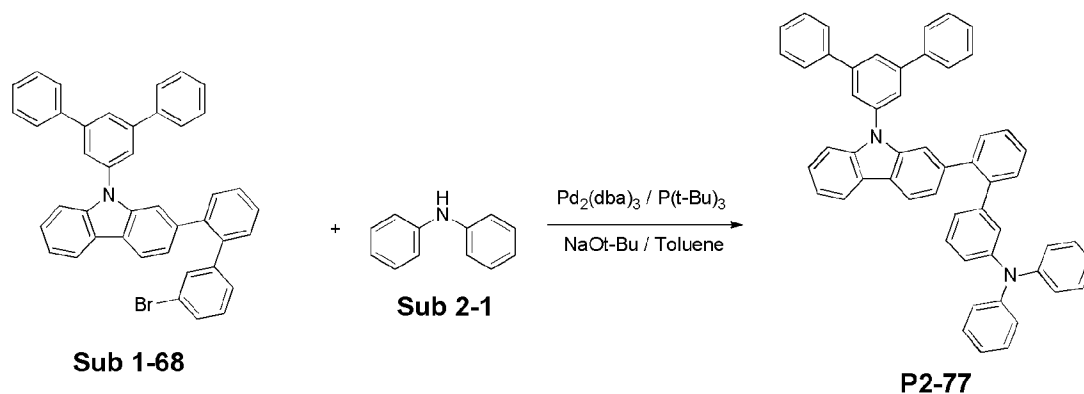


[415] Sub 2-6 (10g, 37.13mmol)에 Sub 1-65 (29.2g, 40.84mmol), $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (1.7g, 1.9mmol), $\text{P}(\text{t-Bu})_3$ (0.8g, 3.7mmol), NaOt-Bu (10.7g, 111.4mmol), toluene (390ml)을 상기 Product P1-1의 합성예를 이용하여 생성물 25.1g (수율: 75%)을 얻었다.

[416] **6. Product P2-77 합성 예**

[417] <반응식 62>

[418]

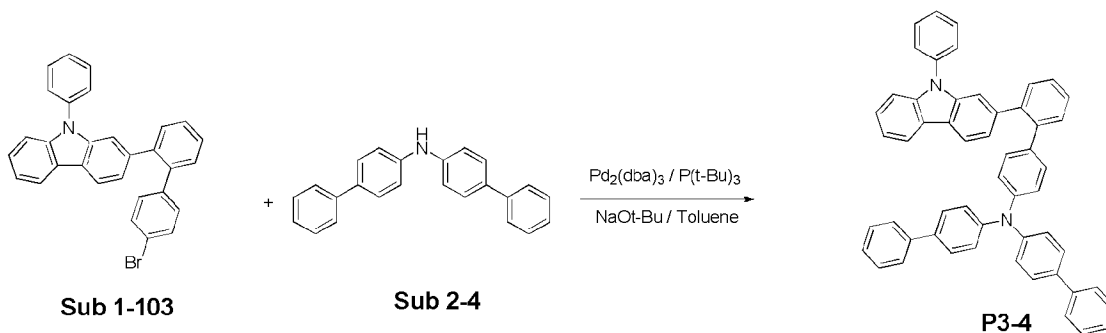


[419] Sub 2-1 (8g, 47.3mmol)에 Sub 1-68 (32.6g, 52mmol), $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (2.2g, 2.4mmol), $\text{P}(\text{t-Bu})_3$ (1g, 4.73mmol), NaOt-Bu (13.6g, 141.8mmol), toluene (500ml)을 상기 Product P1-1의 합성예를 이용하여 생성물 23.7g (수율: 70%)을 얻었다.

[420] **7. Product P3-4 합성 예**

[421] <반응식 63>

[422]

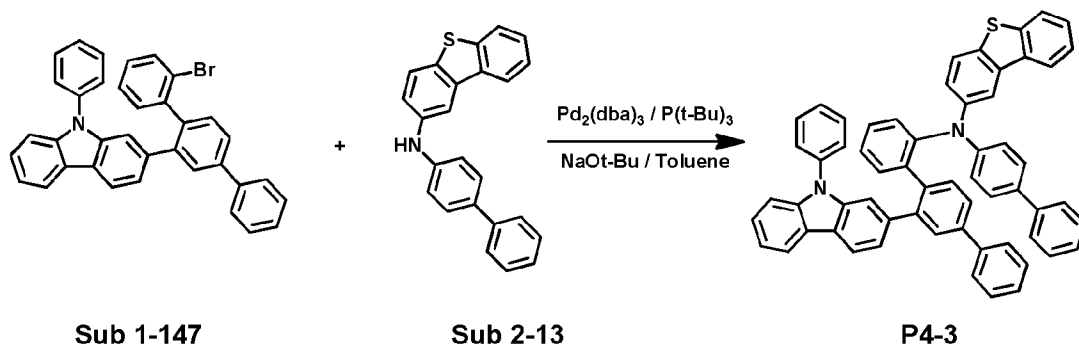


[423] Sub 2-4 (8g, 24.9mmol)에 Sub 1-103 (13g, 27.4mmol), $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (1.14g, 1.24mmol), $\text{P}(\text{t-Bu})_3$ (0.5g, 2.49mmol), NaOt-Bu (7.17g, 74.7mmol), toluene (265ml)을 상기 Product P1-1의 합성예를 이용하여 생성물 13g (수율: 73%)을 얻었다.

[424] (7) Product P4-3 합성예

[425] <반응식 64>

[426]



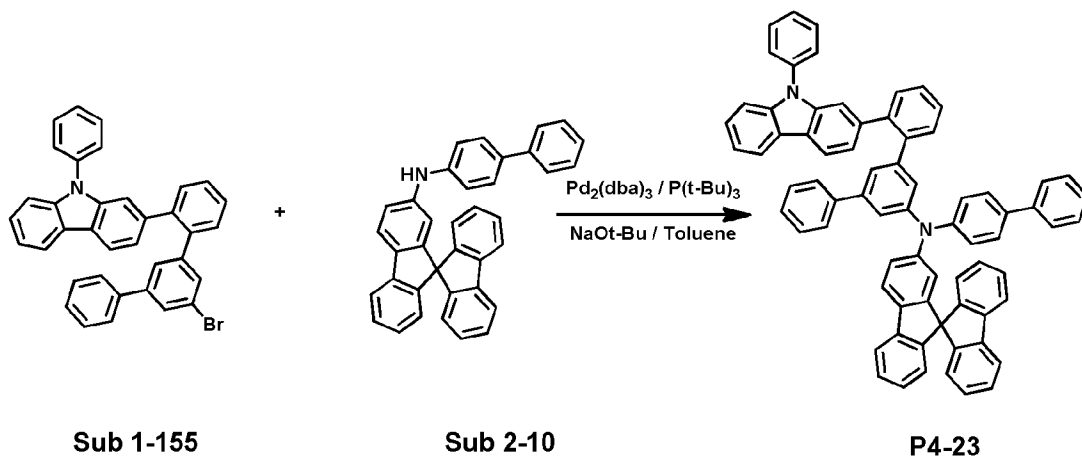
[427]

[428] Sub 1-147 (26.0g, 47.3 mmol)에 Sub 2-13 (18.3g, 52 mmol), $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (2.2 g, 2.4 mmol), $\text{P}(t\text{-Bu})_3$ (1 g, 4.73 mmol), NaOt-Bu (13.6 g, 141.8 mmol), toluene (500 mL)을 Product P1-1 합성법을 사용하여 생성물 23.7g (수율: 61%)를 얻었다.

[429] (8) Product P4-23 합성예

[430] <반응식 65>

[431]

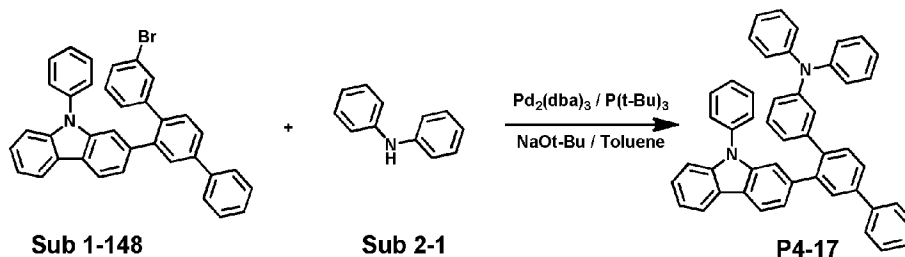


[432] Sub 1-155 (26.0g, 47.3 mmol)에 Sub 2-10 (25.1g, 52 mmol), $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (2.2 g, 2.4 mmol), $\text{P}(t\text{-Bu})_3$ (1 g, 4.73 mmol), NaOt-Bu (13.6 g, 141.8 mmol), toluene (500 mL)을 상기 Product P1-1 합성법을 사용하여 생성물 28.9g (수율: 64%)를 얻었다.

[433] (9) Product P4-17 합성예

[434] <반응식 66>

[435]



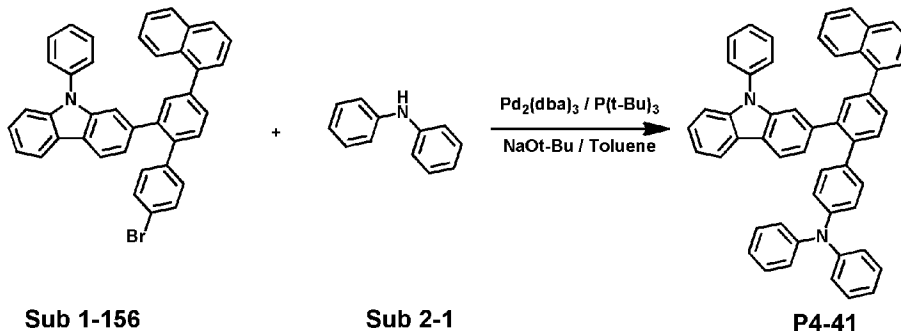
[436] Sub 1-148 (26.0g, 47.3 mmol)에 Sub 2-1 (8.8g, 52 mmol), $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (2.2 g, 2.4

mmol), $P(t\text{-Bu})_3$ (1 g, 4.73 mmol), NaOt-Bu (13.6 g, 141.8 mmol), toluene (500 mL)을 상기 Product P1-1 합성법을 사용하여 생성물 19.0g (수율: 63%)를 얻었다.

[437] **(10) Product P4-41 합성예**

[438] <반응식 67>

[439]

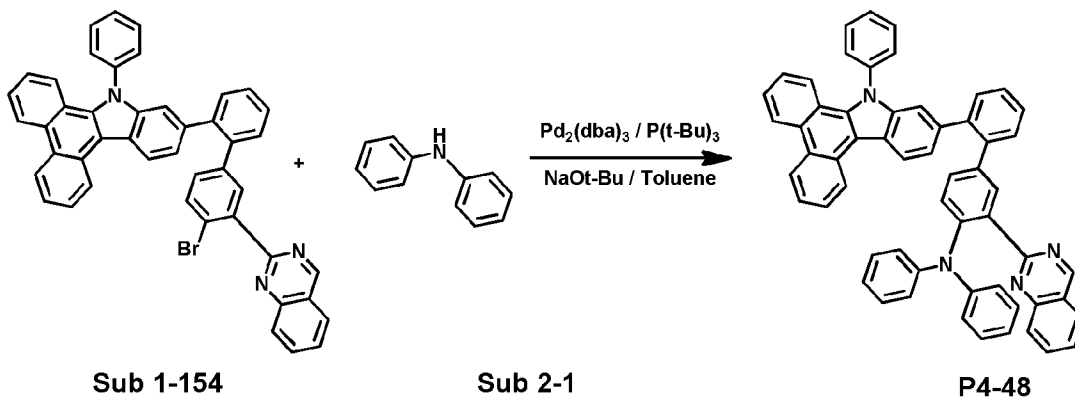


[440] Sub 1-156 (28.4g, 47.3 mmol)에 Sub 2-1 (8.8g, 52 mmol), $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (2.2 g, 2.4 mmol), $P(t\text{-Bu})_3$ (1 g, 4.73 mmol), NaOt-Bu (13.6 g, 141.8 mmol), toluene (500 mL)을 Product P1-1 합성법을 사용하여 생성물 21.2g (수율: 65%)를 얻었다.

[441] **(11) Product P4-48 합성예**

[442] <반응식 68>

[443]



[444] Sub 1-154 (33.2g, 47.3 mmol)에 Sub 2-1 (8.8g, 52 mmol), $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (2.2 g, 2.4 mmol), $P(t\text{-Bu})_3$ (1 g, 4.73 mmol), NaOt-Bu (13.6 g, 141.8 mmol), toluene (500 mL)을 Product P1-1 합성법을 사용하여 생성물 20.6g (수율: 55%)를 얻었다.

[445] 한편, 상기와 같은 합성예에 따라 제조된 본 발명의 화합물 P1-1 내지 P1-112, P2-1 내지 P2-112, P3-1 내지 P3-112, 및 P4-1 내지 P4-48의 FD-MS는 하기 표 3과 같다.

[446] [표 3]

[447]

화합물	FD-MS	화합물	FD-MS
P1-1	m/z=562.24(C ₄₂ H ₃₀ N ₂ =562.70)	P1-2	m/z=638.27(C ₄₈ H ₃₄ N ₂ =638.80)
P1-3	m/z=638.27(C ₄₈ H ₃₄ N ₂ =638.80)	P1-4	m/z=714.30(C ₄₈ H ₃₄ N ₂ =714.89)
P1-5	m/z=662.27(C ₅₀ H ₃₄ N ₂ =662.82)	P1-6	m/z=662.27(C ₅₀ H ₃₄ N ₂ =662.82)
P1-7	m/z=688.29(C ₅₂ H ₃₆ N ₂ =688.86)	P1-8	m/z=802.33(C ₅₂ H ₃₆ N ₂ =803.00)
P1-9	m/z=714.30(C ₅₄ H ₃₈ N ₂ =714.89)	P1-10	m/z=876.35(C ₆₇ H ₄₄ N ₂ =877.08)
P1-11	m/z=612.26(C ₄₆ H ₃₂ N ₂ =612.76)	P1-12	m/z=764.32(C ₅₈ H ₄₀ N ₂ =764.95)
P1-13	m/z=928.38(C ₇₁ H ₄₈ N ₂ =929.15)	P1-14	m/z=714.30(C ₅₄ H ₃₈ N ₂ =714.89)
P1-15	m/z=764.32(C ₅₈ H ₄₀ N ₂ =764.95)	P1-16	m/z=738.30(C ₅₆ H ₃₈ N ₂ =738.91)
P1-17	m/z=794.28(C ₅₈ H ₃₈ N ₂ S=795.00)	P1-18	m/z=778.30(C ₅₈ H ₃₈ N ₂ O=778.94)
P1-19	m/z=740.29(C ₅₄ H ₃₆ N ₄ =740.89)	P1-20	m/z=740.29(C ₅₄ H ₃₆ N ₄ =740.89)
P1-21	m/z=638.27(C ₄₈ H ₃₄ N ₂ =638.80)	P1-22	m/z=638.27(C ₄₈ H ₃₄ N ₂ =638.80)
P1-23	m/z=856.39(C ₆₂ H ₅₂ N ₂ S=857.15)	P1-24	m/z=741.29(C ₅₃ H ₃₅ N ₅ =741.88)
P1-25	m/z=602.27(C ₄₅ H ₃₄ N ₂ =602.76)	P1-26	m/z=815.33(C ₆₁ H ₄₁ N ₃ =816.00)
P1-27	m/z=718.30(C ₅₃ H ₃₈ N ₂ O=718.88)	P1-28	m/z=866.34(C ₆₄ H ₄₂ N ₄ =867.05)
P1-29	m/z=802.33(C ₆₁ H ₄₂ N ₂ =803.00)	P1-30	m/z=878.37(C ₆₇ H ₄₆ N ₂ =879.10)
P1-31	m/z=878.37(C ₆₇ H ₄₆ N ₂ =879.10)	P1-32	m/z=954.40(C ₇₃ H ₅₀ N ₂ =955.19)
P1-33	m/z=902.37(C ₆₉ H ₄₆ N ₂ =903.12)	P1-34	m/z=902.37(C ₆₉ H ₄₆ N ₂ =903.12)
P1-35	m/z=928.38(C ₇₁ H ₄₈ N ₂ =929.15)	P1-36	m/z=1092.44(C ₈₄ H ₅₆ N ₂ =1093.36)
P1-37	m/z=954.40(C ₇₃ H ₅₀ N ₂ =955.19)	P1-38	m/z=1116.44(C ₈₆ H ₅₆ N ₂ =1117.38)
P1-39	m/z=852.35(C ₆₅ H ₄₄ N ₂ =853.06)	P1-40	m/z=954.40(C ₇₃ H ₅₀ N ₂ =955.19)
P1-41	m/z=954.40(C ₇₃ H ₅₀ N ₂ =955.19)	P1-42	m/z=954.40(C ₇₃ H ₅₀ N ₂ =955.19)
P1-43	m/z=954.40(C ₇₃ H ₅₀ N ₂ =955.19)	P1-44	m/z=954.40(C ₇₃ H ₅₀ N ₂ =955.19)
P1-45	m/z=802.33(C ₆₁ H ₄₂ N ₂ =803.00)	P1-46	m/z=878.37(C ₆₇ H ₄₆ N ₂ =879.10)
P1-47	m/z=878.37(C ₆₇ H ₄₆ N ₂ =879.10)	P1-48	m/z=954.40(C ₇₃ H ₅₀ N ₂ =955.19)
P1-49	m/z=902.37(C ₆₉ H ₄₆ N ₂ =903.12)	P1-50	m/z=902.37(C ₆₉ H ₄₆ N ₂ =903.12)
P1-51	m/z=928.38(C ₇₁ H ₄₈ N ₂ =929.15)	P1-52	m/z=1092.44(C ₈₄ H ₅₆ N ₂ =1093.36)
P1-53	m/z=954.40(C ₇₃ H ₅₀ N ₂ =955.19)	P1-54	m/z=1116.44(C ₈₆ H ₅₆ N ₂ =1117.38)
P1-55	m/z=852.35(C ₆₅ H ₄₄ N ₂ =853.06)	P1-56	m/z=954.40(C ₇₃ H ₅₀ N ₂ =955.19)
P1-57	m/z=954.40(C ₇₃ H ₅₀ N ₂ =955.19)	P1-58	m/z=954.40(C ₇₃ H ₅₀ N ₂ =955.19)
P1-59	m/z=954.40(C ₇₃ H ₅₀ N ₂ =955.19)	P1-60	m/z=954.40(C ₇₃ H ₅₀ N ₂ =955.19)

[448]

P1-61	m/z=802.33(C ₆₁ H ₄₂ N ₂ =803.00)	P1-62	m/z=878.37(C ₆₇ H ₄₆ N ₂ =879.10)
P1-63	m/z=878.37(C ₆₇ H ₄₆ N ₂ =879.10)	P1-64	m/z=954.40(C ₇₃ H ₅₀ N ₂ =955.19)
P1-65	m/z=902.37(C ₆₉ H ₄₆ N ₂ =903.12)	P1-66	m/z=902.37(C ₆₉ H ₄₆ N ₂ =903.12)
P1-67	m/z=928.38(C ₇₁ H ₄₈ N ₂ =929.15)	P1-68	m/z=1092.44(C ₈₄ H ₅₆ N ₂ =1093.36)
P1-69	m/z=954.40(C ₇₃ H ₅₀ N ₂ =955.19)	P1-70	m/z=1116.44(C ₈₆ H ₅₆ N ₂ =1117.38)
P1-71	m/z=852.35(C ₆₅ H ₄₄ N ₂ =853.06)	P1-72	m/z=954.40(C ₇₃ H ₅₀ N ₂ =955.19)
P1-73	m/z=954.40(C ₇₃ H ₅₀ N ₂ =955.19)	P1-74	m/z=954.40(C ₇₃ H ₅₀ N ₂ =955.19)
P1-75	m/z=954.40(C ₇₃ H ₅₀ N ₂ =955.19)	P1-76	m/z=954.40(C ₇₃ H ₅₀ N ₂ =955.19)
P1-77	m/z=714.30(C ₅₄ H ₃₈ N ₂ =714.89)	P1-78	m/z=790.33(C ₆₀ H ₄₂ N ₂ =790.99)
P1-79	m/z=790.33(C ₆₀ H ₄₂ N ₂ =790.99)	P1-80	m/z=866.37(C ₆₀ H ₄₂ N ₂ =867.08)
P1-81	m/z=814.33(C ₆₂ H ₄₂ N ₂ =815.01)	P1-82	m/z=814.33(C ₆₂ H ₄₂ N ₂ =815.01)
P1-83	m/z=840.35(C ₆₄ H ₄₄ N ₂ =841.05)	P1-84	m/z=1004.41(C ₇₇ H ₅₂ N ₂ =1005.25)
P1-85	m/z=866.37(C ₆₆ H ₄₆ N ₂ =867.08)	P1-86	m/z=714.30(C ₅₄ H ₃₈ N ₂ =714.89)
P1-87	m/z=714.30(C ₅₄ H ₃₈ N ₂ =714.89)	P1-88	m/z=714.30(C ₅₄ H ₃₈ N ₂ =714.89)
P1-89	m/z=724.37(C ₅₄ H ₂₈ D ₁₀ N ₂ =724.95)	P1-90	m/z=800.40(C ₆₀ H ₃₂ D ₁₀ N ₂ =801.05)
P1-91	m/z=871.40(C ₆₆ H ₄₁ D ₅ N ₂ =872.12)	P1-92	m/z=719.33(C ₅₄ H ₃₃ D ₅ N ₂ =719.92)
P1-93	m/z=852.35(C ₆₅ H ₄₄ N ₂ =853.06)	P1-94	m/z=902.37(C ₆₉ H ₄₆ N ₂ =903.12)
P1-95	m/z=852.35(C ₆₅ H ₄₄ N ₂ =853.06)	P1-96	m/z=902.37(C ₆₉ H ₄₆ N ₂ =903.12)
P1-97	m/z=930.40(C ₇₁ H ₅₀ N ₂ =931.17)	P1-98	m/z=912.37(C ₆₇ H ₄₈ N ₂ O ₂ =913.11)
P1-99	m/z=902.37(C ₆₉ H ₄₆ N ₂ =903.12)	P1-100	m/z=902.37(C ₆₉ H ₄₆ N ₂ =903.12)
P1-101	m/z=768.26(C ₅₆ H ₃₆ N ₂ S=903.12)	P1-102	m/z=768.26(C ₅₆ H ₃₆ N ₂ S=903.12)
P1-103	m/z=794.28(C ₅₈ H ₃₈ N ₂ S=795.00)	P1-104	m/z=958.34(C ₇₁ H ₄₆ N ₂ S=959.20)
P1-105	m/z=752.28(C ₅₆ H ₃₆ N ₂ O=752.90)	P1-106	m/z=752.28(C ₅₆ H ₃₆ N ₂ O=752.90)
P1-107	m/z=778.30(C ₅₈ H ₃₈ N ₂ O=778.94)	P1-108	m/z=942.36(C ₇₁ H ₄₆ N ₂ O=943.14)
P1-109	m/z=902.37(C ₆₉ H ₄₆ N ₂ =903.12)	P1-110	m/z=902.37(C ₆₉ H ₄₆ N ₂ =903.12)
P1-111	m/z=818.28(C ₆₀ H ₃₈ N ₂ =819.02)	P1-112	m/z=802.30(C ₆₀ H ₃₈ N ₂ O=802.96)
P2-1	m/z=562.24(C ₄₂ H ₃₀ N ₂ =562.70)	P2-2	m/z=638.27(C ₄₈ H ₃₄ N ₂ =638.80)
P2-3	m/z=638.27(C ₄₈ H ₃₄ N ₂ =638.80)	P2-4	m/z=714.30(C ₄₈ H ₃₄ N ₂ =714.89)
P2-5	m/z=662.27(C ₅₀ H ₃₄ N ₂ =662.82)	P2-6	m/z=662.27(C ₅₀ H ₃₄ N ₂ =662.82)
P2-7	m/z=688.29(C ₅₂ H ₃₆ N ₂ =688.86)	P2-8	m/z=802.33(C ₅₂ H ₃₆ N ₂ =803.00)
P2-9	m/z=714.30(C ₅₄ H ₃₈ N ₂ =714.89)	P2-10	m/z=876.35(C ₆₇ H ₄₄ N ₂ =877.08)

[449]

P2-11	m/z=612.26(C ₄₆ H ₃₂ N ₂ =612.76)	P2-12	m/z=764.32(C ₅₈ H ₄₀ N ₂ =764.95)
P2-13	m/z=928.38(C ₇₁ H ₄₈ N ₂ =929.15)	P2-14	m/z=714.30(C ₅₄ H ₃₈ N ₂ =714.89)
P2-15	m/z=764.32(C ₅₈ H ₄₀ N ₂ =764.95)	P2-16	m/z=738.30(C ₅₆ H ₃₈ N ₂ =738.91)
P2-17	m/z=794.28(C ₅₈ H ₃₈ N ₂ S=795.00)	P2-18	m/z=778.30(C ₅₈ H ₃₈ N ₂ O=778.94)
P2-19	m/z=740.29(C ₅₄ H ₃₆ N ₄ =740.89)	P2-20	m/z=740.29(C ₅₄ H ₃₆ N ₄ =740.89)
P2-21	m/z=638.27(C ₄₈ H ₃₄ N ₂ =638.80)	P2-22	m/z=638.27(C ₄₈ H ₃₄ N ₂ =638.80)
P2-23	m/z=856.39(C ₆₂ H ₅₂ N ₂ S=857.15)	P2-24	m/z=741.29(C ₅₃ H ₃₅ N ₃ =741.88)
P2-25	m/z=602.27(C ₄₅ H ₃₄ N ₂ =602.76)	P2-26	m/z=815.33(C ₆₁ H ₄₁ N ₃ =816.00)
P2-27	m/z=718.30(C ₅₃ H ₃₈ N ₂ O=718.88)	P2-28	m/z=866.34(C ₆₄ H ₄₂ N ₄ =867.05)
P2-29	m/z=802.33(C ₆₁ H ₄₂ N ₂ =803.00)	P2-30	m/z=878.37(C ₆₇ H ₄₆ N ₂ =879.10)
P2-31	m/z=878.37(C ₆₇ H ₄₆ N ₂ =879.10)	P2-32	m/z=954.40(C ₇₃ H ₅₀ N ₂ =955.19)
P2-33	m/z=902.37(C ₆₉ H ₄₆ N ₂ =903.12)	P2-34	m/z=902.37(C ₆₉ H ₄₆ N ₂ =903.12)
P2-35	m/z=928.38(C ₇₁ H ₄₈ N ₂ =929.15)	P2-36	m/z=1092.44(C ₈₄ H ₅₆ N ₂ =1093.36)
P2-37	m/z=954.40(C ₇₃ H ₅₀ N ₂ =955.19)	P2-38	m/z=1116.44(C ₈₆ H ₅₆ N ₂ =1117.38)
P2-39	m/z=852.35(C ₆₅ H ₄₄ N ₂ =853.06)	P2-40	m/z=954.40(C ₇₃ H ₅₀ N ₂ =955.19)
P2-41	m/z=954.40(C ₇₃ H ₅₀ N ₂ =955.19)	P2-42	m/z=954.40(C ₇₃ H ₅₀ N ₂ =955.19)
P2-43	m/z=954.40(C ₇₃ H ₅₀ N ₂ =955.19)	P2-44	m/z=954.40(C ₇₃ H ₅₀ N ₂ =955.19)
P2-45	m/z=802.33(C ₆₁ H ₄₂ N ₂ =803.00)	P2-46	m/z=878.37(C ₆₇ H ₄₆ N ₂ =879.10)
P2-47	m/z=878.37(C ₆₇ H ₄₆ N ₂ =879.10)	P2-48	m/z=954.40(C ₇₃ H ₅₀ N ₂ =955.19)
P2-49	m/z=902.37(C ₆₉ H ₄₆ N ₂ =903.12)	P2-50	m/z=902.37(C ₆₉ H ₄₆ N ₂ =903.12)
P2-51	m/z=928.38(C ₇₁ H ₄₈ N ₂ =929.15)	P2-52	m/z=1092.44(C ₈₄ H ₅₆ N ₂ =1093.36)
P2-53	m/z=954.40(C ₇₃ H ₅₀ N ₂ =955.19)	P2-54	m/z=1116.44(C ₈₆ H ₅₆ N ₂ =1117.38)
P2-55	m/z=852.35(C ₆₅ H ₄₄ N ₂ =853.06)	P2-56	m/z=954.40(C ₇₃ H ₅₀ N ₂ =955.19)
P2-57	m/z=954.40(C ₇₃ H ₅₀ N ₂ =955.19)	P2-58	m/z=954.40(C ₇₃ H ₅₀ N ₂ =955.19)
P2-59	m/z=954.40(C ₇₃ H ₅₀ N ₂ =955.19)	P2-60	m/z=954.40(C ₇₃ H ₅₀ N ₂ =955.19)
P2-61	m/z=802.33(C ₆₁ H ₄₂ N ₂ =803.00)	P2-62	m/z=878.37(C ₆₇ H ₄₆ N ₂ =879.10)
P2-63	m/z=878.37(C ₆₇ H ₄₆ N ₂ =879.10)	P2-64	m/z=954.40(C ₇₃ H ₅₀ N ₂ =955.19)
P2-65	m/z=902.37(C ₆₉ H ₄₆ N ₂ =903.12)	P2-66	m/z=902.37(C ₆₉ H ₄₆ N ₂ =903.12)
P2-67	m/z=928.38(C ₇₁ H ₄₈ N ₂ =929.15)	P2-68	m/z=1092.44(C ₈₄ H ₅₆ N ₂ =1093.36)
P2-69	m/z=954.40(C ₇₃ H ₅₀ N ₂ =955.19)	P2-70	m/z=1116.44(C ₈₆ H ₅₆ N ₂ =1117.38)
P2-71	m/z=852.35(C ₆₅ H ₄₄ N ₂ =853.06)	P2-72	m/z=954.40(C ₇₃ H ₅₀ N ₂ =955.19)

[450]

P2-73	m/z=954.40(C ₇₃ H ₅₀ N ₂ =955.19)	P2-74	m/z=954.40(C ₇₃ H ₅₀ N ₂ =955.19)
P2-75	m/z=954.40(C ₇₃ H ₅₀ N ₂ =955.19)	P2-76	m/z=954.40(C ₇₃ H ₅₀ N ₂ =955.19)
P2-77	m/z=714.30(C ₅₄ H ₃₈ N ₂ =714.89)	P2-78	m/z=790.33(C ₆₀ H ₄₂ N ₂ =790.99)
P2-79	m/z=790.33(C ₆₀ H ₄₂ N ₂ =790.99)	P2-80	m/z=866.37(C ₆₀ H ₄₂ N ₂ =867.08)
P2-81	m/z=814.33(C ₆₂ H ₄₂ N ₂ =815.01)	P2-82	m/z=814.33(C ₆₂ H ₄₂ N ₂ =815.01)
P2-83	m/z=840.35(C ₆₄ H ₄₄ N ₂ =841.05)	P2-84	m/z=1004.41(C ₇₇ H ₅₂ N ₂ =1005.25)
P2-85	m/z=866.37(C ₆₆ H ₄₆ N ₂ =867.08)	P2-86	m/z=714.30(C ₅₄ H ₃₈ N ₂ =714.89)
P2-87	m/z=714.30(C ₅₄ H ₃₈ N ₂ =714.89)	P2-88	m/z=714.30(C ₅₄ H ₃₈ N ₂ =714.89)
P2-89	m/z=724.37(C ₅₄ H ₂₈ D ₁₀ N ₂ =724.95)	P2-90	m/z=800.40(C ₆₀ H ₃₂ D ₁₀ N ₂ =801.05)
P2-91	m/z=871.40(C ₆₆ H ₄₁ D ₅ N ₂ =872.12)	P2-92	m/z=719.33(C ₅₄ H ₃₃ D ₅ N ₂ =719.92)
P2-93	m/z=852.35(C ₆₅ H ₄₄ N ₂ =853.06)	P2-94	m/z=902.37(C ₆₉ H ₄₆ N ₂ =903.12)
P2-95	m/z=852.35(C ₆₅ H ₄₄ N ₂ =853.06)	P2-96	m/z=902.37(C ₆₉ H ₄₆ N ₂ =903.12)
P2-97	m/z=930.40(C ₇₁ H ₅₀ N ₂ =931.17)	P2-98	m/z=912.37(C ₆₇ H ₄₈ N ₂ O ₂ =913.11)
P2-99	m/z=902.37(C ₆₉ H ₄₆ N ₂ =903.12)	P2-100	m/z=902.37(C ₆₉ H ₄₆ N ₂ =903.12)
P2-101	m/z=768.26(C ₅₆ H ₃₆ N ₂ S=903.12)	P2-102	m/z=768.26(C ₅₆ H ₃₆ N ₂ S=903.12)
P2-103	m/z=794.28(C ₅₈ H ₃₈ N ₂ S=795.00)	P2-104	m/z=958.34(C ₇₁ H ₄₆ N ₂ S=959.20)
P2-105	m/z=752.28(C ₅₆ H ₃₆ N ₂ O=752.90)	P2-106	m/z=752.28(C ₅₆ H ₃₆ N ₂ O=752.90)
P2-107	m/z=778.30(C ₅₈ H ₃₈ N ₂ O=778.94)	P2-108	m/z=942.36(C ₇₁ H ₄₆ N ₂ O=943.14)
P2-109	m/z=902.37(C ₆₉ H ₄₆ N ₂ =903.12)	P2-110	m/z=902.37(C ₆₉ H ₄₆ N ₂ =903.12)
P2-111	m/z=818.28(C ₆₀ H ₃₈ N ₂ =819.02)	P2-112	m/z=802.30(C ₆₀ H ₃₈ N ₂ O=802.96)
P3-1	m/z=562.24(C ₄₂ H ₃₀ N ₂ =562.70)	P3-2	m/z=638.27(C ₄₈ H ₃₄ N ₂ =638.80)
P3-3	m/z=638.27(C ₄₈ H ₃₄ N ₂ =638.80)	P3-4	m/z=714.30(C ₄₈ H ₃₄ N ₂ =714.89)
P3-5	m/z=662.27(C ₅₀ H ₃₄ N ₂ =662.82)	P3-6	m/z=662.27(C ₅₀ H ₃₄ N ₂ =662.82)
P3-7	m/z=688.29(C ₅₂ H ₃₆ N ₂ =688.86)	P3-8	m/z=802.33(C ₅₂ H ₃₆ N ₂ =803.00)
P3-9	m/z=714.30(C ₅₄ H ₃₈ N ₂ =714.89)	P3-10	m/z=876.35(C ₆₇ H ₄₄ N ₂ =877.08)
P3-11	m/z=612.26(C ₄₆ H ₃₂ N ₂ =612.76)	P3-12	m/z=764.32(C ₅₈ H ₄₀ N ₂ =764.95)
P3-13	m/z=928.38(C ₇₁ H ₄₈ N ₂ =929.15)	P3-14	m/z=714.30(C ₅₄ H ₃₈ N ₂ =714.89)
P3-15	m/z=764.32(C ₅₈ H ₄₀ N ₂ =764.95)	P3-16	m/z=738.30(C ₅₆ H ₃₈ N ₂ =738.91)
P3-17	m/z=794.28(C ₅₈ H ₃₈ N ₂ S=795.00)	P3-18	m/z=778.30(C ₅₈ H ₃₈ N ₂ O=778.94)
P3-19	m/z=740.29(C ₅₄ H ₃₆ N ₄ =740.89)	P3-20	m/z=740.29(C ₅₄ H ₃₆ N ₄ =740.89)
P3-21	m/z=638.27(C ₄₈ H ₃₄ N ₂ =638.80)	P3-22	m/z=638.27(C ₄₈ H ₃₄ N ₂ =638.80)

[451]

P3-23	m/z=856.39(C ₆₂ H ₅₂ N ₂ S=857.15)	P3-24	m/z=741.29(C ₅₃ H ₃₅ N ₅ =741.88)
P3-25	m/z=602.27(C ₄₅ H ₃₄ N ₂ =602.76)	P3-26	m/z=815.33(C ₆₁ H ₄₁ N ₃ =816.00)
P3-27	m/z=718.30(C ₅₃ H ₃₈ N ₂ O=718.88)	P3-28	m/z=866.34(C ₆₄ H ₄₂ N ₄ =867.05)
P3-29	m/z=802.33(C ₆₁ H ₄₂ N ₂ =803.00)	P3-30	m/z=878.37(C ₆₇ H ₄₆ N ₂ =879.10)
P3-31	m/z=878.37(C ₆₇ H ₄₆ N ₂ =879.10)	P3-32	m/z=954.40(C ₇₃ H ₅₀ N ₂ =955.19)
P3-33	m/z=902.37(C ₆₉ H ₄₆ N ₂ =903.12)	P3-34	m/z=902.37(C ₆₉ H ₄₆ N ₂ =903.12)
P3-35	m/z=928.38(C ₇₁ H ₄₈ N ₂ =929.15)	P3-36	m/z=1092.44(C ₈₄ H ₅₆ N ₂ =1093.36)
P3-37	m/z=954.40(C ₇₃ H ₅₀ N ₂ =955.19)	P3-38	m/z=1116.44(C ₈₆ H ₅₆ N ₂ =1117.38)
P3-39	m/z=852.35(C ₆₅ H ₄₄ N ₂ =853.06)	P3-40	m/z=954.40(C ₇₃ H ₅₀ N ₂ =955.19)
P3-41	m/z=954.40(C ₇₃ H ₅₀ N ₂ =955.19)	P3-42	m/z=954.40(C ₇₃ H ₅₀ N ₂ =955.19)
P3-43	m/z=954.40(C ₇₃ H ₅₀ N ₂ =955.19)	P3-44	m/z=954.40(C ₇₃ H ₅₀ N ₂ =955.19)
P3-45	m/z=802.33(C ₆₁ H ₄₂ N ₂ =803.00)	P3-46	m/z=878.37(C ₆₇ H ₄₆ N ₂ =879.10)
P3-47	m/z=878.37(C ₆₇ H ₄₆ N ₂ =879.10)	P3-48	m/z=954.40(C ₇₃ H ₅₀ N ₂ =955.19)
P3-49	m/z=902.37(C ₆₉ H ₄₆ N ₂ =903.12)	P3-50	m/z=902.37(C ₆₉ H ₄₆ N ₂ =903.12)
P3-51	m/z=928.38(C ₇₁ H ₄₈ N ₂ =929.15)	P3-52	m/z=1092.44(C ₈₄ H ₅₆ N ₂ =1093.36)
P3-53	m/z=954.40(C ₇₃ H ₅₀ N ₂ =955.19)	P3-54	m/z=1116.44(C ₈₆ H ₅₆ N ₂ =1117.38)
P3-55	m/z=852.35(C ₆₅ H ₄₄ N ₂ =853.06)	P3-56	m/z=954.40(C ₇₃ H ₅₀ N ₂ =955.19)
P3-57	m/z=954.40(C ₇₃ H ₅₀ N ₂ =955.19)	P3-58	m/z=954.40(C ₇₃ H ₅₀ N ₂ =955.19)
P3-59	m/z=954.40(C ₇₃ H ₅₀ N ₂ =955.19)	P3-60	m/z=954.40(C ₇₃ H ₅₀ N ₂ =955.19)
P3-61	m/z=802.33(C ₆₁ H ₄₂ N ₂ =803.00)	P3-62	m/z=878.37(C ₆₇ H ₄₆ N ₂ =879.10)
P3-63	m/z=878.37(C ₆₇ H ₄₆ N ₂ =879.10)	P3-64	m/z=954.40(C ₇₃ H ₅₀ N ₂ =955.19)
P3-65	m/z=902.37(C ₆₉ H ₄₆ N ₂ =903.12)	P3-66	m/z=902.37(C ₆₉ H ₄₆ N ₂ =903.12)
P3-67	m/z=928.38(C ₇₁ H ₄₈ N ₂ =929.15)	P3-68	m/z=1092.44(C ₈₄ H ₅₆ N ₂ =1093.36)
P3-69	m/z=954.40(C ₇₃ H ₅₀ N ₂ =955.19)	P3-70	m/z=1116.44(C ₈₆ H ₅₆ N ₂ =1117.38)
P3-71	m/z=852.35(C ₆₅ H ₄₄ N ₂ =853.06)	P3-72	m/z=954.40(C ₇₃ H ₅₀ N ₂ =955.19)
P3-73	m/z=954.40(C ₇₃ H ₅₀ N ₂ =955.19)	P3-74	m/z=954.40(C ₇₃ H ₅₀ N ₂ =955.19)
P3-75	m/z=954.40(C ₇₃ H ₅₀ N ₂ =955.19)	P3-76	m/z=954.40(C ₇₃ H ₅₀ N ₂ =955.19)
P3-77	m/z=714.30(C ₅₄ H ₃₈ N ₂ =714.89)	P3-78	m/z=790.33(C ₆₀ H ₄₂ N ₂ =790.99)
P3-79	m/z=790.33(C ₆₀ H ₄₂ N ₂ =790.99)	P3-80	m/z=866.37(C ₆₀ H ₄₂ N ₂ =867.08)
P3-81	m/z=814.33(C ₆₂ H ₄₂ N ₂ =815.01)	P3-82	m/z=814.33(C ₆₂ H ₄₂ N ₂ =815.01)
P3-83	m/z=840.35(C ₆₄ H ₄₄ N ₂ =841.05)	P3-84	m/z=1004.41(C ₇₇ H ₅₂ N ₂ =1005.25)

[452]

P3-85	m/z=866.37(C ₆₆ H ₄₆ N ₂ =867.08)	P3-86	m/z=714.30(C ₅₄ H ₃₈ N ₂ =714.89)
P3-87	m/z=714.30(C ₅₄ H ₃₈ N ₂ =714.89)	P3-88	m/z=714.30(C ₅₄ H ₃₈ N ₂ =714.89)
P3-89	m/z=724.37(C ₅₄ H ₂₈ D ₁₀ N ₂ =724.95)	P3-90	m/z=800.40(C ₆₀ H ₃₂ D ₁₀ N ₂ =801.05)
P3-91	m/z=871.40(C ₆₆ H ₄₁ D ₅ N ₂ =872.12)	P3-92	m/z=719.33(C ₅₄ H ₃₃ D ₅ N ₂ =719.92)
P3-93	m/z=852.35(C ₆₅ H ₄₄ N ₂ =853.06)	P3-94	m/z=902.37(C ₆₉ H ₄₆ N ₂ =903.12)
P3-95	m/z=852.35(C ₆₅ H ₄₄ N ₂ =853.06)	P3-96	m/z=902.37(C ₆₉ H ₄₆ N ₂ =903.12)
P3-97	m/z=930.40(C ₇₁ H ₅₀ N ₂ =931.17)	P3-98	m/z=912.37(C ₆₇ H ₄₈ N ₂ O ₂ =913.11)
P3-99	m/z=902.37(C ₆₉ H ₄₆ N ₂ =903.12)	P3-100	m/z=902.37(C ₆₉ H ₄₆ N ₂ =903.12)
P3-101	m/z=768.26(C ₅₆ H ₃₆ N ₂ S=903.12)	P3-102	m/z=768.26(C ₅₆ H ₃₆ N ₂ S=903.12)
P3-103	m/z=794.28(C ₅₈ H ₃₈ N ₂ S=795.00)	P3-104	m/z=958.34(C ₇₁ H ₄₆ N ₂ S=959.20)
P3-105	m/z=752.28(C ₅₆ H ₃₆ N ₂ O=752.90)	P3-106	m/z=752.28(C ₅₆ H ₃₆ N ₂ O=752.90)
P3-107	m/z=778.30(C ₅₈ H ₃₈ N ₂ O=778.94)	P3-108	m/z=942.36(C ₇₁ H ₄₆ N ₂ O=943.14)
P3-109	m/z=902.37(C ₆₉ H ₄₆ N ₂ =903.12)	P3-110	m/z=902.37(C ₆₉ H ₄₆ N ₂ =903.12)
P3-111	m/z=818.28(C ₆₀ H ₃₈ N ₂ =819.02)	P3-112	m/z=802.30(C ₆₀ H ₃₈ N ₂ O=802.96)
P4-1	m/z=638.27(C ₄₈ H ₃₄ N ₂ =638.80)	P4-2	m/z=790.33(C ₆₀ H ₄₂ N ₂ =790.99)
P4-3	m/z=820.29(C ₆₀ H ₄₀ N ₂ S=821.04)	P4-4	m/z=804.31(C ₆₀ H ₄₀ N ₂ O=804.97)
P4-5	m/z=830.37(C ₆₃ H ₄₆ N ₂ =831.05)	P4-6	m/z=954.40(C ₄₃ H ₅₀ N ₂ =955.19)
P4-7	m/z=952.38(C ₇₃ H ₄₈ N ₂ =953.18)	P4-8	m/z=688.29(C ₅₂ H ₃₆ N ₂ =688.86)
P4-9	m/z=688.29(C ₅₂ H ₃₆ N ₂ =688.86)	P4-10	m/z=840.35(C ₆₄ H ₄₄ N ₂ =841.05)
P4-11	m/z=896.32(C ₆₆ H ₄₄ N ₂ S=897.13)	P4-12	m/z=880.35(C ₆₆ H ₄₄ N ₂ O=881.07)
P4-13	m/z=956.41(C ₇₃ H ₅₂ N ₂ =957.21)	P4-14	m/z=1080.44(C ₈₃ H ₅₆ N ₂ =1081.35)
P4-15	m/z=953.38(C ₇₂ H ₄₇ N ₃ =954.16)	P4-16	m/z=740.29(C ₅₄ H ₃₆ N ₄ =740.89)
P4-17	m/z=638.27(C ₄₈ H ₃₄ N ₂ =638.80)	P4-18	m/z=790.33(C ₆₀ H ₄₂ N ₂ =790.99)
P4-19	m/z=820.29(C ₆₀ H ₄₀ N ₂ S=821.04)	P4-20	m/z=804.31(C ₆₀ H ₄₀ N ₂ O=804.97)
P4-21	m/z=830.37(C ₆₃ H ₄₆ N ₂ =831.05)	P4-22	m/z=954.40(C ₄₃ H ₅₀ N ₂ =955.19)
P4-23	m/z=952.38(C ₇₃ H ₄₈ N ₂ =953.18)	P4-24	m/z=688.29(C ₅₂ H ₃₆ N ₂ =688.86)
P4-25	m/z=688.29(C ₅₂ H ₃₆ N ₂ =688.86)	P4-26	m/z=840.35(C ₆₄ H ₄₄ N ₂ =841.05)
P4-27	m/z=896.32(C ₆₆ H ₄₄ N ₂ S=897.13)	P4-28	m/z=880.35(C ₆₆ H ₄₄ N ₂ O=881.07)
P4-29	m/z=956.41(C ₇₃ H ₅₂ N ₂ =957.21)	P4-30	m/z=1080.44(C ₈₃ H ₅₆ N ₂ =1081.35)
P4-31	m/z=953.38(C ₇₂ H ₄₇ N ₃ =954.16)	P4-32	m/z=740.29(C ₅₄ H ₃₆ N ₄ =740.89)
P4-33	m/z=638.27(C ₄₈ H ₃₄ N ₂ =638.80)	P4-34	m/z=790.33(C ₆₀ H ₄₂ N ₂ =790.99)

[453]

P4-35	m/z=820.29(C ₆₀ H ₄₀ N ₂ S=821.04)	P4-36	m/z=804.31(C ₆₀ H ₄₀ N ₂ O=804.97)
P4-37	m/z=830.37(C ₆₃ H ₄₆ N ₂ =831.05)	P4-38	m/z=954.40(C ₄₃ H ₅₀ N ₂ =955.19)
P4-39	m/z=952.38(C ₇₃ H ₄₈ N ₂ =953.18)	P4-40	m/z=688.29(C ₅₂ H ₃₆ N ₂ =688.86)
P4-41	m/z=688.29(C ₅₂ H ₃₆ N ₂ =688.86)	P4-42	m/z=840.35(C ₆₄ H ₄₄ N ₂ =841.05)
P4-43	m/z=896.32(C ₆₆ H ₄₄ N ₂ S=897.13)	P4-44	m/z=880.35(C ₆₆ H ₄₄ N ₂ O=881.07)
P4-45	m/z=956.41(C ₇₃ H ₅₂ N ₂ =957.21)	P4-46	m/z=1080.44(C ₈₃ H ₅₆ N ₂ =1081.35)
P4-47	m/z=953.38(C ₇₂ H ₄₇ N ₃ =954.16)	P4-48	m/z=790.31(C ₅₈ H ₃₈ N ₄ =790.95)

[454]

[455] 유기전기소자의 제조평가[456] [실시예 1] 그린유기발광소자(정공수송층)

[457] 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 P1-1을 60nm 두께로 진공증착하여 정공수송층을 형성하였다. 이어서, 상기 정공수송층 상에 4,4'-N,N'-dicarbazole-biphenyl (이하 "CBP"로 약기함)을 호스트 물질로, tris(2-phenylpyridine)-iridium (이하 "Ir(ppy)₃"으로 약기함)을 도판트 물질로 하여 90:10 중량비로 도핑하여 30nm 두께로 진공증착하여 발광층을 형성하였다. 이어서, 상기 발광층 상에 (1,1'-비스페닐)-4-올레이토비스(2-메틸-8-퀴놀린올레이토)알루미늄(이하 "BAIq"로 약기함)을 10nm 두께로 진공증착하여 정공저지층을 형성하고, 상기 정공저지층 상에 트리스(8-퀴놀리놀)알루미늄 (이하 "Alq₃"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.

[458] [실시예 2] 내지 [실시예 348] 그린유기발광소자(정공수송층)

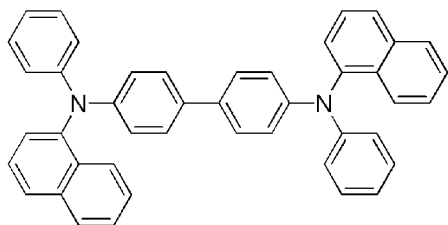
[459] 정공수송층 물질로 본 발명의 화합물 P1-1 대신 하기 표 4에 기재된 본 발명의 화합물 P1-2 내지 P1-112, P2-1 내지 P2-112, P3-1 내지 P3-112, P4-1 내지 P4-21 내지 P4-24, P4-37 내지 P4-4-40 중 하나를 사용한 점을 제외하고는 상기 실시예 1과 동일한 방법으로 유기전기발광소자를 제조하였다.

[460] [비교예 1] 내지 [비교예 4]

[461] 정공수송층 물질로 본 발명의 화합물 P1-1 대신, 비교예 1에서는 하기 비교화합물 1을, 비교예 2에서 하기 비교화합물 2를, 비교예 3에서는 하기 비교화합물 3을, 비교예 4에서는 하기 비교화합물 4를 사용한 점을 제외하고는 상기 실시예 1과 동일한 방법으로 유기전기발광소자를 제조하였다.

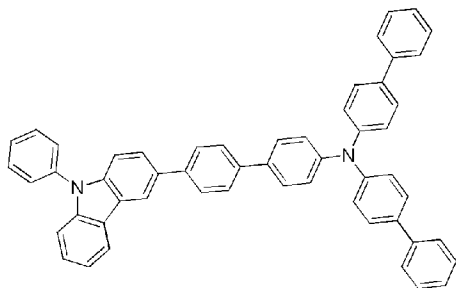
[462] <비교화합물 1>

[463]



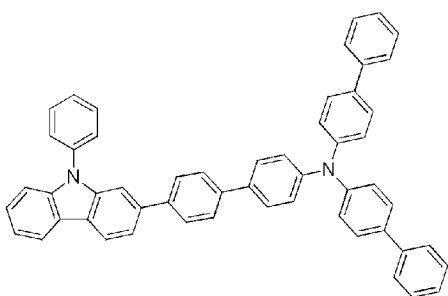
[464] <비교화합물 2>

[465]



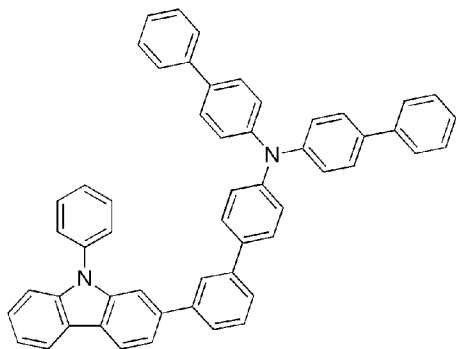
[466] <비교화합물 3>

[467]



[468] <비교화합물 4>

[469]



[470] 본 발명의 실시예 1 내지 실시예 348 및 비교예 1 내지 비교예 4에 의해 제조된 유기전기발광소자들에 순바이어스 직류전압을 가하여 포토리서치(photosearch)사의 PR-650으로 전기발광(EL) 특성을 측정하였으며, 5000cd/m² 기준 휘도에서 맥사이언스사에서 제조된 수명 측정 장비를 통해 T95 수명을 측정하였다. 그 측정 결과는 하기 표 4와 같다.

[471] [표 4]

[472]

	화합물	구동전압 (V)	전류밀도 (mA/cm ²)	휘도 (cd/m ²)	효율 (cd/A)	수명 T(95)	CIE	
							x	y
비교예(1)	비교화합물 1	5.6	17.9	5000.0	27.9	68.2	0.33	0.62
비교예(2)	비교화합물 2	5.3	16.0	5000.0	31.2	120.6	0.33	0.61
비교예(3)	비교화합물 3	5.4	14.5	5000.0	34.5	109.4	0.33	0.62
비교예(4)	비교화합물 4	5.6	13.5	5000.0	37.0	119.1	0.33	0.62
실시예(1)	P1-1	5.5	12.5	5000.0	40.0	130.5	0.33	0.62
실시예(2)	P1-2	5.5	12.7	5000.0	39.4	128.1	0.33	0.61
실시예(3)	P1-3	5.5	13.1	5000.0	38.1	127.8	0.33	0.61
실시예(4)	P1-4	5.4	12.8	5000.0	39.2	122.3	0.33	0.61
실시예(5)	P1-5	5.5	12.7	5000.0	39.5	120.6	0.33	0.62
실시예(6)	P1-6	5.5	13.0	5000.0	38.6	132.7	0.33	0.62
실시예(7)	P1-7	5.4	12.9	5000.0	38.6	130.3	0.33	0.61
실시예(8)	P1-8	5.5	12.7	5000.0	39.5	132.9	0.33	0.62
실시예(9)	P1-9	5.4	12.6	5000.0	39.6	132.4	0.33	0.61
실시예(10)	P1-10	5.6	13.1	5000.0	38.1	123.9	0.33	0.62
실시예(11)	P1-11	5.6	12.9	5000.0	38.8	126.2	0.33	0.61
실시예(12)	P1-12	5.4	12.7	5000.0	39.4	126.9	0.33	0.61
실시예(13)	P1-13	5.4	12.7	5000.0	39.3	124.3	0.33	0.61
실시예(14)	P1-14	5.4	12.9	5000.0	38.7	120.4	0.33	0.62
실시예(15)	P1-15	5.5	12.6	5000.0	39.7	134.6	0.33	0.61
실시예(16)	P1-16	5.3	13.0	5000.0	38.4	120.5	0.33	0.61
실시예(17)	P1-17	5.4	12.6	5000.0	39.8	129.4	0.33	0.62
실시예(18)	P1-18	5.6	13.1	5000.0	38.3	130.3	0.33	0.61
실시예(19)	P1-19	5.5	12.6	5000.0	39.5	130.3	0.33	0.62
실시예(20)	P1-20	5.3	13.0	5000.0	38.5	128.3	0.33	0.62
실시예(21)	P1-21	5.3	12.7	5000.0	39.2	133.1	0.33	0.61
실시예(22)	P1-22	5.6	12.9	5000.0	38.8	126.9	0.33	0.62
실시예(23)	P1-23	5.4	12.8	5000.0	39.1	126.9	0.33	0.62
실시예(24)	P1-24	5.4	12.7	5000.0	39.5	125.8	0.33	0.62
실시예(25)	P1-25	5.5	12.5	5000.0	40.0	126.4	0.33	0.62

[473]

실시예(26)	P1-26	5.6	12.6	5000.0	39.8	120.1	0.33	0.61
실시예(27)	P1-27	5.4	12.5	5000.0	39.9	126.0	0.33	0.61
실시예(28)	P1-28	5.3	12.9	5000.0	38.6	122.2	0.33	0.61
실시예(29)	P1-29	5.5	12.8	5000.0	39.0	127.6	0.33	0.62
실시예(30)	P1-30	5.5	13.1	5000.0	38.2	130.8	0.33	0.62
실시예(31)	P1-31	5.5	13.2	5000.0	38.0	135.0	0.33	0.62
실시예(32)	P1-32	5.4	13.1	5000.0	38.3	123.7	0.33	0.61
실시예(33)	P1-33	5.3	12.7	5000.0	39.4	125.0	0.33	0.61
실시예(34)	P1-34	5.6	13.1	5000.0	38.0	134.1	0.33	0.62
실시예(35)	P1-35	5.3	12.9	5000.0	38.8	132.9	0.33	0.62
실시예(36)	P1-36	5.4	12.6	5000.0	39.6	122.7	0.33	0.61
실시예(37)	P1-37	5.6	12.7	5000.0	39.5	131.1	0.33	0.62
실시예(38)	P1-38	5.5	12.6	5000.0	39.7	133.3	0.33	0.61
실시예(39)	P1-39	5.4	12.7	5000.0	39.3	134.8	0.33	0.62
실시예(40)	P1-40	5.4	12.8	5000.0	39.1	120.5	0.33	0.61
실시예(41)	P1-41	5.3	12.8	5000.0	39.0	124.0	0.33	0.62
실시예(42)	P1-42	5.5	12.6	5000.0	39.6	124.2	0.33	0.61
실시예(43)	P1-43	5.6	12.7	5000.0	39.4	134.0	0.33	0.62
실시예(44)	P1-44	5.3	13.1	5000.0	38.2	128.2	0.33	0.62
실시예(45)	P1-45	5.6	12.7	5000.0	39.4	130.8	0.33	0.62
실시예(46)	P1-46	5.3	13.0	5000.0	38.3	131.8	0.33	0.61
실시예(47)	P1-47	5.3	13.0	5000.0	38.5	134.1	0.33	0.62
실시예(48)	P1-48	5.6	13.1	5000.0	38.1	134.3	0.33	0.61
실시예(49)	P1-49	5.4	13.0	5000.0	38.6	121.7	0.33	0.61
실시예(50)	P1-50	5.6	13.1	5000.0	38.3	131.7	0.33	0.61
실시예(51)	P1-51	5.5	13.1	5000.0	38.3	130.1	0.33	0.61
실시예(52)	P1-52	5.5	12.9	5000.0	38.7	128.3	0.33	0.62
실시예(53)	P1-53	5.3	13.1	5000.0	38.1	127.7	0.33	0.61
실시예(54)	P1-54	5.6	12.8	5000.0	39.2	133.2	0.33	0.62
실시예(55)	P1-55	5.6	13.1	5000.0	38.2	121.1	0.33	0.61
실시예(56)	P1-56	5.4	12.7	5000.0	39.4	127.7	0.33	0.61

[474]

실시예(57)	P1-57	5.3	12.5	5000.0	39.9	120.9	0.33	0.62
실시예(58)	P1-58	5.3	13.1	5000.0	38.3	134.8	0.33	0.61
실시예(59)	P1-59	5.4	12.6	5000.0	39.6	128.8	0.33	0.61
실시예(60)	P1-60	5.6	12.8	5000.0	38.9	126.1	0.33	0.61
실시예(61)	P1-61	5.4	12.8	5000.0	39.1	133.9	0.33	0.62
실시예(62)	P1-62	5.5	12.8	5000.0	39.1	120.9	0.33	0.61
실시예(63)	P1-63	5.4	12.6	5000.0	39.7	132.2	0.33	0.62
실시예(64)	P1-64	5.5	12.6	5000.0	39.5	129.8	0.33	0.62
실시예(65)	P1-65	5.4	12.9	5000.0	38.9	132.6	0.33	0.61
실시예(66)	P1-66	5.4	12.5	5000.0	40.0	120.3	0.33	0.62
실시예(67)	P1-67	5.5	12.5	5000.0	40.0	129.7	0.33	0.61
실시예(68)	P1-68	5.5	13.0	5000.0	38.3	121.8	0.33	0.62
실시예(69)	P1-69	5.5	13.1	5000.0	38.1	134.3	0.33	0.62
실시예(70)	P1-70	5.5	12.5	5000.0	39.8	134.2	0.33	0.62
실시예(71)	P1-71	5.5	12.9	5000.0	38.8	132.8	0.33	0.61
실시예(72)	P1-72	5.4	12.9	5000.0	38.8	131.0	0.33	0.62
실시예(73)	P1-73	5.4	12.9	5000.0	38.8	134.6	0.33	0.61
실시예(74)	P1-74	5.5	13.1	5000.0	38.1	120.9	0.33	0.61
실시예(75)	P1-75	5.4	13.1	5000.0	38.2	126.7	0.33	0.61
실시예(76)	P1-76	5.5	12.7	5000.0	39.4	127.6	0.33	0.62
실시예(77)	P1-77	5.4	12.8	5000.0	39.2	125.5	0.33	0.62
실시예(78)	P1-78	5.4	12.6	5000.0	39.8	132.1	0.33	0.61
실시예(79)	P1-79	5.5	12.7	5000.0	39.4	128.8	0.33	0.62
실시예(80)	P1-80	5.3	12.6	5000.0	39.5	120.9	0.33	0.61
실시예(81)	P1-81	5.5	12.9	5000.0	38.8	125.6	0.33	0.61
실시예(82)	P1-82	5.5	12.5	5000.0	40.0	122.3	0.33	0.62
실시예(83)	P1-83	5.4	13.0	5000.0	38.5	122.6	0.33	0.61
실시예(84)	P1-84	5.3	13.1	5000.0	38.2	126.6	0.33	0.61
실시예(85)	P1-85	5.5	12.7	5000.0	39.4	134.7	0.33	0.61
실시예(86)	P1-86	5.6	12.8	5000.0	39.0	132.9	0.33	0.62
실시예(87)	P1-87	5.4	12.8	5000.0	39.1	127.1	0.33	0.61

[475]

실시예(88)	P1-88	5.3	12.7	5000.0	39.4	120.7	0.33	0.62
실시예(89)	P1-89	5.6	12.8	5000.0	39.1	124.3	0.33	0.62
실시예(90)	P1-90	5.4	13.1	5000.0	38.2	125.0	0.33	0.61
실시예(91)	P1-91	5.6	12.5	5000.0	39.9	131.5	0.33	0.62
실시예(92)	P1-92	5.4	12.6	5000.0	39.5	120.1	0.33	0.61
실시예(93)	P1-93	5.4	12.7	5000.0	39.4	120.7	0.33	0.62
실시예(94)	P1-94	5.4	13.0	5000.0	38.4	132.0	0.33	0.61
실시예(95)	P1-95	5.5	13.1	5000.0	38.2	123.5	0.33	0.61
실시예(96)	P1-96	5.5	12.8	5000.0	38.9	134.6	0.33	0.62
실시예(97)	P1-97	5.6	12.9	5000.0	38.9	131.4	0.33	0.61
실시예(98)	P1-98	5.3	13.1	5000.0	38.3	130.5	0.33	0.62
실시예(99)	P1-99	5.4	13.1	5000.0	38.1	122.7	0.33	0.62
실시예(100)	P1-100	5.4	12.7	5000.0	39.4	125.5	0.33	0.61
실시예(101)	P1-101	5.5	12.8	5000.0	39.0	131.4	0.33	0.61
실시예(102)	P1-102	5.6	12.7	5000.0	39.5	134.7	0.33	0.61
실시예(103)	P1-103	5.4	12.6	5000.0	39.8	121.9	0.33	0.62
실시예(104)	P1-104	5.6	12.5	5000.0	40.0	120.3	0.33	0.62
실시예(105)	P1-105	5.4	12.9	5000.0	38.9	120.2	0.33	0.62
실시예(106)	P1-106	5.3	13.1	5000.0	38.0	127.8	0.33	0.61
실시예(107)	P1-107	5.4	13.0	5000.0	38.5	121.5	0.33	0.61
실시예(108)	P1-108	5.6	13.0	5000.0	38.6	130.2	0.33	0.62
실시예(109)	P1-109	5.3	12.8	5000.0	38.9	133.7	0.33	0.62
실시예(110)	P1-110	5.4	12.7	5000.0	39.3	132.0	0.33	0.62
실시예(111)	P1-111	5.4	12.5	5000.0	39.9	125.8	0.33	0.61
실시예(112)	P1-112	5.5	12.7	5000.0	39.4	122.8	0.33	0.61
실시예(113)	P2-1	5.5	12.1	5000.0	41.2	124.2	0.33	0.61
실시예(114)	P2-2	5.5	12.3	5000.0	40.7	134.3	0.33	0.61
실시예(115)	P2-3	5.6	12.4	5000.0	40.2	126.2	0.33	0.61
실시예(116)	P2-4	5.5	11.8	5000.0	42.5	123.6	0.33	0.62
실시예(117)	P2-5	5.5	12.4	5000.0	40.3	130.9	0.33	0.61
실시예(118)	P2-6	5.4	12.3	5000.0	40.8	132.0	0.33	0.62

[476]

실시예(119)	P2-7	5.6	12.3	5000.0	40.5	132.1	0.33	0.61
실시예(120)	P2-8	5.3	12.2	5000.0	41.1	123.6	0.33	0.62
실시예(121)	P2-9	5.6	11.8	5000.0	42.3	127.8	0.33	0.61
실시예(122)	P2-10	5.5	12.3	5000.0	40.8	122.2	0.33	0.62
실시예(123)	P2-11	5.4	11.8	5000.0	42.5	132.8	0.33	0.61
실시예(124)	P2-12	5.4	11.7	5000.0	42.6	125.9	0.33	0.61
실시예(125)	P2-13	5.5	12.5	5000.0	40.0	132.8	0.33	0.61
실시예(126)	P2-14	5.5	11.6	5000.0	42.9	132.1	0.33	0.62
실시예(127)	P2-15	5.5	11.7	5000.0	42.6	120.6	0.33	0.61
실시예(128)	P2-16	5.5	12.4	5000.0	40.4	124.1	0.33	0.62
실시예(129)	P2-17	5.5	12.2	5000.0	41.1	121.0	0.33	0.62
실시예(130)	P2-18	5.4	12.1	5000.0	41.3	133.9	0.33	0.62
실시예(131)	P2-19	5.5	11.9	5000.0	42.2	126.6	0.33	0.61
실시예(132)	P2-20	5.6	11.9	5000.0	42.1	129.3	0.33	0.62
실시예(133)	P2-21	5.3	11.9	5000.0	41.9	121.2	0.33	0.62
실시예(134)	P2-22	5.6	12.0	5000.0	41.5	122.1	0.33	0.61
실시예(135)	P2-23	5.3	12.3	5000.0	40.8	127.4	0.33	0.62
실시예(136)	P2-24	5.3	11.8	5000.0	42.4	132.5	0.33	0.61
실시예(137)	P2-25	5.4	11.6	5000.0	43.0	130.9	0.33	0.61
실시예(138)	P2-26	5.5	12.4	5000.0	40.3	131.6	0.33	0.61
실시예(139)	P2-27	5.4	11.6	5000.0	42.9	129.3	0.33	0.61
실시예(140)	P2-28	5.4	12.3	5000.0	40.5	125.4	0.33	0.61
실시예(141)	P2-29	5.3	11.8	5000.0	42.4	130.7	0.33	0.62
실시예(142)	P2-30	5.5	11.8	5000.0	42.3	132.4	0.33	0.62
실시예(143)	P2-31	5.5	12.5	5000.0	40.0	132.9	0.33	0.62
실시예(144)	P2-32	5.5	12.4	5000.0	40.3	120.1	0.33	0.61
실시예(145)	P2-33	5.5	11.7	5000.0	42.6	132.4	0.33	0.61
실시예(146)	P2-34	5.4	12.2	5000.0	41.0	123.8	0.33	0.62
실시예(147)	P2-35	5.6	11.7	5000.0	42.8	132.2	0.33	0.62
실시예(148)	P2-36	5.3	12.0	5000.0	41.8	132.6	0.33	0.62
실시예(149)	P2-37	5.5	11.8	5000.0	42.5	129.8	0.33	0.62

[477]

실시예(150)	P2-38	5.6	12.0	5000.0	41.8	127.6	0.33	0.62
실시예(151)	P2-39	5.5	12.0	5000.0	41.8	132.6	0.33	0.61
실시예(152)	P2-40	5.5	12.1	5000.0	41.2	128.5	0.33	0.61
실시예(153)	P2-41	5.4	12.3	5000.0	40.8	131.8	0.33	0.62
실시예(154)	P2-42	5.3	12.5	5000.0	40.0	128.0	0.33	0.62
실시예(155)	P2-43	5.6	11.8	5000.0	42.5	134.5	0.33	0.62
실시예(156)	P2-44	5.4	11.9	5000.0	41.9	134.5	0.33	0.61
실시예(157)	P2-45	5.3	12.1	5000.0	41.4	130.4	0.33	0.61
실시예(158)	P2-46	5.4	11.8	5000.0	42.5	123.0	0.33	0.61
실시예(159)	P2-47	5.5	12.3	5000.0	40.6	122.5	0.33	0.61
실시예(160)	P2-48	5.4	12.0	5000.0	41.6	130.8	0.33	0.62
실시예(161)	P2-49	5.5	12.0	5000.0	41.8	133.5	0.33	0.62
실시예(162)	P2-50	5.5	12.3	5000.0	40.7	126.6	0.33	0.62
실시예(163)	P2-51	5.3	11.9	5000.0	42.0	130.6	0.33	0.62
실시예(164)	P2-52	5.3	12.2	5000.0	41.1	132.6	0.33	0.62
실시예(165)	P2-53	5.4	12.5	5000.0	40.1	124.8	0.33	0.62
실시예(166)	P2-54	5.5	12.1	5000.0	41.5	131.8	0.33	0.62
실시예(167)	P2-55	5.3	12.3	5000.0	40.7	130.9	0.33	0.62
실시예(168)	P2-56	5.3	12.2	5000.0	41.1	128.0	0.33	0.61
실시예(169)	P2-57	5.4	12.4	5000.0	40.3	132.2	0.33	0.61
실시예(170)	P2-58	5.5	12.0	5000.0	41.8	130.7	0.33	0.62
실시예(171)	P2-59	5.4	12.4	5000.0	40.3	127.7	0.33	0.61
실시예(172)	P2-60	5.5	12.2	5000.0	41.1	124.6	0.33	0.62
실시예(173)	P2-61	5.5	11.8	5000.0	42.5	128.2	0.33	0.62
실시예(174)	P2-62	5.6	12.2	5000.0	40.9	131.8	0.33	0.61
실시예(175)	P2-63	5.5	12.2	5000.0	41.0	124.6	0.33	0.62
실시예(176)	P2-64	5.5	12.0	5000.0	41.8	125.0	0.33	0.61
실시예(177)	P2-65	5.5	12.2	5000.0	40.9	124.5	0.33	0.61
실시예(178)	P2-66	5.4	11.7	5000.0	42.8	128.0	0.33	0.62
실시예(179)	P2-67	5.4	12.0	5000.0	41.6	134.5	0.33	0.62
실시예(180)	P2-68	5.5	12.3	5000.0	40.7	126.7	0.33	0.61

[478]

실시예(181)	P2-69	5.3	12.1	5000.0	41.4	134.7	0.33	0.62
실시예(182)	P2-70	5.4	12.0	5000.0	41.8	127.5	0.33	0.62
실시예(183)	P2-71	5.3	11.8	5000.0	42.3	127.1	0.33	0.61
실시예(184)	P2-72	5.5	11.9	5000.0	41.9	127.3	0.33	0.62
실시예(185)	P2-73	5.4	12.4	5000.0	40.3	122.3	0.33	0.61
실시예(186)	P2-74	5.4	12.3	5000.0	40.6	128.2	0.33	0.62
실시예(187)	P2-75	5.4	12.3	5000.0	40.5	131.5	0.33	0.62
실시예(188)	P2-76	5.6	12.1	5000.0	41.3	132.0	0.33	0.61
실시예(189)	P2-77	5.4	11.9	5000.0	42.2	126.4	0.33	0.61
실시예(190)	P2-78	5.4	11.7	5000.0	42.6	131.4	0.33	0.62
실시예(191)	P2-79	5.6	11.7	5000.0	42.6	128.1	0.33	0.61
실시예(192)	P2-80	5.3	11.6	5000.0	43.0	130.3	0.33	0.61
실시예(193)	P2-81	5.6	12.3	5000.0	40.7	120.5	0.33	0.62
실시예(194)	P2-82	5.4	12.2	5000.0	40.8	120.7	0.33	0.61
실시예(195)	P2-83	5.5	12.1	5000.0	41.4	122.5	0.33	0.61
실시예(196)	P2-84	5.5	11.8	5000.0	42.5	120.3	0.33	0.61
실시예(197)	P2-85	5.4	12.5	5000.0	40.0	128.6	0.33	0.61
실시예(198)	P2-86	5.4	11.7	5000.0	42.9	127.2	0.33	0.62
실시예(199)	P2-87	5.5	11.9	5000.0	41.9	123.7	0.33	0.62
실시예(200)	P2-88	5.4	12.5	5000.0	40.1	133.4	0.33	0.61
실시예(201)	P2-89	5.5	11.7	5000.0	42.6	125.5	0.33	0.61
실시예(202)	P2-90	5.5	11.9	5000.0	42.1	131.3	0.33	0.62
실시예(203)	P2-91	5.6	12.5	5000.0	40.1	126.6	0.33	0.62
실시예(204)	P2-92	5.5	11.9	5000.0	42.1	130.5	0.33	0.62
실시예(205)	P2-93	5.5	12.1	5000.0	41.3	121.2	0.33	0.62
실시예(206)	P2-94	5.3	12.1	5000.0	41.2	123.5	0.33	0.61
실시예(207)	P2-95	5.4	11.7	5000.0	42.6	130.3	0.33	0.61
실시예(208)	P2-96	5.5	12.2	5000.0	41.0	130.1	0.33	0.61
실시예(209)	P2-97	5.4	11.8	5000.0	42.3	130.3	0.33	0.62
실시예(210)	P2-98	5.4	12.4	5000.0	40.3	121.8	0.33	0.62
실시예(211)	P2-99	5.6	12.3	5000.0	40.5	130.1	0.33	0.62

[479]

실시예(212)	P2-100	5.6	12.2	5000.0	40.9	120.7	0.33	0.61
실시예(213)	P2-101	5.5	11.6	5000.0	43.0	129.4	0.33	0.61
실시예(214)	P2-102	5.4	12.5	5000.0	40.0	122.1	0.33	0.61
실시예(215)	P2-103	5.5	11.7	5000.0	42.9	123.7	0.33	0.62
실시예(216)	P2-104	5.5	12.0	5000.0	41.5	124.9	0.33	0.61
실시예(217)	P2-105	5.3	12.3	5000.0	40.5	122.6	0.33	0.62
실시예(218)	P2-106	5.5	11.7	5000.0	42.7	121.8	0.33	0.62
실시예(219)	P2-107	5.5	11.8	5000.0	42.5	134.3	0.33	0.61
실시예(220)	P2-108	5.3	12.4	5000.0	40.3	130.8	0.33	0.62
실시예(221)	P2-109	5.5	11.9	5000.0	41.9	123.3	0.33	0.62
실시예(222)	P2-110	5.4	12.5	5000.0	40.0	132.1	0.33	0.61
실시예(223)	P2-111	5.5	12.2	5000.0	41.0	124.4	0.33	0.61
실시예(224)	P2-112	5.4	12.3	5000.0	40.7	121.2	0.33	0.61
실시예(225)	P3-1	5.6	12.6	5000.0	39.6	131.9	0.33	0.62
실시예(226)	P3-2	5.5	12.6	5000.0	39.8	132.4	0.33	0.61
실시예(227)	P3-3	5.6	13.0	5000.0	38.4	133.1	0.33	0.61
실시예(228)	P3-4	5.5	13.0	5000.0	38.5	132.0	0.33	0.61
실시예(229)	P3-5	5.4	12.9	5000.0	38.7	121.0	0.33	0.62
실시예(230)	P3-6	5.4	13.2	5000.0	38.0	120.4	0.33	0.62
실시예(231)	P3-7	5.6	12.8	5000.0	39.2	123.5	0.33	0.61
실시예(232)	P3-8	5.6	12.9	5000.0	38.7	127.2	0.33	0.62
실시예(233)	P3-9	5.3	12.8	5000.0	39.0	128.4	0.33	0.61
실시예(234)	P3-10	5.3	12.9	5000.0	38.9	126.3	0.33	0.62
실시예(235)	P3-11	5.4	12.6	5000.0	39.7	134.6	0.33	0.61
실시예(236)	P3-12	5.5	12.8	5000.0	39.0	121.4	0.33	0.61
실시예(237)	P3-13	5.4	12.8	5000.0	39.1	130.5	0.33	0.61
실시예(238)	P3-14	5.5	12.8	5000.0	39.0	122.0	0.33	0.62
실시예(239)	P3-15	5.3	12.8	5000.0	38.9	126.3	0.33	0.61
실시예(240)	P3-16	5.4	12.7	5000.0	39.4	120.2	0.33	0.61
실시예(241)	P3-17	5.6	12.7	5000.0	39.5	122.8	0.33	0.62
실시예(242)	P3-18	5.5	13.0	5000.0	38.6	123.4	0.33	0.61

[480]

실시예(243)	P3-19	5.5	13.1	5000.0	38.3	124.3	0.33	0.62
실시예(244)	P3-20	5.4	13.0	5000.0	38.4	124.7	0.33	0.62
실시예(245)	P3-21	5.5	12.8	5000.0	39.0	133.8	0.33	0.61
실시예(246)	P3-22	5.3	12.7	5000.0	39.5	132.2	0.33	0.62
실시예(247)	P3-23	5.4	13.0	5000.0	38.6	120.8	0.33	0.62
실시예(248)	P3-24	5.6	12.6	5000.0	39.7	128.7	0.33	0.62
실시예(249)	P3-25	5.5	12.5	5000.0	39.9	126.2	0.33	0.62
실시예(250)	P3-26	5.3	12.5	5000.0	39.9	130.2	0.33	0.61
실시예(251)	P3-27	5.4	13.1	5000.0	38.2	132.5	0.33	0.61
실시예(252)	P3-28	5.3	13.1	5000.0	38.2	132.6	0.33	0.61
실시예(253)	P3-29	5.6	12.7	5000.0	39.3	124.7	0.33	0.62
실시예(254)	P3-30	5.4	12.9	5000.0	38.9	120.1	0.33	0.62
실시예(255)	P3-31	5.6	12.7	5000.0	39.2	134.7	0.33	0.62
실시예(256)	P3-32	5.5	13.0	5000.0	38.6	130.2	0.33	0.61
실시예(257)	P3-33	5.5	12.7	5000.0	39.4	127.9	0.33	0.61
실시예(258)	P3-34	5.5	13.0	5000.0	38.5	131.3	0.33	0.62
실시예(259)	P3-35	5.4	12.6	5000.0	39.5	134.4	0.33	0.62
실시예(260)	P3-36	5.4	12.7	5000.0	39.3	120.3	0.33	0.61
실시예(261)	P3-37	5.4	12.5	5000.0	39.9	132.7	0.33	0.62
실시예(262)	P3-38	5.4	12.5	5000.0	40.0	128.8	0.33	0.61
실시예(263)	P3-39	5.3	12.8	5000.0	39.1	129.5	0.33	0.62
실시예(264)	P3-40	5.4	12.7	5000.0	39.5	130.4	0.33	0.61
실시예(265)	P3-41	5.4	12.6	5000.0	39.6	121.6	0.33	0.62
실시예(266)	P3-42	5.4	13.1	5000.0	38.1	125.2	0.33	0.61
실시예(267)	P3-43	5.5	12.9	5000.0	38.6	132.3	0.33	0.62
실시예(268)	P3-44	5.4	12.9	5000.0	38.9	122.8	0.33	0.62
실시예(269)	P3-45	5.5	12.9	5000.0	38.6	129.2	0.33	0.62
실시예(270)	P3-46	5.5	12.6	5000.0	39.7	129.9	0.33	0.61
실시예(271)	P3-47	5.6	12.6	5000.0	39.8	131.1	0.33	0.62
실시예(272)	P3-48	5.5	12.7	5000.0	39.4	125.4	0.33	0.61
실시예(273)	P3-49	5.3	13.0	5000.0	38.3	128.8	0.33	0.61

[481]

실시예(274)	P3-50	5.4	12.6	5000.0	39.8	120.7	0.33	0.61
실시예(275)	P3-51	5.3	13.1	5000.0	38.2	131.1	0.33	0.61
실시예(276)	P3-52	5.4	12.7	5000.0	39.4	127.5	0.33	0.62
실시예(277)	P3-53	5.5	13.1	5000.0	38.3	128.4	0.33	0.61
실시예(278)	P3-54	5.3	12.6	5000.0	39.8	120.3	0.33	0.62
실시예(279)	P3-55	5.6	13.1	5000.0	38.1	122.7	0.33	0.61
실시예(280)	P3-56	5.5	12.5	5000.0	39.9	121.5	0.33	0.61
실시예(281)	P3-57	5.4	12.9	5000.0	38.7	125.5	0.33	0.62
실시예(282)	P3-58	5.5	13.0	5000.0	38.4	128.1	0.33	0.61
실시예(283)	P3-59	5.3	12.6	5000.0	39.7	129.9	0.33	0.61
실시예(284)	P3-60	5.4	13.0	5000.0	38.6	123.0	0.33	0.61
실시예(285)	P3-61	5.5	13.0	5000.0	38.4	131.0	0.33	0.62
실시예(286)	P3-62	5.4	12.9	5000.0	38.8	126.1	0.33	0.61
실시예(287)	P3-63	5.3	13.0	5000.0	38.5	127.0	0.33	0.62
실시예(288)	P3-64	5.3	13.0	5000.0	38.5	124.7	0.33	0.62
실시예(289)	P3-65	5.6	12.9	5000.0	38.7	129.2	0.33	0.61
실시예(290)	P3-66	5.5	13.0	5000.0	38.4	121.0	0.33	0.62
실시예(291)	P3-67	5.6	12.8	5000.0	39.2	127.0	0.33	0.61
실시예(292)	P3-68	5.6	12.9	5000.0	38.7	126.5	0.33	0.62
실시예(293)	P3-69	5.4	12.7	5000.0	39.4	123.1	0.33	0.62
실시예(294)	P3-70	5.3	12.7	5000.0	39.5	130.5	0.33	0.62
실시예(295)	P3-71	5.5	12.9	5000.0	38.7	123.1	0.33	0.61
실시예(296)	P3-72	5.6	12.8	5000.0	39.2	126.0	0.33	0.62
실시예(297)	P3-73	5.4	13.0	5000.0	38.4	125.6	0.33	0.61
실시예(298)	P3-74	5.4	12.6	5000.0	39.7	121.0	0.33	0.61
실시예(299)	P3-75	5.5	13.1	5000.0	38.1	128.2	0.33	0.61
실시예(300)	P3-76	5.4	12.9	5000.0	38.9	129.3	0.33	0.62
실시예(301)	P3-77	5.5	12.8	5000.0	39.0	123.9	0.33	0.62
실시예(302)	P3-78	5.6	12.6	5000.0	39.8	123.4	0.33	0.61
실시예(303)	P3-79	5.4	13.1	5000.0	38.3	128.1	0.33	0.62
실시예(304)	P3-80	5.3	12.9	5000.0	38.7	134.6	0.33	0.61

[482]

실시예(305)	P3-81	5.4	12.7	5000.0	39.2	125.2	0.33	0.61
실시예(306)	P3-82	5.4	12.6	5000.0	39.6	129.9	0.33	0.62
실시예(307)	P3-83	5.6	12.9	5000.0	38.9	128.0	0.33	0.61
실시예(308)	P3-84	5.4	13.1	5000.0	38.3	133.1	0.33	0.61
실시예(309)	P3-85	5.6	13.0	5000.0	38.3	134.9	0.33	0.61
실시예(310)	P3-86	5.3	13.0	5000.0	38.3	132.6	0.33	0.62
실시예(311)	P3-87	5.4	12.8	5000.0	39.1	124.0	0.33	0.61
실시예(312)	P3-88	5.5	12.9	5000.0	38.8	122.1	0.33	0.62
실시예(313)	P3-89	5.5	12.6	5000.0	39.8	124.5	0.33	0.62
실시예(314)	P3-90	5.5	12.9	5000.0	38.9	132.7	0.33	0.61
실시예(315)	P3-91	5.5	13.0	5000.0	38.4	133.9	0.33	0.62
실시예(316)	P3-92	5.5	12.7	5000.0	39.2	127.9	0.33	0.61
실시예(317)	P3-93	5.3	12.9	5000.0	38.8	127.8	0.33	0.62
실시예(318)	P3-94	5.3	12.8	5000.0	39.2	132.6	0.33	0.61
실시예(319)	P3-95	5.5	12.5	5000.0	40.0	134.6	0.33	0.61
실시예(320)	P3-96	5.5	12.7	5000.0	39.3	134.2	0.33	0.62
실시예(321)	P3-97	5.4	13.0	5000.0	38.4	133.8	0.33	0.61
실시예(322)	P3-98	5.5	13.1	5000.0	38.3	124.4	0.33	0.62
실시예(323)	P3-99	5.4	12.6	5000.0	39.8	122.0	0.33	0.62
실시예(324)	P3-100	5.4	12.5	5000.0	39.9	128.7	0.33	0.61
실시예(325)	P3-101	5.6	13.0	5000.0	38.4	121.6	0.33	0.61
실시예(326)	P3-102	5.4	12.8	5000.0	39.2	134.3	0.33	0.61
실시예(327)	P3-103	5.6	13.0	5000.0	38.4	134.3	0.33	0.62
실시예(328)	P3-104	5.5	12.7	5000.0	39.3	128.3	0.33	0.62
실시예(329)	P3-105	5.3	13.1	5000.0	38.2	125.3	0.33	0.62
실시예(330)	P3-106	5.5	12.9	5000.0	38.9	126.3	0.33	0.61
실시예(331)	P3-107	5.6	12.6	5000.0	39.7	121.7	0.33	0.61
실시예(332)	P3-108	5.4	12.9	5000.0	38.8	128.4	0.33	0.62
실시예(333)	P3-109	5.3	12.8	5000.0	39.0	123.0	0.33	0.62
실시예(334)	P3-110	5.5	12.8	5000.0	39.2	123.0	0.33	0.62
실시예(335)	P3-111	5.4	12.7	5000.0	39.3	134.5	0.33	0.61

[483]

실시예(336)	P3-112	5.5	12.6	5000.0	39.6	124.5	0.33	0.61
실시예(337)	P4-1	5.4	12.0	5000.0	41.6	90.8	0.33	0.61
실시예(338)	P4-2	5.4	12.3	5000.0	40.5	139.5	0.33	0.62
실시예(339)	P4-3	5.5	12.0	5000.0	41.5	119.6	0.33	0.62
실시예(340)	P4-4	5.3	11.9	5000.0	42.1	96.6	0.33	0.62
실시예(341)	P4-21	5.3	12.1	5000.0	41.2	131.7	0.33	0.61
실시예(342)	P4-22	5.3	11.6	5000.0	43.3	129.8	0.33	0.62
실시예(343)	P4-23	5.4	12.5	5000.0	40.0	124.3	0.33	0.61
실시예(344)	P4-24	5.3	11.9	5000.0	41.9	122.3	0.33	0.61
실시예(345)	P4-37	5.4	12.1	5000.0	41.3	105.6	0.33	0.61
실시예(346)	P4-38	5.3	12.0	5000.0	41.6	146.2	0.33	0.62
실시예(347)	P4-39	5.3	12.0	5000.0	41.6	103.8	0.33	0.62
실시예(348)	P4-40	5.4	12.8	5000.0	38.9	96.2	0.33	0.61

[484]

[485] 상기 표 4의 소자 측정 결과에서 알 수 있듯이, 본 발명의 화합물을 정공수송층의 재료로 사용한 소자가 비교화합물 1 내지 비교화합물 4를 정공수송층의 재료로 사용한 소자에 비해 높은 효율과 긴 수명을 나타내는 것을 확인하였다.

[486] 즉, 본 발명의 화합물과 상이한 구조인 비교화합물 1을 사용한 비교예 1에 비해 본 발명의 화합물을 사용한 소자가 현저히 높은 효율과 긴 수명을 나타내는 것을 확인하였다.

[487] 또한, 본 발명의 화합물과 유사하게 카바졸을 모핵으로 사용하는 구조인 비교화합물 2 내지 비교화합물 4를 사용한 비교예 2 내지 비교예 4를 살펴보면, 카바졸의 3번 위치에 연결기가 결합되는 경우(비교예 2)는 카바졸의 2번 위치에 연결기가 결합되는 경우(비교예 3, 비교예 4)보다 효율은 조금 낮으나 비교적 긴 수명을 나타내는 것을 확인할 수 있으며, 연결기가 비선형(non-linear)의 구조인 비교예 4는 연결기가 선형(linear)의 구조인 비교예 3에 비해 높은 효율을 나타내는 것을 확인하였다.

[488] 최종적으로 표 4의 결과를 살펴보면, 카바졸의 2번 위치에 오쏘-오쏘(ortho-ortho), 오쏘-메타(ortho-meta), 오쏘-파라(ortho-para) 위치로 연결기-아민기가 결합되어 있는 본 발명의 화합물을 사용한 소자가 메타-파라(meta-para)로 연결기-아민기가 결합되어 있는 비교예 4보다 높은 효율 및 긴 수명을 나타내는 것을 확인하였다. 한편, 본 발명의 화합물을 사용한 소자 중에서는 P2 타입(오쏘-메타; ortho-meta)이 P1 타입(오쏘-오쏘; ortho-ortho) 및 P3 타입(오쏘-파라; ortho-para)보다 높은 효율 및 긴 수명을 나타내는 것을 확인할 수

있다.

[489] 이는 다음과 같이 설명할 수 있는데, 연결기가 카바졸의 2번 위치에 연결되는 경우가 카바졸의 3번 위치에 연결되는 경우보다 콘쥬게이션 길이(conjugation length)가 짧아지게 되며, 이로 인해 밴드갭(band gap)이 넓어지게 되어 깊은 HOMO값을 갖게 된다. 또한 연결기-아민기가 선형(linear)으로 결합된 것보다 본 발명의 화합물과 같이 비선형(non-linear), 특히 오쏘(ortho) 위치로 결합됨에 따라 결합각이 작아져 높은 T1값을 갖게 되고 이로 인해 전자 블로킹 능력이 향상되었다. 따라서 본 발명의 화합물을 사용한 소자는 결과적으로 깊은 HOMO값과 향상된 전자 블로킹 능력으로 인해 엑시톤이 발광층 내에서 더욱 쉽게 생성되면서 효율이 향상되고, 수명이 길어지는 것으로 판단된다.

[490] 앞에서 설명한 특성(깊은 HOMO 에너지 레벨, 높은 T1값, 열적 안정성)들을 종합해보면 카바졸의 결합위치와 아민기의 결합 위치에 따라 밴드갭(band gap) 및 전기적 특성, 계면 특성 등이 크게 변화될 수 있다는 것을 보여주며 이는 소자의 성능 향상에 주요한 인자로 작용한다는 것을 확인할 수 있다.

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

[492]

[493] **[실시예 349] 발광보조층 Red에 적용**

[494] 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, "NPD"로 약기함)을 60nm 두께로 진공증착하여 정공수송층을 형성하였다. 이어서, 상기 정공수송층 상에 본 발명의 화합물 P1-1을 20nm 두께로 진공증착하여 발광보조층을 형성한 후, 상기 발광보조층 상에 CBP를 호스트 물질로, (piq)₂Ir(acac)[bis-(1-phenylisoquinolyl)iridium(III)acetylacetonate]를 도판트 물질로 하여 95:5 중량비로 도핑하여 30nm 두께로 진공증착하여 발광층을 형성하였다. 이어서, 상기 발광층 상에 BAQ를 10nm 두께로 진공증착하여 정공저지층을 형성하고, 상기 정공저지층 상에 Alq₃을 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.

[495] **[실시예 350] 내지 [실시예 476] 발광보조층 Red에 적용**

[496] 발광보조층 물질로 본 발명의 화합물 P1-1 대신 하기 표 5에 기재된 본 발명의 화합물 P1-2 내지 P1-16, P1-63, P1-64, P1-101 내지 P1-108, P2-1 내지 P2-20, P2-45

내지 P2-52, P2-61 내지 P2-64, P3-17 내지 P3-20, P3-45 내지 P3-52, P3-61, P3-62, P3-101 내지 P3-108, P4-1 내지 P4-48 중 하나를 사용한 점을 제외하고는 상기 실시예 349와 동일한 방법으로 유기전기발광소자를 제조하였다.

[497] **[비교예 5] 내지 [비교예 8]**

[498] 발광보조층 물질로 본 발명의 화합물 P1-1 대신 비교예 5는 상기 비교화합물 2를, 비교예 6은 상기 비교화합물 3을, 비교예 7은 상기 비교화합물 4를 사용하고, 비교예 8은 발광보조층을 형성하지 않은 점을 제외하고는 실시예 349와 동일한 방법으로 유기전기발광소자를 제조하였다.

[499] 본 발명의 실시예 349 내지 실시예 476 및 비교예 5 내지 비교예 8에 의해 제조된 유기전기발광소자들에 순바이어스 직류전압을 가하여 포토리서치(photoresearch)사의 PR-650으로 전기발광(EL) 특성을 측정하였으며, 2500cd/m² 기준 휘도에서 맥사이언스사에서 제조된 수명 측정 장비를 통해 T95 수명을 측정하였다. 그 측정 결과는 하기 표 5와 같다.

[500] [표 5]

[501]

	화합물	구동전압 (V)	전류밀도 (mA/cm ²)	휘도 (cd/m ²)	효율 (cd/A)	수명 T(95)	CIE	
							x	y
비교예(5)	비교예(2)	5.9	29.0	2500.0	8.6	102.0	0.65	0.31
비교예(6)	비교예(3)	6.0	28.1	2500.0	8.9	111.2	0.64	0.34
비교예(7)	비교예(4)	6.1	27.5	2500.0	9.1	116.0	0.66	0.33
비교예(8)	-	5.7	34.2	2500.0	7.3	51.5	0.64	0.31
실시예(349)	P1-1	5.8	23.5	2500.0	10.6	138.1	0.64	0.32
실시예(350)	P1-2	5.8	20.0	2500.0	12.5	148.9	0.65	0.31
실시예(351)	P1-3	6.1	18.1	2500.0	13.8	135.3	0.66	0.32
실시예(352)	P1-4	5.7	18.3	2500.0	13.7	147.9	0.66	0.30
실시예(353)	P1-5	5.8	18.2	2500.0	13.7	149.8	0.66	0.32
실시예(354)	P1-6	6.1	17.9	2500.0	13.9	120.2	0.64	0.30
실시예(355)	P1-7	5.9	17.9	2500.0	13.9	142.5	0.66	0.33
실시예(356)	P1-8	6.1	23.9	2500.0	10.5	137.9	0.65	0.30
실시예(357)	P1-9	5.7	23.4	2500.0	10.7	146.0	0.65	0.31
실시예(358)	P1-10	5.7	21.5	2500.0	11.6	128.7	0.66	0.33
실시예(359)	P1-11	6.0	24.7	2500.0	10.1	144.2	0.65	0.32
실시예(360)	P1-12	5.7	20.4	2500.0	12.3	145.1	0.65	0.30
실시예(361)	P1-13	5.8	17.0	2500.0	14.7	137.8	0.65	0.34
실시예(362)	P1-14	5.7	22.4	2500.0	11.1	126.3	0.64	0.34
실시예(363)	P1-15	6.0	19.0	2500.0	13.1	135.8	0.64	0.31
실시예(364)	P1-16	6.0	20.8	2500.0	12.0	142.8	0.65	0.32
실시예(365)	P1-63	5.8	17.5	2500.0	14.2	137.3	0.65	0.30
실시예(366)	P1-64	6.0	23.0	2500.0	10.9	132.2	0.66	0.32
실시예(367)	P1-101	5.8	17.2	2500.0	14.5	146.3	0.64	0.31
실시예(368)	P1-102	5.9	23.9	2500.0	10.4	148.6	0.66	0.31
실시예(369)	P1-103	5.8	17.2	2500.0	14.5	148.0	0.65	0.30
실시예(370)	P1-104	5.9	17.8	2500.0	14.0	130.2	0.64	0.31
실시예(371)	P1-105	6.0	21.3	2500.0	11.8	120.2	0.64	0.31
실시예(372)	P1-106	5.8	21.0	2500.0	11.9	143.1	0.65	0.33

[502]

실시예(373)	P1-107	6.1	20.7	2500.0	12.1	140.3	0.65	0.34
실시예(374)	P1-108	5.9	18.6	2500.0	13.4	127.2	0.64	0.31
실시예(375)	P2-1	5.8	14.2	2500.0	17.6	131.5	0.65	0.31
실시예(376)	P2-2	5.9	15.6	2500.0	16.0	133.2	0.65	0.31
실시예(377)	P2-3	5.7	13.0	2500.0	19.3	141.2	0.65	0.33
실시예(378)	P2-4	5.9	15.4	2500.0	16.2	133.7	0.66	0.31
실시예(379)	P2-5	5.8	13.4	2500.0	18.7	130.2	0.64	0.33
실시예(380)	P2-6	5.9	14.3	2500.0	17.5	138.9	0.64	0.31
실시예(381)	P2-7	6.1	12.7	2500.0	19.7	138.8	0.64	0.31
실시예(382)	P2-8	5.8	13.2	2500.0	18.9	145.7	0.65	0.30
실시예(383)	P2-9	5.9	14.4	2500.0	17.4	125.8	0.65	0.34
실시예(384)	P2-10	6.0	14.0	2500.0	17.8	129.3	0.66	0.33
실시예(385)	P2-11	5.7	14.7	2500.0	17.1	131.3	0.66	0.31
실시예(386)	P2-12	5.9	13.7	2500.0	18.3	140.2	0.65	0.31
실시예(387)	P2-13	6.0	14.3	2500.0	17.5	131.3	0.66	0.32
실시예(388)	P2-14	5.7	13.0	2500.0	19.3	125.5	0.65	0.33
실시예(389)	P2-15	5.8	16.2	2500.0	15.5	122.5	0.65	0.33
실시예(390)	P2-16	6.0	14.5	2500.0	17.3	147.1	0.65	0.32
실시예(391)	P2-17	5.9	13.0	2500.0	19.2	124.2	0.65	0.31
실시예(392)	P2-18	5.7	14.2	2500.0	17.6	132.9	0.64	0.30
실시예(393)	P2-19	5.9	15.5	2500.0	16.2	122.3	0.65	0.33
실시예(394)	P2-20	5.9	13.0	2500.0	19.3	132.8	0.66	0.31
실시예(395)	P2-45	5.8	12.7	2500.0	19.6	127.7	0.64	0.31
실시예(396)	P2-46	5.7	14.7	2500.0	17.0	133.4	0.66	0.30
실시예(397)	P2-47	5.9	15.2	2500.0	16.5	128.9	0.65	0.31
실시예(398)	P2-48	5.9	13.2	2500.0	18.9	132.6	0.66	0.30
실시예(399)	P2-49	5.8	12.5	2500.0	20.0	128.4	0.65	0.33
실시예(400)	P2-50	6.0	13.9	2500.0	17.9	144.4	0.66	0.34
실시예(401)	P2-51	5.8	13.1	2500.0	19.2	147.3	0.66	0.31
실시예(402)	P2-52	5.9	13.8	2500.0	18.1	128.9	0.65	0.34

[503]

실시예(403)	P2-61	5.9	13.8	2500.0	18.1	131.5	0.65	0.32
실시예(404)	P2-62	5.7	16.5	2500.0	15.1	133.2	0.65	0.32
실시예(405)	P2-63	6.0	15.5	2500.0	16.2	141.2	0.64	0.30
실시예(406)	P2-64	5.7	12.7	2500.0	19.6	133.7	0.66	0.32
실시예(407)	P3-17	6.1	17.4	2500.0	14.4	133.0	0.66	0.30
실시예(408)	P3-18	5.8	21.7	2500.0	11.5	139.7	0.64	0.31
실시예(409)	P3-19	5.8	18.4	2500.0	13.6	132.7	0.66	0.30
실시예(410)	P3-20	5.7	18.4	2500.0	13.6	123.9	0.64	0.33
실시예(411)	P3-45	5.9	24.2	2500.0	10.3	141.4	0.66	0.33
실시예(412)	P3-46	5.9	20.5	2500.0	12.2	133.6	0.65	0.32
실시예(413)	P3-47	5.9	18.4	2500.0	13.6	149.3	0.65	0.32
실시예(414)	P3-48	5.8	19.7	2500.0	12.7	139.8	0.64	0.31
실시예(415)	P3-49	5.8	18.9	2500.0	13.2	123.3	0.65	0.33
실시예(416)	P3-50	6.0	20.0	2500.0	12.5	149.3	0.65	0.33
실시예(417)	P3-51	5.8	16.9	2500.0	14.8	136.3	0.66	0.32
실시예(418)	P3-52	5.9	18.7	2500.0	13.4	147.0	0.66	0.31
실시예(419)	P3-61	5.9	19.7	2500.0	12.7	142.0	0.65	0.31
실시예(420)	P3-62	5.7	22.8	2500.0	11.0	122.5	0.64	0.32
실시예(421)	P3-101	5.9	17.7	2500.0	14.1	141.0	0.65	0.31
실시예(422)	P3-102	5.7	21.4	2500.0	11.7	127.4	0.65	0.32
실시예(423)	P3-103	6.1	22.3	2500.0	11.2	140.9	0.65	0.31
실시예(424)	P3-104	6.0	17.3	2500.0	14.5	121.0	0.66	0.33
실시예(425)	P3-105	6.0	21.1	2500.0	11.8	146.3	0.66	0.34
실시예(426)	P3-106	5.8	21.7	2500.0	11.5	128.1	0.66	0.31
실시예(427)	P3-107	5.8	17.8	2500.0	14.0	131.5	0.65	0.33
실시예(428)	P3-108	5.8	19.0	2500.0	13.1	149.7	0.66	0.34
실시예(429)	P4-1	5.5	14.4	2500.0	17.4	134.8	0.64	0.32
실시예(430)	P4-2	5.5	15.8	2500.0	15.9	132.0	0.65	0.31
실시예(431)	P4-3	5.5	16.5	2500.0	15.1	137.1	0.66	0.32
실시예(432)	P4-4	5.4	12.8	2500.0	19.5	136.7	0.66	0.30

[504]

실시예(433)	P4-5	5.4	12.7	2500.0	19.6	141.5	0.66	0.32
실시예(434)	P4-6	5.4	15.3	2500.0	16.3	136.9	0.64	0.30
실시예(435)	P4-7	5.4	12.5	2500.0	19.9	141.6	0.66	0.33
실시예(436)	P4-8	5.5	14.4	2500.0	17.4	147.3	0.65	0.30
실시예(437)	P4-9	5.4	13.3	2500.0	18.9	141.8	0.65	0.31
실시예(438)	P4-10	5.3	13.6	2500.0	18.4	137.9	0.66	0.33
실시예(439)	P4-11	5.4	13.8	2500.0	18.1	142.9	0.65	0.32
실시예(440)	P4-12	5.4	12.8	2500.0	19.5	149.2	0.65	0.30
실시예(441)	P4-13	5.4	16.3	2500.0	15.4	147.3	0.65	0.34
실시예(442)	P4-14	5.3	16.6	2500.0	15.1	135.1	0.64	0.34
실시예(443)	P4-15	5.3	13.9	2500.0	18.0	141.4	0.64	0.31
실시예(444)	P4-16	5.4	14.9	2500.0	16.8	141.2	0.65	0.32
실시예(445)	P4-17	5.3	13.1	2500.0	19.0	148.9	0.65	0.30
실시예(446)	P4-18	5.4	13.7	2500.0	18.2	134.3	0.66	0.32
실시예(447)	P4-19	5.3	14.9	2500.0	16.8	138.9	0.64	0.31
실시예(448)	P4-20	5.3	12.8	2500.0	19.5	145.5	0.66	0.31
실시예(449)	P4-21	5.4	14.5	2500.0	17.2	138.9	0.65	0.30
실시예(450)	P4-22	5.4	15.5	2500.0	16.1	145.4	0.64	0.31
실시예(451)	P4-23	5.3	14.7	2500.0	17.0	130.4	0.64	0.31
실시예(452)	P4-24	5.4	14.5	2500.0	17.3	133.3	0.65	0.33
실시예(453)	P4-25	5.3	15.5	2500.0	16.1	130.8	0.65	0.34
실시예(454)	P4-26	5.4	14.0	2500.0	17.8	140.3	0.64	0.31
실시예(455)	P4-27	5.5	16.4	2500.0	15.2	143.8	0.65	0.31
실시예(456)	P4-28	5.4	16.5	2500.0	15.1	130.3	0.65	0.31
실시예(457)	P4-29	5.5	13.4	2500.0	18.6	140.3	0.65	0.33
실시예(458)	P4-30	5.4	12.7	2500.0	19.6	144.7	0.66	0.31
실시예(459)	P4-31	5.3	13.7	2500.0	18.3	134.9	0.64	0.33
실시예(460)	P4-32	5.3	13.8	2500.0	18.2	146.6	0.64	0.31
실시예(461)	P4-33	5.3	14.3	2500.0	17.5	132.5	0.64	0.31
실시예(462)	P4-34	5.4	15.0	2500.0	16.6	133.9	0.65	0.30

[505]

실시예(463)	P4-35	5.4	15.7	2500.0	15.9	146.8	0.65	0.34
실시예(464)	P4-36	5.4	16.2	2500.0	15.4	137.2	0.66	0.33
실시예(465)	P4-37	5.4	14.4	2500.0	17.3	135.6	0.66	0.31
실시예(466)	P4-38	5.4	13.9	2500.0	18.0	149.9	0.65	0.31
실시예(467)	P4-39	5.4	16.6	2500.0	15.0	139.2	0.66	0.32
실시예(468)	P4-40	5.4	15.8	2500.0	15.8	137.4	0.65	0.33
실시예(469)	P4-41	5.4	12.7	2500.0	19.6	143.9	0.65	0.33
실시예(470)	P4-42	5.5	13.6	2500.0	18.4	141.9	0.65	0.32
실시예(471)	P4-43	5.5	13.5	2500.0	18.5	147.7	0.65	0.31
실시예(472)	P4-44	5.5	15.1	2500.0	16.6	137.9	0.64	0.30
실시예(473)	P4-45	5.3	13.3	2500.0	18.8	140.9	0.65	0.33
실시예(474)	P4-46	5.4	13.1	2500.0	19.1	136.2	0.66	0.31
실시예(475)	P4-47	5.3	14.2	2500.0	17.6	145.1	0.64	0.31
실시예(476)	P4-48	5.4	12.8	2500.0	19.5	138.4	0.66	0.30

[506]

[507] [실시예 477] 그린유기발광소자(발광보조층)

[508] 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 NPD를 60nm 두께로 진공증착하여 정공수송층을 형성하였다. 이어서, 상기 정공수송층 상에 본 발명의 화합물 P1-21을 20nm 두께로 진공증착하여 발광보조층을 형성한 후, 상기 발광보조층 상에 CBP를 호스트 물질로, Ir(ppy)₃을 도판트 물질로 하여 95:5 중량비로 도핑하여 30nm 두께로 진공증착하여 발광층을 형성하였다. 이어서, 상기 발광층 상에 BAlq를 10nm 두께로 진공증착하여 정공저지층을 형성하고, 상기 정공저지층 상에 Alq₃을 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.

[509] [실시예 478] 내지 [실시예 516] 그린유기발광소자(발광보조층)

[510] 발광보조층 물질로 본 발명의 화합물 P1-21 대신 하기 표 6에 기재된 본 발명의 화합물 P1-22 내지 P1-30, P2-31 내지 P2-38, P3-39 내지 P3-44 및 P3-77 내지 P3-92 중 하나를 사용한 점을 제외하고는 상기 실시예 477과 동일한 방법으로 유기전기발광소자를 제조하였다.

[511] [비교예 9] 내지 [비교예 12] 그린유기발광소자(발광보조층)

- [512] 발광보조층 물질로 본 발명의 화합물 P1-21 대신, 비교예 9는 상기 비교화합물 2를, 비교예 10은 상기 비교화합물 3을, 비교예 11은 상기 비교화합물 4를 사용하고, 비교예 12는 발광보조층을 형성하지 않은 점을 제외하고는 상기 실시예 477과 동일한 방법으로 유기전기발광소자를 제조하였다.
- [513] 본 발명의 실시예 417 내지 실시예 516 및 비교예 9 내지 비교예 12에 의해 제조된 유기전기발광소자들에 순바이어스 직류전압을 가하여 포토리서치(photoresearch)사의 PR-650으로 전기발광(EL) 특성을 측정하였으며, 5000cd/m² 기준 휘도에서 맥사이언스사에서 제조된 수명 측정 장비를 통해 T95 수명을 측정하였다. 그 측정 결과는 하기 표 6과 같다.
- [514] [표 6]

[515]

	화합물	구동전압 (V)	전류밀도 (mA/cm ²)	휘도 (cd/m ²)	효율 (cd/A)	수명 T(95)	CIE	
							x	y
비교예(9)	비교예(2)	5.6	13.6	5000	36.8	116.9	0.33	0.61
비교예(10)	비교예(3)	5.8	12.3	5000	40.5	118.7	0.33	0.61
비교예(11)	비교예(4)	6.1	11.6	5000	43.2	124.5	0.33	0.61
비교예(12)	-	5.6	21.7	5000	23.0	65.7	0.33	0.61
실시예(477)	P1-21	5.7	10.8	5000.0	46.4	143.2	0.33	0.62
실시예(478)	P1-22	5.9	10.4	5000.0	48.0	139.4	0.33	0.62
실시예(479)	P1-23	5.9	11.0	5000.0	45.4	131.1	0.33	0.61
실시예(480)	P1-24	5.7	11.1	5000.0	45.2	146.6	0.33	0.61
실시예(481)	P1-25	5.9	11.0	5000.0	45.5	138.3	0.33	0.62
실시예(482)	P1-26	5.9	10.5	5000.0	47.6	145.8	0.33	0.61
실시예(483)	P1-27	5.8	10.7	5000.0	46.7	130.1	0.33	0.62
실시예(484)	P1-28	5.7	11.0	5000.0	45.5	136.1	0.33	0.62
실시예(485)	P1-29	5.8	10.6	5000.0	47.0	144.8	0.33	0.62
실시예(486)	P1-30	5.6	10.7	5000.0	46.8	137.0	0.33	0.61
실시예(487)	P2-31	5.8	9.5	5000.0	52.6	137.7	0.33	0.62
실시예(488)	P2-32	5.8	9.9	5000.0	50.7	145.9	0.33	0.61
실시예(489)	P2-33	5.7	9.5	5000.0	52.8	140.5	0.33	0.62
실시예(490)	P2-34	5.8	9.5	5000.0	52.5	149.4	0.33	0.61
실시예(491)	P2-35	5.9	10.1	5000.0	49.7	144.3	0.33	0.61
실시예(492)	P2-36	5.9	9.7	5000.0	51.7	133.7	0.33	0.62
실시예(493)	P2-37	5.9	10.1	5000.0	49.3	149.7	0.33	0.61
실시예(494)	P2-38	5.7	9.9	5000.0	50.5	141.0	0.33	0.61
실시예(495)	P3-39	6.0	10.5	5000.0	47.6	132.8	0.33	0.62
실시예(496)	P3-40	5.6	10.8	5000.0	46.4	141.7	0.33	0.61
실시예(497)	P3-41	5.8	10.8	5000.0	46.5	142.7	0.33	0.61
실시예(498)	P3-42	5.8	11.0	5000.0	45.3	141.3	0.33	0.62
실시예(499)	P3-43	5.7	11.1	5000.0	45.0	141.2	0.33	0.61
실시예(500)	P3-44	5.9	10.8	5000.0	46.5	130.3	0.33	0.62

[516]

실시예(501)	P3-77	5.7	11.1	5000.0	45.2	139.9	0.33	0.62
실시예(502)	P3-78	5.9	11.0	5000.0	45.3	134.6	0.33	0.61
실시예(503)	P3-79	5.9	10.6	5000.0	47.2	132.9	0.33	0.61
실시예(504)	P3-80	5.9	10.7	5000.0	46.6	149.2	0.33	0.61
실시예(505)	P3-81	5.8	11.1	5000.0	45.2	142.9	0.33	0.62
실시예(506)	P3-82	5.8	11.0	5000.0	45.5	143.5	0.33	0.62
실시예(507)	P3-83	5.7	10.6	5000.0	47.2	135.9	0.33	0.61
실시예(508)	P3-84	5.9	10.5	5000.0	47.7	140.3	0.33	0.62
실시예(509)	P3-85	5.9	10.8	5000.0	46.3	143.4	0.33	0.61
실시예(510)	P3-86	5.8	11.0	5000.0	45.4	131.0	0.33	0.61
실시예(511)	P3-87	5.8	10.7	5000.0	46.7	148.2	0.33	0.61
실시예(512)	P3-88	5.8	10.9	5000.0	46.0	143.8	0.33	0.62
실시예(513)	P3-89	5.7	10.6	5000.0	47.4	146.7	0.33	0.62
실시예(514)	P3-90	6.0	10.5	5000.0	47.5	137.4	0.33	0.61
실시예(515)	P3-91	5.8	10.6	5000.0	47.2	138.4	0.33	0.61
실시예(516)	P3-92	5.8	11.0	5000.0	45.6	145.0	0.33	0.61

[517]

[518] 상기 표 5 및 표 6의 소자 측정 결과에서 알 수 있듯이, 본 발명의 화합물을 발광보조층의 재료로 사용한 소자가 비교화합물 2 내지 비교화합물 4를 발광보조층의 재료로 사용한 소자 및 발광보조층을 형성하지 않은 소자에 비해 높은 효율과 긴 수명을 나타내는 것을 확인하였다.

[519] 즉, 비교화합물 2 내지 비교화합물 4를 사용한 비교예 5 내지 비교예 7 및 비교예 9 내지 비교예 11에 비해 본 발명의 화합물을 사용한 소자가 효율 및 수명이 향상되는 것을 확인하였다. 특히, 발광보조층을 형성하지 않은 비교예 8 및 비교예 12에 비해 본 발명의 화합물을 사용한 소자가 현저히 높은 효율 및 긴 수명을 나타내는 것을 확인하였다.

[520] 또한, 카바졸의 2번 위치에 연결기가 결합되어 있더라도 아민기가 연결기의 어느 위치에 결합되느냐에 따라 수명에서 큰 차이를 나타내는 것을 확인할 수 있었다.

[521] 이는 아민기가 연결기의 어느 위치에 결합되느냐에 따라 결합각의 차이가 발생하며, 이로 인해 T1값의 차이가 발생하여 전자 블로킹 능력의 차이가 발생하기 때문인 것으로 판단된다.

[522] 또한, 레드 발광보조층의 소자 결과인 표 5를 보면, 본 발명의 화합물에서 R³ 또는 R⁴가 수소 이외의 치환기로 치환되어 있는 화합물 (P4-1 내지 P4-48)이 수소로치환된 화합물보다 레드 발광보조층으로 사용하였을 시, 효율은

유사하였으나 구동전압과 수명면에서 보다 더 향상된 결과를 나타내는 것을 확인하였다.

[523] 상기에서 설명한 바와 같이 카바졸과 연결기의 결합 위치 및 연결기와 아민기의 결합 위치에 따라 정공수송층뿐만 아니라 발광보조층에서의 소자 성능 향상에 주요 인자로 작용하여 비슷한 경향성을 나타내는 것을 확인할 수 있다.

[524] 이상, 본 발명을 예시적으로 설명하였으며, 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.

[525] CROSS-REFERENCE TO RELATED APPLICATION

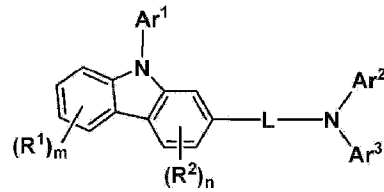
[526] 본 특허출원은 2014년 2월 19일 한국에 출원한 특허출원번호 제10-2014-0018889호 및 2014년 6월 13일 한국에 출원한 특허출원번호 제10-2014-0072377호에 대해 미국 특허법 119(a)조 (35 U.S.C § 119(a))에 따라 우선권을 주장하며, 그 모든 내용은 참고문헌으로 본 특허출원에 병합된다. 아울러, 본 특허출원은 미국 이외에 국가에 대해서도 위와 동일한 이유로 우선권을 주장하면 그 모든 내용은 참고문헌으로 본 특허출원에 병합된다.

청구범위

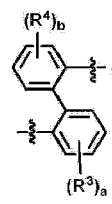
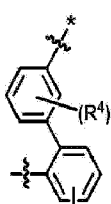
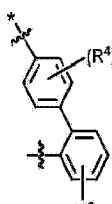
[청구항 1]

하기 화학식 1로 표시되는 화합물:

<화학식 1>



상기 화학식 1에서, Ar¹ 내지 Ar³은 서로 독립적으로, C₆-C₆₀의 아릴기; 플루오렌일기; O, N, S, Si 및 P로 이루어진 군에서 선택된 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C₂-C₆₀의 헤테로고리기; C₃-C₆₀의 지방족고리와 C₆-C₆₀의 방향족고리의 융합고리기; C₁-C₅₀의 알킬기; C₂-C₂₀의 알켄일기; C₂-C₂₀의 알킨일기; C₁-C₃₀의 알콕실기; 및 C₆-C₃₀의 아릴옥시기;로 이루어진 군에서 선택되며,

L은 ,  또는  이고(표시 *는 화학식 1 중

아민기의 질소와 결합되는 위치를 의미함),

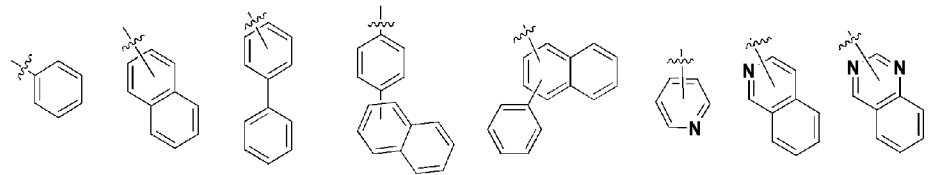
a, b 및 m은 각각 0 내지 4의 정수이고, n은 0 내지 3의 정수이며, R¹ 내지 R⁴는 서로 독립적으로, i) 중수소; 할로젠; C₆-C₆₀의 아릴기; 플루오렌일기; O, N, S, Si 및 P로 이루어진 군에서 선택된 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C₂-C₆₀의 헤테로고리기; C₃-C₆₀의 지방족고리와 C₆-C₆₀의 방향족고리의 융합고리기; C₁-C₅₀의 알킬기; C₂-C₂₀의 알켄일기; C₂-C₂₀의 알킨일기; C₁-C₃₀의 알콕실기; C₆-C₃₀의 아릴옥시기; 및 -L'(R^a)(R^b);로 이루어진 군에서 선택되거나, 또는 ii) 이웃한 기끼리 서로 결합하여 적어도 하나의 고리를 형성할 수 있으며, 이때 고리를 형성하지 않는 R¹ 내지 R⁴는 각각 상기 i)에서 정의된 것과 동일하며,

상기 L'은 단일결합; C₆-C₆₀의 아릴렌기; 플루오렌일렌기; C₃-C₆₀의 지방족고리와 C₆-C₆₀의 방향족고리의 융합고리기; 및 O, N, S, Si 및 P로 이루어진 군에서 선택된 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C₂-C₆₀의 헤테로고리기;로 이루어진 군에서 선택되고, 상기 R^a 및 R^b는 서로 독립적으로 C₆-C₆₀의 아릴기; 플루오렌일기; C₃-C₆₀의 지방족고리와 C₆-C₆₀의 방향족고리의 융합고리기; 및 O, N, S, Si 및 P로 이루어진 군에서 선택된 적어도 하나의

헤테로원자를 포함하는 C_2-C_{60} 의 헤테로고리기;로 이루어진 군에서 선택되며,
 상기 아릴기, 플루오렌일기, 헤테로고리기, 융합고리기, 알킬기, 알켄일기, 알킨일기, 알콕실기, 아릴옥시기, 아릴렌기 및 플루오렌일렌기 각각은 중수소; 할로젠; 실란기; 실록산기; 붕소기; 게르마늄기; 시아노기; 니트로기; 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; O, N, S, Si 및 P로 이루어진 군에서 선택된 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 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 선택적으로 치환될 수 있다.

[청구항 2]

제 1항에 있어서,
 a와 b가 모두 O이거나, R^3 및 R^4 가 서로 독립적으로 하기 구조에서 선택되는 것을 특징으로 하는 화합물:

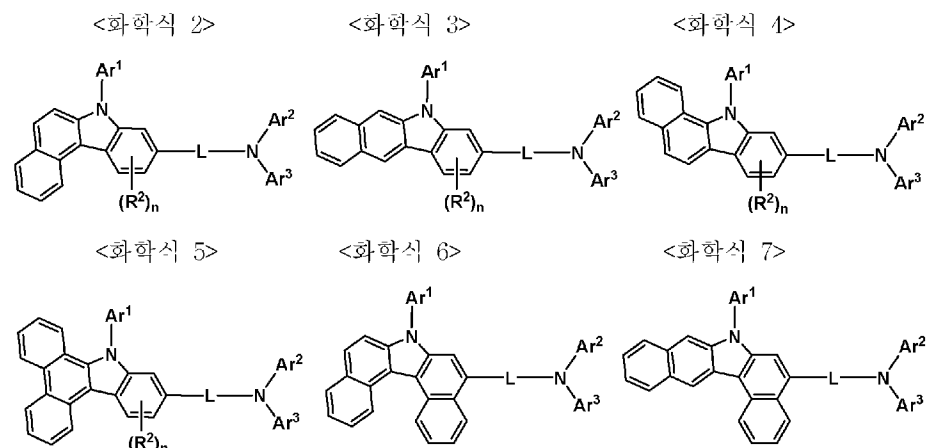


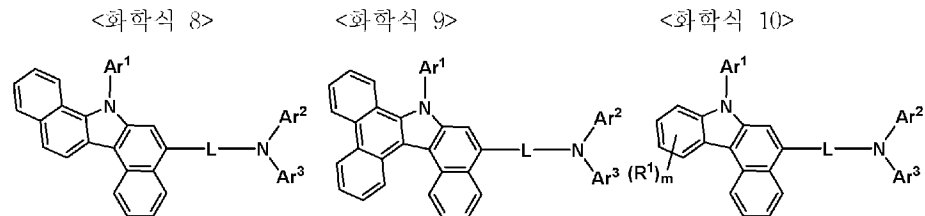
[청구항 3]

제 1항에 있어서,
 R^1 및 R^2 중 적어도 하나는 이웃한 기끼리 서로 결합하여 고리를 형성하는 것을 특징으로 하는 화합물.

[청구항 4]

제 3항에 있어서,
 하기 화학식 중 하나로 표시되는 것을 특징으로 하는 화합물:



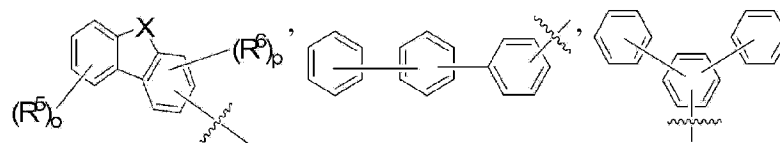


상기 화학식 2 내지 화학식 10에서, Ar¹ 내지 Ar³, L, R¹, R², m 및 n은 제 1항에서 정의된 것과 동일하다.

[청구항 5]

제 1항에 있어서,

상기 Ar¹은 하기 구조에서 선택되는 것을 특징으로 하는 화합물:



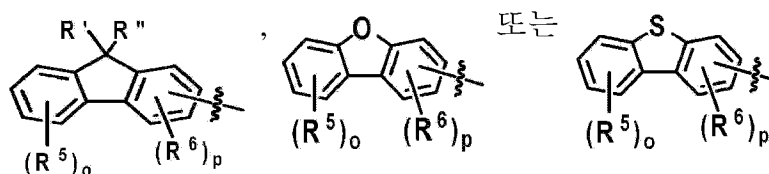
상기 구조에서, X는 O, S 또는 C(R')(R'')이고, 여기서 R' 및 R''은 서로 독립적으로, 수소; 중수소; 삼중수소; C₆-C₂₀의 아릴기; C₁-C₂₀의 알킬기; 및 C₂-C₂₀의 알켄일기;로 이루어진 군에서 선택되며, R' 및 R''은 서로 결합하여 이들이 결합된 탄소와 함께 스파이로 화합물을 형성할 수 있고,

o는 0 내지 4의 정수이고, p는 0 내지 3의 정수이며, R⁵ 및 R⁶은 서로 독립적으로, i) 중수소; 삼중수소; 할로젠; C₆-C₆₀의 아릴기; 플루오렌일기; O, N, S, Si 및 P로 이루어진 군에서 선택된 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C₂-C₆₀의 헤테로고리; C₃-C₆₀의 지방족고리와 C₆-C₆₀의 방향족고리의 융합고리; C₁-C₅₀의 알킬기; C₂-C₂₀의 알켄일기; C₂-C₂₀의 알킨일기; C₁-C₃₀의 알콕실기; 및 C₆-C₃₀의 아릴옥시기;로 이루어진 군에서 선택되거나, 또는 ii) 이웃한 기끼리 서로 결합하여 적어도 하나의 고리를 형성할 수 있으며, 단 고리를 형성하지 않는 R⁵ 및 R⁶은 상기 i)에서 정의된 것과 동일하다.

[청구항 6]

제 5항에 있어서,

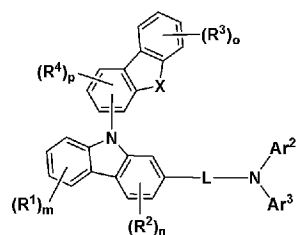
Ar¹은



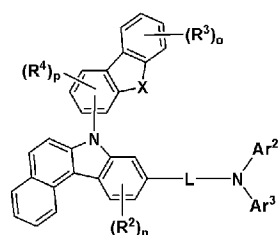
이고,

상기 화학식 1은 하기 화학식 11 내지 화학식 20 중에서 하나로 표시되는 것을 특징으로 하는 화합물:

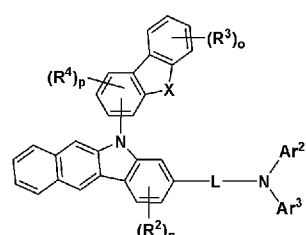
<화학식 11>



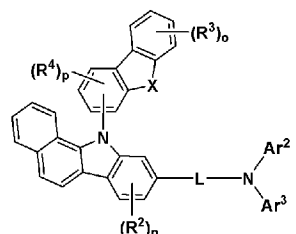
<화학식 12>



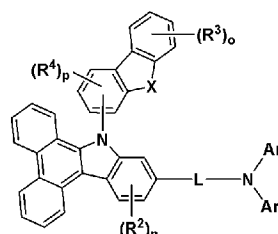
<화학식 13>



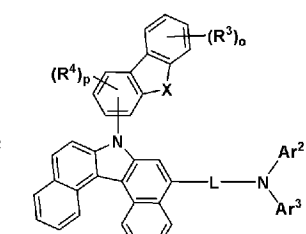
<화학식 14>



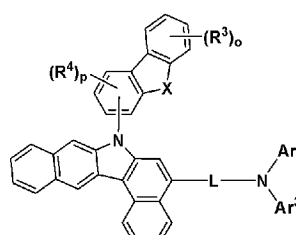
<화학식 15>



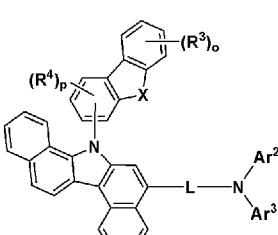
<화학식 16>



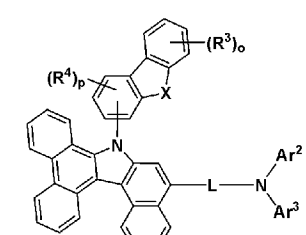
<화학식 17>



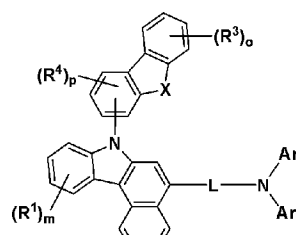
<화학식 18>



<화학식 19>



<화학식 20>

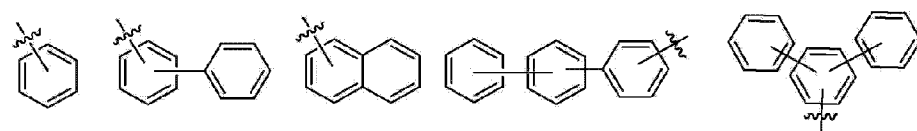


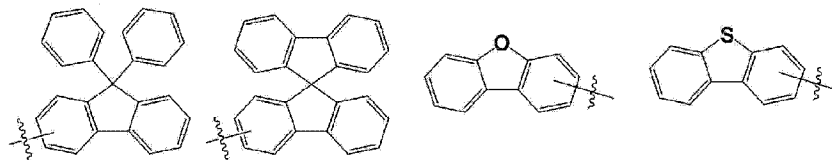
상기 화학식 11 내지 20에서, Ar², Ar³, L, R¹, R², m 및 n은 제1항에서 정의된 것과 동일하며, X, R⁵, R⁶, o 및 p는 제5항에서 정의된 것과 동일하다.

[청구항 7]

제 1항에 있어서,

상기 Ar² 및 Ar³은 서로 독립적으로 하기 구조에서 선택되는 것을 특징으로 하는 화합물:

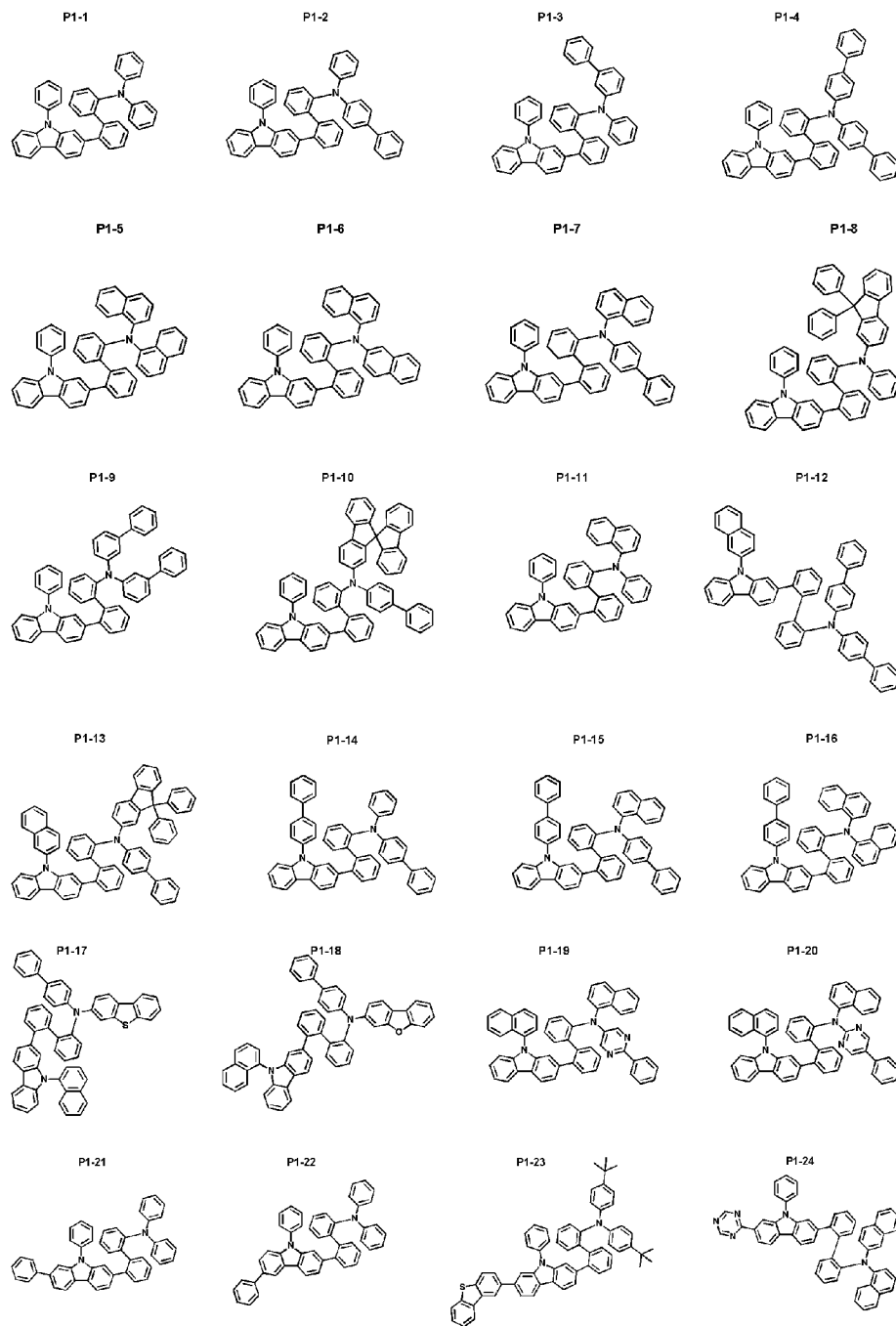


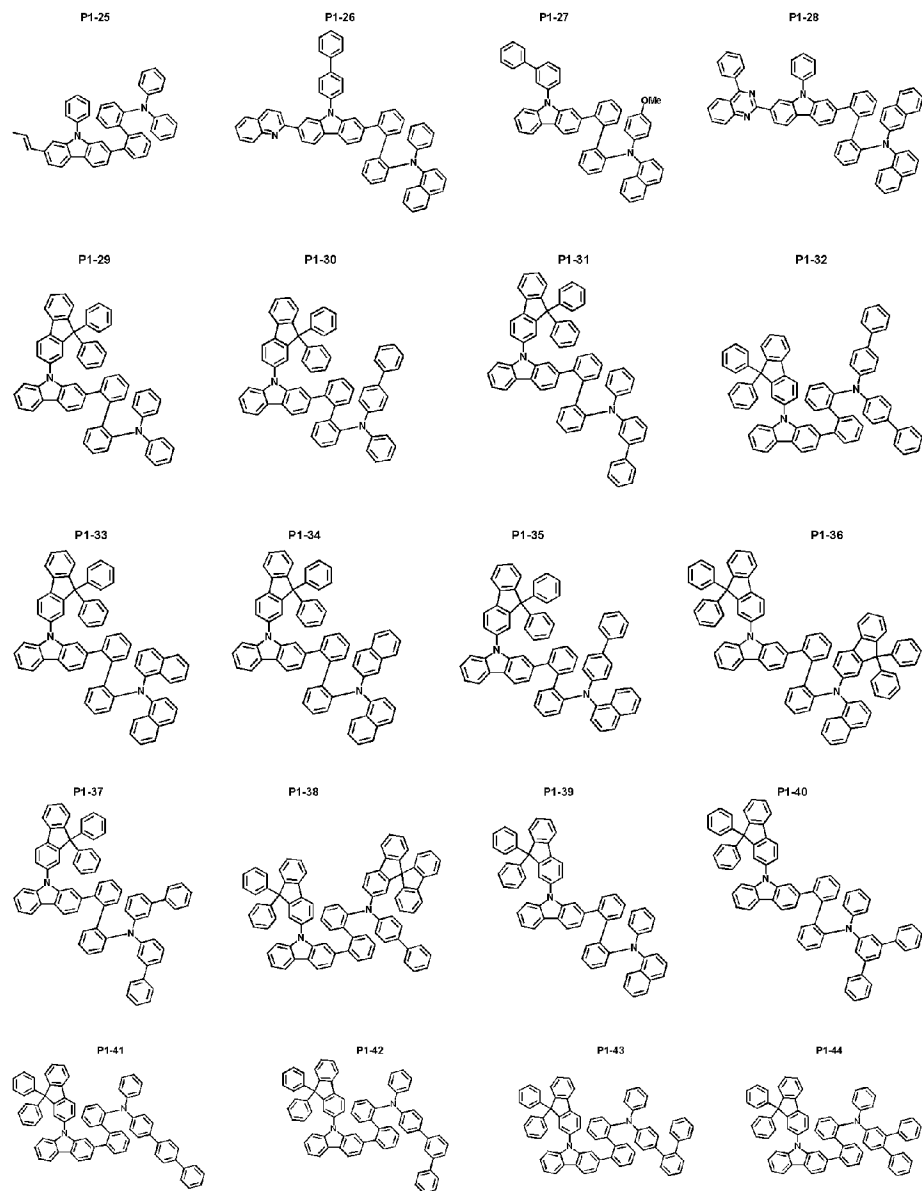


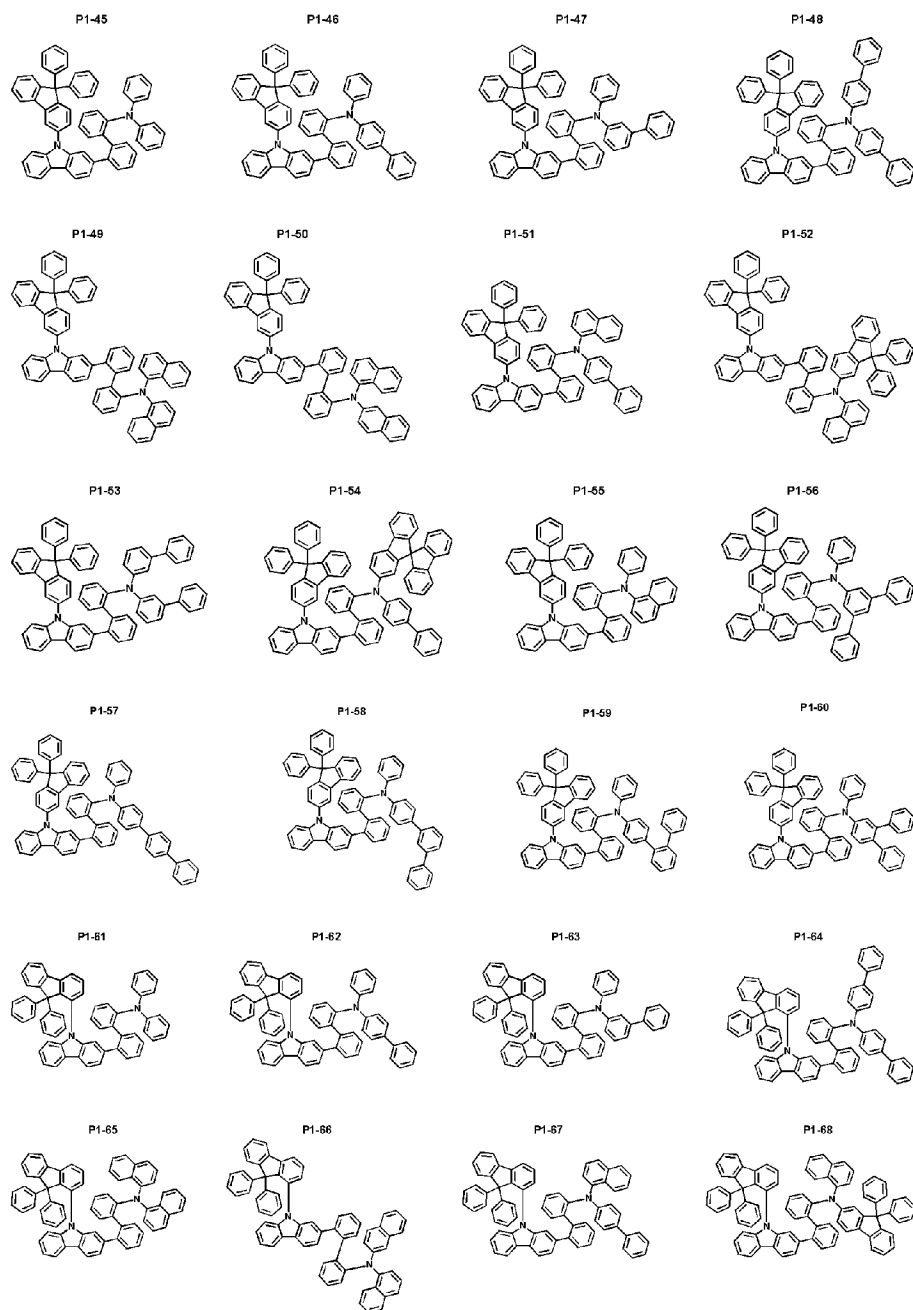
[청구항 8]

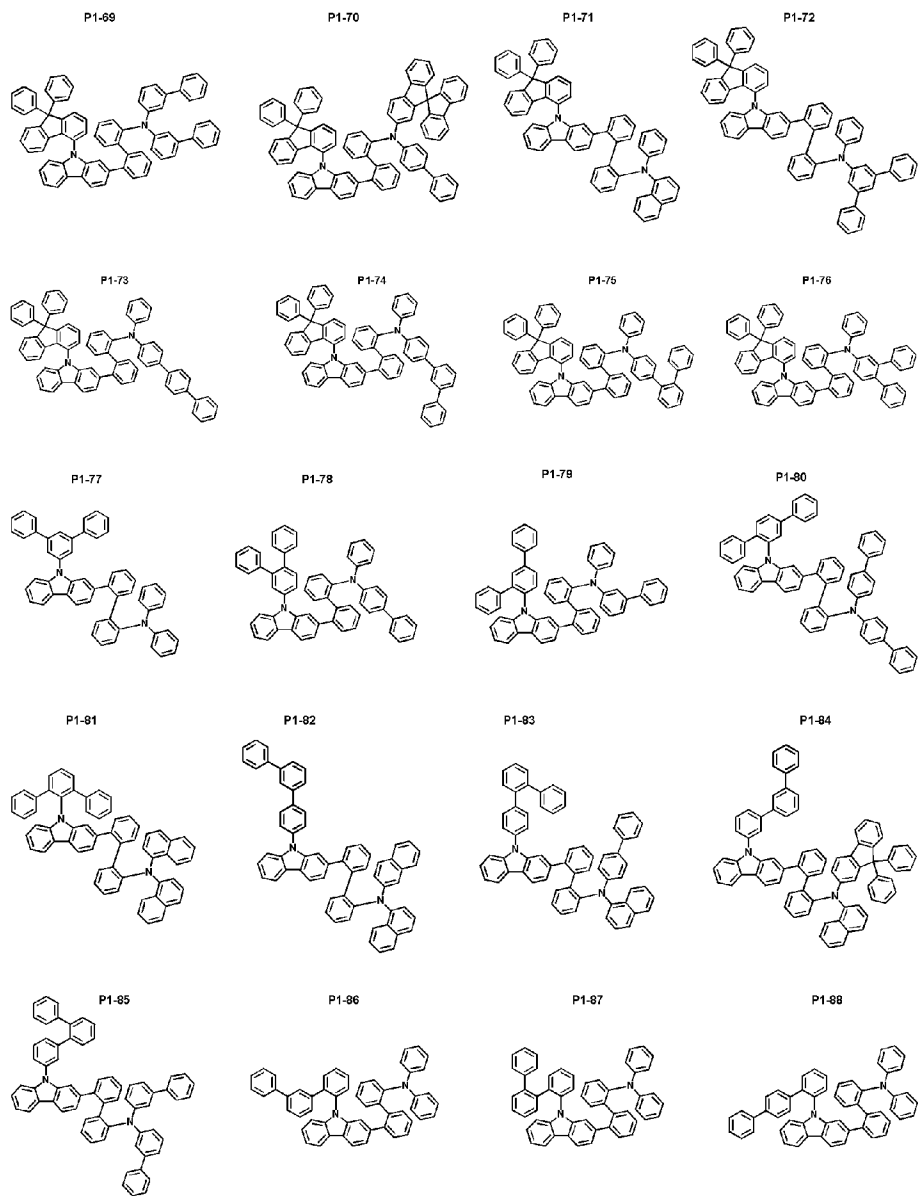
제 1항에 있어서,

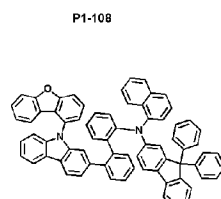
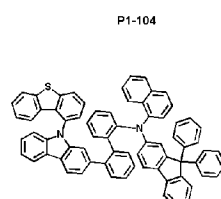
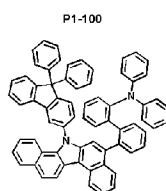
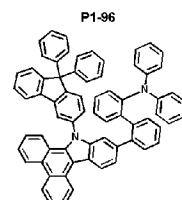
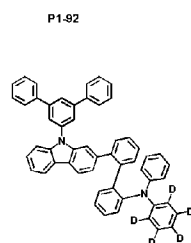
하기 화합물 중 하나인 것을 특징으로 하는 화합물:

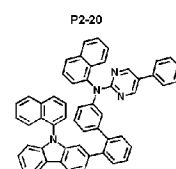
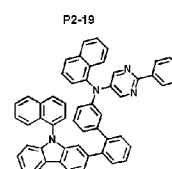
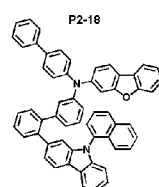
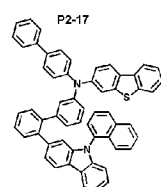
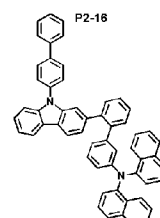
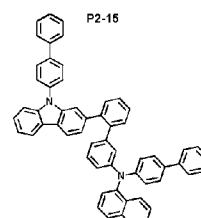
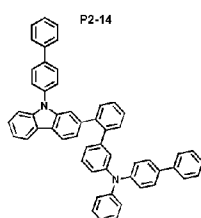
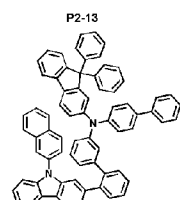
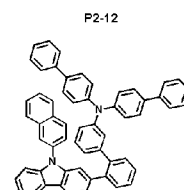
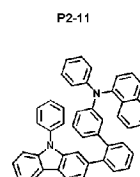
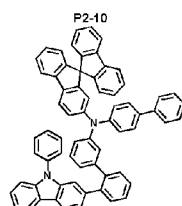
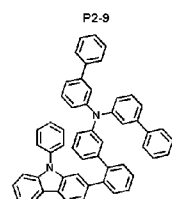
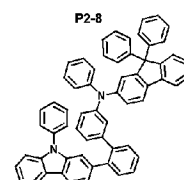
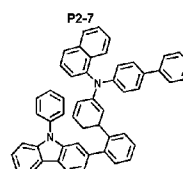
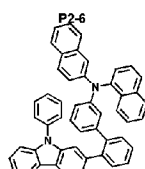
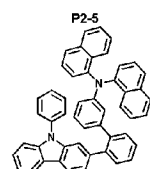
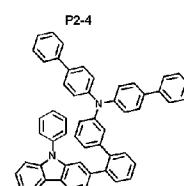
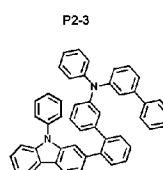
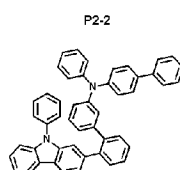
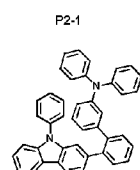
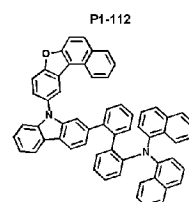
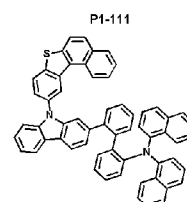
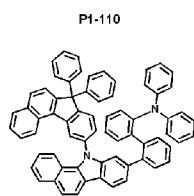
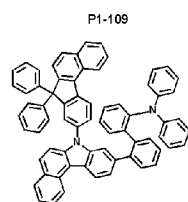


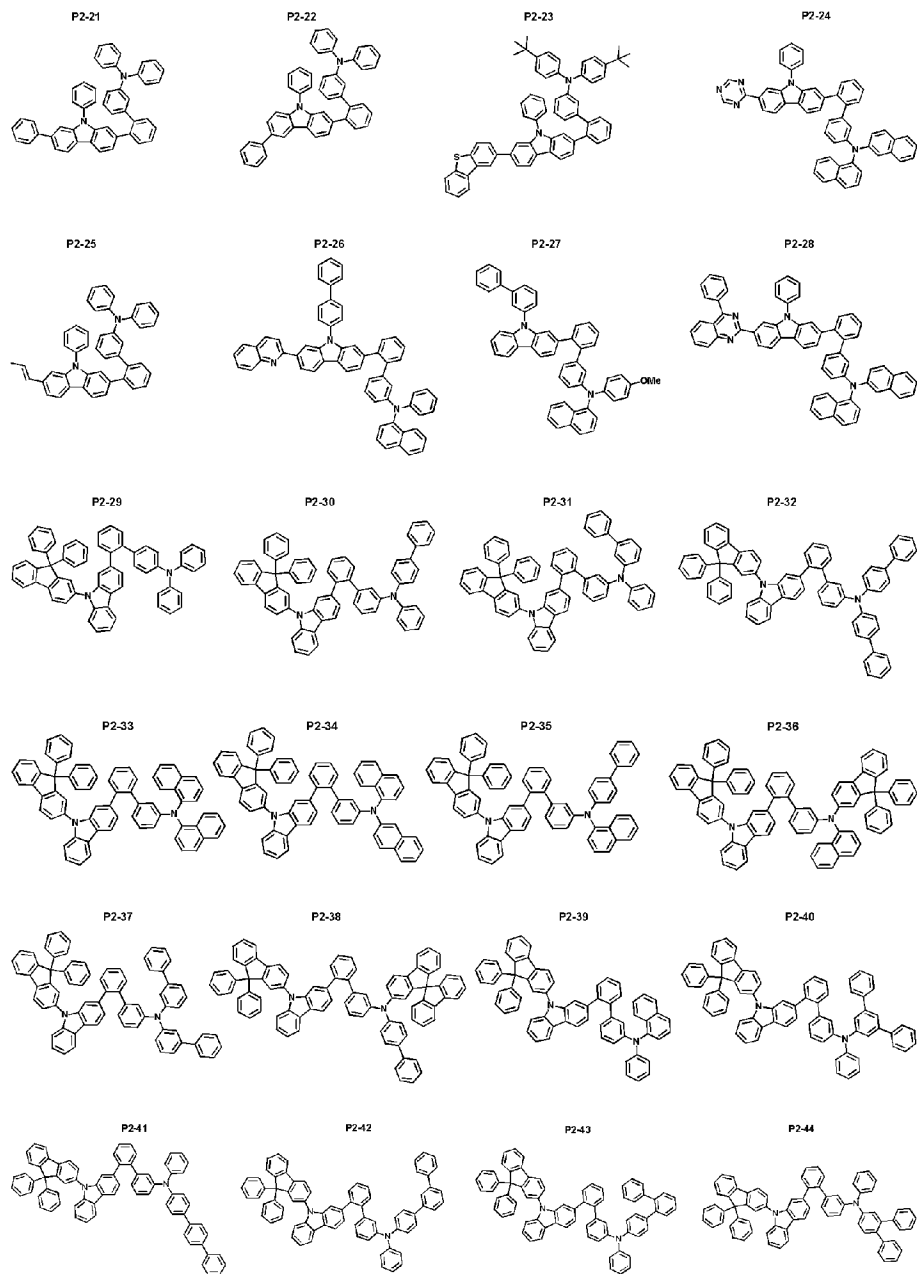


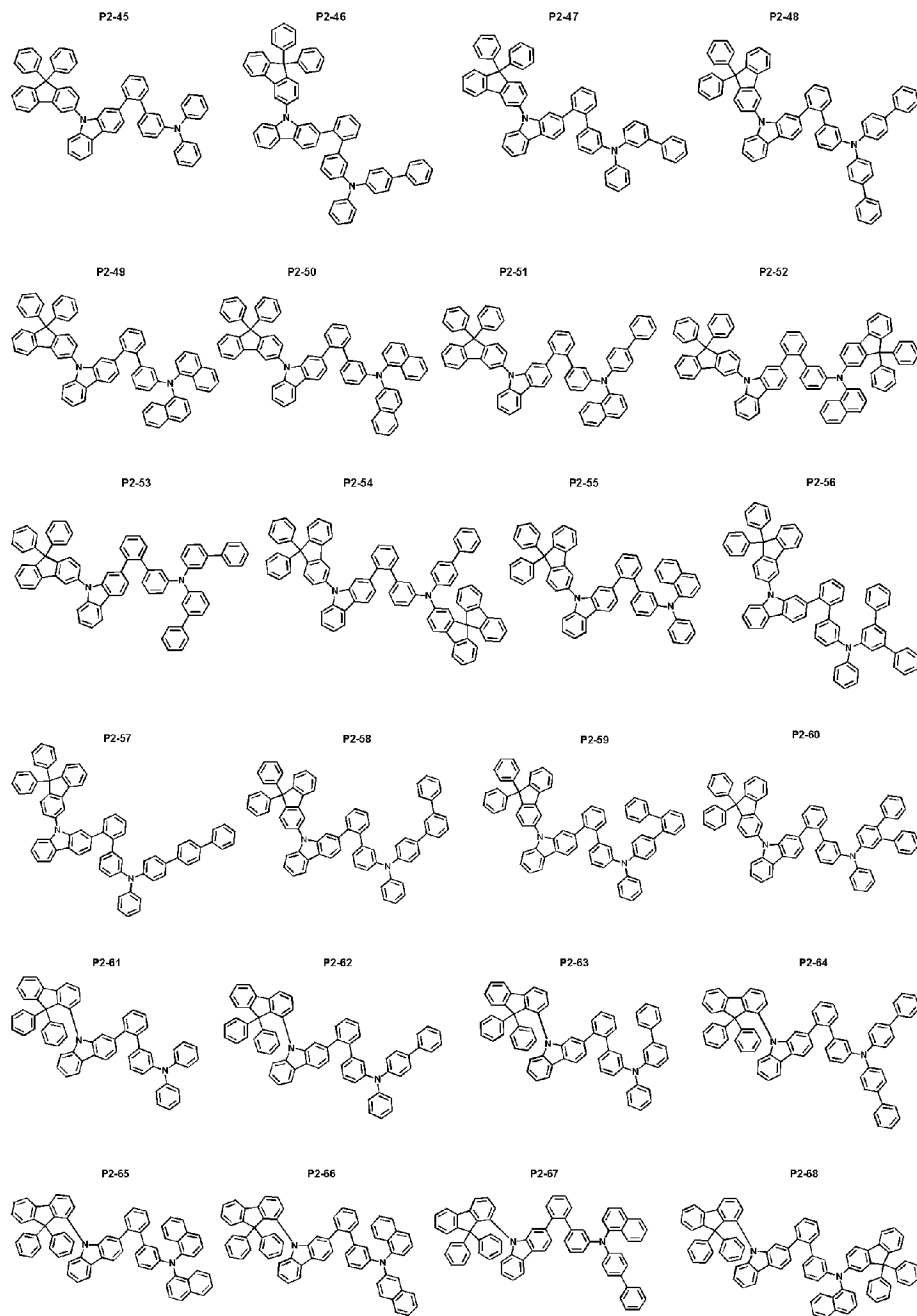


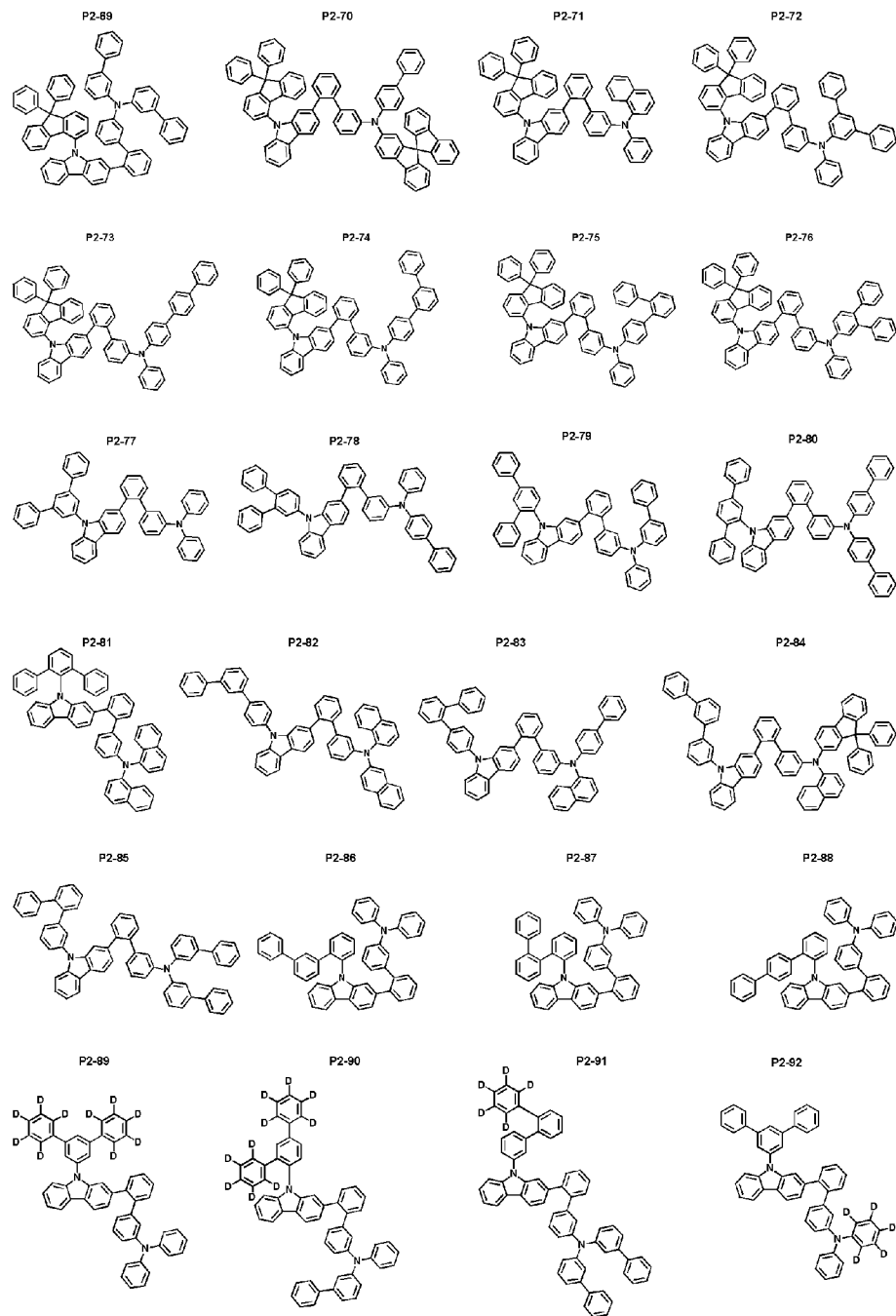


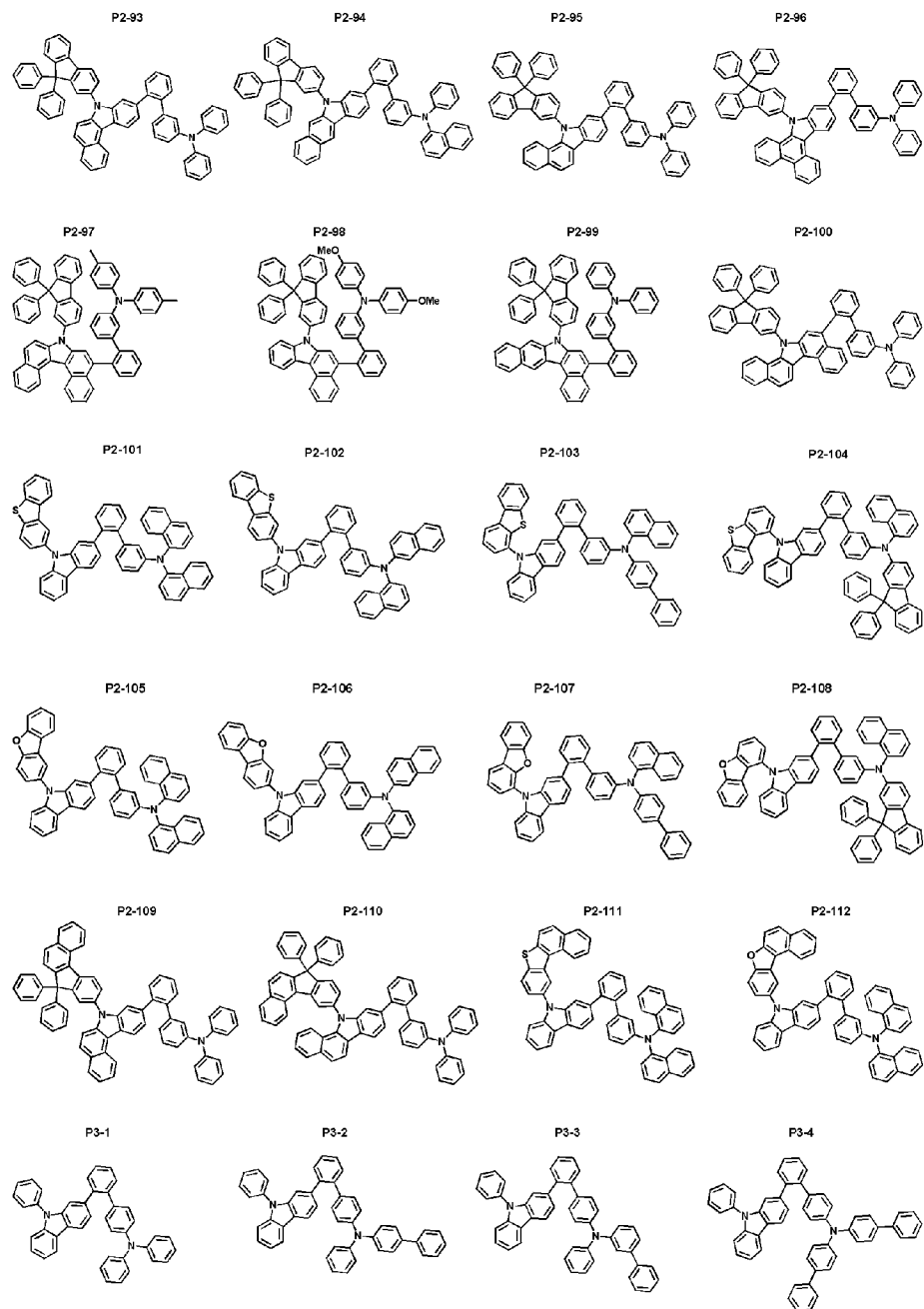


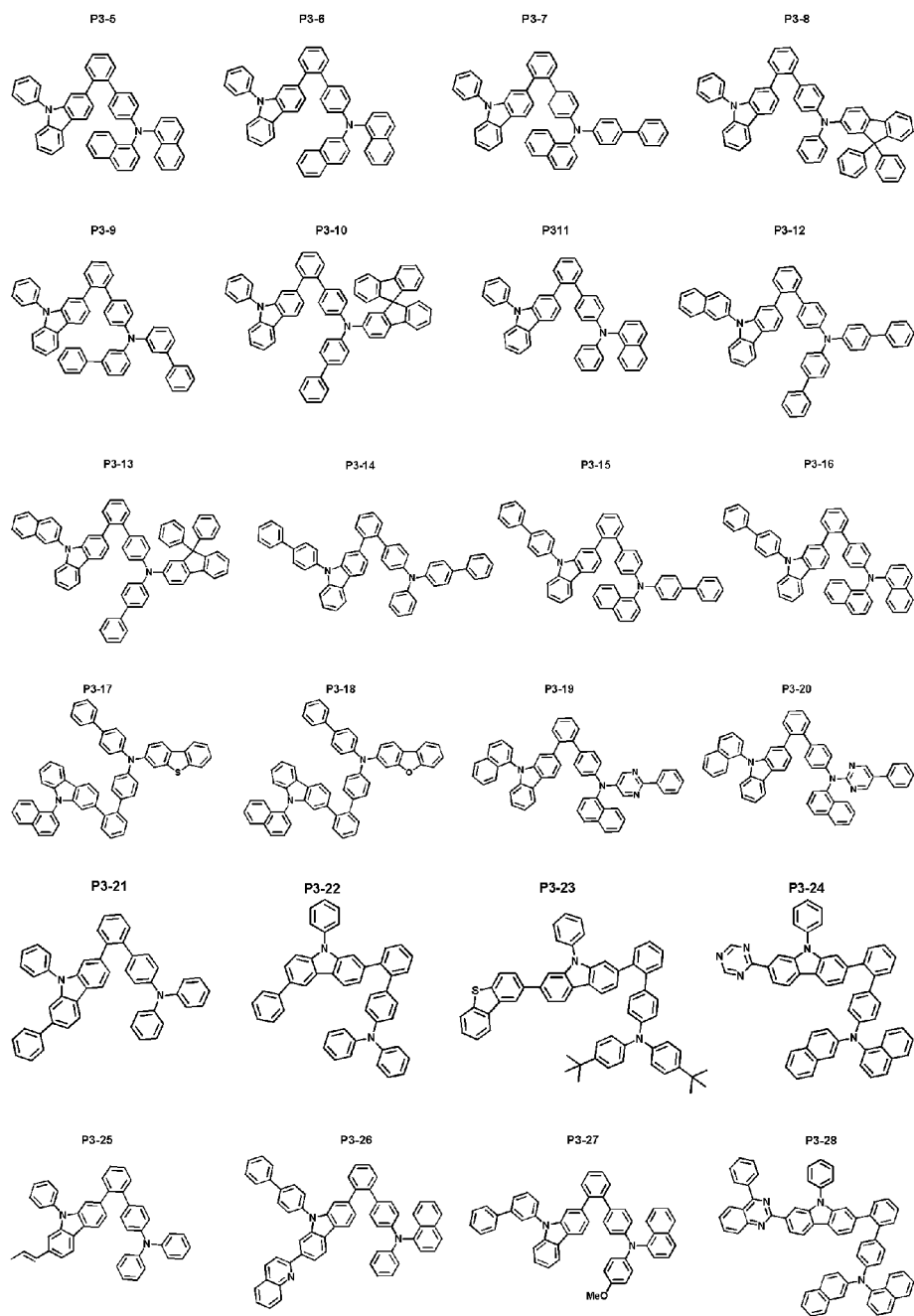


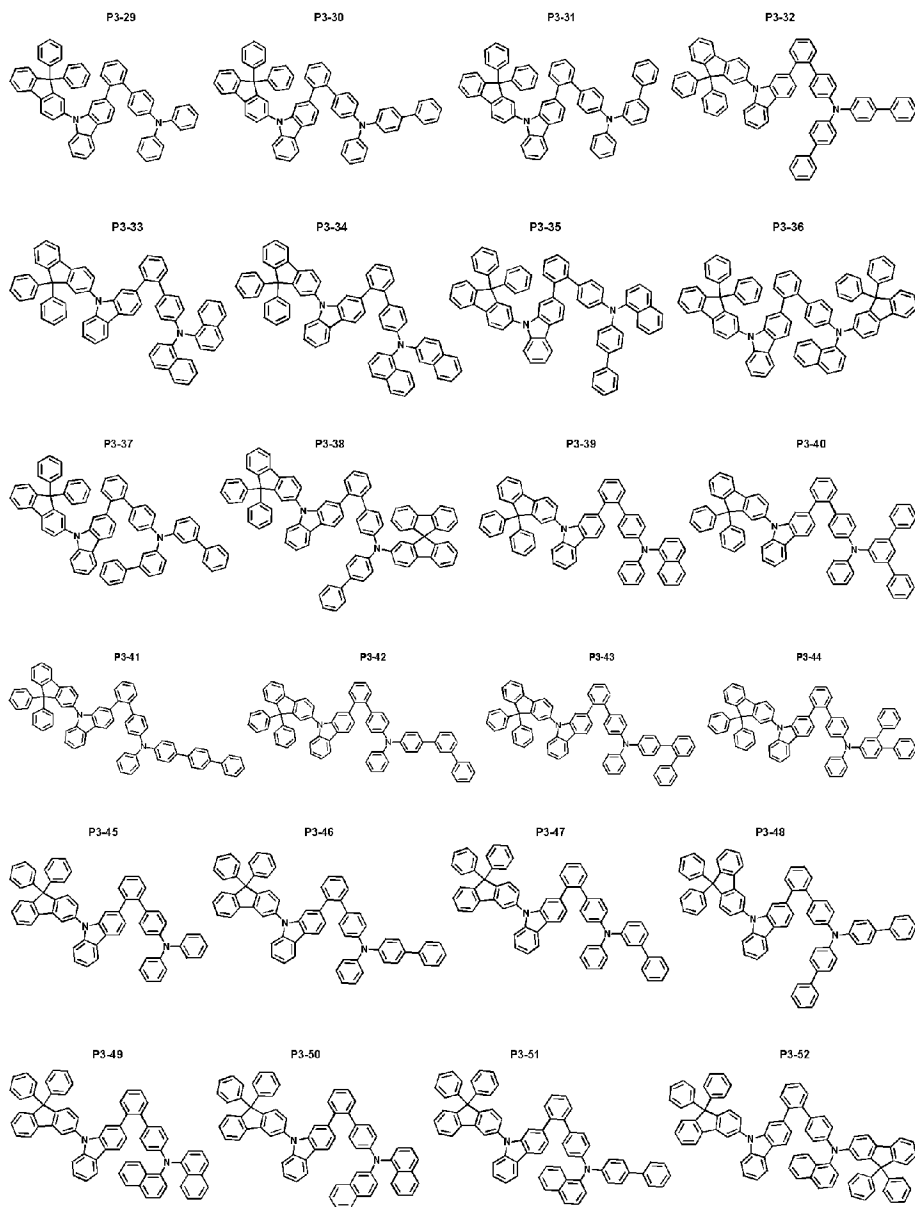


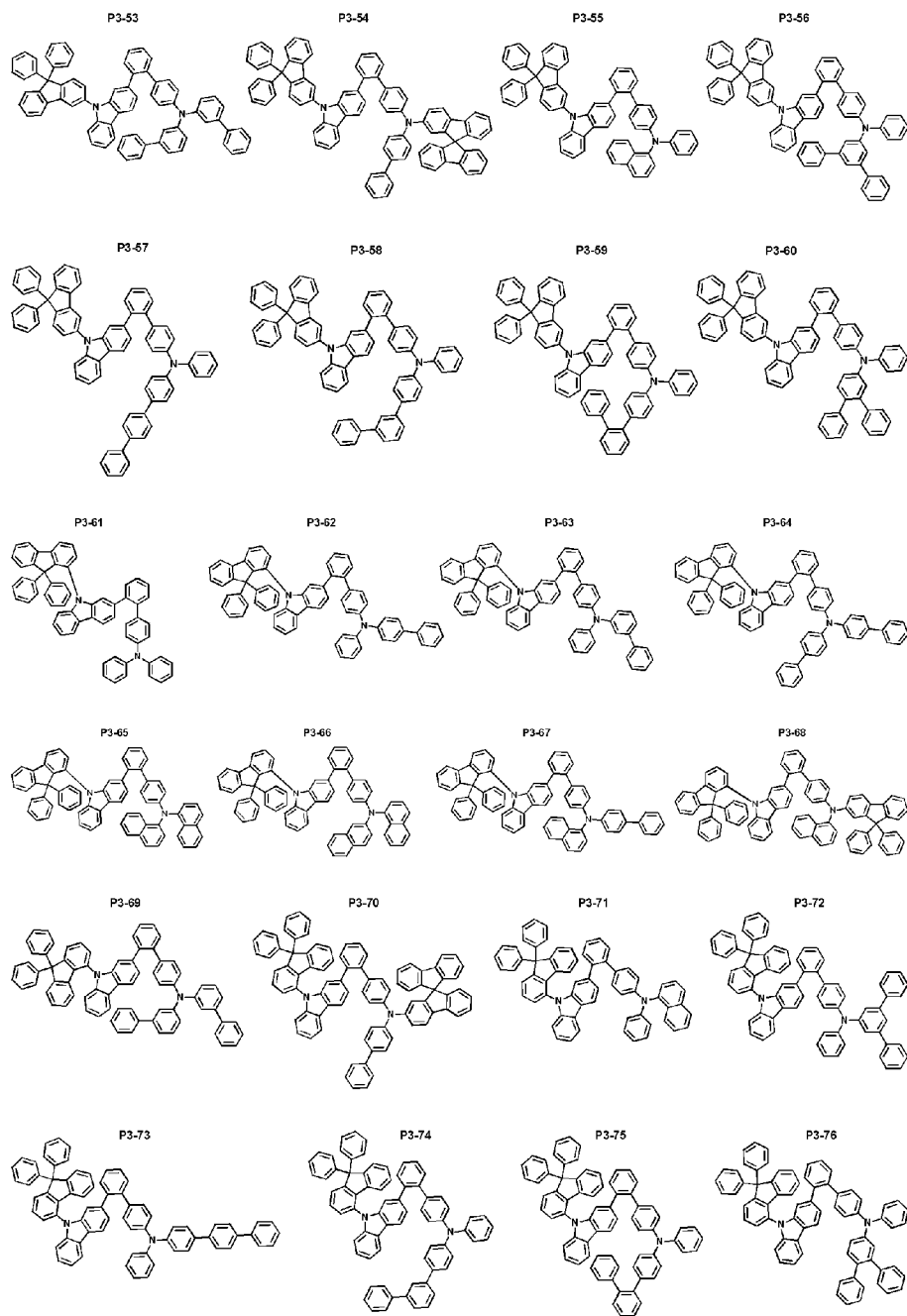


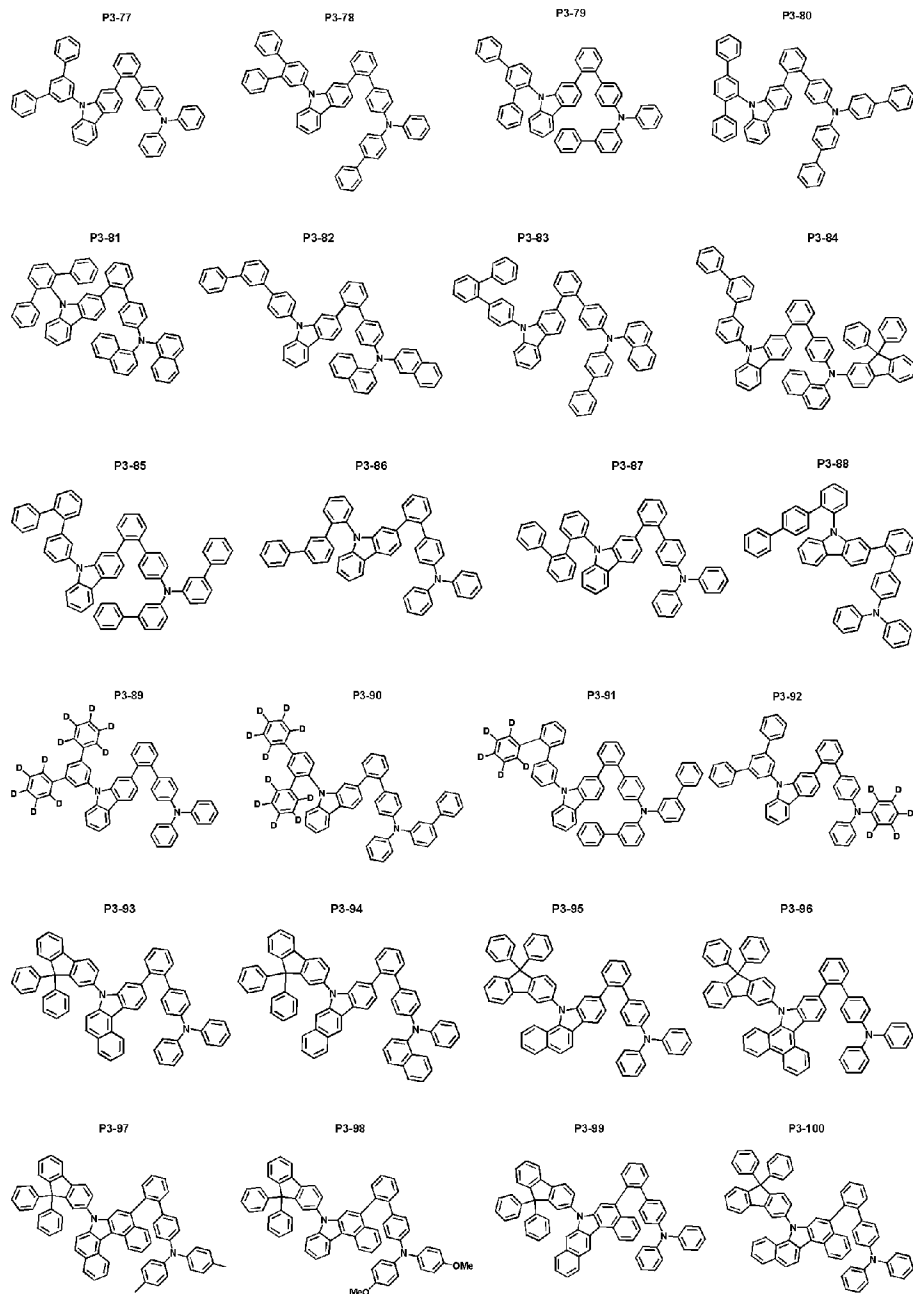


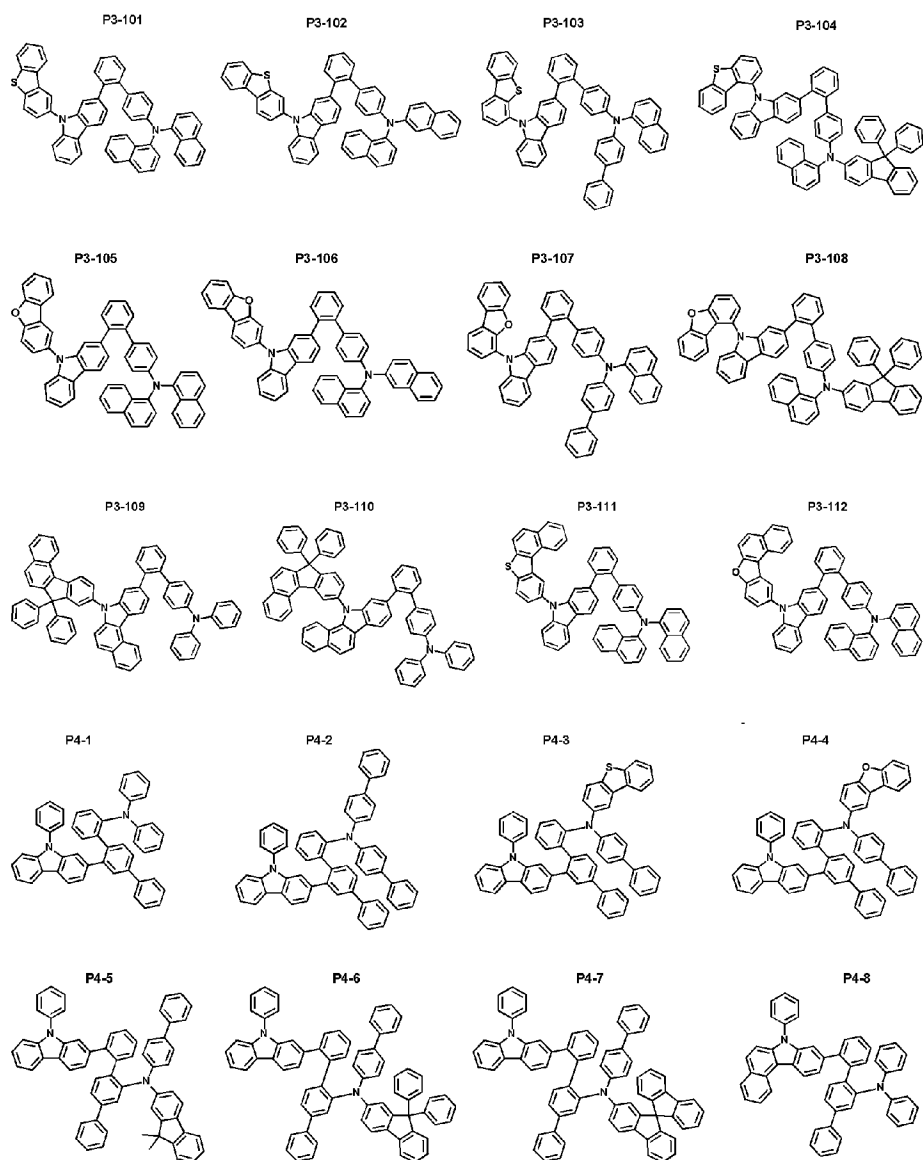


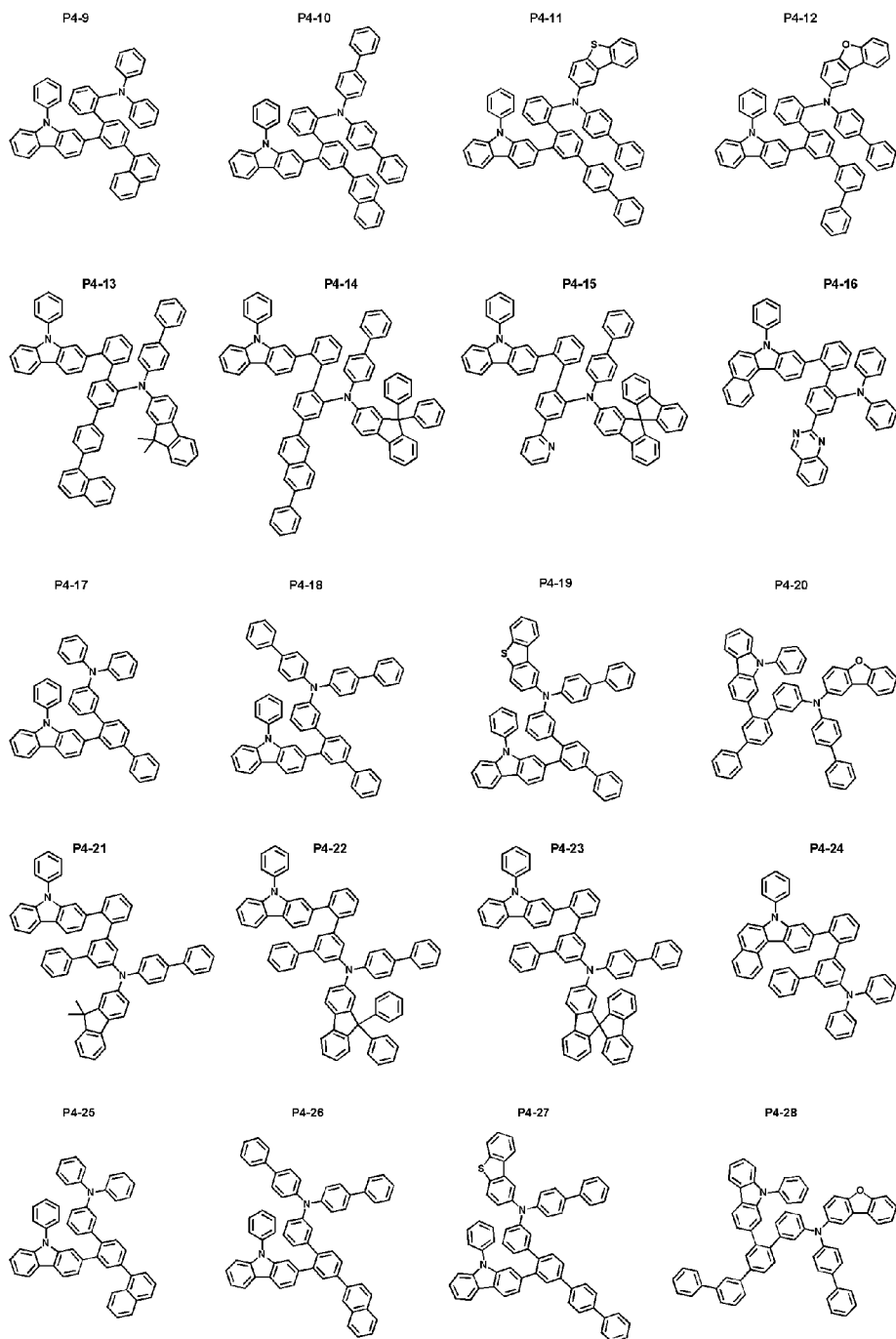


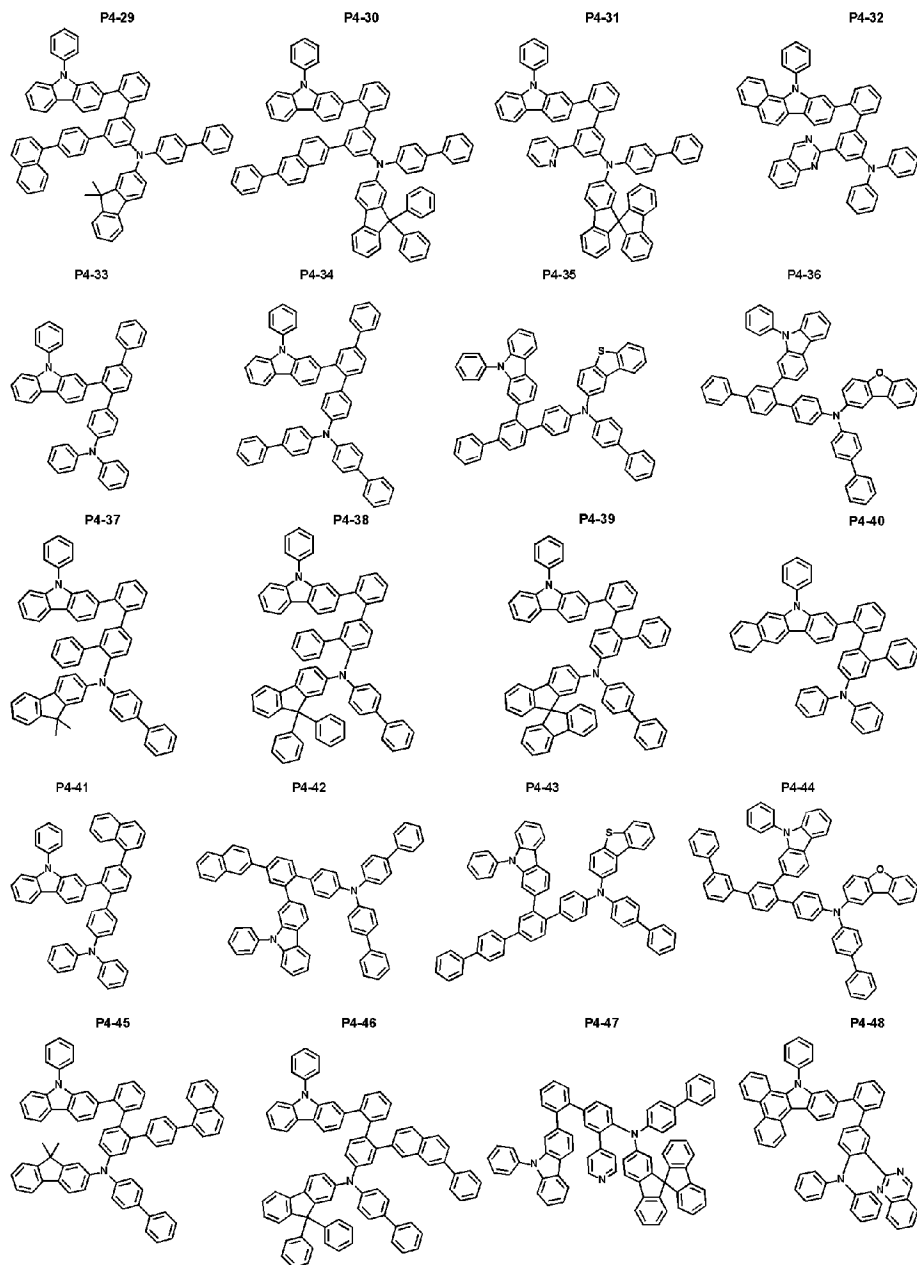












[청구항 9]

제 1전극; 제 2전극; 및 상기 제 1전극과 제 2전극 사이에 위치하는 유기물층;을 포함하며,
상기 유기물층에는 제 1항의 화합물이 함유된 것을 특징으로 하는 유기전기소자.

[청구항 10]

제 9항에 있어서,
상기 화합물은 상기 유기물층의 정공주입층, 정공수송층, 발광보조층 및 발광층 중 적어도 하나의 층에 함유되며, 상기 화합물은 1종 단독 또는 2종 이상의 혼합물인 것을 특징으로 하는 유기전기소자.

[청구항 11]

제 9항에 있어서,

상기 제 1전극과 제 2전극의 일면 중 상기 유기물층과 반대되는 적어도 일면에 형성되는 광효율 개선층을 더 포함하는 유기전기소자.

[청구항 12]

제 9항에 있어서,

상기 유기물층은 스핀코팅 공정, 노즐 프린팅 공정, 잉크젯 프린팅 공정, 슬롯코팅 공정, 딥코팅 공정 또는 볼투볼 공정에 의해 형성되는 것을 특징으로 하는 유기전기소자.

[청구항 13]

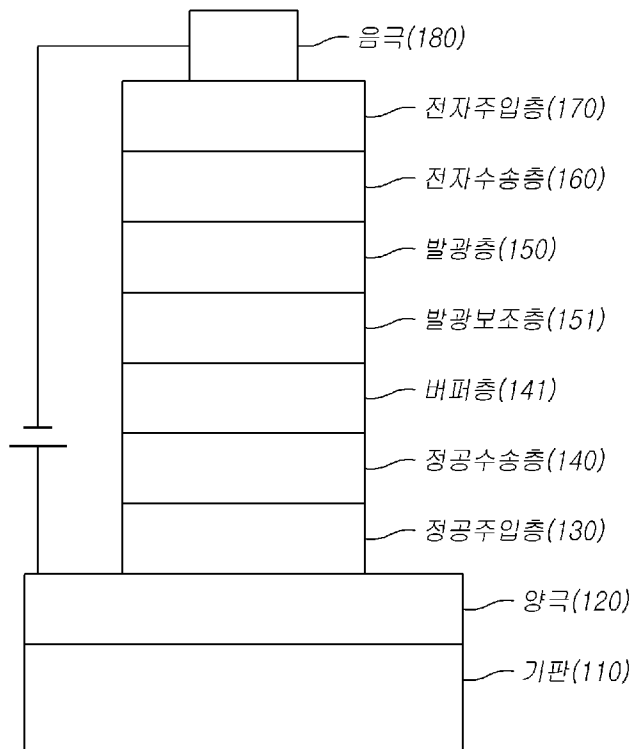
제 9항의 유기전기소자를 포함하는 디스플레이장치; 및
상기 디스플레이장치를 구동하는 제어부;를 포함하는 전자장치.

[청구항 14]

제 13항에 있어서,

상기 유기전기소자는 유기전기발광소자, 유기태양전지, 유기감광체, 유기트랜지스터, 및 단색 또는 백색 조명용 소자 중 적어도 하나인 것을 특징으로 하는 전자장치.

[도1]

100

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/KR2015/001362**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; H05B 33/14; H05B 33/22; C09K 11/06; H01L 51/50; C07D 209/86

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

Korean Utility models and applications for Utility models: IPC as above

Japanese Utility models and applications for Utility models: IPC as above

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

eKOMPASS (KIPO internal), STN(REG, CAplus), PubMed, JPO, USPTO, Google & Keywords: organic electronic element, organic light emitting device, carbazole, biphenyl, fluorenyl

C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
X	KR 10-2013-0096334 A (DUKSAN HI-METAL CO., LTD.) 30 August 2013 See claims 1, 4, 6-7, 11	1-14
A	JP 2004-103467 A (MITSUBISHI CHEMICALS CORP) 02 April 2004 See claim 1, tables 1-12	1-14
A	KR 10-1188280 B1 (DUKSAN HI-METAL CO., LTD.) 05 October 2012 See claims 4-5	1-14
A	JP 10-316658 A (MITSUBISHI CHEMICALS CORP) 02 December 1998 See claim 1	1-14



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

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

"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

05 JUNE 2015 (05.06.2015)

Date of mailing of the international search report

05 JUNE 2015 (05.06.2015)

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/KR2015/001362

Patent document cited in search report	Publication date	Patent family member	Publication date
KR 10-2013-0096334 A	30/08/2013	NONE	
JP 2004-103467 A	02/04/2004	NONE	
KR 10-1188280 B1	05/10/2012	WO 2011-155742 A2	15/12/2011
		WO 2011-155742 A3	19/04/2012
JP 10-316658A	02/12/1998	JP 4038833 B2	30/01/2008

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; H05B 33/14; H05B 33/22; C09K 11/06; H01L 51/50; C07D 209/86

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(KIPO internal), STN(REG, Cplus), PubMed, JPO, USPTO, Google & 키워드: 유기전기소자, 유기발광소자, 카바졸, 바이페닐, 플루오레닐

C. 관련 문헌

카테고리*	인용문헌명 및 관련 구절(해당하는 경우)의 기재	관련 청구항
X	KR 10-2013-0096334 A (덕산하이메탈(주)) 2013.08.30. 청구항 1, 4, 6-7, 11항 참조	1-14
A	JP 2004-103467 A (MITSUBISHI CHEMICALS CORP) 2004.04.02. 청구항 1항, 표 1-12 참조	1-14
A	KR 10-1188280 B1 (덕산하이메탈(주)) 2012.10.05. 청구항 4-5항 참조	1-14
A	JP 10-316658 A (MITSUBISHI CHEMICALS CORP) 1998.12.02. 청구항 1항 참조	1-14

☐ 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

“T” 국제출원일 또는 우선일 후에 공개된 문헌으로, 출원과 상충하지 않으며 발명의 기초가 되는 원리나 이론을 이해하기 위해 인용된 문헌

“E” 국제출원일보다 빠른 출원일 또는 우선일을 가지나 국제출원일 이후에 공개된 선출원 또는 특허 문헌

“X” 특별한 관련이 있는 문헌. 해당 문헌 하나만으로 청구된 발명의 신규성 또는 진보성이 없는 것으로 본다.

“L” 우선권 주장에 의문을 제기하는 문헌 또는 다른 인용문헌의 공개일 또는 다른 특별한 이유(이유를 명시)를 밝히기 위하여 인용된 문헌

“Y” 특별한 관련이 있는 문헌. 해당 문헌이 하나 이상의 다른 문헌과 조합하는 경우로 그 조합이 당업자에게 자명한 경우 청구된 발명은 진보성이 없는 것으로 본다.

“O” 구두 개시, 사용, 전시 또는 기타 수단을 언급하고 있는 문헌

“&” 동일한 대응특허문헌에 속하는 문헌

“P” 우선일 이후에 공개되었으나 국제출원일 이전에 공개된 문헌

국제조사의 실제 완료일

2015년 06월 05일 (05.06.2015)

국제조사보고서 발송일

2015년 06월 05일 (05.06.2015)

ISA/KR의 명칭 및 우편주소



대한민국 특허청
(302-701) 대전광역시 서구 청사로 189,
4동 (둔산동, 정부대전청사)

팩스 번호 +82-42-472-7140

심사관

김범수

전화번호 +82-42-481-5412



국제조사보고서에서 인용된 특허문헌	공개일	대응특허문헌	공개일
KR 10-2013-0096334 A	2013/08/30	없음	
JP 2004-103467 A	2004/04/02	없음	
KR 10-1188280 B1	2012/10/05	WO 2011-155742 A2 WO 2011-155742 A3	2011/12/15 2012/04/19
JP 10-316658A	1998/12/02	JP 4038833 B2	2008/01/30