

(12) 특허협력조약에 의하여 공개된 국제출원

(19) 세계지식재산권기구
국제사무국

(43) 국제공개일
2016년 1월 7일 (07.01.2016)



(10) 국제공개번호
WO 2016/003225 A2

- (51) 국제특허분류:
C07D 403/10 (2006.01) H01L 51/50 (2006.01)
C09K 11/06 (2006.01)
- (21) 국제출원번호: PCT/KR2015/006840
- (22) 국제출원일: 2015년 7월 2일 (02.07.2015)
- (25) 출원언어: 한국어
- (26) 공개언어: 한국어
- (30) 우선권정보:
10-2014-0082886 2014년 7월 3일 (03.07.2014) 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: 박종광 (PARK, Jonggwang); 681-280 울산시 중구 산전 2길 19 동, Ulsan (KR). 박형근 (PARK, Hyoung Keun); 200-963 강원도 춘천시 후석로 228 번길 24 석사 2 지구 아파트 211 동 1501 호, Gangwon-do (KR). 조혜민 (CHO, Hyemin); 412-740 경기도 고양시 화신로 311 별빛마을 9 단지 아파트 924 동 1401 호, Gyeonggi-do (KR). 이대원 (LEE, Dae Won); 437-761 경기도 의왕시 내손순환로 7 래미안에버하임 306-1701, Gyeonggi-do (KR). 최연희 (CHOI, Yeon Hee); 331-836 충청남도 천안시 서북구 성거읍 천흥 3길 17 신비텔 9 동 405 호, Chungcheongnam-do (KR). 이학영 (LEE,

Hak Young); 331-836 충청남도 천안시 서북구 성거읍 천흥 3길 19-1, 신비텔 12 동 205 호, Chungcheongnam-do (KR).

(74) 대리인: 김정은 (KIM, Jeongeun); 135-923 서울시 강남구 테헤란로 16길 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, 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.

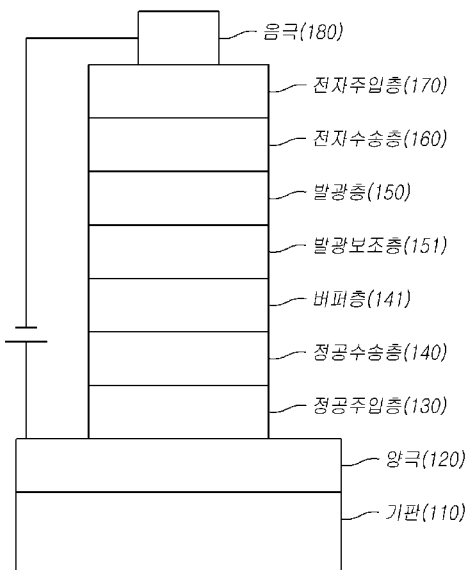
(84) 지정국 (별도의 표시가 없는 한, 가능한 모든 종류의 역내 권리의 보호를 위하여): ARIPO (BW, GH, GM, KE, LR, LS, MW, MZ, NA, RW, SD, SL, ST, SZ, TZ, UG, ZM, ZW), 유라시아 (AM, AZ, BY, KG, KZ, RU, TJ, TM), 유럽 (AL, AT, BE, BG, CH, CY, CZ, DE, DK, EE, ES, FI, FR, GB, GR, HR, HU, IE, IS, IT, LT, LU, LV, MC, MK, MT, NL, NO, PL, PT, RO, RS,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

[다음 쪽 계속]

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

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

100



(57) Abstract: Disclosed is a compound represented by chemical formula 1. 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 compound represented by chemical formula 1 is included in the organic layer, the luminous efficiency, stability and lifespan can be improved.

(57) 요약서: 화학식 1에 의해 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 1로 표시되는 화합물을 포함한다. 유기물층에 화학식 1로 표시되는 화합물이 포함되면, 발광효율, 안정성 및 수명 등이 향상될 수 있다.

WO 2016/003225 A2

공개:

- 국제조사보고서 없이 공개하며 보고서 접수 후 이를 별도 공개함 (규칙 48.2(g))

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. 그리고 상기 발광 재료는 분자량에 따라 고분자형과 저분자형으로 분류될 수 있고, 발광 메커니즘에 따라 전자의 일중항 여기 상태에서부터 유래되는 형광 재료와 전자의 삼중항 여기상태로부터 유래되는 인광 재료로 분류될 수 있다. 또한 발광 재료는 발광색에 따라 청색, 녹색, 적색 발광 재료와 보다 나은 천연색을 구현하기 위해 필요한 노란색 및 주황색 발광 재료로 구분될 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] 일반적으로, 전자수송층에서 발광층으로 전자가 전달되고 정공이 정공수송층에서 발광층으로 전달되어 재조합(recombination)에 의해 엑시톤(exciton)이 생성된다. 하지만, 일반적인 유기전기발광소자에서 정공이동도(hole mobility)가 전자 이동도(electron mobility) 보다 빠르기 때문에 발광층 내에서 생성된 엑시톤이 전자수송층으로 넘어가게 되어 결과적으로

발광층 내 전하 불균형(charge unbalance)을 초래하여 전자수송층 계면에서 발광하게 된다. 전자수송층 계면에서 발광될 경우, 유기전기소자의 색순도 및 효율이 저하되는 문제점이 발생하고 있으며, 특히 유기전기소자 제작 시 고온 안정성이 떨어져 유기전기소자의 수명이 짧아지는 문제점이 발생하게 된다.

[7] 따라서, 고온 안정성과 높은 전자 이동도(electron mobility: 풀디바이스(full device)의 블루소자 구동전압 범위 내)를 가지면서 높은 T_1 값으로 정공저지능력(hole blocking ability)을 향상시키는 전자수송 물질의 개발이 필요하다. (*Adv. Funct. Mater.* 2013, **23**, 1323)

[8] 한편, 최근 유기전기발광소자에 있어 기존의 정공수송층 물질의 문제점을 해결하기 위해 정공수송층과 발광층 사이에 발광보조층을 형성하며, 이러한 발광보조층은 적당한 구동전압을 갖기 위한 정공이동도와 높은 T_1 값 및 넓은 밴드갭(wide bandgap)을 갖은 물질을 사용하여야 한다.

[9] 하지만, 이들 각 유기물층을 단순히 개선한다고 하여 효율을 극대화시킬 수는 없다. 왜냐하면 각 유기물층 간의 에너지 준위 및 T_1 값, 물질의 고유특성(이동도, 계면특성 등) 등이 최적의 조합을 이루었을 때 긴 수명과 높은 효율을 동시에 달성할 수 있기 때문이다.

[10] 즉, 유기전기발광소자가 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 하며, 특히 전자수송층, 정공수송층 및 발광보조층 등의 재료 조합을 통해 전하 균형(charge balance)을 효과적으로 이룰 수 있는 재료 개발이 절실히 요구되고 있다.

발명의 상세한 설명

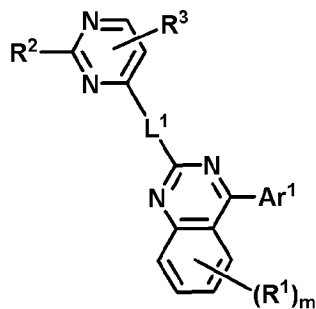
기술적 과제

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

과제 해결 수단

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

[13]



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

발명의 효과

- [15] 본 발명에 따른 화합물을 이용함으로써 소자의 높은 발광효율 및 고내열성을 달성할 수 있고, 소자의 색순도 및 수명을 향상시킬 수 있다.

도면의 간단한 설명

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

발명의 실시를 위한 형태

- [24] 이하, 본 발명의 실시예를 첨부된 도면을 참조하여 상세하게 설명한다.
- [25] 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.
- [26] 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.
- [27] 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.
- [28] 본 명세서 및 첨부된 청구의 범위에서 사용된 바와 같이, 달리 언급하지 않는 한, 하기 용어의 의미는 하기와 같다.
- [29] 본 명세서에서 사용된 용어 "할로" 또는 "할로젠"은 다른 설명이 없는 한 불소(F), 브롬(Br), 염소(Cl) 또는 요오드(I)이다.
- [30] 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.

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

[32] 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.

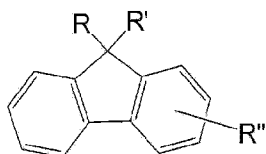
[33] 본 발명에 사용된 용어 "시클로알킬"은 다른 설명이 없는 한 3 내지 60의 탄소수를 갖는 고리를 형성하는 알킬을 의미하며, 여기에 제한되는 것은 아니다.

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

[35] 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.

[36] 본 발명에 사용된 용어 "플루오렌일기" 또는 "플루오렌일렌기"는 다른 설명이 없는 한 각각 하기 구조에서 R, R' 및 R"이 모두 수소인 1가 또는 2가 작용기를 의미하며, "치환된 플루오렌일기" 또는 "치환된 플루오렌일렌기"는 치환기 R, R', R" 중 적어도 하나가 수소 이외의 치환기인 것을 의미하며, R과 R'이 서로 결합되어 이들이 결합된 탄소와 함께 스파이로 화합물을 형성한 경우를 포함한다.

[37]

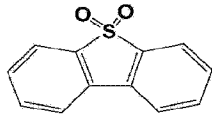


[38] 본 발명에 사용된 용어 "아릴기" 및 "아릴렌기"는 다른 설명이 없는 한 각각 6 내지 60의 탄소수를 가지며, 이에 제한되는 것은 아니다. 본 발명에서 아릴기 또는 아릴렌기는 단일고리형, 고리접합체, 접합된 여러 고리계, 스파이로 화합물 등을 포함한다.

[39] 본 발명에 사용된 용어 "헤테로고리기"는 "헤테로아릴기" 또는 "헤테로아릴렌기"와 같은 방향족 고리뿐만 아니라 비방향족 고리도 포함하며, 다른 설명이 없는 한 각각 하나 이상의 헤테로원자를 포함하는 탄소수 2 내지 60의 고리를 의미하나 여기에 제한되는 것은 아니다. 본 명세서에서 사용된 용어 "헤테로원자"는 다른 설명이 없는 한 N, O, S, P 또는 Si를 나타내며, 헤테로고리기는 헤테로원자를 포함하는 단일고리형, 고리접합체, 접합된 여러 고리계, 스파이로 화합물 등을 의미한다.

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

[41]



[42]

본 발명에서 사용된 용어 "고리"는 단일환 및 다환을 포함하며, 탄화수소고리는 물론 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 헤테로고리를 포함하고, 방향족 및 비방향족 고리를 포함한다.

[43]

본 발명에서 사용된 용어 "다환"은 바이페닐, 터페닐 등과 같은 고리 집합체(ring assemblies), 접합된(fused) 여러 고리게 및 스파이로 화합물을 포함하며, 방향족뿐만 아니라 비방향족도 포함하고, 탄화수소고리는 물론 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 헤테로고리를 포함한다.

[44]

본 발명에서 사용된 용어 "고리 집합체(ring assemblies)"는 둘 또는 그 이상의 고리게(단일고리 또는 접합된 고리게)가 단일결합이나 또는 이중결합을 통해서 서로 직접 연결되어 있고 이와 같은 고리 사이의 직접 연결의 수가 이 화합물에 들어 있는 고리게의 총 수보다 1개가 적은 것을 의미한다. 고리 집합체는 동일 또는 상이한 고리게가 단일결합이나 이중결합을 통해 서로 직접 연결될 수 있다.

[45]

본 발명에서 사용된 용어 "접합된 여러 고리게"는 적어도 두개의 원자를 공유하는 접합된(fused) 고리 형태를 의미하며, 둘 이상의 탄화수소류의 고리게가 접합된 형태 및 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 헤테로고리게가 적어도 하나 접합된 형태 등을 포함한다. 이러한 접합된 여러 고리게는 방향족고리, 헤테로방향족고리, 지방족 고리 또는 이들 고리의 조합일 수 있다.

[46]

본 발명에서 사용된 용어 "스파이로 화합물"은 '스파이로 연결(spiro union)'을 가지며, 스파이로 연결은 2개의 고리가 오로지 1개의 원자를 공유함으로써 이루어지는 연결을 의미한다. 이때, 두 고리에 공유된 원자를 '스파이로 원자'라 하며, 한 화합물에 들어 있는 스파이로 원자의 수에 따라 이들을 각각 '모노스파이로-', '다이스파이로-', '트라이스파이로-' 화합물이라 한다.

[47]

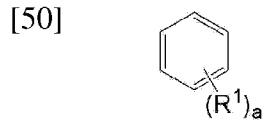
또한, 접두사가 연속으로 명명되는 경우 먼저 기재된 순서대로 치환기가 나열되는 것을 의미한다. 예를 들어, 아릴알콕시기의 경우 아릴기로 치환된 알콕시기를 의미하며, 알콕시카르보닐기의 경우 알콕시기로 치환된 카르보닐기를 의미하며, 또한 아릴카르보닐알켄일기의 경우 아릴카르보닐기로 치환된 알켄일기를 의미하며 여기서 아릴카르보닐기는 아릴기로 치환된 카르보닐기이다.

[48]

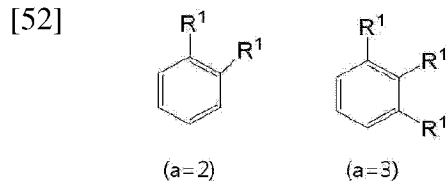
또한 명시적인 설명이 없는 한, 본 발명에서 사용된 용어 "치환 또는 비치환된"에서 "치환"은 중수소, 할로젠, 아미노기, 니트릴기, 니트로기, C₁-C₂₀의 알킬기, C₁-C₂₀의 알콕시기, C₁-C₂₀의 알킬아민기, C₁-C₂₀의 알킬티오펜기, C₆-C₂₀의 아릴티오펜기, C₂-C₂₀의 알켄일기, C₂-C₂₀의 알킨일기, C₃-C₂₀의 시클로알킬기, C₆-C₂₀의 아릴기, 중수소로 치환된 C₆-C₂₀의 아릴기, C₈-C₂₀의 아릴알켄일기, 실란기, 붕소기, 게르마늄기, 및 C₂-C₂₀의 헤테로고리기로 이루어진 군으로부터 선택되는

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.



[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(120)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), 발광보조층(151) 및/또는 전자수송층(160) 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 T_1 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 발명의 화학식 1 또는 1a에 따른 화합물을 사용하여 전자수송층을 형성하거나/하고, 본 발명의 화학식 2에 따른 화합물을 정공수송층 및/또는 발광보조층을 형성함으로써 각 유기물층 간의 에너지 레벨(level) 및 T_1 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.

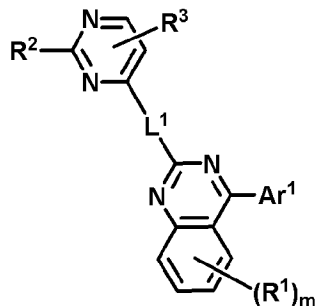
[66] 본 발명의 다른 실시예는 상술한 본 발명의 유기전기소자를 포함하는 디스플레이장치와, 이 디스플레이장치를 제어하는 제어부를 포함하는 전자장치를 포함할 수 있다. 이때, 전자장치는 현재 또는 장래의 유무선 통신단말일 수 있으며, 휴대폰 등의 이동 통신 단말기, PDA, 전자사전, PMP, 리모콘, 네비게이션, 게임기, 각종 TV, 각종 컴퓨터 등 모든 전자장치를 포함한다.

[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, 각 기호는 아래와 같이 정의될 수 있다.

[72] Ar¹ 및 R¹은 서로 독립적으로 C₆-C₂₄의 아릴기 또는 플루오렌일기이며, m은 0-4의 정수이며, m이 2이상인 경우 R¹은 서로 동일하거나 상이하다.

[73] 바람직하게는, Ar¹은 치환 또는 비치환된 C₆-C₁₈의 아릴기일 수 있으며, 또한 바람직하게는 치환 또는 비치환된 C₆, C₁₀, C₁₂, C₁₄, C₁₅, C₁₆ 또는 C₁₈의 아릴기일 수 있고, 또한 바람직하게는 메틸 또는 중수소로 치환되거나 비치환된 페닐기, 중수소로 치환되거나 비치환된 바이페닐릴기, 나프틸기, m- 또는 p-터페닐릴기, 안트릴기, 페난트릴기, 피렌일기 또는 9,9-디메틸-9H-플루오렌일기일 등일 수 있다.

[74] 바람직하게는 m은 0 내지 2일 수 있으며, 바람직하게는 R¹은 페닐기일 수 있다.

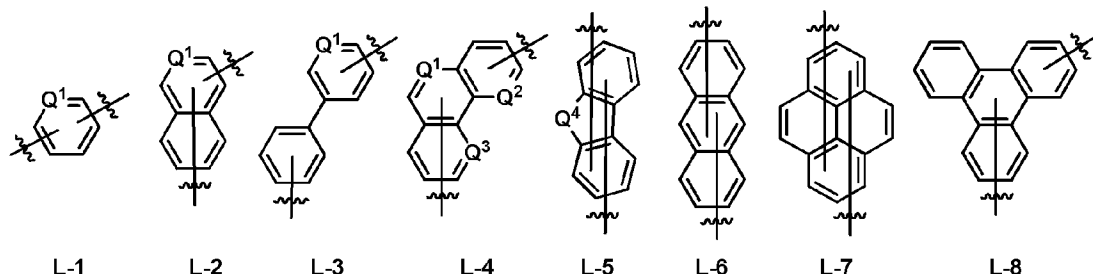
[75] 바람직하게는, Ar¹ 및 R¹이 아릴기 또는 플루오렌일기인 경우, 이들은 중수소, 할로젠, 실란기, 실록산기, 붕소기, 게르마늄기, 시아노기, 니트로기, C₁-C₂₀의 알킬싸이오기, C₁-C₂₀의 알콕시기, C₁-C₂₀의 알킬기, C₂-C₂₀의 알켄일기, C₂-C₂₀의 알킨일기, C₆-C₂₀의 아릴기, 중수소로 치환된 C₆-C₂₀의 아릴기, 플루오렌일기, O, N, S, Si 및 P로 이루어진 그룹에서 선택된 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C₂-C₂₀의 헤테로고리기, C₃-C₂₀의 시클로알킬기, C₇-C₂₀의 아릴알킬기, 및 C₈-C₂₀의 아릴알켄일기로 이루어진 군에서 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 더 치환될 수 있다.

[76] 상기 화학식 1에서, L¹은 단일결합, C₆-C₆₀의 아릴렌기, 플루오렌일렌기, O, N, S,

Si 및 P로 이루어진 그룹에서 선택된 적어도 하나의 헤테로 원자를 포함하는 C₂-C₆₀의 헤테로고리기, C₃-C₆₀의 지방족고리와 C₆-C₆₀의 방향족고리의 융합고리, 및 이들의 조합으로 이루어진 군에서 선택될 수 있다.

- [77] 바람직하게는, L¹은 C₁-C₁₈의 아릴기, C₅-C₁₃의 헤테로고리기 또는 이들의 조합일 수 있으며, 또한 바람직하게는 하기 L-1 내지 L-8로 표시되는 것 중 하나일 수 있다.

[78]



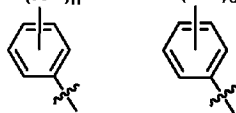
- [79] 상기 L-1 내지 L-8에서, Q¹ 내지 Q³은 서로 독립적으로 CR^a 또는 N이고, Q⁴는 S, O 또는 CR^bR^c이다. 또한, R^a, R^b 및 R^c는 서로 독립적으로 수소, C₆-C₆₀의 아릴기, 플루오렌일기, O, N, S, Si 및 P로 이루어진 그룹에서 선택된 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C₂-C₆₀의 헤테로고리기, C₃-C₆₀의 지방족고리와 C₆-C₆₀의 방향족고리의 융합고리, C₁-C₅₀의 알킬기, C₂-C₂₀의 알켄일기, C₂-C₂₀의 알킨일기, C₁-C₃₀의 알콕시기, 및 C₆-C₃₀의 아릴옥시기로 구성된 군에서 선택된다.

- [80] 또한, 바람직하게는 L¹은 메틸로 치환 또는 비치환된 페닐렌기, 나프틸렌기, 바이페닐렌기, 안트릴렌기, 페난트릴렌기, 트라이페닐렌일렌기, 피렌일렌기, 피리딜렌기, 퀴놀릴렌기, 퀴놀릴렌기와 페닐릴렌기의 조합, 피리딜렌기와 페닐렌기의 조합, 디벤조싸이엔일렌기, 페난트릴렌기 또는 페난트리딜렌기일 수 있다.

- [81] 바람직하게는, L¹은 중수소, 할로젠, 실란기, 실록산기, 붕소기, 게르마늄기, 시아노기, 니트로기, C₁-C₂₀의 알킬싸이오기, C₁-C₂₀의 알콕시기, C₁-C₂₀의 알킬기, C₂-C₂₀의 알켄일기, C₂-C₂₀의 알킨일기, C₆-C₂₀의 아릴기, 중수소로 치환된 C₆-C₂₀의 아릴기, 플루오렌일기, O, N, S, Si 및 P로 이루어진 그룹에서 선택된 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C₂-C₂₀의 헤테로고리기, C₃-C₂₀의 시클로알킬기, C₇-C₂₀의 아릴알킬기, 및 C₈-C₂₀의 아릴알켄일기로 이루어진 군에서 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 더 치환될 수 있다.

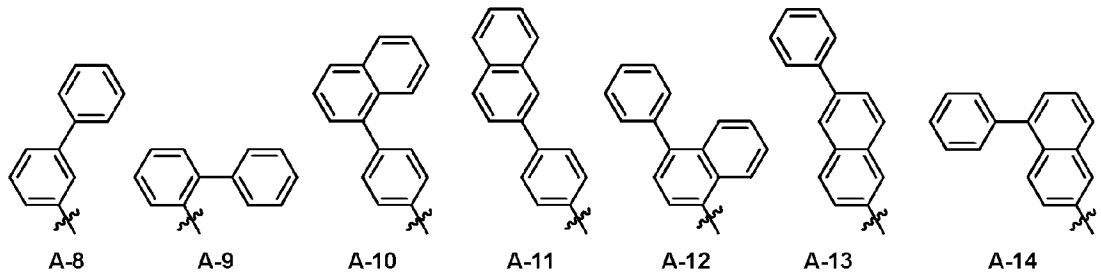
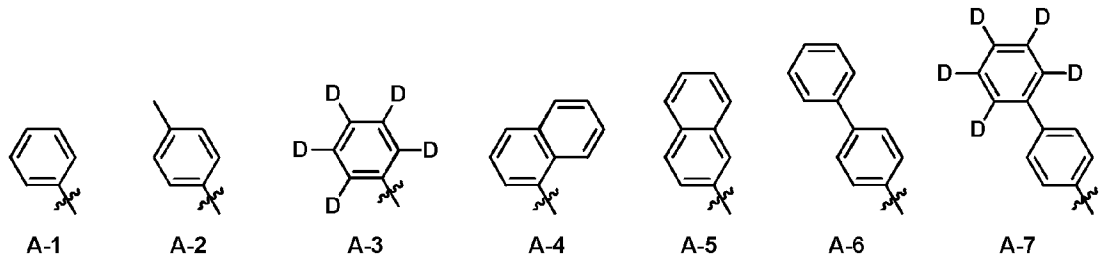
- [82] R² 및 R³는 서로 독립적으로 C₆-C₆₀의 아릴기, 플루오렌일기, O, N, S, Si 및 P로 이루어진 그룹에서 선택된 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C₂-C₆₀의 헤테로고리기, C₃-C₆₀의 지방족고리와 C₆-C₆₀의 방향족고리의 융합고리, 및 이들의 조합으로 이루어진 군에서 선택될 수 있다.

- [83] 바람직하게는 R² 및 R³는 (R¹³)_n 또는 (R¹³)_o일 수 있으며, 또한 바람직하게는

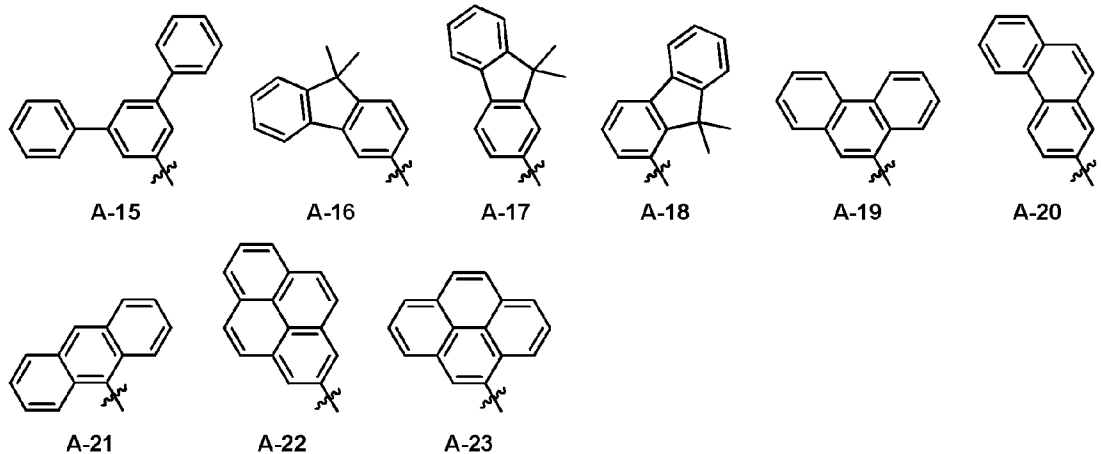


하기 A-1 내지 A-23으로 표시되는 것 중 하나일 수 있다.

[84]



[85]



[86] 한편, 상기 R^{12} 및 R^{13} 은 서로 독립적으로 i) 중수소, 할로젠, C_6-C_{60} 의 아릴기, 플루오렌일기, O, N, S, Si 및 P로 이루어진 그룹에서 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 알콕시기, 및 C_6-C_{30} 의 아릴옥시기로 구성된 군에서 선택되거나, 또는 ii) 이웃한 기끼리 서로 결합하여 적어도 하나의 고리를 형성할 수 있으며, 이때 고리를 형성하지 않는 R^{12} 및 R^{13} 은 상기 i)에서 정의된 것과 동일하다. 이때 형성되는 고리는 단환 또는 다환일 수 있다.

[87] 또한, n 및 o는 서로 독립적으로 0 내지 5의 정수이고, n이 2 이상의 정수인 경우 R^{12} 는 서로 동일하거나 상이하며, o가 2 이상의 정수인 경우 R^{13} 은 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

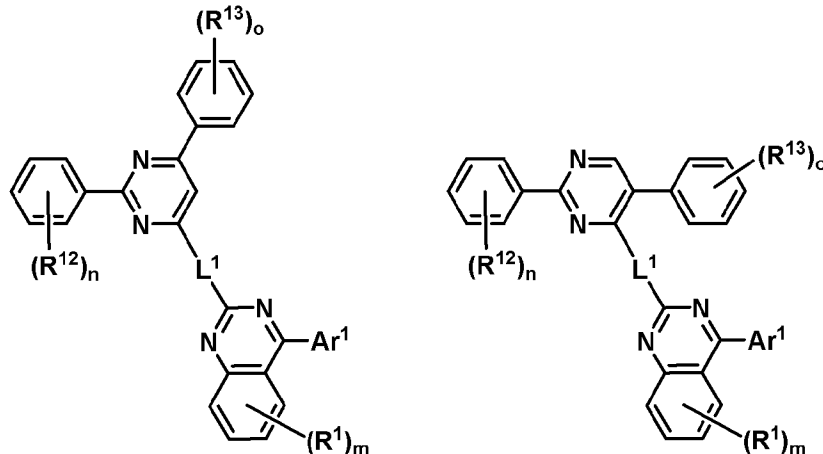
[88] 바람직하게는, 상기 R^{12} 및 R^{13} 의 아릴기, 플루오렌일기, 헤테로고리기, 융합고리기, 알킬기, 알켄일기, 알콕시기 및 아릴옥시기는 서로 독립적으로 중수소, 할로젠, 실란기, 실록산기, 붕소기, 게르마늄기, 시아노기, 니트로기, C_1-C_{20} 의 알킬싸이오기, C_1-C_{20} 의 알콕시기, C_1-C_{20} 의 알킬기, C_2-C_{20} 의 알켄일기, C_2-C_{20}

의 알킬일기, C₆-C₂₀의 아릴기, 중수소로 치환된 C₆-C₂₀의 아릴기, 플루오렌일기, O, N, S, Si 및 P로 이루어진 그룹에서 선택된 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C₂-C₂₀의 헤테로고리기, C₃-C₂₀의 시클로알킬기, C₇-C₂₀의 아릴알킬기, 및 C₈-C₂₀의 아릴알켄일기로 이루어진 군에서 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 더 치환될 수 있다.

[89] 바람직하게는, 상기 화학식 1은 하기 화학식 1a 또는 1b로 표시될 수 있다.

[90] <화학식 1a>

<화학식 1b>



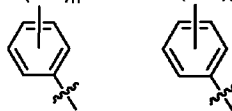
[91] 상기 화학식 1a 및 1b에서, Ar¹, R¹, L¹ 및 m은 화학식 1에서 정의된 것과 동일하다.

[92] 또한, R¹² 및 R¹³은 서로 독립적으로 i) 중수소, 할로젠, C₆-C₆₀의 아릴기, 플루오렌일기, O, N, S, Si 및 P로 이루어진 그룹에서 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 알콕시기, 및 C₆-C₃₀의 아릴옥시기로 구성된 군에서 선택되거나, 또는 ii) 이웃한 기끼리 서로 결합하여 적어도 하나의 단환 또는 다환의 고리를 형성할 수 있으며, 이때 고리를 형성하지 않는 R¹² 및 R¹³은 상기 i)에서 정의된 것과 동일하며, n 및 o는 서로 독립적으로 0 내지 5의 정수이고, n이 2 이상의 정수인 경우 R¹²는 서로 동일하거나 상이하며, o가 2 이상의 정수인 경우 R¹³은 서로 동일하거나 상이하다.

[93] 바람직하게는, 상기 R¹² 및 R¹³의 아릴기, 플루오렌일기, 헤테로고리기, 융합고리기, 알킬기, 알켄일기, 알콕시기 및 아릴옥시기는 서로 독립적으로 중수소, 할로젠, 실란기, 실록산기, 붕소기, 게르마늄기, 시아노기, 니트로기, C₁-C₂₀의 알킬싸이오기, C₁-C₂₀의 알콕시기, C₁-C₂₀의 알킬기, C₂-C₂₀의 알켄일기, C₂-C₂₀의 알킨일기, C₆-C₂₀의 아릴기, 중수소로 치환된 C₆-C₂₀의 아릴기, 플루오렌일기, O, N, S, Si 및 P로 이루어진 그룹에서 선택된 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C₂-C₂₀의 헤테로고리기, C₃-C₂₀의 시클로알킬기, C₇-C₂₀의 아릴알킬기, 및 C₈-C₂₀의 아릴알켄일기로 이루어진 군에서 선택된 하나 이상의 치환기로

선택적으로 더 치환될 수 있다.

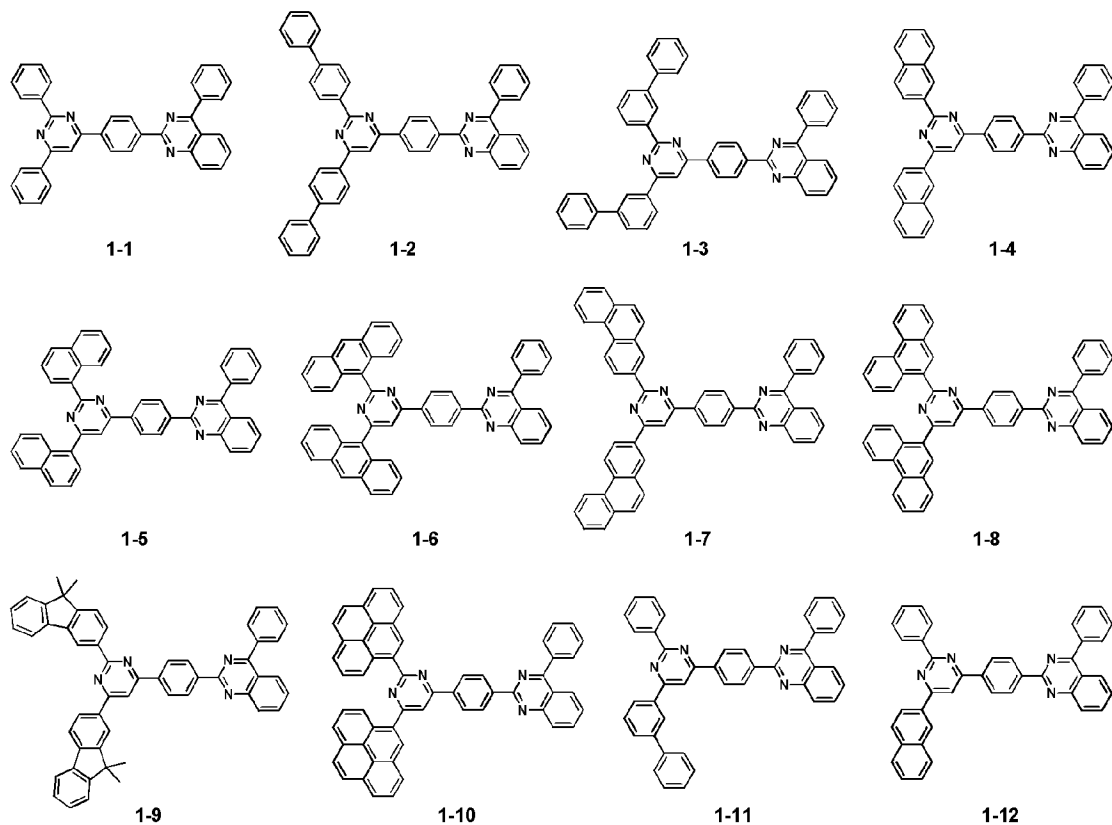
[94] 또한, 바람직하게는, 상기 화학식 2에서, $(R^{12})_n$ 또는 $(R^{13})_o$ 는 상기 A-1 내지



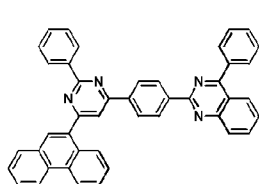
A-23으로 표시되는 것 중 하나일 수 있다.

[95] 구체적으로, 상기 화학식 1, 1a 또는 1b로 표시되는 화합물은 하기 화합물 중 하나일 수 있다.

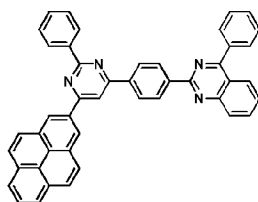
[96]



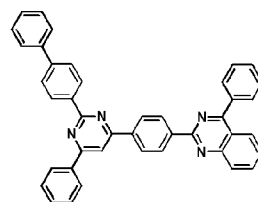
[97]



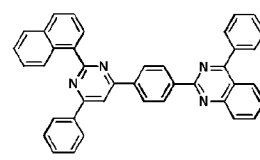
1-13



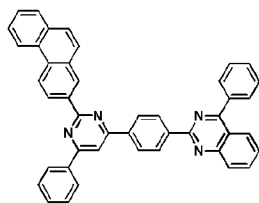
1-14



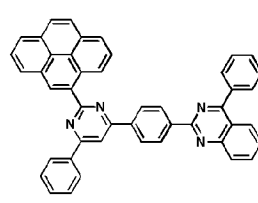
1-15



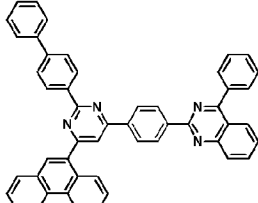
1-16



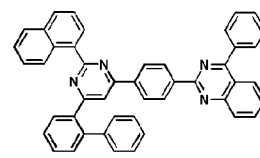
1-17



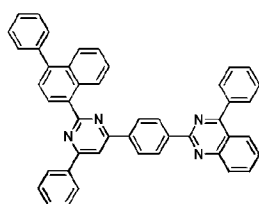
1-18



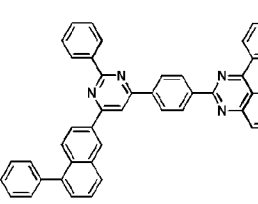
1-19



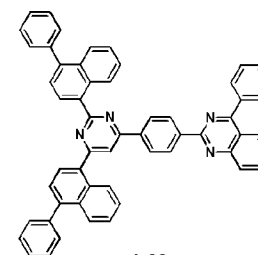
1-20



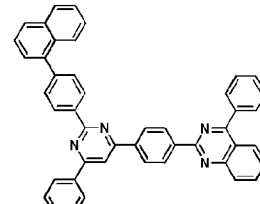
1-21



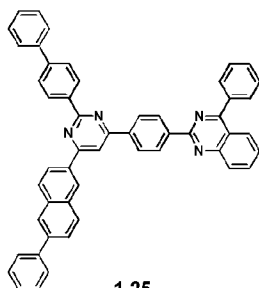
1-22



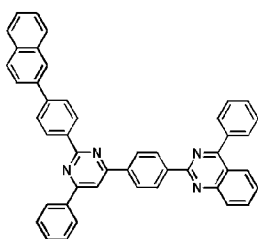
1-23



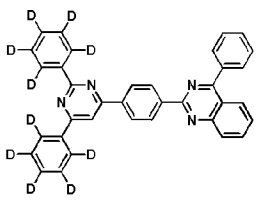
1-24



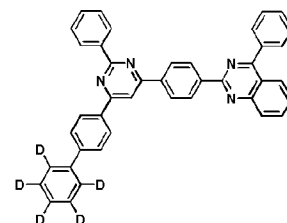
1-25



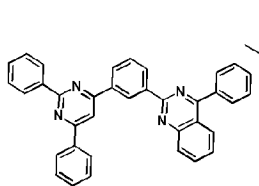
1-26



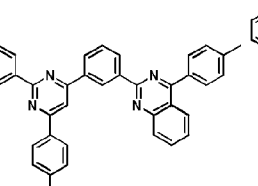
1-27



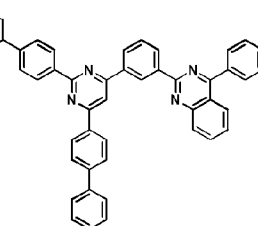
1-28



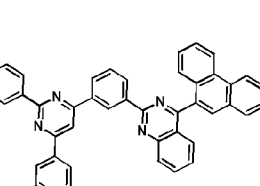
1-29



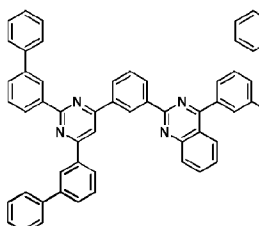
1-30



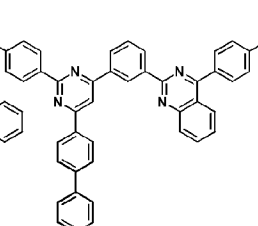
1-31



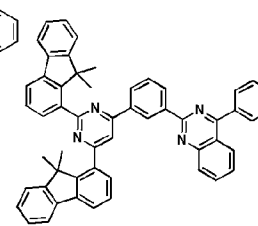
1-32



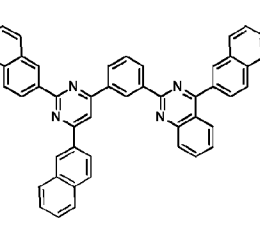
1-33



1-34

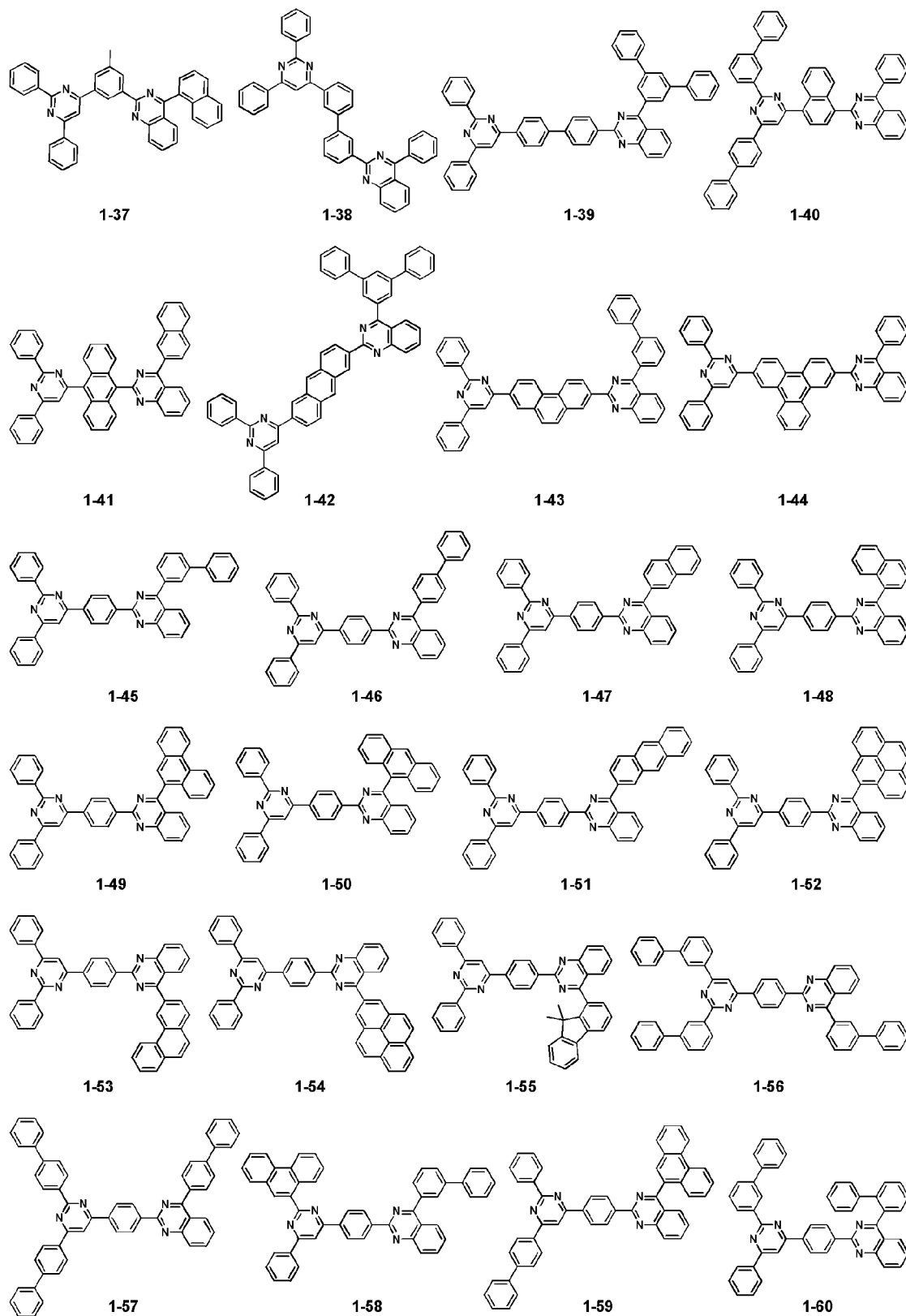


1-35

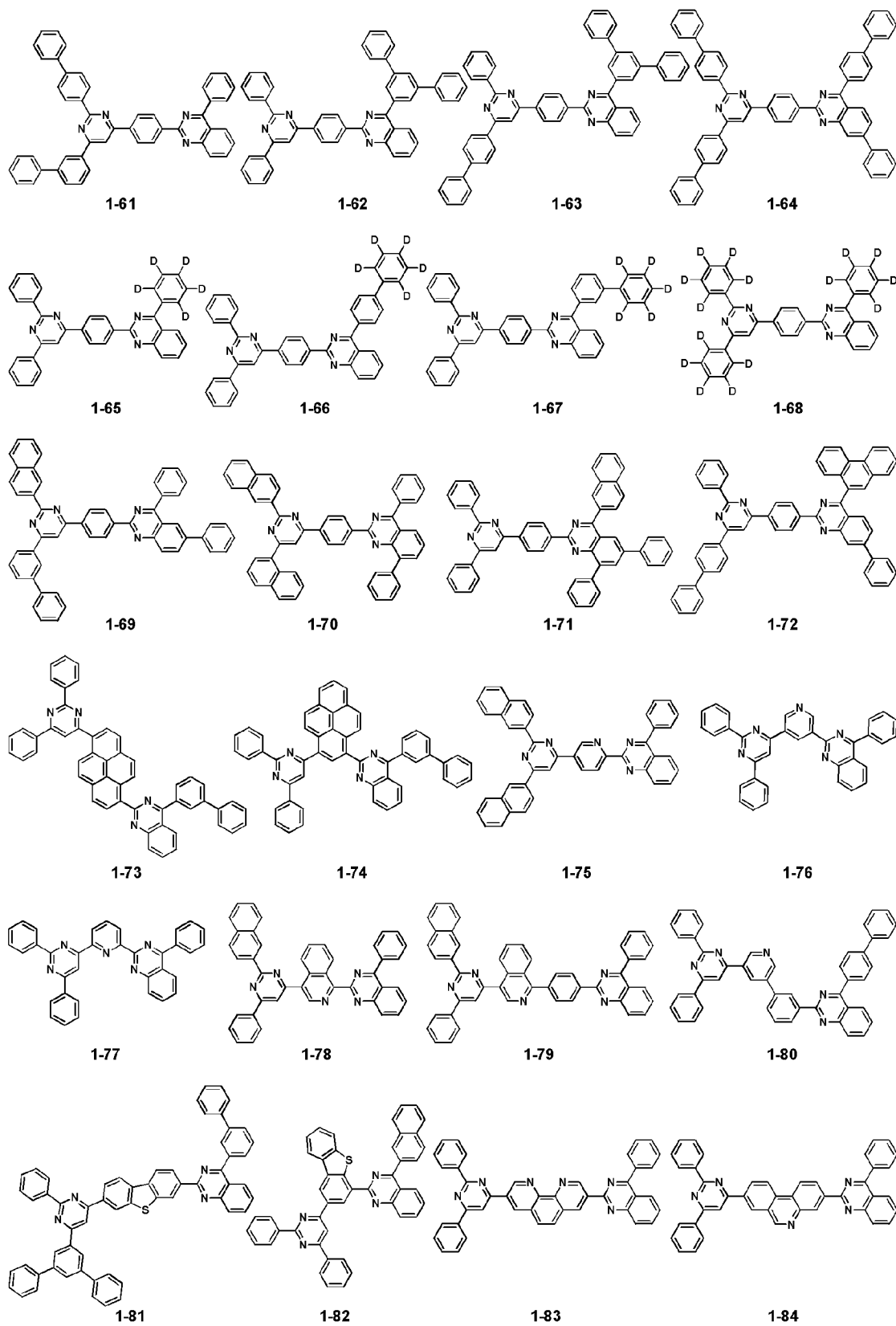


1-36

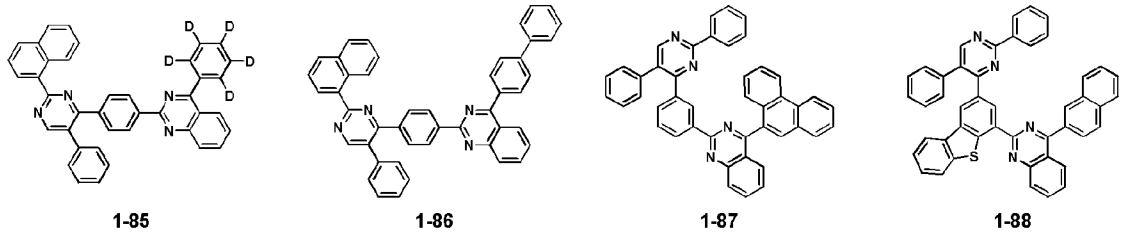
[98]



[99]



[100]



[101] 다른 실시예로서, 본 발명은 상기 화학식 1, 화학식 1a 또는 화학식 1b로 표시되는 유기전기소자용 화합물을 제공한다.

[102] 또 다른 실시예에서, 본 발명은 상기 화학식 1, 화학식 1a 또는 화학식 1b로 표시되는 화합물을 함유하는 유기전기소자를 제공한다.

[103] 이때, 유기전기소자는 제 1전극; 제 2전극; 및 상기 제 1전극과 제 2전극 사이에 위치하는 유기물층;을 포함할 수 있으며, 유기물층은 화학식 1, 화학식 1a 또는 화학식 1b로 표시되는 화합물을 포함할 수 있으며, 화학식 1, 화학식 1a 또는 화학식 1b로 표시되는 화합물은 유기물층의 전자수송층 및 발광층 중 적어도 하나의 층에 함유될 수 있다. 즉, 화학식 1, 화학식 1a 또는 화학식 1b로 표시되는 화합물은 전자수송층 또는 발광층의 재료로 사용될 수 있다.

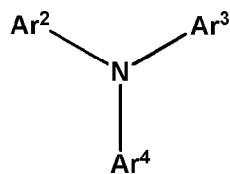
[104] 바람직하게는, 유기물층에 상기 화합물 1-1 내지 1-88 중 하나를 포함하는 유기전기소자를 제공한다.

[105] 바람직하게는, 상기 유기물층에 함유된 화합물은 상기 화학식 1, 화학식 1a 또는 화학식 1b로 표시되는 1종 단독 또는 2 이상의 혼합물일 수 있다. 예컨대, 유기물층 중 전자수송층이나 발광층은 화합물 1-1 단독으로 형성될 수도 있고, 화합물 1-1과 화합물 1-2가 혼합된 혼합물로 형성될 수도 있다.

[106] 다른 실시예로, 본발명의 유기물층은 전자수송층, 발광층, 발광보조층 및 정공수송층을 포함하며, 상기 발광보조층은 상기 정공수송층과 상기 발광층 사이에 형성되며, 상기 전자수송층은 상기 화학식 1, 화학식 1a 또는 화학식 1b로 표시되는 화합물을 함유하고, 상기 정공수송층 및 발광보조층 중 적어도 일층은 서로 독립적으로 하기 화학식 2로 표시되는 화합물을 함유한다.

[107] <화학식 2>

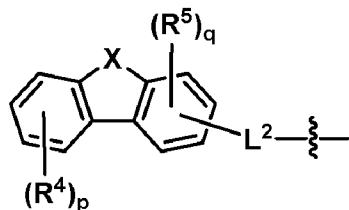
[108]



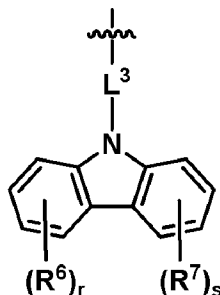
[109] 상기 화학식 2에서, Ar² 및 Ar³은 서로 독립적으로 C₆-C₆₀의 아릴기, 플루오렌일기, O, N, S, Si 및 P로 이루어진 그룹에서 선택된 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C₂-C₆₀의 헤테로고리, C₃-C₆₀의 지방족고리와 C₆-C₆₀의 방향족고리의 융합고리, C₁-C₅₀의 알킬기, C₂-C₂₀의 알켄일기, C₂-C₂₀의 알킨일기, C₁-C₃₀의 알콕시기, 및 C₆-C₃₀의 아릴옥시기로 구성된 군에서 선택된다.

[110] 또한, Ar⁴는 C₆-C₃₀의 아릴기, 하기 화학식 2a 또는 화학식 2b이다.

[111] <화학식 2a>



<화학식 2b>



[112] 상기 화학식 2a 및 2b에서, X는 NR^d , O, S, 또는 CR^eR^f 이며, 이때 R^d 내지 R^f 는 서로 독립적으로 $\text{C}_6\text{-C}_{60}$ 의 아릴기, 플루오렌일기, O, N, S, Si 및 P로 이루어진 그룹에서 선택된 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 $\text{C}_2\text{-C}_{60}$ 의 헤테로고리기, $\text{C}_3\text{-C}_{60}$ 의 지방족고리와 $\text{C}_6\text{-C}_{60}$ 의 방향족고리의 융합고리기, $\text{C}_1\text{-C}_{50}$ 의 알킬기, $\text{C}_2\text{-C}_{20}$ 의 알켄일기, $\text{C}_2\text{-C}_{20}$ 의 알킨일기, $\text{C}_1\text{-C}_{30}$ 의 알콕시기, 및 $\text{C}_6\text{-C}_{30}$ 의 아릴옥시기로 구성된 군에서 선택되며, R^e 및 R^f 는 서로 결합하여 스파이로 화합물을 형성할 수 있다.

[113] 또한, L^2 는 단일결합, $\text{C}_6\text{-C}_{60}$ 의 아릴렌기, 플루오렌일렌기, O, N, S, Si 및 P로 이루어진 그룹에서 선택된 적어도 하나의 헤테로 원자를 포함하는 $\text{C}_2\text{-C}_{60}$ 의 헤테로고리기, $\text{C}_3\text{-C}_{60}$ 의 지방족고리와 $\text{C}_6\text{-C}_{60}$ 의 방향족고리의 융합고리기, 및 이들의 조합으로 이루어진 군에서 선택될 수 있고, L^3 는 $\text{C}_6\text{-C}_{60}$ 의 아릴렌기, 플루오렌일렌기, O, N, S, Si 및 P로 이루어진 그룹에서 선택된 적어도 하나의 헤테로 원자를 포함하는 $\text{C}_2\text{-C}_{60}$ 의 헤테로고리기, $\text{C}_3\text{-C}_{60}$ 의 지방족고리와 $\text{C}_6\text{-C}_{60}$ 의 방향족고리의 융합고리기, 및 이들의 조합으로 이루어진 군에서 선택될 수 있다.

[114] 바람직하게는, L^2 및 L^3 는 서로 독립적으로 중수소, 할로젠, 실란기, 실록산기, 붕소기, 게르마늄기, 시아노기, 니트로기, $\text{C}_1\text{-C}_{20}$ 의 알킬싸이오기, $\text{C}_1\text{-C}_{20}$ 의 알콕시기, $\text{C}_1\text{-C}_{20}$ 의 알킬기, $\text{C}_2\text{-C}_{20}$ 의 알켄일기, $\text{C}_2\text{-C}_{20}$ 의 알킨일기, $\text{C}_6\text{-C}_{20}$ 의 아릴기, 중수소로 치환된 $\text{C}_6\text{-C}_{20}$ 의 아릴기, 플루오렌일기, O, N, S, Si 및 P로 이루어진 그룹에서 선택된 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 $\text{C}_2\text{-C}_{20}$ 의 헤테로고리기, $\text{C}_3\text{-C}_{20}$ 의 시클로알킬기, $\text{C}_7\text{-C}_{20}$ 의 아릴알킬기, 및 $\text{C}_8\text{-C}_{20}$ 의 아릴알켄일기로 이루어진 군에서 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 더 치환될 수 있다,

[115] 또한, 상기 화학식 2a 및 2b에서, R^4 내지 R^7 은 i) 서로 독립적으로 중수소, 삼중수소, 할로젠, $\text{C}_6\text{-C}_{60}$ 의 아릴기, 플루오렌일기, O, N, S, Si 및 P로 이루어진 그룹에서 선택된 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 $\text{C}_2\text{-C}_{60}$ 의 헤테로고리기, $\text{C}_3\text{-C}_{60}$ 의 지방족고리와 $\text{C}_6\text{-C}_{60}$ 의 방향족고리의 융합고리기, $\text{C}_1\text{-C}_{50}$ 의 알킬기, $\text{C}_2\text{-C}_{20}$ 의 알켄일기, $\text{C}_2\text{-C}_{20}$ 의 알킨일기, $\text{C}_1\text{-C}_{30}$ 의 알콕시기, 및 $\text{C}_6\text{-C}_{30}$ 의 아릴옥시기로 구성된 군에서 선택되거나, 또는 ii) 이웃한 기끼리 서로 결합하여 적어도 하나의 고리를 형성하며, 이때 고리를 형성하지 않는 기는 상기 i)에서 정의된 것과 동일하며, p, r 및 s는 각각 0 내지 4의 정수이고, q는 0 내지 3의 정수이며, 이들

각각이 2 이상의 정수인 경우, R^4 내지 R^7 각각은 서로 같거나 상이하다.

- [116] 바람직하게는, Ar^2 내지 Ar^4 , R^4 내지 R^7 이 각각 아릴기인 경우, Ar^2 , Ar^3 , R^4 내지 R^7 이 각각 플루오렌일기, 헤테로고리기, 융합고리기, 알킬기, 알켄일기, 알킨일기, 알콕시기 또는 아릴옥시기인 경우, 이들 각각은 서로 독립적으로 중수소, 할로젠, 실란기, 실록산기, 붕소기, 게르마늄기, 시아노기, 니트로기, C_1-C_{20} 의 알킬싸이오기, C_1-C_{20} 의 알콕시기, 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 그룹에서 선택된 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C_2-C_{20} 의 헤테로고리기, C_3-C_{20} 의 시클로알킬기, C_7-C_{20} 의 아릴알킬기, C_8-C_{20} 의 아릴알켄일기, 및 $-L'-N(R')(R'')$ (여기서, 상기 L' 은 단일결합, C_6-C_{30} 의 아릴렌기, 플루오렌일렌기, C_3-C_{30} 의 지방족고리와 C_6-C_{30} 의 방향족고리의 융합고리기, 및 O, N, S, Si 및 P로 이루어진 군에서 선택된 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C_2-C_{30} 의 헤테로고리기로 이루어진 군에서 선택되며, 상기 R' 및 R'' 는 서로 독립적으로 C_6-C_{30} 의 아릴기, 플루오렌일기, C_3-C_{30} 의 지방족고리와 C_6-C_{30} 의 방향족고리의 융합고리기, 및 O, N, S, Si 및 P로 이루어진 군에서 선택된 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C_2-C_{30} 의 헤테로고리기로 이루어진 군에서 선택됨)로 이루어진 군에서 선택된 하나 이상의 치환기로 치환될 수 있다.
- [117] 구체적으로, 상기 화학식 2는 하기 화합물 중 하나일 수 있다.

2-1

2-2

2-3

2-4

2-5

2-6

2-7

2-8

2-9

2-10

2-11

2-12

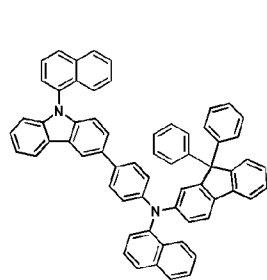
2-13

2-14

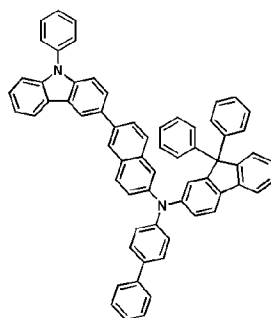
2-15

2-16

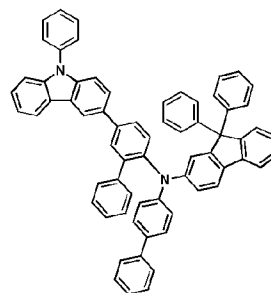
[119]



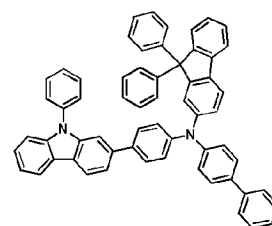
2-17



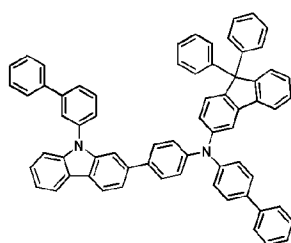
2-18



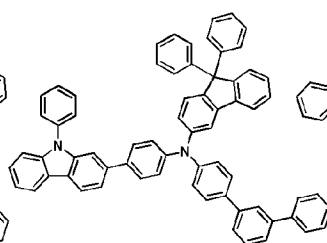
2-19



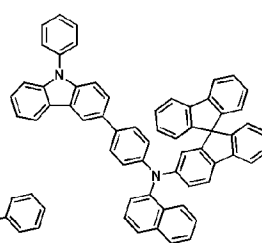
2-20



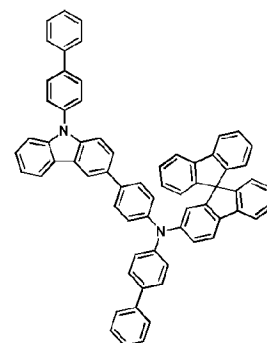
2-21



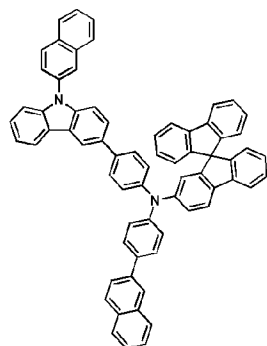
2-22



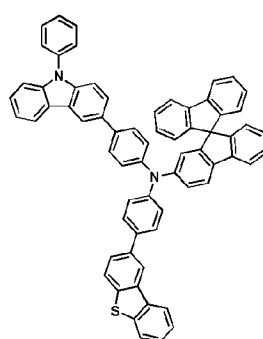
2-23



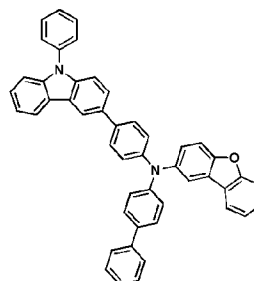
2-24



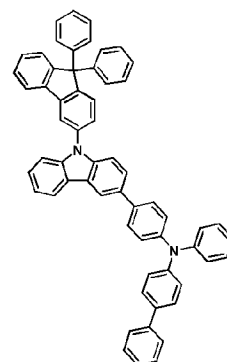
2-25



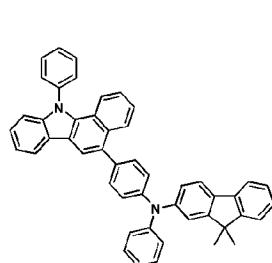
2-26



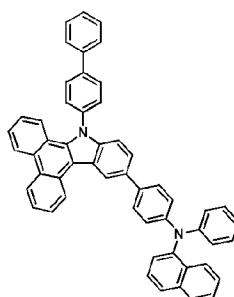
2-27



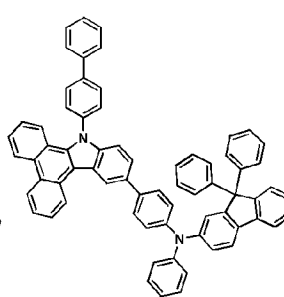
2-28



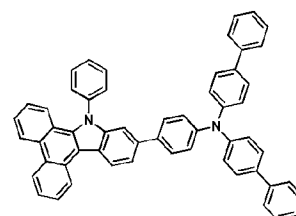
2-29



2-30

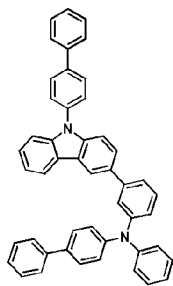


2-31

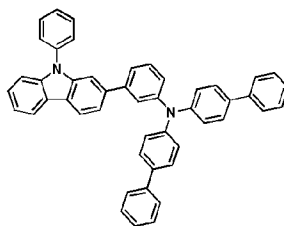


2-32

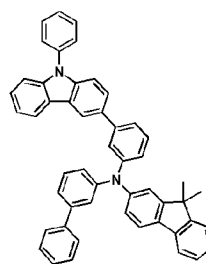
[120]



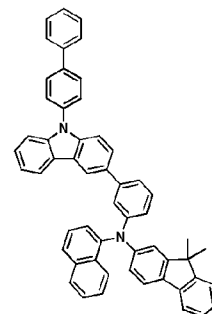
2-33



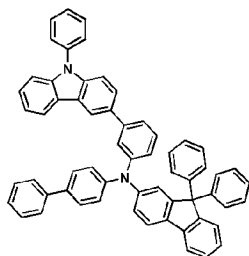
2-34



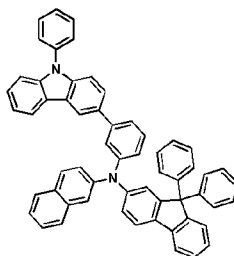
2-35



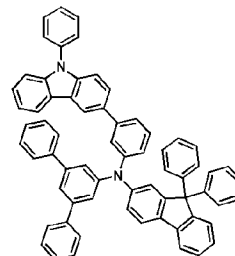
2-36



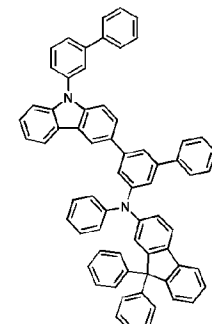
2-37



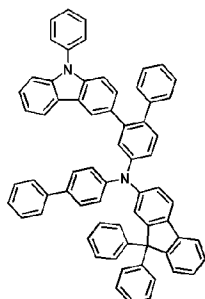
2-38



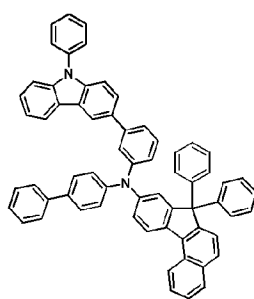
2-39



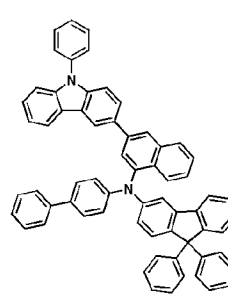
2-40



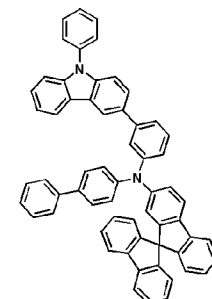
2-41



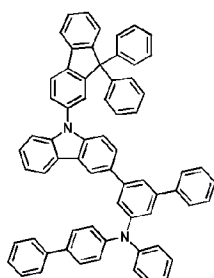
2-42



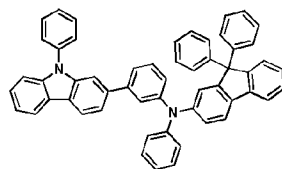
2-43



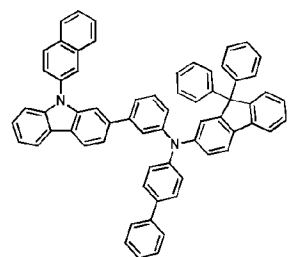
2-44



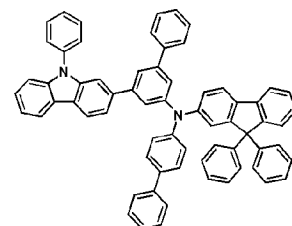
2-45



2-46

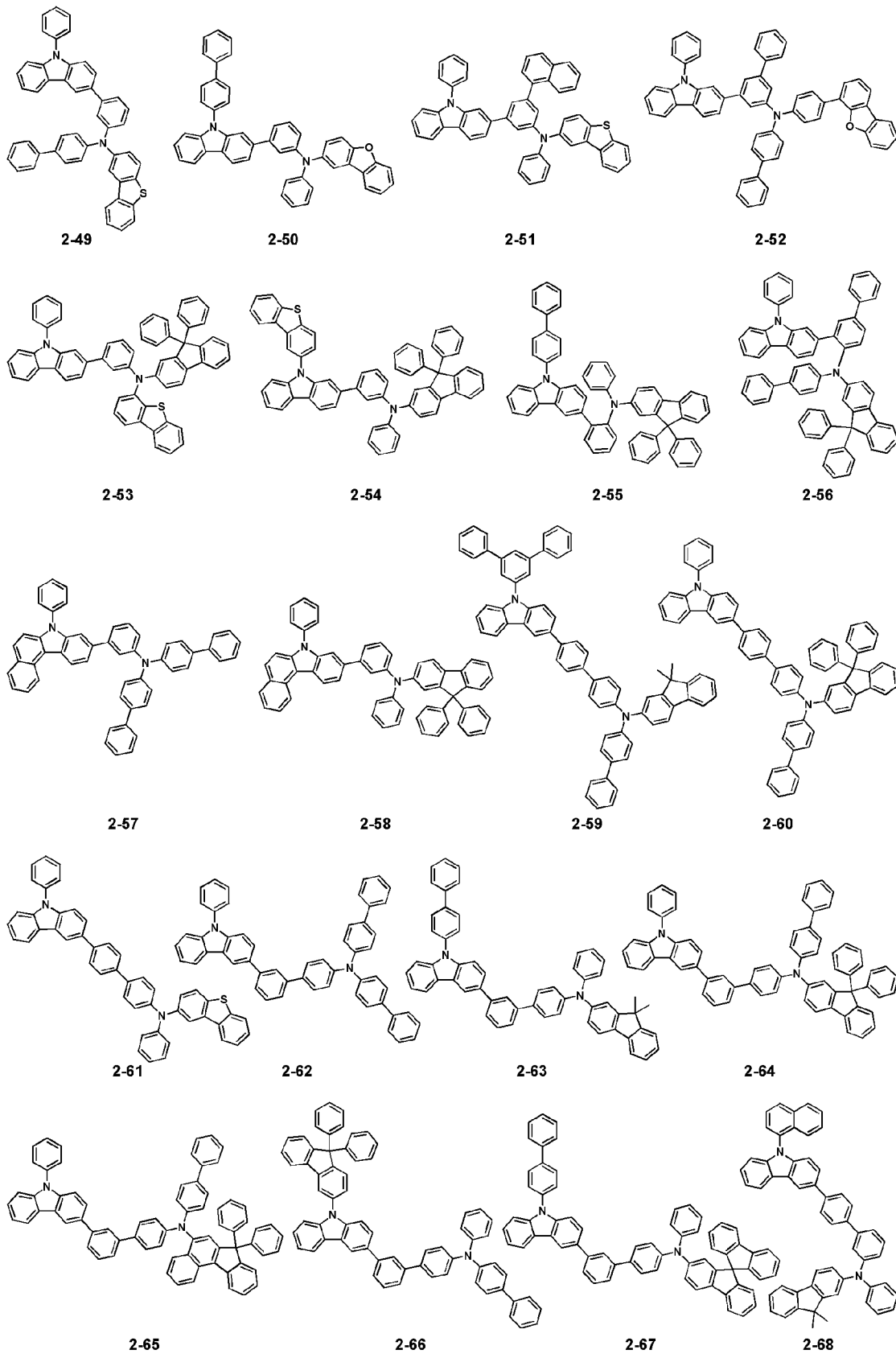


2-47

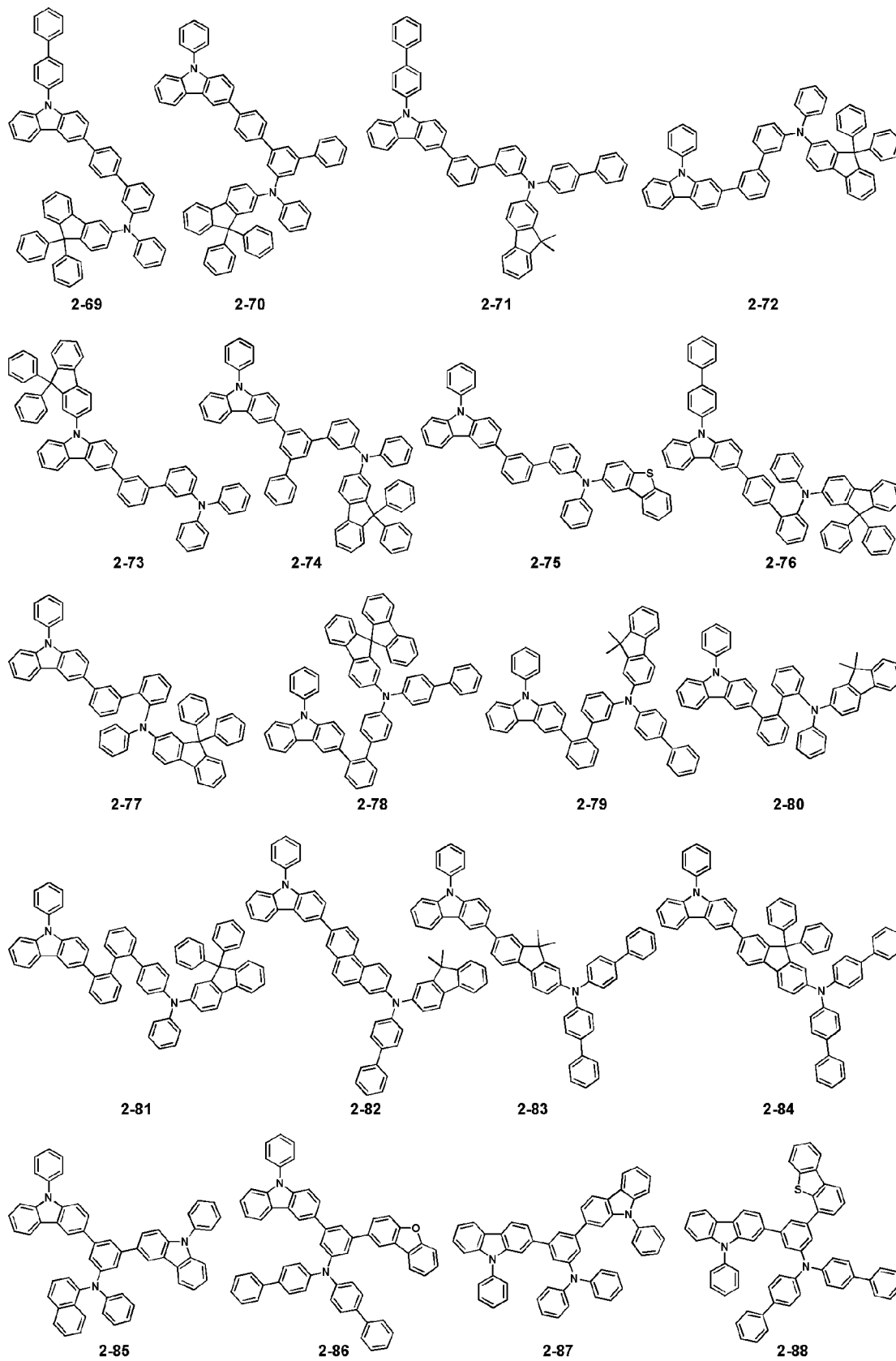


2-48

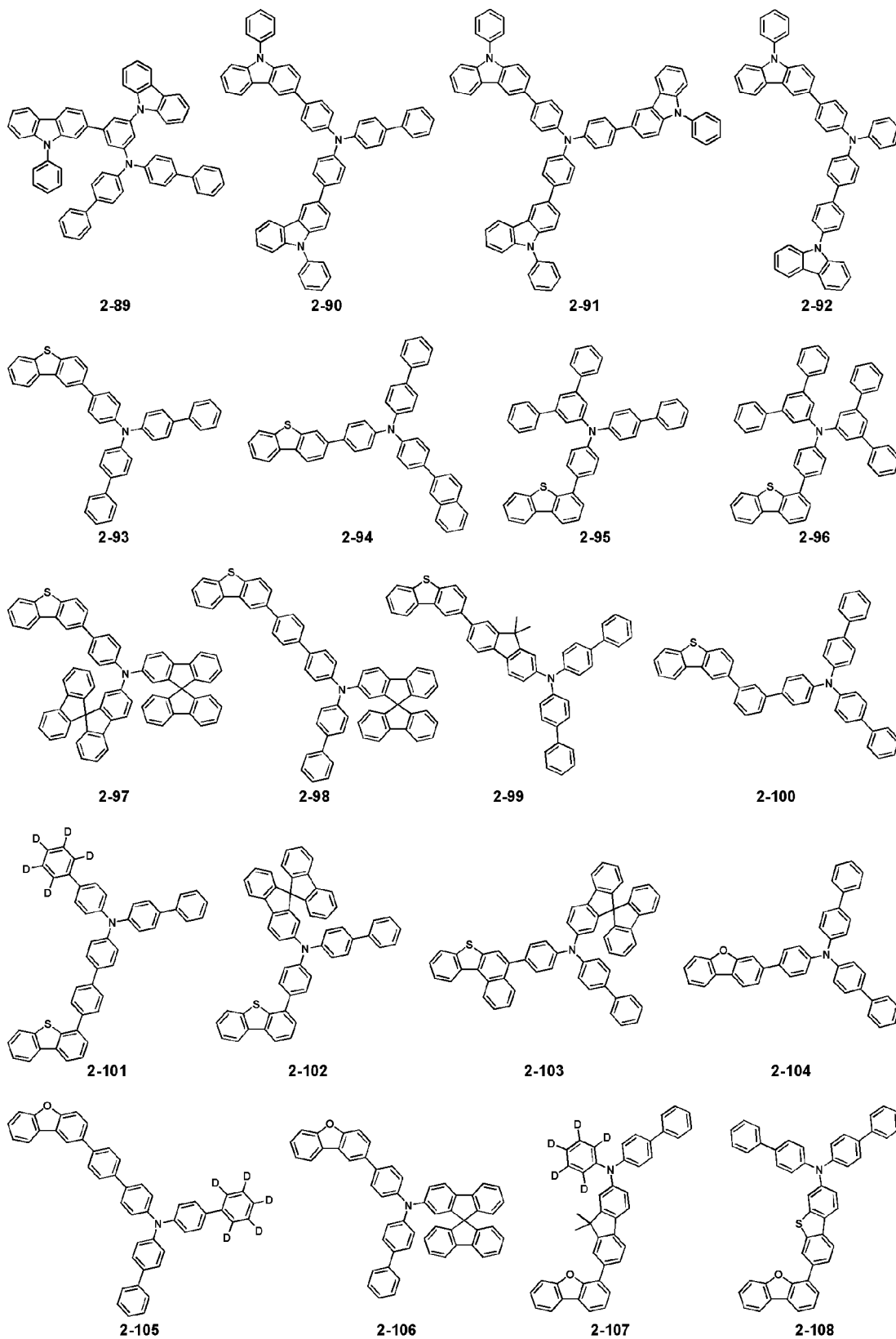
[121]



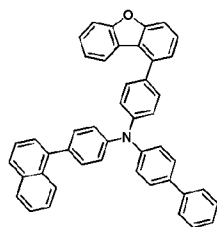
[122]



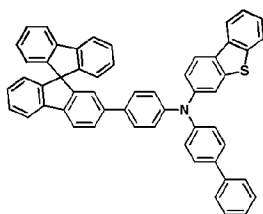
[123]



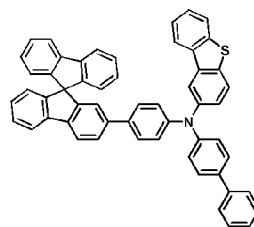
[124]



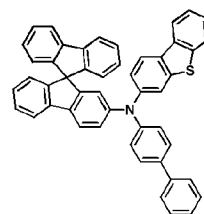
2-109



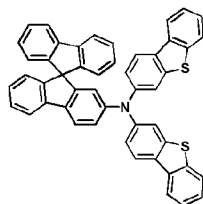
2-110



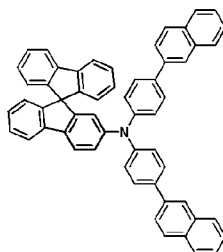
2-111



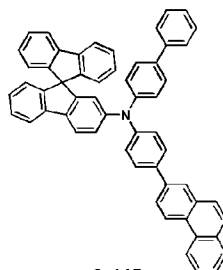
2-112



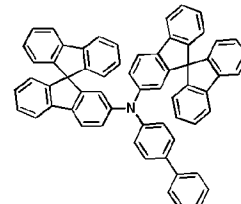
2-113



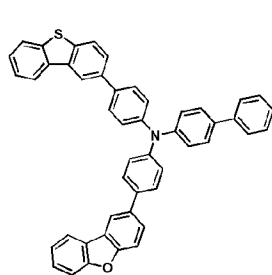
2-114



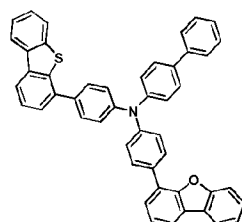
2-115



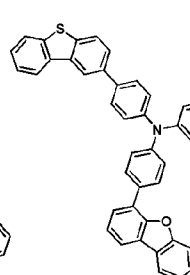
2-116



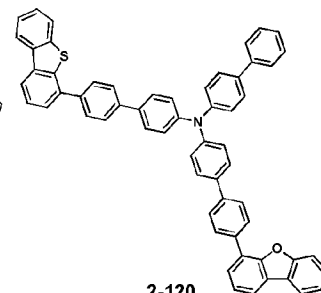
2-117



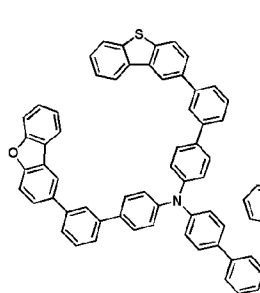
2-118



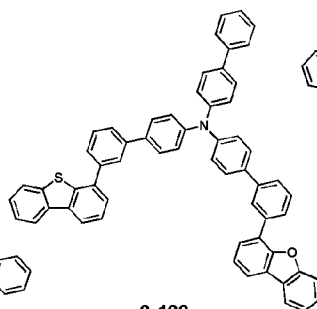
2-119



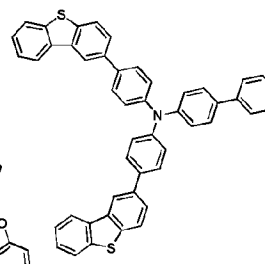
2-120



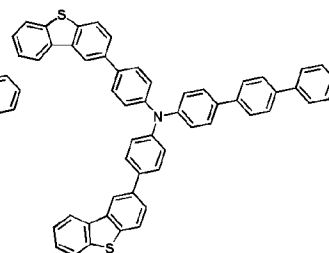
2-121



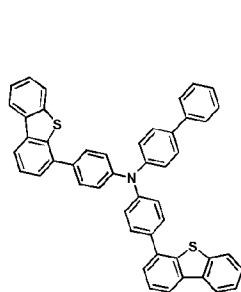
2-122



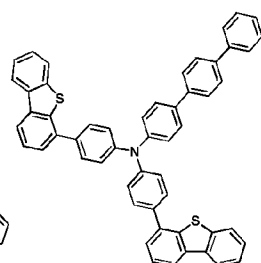
2-123



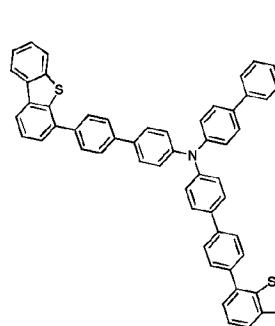
2-124



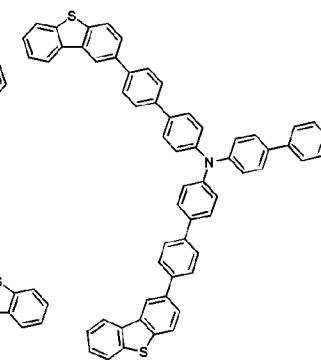
2-125



2-126

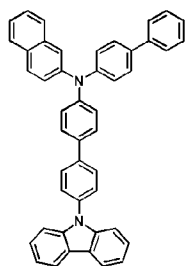


2-127

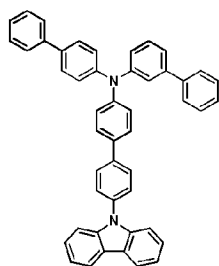


2-128

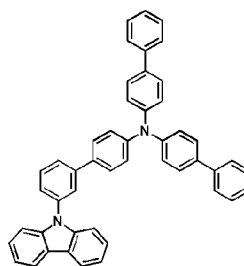
[125]



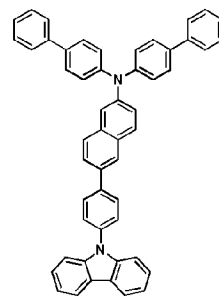
2-129



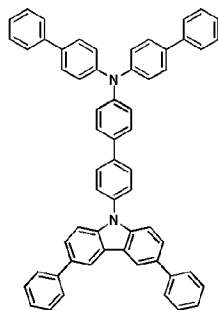
2-130



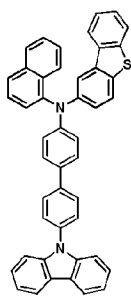
2-131



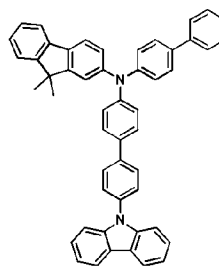
2-132



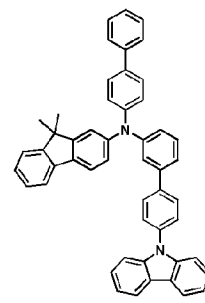
2-133



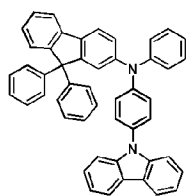
2-134



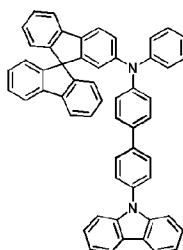
2-135



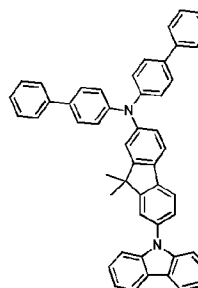
2-136



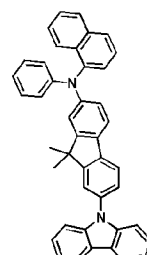
2-137



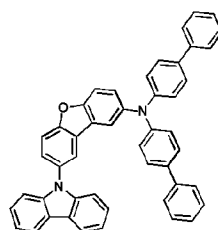
2-138



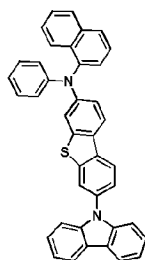
2-139



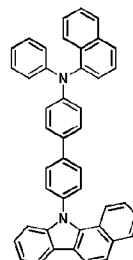
2-140



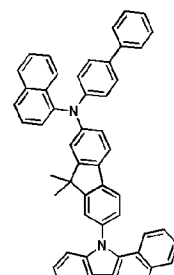
2-141



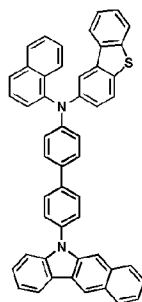
2-142



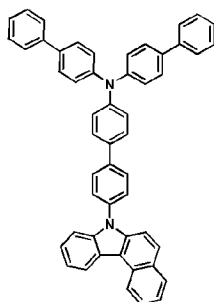
2-143



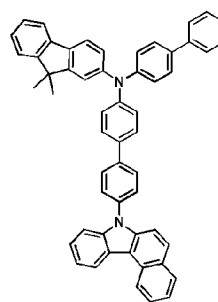
2-144



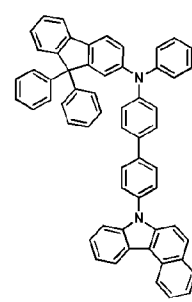
2-145



2-146

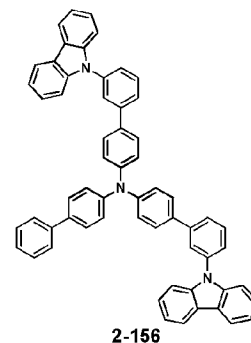
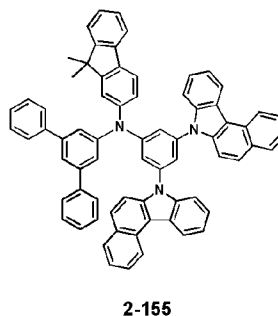
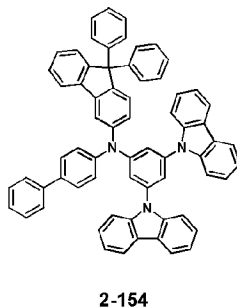
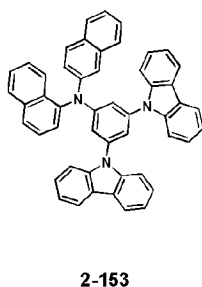
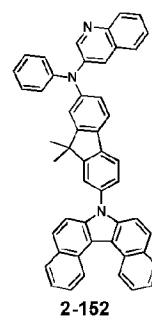
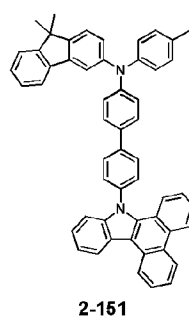
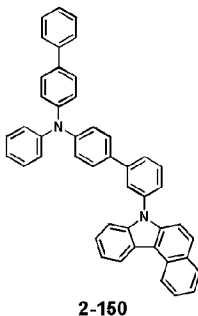
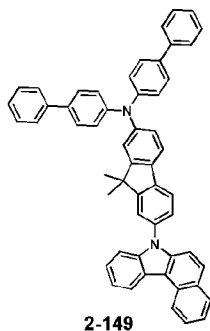


2-147



2-148

[126]



[127] 또한, 상기 정공수송층 또는 발광보조층에 함유되는 카바졸 유도체 또는 아릴아민 유도체 화합물로 한국등록특허 제10-1251451호와 제10-1298483호에 개시된 화합물을 사용할 수 있다.

[128] 한편, 상기 유기물층은 스핀코팅 공정, 노즐 프린팅 공정, 잉크젯 프린팅 공정, 슬롯코팅 공정, 딥코팅 공정 또는 롤투롤 공정에 의해 형성될 수 있다.

[129] 본 발명의 다른 실시예로, 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. 바람직하게는, 상기 광효율 개선층은 상기 화학식 2로 표시되는 화합물을 포함할 수 있다.

[130] 본 발명의 또 다른 실시예에서, 본 발명은 본 발명에 따른 화합물이 함유된 유기물층을 포함하는 유기전기소자를 포함하는 디스플레이장치 및 상기 디스플레이장치를 제어하는 제어부를 포함하는 전자장치를 제공한다. 이때 유기전기소자는 유기전기발광소자, 유기태양전지, 유기감광체, 유기트랜지스터, 및 단색 또는 백색 조명용 소자 중 하나일 수 있다.

[131]

[132] 이하에서, 본 발명에 따른 화학식으로 표시되는 화합물의 합성에 및 유기전기소자의 제조예에 관하여 실시예를 들어 구체적으로 설명하지만, 본 발명이 하기의 실시예로 한정되는 것은 아니다.

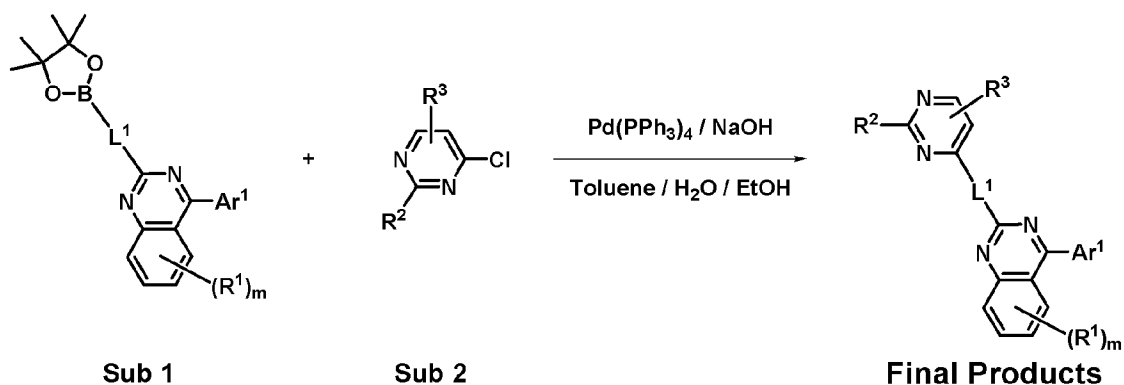
[133] **합성예**

[134] **I. 화학식 1의 합성**

[135] 본 발명에 따른 화학식 1로 표시되는 화합물(final products)은 하기 반응식 1과 같이 Sub 1과 Sub 2를 반응시켜 합성되며, 이에 한정되는 것은 아니다.

[136] <반응식 1>

[137]



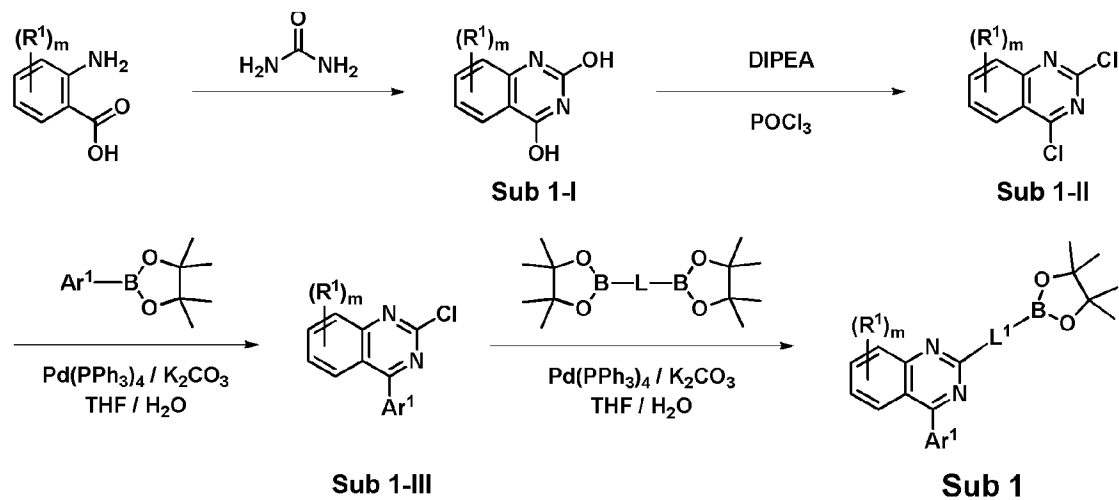
[138] (R^1 내지 R^3 , Ar^1 , L^1 , 및 m 은 상기 화학식 1에서 정의된 것과 동일하다.)

[139] **1. Sub 1의 합성**

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

[141] <반응식 2>

[142]

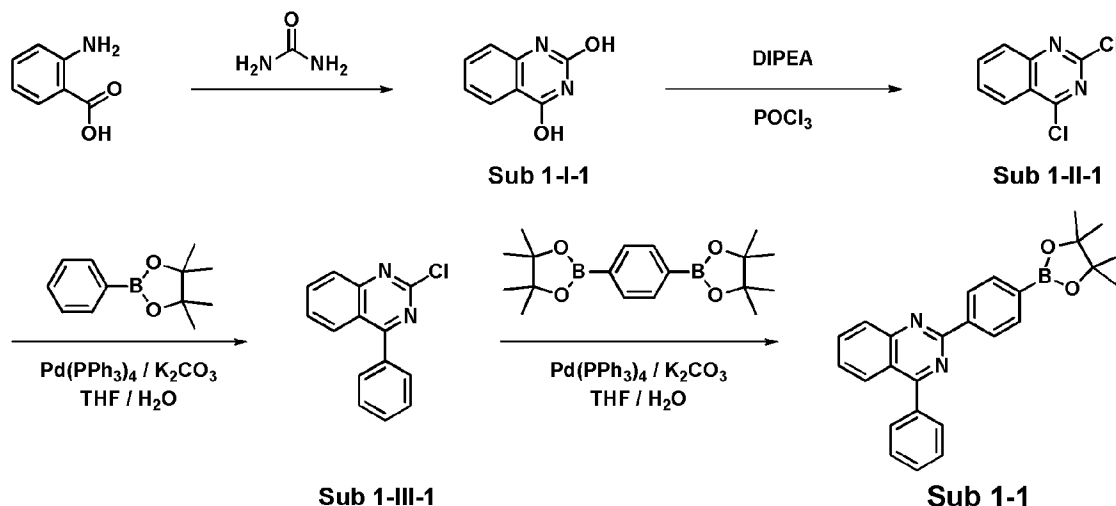


[143] Sub 1에 속하는 구체적인 화합물의 합성예는 다음과 같다.

[144] **(1) Sub 1-1 합성예**

[145] <반응식 3>

[146]

[147] **Sub 1-I-1 합성**

[148] 출발물질인 2-aminobenzoic acid (101.51 g, 0.7402 mol)를 둥근바닥플라스크에 urea (311.19 g, 5.1813 mol)와 함께 넣고 160°C에서 교반하였다. TLC로 반응을 확인한 후, 100°C까지 냉각시키고 H₂O (500ml)을 첨가하여 1시간 동안 교반하였다. 반응이 완료되면 생성된 고체를 감압여과하고 물로 세척 후 건조하여 생성물 97.22 g (수율: 81%)을 얻었다.

[149] **Sub 1-II-1 합성**

[150] 상기 합성에서 얻어진 Sub 1-I-1 (97.22 g, 0.5996 mol)을 둥근바닥플라스크에 넣고 POCl₃ (400ml)로 상온에서 녹인 후에, *N,N*-Diisopropylethylamine (193.72 g, 1.4989 mol)을 천천히 적가시킨 후, 90°C에서 교반하였다. 반응이 완료되면 농축한 후 얼음물 (1000ml)을 넣고 상온에서 1시간 동안 교반하였다. 생성된 고체를 감압여과하고 건조하여 생성물 102.63 g (수율: 86%)을 얻었다.

[151] **Sub 1-III-1 합성**

[152] 상기 합성에서 얻어진 Sub 1-II-1 (69.13 g, 0.3473 mol)과 4,4,5,5-tetramethyl-2-phenyl-1,3,2-dioxaborolane (70.88 g, 0.3473 mol)을 둥근바닥플라스크에 넣고 THF (770ml)와 H₂O (385ml)로 녹인 후에 K₂CO₃ (144.01 g, 1.042 mol), Pd(PPh₃)₄ (16.05 g, 0.0139 mol)를 첨가하고 90°C에서 교반하였다. 반응이 완료되면 CH₂Cl₂와 물로 추출한 후 유기층을 MgSO₄로 건조하고 농축한 후 생성된 화합물을 silicagel column 및 재결정하여 생성물 55.17 g (수율: 66%)을 얻었다.

[153] **Sub 1-1 합성**

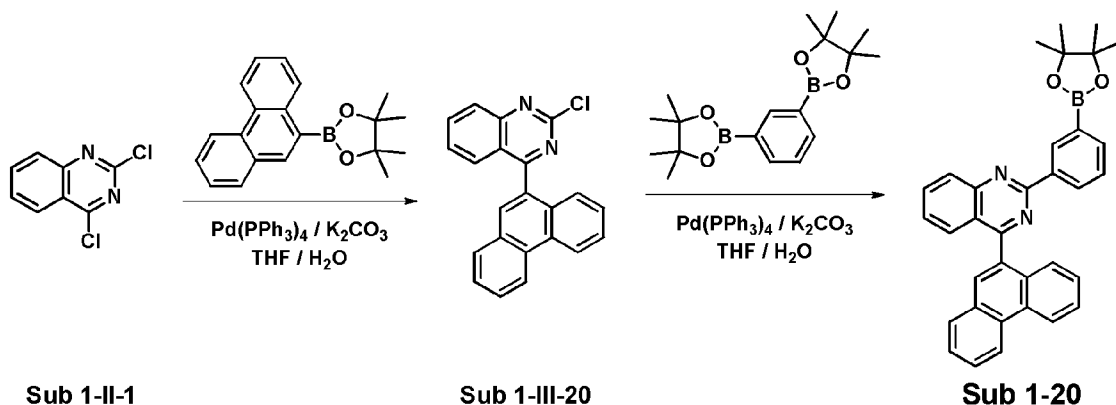
[154] 상기 합성에서 얻어진 Sub 1-III-1 (25.02 g, 0.104 mol)과 1,4-bis(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)benzene (34.31 g, 0.104 mol)을 둥근바닥플라스크에 넣고 THF (230ml)와 H₂O (115ml)로 녹인 후에 K₂CO₃ (43.1 g, 0.3119 mol), Pd(PPh₃)₄ (4.8 g, 0.0042 mol)를 첨가하고 70°C에서 교반하였다. 반응이 완료되면 CH₂Cl₂와 물로 추출한 후 유기층을 MgSO₄로 건조하고 농축한 후 생성된 화합물을 silicagel column 및 재결정하여 생성물 19.52 g (수율: 46%)을 얻었다.

얻었다.

[155] (2) Sub 1-20 합성 예

[156] <반응식 4>

[157]



[158] **Sub 1-III-20 합성**

[159] 상기 합성에서 얻어진 Sub 1-II-1 (29.99 g, 0.1507 mol)에 4,4,5,5-tetramethyl-2-(phenanthren-9-yl)-1,3,2-dioxaborolane (45.83 g, 0.1507 mol), K_2CO_3 (62.47 g, 0.452 mol), $Pd(PPh_3)_4$ (6.96 g, 0.006 mol), THF (340ml), H_2O (170ml)을 상기 Sub 1-III-1 합성법을 사용하여 생성물 35.95 g (수율: 70%)을 얻었다.

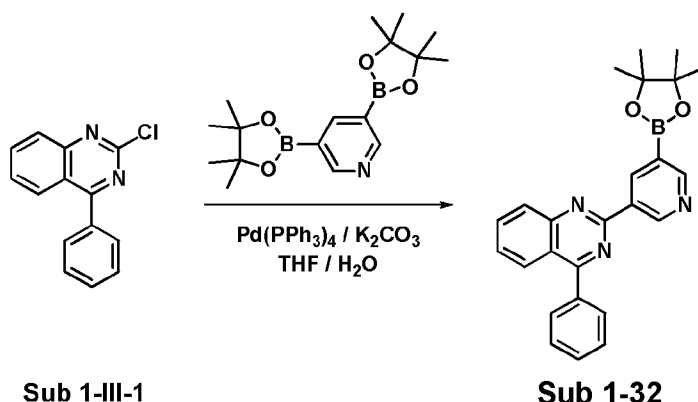
[160] **Sub 1-20 합성**

[161] 상기 합성에서 얻어진 Sub 1-III-20 (35.95 g, 0.1055 mol)에 1,3-bis(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)benzene (34.81 g, 0.1055 mol), K_2CO_3 (43.74 g, 0.317 mol), $Pd(PPh_3)_4$ (4.88 g, 0.0042 mol), THF (230ml), H_2O (115ml)을 상기 Sub 1-1 합성법을 사용하여 생성물 28.42 g (수율: 53%)을 얻었다.

[162] (3) Sub 1-32 합성 예

[163] <반응식 5>

[164]

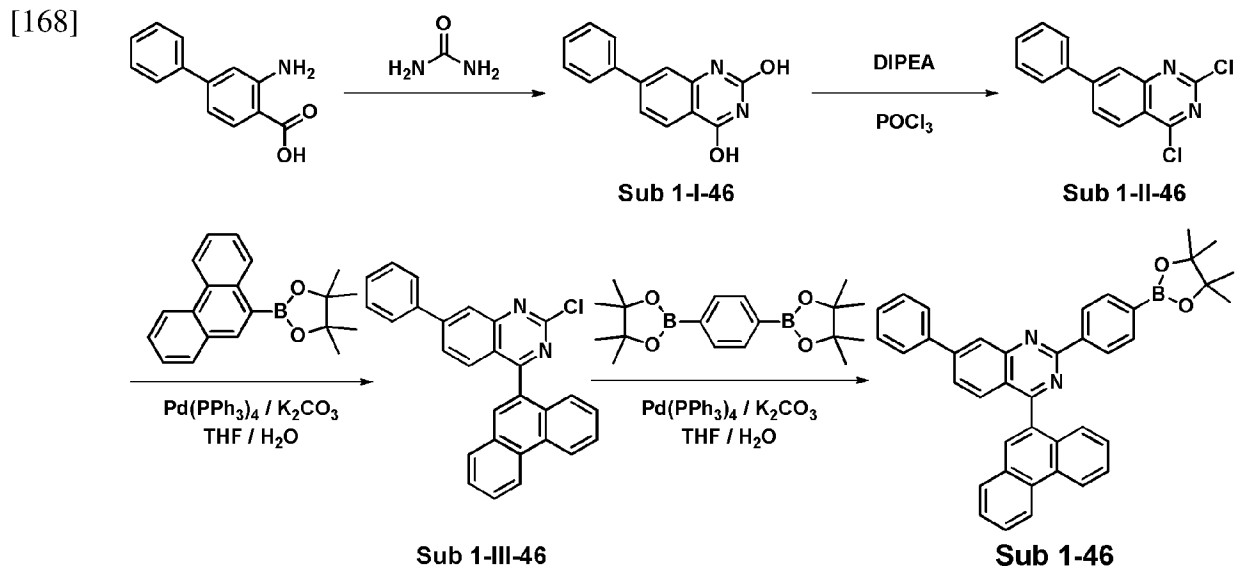


[165] 상기 합성에서 얻어진 Sub 1-III-1 (28.04 g, 0.1165 mol)에

3,5-bis(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)pyridine (38.56 g, 0.1165 mol), K_2CO_3 (48.3 g, 0.3495 mol), $Pd(PPh_3)_4$ (5.38 g, 0.0047 mol), THF (260ml), H_2O (130ml)을 상기 Sub 1-1 합성법을 사용하여 생성물 20.03 g (수율: 42%)을 얻었다.

[166] (4) Sub 1-46 합성 예

[167] <반응식 6>



[169] **Sub 1-I-46 합성**

[170] 출발물질인 3-amino-[1,1'-biphenyl]-4-carboxylic acid (19.46 g, 0.0913 mol)에 urea (38.37 g, 0.6388 mol), H₂O (46ml)을 상기 Sub 1-I-1 합성법을 사용하여 생성물 16.96 g (수율: 78%)을 얻었다.

[171] **Sub 1-II-46 합성**

[172] 상기 합성에서 얻어진 Sub 1-I-46 (16.96 g, 0.0712 mol)에 POCl₃ (50ml), N,N-Diisopropylethylamine (23 g, 0.178 mol)을 상기 Sub 1-II-1 합성법을 사용하여 생성물 17.43 g (수율: 89%)을 얻었다.

[173] **Sub 1-III-46 합성**

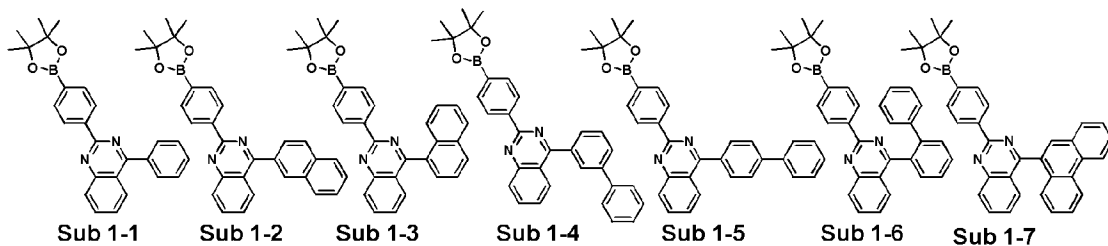
[174] 상기 합성에서 얻어진 Sub 1-II-46 (17.43 g, 0.0634 mol)에 4,4,5,5-tetramethyl-2-(phenanthren-9-yl)-1,3,2-dioxaborolane (19.27 g, 0.0634 mol), K₂CO₃ (26.27 g, 0.1901 mol), Pd(PPh₃)₄ (2.93 g, 0.0025 mol), THF (140ml), H₂O (70ml)을 상기 Sub 1-III-1 합성법을 사용하여 생성물 17.7 g (수율: 67%)을 얻었다.

[175] **Sub 1-46 합성**

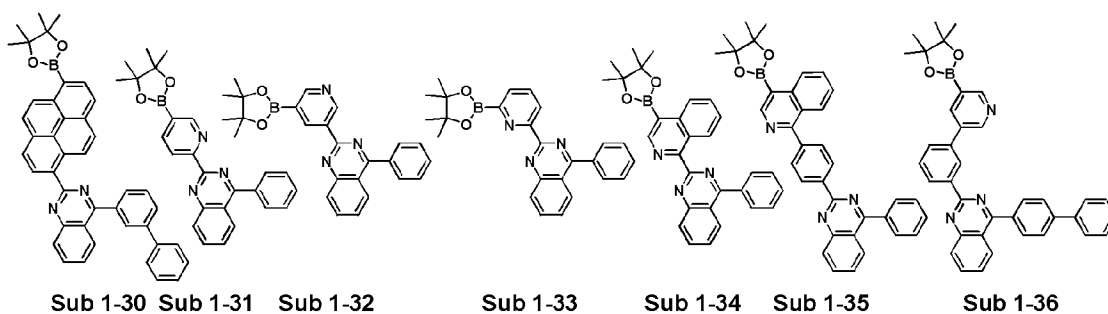
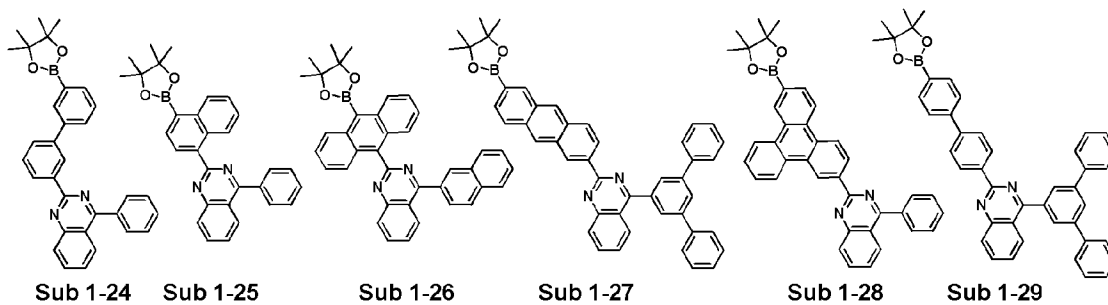
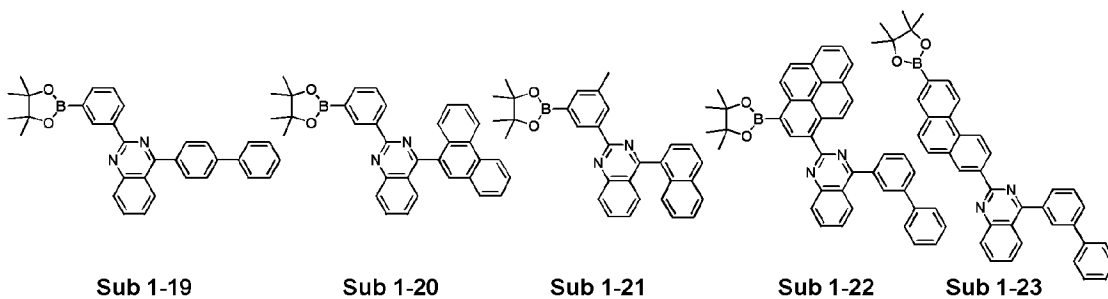
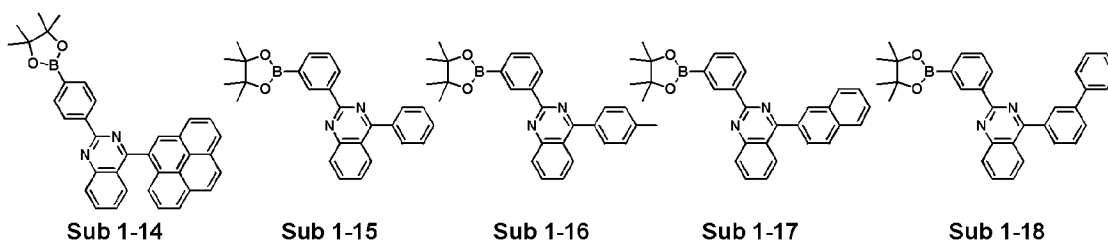
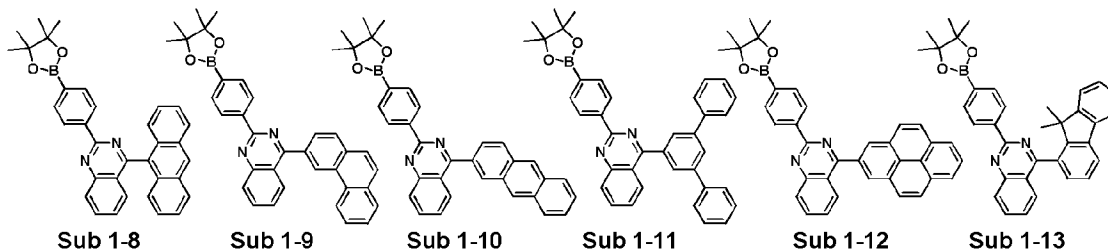
[176] 상기 합성에서 얻어진 Sub 1-III-46 (17.21 g, 0.0413 mol)과 1,4-bis(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)benzene (13.62 g, 0.0413 mol), THF (90ml)와 H₂O (45ml)으로 녹인 후에 K₂CO₃ (17.12 g, 0.1238 mol), Pd(PPh₃)₄ (1.91 g, 0.0017 mol)을 상기 Sub 1-1 합성법을 사용하여 생성물 13.99 g (수율: 58%)을 얻었다.

[177] 한편, Sub 1에 속하는 화합물은 아래와 같은 화합물일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니며, 표 1은 Sub 1에 속하는 화합물의 FD-MS 값을 나타낸 것이다.

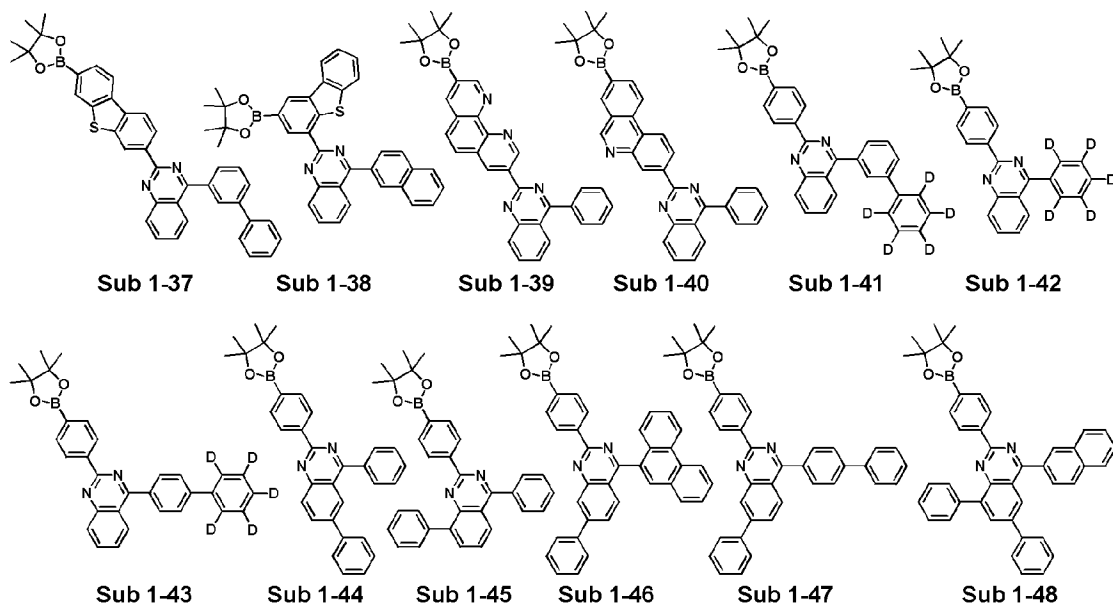
[178]



[179]



[180]



[181]

[표 1]

[182]

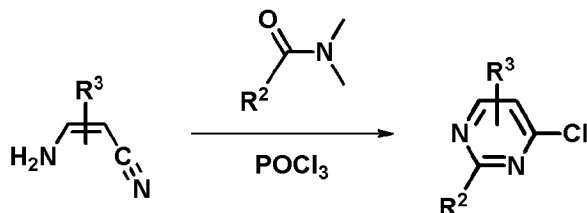
화합물	FD-MS	화합물	FD-MS
Sub 1-1	m/z=408.20(C ₂₆ H ₂₅ BN ₂ O ₂ =408.30)	Sub 1-2	m/z=458.22(C ₃₀ H ₂₇ BN ₂ O ₂ =458.36)
Sub 1-3	m/z=458.22(C ₃₀ H ₂₇ BN ₂ O ₂ =458.36)	Sub 1-4	m/z=484.23(C ₃₂ H ₂₉ BN ₂ O ₂ =484.40)
Sub 1-5	m/z=484.23(C ₃₂ H ₂₉ BN ₂ O ₂ =484.40)	Sub 1-6	m/z=484.23(C ₃₂ H ₂₉ BN ₂ O ₂ =484.40)
Sub 1-7	m/z=508.23(C ₃₄ H ₂₉ BN ₂ O ₂ =508.42)	Sub 1-8	m/z=508.23(C ₃₄ H ₂₉ BN ₂ O ₂ =508.42)
Sub 1-9	m/z=508.23(C ₃₄ H ₂₉ BN ₂ O ₂ =508.42)	Sub 1-10	m/z=508.23(C ₃₄ H ₂₉ BN ₂ O ₂ =508.42)
Sub 1-11	m/z=560.26(C ₃₈ H ₃₃ BN ₂ O ₂ =560.49)	Sub 1-12	m/z=532.23(C ₃₆ H ₂₉ BN ₂ O ₂ =532.44)
Sub 1-13	m/z=524.26(C ₃₅ H ₃₃ BN ₂ O ₂ =524.46)	Sub 1-14	m/z=532.23(C ₃₆ H ₂₉ BN ₂ O ₂ =532.44)
Sub 1-15	m/z=408.20(C ₂₆ H ₂₅ BN ₂ O ₂ =408.30)	Sub 1-16	m/z=422.22(C ₂₇ H ₂₇ BN ₂ O ₂ =422.33)
Sub 1-17	m/z=458.22(C ₃₀ H ₂₇ BN ₂ O ₂ =458.36)	Sub 1-18	m/z=484.23(C ₃₂ H ₂₉ BN ₂ O ₂ =484.40)
Sub 1-19	m/z=484.23(C ₃₂ H ₂₉ BN ₂ O ₂ =484.40)	Sub 1-20	m/z=508.23(C ₃₄ H ₂₉ BN ₂ O ₂ =508.42)
Sub 1-21	m/z=472.23(C ₃₁ H ₂₉ BN ₂ O ₂ =472.39)	Sub 1-22	m/z=608.26(C ₄₂ H ₃₃ BN ₂ O ₂ =608.53)
Sub 1-23	m/z=584.26(C ₄₀ H ₃₃ BN ₂ O ₂ =584.51)	Sub 1-24	m/z=484.23(C ₃₂ H ₂₉ BN ₂ O ₂ =484.40)
Sub 1-25	m/z=458.22(C ₃₀ H ₂₇ BN ₂ O ₂ =458.36)	Sub 1-26	m/z=558.25(C ₃₈ H ₃₁ BN ₂ O ₂ =558.48)
Sub 1-27	m/z=660.29(C ₄₆ H ₃₇ BN ₂ O ₂ =660.61)	Sub 1-28	m/z=558.25(C ₃₈ H ₃₁ BN ₂ O ₂ =558.48)
Sub 1-29	m/z=636.29(C ₄₄ H ₃₇ BN ₂ O ₂ =636.59)	Sub 1-30	m/z=608.26(C ₄₂ H ₃₃ BN ₂ O ₂ =608.53)
Sub 1-31	m/z=409.20(C ₂₅ H ₂₄ BN ₃ O ₂ =409.29)	Sub 1-32	m/z=409.20(C ₂₅ H ₂₄ BN ₃ O ₂ =409.29)
Sub 1-33	m/z=409.20(C ₂₅ H ₂₄ BN ₃ O ₂ =409.29)	Sub 1-34	m/z=459.21(C ₂₉ H ₂₆ BN ₃ O ₂ =459.35)
Sub 1-35	m/z=535.24(C ₃₅ H ₃₀ BN ₃ O ₂ =535.44)	Sub 1-36	m/z=561.26(C ₃₇ H ₃₂ BN ₃ O ₂ =561.48)
Sub 1-37	m/z=590.22(C ₃₈ H ₃₁ BN ₂ O ₂ S=590.54)	Sub 1-38	m/z=564.20(C ₃₆ H ₂₉ BN ₂ O ₂ S=564.50)
Sub 1-39	m/z=510.22(C ₃₂ H ₂₇ BN ₄ O ₂ =510.39)	Sub 1-40	m/z=509.23(C ₃₈ H ₂₈ BN ₃ O ₂ =509.41)
Sub 1-41	m/z=489.26(C ₃₂ H ₂₄ D ₅ BN ₂ O ₂ =489.43)	Sub 1-42	m/z=413.23(C ₂₆ H ₂₀ D ₅ BN ₂ O ₂ =413.33)
Sub 1-43	m/z=489.26(C ₃₂ H ₂₄ D ₅ BN ₂ O ₂ =489.43)	Sub 1-44	m/z=484.23(C ₃₂ H ₂₉ BN ₂ O ₂ =484.40)
Sub 1-45	m/z=484.23(C ₃₂ H ₂₉ BN ₂ O ₂ =484.40)	Sub 1-46	m/z=584.26(C ₄₀ H ₃₃ BN ₂ O ₂ =584.51)
Sub 1-47	m/z=560.26(C ₃₈ H ₃₃ BN ₂ O ₂ =560.49)	Sub 1-48	m/z=610.28(C ₄₂ H ₃₅ BN ₄ O ₂ =610.55)

[183] **2. Sub 2의 합성**

[184] 상기 반응식 1의 Sub 2는 하기 반응식 7의 반응경로에 의해 합성될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[185] <반응식 7>

[186]



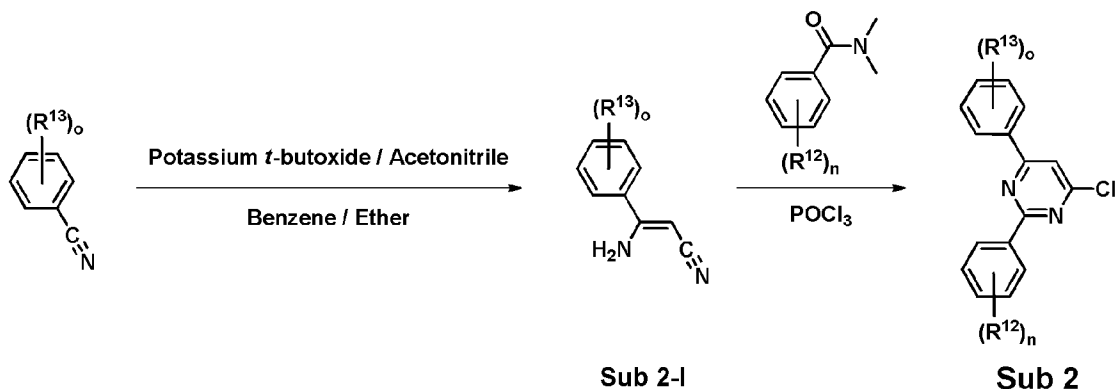
Sub 2-I

Sub 2

[187] 또한, 상기 반응식 1의 Sub 2는 보다 구체적으로 하기 반응식 7a 또는 7b의 반응경로에 의해 합성될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

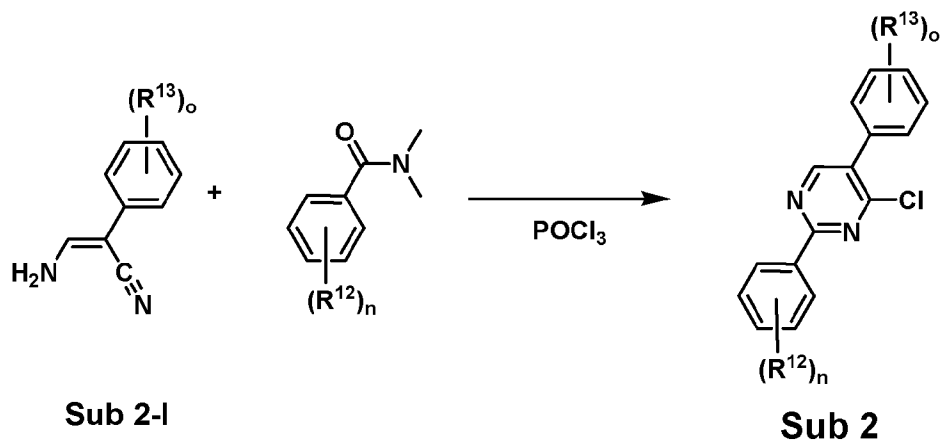
[188] <반응식 7a>

[189]



[190] <반응식 7b>

[191]



Sub 2-I

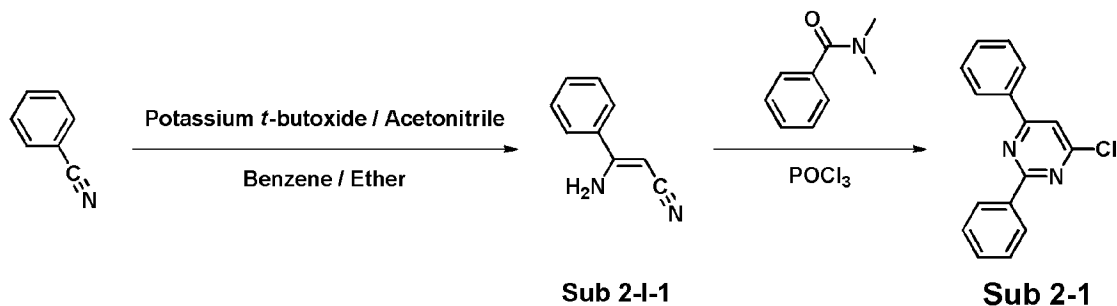
Sub 2

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

[193] **(1) Sub 2-1 합성예**

[194] <반응식 8>

[195]

[196] **Sub 2-I-1 합성**

[197] 출발물질인 benzonitrile (40 g, 0.3879 mol)을 둥근바닥플라스크에 넣고 benzene (1300ml)으로 녹인 후에, potassium *t*-butoxide (152.34 g, 1.3576 mol), acetonitrile (47.77 g, 1.1637 mmol)를 첨가하고 20°C에서 교반하였다. 반응이 완료되면 ether와 2% NaHCO₃를 첨가하였다. 이후 농축한 후 생성된 화합물을 재결정하여 생성물 29.08 g (수율: 52%)을 얻었다.

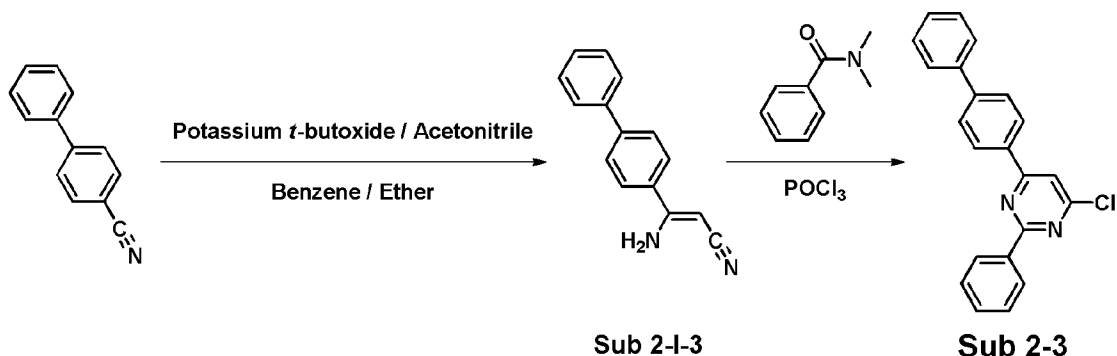
[198] **Sub 2-1 합성**

[199] 상기 합성에서 얻어진 Sub 2-I-1 (29.08 g, 0.2017 mol)을 둥근바닥플라스크에 넣은 후에, N,N-dimethylbenzamide (33.10 g, 0.2219 mol)와 POCl₃ (380ml)을 첨가하고 환류시켰다. 반응이 완료되면 얼음물에 반응물을 넣어준 뒤 ammonium hydroxide (pH=7)를 첨가하였다. Chloroform과 물로 추출한 후 유기층을 MgSO₄로 건조하고 농축한 후 생성된 화합물을 재결정하여 생성물 33.89 g (수율: 63%)을 얻었다.

[200] **(2) Sub 2-3 합성예**

[201] <반응식 9>

[202]

[203] **Sub 2-I-3 합성**

[204] 출발물질인 [1,1'-biphenyl]-4-carbonitrile (20.65 g, 0.1152 mol)에 potassium *t*-butoxide (45.25 g, 0.4033 mmol), acetonitrile (14.19 g, 0.3457 mmol), benzene (380ml)을 상기 Sub 2-I-1 합성법을 사용하여 생성물 11.93 g (수율: 47%)을 얻었다.

[205] **Sub 2-3 합성**

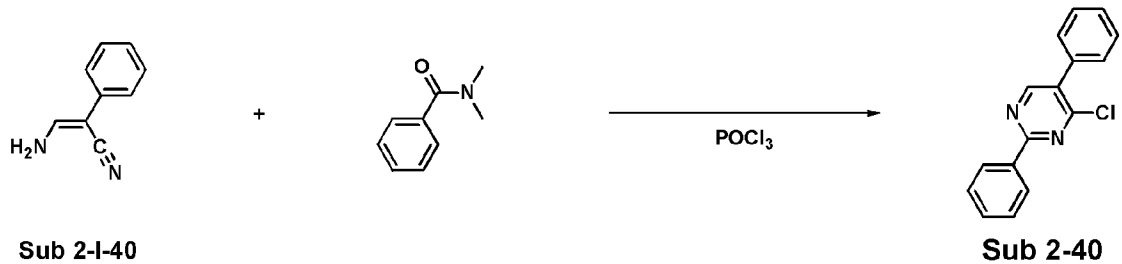
[206] 상기 합성에서 얻어진 Sub 2-I-3 (11.93 g, 0.0542 mol)에 N,N-dimethylbenzamide (8.89 g, 0.0596 mol), POCl₃ (100ml)를 상기 Sub 2-1 합성법을 사용하여 생성물

10.58 g (수율: 57%)을 얻었다.

[207] (3) Sub 2-40 합성예

[208] <반응식 10>

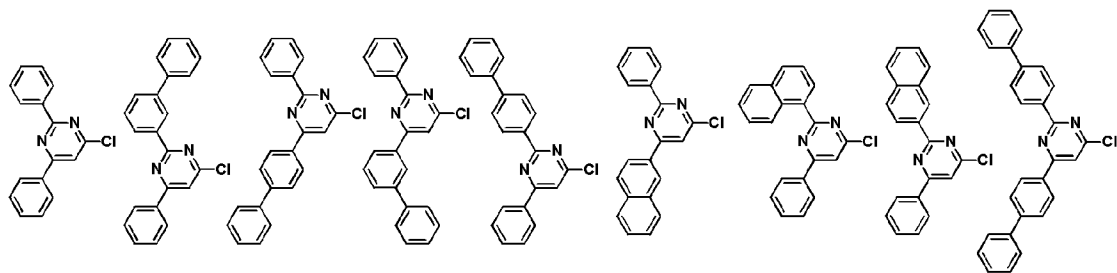
[209]



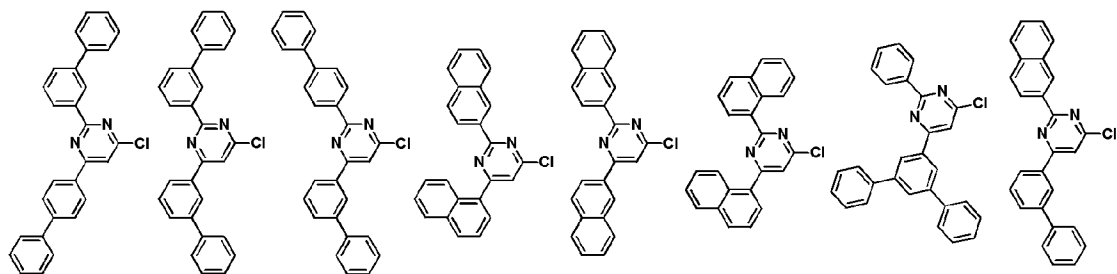
[210] Sub 2-I-40 (BOC Sciences사의 beta-Aminocrotonitrile (CAS : 33201-99-9) 사용) (13.22 g, 0.0917 mol)에 N,N-dimethylbenzamide (15.05 g, 0.1009 mol), POCl₃ (170ml)를 상기 Sub 2-1 합성법을 사용하여 생성물 12.23 g (수율: 50%)을 얻었다.

[211] 한편, Sub 2에 속하는 화합물은 아래와 같은 화합물일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니며, 표 2는 Sub 2에 속하는 화합물의 FD-MS 값을 나타낸 것이다.

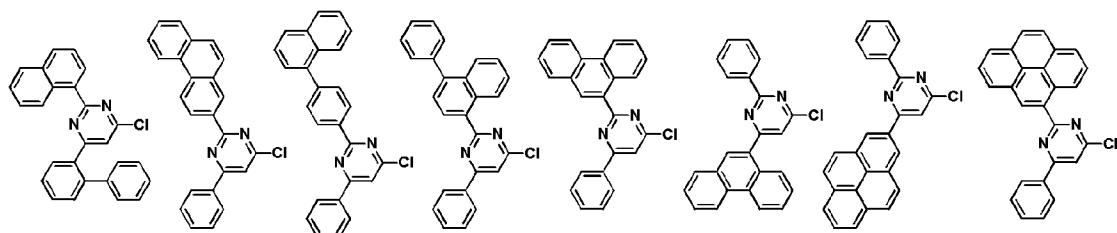
[212]



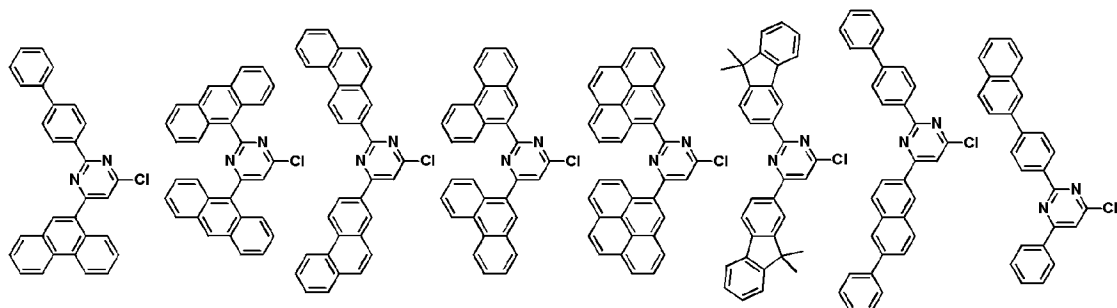
Sub 2-1 Sub 2-2 Sub 2-3 Sub 2-4 Sub 2-5 Sub 2-6 Sub 2-7 Sub 2-8 Sub 2-9



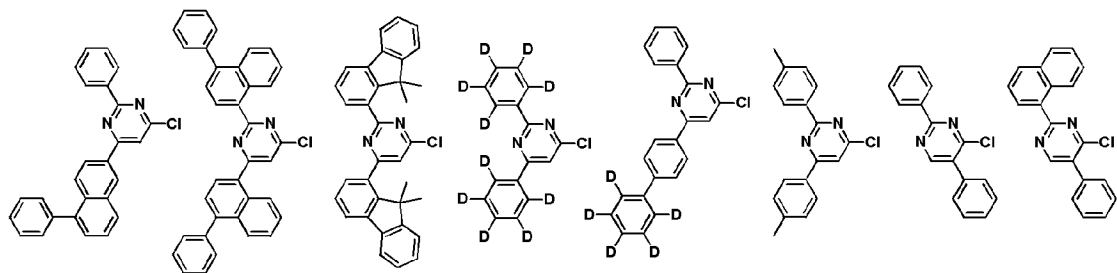
Sub 2-10 Sub 2-11 Sub 2-12 Sub 2-13 Sub 2-14 Sub 2-15 Sub 2-16 Sub 2-17



Sub 2-18 Sub 2-19 Sub 2-20 Sub 2-21 Sub 2-22 Sub 2-23 Sub 2-24 Sub 2-25



Sub 2-26 Sub 2-27 Sub 2-28 Sub 2-29 Sub 2-30 Sub 2-31 Sub 2-32 Sub 2-33



Sub 2-34 Sub 2-35 Sub 2-36 Sub 2-37 Sub 2-38 Sub 2-39 Sub 2-40 Sub 2-41

[213]

[2]

[214]

화합물	FD-MS	화합물	FD-MS
Sub 2-1	m/z=266.06(C ₁₆ H ₁₁ CIN ₂ =266.72)	Sub 2-2	m/z=342.09(C ₂₂ H ₁₅ CIN ₂ =342.82)
Sub 2-3	m/z=342.09(C ₂₂ H ₁₅ CIN ₂ =342.82)	Sub 2-4	m/z=342.09(C ₂₂ H ₁₅ CIN ₂ =342.82)
Sub 2-5	m/z=342.09(C ₂₂ H ₁₅ CIN ₂ =342.82)	Sub 2-6	m/z=316.08(C ₂₀ H ₁₃ CIN ₂ =316.78)
Sub 2-7	m/z=316.08(C ₂₀ H ₁₃ CIN ₂ =316.78)	Sub 2-8	m/z=316.08(C ₂₀ H ₁₃ CIN ₂ =316.78)
Sub 2-9	m/z=418.12(C ₂₈ H ₁₉ CIN ₂ =418.92)	Sub 2-10	m/z=418.12(C ₂₈ H ₁₉ CIN ₂ =418.92)
Sub 2-11	m/z=418.12(C ₂₈ H ₁₉ CIN ₂ =418.92)	Sub 2-12	m/z=418.12(C ₂₈ H ₁₉ CIN ₂ =418.92)
Sub 2-13	m/z=366.09(C ₂₄ H ₁₅ CIN ₂ =366.84)	Sub 2-14	m/z=366.09(C ₂₄ H ₁₅ CIN ₂ =366.84)
Sub 2-15	m/z=366.09(C ₂₄ H ₁₅ CIN ₂ =366.84)	Sub 2-16	m/z=418.12(C ₂₈ H ₁₉ CIN ₂ =418.92)
Sub 2-17	m/z=392.11(C ₂₆ H ₁₇ CIN ₂ =392.88)	Sub 2-18	m/z=392.11(C ₂₆ H ₁₇ CIN ₂ =392.88)
Sub 2-19	m/z=366.09(C ₂₄ H ₁₅ CIN ₂ =366.84)	Sub 2-20	m/z=392.11(C ₂₆ H ₁₇ CIN ₂ =392.88)
Sub 2-21	m/z=392.11(C ₂₆ H ₁₇ CIN ₂ =392.88)	Sub 2-22	m/z=366.09(C ₂₄ H ₁₅ CIN ₂ =366.84)
Sub 2-23	m/z=366.09(C ₂₄ H ₁₅ CIN ₂ =366.84)	Sub 2-24	m/z=390.09(C ₂₆ H ₁₅ CIN ₂ =390.86)
Sub 2-25	m/z=390.09(C ₂₆ H ₁₅ CIN ₂ =390.86)	Sub 2-26	m/z=442.12(C ₃₀ H ₁₈ CIN ₂ =442.94)
Sub 2-27	m/z=466.12(C ₃₂ H ₁₉ CIN ₂ =466.96)	Sub 2-28	m/z=466.12(C ₃₂ H ₁₉ CIN ₂ =466.96)
Sub 2-29	m/z=466.12(C ₃₂ H ₁₉ CIN ₂ =466.96)	Sub 2-30	m/z=514.12(C ₃₆ H ₁₉ CIN ₂ =515.00)
Sub 2-31	m/z=498.19(C ₃₄ H ₂₇ CIN ₂ =499.04)	Sub 2-32	m/z=468.14(C ₃₂ H ₂₁ CIN ₂ =468.98)
Sub 2-33	m/z=392.11(C ₂₆ H ₁₇ CIN ₂ =392.88)	Sub 2-34	m/z=392.11(C ₂₆ H ₁₇ CIN ₂ =392.88)
Sub 2-35	m/z=518.15(C ₃₆ H ₂₃ CIN ₂ =519.03)	Sub 2-36	m/z=498.19(C ₃₄ H ₂₇ CIN ₂ =499.04)
Sub 2-37	m/z=276.12(C ₁₆ H ₁₀ CIN ₂ =276.79)	Sub 2-38	m/z=347.12(C ₂₂ H ₁₀ D ₅ CIN ₂ =347.85)
Sub 2-39	m/z=294.09(C ₁₈ H ₁₅ CIN ₂ =294.78)	Sub 2-40	m/z=266.06(C ₁₆ H ₁₁ CIN ₂ =266.72)
Sub 2-41	m/z=316.08(C ₂₀ H ₁₃ CIN ₂ =316.78)		

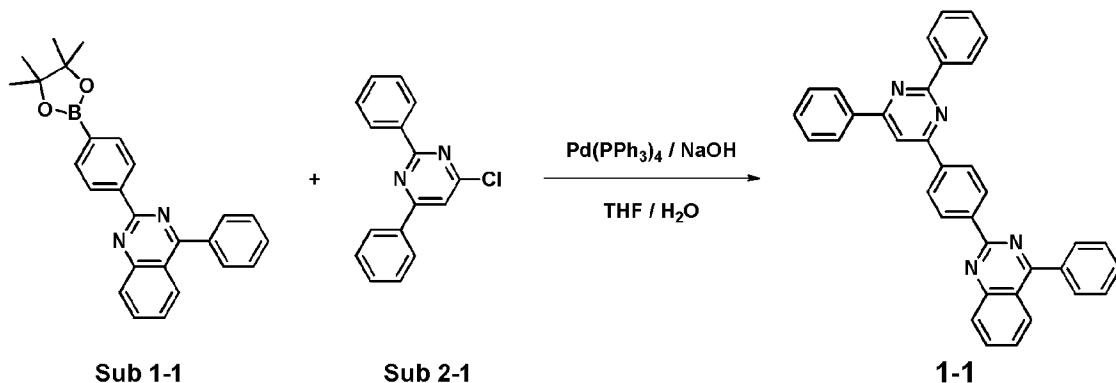
[215] 3. 최종 생성물(Final Product) 합성

[216] Sub 1 (1 당량)을 둥근바닥플라스크에 넣고 THF로 녹인 후에, Sub 2 (1 당량), Pd(PPh₃)₄ (0.04 당량), NaOH (3 당량), 물을 첨가하고 80°C에서 교반하였다. 반응이 완료되면 CH₂Cl₂와 물로 추출한 후 유기층을 MgSO₄로 건조하고 농축한 후 생성된 화합물을 silicagel column 및 재결정하여 최종 생성물(final product)를 얻었다.

[217] (1) Product 1-1 합성예

[218] <반응식 11>

[219]

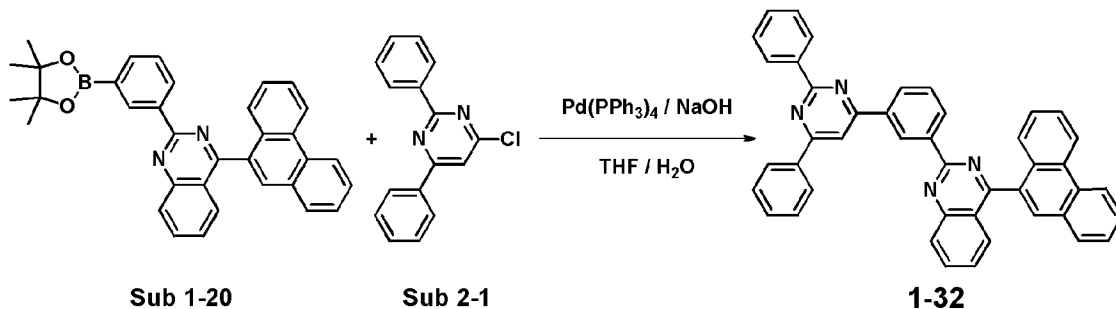


[220] 상기 합성에서 얻어진 Sub 1-1 (10 g, 0.0245 mol)를 둥근바닥플라스크에 넣고 THF (120ml)로 녹인 후에, Sub 2-1 (6.53 g, 0.0245 mmol), Pd(PPh₃)₄ (1.13 g, 0.001 mol), NaOH (2.94 g, 0.0735 mol), H₂O (60ml)을 첨가하고 80°C에서 교반하였다. 반응이 완료되면 CH₂Cl₂와 물로 추출한 후 유기층을 MgSO₄로 건조하고 농축한 후 생성된 화합물을 silicagel column 및 재결정하여 생성물 8.79 g (수율: 70%)을 얻었다.

[221] **(2) Product 1-32 합성예**

[222] <반응식 12>

[223]

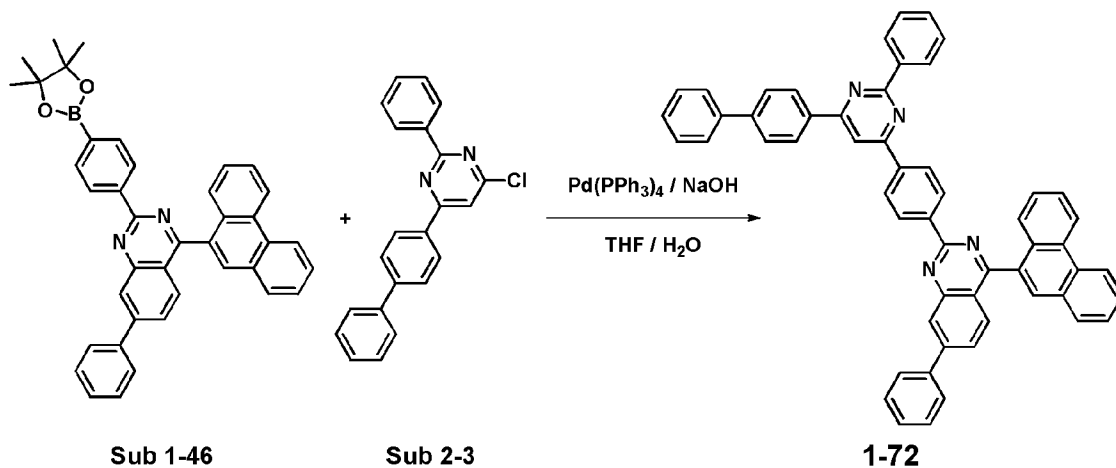


[224] 상기 합성에서 얻어진 Sub 1-20 (13 g, 0.0256 mol)에 Sub 2-1 (6.82 g, 0.0256 mmol), Pd(PPh₃)₄ (1.18 g, 0.001 mol), NaOH (3.07 g, 0.0767 mol), THF (120ml), H₂O (60ml)을 상기 Product 1-1 합성법을 사용하여 생성물 10.18 g (수율: 65%)을 얻었다.

[225] **(3) Product 1-72 합성예**

[226] <반응식 13>

[227]

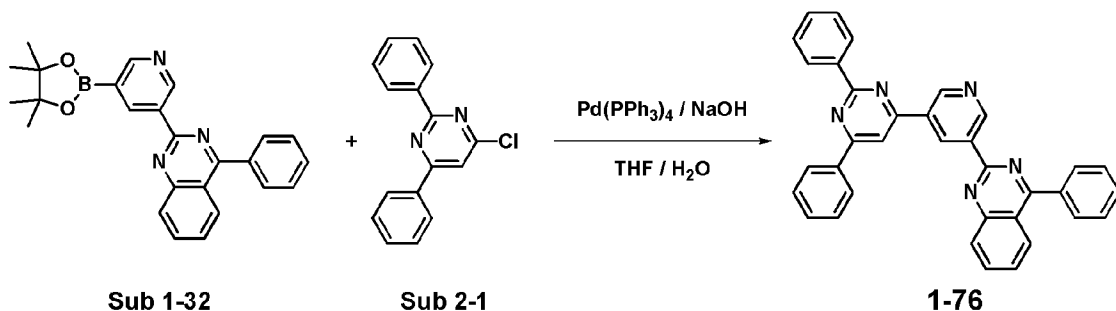


[228] 상기 합성에서 얻어진 Sub 1-46 (8 g, 0.0137 mol)에 Sub 2-3 (4.69 g, 0.0137 mmol), Pd(PPh₃)₄ (0.63 g, 0.0005 mol), NaOH (1.64 g, 0.0411 mol), THF (80ml), H₂O (40ml)을 상기 Product 1-1 합성법을 사용하여 생성물 6.7 g (수율: 64%)을 얻었다.

[229] **(4) Product 1-76 합성예**

[230] <반응식 14>

[231]

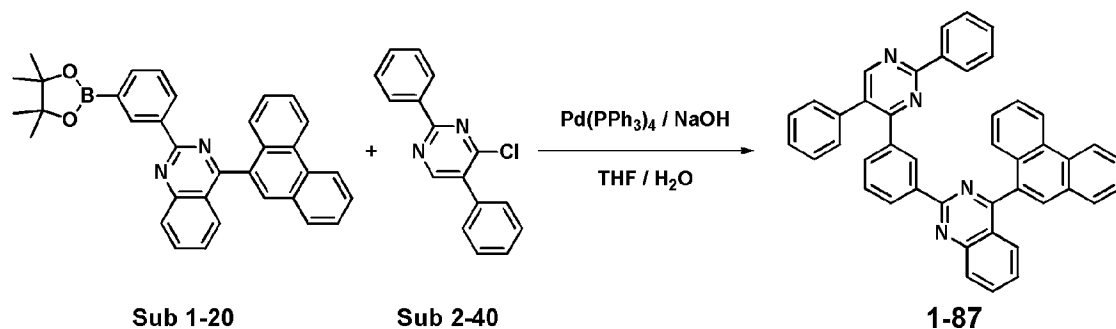


[232] 상기 합성에서 얻어진 Sub 1-32 (10.03 g, 0.0245 mol)에 Sub 2-1 (6.54 g, 0.0245 mmol), Pd(PPh₃)₄ (1.13 g, 0.001 mol), NaOH (2.94 g, 0.0735 mol), THF (120ml), H₂O (60ml)을 상기 Product 1-1 합성법을 사용하여 생성물 8.94 g (수율: 71%)을 얻었다.

[233] (5) Product 1-87 합성예

[234] <반응식 15>

[235]



[236] 상기 합성에서 얻어진 Sub 1-20 (12.23 g, 0.0241 mol)에 Sub 2-40 (6.42 g, 0.0241 mmol), Pd(PPh₃)₄ (1.11 g, 0.001 mol), NaOH (2.89 g, 0.0722 mol), THF (120ml), H₂O (60ml)을 상기 Product 1-1 합성법을 사용하여 생성물 8.55 g (수율: 58%)을 얻었다.

[237] 한편, 상기와 같은 합성예에 따라 제조된 본 발명의 화합물 1-1 내지 1-88의 FD-MS 값은 하기 표 3과 같다.

[238] [표 3]

[239]

화합물	FD-MS	화합물	FD-MS
1-1	m/z=512.20(C ₃₆ H ₂₄ N ₄ =512.60)	1-2	m/z=664.26(C ₄₈ H ₃₂ N ₄ =664.79)
1-3	m/z=664.26(C ₄₈ H ₃₂ N ₄ =664.79)	1-4	m/z=612.23(C ₄₄ H ₂₈ N ₄ =612.72)
1-5	m/z=612.23(C ₄₄ H ₂₈ N ₄ =612.72)	1-6	m/z=712.26(C ₅₂ H ₃₂ N ₄ =712.84)
1-7	m/z=712.26(C ₅₂ H ₃₂ N ₄ =712.84)	1-8	m/z=712.26(C ₅₂ H ₃₂ N ₄ =712.84)
1-9	m/z=744.33(C ₅₄ H ₄₀ N ₄ =744.92)	1-10	m/z=760.26(C ₅₆ H ₃₂ N ₄ =760.88)
1-11	m/z=588.23(C ₄₂ H ₂₈ N ₄ =588.70)	1-12	m/z=562.22(C ₄₀ H ₂₆ N ₄ =562.66)
1-13	m/z=612.23(C ₄₄ H ₂₈ N ₄ =612.72)	1-14	m/z=636.23(C ₄₆ H ₂₈ N ₄ =636.74)
1-15	m/z=588.23(C ₄₂ H ₂₈ N ₄ =588.70)	1-16	m/z=562.22(C ₄₀ H ₂₆ N ₄ =562.66)
1-17	m/z=612.23(C ₄₄ H ₂₈ N ₄ =612.72)	1-18	m/z=636.23(C ₄₆ H ₂₈ N ₄ =636.74)
1-19	m/z=688.26(C ₅₀ H ₃₂ N ₄ =688.82)	1-20	m/z=638.25(C ₄₆ H ₃₀ N ₄ =638.76)
1-21	m/z=638.25(C ₄₆ H ₃₀ N ₄ =638.76)	1-22	m/z=638.25(C ₄₆ H ₃₀ N ₄ =638.76)
1-23	m/z=764.29(C ₅₆ H ₃₆ N ₄ =764.91)	1-24	m/z=638.25(C ₄₆ H ₃₀ N ₄ =638.76)
1-25	m/z=714.28(C ₅₂ H ₃₄ N ₄ =714.85)	1-26	m/z=638.25(C ₄₆ H ₃₀ N ₄ =638.76)
1-27	m/z=522.26(C ₃₆ H ₁₄ D ₁₀ N ₄ =522.66)	1-28	m/z=593.26(C ₄₂ H ₂₃ D ₅ N ₄ =593.73)
1-29	m/z=512.20(C ₃₆ H ₂₄ N ₄ =512.60)	1-30	m/z=554.25(C ₃₉ H ₃₀ N ₄ =554.68)
1-31	m/z=664.26(C ₄₈ H ₃₂ N ₄ =664.79)	1-32	m/z=612.23(C ₄₄ H ₂₈ N ₄ =612.72)
1-33	m/z=740.29(C ₅₄ H ₃₆ N ₄ =740.89)	1-34	m/z=740.29(C ₅₄ H ₃₆ N ₄ =740.89)
1-35	m/z=744.33(C ₅₄ H ₄₀ N ₄ =744.92)	1-36	m/z=662.25(C ₄₈ H ₃₀ N ₄ =662.78)
1-37	m/z=576.23(C ₄₁ H ₂₈ N ₄ =576.69)	1-38	m/z=588.23(C ₄₂ H ₂₈ N ₄ =588.70)
1-39	m/z=740.29(C ₅₄ H ₃₆ N ₄ =740.89)	1-40	m/z=714.28(C ₅₂ H ₃₄ N ₄ =714.85)
1-41	m/z=662.25(C ₄₈ H ₃₀ N ₄ =662.78)	1-42	m/z=764.29(C ₅₆ H ₃₆ N ₄ =764.91)
1-43	m/z=688.26(C ₅₀ H ₃₂ N ₄ =688.82)	1-44	m/z=662.25(C ₄₈ H ₃₀ N ₄ =662.78)
1-45	m/z=588.23(C ₄₂ H ₂₈ N ₄ =588.70)	1-46	m/z=588.23(C ₄₂ H ₂₈ N ₄ =588.70)
1-47	m/z=562.22(C ₄₀ H ₂₆ N ₄ =562.66)	1-48	m/z=562.22(C ₄₀ H ₂₆ N ₄ =562.66)
1-49	m/z=612.23(C ₄₄ H ₂₈ N ₄ =612.72)	1-50	m/z=612.23(C ₄₄ H ₂₈ N ₄ =612.72)
1-51	m/z=612.23(C ₄₄ H ₂₈ N ₄ =612.72)	1-52	m/z=636.23(C ₄₆ H ₂₈ N ₄ =636.74)
1-53	m/z=612.23(C ₄₄ H ₂₈ N ₄ =612.72)	1-54	m/z=636.23(C ₄₆ H ₂₈ N ₄ =636.74)
1-55	m/z=628.26(C ₄₅ H ₃₂ N ₄ =628.76)	1-56	m/z=740.29(C ₅₄ H ₃₆ N ₄ =740.89)
1-57	m/z=740.29(C ₅₄ H ₃₆ N ₄ =740.89)	1-58	m/z=688.26(C ₅₀ H ₃₂ N ₄ =688.82)
1-59	m/z=688.26(C ₅₀ H ₃₂ N ₄ =688.82)	1-60	m/z=664.26(C ₄₈ H ₃₂ N ₄ =664.79)
1-61	m/z=664.26(C ₄₈ H ₃₂ N ₄ =664.79)	1-62	m/z=664.26(C ₄₈ H ₃₂ N ₄ =664.79)
1-63	m/z=740.29(C ₅₄ H ₃₆ N ₄ =740.89)	1-64	m/z=816.33(C ₆₀ H ₄₀ N ₄ =816.99)
1-65	m/z=517.23(C ₃₆ H ₁₉ D ₅ N ₄ =517.63)	1-66	m/z=593.26(C ₄₂ H ₂₃ D ₅ N ₄ =593.73)

[240]

1-67	m/z=593.26(C ₄₂ H ₂₃ D ₅ N ₄ =593.73)	1-68	m/z=527.29(C ₃₆ H ₉ D ₁₅ N ₄ =527.69)
1-69	m/z=714.28(C ₅₂ H ₃₄ N ₄ =714.85)	1-70	m/z=688.26(C ₅₀ H ₃₂ N ₄ =688.82)
1-71	m/z=714.28(C ₅₂ H ₃₄ N ₄ =714.85)	1-72	m/z=764.29(C ₅₆ H ₃₆ N ₄ =764.91)
1-73	m/z=712.26(C ₅₂ H ₃₂ N ₄ =712.84)	1-74	m/z=712.26(C ₅₂ H ₃₂ N ₄ =712.84)
1-75	m/z=613.23(C ₄₃ H ₂₇ N ₅ =613.71)	1-76	m/z=513.20(C ₃₅ H ₂₃ N ₅ =513.59)
1-77	m/z=513.20(C ₃₅ H ₂₃ N ₅ =513.59)	1-78	m/z=613.23(C ₄₃ H ₂₇ N ₅ =613.71)
1-79	m/z=689.26(C ₄₉ H ₃₁ N ₅ =689.80)	1-80	m/z=665.26(C ₄₇ H ₃₁ N ₅ =665.78)
1-81	m/z=846.28(C ₆₀ H ₃₈ N ₄ S=847.04)	1-82	m/z=668.20(C ₄₆ H ₂₈ N ₄ S=668.81)
1-83	m/z=614.22(C ₄₂ H ₂₆ N ₆ =614.70)	1-84	m/z=613.23(C ₄₃ H ₂₇ N ₅ =613.71)
1-85	m/z=567.25(C ₄₀ H ₂₁ D ₅ N ₄ =567.69)	1-86	m/z=638.25(C ₄₆ H ₃₀ N ₄ =638.76)
1-87	m/z=612.23(C ₄₄ H ₂₈ N ₄ =612.72)	1-88	m/z=668.20(C ₄₆ H ₂₈ N ₄ S=668.81)

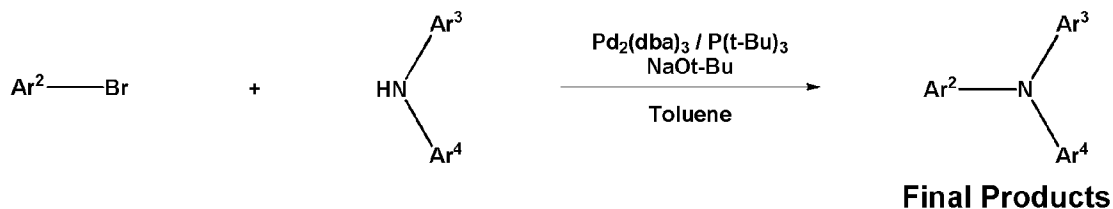
[241]

[242] **II. 화학식 2의 합성**

[243] 본 발명에 따른 화학식 2로 표시되는 화합물(final products)은 하기 반응식 16과 같이 합성된다.

[244] <반응식 16>

[245]

[246] (Ar² 내지 Ar⁴는 상기 화학식 2에서 정의된 것과 동일하다.)[247] **1. 화학식 2의 중간체 합성**

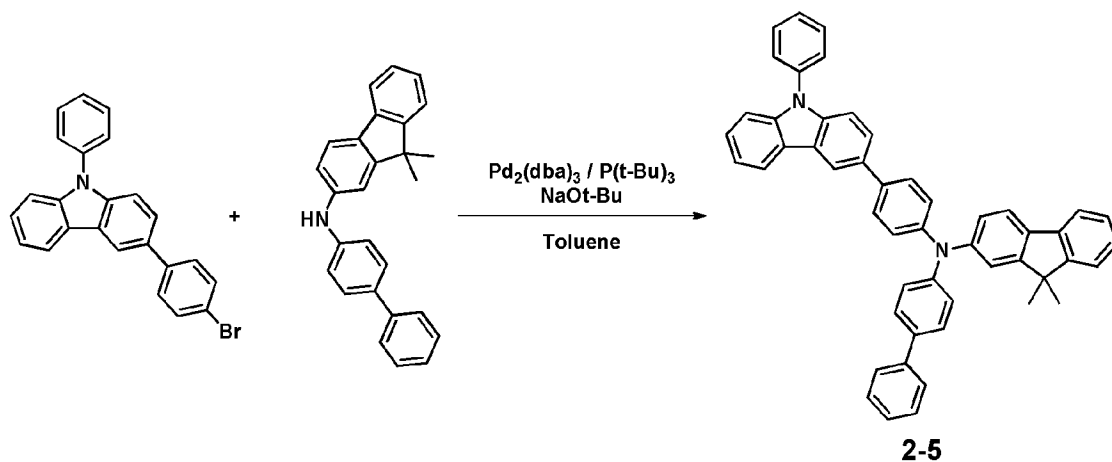
[248] 본 출원인의 한국등록특허 제10-1251451호(2013.04.05일자 등록공고)와 제10-1298483호(2013.08.21일자 등록공고)에 개시된 합성 방법을 사용하였다.

[249]

[250] **2. Product 합성**[251] HNAr³Ar⁴ (1 당량)을 둥근바닥플라스크에 toluene으로 녹인 후에, Ar²-Br (1.2 당량), Pd₂(dba)₃ (0.03 당량), P(*t*-Bu)₃ (0.08 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 최종 생성물(final product)를 얻었다.[252] **(1) Product 2-5 합성예**

[253] <반응식 17>

[254]

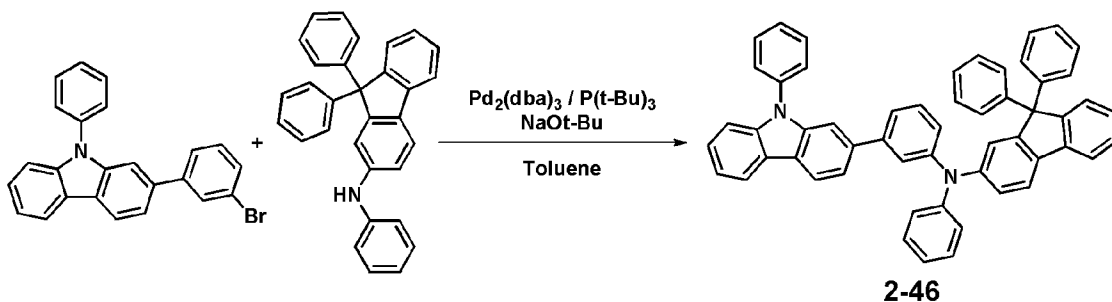


[255] *N*-([1,1'-biphenyl]-4-yl)-9,9-dimethyl-9*H*-fluoren-2-amine (16.32 g, 45.1 mmol)을 둥근바닥플라스크에 넣고 toluene (500ml)으로 녹인 후에, 3-(4-bromophenyl)-9-phenyl-9*H*-carbazole (21.58 g, 54.2 mmol), Pd₂(dba)₃ (1.24 g, 1.4 mmol), 50% P(*t*-Bu)₃ (1.8ml, 3.6 mmol), NaOt-Bu (13.02 g, 135.4 mmol)을 첨가하고 100°C에서 교반하였다. 반응이 완료되면 CH₂Cl₂와 물로 추출한 후 유기층을 MgSO₄로 건조하고 농축한 후 생성된 화합물을 silicagel column 및 재결정하여 생성물 26.36 g (수율: 86%)를 얻었다.

[256] **(2) Product 2-46 합성 예**

[257] <반응식 18>

[258]

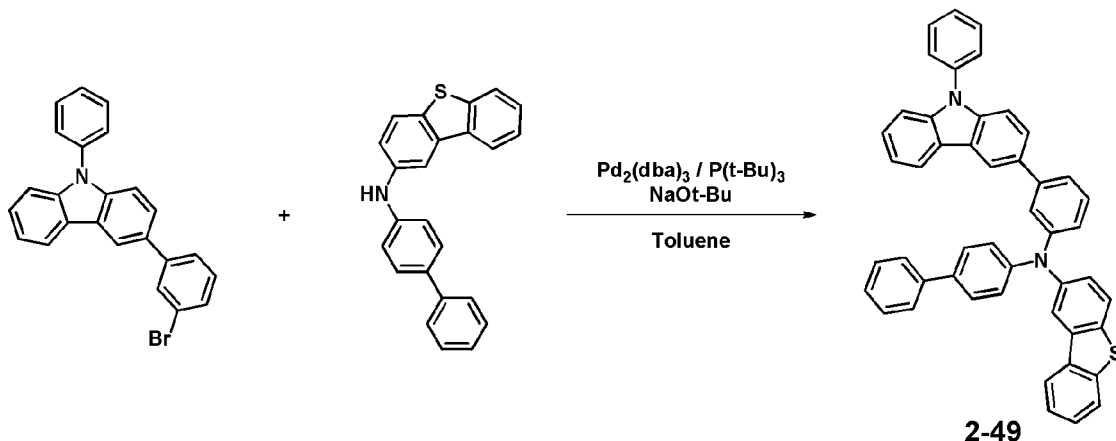


[259] *N*,9,9-triphenyl-9*H*-fluoren-2-amine (17.93 g, 43.8 mmol)에 2-(3-bromophenyl)-9-phenyl-9*H*-carbazole (20.93 g, 52.5 mmol), Pd₂(dba)₃ (1.2 g, 1.3 mmol), 50% P(*t*-Bu)₃ (1.7ml, 3.5 mmol), NaOt-Bu (12.62 g, 131.3 mmol), toluene (480ml)을 상기 Product 2-5 합성법을 사용하여 생성물 23.87 g (수율: 75%)를 얻었다.

[260] **(3) Product 2-49 합성 예**

[261] <반응식 19>

[262]

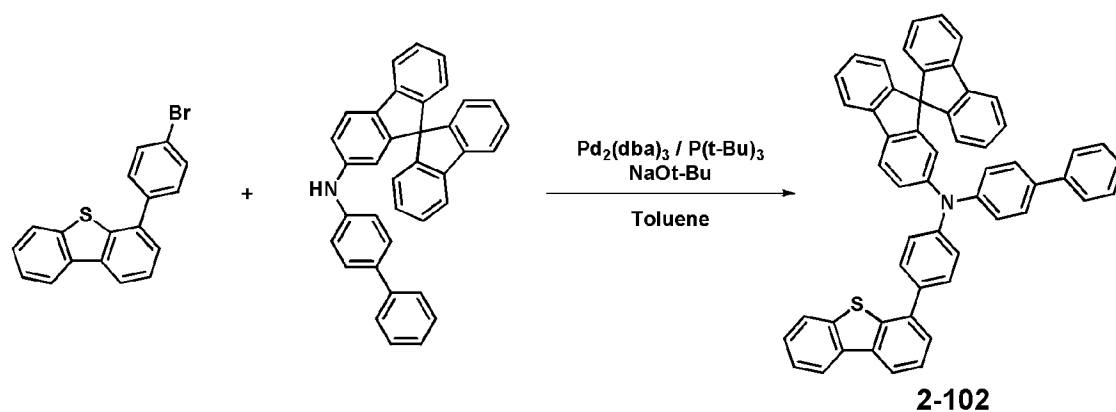


[263] *N*-([1,1'-biphenyl]-4-yl)dibenzo[*b,d*]thiophen-2-amine (17.07 g, 48.6 mmol)에 3-(3-bromophenyl)-9-phenyl-9*H*-carbazole (23.21 g, 58.3 mmol), Pd₂(dba)₃ (1.33 g, 1.5 mmol), 50% P(*t*-Bu)₃ (1.9ml, 3.9 mmol), NaOt-Bu (14 g, 145.7 mmol), toluene (530ml)을 상기 Product 2-5 합성법을 사용하여 생성물 26.31 g (수율: 81%)를 얻었다.

[264] **(4) Product 2-102 합성예**

[265] <반응식 20>

[266]

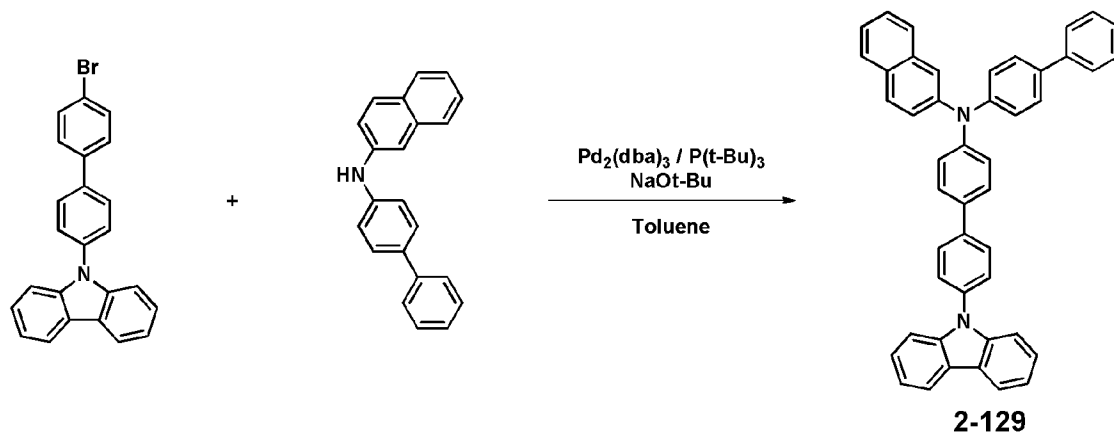


[267] *N*-([1,1'-biphenyl]-4-yl)-9,9'-spirobi[fluoren]-2-amine (21.65 g, 44.8 mmol)에 4-(4-bromophenyl)dibenzo[*b,d*]thiophene (18.23 g, 53.7 mmol), Pd₂(dba)₃ (1.23 g, 1.3 mmol), 50% P(*t*-Bu)₃ (1.7ml, 3.6 mmol), NaOt-Bu (12.91 g, 134.3 mmol), toluene (490ml)을 상기 Product 2-5 합성법을 사용하여 생성물 25.58 g (수율: 77%)를 얻었다.

[268] **(5) Product 2-129 합성예**

[269] <반응식 21>

[270]

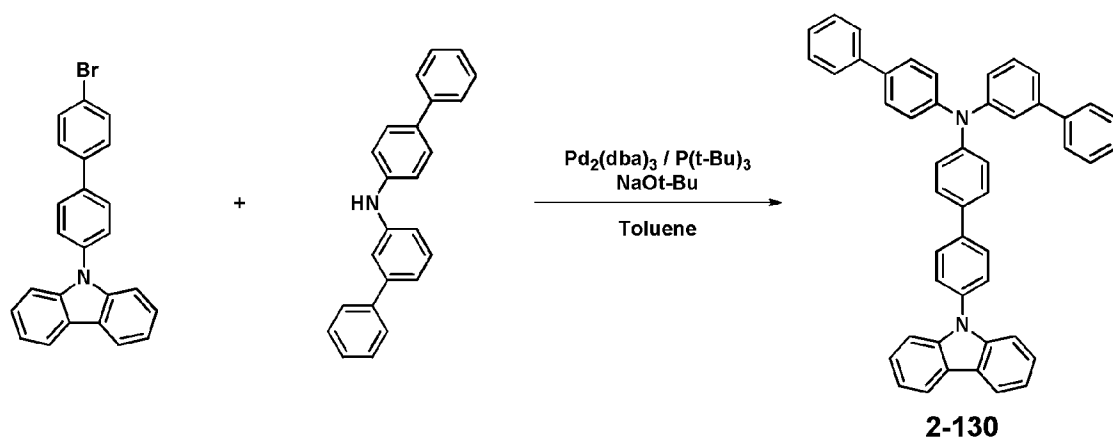


[271] *N*-([1,1'-biphenyl]-4-yl)naphthalen-2-amine (14.32 g, 48.5 mmol)에 9-(4'-bromo-[1,1'-biphenyl]-4-yl)-9*H*-carbazole (23.17 g, 58.2 mmol), Pd₂(dba)₃ (1.33 g, 1.5 mmol), 50% P(*t*-Bu)₃ (1.9ml, 3.9 mmol), NaOt-Bu (13.98 g, 145.4 mmol), toluene (530ml)을 상기 Product 2-5 합성법을 사용하여 생성물 24.66 g (수율: 83%)를 얻었다.

[272] **(6) Product 2-130 합성 예**

[273] <반응식 22>

[274]



[275] *N*-([1,1'-biphenyl]-4-yl)-[1,1'-biphenyl]-3-amine (16.83 g, 52.4 mmol)에 9-(4'-bromo-[1,1'-biphenyl]-4-yl)-9*H*-carbazole (25.03 g, 62.8 mmol), Pd₂(dba)₃ (1.44 g, 1.6 mmol), 50% P(*t*-Bu)₃ (2ml, 4.2 mmol), NaOt-Bu (15.1 g, 157.1 mmol), toluene (580ml)을 상기 Product 2-5 합성법을 사용하여 생성물 26.76 g (수율: 80%)를 얻었다.

[276] 한편, 상기와 같은 합성예에 따라 제조된 본 발명의 화합물 2-1 내지 2-156의 FD-MS 값은 하기 표 4와 같다.

[277] [표 4]

[278]

화합물	FD-MS	화합물	FD-MS
2-1	m/z=638.27(C ₄₈ H ₃₄ N ₂ =638.80)	2-2	m/z=648.33(C ₄₈ H ₂₄ D ₁₀ N ₂ =648.86)
2-3	m/z=638.27(C ₄₈ H ₃₄ N ₂ =638.80)	2-4	m/z=688.29(C ₅₂ H ₃₆ N ₂ =688.86)
2-5	m/z=678.30(C ₅₁ H ₃₈ N ₂ =678.86)	2-6	m/z=728.32(C ₅₅ H ₄₀ N ₂ =728.92)
2-7	m/z=678.30(C ₅₁ H ₃₈ N ₂ =678.86)	2-8	m/z=728.32(C ₅₅ H ₄₀ N ₂ =728.92)
2-9	m/z=728.32(C ₅₅ H ₄₀ N ₂ =728.92)	2-10	m/z=678.30(C ₅₁ H ₃₈ N ₂ =678.86)
2-11	m/z=678.30(C ₅₁ H ₃₈ N ₂ =678.86)	2-12	m/z=708.26(C ₅₁ H ₃₆ N ₂ S=708.91)
2-13	m/z=726.30(C ₅₅ H ₃₈ N ₂ =726.90)	2-14	m/z=740.32(C ₅₆ H ₄₀ N ₂ =740.93)
2-15	m/z=802.33(C ₆₁ H ₄₂ N ₂ =803.00)	2-16	m/z=878.37(C ₆₇ H ₄₆ N ₂ =879.10)
2-17	m/z=826.33(C ₆₃ H ₄₂ N ₂ =827.02)	2-18	m/z=852.35(C ₆₅ H ₄₄ N ₂ =853.06)
2-19	m/z=878.37(C ₆₇ H ₄₆ N ₂ =879.10)	2-20	m/z=802.33(C ₆₁ H ₄₂ N ₂ =803.00)
2-21	m/z=878.37(C ₆₇ H ₄₆ N ₂ =879.10)	2-22	m/z=878.37(C ₆₇ H ₄₆ N ₂ =879.10)
2-23	m/z=774.30(C ₅₉ H ₃₈ N ₂ =774.95)	2-24	m/z=876.35(C ₆₇ H ₄₄ N ₂ =877.08)
2-25	m/z=900.35(C ₆₉ H ₄₄ N ₂ =901.10)	2-26	m/z=906.31(C ₆₇ H ₄₂ N ₂ S=907.13)
2-27	m/z=652.25(C ₄₈ H ₃₂ N ₂ O=652.78)	2-28	m/z=802.33(C ₆₁ H ₄₂ N ₂ =803.00)
2-29	m/z=652.29(C ₄₉ H ₃₆ N ₂ =652.82)	2-30	m/z=712.29(C ₅₄ H ₃₆ N ₂ =712.88)
2-31	m/z=902.37(C ₆₉ H ₄₆ N ₂ =903.12)	2-32	m/z=738.30(C ₅₆ H ₃₈ N ₂ =738.91)
2-33	m/z=638.27(C ₄₈ H ₃₄ N ₂ =638.80)	2-34	m/z=638.27(C ₄₈ H ₃₄ N ₂ =638.80)
2-35	m/z=678.30(C ₅₁ H ₃₈ N ₂ =678.86)	2-36	m/z=728.32(C ₅₅ H ₄₀ N ₂ =728.92)
2-37	m/z=802.33(C ₆₁ H ₄₂ N ₂ =803.00)	2-38	m/z=776.32(C ₅₉ H ₄₀ N ₂ =776.96)
2-39	m/z=878.37(C ₆₇ H ₄₆ N ₂ =879.10)	2-40	m/z=878.37(C ₆₇ H ₄₆ N ₂ =879.10)
2-41	m/z=878.37(C ₆₇ H ₄₆ N ₂ =879.10)	2-42	m/z=852.35(C ₆₅ H ₄₄ N ₂ =853.06)
2-43	m/z=852.35(C ₆₅ H ₄₄ N ₂ =853.06)	2-44	m/z=800.32(C ₆₁ H ₄₀ N ₂ =800.98)
2-45	m/z=878.37(C ₆₇ H ₄₆ N ₂ =879.10)	2-46	m/z=726.30(C ₅₅ H ₃₈ N ₂ =726.90)
2-47	m/z=852.35(C ₆₅ H ₄₄ N ₂ =853.06)	2-48	m/z=878.37(C ₆₇ H ₄₆ N ₂ =879.10)
2-49	m/z=668.23(C ₄₈ H ₃₂ N ₂ S=668.85)	2-50	m/z=652.25(C ₄₈ H ₃₂ N ₂ O=652.78)
2-51	m/z=718.24(C ₅₂ H ₃₄ N ₂ S=718.90)	2-52	m/z=804.31(C ₆₀ H ₄₀ N ₂ O=804.97)
2-53	m/z=832.29(C ₆₁ H ₄₀ N ₂ S=833.05)	2-54	m/z=832.29(C ₆₁ H ₄₀ N ₂ S=833.05)

[279]

2-55	m/z=802.33(C ₆₁ H ₄₂ N ₂ =803.00)	2-56	m/z=878.37(C ₆₇ H ₄₆ N ₂ =879.10)
2-57	m/z=688.29(C ₅₂ H ₃₆ N ₂ =688.86)	2-58	m/z=776.32(C ₅₉ H ₄₀ N ₂ =776.96)
2-59	m/z=906.40(C ₆₉ H ₅₀ N ₂ =907.15)	2-60	m/z=878.37(C ₆₇ H ₄₆ N ₂ =879.10)
2-61	m/z=668.23(C ₄₈ H ₃₂ N ₂ S=668.85)	2-62	m/z=714.30(C ₅₄ H ₃₈ N ₂ =714.89)
2-63	m/z=754.33(C ₅₇ H ₄₂ N ₂ =754.96)	2-64	m/z=878.37(C ₆₇ H ₄₆ N ₂ =879.10)
2-65	m/z=928.38(C ₇₁ H ₄₈ N ₂ =929.15)	2-66	m/z=878.37(C ₆₇ H ₄₆ N ₂ =879.10)
2-67	m/z=876.35(C ₆₇ H ₄₄ N ₂ =877.08)	2-68	m/z=728.32(C ₅₅ H ₄₀ N ₂ =728.92)
2-69	m/z=878.37(C ₆₇ H ₄₆ N ₂ =879.10)	2-70	m/z=878.37(C ₆₇ H ₄₆ N ₂ =879.10)
2-71	m/z=830.37(C ₆₃ H ₄₆ N ₂ =831.05)	2-72	m/z=802.33(C ₆₁ H ₄₂ N ₂ =803.00)
2-73	m/z=802.33(C ₆₁ H ₄₂ N ₂ =803.00)	2-74	m/z=878.37(C ₆₇ H ₄₆ N ₂ =879.10)
2-75	m/z=668.23(C ₄₈ H ₃₂ N ₂ S=668.85)	2-76	m/z=878.37(C ₆₇ H ₄₆ N ₂ =879.10)
2-77	m/z=802.33(C ₆₁ H ₄₂ N ₂ =803.00)	2-78	m/z=876.35(C ₆₇ H ₄₄ N ₂ =877.08)
2-79	m/z=754.33(C ₅₇ H ₄₂ N ₂ =754.96)	2-80	m/z=678.30(C ₅₁ H ₃₈ N ₂ =678.86)
2-81	m/z=878.37(C ₆₇ H ₄₆ N ₂ =879.10)	2-82	m/z=778.33(C ₅₉ H ₄₂ N ₂ =778.98)
2-83	m/z=754.33(C ₅₇ H ₄₂ N ₂ =754.96)	2-84	m/z=878.37(C ₆₇ H ₄₆ N ₂ =879.10)
2-85	m/z=777.31(C ₅₈ H ₃₉ N ₃ =777.95)	2-86	m/z=804.31(C ₆₀ H ₄₀ N ₂ O=804.97)
2-87	m/z=727.30(C ₅₄ H ₃₇ N ₃ =727.89)	2-88	m/z=820.29(C ₆₀ H ₄₀ N ₂ S=821.04)
2-89	m/z=803.33(C ₆₀ H ₄₁ N ₃ =803.99)	2-90	m/z=803.33(C ₆₀ H ₄₁ N ₃ =803.99)
2-91	m/z=968.39(C ₇₂ H ₄₈ N ₄ =969.18)	2-92	m/z=727.30(C ₅₄ H ₃₇ N ₃ =727.89)
2-93	m/z=579.20(C ₄₂ H ₂₉ NS=579.75)	2-94	m/z=629.22(C ₄₆ H ₃₁ NS=629.81)
2-95	m/z=655.23(C ₄₈ H ₃₃ NS=655.85)	2-96	m/z=731.26(C ₅₄ H ₃₇ NS=731.94)
2-97	m/z=903.30(C ₆₈ H ₄₁ NS=904.12)	2-98	m/z=817.28(C ₆₁ H ₃₉ NS=818.03)
2-99	m/z=695.26(C ₅₁ H ₃₇ NS=695.91)	2-100	m/z=655.23(C ₄₈ H ₃₃ NS=655.85)
2-101	m/z=660.26(C ₄₈ H ₂₈ D ₅ NS=660.88)	2-102	m/z=741.25(C ₅₅ H ₃₅ NS=741.94)
2-103	m/z=791.26(C ₅₉ H ₃₇ NS=792.00)	2-104	m/z=563.22(C ₄₂ H ₂₉ NO=563.69)
2-105	m/z=644.29(C ₄₈ H ₂₈ D ₅ NO=644.81)	2-106	m/z=725.27(C ₅₅ H ₃₅ NO=725.87)
2-107	m/z=608.29(C ₄₅ H ₂₈ D ₅ NO=608.78)	2-108	m/z=669.21(C ₄₈ H ₃₁ NOS=669.83)
2-109	m/z=613.24(C ₄₆ H ₃₁ NO=613.74)	2-110	m/z=741.25(C ₅₅ H ₃₅ NS=741.94)
2-111	m/z=741.25(C ₅₅ H ₃₅ NS=741.94)	2-112	m/z=665.22(C ₄₉ H ₃₁ NS=665.84)

[280]

2-113	m/z=695.17(C ₄₉ H ₂₉ NS ₂ =695.89)	2-114	m/z=735.29(C ₅₇ H ₃₇ N=735.91)
2-115	m/z=735.29(C ₅₇ H ₃₇ N=735.91)	2-116	m/z=797.31(C ₆₂ H ₃₉ N=797.98)
2-117	m/z=669.21(C ₄₈ H ₃₁ NOS=669.83)	2-118	m/z=669.21(C ₄₈ H ₃₁ NOS=669.83)
2-119	m/z=669.21(C ₄₈ H ₃₁ NOS=669.83)	2-120	m/z=821.28(C ₆₀ H ₃₉ NOS=822.02)
2-121	m/z=821.28(C ₆₀ H ₃₉ NOS=822.02)	2-122	m/z=821.28(C ₆₀ H ₃₉ NOS=822.02)
2-123	m/z=685.19(C ₄₈ H ₃₁ NS ₂ =685.90)	2-124	m/z=761.22(C ₅₄ H ₃₅ NS ₂ =761.99)
2-125	m/z=685.19(C ₄₈ H ₃₁ NS ₂ =685.90)	2-126	m/z=761.22(C ₅₄ H ₃₅ NS ₂ =761.99)
2-127	m/z=837.25(C ₆₀ H ₃₉ NS ₂ =838.09)	2-128	m/z=837.25(C ₆₀ H ₃₉ NS ₂ =838.09)
2-129	m/z=612.26(C ₄₆ H ₃₂ N ₂ =612.76)	2-130	m/z=638.27(C ₄₈ H ₃₄ N ₂ =638.80)
2-131	m/z=638.27(C ₄₈ H ₃₄ N ₂ =638.80)	2-132	m/z=688.29(C ₅₂ H ₃₆ N ₂ =688.86)
2-133	m/z=790.33(C ₆₀ H ₄₂ N ₂ =790.99)	2-134	m/z=642.21(C ₄₆ H ₃₀ N ₂ S=642.81)
2-135	m/z=678.30(C ₅₁ H ₃₈ N ₂ =678.86)	2-136	m/z=678.30(C ₅₁ H ₃₈ N ₂ =678.86)
2-137	m/z=650.27(C ₄₉ H ₃₄ N ₂ =650.81)	2-138	m/z=724.29(C ₅₅ H ₃₆ N ₂ =724.89)
2-139	m/z=678.30(C ₅₁ H ₃₈ N ₂ =678.86)	2-140	m/z=576.26(C ₄₃ H ₃₂ N ₂ =576.73)
2-141	m/z=652.25(C ₄₈ H ₃₂ N ₂ O=652.78)	2-142	m/z=566.18(C ₄₀ H ₂₆ N ₂ S=566.71)
2-143	m/z=586.24(C ₄₄ H ₃₀ N ₂ =586.72)	2-144	m/z=702.30(C ₅₃ H ₃₈ N ₂ =702.88)
2-145	m/z=692.23(C ₅₀ H ₃₂ N ₂ S=692.87)	2-146	m/z=688.29(C ₅₂ H ₃₆ N ₂ =688.86)
2-147	m/z=728.32(C ₅₅ H ₄₀ N ₂ =728.92)	2-148	m/z=776.32(C ₅₉ H ₄₀ N ₂ =776.96)
2-149	m/z=728.32(C ₅₅ H ₄₀ N ₂ =728.92)	2-150	m/z=612.26(C ₄₆ H ₃₂ N ₂ =612.76)
2-151	m/z=716.32(C ₅₄ H ₄₀ N ₂ =716.91)	2-152	m/z=677.28(C ₅₀ H ₃₅ N ₃ =677.83)
2-153	m/z=675.27(C ₅₀ H ₃₃ N ₃ =675.82)	2-154	m/z=891.36(C ₆₇ H ₄₅ N ₃ =892.09)
2-155	m/z=943.39(C ₇₁ H ₄₉ N ₃ =944.17)	2-156	m/z=803.33(C ₆₀ H ₄₁ N ₃ =803.99)

[281]

[282] 유기전기소자의 제조평가

[283] [실시예 I-1] 레드유기전기발광소자 (전자수송층)

[284] 본 발명의 화합물을 전자수송층 물질로 사용하여 통상적인 방법에 따라 유기전기발광소자를 제작하였다. 먼저, 유리 기판에 형성된 ITO층(양극) 위에 4,4',4"-Tris[2-naphthyl(phenyl)amino]triphenylamine (이하 "2-TNATA"로 약기함)을 60 nm 두께로 진공증착하여 정공주입층을 형성한 후, 정공주입층 위에 4,4-비스[N-(1-나프틸)-N-페닐아미노]비페닐 (이하 "NPD"로 약기함)를 60 nm 두께로 진공증착하여 정공수송층을 형성하였다. 다음으로, 정공수송층 상에 호스트 물질로 CBP [4,4'-N,N'-dicarbazole-biphenyl]를, 도판트 물질로 bis-(1-phenylisoquinolyl)iridium(III)acetylacetonate (이하 "(piq)₂Ir(acac)"로 약기함)를 95:5 중량비로 도핑하여 30nm 두께의 발광층을 증착하였다. 이어서,

상기 발광층 상에

(1,1'비스페닐)-4-올레이트)비스(2-메틸-8-퀴놀린올레이트)알루미늄 (이하 "BALq"로 약기함)을 10 nm 두께로 진공증착하여 정공저지층을 형성하고, 상기 정공 저지층 상에 본 발명의 화합물 1-1을 40 nm 두께로 진공증착하여 전자수송층을 성막하였다. 이후, 전자수송층 상에 할로젠화 알칼리 금속인 LiF를 0.2 nm 두께로 증착하여 전자주입층을 형성하고, 이어서 Al을 150 nm의 두께로 증착하여 음극을 형성함으로써 유기전기발광소자를 제조하였다.

[285]

[286] **[실시예 I-2] 내지 [실시예 I-74] 레드유기전기발광소자 (전자수송층)**

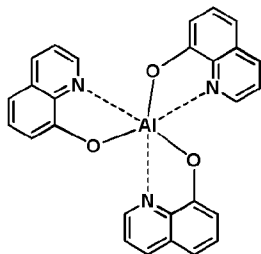
[287] 전자수송층 물질로 본 발명의 화합물 1-1 대신 하기 표 5에 기재된 본 발명의 화합물을 사용한 점을 제외하고는 실시예 I-1과 동일한 방법으로 유기전기발광소자를 제작하였다.

[288] **[비교예 I-1]**

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

[290] <비교화합물 1> Alq₃

[291]

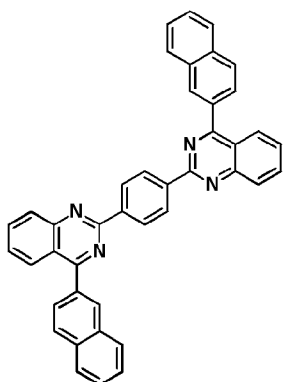


[292] **[비교예 I-2]**

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

[294] <비교화합물 2>

[295]

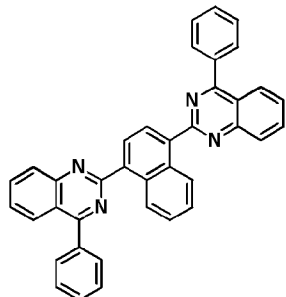


[296] **[비교예 I-3]**

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

[298] <비교화합물 3>

[299]



[300] 본 발명의 실시예 I-1 내지 실시예 I-74 및 비교예 1 내지 비교예 3에 의해 제조된 유기전기발광소자들에 순바이어스 직류전압을 가하여 포토리서치(photoresarch)사의 PR-650으로 전기발광(EL) 특성을 측정하고, 2500cd/m² 기준 휘도에서 맥사이언스사에서 제조된 수명 측정 장비를 통해 T95 수명을 측정하였다. 측정 결과는 하기 표 5와 같다.

[301] [표 5]

[302]

	전자수송층 화합물	구동전압 (V)	전류밀도 (mA/cm ²)	휘도 (cd/m ²)	효율 (cd/A)	수명 T(95)	CIE	
							x	y
비교예(I-1)	비교화합물 1	6.5	33.8	2500	7.4	63.5	0.66	0.32
비교예(I-2)	비교화합물 2	6.4	28.1	2500	8.9	86.9	0.66	0.32
비교예(I-3)	비교화합물 3	6.4	29.4	2500	8.5	79.1	0.66	0.32
실시예(I-1)	화합물(1-1)	6.2	19.4	2500	12.9	120.9	0.66	0.33
실시예(I-2)	화합물(1-2)	6.3	19.2	2500	13.0	124.8	0.66	0.33
실시예(I-3)	화합물(1-3)	6.2	21.0	2500	11.9	117.4	0.66	0.33
실시예(I-4)	화합물(1-4)	6.2	20.8	2500	12.0	124.0	0.66	0.33
실시예(I-5)	화합물(1-5)	6.2	20.7	2500	12.1	117.6	0.66	0.32
실시예(I-6)	화합물(1-7)	6.2	22.8	2500	11.0	114.3	0.66	0.32
실시예(I-7)	화합물(1-8)	6.2	21.3	2500	11.7	122.9	0.66	0.32
실시예(I-8)	화합물(1-9)	6.2	23.0	2500	10.9	111.1	0.66	0.32
실시예(I-9)	화합물(1-10)	6.3	22.3	2500	11.2	111.3	0.66	0.33
실시예(I-10)	화합물(1-11)	6.2	20.7	2500	12.1	120.0	0.66	0.33
실시예(I-11)	화합물(1-12)	6.2	20.6	2500	12.2	123.5	0.66	0.33
실시예(I-12)	화합물(1-13)	6.3	21.7	2500	11.5	119.8	0.66	0.33
실시예(I-13)	화합물(1-14)	6.3	21.8	2500	11.5	111.2	0.66	0.33
실시예(I-14)	화합물(1-15)	6.2	20.6	2500	12.2	122.5	0.66	0.33
실시예(I-15)	화합물(1-16)	6.3	20.7	2500	12.1	123.1	0.66	0.33
실시예(I-16)	화합물(1-17)	6.3	21.4	2500	11.7	119.4	0.66	0.32
실시예(I-17)	화합물(1-18)	6.2	21.8	2500	11.5	112.1	0.66	0.32
실시예(I-18)	화합물(1-19)	6.3	21.4	2500	11.7	123.1	0.66	0.32
실시예(I-19)	화합물(1-20)	6.2	22.0	2500	11.4	116.0	0.66	0.33
실시예(I-20)	화합물(1-21)	6.3	22.3	2500	11.2	112.6	0.66	0.32
실시예(I-21)	화합물(1-22)	6.3	23.0	2500	10.9	112.5	0.66	0.32
실시예(I-22)	화합물(1-23)	6.2	21.9	2500	11.4	111.7	0.66	0.32
실시예(I-23)	화합물(1-24)	6.3	23.0	2500	10.9	115.1	0.66	0.33
실시예(I-24)	화합물(1-25)	6.3	22.8	2500	11.0	116.9	0.66	0.33
실시예(I-25)	화합물(1-26)	6.2	22.8	2500	11.0	110.5	0.66	0.32
실시예(I-26)	화합물(1-27)	6.2	19.9	2500	12.6	120.0	0.66	0.32
실시예(I-27)	화합물(1-28)	6.3	20.9	2500	11.9	120.7	0.66	0.33
실시예(I-28)	화합물(1-29)	6.2	18.1	2500	13.8	132.1	0.66	0.32

[303]

실시예(I-29)	화합물(1-30)	6.2	21.3	2500	11.7	117.2	0.66	0.32
실시예(I-30)	화합물(1-31)	6.2	20.5	2500	12.2	122.1	0.66	0.32
실시예(I-31)	화합물(1-32)	6.2	18.5	2500	13.5	128.4	0.66	0.33
실시예(I-32)	화합물(1-33)	6.2	20.5	2500	12.2	124.6	0.66	0.32
실시예(I-33)	화합물(1-34)	6.3	20.1	2500	12.4	120.6	0.66	0.33
실시예(I-34)	화합물(1-35)	6.2	21.4	2500	11.7	122.2	0.66	0.32
실시예(I-35)	화합물(1-36)	6.3	20.1	2500	12.4	123.0	0.66	0.32
실시예(I-36)	화합물(1-37)	6.3	21.2	2500	11.8	120.5	0.66	0.33
실시예(I-37)	화합물(1-38)	6.3	22.2	2500	11.3	117.0	0.66	0.33
실시예(I-38)	화합물(1-39)	6.3	22.0	2500	11.3	111.1	0.66	0.33
실시예(I-39)	화합물(1-40)	6.3	23.0	2500	10.9	113.8	0.66	0.32
실시예(I-40)	화합물(1-41)	6.4	24.7	2500	10.1	115.4	0.66	0.33
실시예(I-41)	화합물(1-43)	6.3	22.2	2500	11.3	115.3	0.66	0.32
실시예(I-42)	화합물(1-44)	6.4	23.7	2500	10.6	112.5	0.66	0.32
실시예(I-43)	화합물(1-45)	6.2	20.5	2500	12.2	120.5	0.66	0.33
실시예(I-44)	화합물(1-46)	6.2	19.2	2500	13.0	125.2	0.66	0.33
실시예(I-45)	화합물(1-47)	6.3	21.7	2500	11.5	116.3	0.66	0.33
실시예(I-46)	화합물(1-48)	6.3	21.7	2500	11.5	116.2	0.66	0.33
실시예(I-47)	화합물(1-49)	6.2	20.4	2500	12.2	120.6	0.66	0.33
실시예(I-48)	화합물(1-51)	6.3	22.4	2500	11.1	116.4	0.66	0.33
실시예(I-49)	화합물(1-52)	6.3	21.9	2500	11.4	111.4	0.66	0.32
실시예(I-50)	화합물(1-53)	6.2	22.9	2500	10.9	112.8	0.66	0.33
실시예(I-51)	화합물(1-55)	6.2	22.6	2500	11.1	110.6	0.66	0.32
실시예(I-52)	화합물(1-56)	6.2	21.4	2500	11.7	118.1	0.66	0.33
실시예(I-53)	화합물(1-57)	6.2	21.3	2500	11.7	116.9	0.66	0.32
실시예(I-54)	화합물(1-58)	6.2	21.3	2500	11.7	120.1	0.66	0.33
실시예(I-55)	화합물(1-59)	6.3	20.6	2500	12.2	120.9	0.66	0.33
실시예(I-56)	화합물(1-60)	6.2	21.9	2500	11.4	116.0	0.66	0.33
실시예(I-57)	화합물(1-61)	6.3	21.5	2500	11.6	118.0	0.66	0.33
실시예(I-58)	화합물(1-62)	6.2	21.8	2500	11.5	113.0	0.66	0.33
실시예(I-59)	화합물(1-63)	6.2	22.6	2500	11.1	112.2	0.66	0.33
실시예(I-60)	화합물(1-64)	6.3	23.1	2500	10.8	113.7	0.66	0.32
실시예(I-61)	화합물(1-65)	6.3	19.9	2500	12.6	123.6	0.66	0.32
실시예(I-62)	화합물(1-66)	6.2	18.9	2500	13.2	124.9	0.66	0.33
실시예(I-63)	화합물(1-67)	6.2	20.5	2500	12.2	121.7	0.66	0.32

[304]

실시예(I-64)	화합물(1-68)	6.2	20.1	2500	12.5	125.0	0.66	0.33
실시예(I-65)	화합물(1-69)	6.3	21.5	2500	11.6	116.1	0.66	0.33
실시예(I-66)	화합물(1-70)	6.3	21.4	2500	11.7	117.0	0.66	0.32
실시예(I-67)	화합물(1-71)	6.3	21.5	2500	11.6	116.8	0.66	0.32
실시예(I-68)	화합물(1-72)	6.3	21.5	2500	11.6	116.6	0.66	0.33
실시예(I-69)	화합물(1-73)	6.4	24.3	2500	10.3	116.2	0.66	0.32
실시예(I-70)	화합물(1-74)	6.4	24.0	2500	10.4	115.3	0.66	0.33
실시예(I-71)	화합물(1-80)	6.4	24.2	2500	10.3	112.8	0.66	0.32
실시예(I-72)	화합물(1-81)	6.3	23.0	2500	10.9	111.7	0.66	0.33
실시예(I-73)	화합물(1-82)	6.2	20.1	2500	12.4	124.9	0.66	0.33
실시예(I-74)	화합물(1-84)	6.4	23.7	2500	10.6	114.8	0.66	0.33

[305]

상기 표 5의 결과로부터 알 수 있듯이, 본 발명의 유기전기발광소자용 재료를 전자수송층으로 사용한 경우 비교화합물 1 내지 비교화합물 3보다 높은 발광효율 및 높은 수명을 나타내는 것을 확인할 수 있었다.

[306]

이러한 결과는, 비교화합물 1인 Alq_3 의 경우 발광층 내에 도펀트로 사용한 $Ir(ppy)_3$ 의 T_1 값보다 낮은 T_1 값을 갖는데 반해 본 발명 화합물의 경우 $Ir(ppy)_3$ 의 T_1 값보다 대체적으로 높은 T_1 값을 나타내기 때문인 것으로 보인다.

[307]

본 발명의 화합물을 전자수송층으로 사용할 경우, 도펀트보다 높은 T_1 값을 가지므로 발광층 내에 여기자(exiton)가 머무를 수 있는 확률을 상대적으로 높이기 때문에 효율이 증가된 것으로 판단되며, 발광층 내 효율이 증가됨에 따라 구동전압이 낮아지고, 또한 높은 T_1 값으로 인해 정공이 넘어오는 현상을 줄일 수 있게 되어 수명이 증가되는 것으로 판단된다.

[308]

또한, 본 발명 화합물과 유사한 퀴나졸린을 포함하는 비교화합물 2와 비교화합물 3 경우, 본 발명의 화합물보다 낮은 LUMO 값을 갖는 것으로 보인다. 이는 본 발명 화합물이 비교화합물 2와 비교화합물 3보다 전자를 쉽고 빠르게 발광층 내로 전달시킬 수 있다는 것이며, 이로 인해 발광층 내 전하 균형(charge balance)이 증가하여 결과적으로 효율이 증가되는 것으로 판단된다.

[309]

또한 전자수송층으로 사용한 본 발명의 화합물은 연결기 L에 메타(meta)로 격인 페닐기를 도입시 좀 더 뒤틀린(twisted) 구조 형태가 되면서 더 높은 T_1 값을 갖게 되는 것을 확인할 수 있었다.

[310]

[311]

[실시예 II-1] 레드유기전기발광소자 (전자수송층, 정공수송층)

[312]

본 발명의 화합물을 전자수송층 물질로 사용하여 통상적인 방법에 따라 유기전기발광소자를 제작하였다. 먼저, 유리 기판에 형성된 ITO층(양극) 위에 2-TNATA를 60 nm 두께로 진공증착하여 정공주입층을 형성한 후, 정공주입층 위에 본 발명의 화합물 2-5를 60 nm 두께로 진공증착하여 정공수송층을 형성하였다. 다음으로, 정공수송층 상에 호스트 물질로 CBP를, 도펀트 물질로

(piq)₂Ir(acac)를 95:5 중량비로 도핑하여 30nm 두께의 발광층을 증착하였다. 이어서, 상기 발광층 상에 BAlq을 10 nm 두께로 진공증착하여 정공저지층을 형성하고, 상기 정공저지층 상에 본 발명의 화합물 1-1을 40 nm 두께로 진공증착하여 전자수송층을 성막하였다. 이후, 전자수송층 상에 할로젠화 알칼리 금속인 LiF를 0.2 nm 두께로 증착하여 전자주입층을 형성하고, 이어서 Al을 150 nm의 두께로 증착하여 음극을 형성함으로써 유기전기발광소자를 제조하였다.

[313] [실시예 II-2] 내지 [실시예 II-6] 레드유기전기발광소자 (전자수송층, 정공수송층)

[314] 전자수송층 물질로 본 발명의 화합물 1-1 대신 하기 표 6에 기재된 본 발명의 화합물을 사용한 점을 제외하고는 실시예 II-1과 동일한 방법으로 유기전기발광소자를 제작하였다.

[315] [실시예 II-7] 레드유기전기발광소자 (전자수송층, 정공수송층)

[316] 정공수송층 물질로 본 발명의 화합물 2-5 대신 하기 표 6에 기재된 본 발명의 화합물 2-102를 사용한 점을 제외하고는 실시예 II-1과 동일한 방법으로 유기전기발광소자를 제작하였다.

[317] [실시예 II-8] 내지 [실시예 II-12] 레드유기전기발광소자 (전자수송층, 정공수송층)

[318] 전자수송층 물질로 본 발명의 화합물 1-1 대신 하기 표 6에 기재된 본 발명의 화합물을 사용한 점을 제외하고는 실시예 II-7과 동일한 방법으로 유기전기발광소자를 제작하였다.

[319] [실시예 II-13] 레드유기전기발광소자 (전자수송층, 정공수송층)

[320] 정공수송층 물질로 본 발명의 화합물 2-5 대신 하기 표 6에 기재된 본 발명의 화합물 2-129를 사용한 점을 제외하고는 실시예 II-1과 동일한 방법으로 유기전기발광소자를 제작하였다.

[321] [실시예 II-14] 내지 [실시예 II-18] 레드유기전기발광소자 (전자수송층, 정공수송층)

[322] 전자수송층 물질로 본 발명의 화합물 1-1 대신 하기 표 6에 기재된 본 발명의 화합물을 사용한 점을 제외하고는 실시예 II-13과 동일한 방법으로 유기전기발광소자를 제작하였다.

[323] 본 발명의 실시예 II-1 내지 실시예 II-18에 의해 제조된 유기전기발광소자들에 순바이어스 직류전압을 가하여 포토리서치(photoresarch)사의 PR-650으로 전기발광(EL) 특성을 측정하고 2500cd/m² 기준 휘도에서 맥사이언스사에서 제조된 수명 측정 장비를 통해 T95 수명을 측정하였는데, 그 측정 결과는 하기 표 6과 같다.

[324] [표 6]

[325]

	정공수송층 화합물	전자수송층 화합물	구동전압 (V)	전류밀도 (mA/cm ²)	휘도 (cd/m ²)	효율 (cd/A)	수명 T(95)
실시예(II-1)	화합물 (2-5)	화합물(1-1)	6.1	16.4	2500	15.3	145.6
실시예(II-2)		화합물(1-2)	6.1	16.6	2500	15.0	144.4
실시예(II-3)		화합물(1-29)	5.9	15.3	2500	16.3	158.1
실시예(II-4)		화합물(1-32)	6.0	15.8	2500	15.8	152.3
실시예(II-5)		화합물(1-46)	6.0	16.2	2500	15.4	148.8
실시예(II-6)		화합물(1-82)	6.0	16.4	2500	15.2	143.8
실시예(II-7)	화합물 (2-102)	화합물(1-1)	6.1	17.3	2500	14.4	139.5
실시예(II-8)		화합물(1-2)	6.1	17.3	2500	14.5	140.7
실시예(II-9)		화합물(1-29)	6.0	16.4	2500	15.3	147.4
실시예(II-10)		화합물(1-32)	6.0	16.9	2500	14.8	143.0
실시예(II-11)		화합물(1-46)	6.1	17.2	2500	14.5	141.2
실시예(II-12)		화합물(1-82)	6.1	17.4	2500	14.3	140.9
실시예(II-13)	화합물 (2-129)	화합물(1-1)	6.1	18.2	2500	13.7	131.9
실시예(II-14)		화합물(1-2)	6.0	18.0	2500	13.9	131.0
실시예(II-15)		화합물(1-29)	6.0	17.0	2500	14.7	143.9
실시예(II-16)		화합물(1-32)	6.1	17.5	2500	14.3	138.3
실시예(II-17)		화합물(1-46)	6.1	17.8	2500	14.0	135.6
실시예(II-18)		화합물(1-82)	6.1	18.0	2500	13.9	136.1

[326]

[327] [실시예 III-1] 레드유기전기발광소자 (전자수송층, 정공수송층, 발광보조층)

[328] 본 발명의 화합물을 전자수송층 물질로 사용하여 통상적인 방법에 따라 유기전기발광소자를 제작하였다. 먼저, 유리 기판에 형성된 ITO층(양극) 위에 2-TNATA를 60 nm 두께로 진공증착하여 정공주입층을 형성한 후, 정공주입층 위에 본 발명의 화합물 2-5를 60 nm 두께로 진공증착하여 정공수송층을 형성하였다. 이어서, 상기 정공수송층 상에 본 발명의 화합물 2-46을 20 nm의 두께로 진공증착하여 발광보조층을 형성한 후, 상기 발광보조층 상에 호스트 물질로 CBP를, 도판트 물질로 (piq)₂Ir(acac)를 95:5 중량비로 도핑하여 30nm 두께의 발광층을 증착하였다. 이어서, 상기 발광층 상에 BA1q를 10 nm 두께로 진공증착하여 정공저지층을 형성하고, 상기 정공 저지층 상에 본 발명의 화합물 1-1을 40 nm 두께로 진공증착하여 전자수송층을 성막하였다. 이후, 전자수송층 상에 할로젠화 알칼리 금속인 LiF를 0.2 nm 두께로 증착하여 전자주입층을 형성하고, 이어서 Al을 150 nm의 두께로 증착하여 음극을 형성함으로써 유기전기발광소자를 제조하였다.

[329] [실시예 III-2] 내지 [실시예 III-6] 레드유기전기발광소자 (전자수송층, 정공수송층, 발광보조층)

[330] 전자수송층 물질로 본 발명의 화합물 1-1 대신 하기 표 7에 기재된 본 발명의

화합물을 사용한 점을 제외하고는 실시예 III-1과 동일한 방법으로 유기전기발광소자를 제작하였다.

[331] [실시예 III-7] 레드유기전기발광소자 (전자수송층, 정공수송층, 발광보조층)

[332] 발광보조층 물질로 본 발명의 화합물 2-46 대신 하기 표 7에 기재된 본 발명의 화합물 2-49를 사용한 점을 제외하고는 실시예 III-1과 동일한 방법으로 유기전기발광소자를 제작하였다.

[333] [실시예 III-8] 내지 [실시예 III-12] 레드유기전기발광소자 (전자수송층, 정공수송층, 발광보조층)

[334] 전자수송층 물질로 본 발명의 화합물 1-1 대신 하기 표 7에 기재된 본 발명의 화합물을 사용한 점을 제외하고는 실시예 III-7과 동일한 방법으로 유기전기발광소자를 제작하였다.

[335] [실시예 III-13] 레드유기전기발광소자 (전자수송층, 정공수송층, 발광보조층)

[336] 발광보조층 물질로 본 발명의 화합물 2-46 대신 하기 표 7에 기재된 본 발명의 화합물 2-130을 사용한 점을 제외하고는 실시예 III-1과 동일한 방법으로 유기전기발광소자를 제작하였다.

[337] [실시예 III-14] 내지 [실시예 III-18] 레드유기전기발광소자 (전자수송층, 정공수송층, 발광보조층)

[338] 전자수송층 물질로 본 발명의 화합물 1-1 대신 하기 표 7에 기재된 본 발명의 화합물을 사용한 점을 제외하고는 실시예 III-13과 동일한 방법으로 유기전기발광소자를 제작하였다.

[339] 본 발명의 실시예 III-1 내지 실시예 III-18에 의해 제조된 유기전기발광소자들에 순바이어스 직류전압을 가하여 포토리서치(photoresarch)사의 PR-650으로 전기발광(EL) 특성을 측정하고 2500cd/m² 기준 휘도에서 맥사이언스사에서 제조된 수명 측정 장비를 통해 T95 수명을 측정하였는데, 그 측정 결과는 하기 표 7과 같다.

[340] [표 7]

[341]

	정공수송층 화합물	발광보조층 화합물	전자수송층 화합물	구동전압 (V)	전류밀도 (mA/cm ²)	휘도 (cd/m ²)	효율 (cd/A)	수명 T(95)
실시예(III-1)	화합물 (2-5)	화합물 (2-46)	화합물(1-1)	6.2	11.1	2500	22.5	176.7
실시예(III-2)			화합물(1-2)	6.2	11.0	2500	22.7	180.4
실시예(III-3)			화합물(1-29)	6.2	10.2	2500	24.4	193.2
실시예(III-4)			화합물(1-32)	6.1	10.4	2500	24.1	184.6
실시예(III-5)			화합물(1-46)	6.2	10.7	2500	23.5	181.8
실시예(III-6)			화합물(1-82)	6.2	11.0	2500	22.7	181.9
실시예(III-7)		화합물 (2-49)	화합물(1-1)	6.2	11.8	2500	21.2	168.2
실시예(III-8)			화합물(1-2)	6.2	11.9	2500	21.1	171.2
실시예(III-9)			화합물(1-29)	6.2	10.9	2500	22.8	182.3
실시예(III-10)			화합물(1-32)	6.2	11.3	2500	22.2	178.1
실시예(III-11)			화합물(1-46)	6.2	11.4	2500	21.9	173.8
실시예(III-12)			화합물(1-82)	6.2	11.8	2500	21.2	172.3
실시예(III-13)		화합물 (2-130)	화합물(1-1)	6.2	12.2	2500	20.5	162.0
실시예(III-14)			화합물(1-2)	6.1	12.2	2500	20.5	163.1
실시예(III-15)			화합물(1-29)	6.1	11.3	2500	22.1	175.5
실시예(III-16)			화합물(1-32)	6.2	11.5	2500	21.8	169.1
실시예(III-17)			화합물(1-46)	6.2	11.8	2500	21.1	165.6
실시예(III-18)			화합물(1-82)	6.2	12.3	2500	20.4	165.8

[342] 상기 표 5 내지 표 7의 결과로부터 알 수 있듯이, 실시예 I(실시예 I-1 내지 실시예 I-74) 및 실시예 II(실시예 II-1 내지 실시예 II-18)보다 실시예 III(실시예 III-1 내지 실시예 III-18)이 발광효율 및 수명이 향상된다.

[343] 또한, 상기 표 5와 표 6에서 알 수 있는 것과 같이, NPB를 정공 수송층으로 사용했을 때보다 정공 수송층 물질로 화학식 2의 화합물을 사용한 실시예 II의 경우, NPB를 사용했을 때보다 낮은 구동전압과 높은 수명을 나타낸다.

[344] 특히, 표 5 및 표 6에서, 수명을 보다 향상시키기 위해 정공수송층과 발광층 사이에 화학식 2로 표시되는 화합물 중 높은 T_1 값과 넓은 밴드 갭을 갖는 물질을 발광보조층으로 추가 적용한 실시예의 소자 특성 측정 결과는 상기 표 7과 같다.

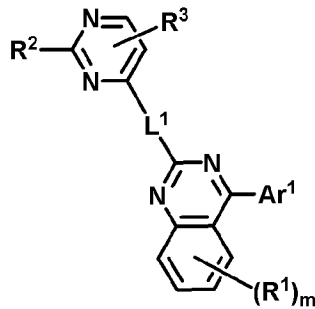
[345] 상기 표 7을 참조해보면, 화학식 2의 물질을 정공수송층과 발광보조층으로 사용하고 전자수송층에 본 발명 화합물인 화학식 1, 1a 또는 1b의 화합물을 사용하였을 경우 낮은 구동전압과, 높은 발광효율을 나타내고, 특히 수명이 크게 증가하는 것을 확인할 수 있다. 이는 정공수송층으로부터 넘어온 정공이 낮은 HOMO 값을 갖는 발광보조층에서 다소 정체가 되면서 발광층 내 전하 균형(charge balance)이 증가하여 효율이 증가된 것으로 판단된다. 또한, 발광보조층의 높은 T_1 값으로 인해 발광층에서 넘어오는 전자를 감소시켜(electron blocking) 정공수송층 계면에서의 발광을 막아줌으로써 색순도 저하를 감소시키는 것이라 판단된다.

- [346] 상기 표 7과 같이 본 발명의 화학식 1, 1a 또는 1b로 표시되는 화합물을 전자수송층 물질로 사용하고 화학식 2로 표시되는 화합물을 정공수송층 및/또는 발광보조층으로 사용하여 높은 발광효율 및 높은 수명을 갖는 소자 조합은 본 발명이 속하는 기술분야에서 통상의 지식을 가지는 자라고 해도 쉽게 그 성능을 유추하기 어려울 것이다.
- [347] 이상의 설명은 본 발명을 예시적으로 설명한 것에 불과한 것으로, 본 발명이 속하는 기술분야에서 통상의 지식을 가지는 자라면 본 발명의 본질적인 특성에서 벗어나지 않는 범위에서 다양한 변형이 가능할 것이다. 따라서, 본 명세서에 개시된 실시예들은 본 발명을 한정하기 위한 것이 아니라 설명하기 위한 것이고, 이러한 실시예에 의하여 본 발명의 사상과 범위가 한정되는 것은 아니다. 본 발명의 보호범위는 아래의 청구범위에 의하여 해석되어야 하며, 그와 동등한 범위 내에 있는 모든 기술은 본 발명의 권리범위에 포함하는 것으로 해석되어야 한다.
- [348] CROSS-REFERENCE TO RELATED APPLICATION
- [349] 본 특허출원은 2014년 7월 3일 한국에 출원한 특허출원번호 제10-2014-0082886호에 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 및 R¹은 서로 독립적으로 C₆-C₂₄의 아릴기 또는 플루오렌일기이며, m은 0 내지 4의 정수이며, m이 2이상인 경우 R¹은 서로 동일하거나 상이하며,

L¹은 단일결합, C₆-C₆₀의 아릴렌기, 플루오렌일렌기, O, N, S, Si 및 P로 이루어진 그룹에서 선택된 적어도 하나의 헤테로 원자를 포함하는 C₂-C₆₀의 헤테로고리기, C₃-C₆₀의 지방족고리와 C₆-C₆₀의 방향족고리의 융합고리기, 및 이들의 조합으로 이루어진 군에서 선택되며, 이들 각각은 중수소, 할로젠, 실란기, 실록산기, 붕소기, 게르마늄기, 시아노기, 니트로기, C₁-C₂₀의 알킬싸이오기, C₁-C₂₀의 알콕시기, C₁-C₂₀의 알킬기, C₂-C₂₀의 알켄일기, C₂-C₂₀의 알킨일기, C₆-C₂₀의 아릴기, 중수소로 치환된 C₆-C₂₀의 아릴기, 플루오렌일기, O, N, S, Si 및 P로 이루어진 그룹에서 선택된 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C₂-C₂₀의 헤테로고리기, C₃-C₂₀의 시클로알킬기, C₇-C₂₀의 아릴알킬기, 및 C₈-C₂₀의 아릴알켄일기로 이루어진 군에서 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환될 수 있으며,

R² 및 R³는 서로 독립적으로 C₆-C₆₀의 아릴기, 플루오렌일기, O, N, S, Si 및 P로 이루어진 그룹에서 선택된 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C₂-C₆₀의 헤테로고리기, C₃-C₆₀의 지방족고리와 C₆-C₆₀의 방향족고리의 융합고리기, 및 이들의 조합으로 이루어진 군에서 선택되며,

Ar¹, R¹, R² 및 R³의 아릴기 및 플루오렌일기와, R² 및 R³의 헤테로고리기 및 융합고리기는, 서로 독립적으로 중수소, 할로젠, 실란기, 실록산기, 붕소기, 게르마늄기, 시아노기, 니트로기, C₁-C₂₀의 알킬싸이오기, C₁-C₂₀의 알콕시기, C₁-C₂₀의 알킬기, C₂-C₂₀의 알켄일기, C₂-C₂₀의 알킨일기, C₆-C₂₀의 아릴기, 중수소로 치환된 C₆-C₂₀의 아릴기, 플루오렌일기, O, N, S, Si 및 P로 이루어진 그룹에서 선택된 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C₂-C₂₀의 헤테로고리기, C₃-C₂₀의 시클로알킬기, C₇-C₂₀의 아릴알킬기, 및 C₈

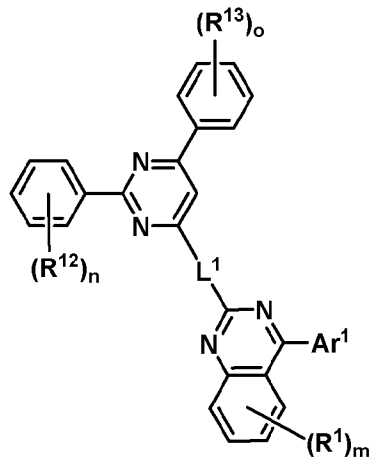
-C₂₀의 아릴알켄일기로 이루어진 군에서 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환될 수 있다.

[청구항 2]

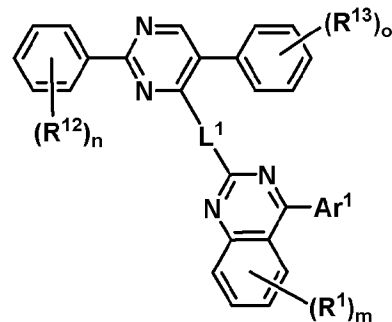
제 1항에 있어서,

상기 화학식 1은 하기 화학식 1a 또는 화학식 1b로 표시되는 것을 특징으로 하는 화합물:

<화학식 1a>



<화학식 1b>



상기 화학식 1a 및 1b에서,

Ar¹, R¹, L¹ 및 m은 제1항에서 정의된 것과 동일하며,

R¹² 및 R¹³은 서로 독립적으로 i) 중수소, 할로젠, C₆-C₆₀의 아릴기,

플루오렌일기, O, N, S, Si 및 P로 이루어진 그룹에서 선택된 적어도

하나의 헤테로원자를 포함하는 C₂-C₆₀의 헤테로고리기, C₃-C₆₀의

지방족고리와 C₆-C₆₀의 방향족고리의 융합고리기, C₁-C₅₀의 알킬기, C₂-C₂₀

의 알켄일기, C₂-C₂₀의 알킨일기, C₁-C₃₀의 알콕시기, 및 C₆-C₃₀의

아릴옥시기로 구성된 군에서 선택되거나, 또는 ii) 이웃한 기끼리 서로

결합하여 적어도 하나의 고리를 형성할 수 있으며, 이때 고리를 형성하지

않는 R¹² 및 R¹³은 상기 i)에서 정의된 것과 동일하며, n 및 o는 서로

독립적으로 0 내지 5의 정수이고, n이 2 이상의 정수인 경우 R¹²는 서로

동일하거나 상이하며, o가 2 이상의 정수인 경우 R¹³은 서로 동일하거나

상이하며,

상기 R¹² 및 R¹³의 아릴기, 플루오렌일기, 헤테로고리기, 융합고리기,

알킬기, 알켄일기, 알콕시기 및 아릴옥시기는 서로 독립적으로 중수소,

할로젠, 실란기, 실록산기, 붕소기, 게르마늄기, 시아노기, 니트로기, C₁-C

₂₀의 알킬싸이오기, C₁-C₂₀의 알콕시기, C₁-C₂₀의 알킬기, C₂-C₂₀의

알켄일기, C₂-C₂₀의 알킨일기, C₆-C₂₀의 아릴기, 중수소로 치환된 C₆-C₂₀의

아릴기, 플루오렌일기, O, N, S, Si 및 P로 이루어진 그룹에서 선택된

적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C₂-C₂₀의 헤테로고리기, C₃-C₂₀의

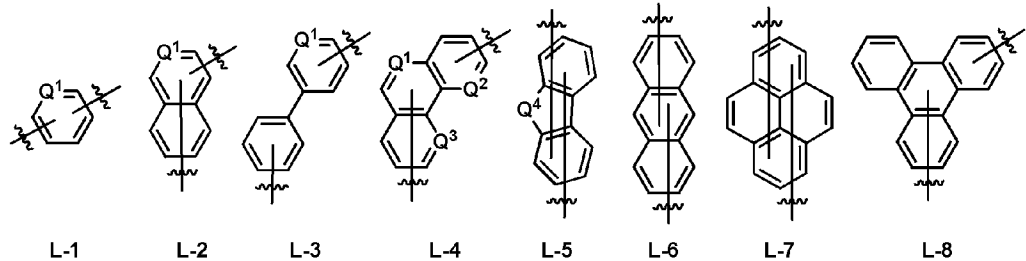
시클로알킬기, C₇-C₂₀의 아릴알킬기, 및 C₈-C₂₀의 아릴알켄일기로

이루어진 군에서 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환될 수 있다.

[청구항 3]

제 1항에 있어서,

상기 화학식 1의 L¹은 하기 L-1 내지 L-8로 표시되는 것 중 하나인 것을 특징으로 하는 화합물:



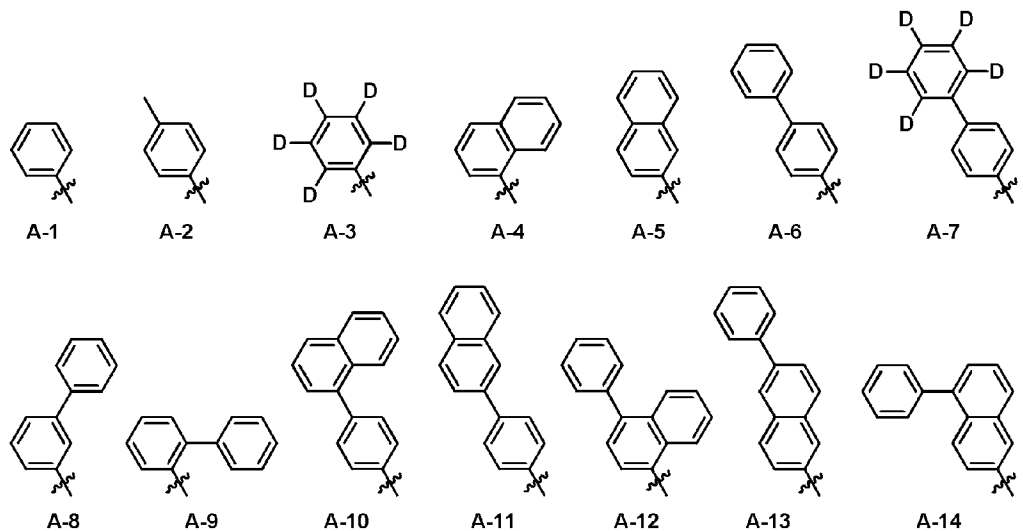
상기 L-1 내지 L-8에서, Q¹ 내지 Q³은 서로 독립적으로 CR^a 또는 N이고, Q⁴는 S, O 또는 CR^bR^c이며,

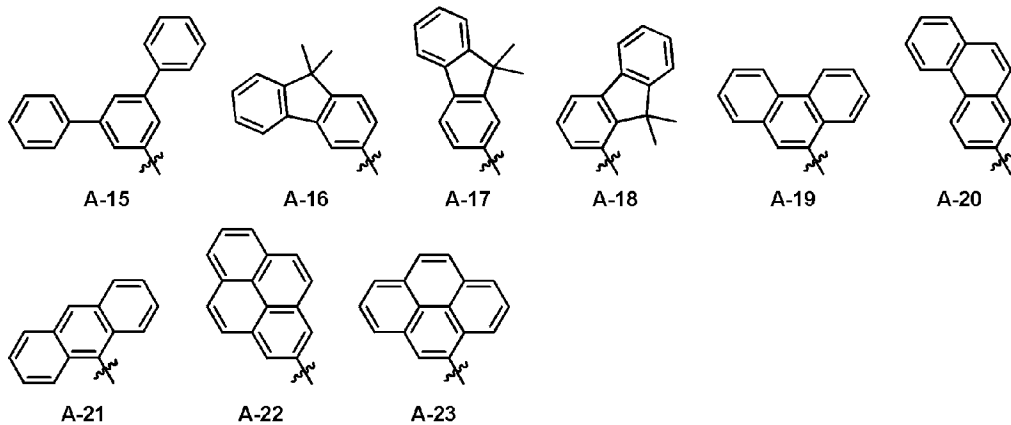
R^a, R^b 및 R^c는 서로 독립적으로 수소, C₆-C₆₀의 아릴기, 플루오렌일기, O, N, S, Si 및 P로 이루어진 그룹에서 선택된 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C₂-C₆₀의 헤테로고리기, C₃-C₆₀의 지방족고리와 C₆-C₆₀의 방향족고리의 융합고리기, C₁-C₅₀의 알킬기, C₂-C₂₀의 알켄일기, C₂-C₂₀의 알킨일기, C₁-C₃₀의 알콕시기, 및 C₆-C₃₀의 아릴옥시기로 구성된 군에서 선택된다.

[청구항 4]

제 1항에 있어서,

R² 및 R³는 서로 독립적으로, 하기 A-1 내지 A-23으로 표시되는 것 중 하나인 것을 특징으로 하는 화합물:

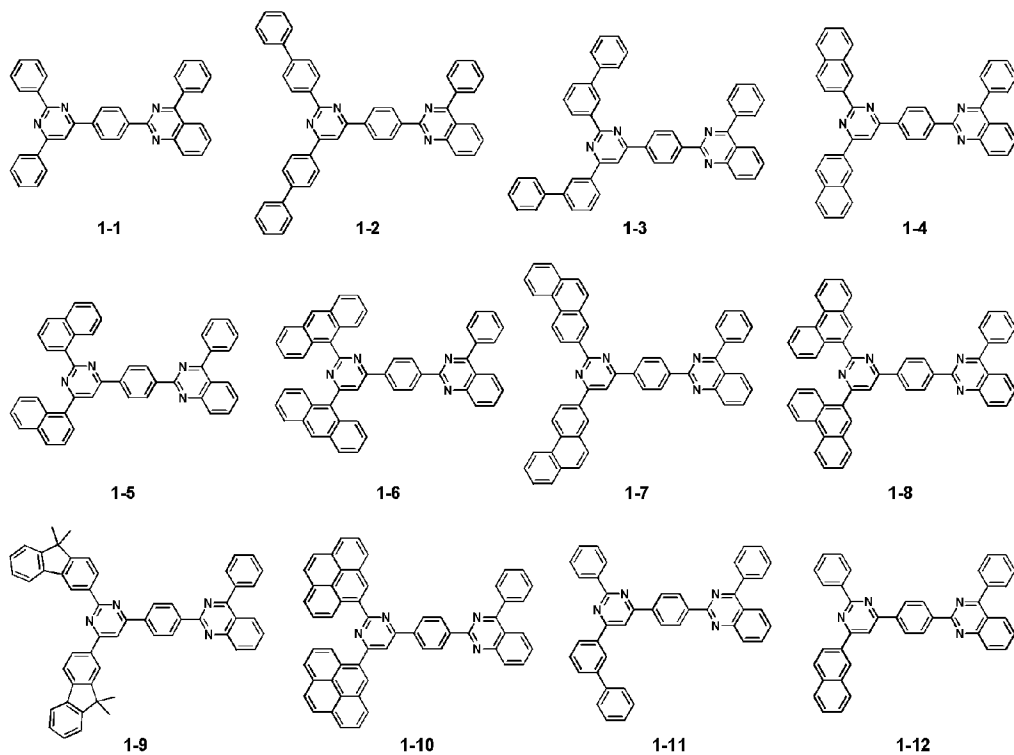


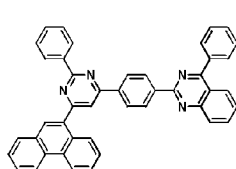


[청구항 5]

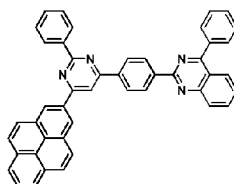
제 1항에 있어서,

하기 화합물 중 하나인 것을 특징으로 하는 화합물:

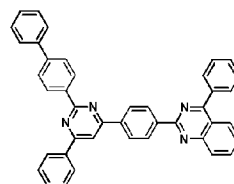




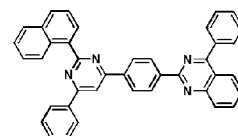
1-13



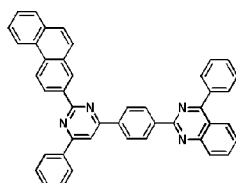
1-14



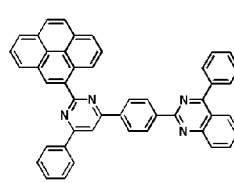
1-15



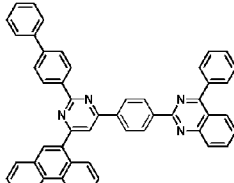
1-16



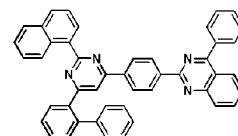
1-17



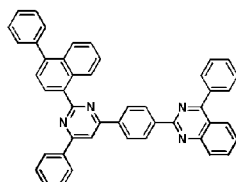
1-18



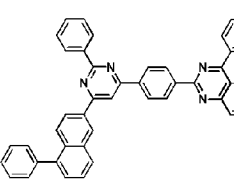
1-19



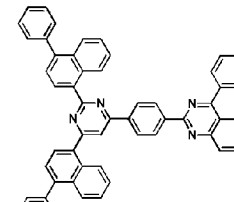
1-20



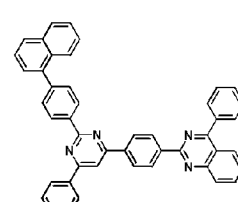
1-21



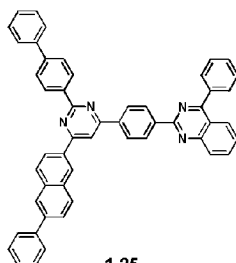
1-22



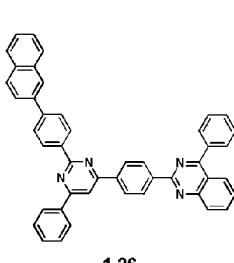
1-23



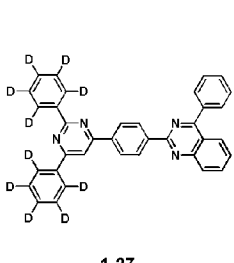
1-24



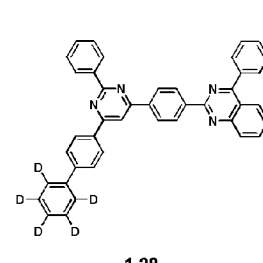
1-25



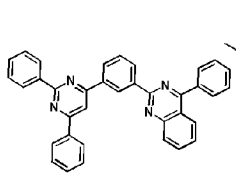
1-26



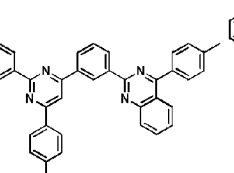
1-27



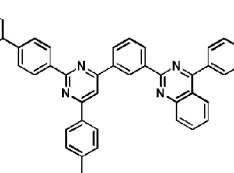
1-28



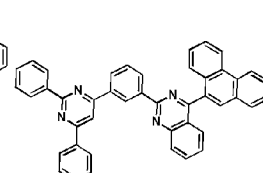
1-29



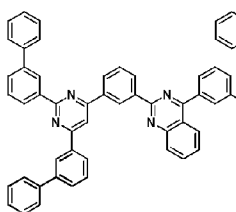
1-30



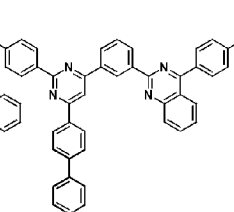
1-31



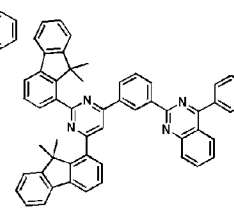
1-32



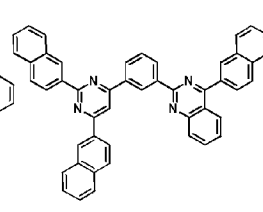
1-33



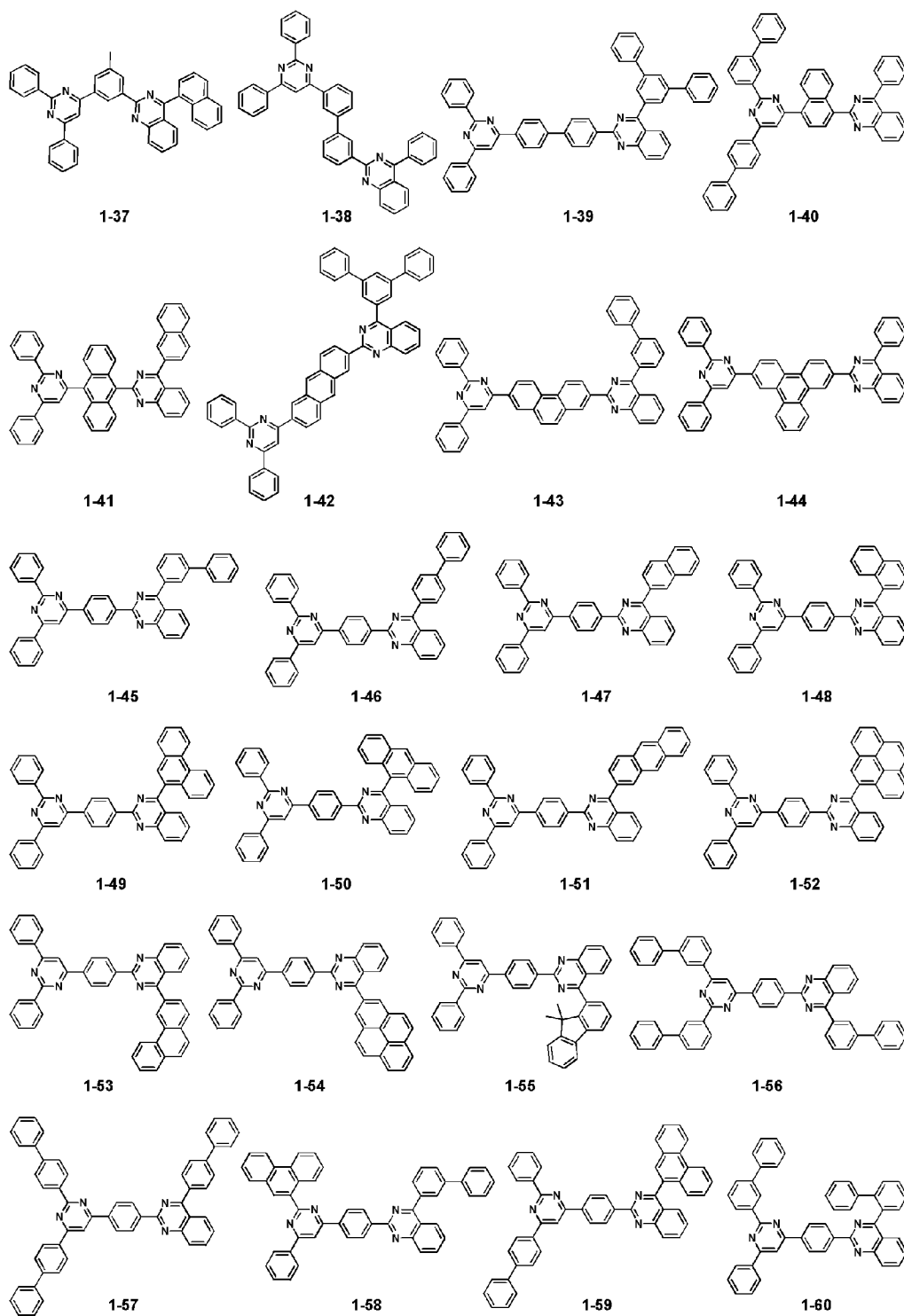
1-34

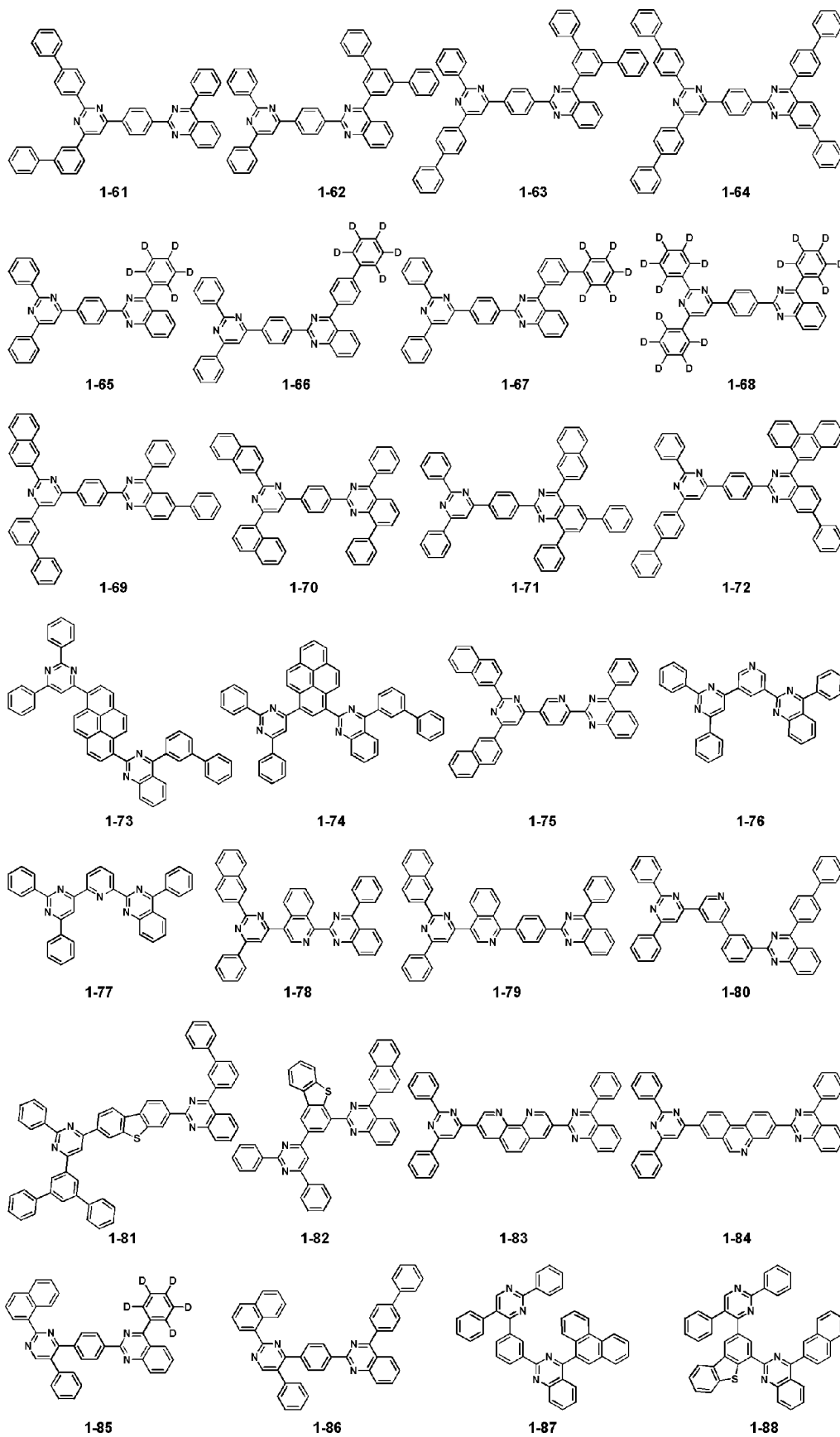


1-35



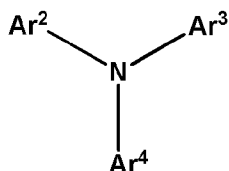
1-36





- [청구항 6] 제 1전극; 제 2전극; 및 상기 제 1전극과 제 2전극 사이에 위치하는 유기물층;을 포함하는 유기전기소자에 있어서,
상기 유기물층은 제 1항의 화합물을 함유하며,
상기 화합물은 1종 단독 또는 2종 이상의 혼합물인 것을 특징으로 하는 유기전기소자.
- [청구항 7] 제 6항에 있어서,
상기 화합물은 상기 유기물층의 전자수송층 및 발광층 중 적어도 하나의 층에 함유되어 있는 것을 특징으로 하는 유기전기소자.
- [청구항 8] 제 6항에 있어서,
상기 유기물층은 전자수송층, 발광층, 발광보조층 및 정공수송층을 포함하며, 상기 발광보조층은 상기 정공수송층과 상기 발광층 사이에 형성되며,
상기 전자수송층은 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 함유하고,
상기 정공수송층 및 발광보조층 중 적어도 일층은 서로 독립적으로 하기 화학식 2로 표시되는 화합물을 함유하는 것을 특징으로 하는 유기전기소자:

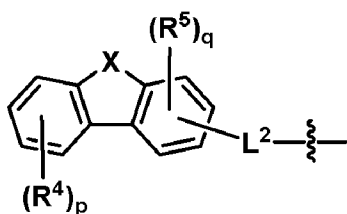
<화학식 2>



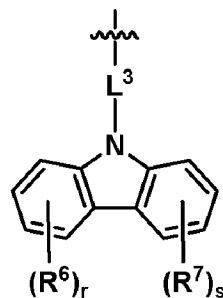
상기 화학식 2에서,

Ar² 및 Ar³은 서로 독립적으로 C₆-C₆₀의 아릴기, 플루오렌일기, O, N, S, Si 및 P로 이루어진 그룹에서 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 알콕시기, 및 C₆-C₃₀의 아릴옥시기로 구성된 군에서 선택되며,
Ar⁴는 C₆-C₃₀의 아릴기, 하기 화학식 2a 또는 화학식 2b이며,

<화학식 2a>



<화학식 2b>



상기 화학식 2a 및 2b에서,

X는 NR^d, O, S, 또는 CR^eR^f이며, 이때 R^d 내지 R^f는 서로 독립적으로 C₆-C₆₀

의 아릴기, 플루오렌일기, O, N, S, Si 및 P로 이루어진 그룹에서 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 알콕시기, 및 C_6-C_{30} 의 아릴옥시기로 구성된 군에서 선택되며, R^e 및 R^f 는 서로 결합하여 스파이로 화합물을 형성할 수 있고,

L^2 및 L^3 는 단일결합, C_6-C_{60} 의 아릴렌기, 플루오렌일렌기, O, N, S, Si 및 P로 이루어진 그룹에서 선택된 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C_2-C_{60} 의 헤테로고리기, C_3-C_{60} 의 지방족고리와 C_6-C_{60} 의 방향족고리의 융합고리기, 및 이들의 조합으로 이루어진 군에서 선택되며, 단 L^3 가 단일결합인 경우는 제외하고,

L^2 및 L^3 는 서로 독립적으로 중수소, 할로젠, 실란기, 실록산기, 붕소기, 게르마늄기, 시아노기, 니트로기, C_1-C_{20} 의 알킬싸이오기, C_1-C_{20} 의 알콕시기, 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 그룹에서 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 아릴알켄일기로 이루어진 군에서 선택된 하나 이상의 치환기로 선택적으로 치환될 수 있으며,

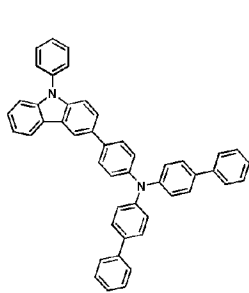
R^4 내지 R^7 은 i) 서로 독립적으로 중수소, 삼중수소, 할로젠, C_6-C_{60} 의 아릴기, 플루오렌일기, O, N, S, Si 및 P로 이루어진 그룹에서 선택된 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C_2-C_{60} 의 헤테로고리기, C_3-C_{60} 의 지방족고리와 C_6-C_{60} 의 방향족고리의 융합고리기, C_1-C_{50} 의 알킬기, C_2-C_{20} 의 알켄일기, C_2-C_{20} 의 알킨일기, C_1-C_{30} 의 알콕시기, 및 C_6-C_{30} 의 아릴옥시기로 구성된 군에서 선택되거나, 또는 ii) 이웃한 기끼리 서로 결합하여 적어도 하나의 고리를 형성하며, 이때 고리를 형성하지 않는 기는 상기 i)에서 정의된 것과 동일하며,

p, r 및 s 는 각각 0 내지 4의 정수이고, q 는 0 내지 3의 정수이며, 이들 각각이 2 이상의 정수인 경우, R^4 내지 R^7 각각은 서로 같거나 상이하며,

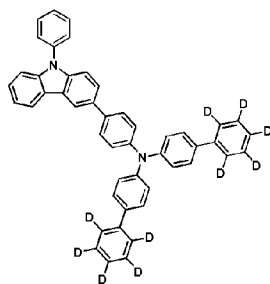
Ar^2 내지 Ar^4 , R^4 내지 R^7 이 각각 아릴기인 경우, Ar^2 , Ar^3 , R^4 내지 R^7 이 각각 플루오렌일기, 헤테로고리기, 융합고리기, 알킬기, 알켄일기, 알킨일기, 알콕시기 또는 아릴옥시기인 경우, 이들 각각은 서로 독립적으로 중수소, 할로젠, 실란기, 실록산기, 붕소기, 게르마늄기, 시아노기, 니트로기, C_1-C_{20} 의 알킬싸이오기, C_1-C_{20} 의 알콕시기, C_1-C_{20} 의 알킬기, C_2-C_{20} 의 알켄일기, C_2-C_{20} 의 알킨일기, C_6-C_{20} 의 아릴기, 중수소로 치환된 C_6-C_{20} 의 아릴기, 플루오렌일기, O, N, S, Si 및 P로 이루어진 그룹에서 선택된 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C_2-C_{20} 의 헤테로고리기, C_3-C_{20} 의 시클로알킬기, C_7-C_{20} 의 아릴알킬기, C_8-C_{20} 의

아릴알켄일기, 및 $-L-N(R')(R'')$ (여기서, 상기 L'은 단일결합, C_6-C_{30} 의 아릴렌기, 플루오렌일렌기, C_3-C_{30} 의 지방족고리와 C_6-C_{30} 의 방향족고리의 융합고리기, 및 O, N, S, Si 및 P로 이루어진 군에서 선택된 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C_2-C_{30} 의 헤테로고리기로 이루어진 군에서 선택되며, 상기 R' 및 R''는 서로 독립적으로 C_6-C_{30} 의 아릴기, 플루오렌일기, C_3-C_{30} 의 지방족고리와 C_6-C_{30} 의 방향족고리의 융합고리기, 및 O, N, S, Si 및 P로 이루어진 군에서 선택된 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C_2-C_{30} 의 헤테로고리기로 이루어진 군에서 선택됨)로 이루어진 군에서 선택된 하나 이상의 치환기로 치환될 수 있다.

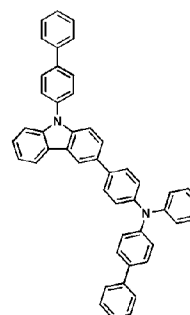
[청구항 9] 제 8항에 있어서,
상기 화학식 2는 하기 화합물 중 하나인 것을 특징으로 하는
유기전기소자:



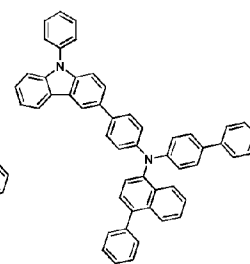
2-1



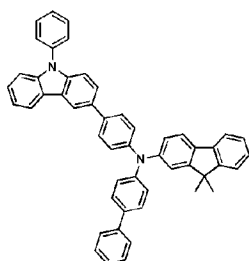
2-2



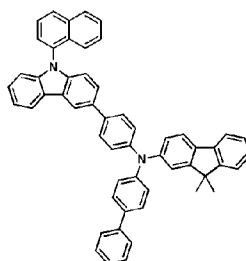
2-3



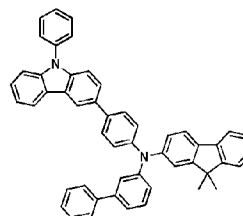
2-4



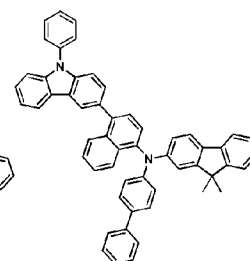
2-5



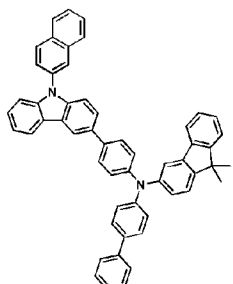
2-6



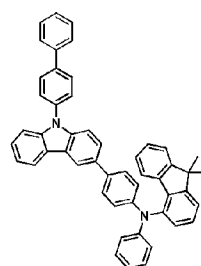
2-7



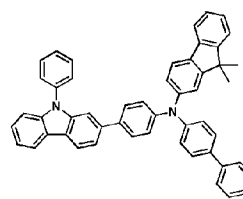
2-8



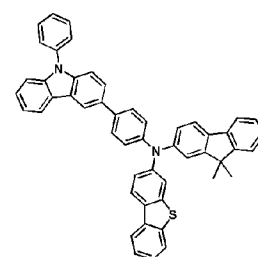
2-9



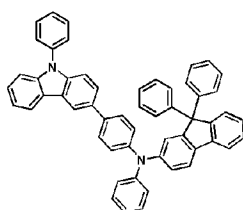
2-10



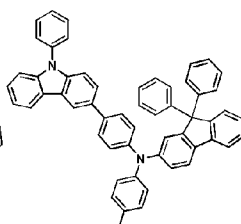
2-11



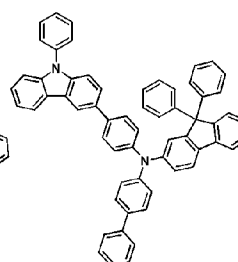
2-12



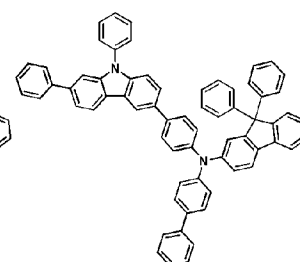
2-13



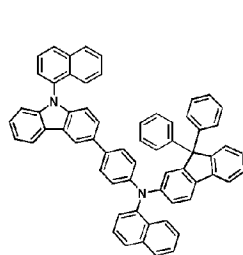
2-14



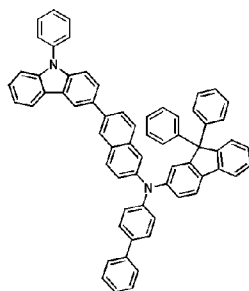
2-15



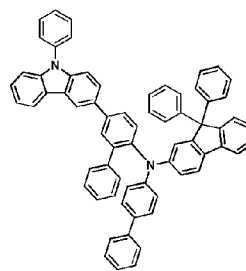
2-16



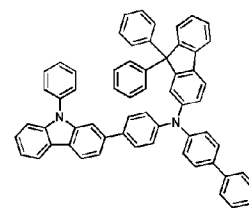
2-17



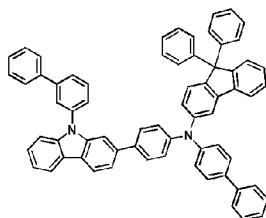
2-18



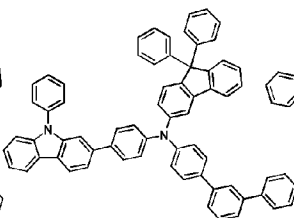
2-19



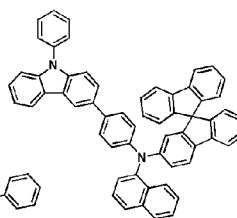
2-20



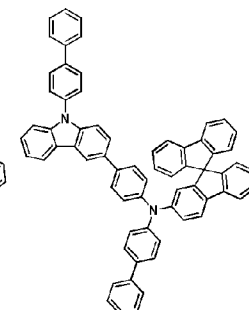
2-21



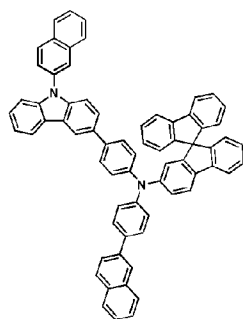
2-22



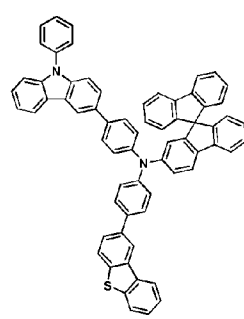
2-23



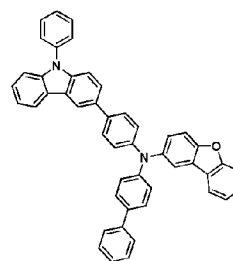
2-24



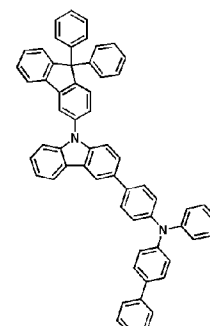
2-25



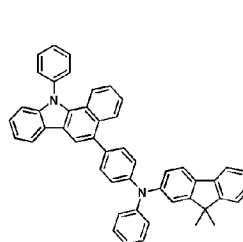
2-26



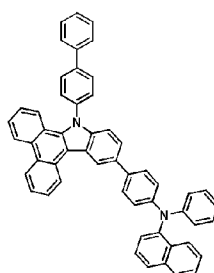
2-27



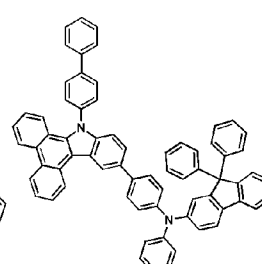
2-28



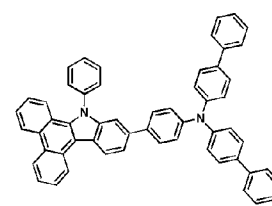
2-29



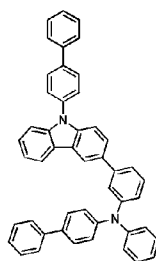
2-30



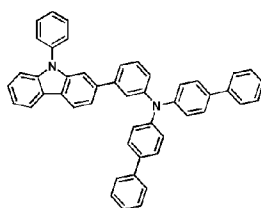
2-31



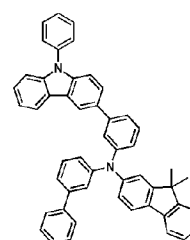
2-32



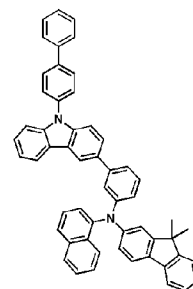
2-33



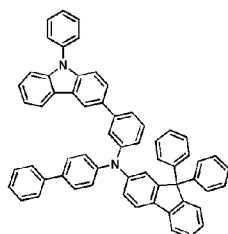
2-34



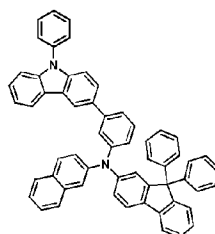
2-35



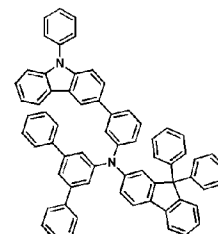
2-36



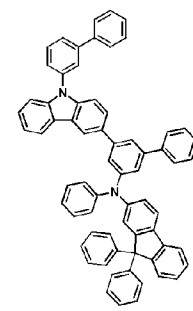
2-37



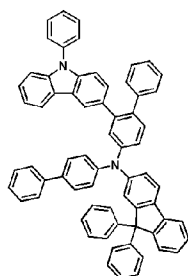
2-38



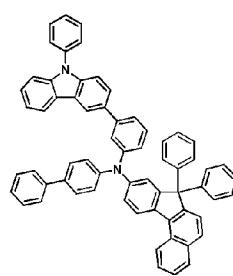
2-39



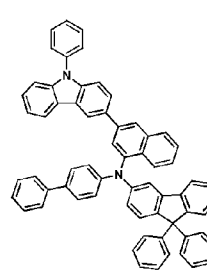
2-40



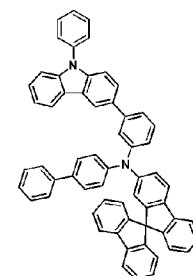
2-41



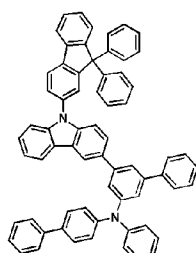
2-42



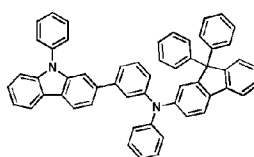
2-43



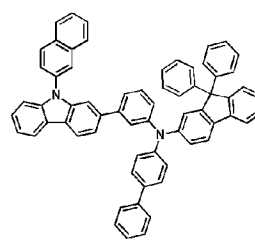
2-44



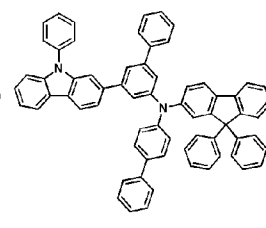
2-45



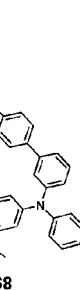
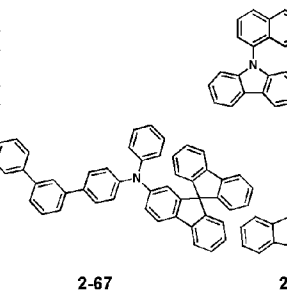
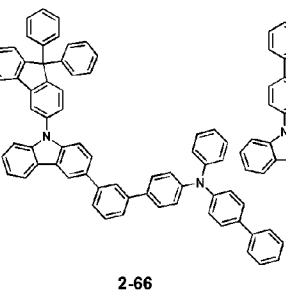
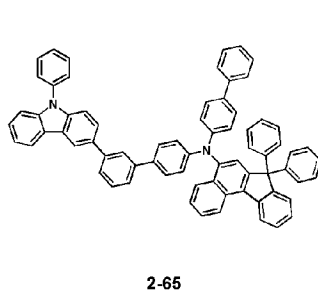
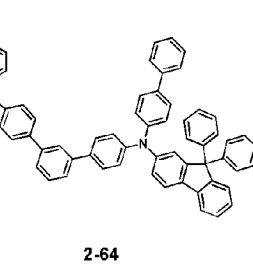
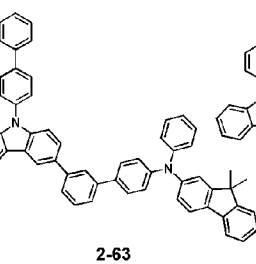
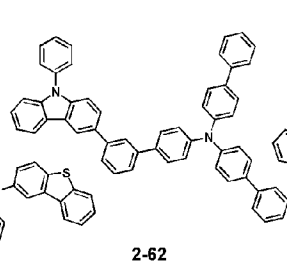
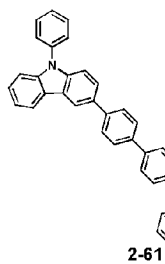
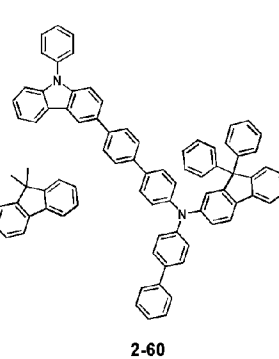
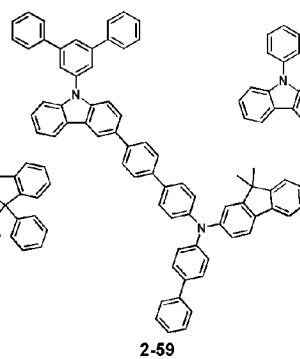
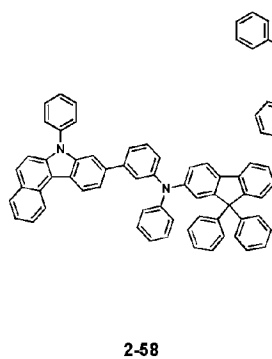
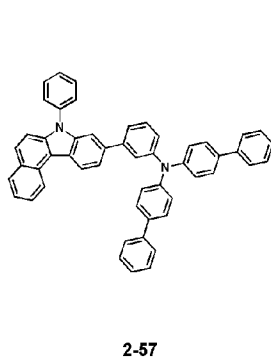
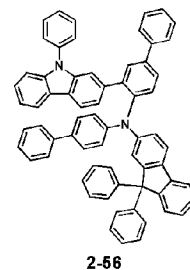
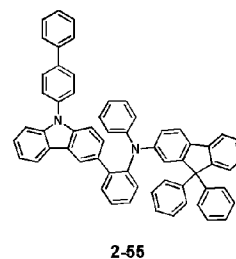
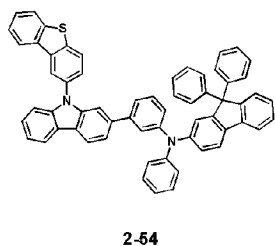
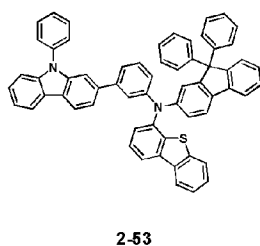
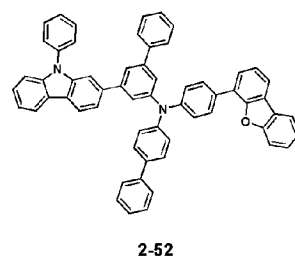
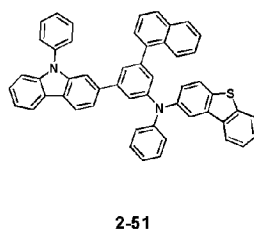
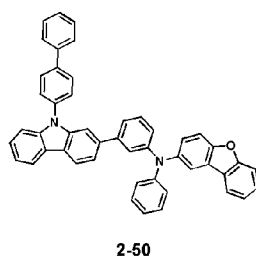
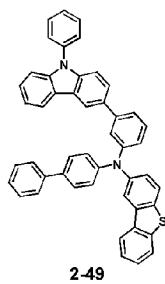
2-46

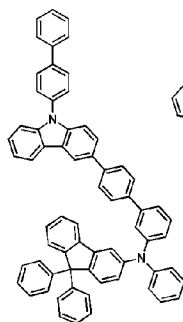


2-47

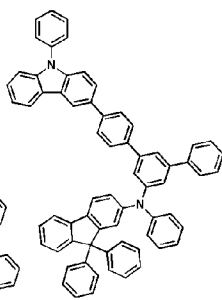


2-48

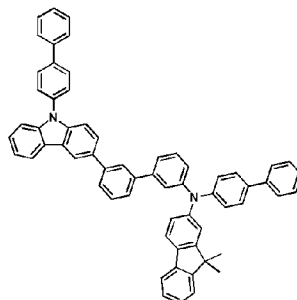




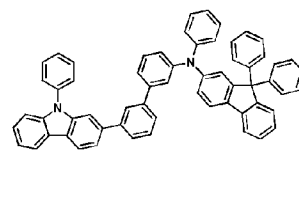
2-69



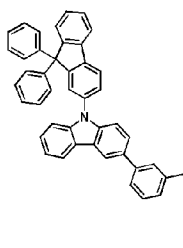
2-70



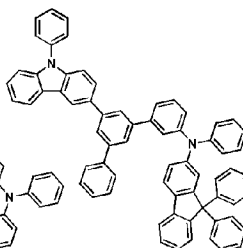
2-71



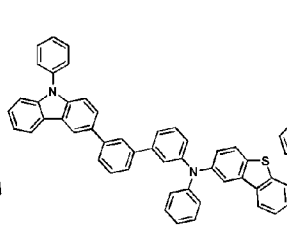
2-72



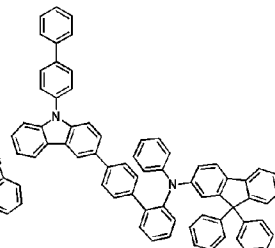
2-73



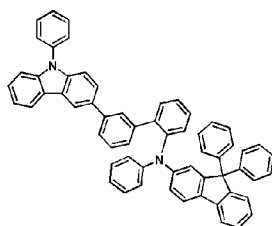
2-74



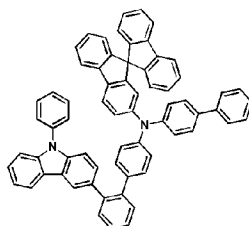
2-75



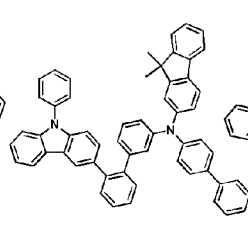
2-76



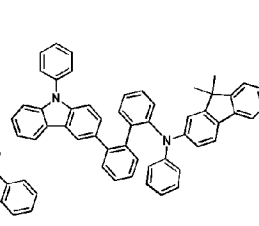
2-77



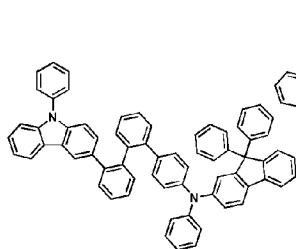
2-78



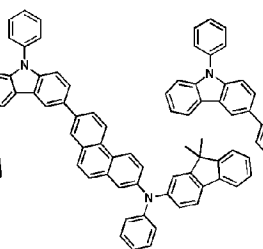
2-79



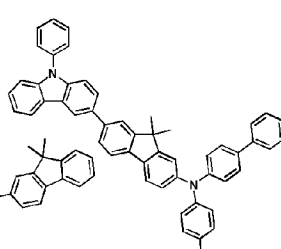
2-80



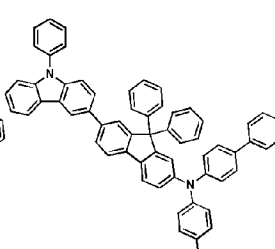
2-81



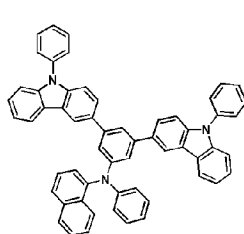
2-82



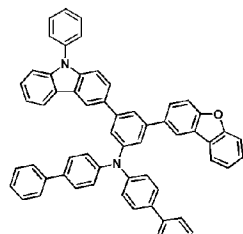
2-83



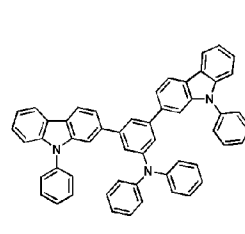
2-84



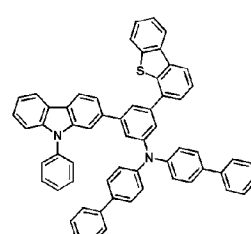
2-85



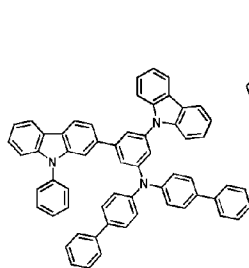
2-86



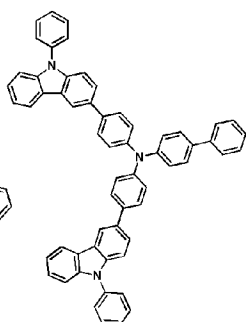
2-87



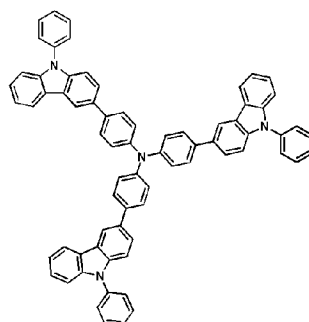
2-88



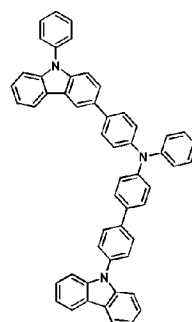
2-89



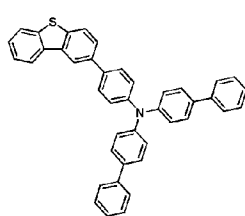
2-90



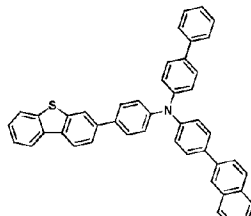
2-91



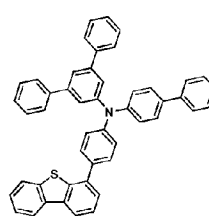
2-92



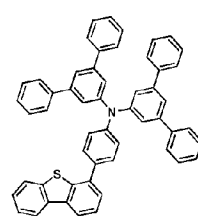
2-93



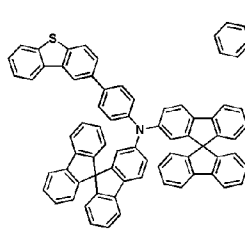
2-94



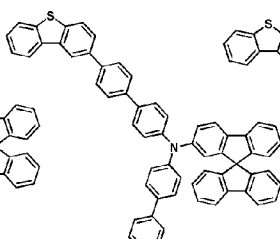
2-95



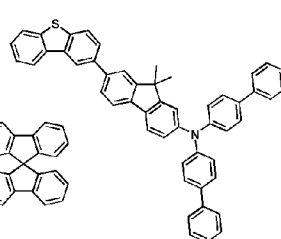
2-96



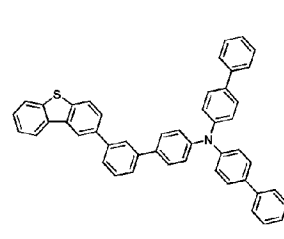
2-97



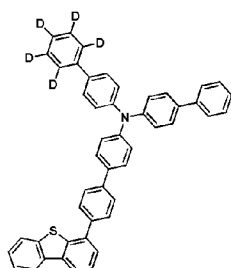
2-98



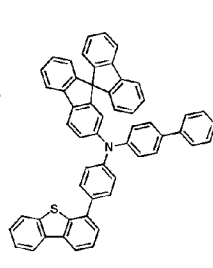
2-99



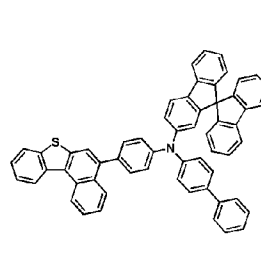
2-100



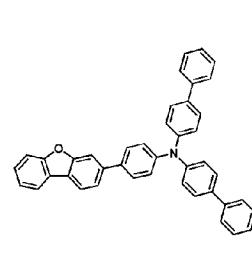
2-101



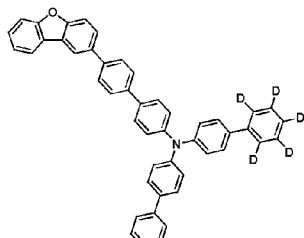
2-102



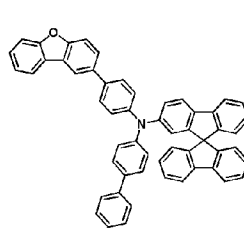
2-103



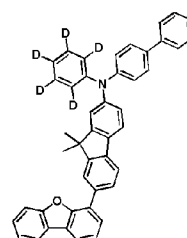
2-104



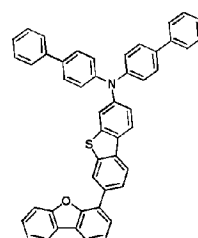
2-105



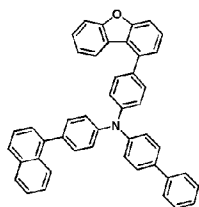
2-106



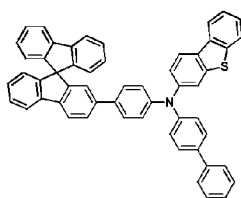
2-107



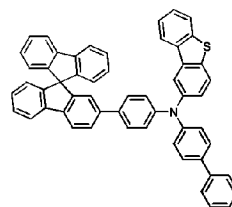
2-108



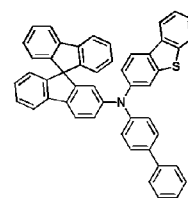
2-109



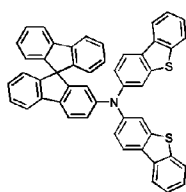
2-110



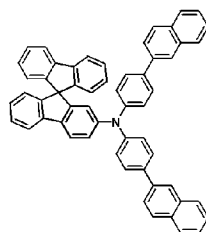
2-111



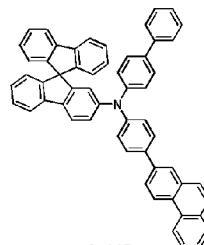
2-112



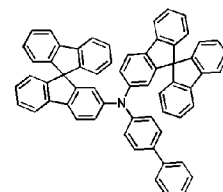
2-113



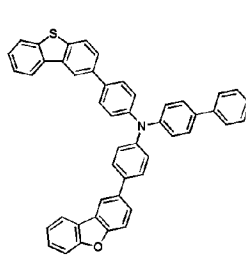
2-114



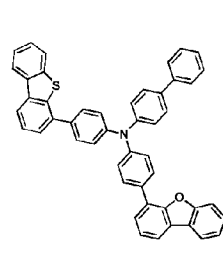
2-115



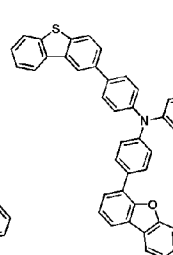
2-116



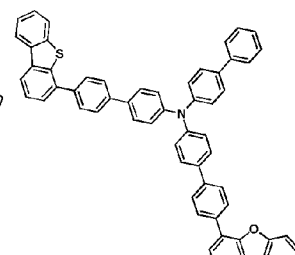
2-117



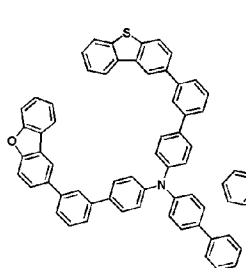
2-118



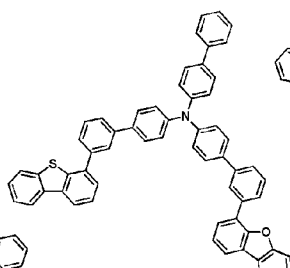
2-119



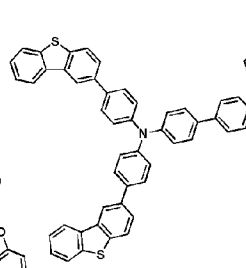
2-120



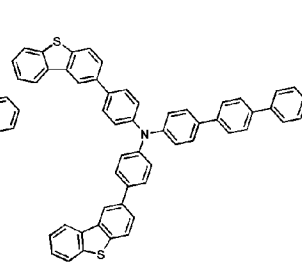
2-121



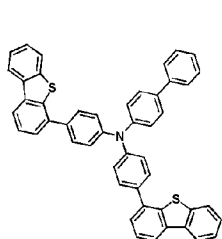
2-122



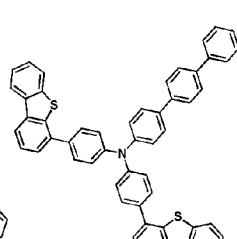
2-123



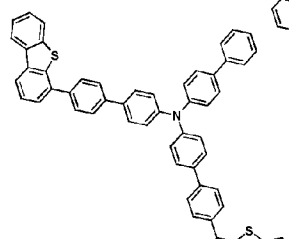
2-124



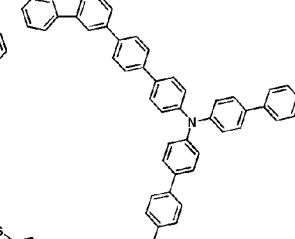
2-125



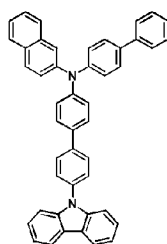
2-126



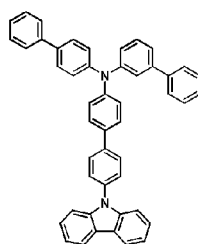
2-127



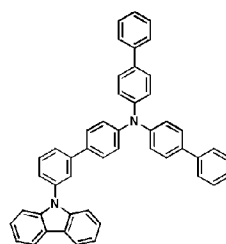
2-128



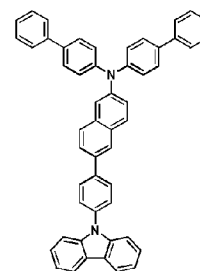
2-129



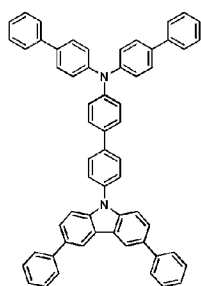
2-130



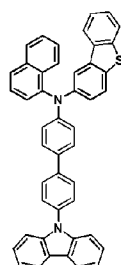
2-131



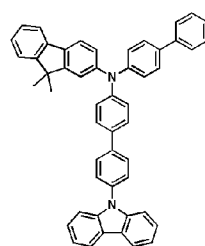
2-132



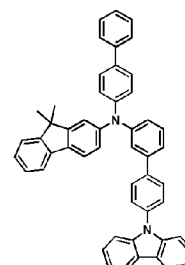
2-133



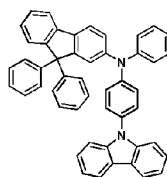
2-134



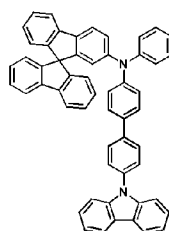
2-135



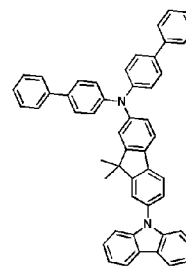
2-136



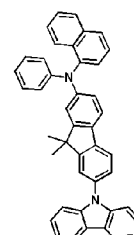
2-137



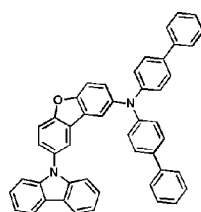
2-138



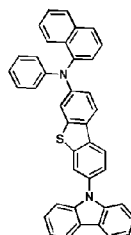
2-139



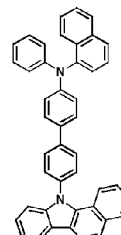
2-140



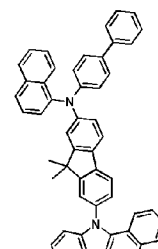
2-141



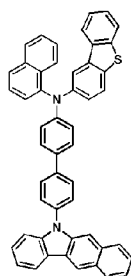
2-142



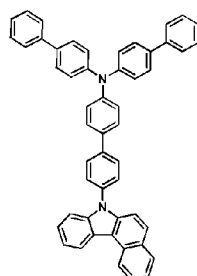
2-143



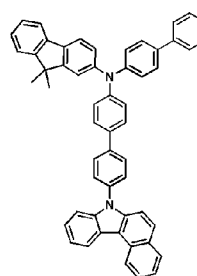
2-144



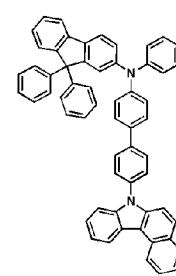
2-145



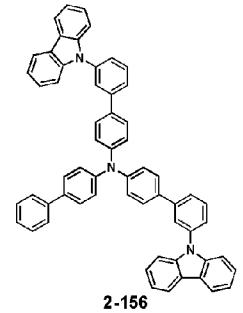
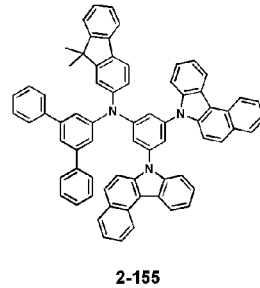
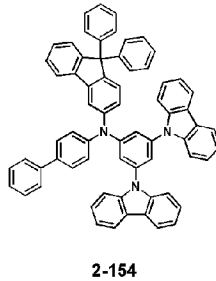
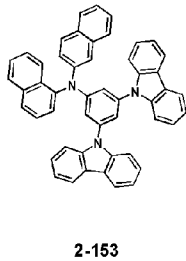
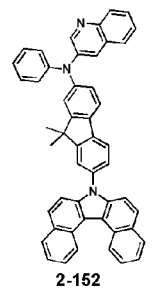
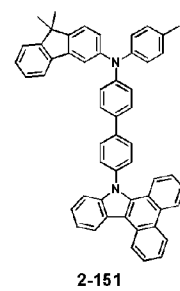
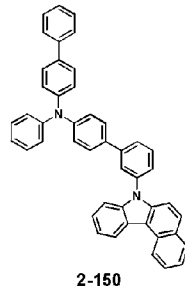
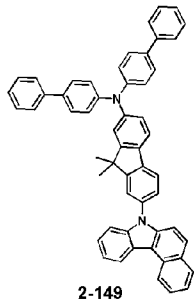
2-146



2-147



2-148



- [청구항 10] 제 8항에 있어서,
상기 제 1전극과 상기 제 2전극의 일측면 중 상기 유기물층과 반대되는 적어도 일측에 형성된 광효율 개선층을 더 포함하며, 상기 광효율 개선층은 상기 화학식 2로 표시되는 화합물을 포함하는 것을 특징으로 하는 유기전기소자.
- [청구항 11] 제 6항에 있어서,
상기 유기물층은 스핀코팅 공정, 노즐 프린팅 공정, 잉크젯 프린팅 공정, 슬롯코팅 공정, 딥코팅 공정 또는 롤투롤 공정에 의해 형성되는 것을 특징으로 하는 유기전기소자.
- [청구항 12] 제 6항의 유기전기소자를 포함하는 디스플레이장치; 및
상기 디스플레이장치를 제어하는 제어부;를 포함하는 전자장치.
- [청구항 13] 제 12항에 있어서,
상기 유기전기소자는 유기전기발광소자, 유기태양전지, 유기감광체, 유기트랜지스터, 및 단색 또는 백색 조명용 소자 중 적어도 하나인 것을 특징으로 하는 전자장치.

[도1]

100