



(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 등록특허공보(B1)

(45) 공고일자 2017년05월11일
 (11) 등록번호 10-1734460
 (24) 등록일자 2017년05월02일

- (51) 국제특허분류(Int. Cl.)
 C09K 11/06 (2006.01) C07C 309/36 (2006.01)
 C07D 405/04 (2006.01) C07D 409/04 (2006.01)
 H01L 51/00 (2006.01) H01L 51/50 (2006.01)
- (52) CPC특허분류
 C09K 11/06 (2013.01)
 C07C 309/36 (2013.01)
- (21) 출원번호 10-2016-0091509(분할)
- (22) 출원일자 2016년07월19일
 심사청구일자 2016년07월19일
- (65) 공개번호 10-2016-0092966
- (43) 공개일자 2016년08월05일
- (62) 원출원 특허 10-2013-0067316
 원출원일자 2013년06월12일
 심사청구일자 2014년09월03일
- (30) 우선권주장
 1020120091340 2012년08월21일 대한민국(KR)
- (56) 선행기술조사문헌
 KR1020110025906 A
 KR1020110122130 A
 KR1020120078301 A

- (73) 특허권자
제일모직주식회사
 경상북도 구미시 구미대로 58 (공단동)
- (72) 발명자
이한일
 경기도 수원시 영통구 삼성로 130 (매탄동)
류동완
 경기도 수원시 영통구 삼성로 130 (매탄동)
 (뒷면에 계속)
- (74) 대리인
팬코리아특허법인

전체 청구항 수 : 총 10 항

심사관 : 지무근

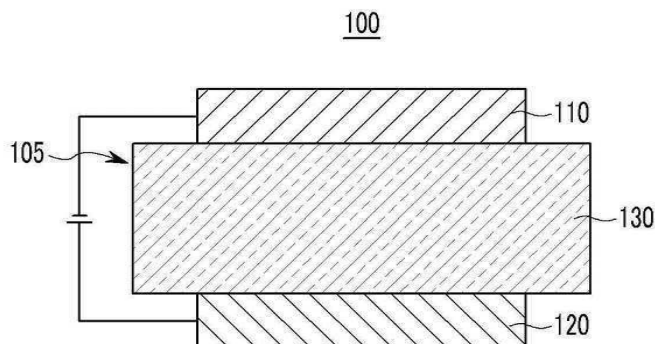
(54) 발명의 명칭 **유기광전자소자용 화합물, 이를 포함하는 유기발광소자 및 상기 유기발광소자를 포함하는 표시장치**

(57) 요약

유기광전자소자용 화합물, 이를 포함하는 유기발광소자 및 상기 유기발광소자를 포함하는 표시장치에 관한 것으로, 하기 화학식 1 및 3의 조합으로 표시되는 유기광전자소자용 화합물을 제공하여, 우수한 전기화학적 및 열적 안정성으로 수명 특성이 우수하고, 낮은 구동전압에서도 높은 발광효율을 가지는 유기발광소자를 제조할 수

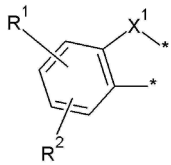
(뒷면에 계속)

대표도 - 도1

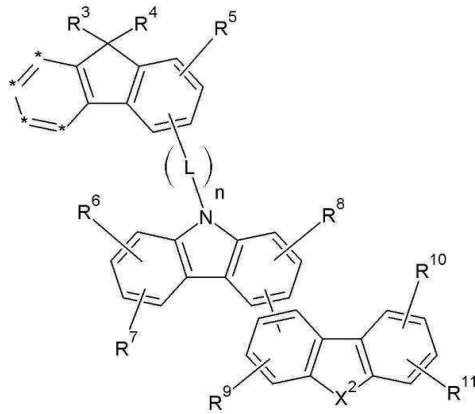


있다.

[화학식 1]



[화학식 3]



(52) CPC특허분류

C07D 405/04 (2013.01)

C07D 409/04 (2013.01)

H01L 51/0062 (2013.01)

H01L 51/0072 (2013.01)

H01L 51/0073 (2013.01)

H01L 51/0074 (2013.01)

H01L 51/5012 (2013.01)

H01L 51/5024 (2013.01)

H01L 51/5056 (2013.01)

(72) 발명자

정성현

경기도 수원시 영통구 삼성로 130 (매탄동)

채미영

경기도 수원시 영통구 삼성로 130 (매탄동)

허달호

경기도 수원시 영통구 삼성로 130 (매탄동)

홍진석

경기도 수원시 영통구 삼성로 130 (매탄동)

김준석

경기도 수원시 영통구 삼성로 130 (매탄동)

유동규

경기도 수원시 영통구 삼성로 130 (매탄동)

장유나

경기도 수원시 영통구 삼성로 130 (매탄동)

조영경

경기도 수원시 영통구 삼성로 130 (매탄동)

명세서

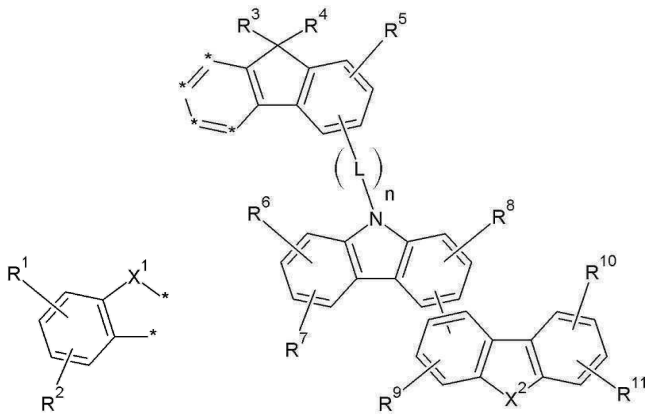
청구범위

청구항 1

하기 화학식 1 및 3의 조합으로 표시되는 유기광전자소자용 화합물:

[화학식 1]

[화학식 3]



상기 화학식 1 및 3에서,

X¹은 -O- 또는 -S-이고,

X²는 -O-, -S-, 또는 -NR'-이며, 상기 R'는 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C10 알킬기, 또는 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기이고,

R¹ 내지 R¹¹는 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C10 알킬기, 또는 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기이고,

L은 단일결합, 또는 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴렌기이고,

n은 0 내지 3의 정수 중 어느 하나이고,

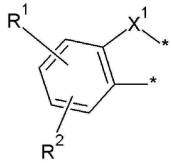
상기 화학식 1의 두개의 *는 상기 화학식 3의 네개의 * 중 인접한 두개와 결합하여 융합고리를 형성한다.

청구항 2

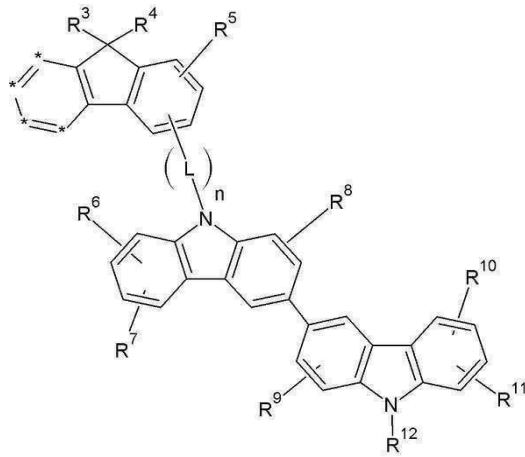
제1항에 있어서,

상기 유기광전자소자용 화합물은 하기 화학식 1 및 4의 조합으로 표시되는 유기광전자소자용 화합물:

[화학식 1]



[화학식 4]



상기 화학식 1 및 4에서,

X¹은 -O- 또는 -S-이고,

R¹ 내지 R¹²는 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C10 알킬기, 또는 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기이고,

L은 단일결합, 또는 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아틸렌기이고,

n은 0 내지 3의 정수 중 어느 하나이고,

상기 화학식 1의 두개의 *는 상기 화학식 4의 네개의 * 중 인접한 두개와 결합하여 융합고리를 형성한다.

청구항 3

삭제

청구항 4

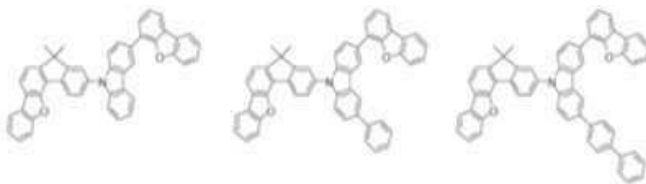
삭제

청구항 5

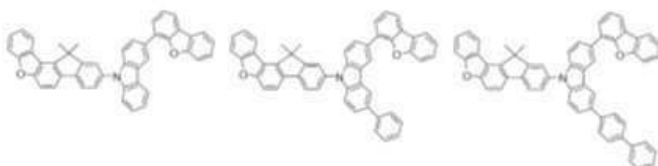
제1항에 있어서,

상기 유기광전자소자용 화합물은 하기 화학식 B-13 내지 B-42, B-67 및 B-68 중 어느 하나로 표시되는 것인 유기광전자소자용 화합물.

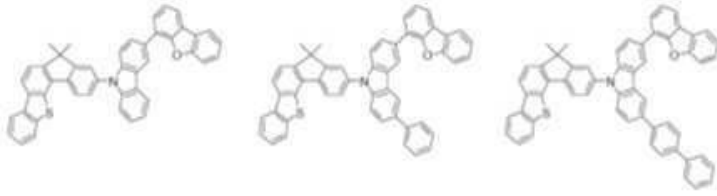
[화학식 B-13] [화학식 B-14] [화학식 B-15]



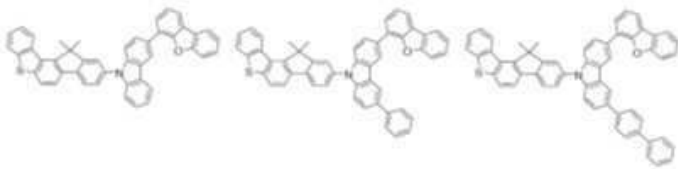
[화학식 B-16] [화학식 B-17] [화학식 B-18]



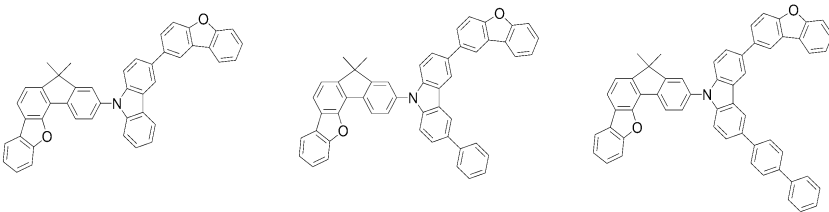
[화학식 B-19] [화학식 B-20] [화학식 B-21]



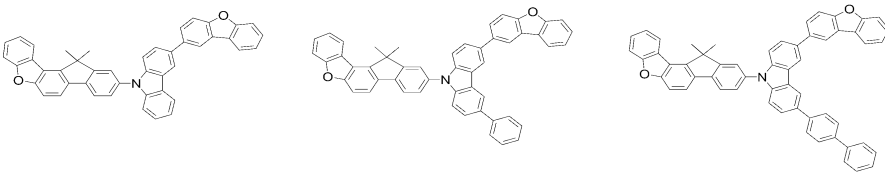
[화학식 B-22] [화학식 B-23] [화학식 B-24]



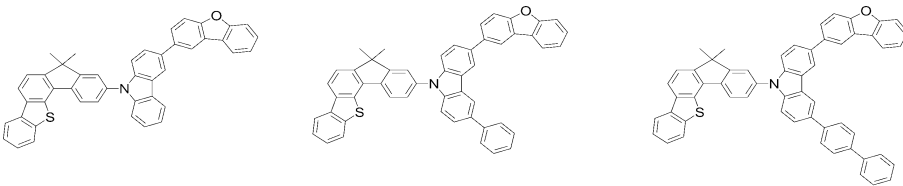
[화학식 B-25] [화학식 B-26] [화학식 B-27]



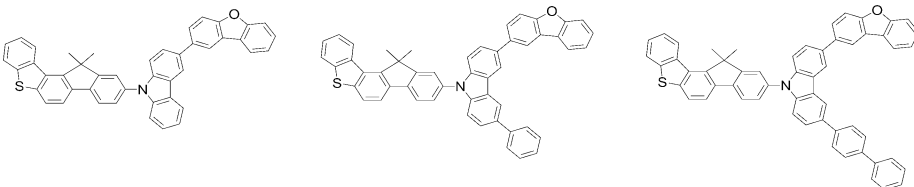
[화학식 B-28] [화학식 B-29] [화학식 B-30]



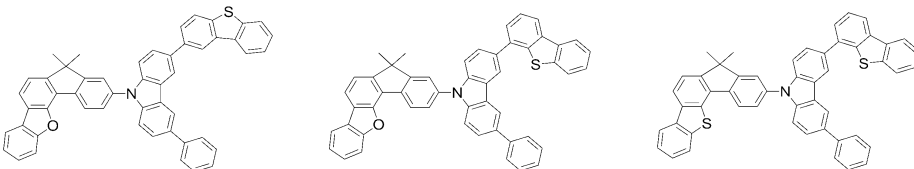
[화학식 B-31] [화학식 B-32] [화학식 B-33]



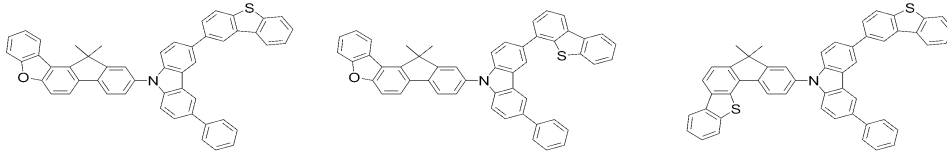
[화학식 B-34] [화학식 B-35] [화학식 B-36]



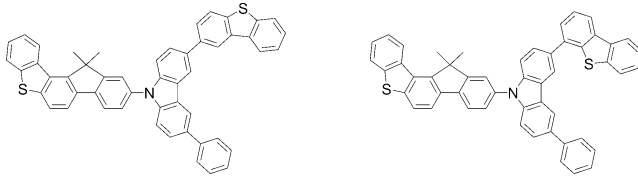
[화학식 B-37] [화학식 B-38] [화학식 B-39]



[화학식 B-40] [화학식 B-41] [화학식 B-42]



[화학식 B-67] [화학식 B-68]

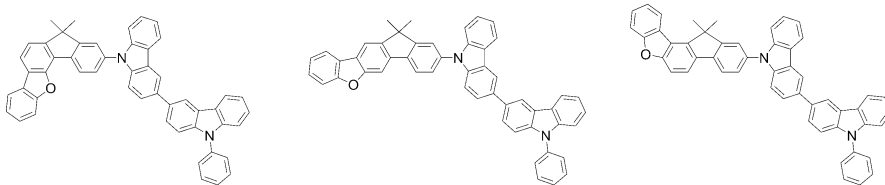


청구항 6

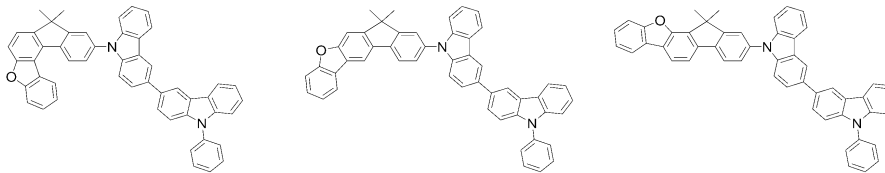
제1항에 있어서,

상기 유기광전자소자용 화합물은 하기 화학식 C-1 내지 C-12, 및 C-19 내지 C-66 중 어느 하나로 표시되는 것인 유기광전자소자용 화합물.

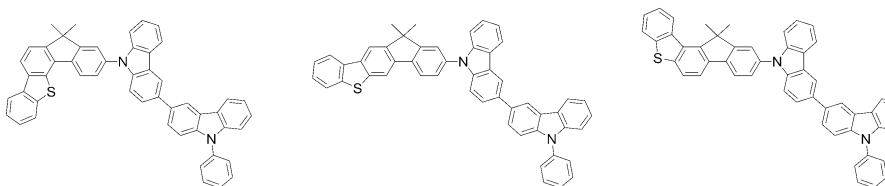
[화학식 C-1] [화학식 C-2] [화학식 C-3]



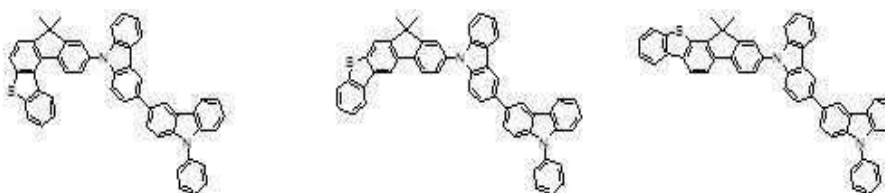
[화학식 C-4] [화학식 C-5] [화학식 C-6]



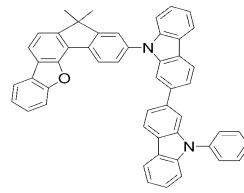
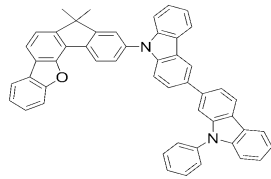
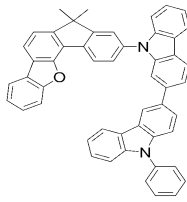
[화학식 C-7] [화학식 C-8] [화학식 C-9]



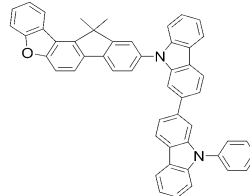
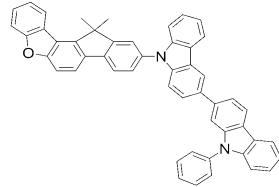
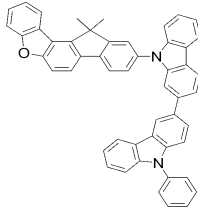
[화학식 C-10] [화학식 C-11] [화학식 C-12]



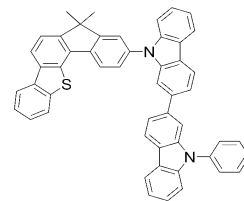
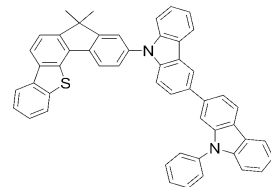
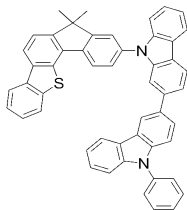
[화학식 C-19] [화학식 C-20] [화학식 C-21]



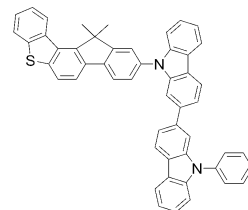
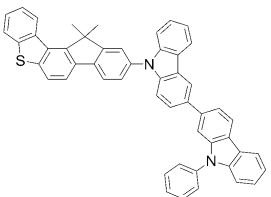
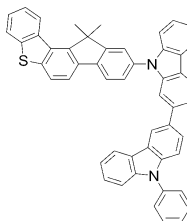
[화학식 C-22] [화학식 C-23] [화학식 C-24]



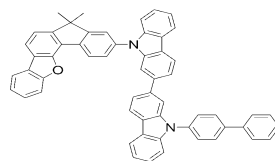
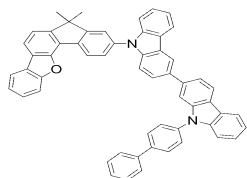
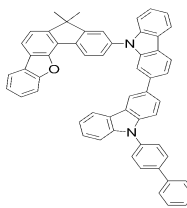
[화학식 C-25] [화학식 C-26] [화학식 C-27]



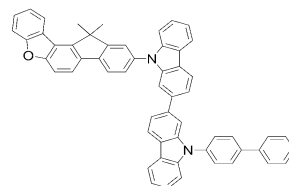
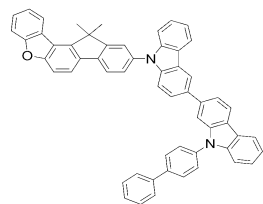
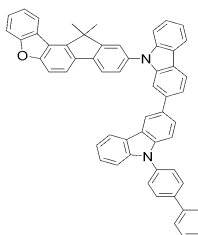
[화학식 C-28] [화학식 C-29] [화학식 C-30]



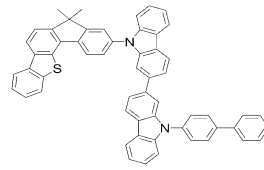
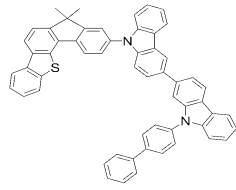
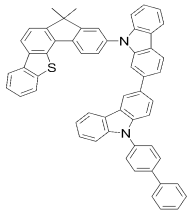
[화학식 C-31] [화학식 C-32] [화학식 C-33]



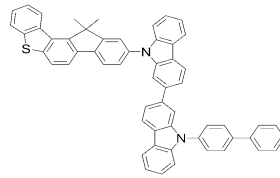
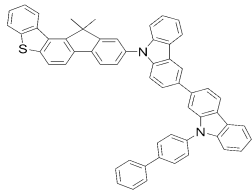
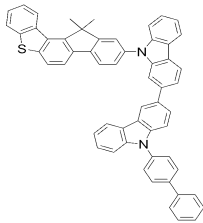
[화학식 C-34] [화학식 C-35] [화학식 C-36]



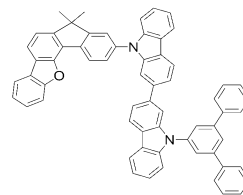
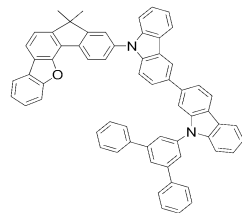
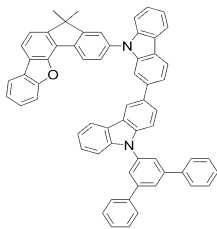
[화학식 C-37] [화학식 C-38] [화학식 C-39]



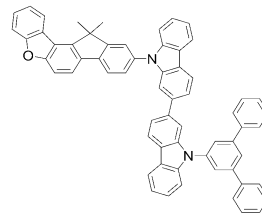
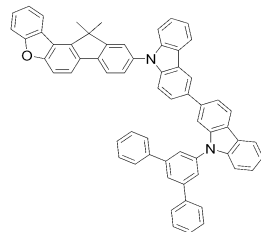
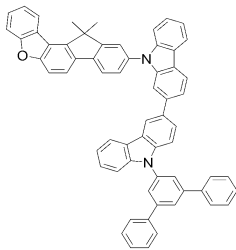
[화학식 C-40] [화학식 C-41] [화학식 C-42]



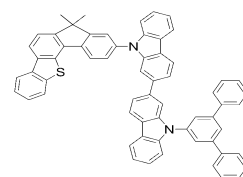
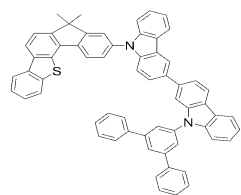
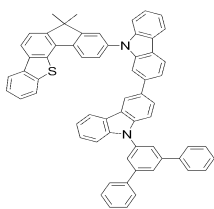
[화학식 C-43] [화학식 C-44] [화학식 C-45]



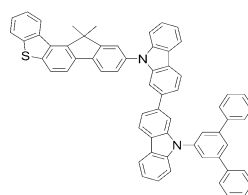
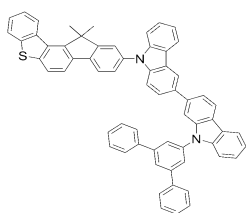
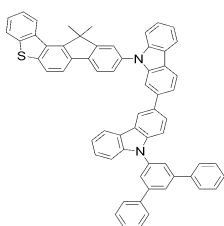
[화학식 C-46] [화학식 C-47] [화학식 C-48]



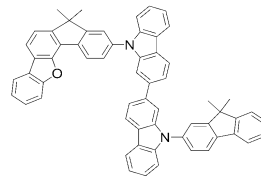
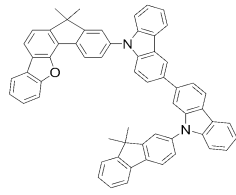
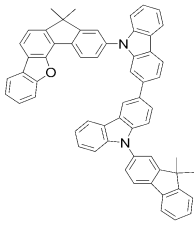
[화학식 C-49] [화학식 C-50] [화학식 C-51]



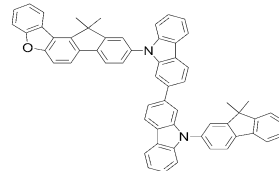
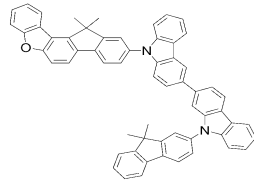
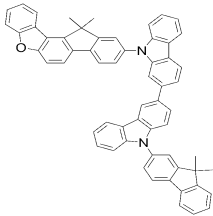
[화학식 C-52] [화학식 C-53] [화학식 C-54]



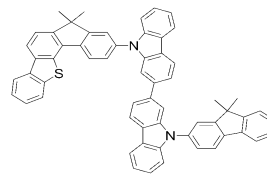
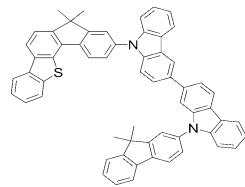
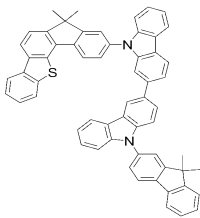
[화학식 C-55] [화학식 C-56] [화학식 C-57]



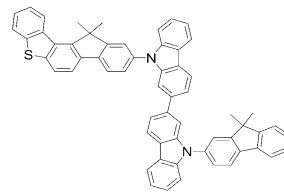
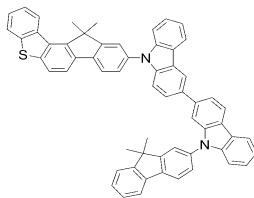
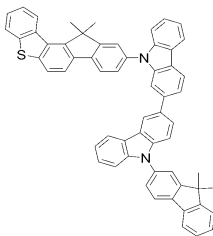
[화학식 C-58] [화학식 C-59] [화학식 C-60]



[화학식 C-61] [화학식 C-62] [화학식 C-63]



[화학식 C-64] [화학식 C-65] [화학식 C-66]



청구항 7

삭제

청구항 8

제1항에 있어서,

상기 유기광전자소자용 화합물은 3중항 여기에너지(T1) 2.0eV 이상인 것인 유기광전자소자용 화합물.

청구항 9

양극, 음극 및 상기 양극과 음극 사이에 개재되는 적어도 한 층 이상의 유기박막층을 포함하는 유기발광소자에 있어서,

상기 유기박막층 중 적어도 어느 한 층은 상기 제1항에 따른 유기광전자소자용 화합물을 포함하는 것인 유기발광소자.

청구항 10

제9항에 있어서,

상기 유기박막층은 발광층, 정공수송층, 정공주입층, 전자수송층, 전자주입층, 정공차단층 및 이들의 조합으로

이루어진 군에서 선택되는 것인 유기발광소자.

청구항 11

제10항에 있어서,

상기 유기광전자소자용 화합물은 정공수송층 또는 정공주입층 내에 포함되는 것인 유기발광소자.

청구항 12

제10항에 있어서,

상기 유기광전자소자용 화합물은 발광층 내에 포함되는 것인 유기발광소자.

청구항 13

제9항의 유기발광소자를 포함하는 표시장치.

발명의 설명

기술 분야

[0001] 수명, 효율, 전기화학적 안정성 및 열적 안정성이 우수한 유기광전자소자를 제공할 수 있는 유기광전자소자용 화합물, 이를 포함하는 유기발광소자 및 상기 유기발광소자를 포함하는 표시장치에 관한 것이다.

배경 기술

[0002] 유기광전자소자(organic optoelectric device)라 함은 정공 또는 전자를 이용한 전극과 유기물 사이에서의 전하 교류를 필요로 하는 소자를 의미한다.

[0003] 유기광전자소자는 동작 원리에 따라 하기와 같이 크게 두 가지로 나눌 수 있다. 첫째는 외부의 광원으로부터 소자로 유입된 광자에 의하여 유기물층에서 엑시톤(exciton)이 형성되고 이 엑시톤이 전자와 정공으로 분리되고, 이 전자와 정공이 각각 다른 전극으로 전달되어 전류원(전압원)으로 사용되는 형태의 전자소자이다.

[0004] 둘째는 2 개 이상의 전극에 전압 또는 전류를 가하여 전극과 계면을 이루는 유기물 반도체에 정공 또는 전자를 주입하고, 주입된 전자와 정공에 의하여 동작하는 형태의 전자소자이다.

[0005] 유기광전자소자의 예로는 유기광전소자, 유기발광소자, 유기태양전지, 유기감광체 드럼(organic photo conductor drum), 유기트랜지스터 등이 있으며, 이들은 모두 소자의 구동을 위하여 정공의 주입 또는 수송 물질, 전자의 주입 또는 수송 물질, 또는 발광 물질을 필요로 한다.

[0006] 특히, 유기발광소자(organic light emitting diode, OLED)는 최근 평판 디스플레이(flat panel display)의 수요가 증가함에 따라 주목받고 있다. 일반적으로 유기 발광 현상이란 유기 물질을 이용하여 전기에너지를 빛에너지로 전환시켜주는 현상을 말한다.

[0007] 이러한 유기발광소자는 유기발광재료에 전류를 가하여 전기에너지를 빛으로 전환시키는 소자로서 통상 양극(anode)과 음극(cathode) 사이에 기능성 유기물 층이 삽입된 구조로 이루어져 있다. 여기서 유기물층은 유기발광소자의 효율과 안정성을 높이기 위하여 각기 다른 물질로 구성된 다층의 구조로 이루어진 경우가 많으며, 예컨대 정공주입층, 정공수송층, 발광층, 전자수송층, 전자주입층 등으로 이루어질 수 있다.

[0008] 이러한 유기발광소자의 구조에서 두 전극 사이에 전압을 걸어주게 되면 양극에서는 정공(hole)이, 음극에서는 전자(electron)가 유기물층에 주입되게 되고, 주입된 정공과 전자가 만나 재결합(recombination)에 의해 에너지가 높은 여기자를 형성하게 된다. 이때 형성된 여기자가 다시 바닥상태(ground state)로 이동하면서 특정한 파장을 갖는 빛이 발생하게 된다.

[0009] 최근에는, 형광 발광물질뿐 아니라 인광 발광물질도 유기발광소자의 발광물질로 사용될 수 있음이 알려졌으며, 이러한 인광 발광은 바닥상태(ground state)에서 여기상태(excited state)로 전자가 전이한 후, 계간 전이(intersystem crossing)를 통해 단일항 여기자가 삼중항 여기자로 비발광 전이된 다음, 삼중항 여기자가 바닥상태로 전이하면서 발광하는 메카니즘으로 이루어진다.

[0010] 상기한 바와 같이 유기발광소자에서 유기물층으로 사용되는 재료는 기능에 따라, 발광 재료와 전하 수송 재료,

예컨대 정공주입 재료, 정공수송 재료, 전자수송 재료, 전자주입 재료 등으로 분류될 수 있다.

- [0011] 또한, 발광 재료는 발광색에 따라 청색, 녹색, 적색 발광재료와 보다 나은 천연색을 구현하기 위해 필요한 노란색 및 주황색 발광 재료로 구분될 수 있다.
- [0012] 한편, 발광 재료로서 하나의 물질만 사용하는 경우 분자간 상호 작용에 의하여 최대 발광 파장이 장파장으로 이동하고 색순도가 떨어지거나 발광 감쇄 효과로 소자의 효율이 감소되는 문제가 발생하므로, 색순도의 증가와 에너지 전이를 통한 발광 효율과 안정성을 증가시키기 위하여 발광 재료로서 호스트/도판트 계를 사용할 수 있다.
- [0013] 유기발광소자가 전술한 우수한 특징들을 충분히 발휘하기 위해서는 소자 내 유기물층을 이루는 물질, 예컨대 정공주입 물질, 정공수송 물질, 발광 물질, 전자수송 물질, 전자주입 물질, 발광 재료 중 호스트 및/또는 도판트 등이 안정하고 효율적인 재료에 의하여 뒷받침되는 것이 선행되어야 하며, 아직까지 안정하고 효율적인 유기발광소자용 유기물층 재료의 개발이 충분히 이루어지지 않은 상태이며, 따라서 새로운 재료의 개발이 계속 요구되고 있다. 이와 같은 재료 개발의 필요성은 전술한 다른 유기광전자소자에서도 마찬가지이다.
- [0014] 또한, 저분자 유기발광소자는 진공 증착법에 의해 박막의 형태로 소자를 제조하므로 효율 및 수명성능이 좋으며, 고분자 유기 발광 소자는 잉크젯(Inkjet) 또는 스핀코팅(spin coating)법을 사용하여 초기 투자비가 적고 대면적화가 유리한 장점이 있다.
- [0015] 저분자 유기발광소자 및 고분자 유기발광소자는 모두 자체발광, 고속응답, 광시야각, 초박형, 고화질, 내구성, 넓은 구동온도범위 등의 장점을 가지고 있어 차세대 디스플레이로 주목을 받고 있다. 특히 기존의 LCD(liquid crystal display)와 비교하여 자체발광형으로서 어두운 곳이나 외부의 빛이 들어와도 시안성이 좋으며, 백라이트가 필요 없어 LCD의 1/3수준으로 두께 및 무게를 줄일 수 있다.
- [0016] 또한, 응답속도가 LCD에 비해 1000배 이상 빠른 마이크로 초 단위여서 잔상이 없는 완벽한 동영상 구현할 수 있다. 따라서, 최근 본격적인 멀티미디어 시대에 맞춰 최적의 디스플레이로 각광받을 것으로 기대되며, 이러한 장점을 바탕으로 1980년대 후반 최초 개발 이후 효율 80배, 수명 100배 이상에 이르는 급격한 기술발전을 이루어 왔고, 최근에는 40인치 유기발광소자 패널이 발표되는 등 대형화가 급속히 진행되고 있다.
- [0017] 대형화를 위해서는 발광 효율의 증대 및 소자의 수명 향상이 수반되어야 한다. 이때, 소자의 발광 효율은 발광층 내의 정공과 전자의 결합이 원활히 이루어져야 한다. 그러나, 일반적으로 유기물의 전자 이동도는 정공 이동도에 비해 느리므로, 발광층 내의 정공과 전자의 결합이 효율적으로 이루어지기 위해서는, 효율적인 전자 수송층을 사용하여 음극으로부터의 전자 주입 및 이동도를 높이는 동시에, 정공의 이동을 차단할 수 있어야 한다.
- [0018] 또한, 수명 향상을 위해서는 소자의 구동시 발생하는 줄열(Joule heat)로 인해 재료가 결정화되는 것을 방지하여야 한다. 따라서, 전자의 주입 및 이동성이 우수하며, 전기화학적 안정성이 높은 유기 화합물에 대한 개발이 필요하다.

발명의 내용

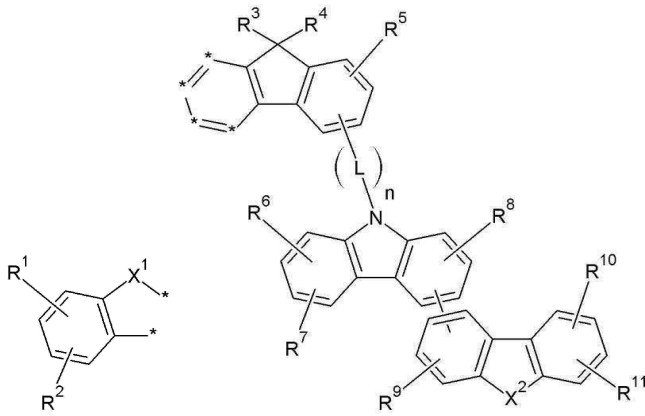
해결하려는 과제

- [0019] 정공 주입 및 수송 역할 또는 전자 주입 및 수송역할을 할 수 있고, 적절한 도판트와 함께 발광 호스트로서의 역할을 할 수 있는 유기광전자소자용 화합물을 제공한다.
- [0020] 수명, 효율, 구동전압, 전기화학적 안정성 및 열적 안정성이 우수한 유기발광소자 및 이를 포함하는 표시장치를 제공하고자 한다.

과제의 해결 수단

- [0021] 본 발명의 일 구현예에서는, 하기 화학식 1 및 3의 조합으로 표시되는 유기광전자소자용 화합물을 제공한다.

[0022] [화학식 1] [화학식 3]

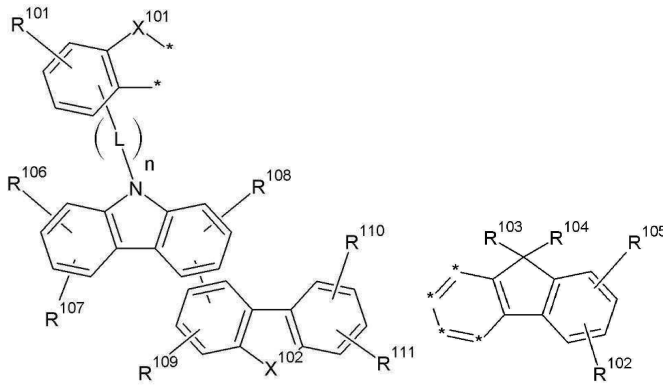


[0023]

[0024] 상기 화학식 1 및 3에서, X^1 은 -O- 또는 -S-이고, X^2 는 -O-, -S-, 또는 -NR'-이며, 상기 R'는 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C10 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기 또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴기이고, R^1 내지 R^{11} 는 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C10 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기 또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴기이고, L은 단일결합, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아틸렌기 또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아틸렌기이고, n은 0 내지 3의 정수 중 어느 하나이고, 상기 화학식 1의 두개의 *는 상기 화학식 3의 네개의 * 중 인접한 두개와 결합하여 융합고리를 형성한다.

[0025] 본 발명의 다른 일 구현예에서는, 하기 화학식 AD-3 및 AD-2의 조합으로 표시되는 유기광전자소자용 화합물을 제공한다.

[0026] [화학식 AD-3] [화학식 AD-2]



[0027]

[0028] 상기 화학식 AD-3 및 AD-2에서, X^{101} 은 -O- 또는 -S-이고, X^{102} 는 -O-, -S-, 또는 -NR'-이며, 상기 R'는 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C10 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기 또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴기이고, R^{101} 내지 R^{111} 는 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C10 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기 또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴기이고, L은 단일결합, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아틸렌기 또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아틸렌기이고, n은 0 내지 3의 정수 중 어느 하나이고, 상기 화학식 AD-3의 두개의 *는 상기 화학식 AD-2의 네개의 * 중 인접한 두개와 결합하여 융합고리를 형성한다.

[0029] 본 발명의 또 다른 일 구현예에서는, 양극, 음극 및 상기 양극과 음극 사이에 개재되는 적어도 한 층 이상의 유기박막층을 포함하는 유기발광소자에 있어서, 상기 유기박막층 중 적어도 어느 한 층은 전술한 유기광전자소자용 화합물을 포함하는 것인 유기발광소자를 제공한다.

[0030] 본 발명의 또 다른 일 구현예에서는, 전술한 유기발광소자를 포함하는 표시장치를 제공한다.

발명의 효과

- [0031] 높은 정공 또는 전자 수송성, 막 안정성 열적 안정성 및 높은 3중항 여기에너지를 가지는 화합물을 제공할 수 있다.
- [0032] 이러한 화합물은 발광층의 정공 주입/수송 재료, 호스트 재료, 또는 전자 주입/수송 재료로 이용될 수 있다. 이를 이용한 유기광전자소자는 우수한 전기화학적 및 열적 안정성을 가지게 되어 수명 특성이 우수하고, 낮은 구동전압에서도 높은 발광효율을 가질 수 있다.

도면의 간단한 설명

- [0033] 도 1 및 도 2는 본 발명의 일 구현예에 따른 유기광전자소자용 화합물을 이용하여 제조될 수 있는 유기발광소자에 대한 다양한 구현예들을 나타내는 단면도이다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

- [0034] 이하, 본 발명의 구현예를 상세히 설명하기로 한다. 다만, 이는 예시로서 제시되는 것으로, 이에 의해 본 발명이 제한되지는 않으며 본 발명은 후술할 청구범위의 범주에 의해 정의될 뿐이다.
- [0035] 본 명세서에서 "치환"이란 별도의 정의가 없는 한, 치환기 또는 화합물 중의 적어도 하나의 수소가 중수소, 할로젠기, 히드록시기, 아미노기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 아민기, 니트로기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C40 실릴기, C1 내지 C30 알킬기, C1 내지 C10 알킬실릴기, C3 내지 C30 시클로알킬기, C6 내지 C30 아릴기, C1 내지 C20 알콕시기, 플루오로기, 트리플루오로메틸기 등의 C1 내지 C10 트리플루오로알킬기 또는 시아노기로 치환된 것을 의미한다.
- [0036] 또한 상기 치환된 할로젠기, 히드록시기, 아미노기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 아민기, 니트로기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C40 실릴기, C1 내지 C30 알킬기, C1 내지 C10 알킬실릴기, C3 내지 C30 시클로알킬기, C6 내지 C30 아릴기, C1 내지 C20 알콕시기, 플루오로기, 트리플루오로메틸기 등의 C1 내지 C10 트리플루오로알킬기 또는 시아노기 중 인접한 두 개의 치환기가 융합되어 고리를 형성할 수도 있다.
- [0037] 본 명세서에서 "헤테로"란 별도의 정의가 없는 한, 하나의 작용기 내에 N, O, S 및 P로 이루어진 군에서 선택되는 헤테로 원자를 1 내지 3개 함유하고, 나머지는 탄소인 것을 의미한다.
- [0038] 본 명세서에서 "알킬(alkyl)기"이란 별도의 정의가 없는 한, 지방족 탄화수소기를 의미한다. 알킬기는 어떠한 이중결합이나 삼중결합을 포함하고 있지 않은 "포화 알킬(saturated alkyl)기"일 수 있다.
- [0039] 상기 알킬기는 분지형, 직쇄형 또는 환형일 수 있다.
- [0040] "알케닐(alkenyl)기"는 적어도 두 개의 탄소원자가 적어도 하나의 탄소-탄소 이중 결합으로 이루어진 작용기를 의미하며, "알키닐(alkynyl)기"는 적어도 두 개의 탄소원자가 적어도 하나의 탄소-탄소 삼중 결합으로 이루어진 작용기를 의미한다.
- [0041] 알킬기는 C1 내지 C20인 알킬기일 수 있다. 보다 구체적으로 알킬기는 C1 내지 C10 알킬기 또는 C1 내지 C6 알킬기일 수도 있다.
- [0042] 예를 들어, C1 내지 C4 알킬기는 알킬쇄에 1 내지 4 개의 탄소원자, 즉, 알킬쇄는 메틸, 에틸, 프로필, 이소-프로필, n-부틸, 이소-부틸, sec-부틸 및 t-부틸로 이루어진 군에서 선택됨을 나타낸다.
- [0043] 구체적인 예를 들어 상기 알킬기는 메틸기, 에틸기, 프로필기, 이소프로필기, 부틸기, 이소부틸기, t-부틸기, 펜틸기, 헥실기, 시클로프로필기, 시클로부틸기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기 등을 의미한다.
- [0044] "방향족기"는 고리 형태인 작용기의 모든 원소가 p-오비탈을 가지고 있으며, 이들 p-오비탈이 공액(conjugation)을 형성하고 있는 작용기를 의미한다. 구체적인 예로 아릴기와 헤테로아릴기가 있다.
- [0045] "아릴(aryl)기"는 모노시클릭 또는 융합 고리 폴리시클릭(즉, 탄소원자들의 인접한 쌍들을 나눠 가지는 고리) 작용기를 포함한다.
- [0046] "헤테로아릴(heteroaryl)기"는 아릴기 내에 N, O, S 및 P로 이루어진 군에서 선택되는 헤테로 원자를 1 내지 3개 함유하고, 나머지는 탄소인 것을 의미한다. 상기 헤테로아릴기가 융합고리인 경우, 각각의 고리마다 상기 헤테로 원자를 1 내지 3개 포함할 수 있다.

[0047] 본 명세서에서 카바졸계 유도체라함은 치환 또는 비치환된 카바졸릴기의 질소원자가 질소가 아닌 헤테로 원자 또는 탄소로 치환된 구조를 의미한다. 구체적인 예를 들어, 디벤조퓨란(디벤조퓨라닐기), 디벤조티오펜(디벤조티오페닐기), 플루오렌(플루오레닐기) 등 이다.

[0048] 본 명세서에서, 정공 특성이란, HOMO 준위를 따라 전도 특성을 가져 양극에서 형성된 정공의 발광층으로의 주입 및 발광층에서의 이동을 용이하게 하는 특성을 의미한다.

[0049] 또한 전자 특성이란, LUMO 준위를 따라 전도 특성을 가져 음극에서 형성된 전자의 발광층으로의 주입 및 발광층에서의 이동을 용이하게 하는 특성을 의미한다.

[0050] 본 명세서에서, 벤조티오펜계 유도체는 벤조티오펜 화합물에서 S 원자가 S가 아닌 헤테로원자로 치환된 구조를 포함한다. 구체적인 예를 들어, 상기 헤테로원자는 -O-, -S-, -S(O)-, -S(O)₂- 또는 -NR'-를 포함할 수 있다.

[0051] 본 발명의 일 구현예에 따른 유기광전자소자용 화합물은 플루오렌계 융합 고리 코어에 치환 또는 비치환된 카바졸릴기를 결합한 구조일 수 있다.

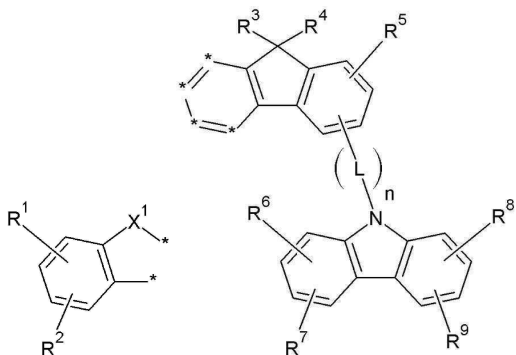
[0052] 상기 코어 구조는 유기광전자소자의 발광 재료, 정공주입재료 또는 정공수송재료로 이용될 수 있다. 특히 정공주입재료 또는 정공수송재료에 적합할 수 있다.

[0053] 또한, 상기 유기광전자소자용 화합물은 코어 부분과 코어 부분에 치환된 치환기에 다양한 또 다른 치환기를 도입함으로써 다양한 에너지 밴드 갭을 갖는 화합물이 될 수 있다.

[0054] 상기 화합물의 치환기에 따라 적절한 에너지 준위를 가지는 화합물을 유기광전자소자에 사용함으로써, 정공전달 능력 또는 전자전달 능력이 강화되어 효율 및 구동전압 면에서 우수한 효과를 가지고, 전기화학적 및 열적 안정성이 뛰어나 유기광전자소자 구동시 수명 특성을 향상시킬 수 있다.

[0055] 본 발명의 일 구현예에 따르면, 상기 유기광전자소자용 화합물은 하기 화학식 1 및 2의 조합으로 표시되는 유기광전자소자용 화합물일 수 있다.

[0056] [화학식 1] [화학식 2]



[0057] 상기 화학식 1 및 2에서, X¹은 -O-, -S-, -S(O)- 또는 -S(O)₂-이고, R¹ 내지 R⁹는 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C10 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기 또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴기이고, L은 단일결합, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C10 알케닐렌기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C10 알키닐렌기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴렌기 또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴렌기이고, n은 0 내지 3의 정수 중 어느 하나이고, 상기 화학식 1의 두개의 *는 상기 화학식 2의 네개의 * 중 인접한 두개와 결합하여 융합고리를 형성한다.

[0059] 상기 카바졸릴기의 결합으로, 상기 플루오렌계 융합 코어 내 전자 및 정공이 화합물 전체로 용이하게 이동될 수 있다. 이로부터 상기 유기광전자소자용 화합물을 이용한 소자의 수명 특성이 개선될 수 있다. 또한 카바졸릴기의 아민(N)과 직접 결합 할 경우 HOMO값을 크게 낮출 수 있으며 이를 통해 밴드갭이 큰 유기화합물을 합성할 수 있다. 이로부터 유기광전자 소자용 화합물을 이용한 소자에 다양하게 적용할 수 있다.

[0060] 상기 X¹은 -O-, -S-, -S(O)- 또는 -S(O)₂-일 수 있다. 상기 X¹이 -O-인 경우, 소자의 수명 특성에 보다 도움이 될 수 있으며, 상기 X¹이 -S-인 경우, 소자의 효율 특성에 보다 도움이 될 수 있다.

[0061] 보다 구체적으로, 상기 X^1 은 -O- 또는 -S-일 수 있다. 이러한 경우 -O- 와 -S-는 비공유전자쌍을 가지고 있어 전극과 상호작용이 용이하기 때문에 이동도가 높다. 이러한 이유로 구동 전압이 저하 되는 효과가 있다. 동시에 입체 장애성이 있어서 분자사이의 상호작용이 작아 결정화가 억제되기 때문에 소자제조 수율이 향상되며, 소자의 수명을 길게할 수 있다.

[0062] 상기 R^3 및 R^4 는 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기일 수 있다. 보다 구체적으로 페닐기일 수 있다. 상기 R^3 및 R^4 가 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기인 경우, 화합물의 열에 대한 안정성이 개선될 수 있다.

[0063] 또한, 상기 화합물은 입체 장애성을 가지기 때문에 분자 사이의 상호작용이 작아 결정화가 억제될 수 있다. 이로 인해 소자를 제조하는 수율을 향상시킬 수 있다. 또한, 제조된 소자의 수명 특성이 개선될 수 있다.

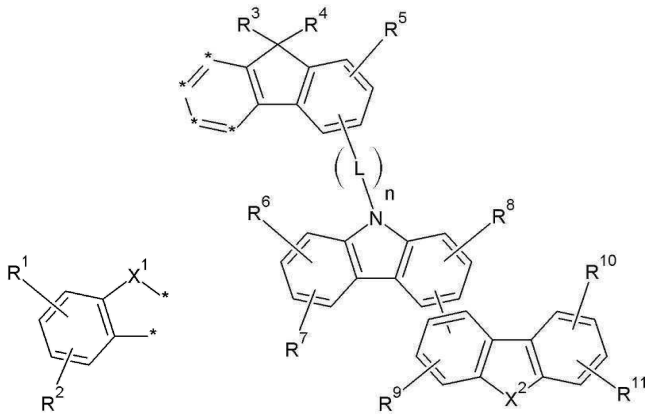
[0064] 또한, 상기 화합물은 비교적 분자량이 크기 때문에, 화합물의 증착시의 분해를 억제할 수 있다.

[0065] 상기 L을 선택적으로 조절하여 화합물 전체의 공액(conjugation) 길이를 결정할 수 있으며, 이로부터 삼중항(triplet) 에너지 밴드갭을 조절할 수 있다. 이를 통해 유기광전소자에서 필요로 하는 재료의 특성을 구현해 낼 수 있다. 또한, 올소, 파라, 메타의 결합위치 변경을 통해서도 삼중항 에너지 밴드갭을 조절할 수 있다.

[0066] 상기 L의 구체적인 예로는 치환 또는 비치환된 페닐렌기, 치환 또는 비치환된 바이페닐렌기, 치환 또는 비치환된 터페닐렌기, 치환 또는 비치환된 나프틸렌기, 치환 또는 비치환된 안트라세닐렌기, 치환 또는 비치환된 페난트릴렌기, 치환 또는 비치환된 피레닐렌기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐렌기, 치환 또는 비치환된 p-터페닐기, 치환 또는 비치환된 m-터페닐기, 치환 또는 비치환된 페릴레닐기 등이다.

[0067] 보다 구체적으로 상기 유기광전소자용 화합물은 하기 화학식 1 및 3의 조합으로 표시될 수 있다.

[0068] [화학식 1] [화학식 3]



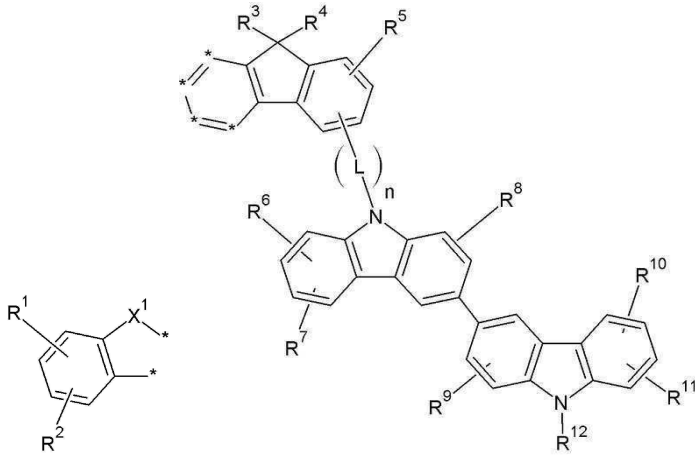
[0069] 상기 화학식 1 및 3에서, X^1 은 -O-, -S-, -S(O)- 또는 -S(O)₂-이고, X^2 는 -O-, -S-, -S(O)-, -S(O)₂-, -CR'R''- 또는 -NR'-이며, 상기 R' 및 R''는 독립적으로, 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C10 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기 또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴기이고, R^1 내지 R^{11} 는 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C10 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기 또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴기이고, L은 단일결합, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C10 알케닐렌기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C10 알킬닐렌기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴렌기 또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴렌기이고, n은 0 내지 3의 정수 중 어느 하나이고, 상기 화학식 1의 두개의 *는 상기 화학식 3의 네개의 * 중 인접한 두개와 결합하여 융합고리를 형성한다.

[0071] 상기 유기광전소자용 화합물은 상기 화학식 1 및 3의 조합으로 표시되는 경우, 카바졸의 결합을 통해 상기 플루오렌 융합구조의 전자, 정공이 화합물 전체로 넓게 퍼질 수 있어 소자의 수명이 길어질 수 있다.

[0072] 또한, 상기 화학식 3의 구조를 통해 소자의 효율 특성을 보완할 수 있다.

[0073] 보다 구체적으로, 상기 유기광전소자용 화합물은 하기 화학식 1 및 4의 조합으로 표시될 수 있다.

[0074] [화학식 1] [화학식 4]



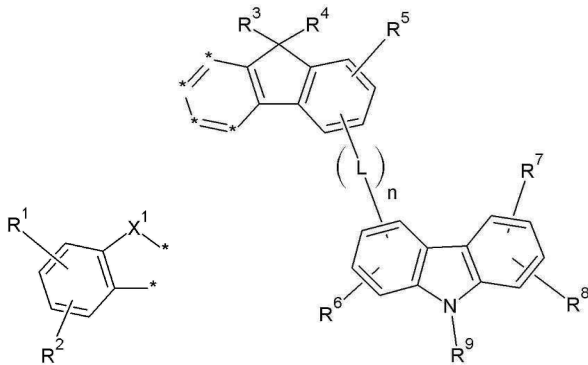
[0075]

[0076] 상기 화학식 1 및 4에서, X^1 은 -O-, -S-, -S(O)- 또는 -S(O)₂-이고, R¹ 내지 R¹²는 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C10 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기 또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴기이고, L은 단일결합, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C10 알케닐렌기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C10 알키닐렌기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴렌기 또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴렌기이고, n은 0 내지 3의 정수 중 어느 하나이고, 상기 화학식 1의 두개의 *는 상기 화학식 4의 네개의 * 중 인접한 두개와 결합하여 융합고리를 형성한다.

[0077] 상기 유기광전자소자용 화합물은 상기 화학식 1 및 4의 조합으로 표시되는 경우, 비스카바졸 구조를 포함할 수 있다. 보다 구체적으로 화학식 4에 카바졸 구조를 포함할 경우 삼중항 에너지를 획기적으로 증가 시킬 수 있으며, 이를 통해 인광소자의 발광효율을 개선할 수 있다.

[0078] 본 발명의 다른 일 구현예에서는, 하기 화학식 1 및 5의 조합으로 표시되는 유기광전자소자용 화합물을 제공한다.

[0079] [화학식 1] [화학식 5]



[0080]

[0081] 상기 화학식 1 및 5에서, X^1 은 -O-, -S-, -S(O)- 또는 -S(O)₂-이고, R¹ 내지 R⁹는 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C10 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기 또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴기이고, L은 단일결합, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C10 알케닐렌기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C10 알키닐렌기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴렌기 또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴렌기이고, n은 0 내지 3의 정수 중 어느 하나이고, 상기 화학식 1의 두개의 *는 상기 화학식 5의 네개의 * 중 인접한 두개와 결합하여 융합고리를 형성한다.

[0082] 상기 화학식 1 및 5의 조합으로 표시되는 유기광전자소자용 화합물과 전술한 화학식 1 및 2의 조합으로 표시되는 유기광전자소자용 화합물은 카바졸릴기의 결합위치에 차이가 있다.

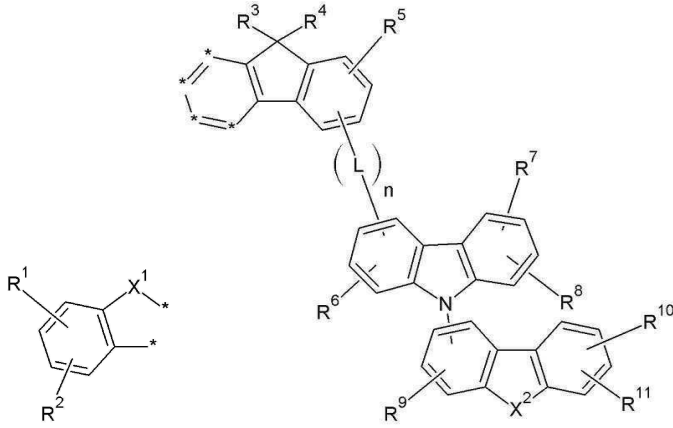
[0083] 상기 화학식 1 및 5의 조합으로 표시되는 유기광전자소자용 화합물의 경우, 전술한 구조보다 높은 HOMO값을 가지는 화합물을 제조할 수 있다. 또한 상기 화학식 1 및 5의 조합으로 표시되는 구조는 소자의 효율 및 수명 특

성을 개선할 수 있다.

[0084] 기타 치환기에 대한 설명은 전술한 화학식 1 및 2의 조합으로 표시되는 유기광전자소자용 화합물과 동일하기 때문에 생략하도록 한다.

[0085] 보다 구체적으로, 상기 유기광전자소자용 화합물은 하기 화학식 1 및 6의 조합으로 표시될 수 있다.

[0086] [화학식 1] [화학식 6]

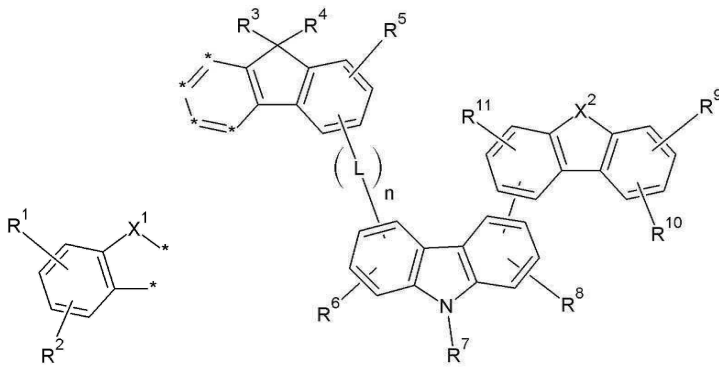


[0087]

[0088] 상기 화학식 1 및 6에서, X^1 은 -O-, -S-, -S(O)- 또는 -S(O)₂-이고, X^2 는 -O-, -S-, -S(O)-, -CR'R''-, -S(O)₂- 또는 -NR'-이며, 상기 R' 및 R''는 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C10 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기 또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴기이고, R¹ 내지 R¹¹는 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C10 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기 또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴기이고, L은 단일결합, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C10 알케닐렌기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C10 알킬닐렌기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아틸렌기 또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아틸렌기이고, n은 0 내지 3의 정수 중 어느 하나이고, 상기 화학식 1의 두개의 *는 상기 화학식 6의 네개의 * 중 인접한 두개와 결합하여 융합고리를 형성한다.

[0089] 보다 구체적으로, 상기 유기광전자소자용 화합물은 하기 화학식 1 및 7의 조합으로 표시될 수 있다.

[0090] [화학식 1] [화학식 7]



[0091]

[0092] 상기 화학식 1 및 7에서, X^1 은 -O-, -S-, -S(O)- 또는 -S(O)₂-이고, X^2 는 -O-, -S-, -S(O)-, -S(O)₂-, -CR'R''- 또는 -NR'-이며, 상기 R' 및 R''는 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C10 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기 또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴기이고, R¹ 내지 R¹¹는 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C10 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기 또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴기이고, L은 단일결합, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C10 알케닐렌기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C10 알킬닐렌기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아틸렌기 또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아틸렌기이고, n은 0 내지 3의 정수 중 어느 하나이고, 상기 화학식 1의 두개의 *는 상기 화학식 7의 네개의 * 중 인접한 두개와 결합하여 융합고리를 형성한다.

[0093] 상기 유기광전자소자용 화합물은 하기 화학식 1 및 6의 조합으로 표시되는 화합물과, 상기 유기광전자소자용 화합물은 하기 화학식 1 및 7의 조합으로 표시되는 화합물과 같이 추가적인 카바졸릴계 치환기가 결합되는 경우, 삼중항 에너지를 획기적으로 증가시킬 수 있으며, 이를 통해 인광소자의 발광효율을 개선할 수 있다.

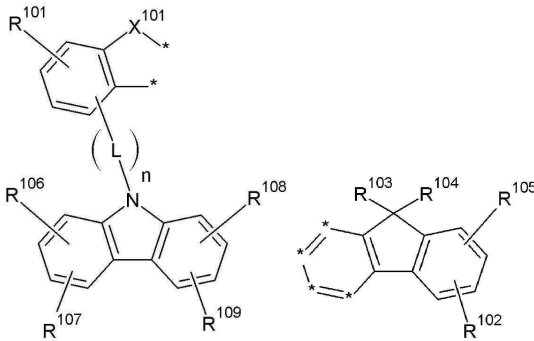
[0094] 상기 R¹ 내지 R⁹는 독립적으로 치환 또는 비치환된 페닐기, 치환 또는 비치환된 나프틸기, 치환 또는 비치환된 안트라세닐기, 치환 또는 비치환된 페난트릴기, 치환 또는 비치환된 나프타세닐기, 치환 또는 비치환된 피레닐기, 치환 또는 비치환된 바이페닐일기, 치환 또는 비치환된 p-터페닐기, 치환 또는 비치환된 m-터페닐기, 치환 또는 비치환된 크리세닐기, 치환 또는 비치환된 트리페닐레닐기, 치환 또는 비치환된 페릴레닐기, 치환 또는 비치환된 인데닐기, 치환 또는 비치환된 퓨라닐기, 치환 또는 비치환된 티오펜일기, 치환 또는 비치환된 피롤릴기, 치환 또는 비치환된 피라졸릴기, 치환 또는 비치환된 이미다졸일기, 치환 또는 비치환된 트리아졸일기, 치환 또는 비치환된 옥사졸일기, 치환 또는 비치환된 티아졸일기, 치환 또는 비치환된 옥사디아졸일기, 치환 또는 비치환된 티아디아졸일기, 치환 또는 비치환된 피리딜기, 치환 또는 비치환된 피리미디닐기, 치환 또는 비치환된 피라지닐기, 치환 또는 비치환된 트리아지닐기, 치환 또는 비치환된 벤조퓨라닐기, 치환 또는 비치환된 벤조티오펜일기, 치환 또는 비치환된 벤즈이미다졸일기, 치환 또는 비치환된 인돌일기, 치환 또는 비치환된 퀴놀리닐기, 치환 또는 비치환된 이소퀴놀리닐기, 치환 또는 비치환된 퀴나졸리닐기, 치환 또는 비치환된 퀴녹살리닐기, 치환 또는 비치환된 나프티리디닐기, 치환 또는 비치환된 벤즈옥사진일기, 치환 또는 비치환된 벤즈티아진일기, 치환 또는 비치환된 아크리디닐기, 치환 또는 비치환된 페나진일기, 치환 또는 비치환된 페노티아진일기, 치환 또는 비치환된 페녹사진일기 또는 이들의 조합일 수 있으나, 이에 제한되지는 않는다.

[0095] 상기 R¹ 내지 R⁹의 치환기는 전술한 모든 화학식의 R¹ 내지 R¹¹에 모두 적용될 수 있다.

[0096] 상기 치환기로 인해 상기 유기광전자소자용 화합물은 발광, 정공 또는 전자 특성; 막 안정성; 열적 안정성 및 높은 3중항 여기에너지(T1)를 가질 수 있다.

[0097] 본 발명의 또 다른 일 구현예에서는, 하기 화학식 AD-1 및 AD-2의 조합으로 표시되는 유기광전자소자용 화합물을 제공한다.

[0098] [화학식 AD-1] [화학식 AD-2]



[0099]

[0100] 상기 화학식 AD-1 및 AD-2에서, X¹⁰¹은 -O-, -S-, -S(O)- 또는 -S(O)₂-이고, R¹⁰¹ 내지 R¹⁰⁹는 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C10 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기 또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴기이고, L은 단일결합, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C10 알케닐렌기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C10 알킬닐렌기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴렌기 또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴렌기이고, n은 0 내지 3의 정수 중 어느 하나이고, 상기 화학식 AD-1의 두개의 *는 상기 화학식 AD-2의 네개의 * 중 인접한 두개와 결합하여 융합고리를 형성한다.

[0101] 상기 화학식 AD-1 및 AD-2의 조합으로 표시되는 화합물은 전술한 본 발명의 일 구현예인 화학식 1 및 2의 조합으로 표시되는 화합물에서 카바졸릴기의 결합 위치가 변경된 것이다.

[0102] 상기 화학식 1의 정공형성 능력은 화학식 2에 비해 높은 편이기 때문에 보다 좋은 정공특성을 가지게 하는 것이 좋으나 다양한 소자에 적용하기 위해서는 화합물의 정공 형성 능력을 조절할 수 있어야 한다.

[0103] 이럴때 상기 화학식의 AD-1 및 AD-2의 조합으로 카바졸릴기의 결합위치를 바꾸면서 조절할 수 있다. 또한 정공/전자 이동도가 높은 AD-1기를 카바졸릴기와 직접연결 함으로써 분자내 전체 정공/전자 이동도를 높게 할 수 있

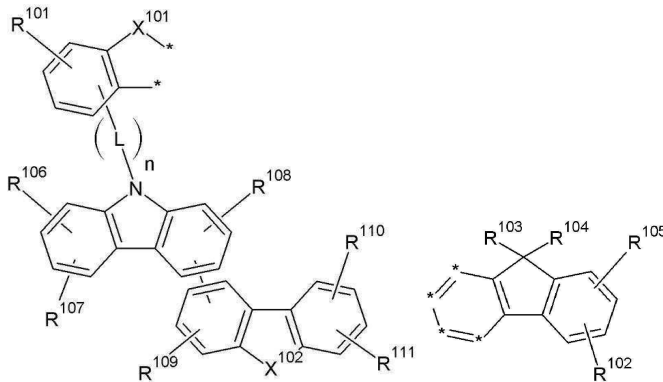
다.

[0104] 나머지 치환기에 대한 설명은 전술한 본 발명의 일 구현예인 화학식 1 및 2의 조합으로 표시되는 화합물에서과 유사하기 때문에 생략하기로 한다.

[0105] 보다 구체적으로, 상기 유기광전자소자용 화합물은 하기 화학식 AD-3 및 AD-2의 조합으로 표시될 수 있다.

[0106] 상기 화학식 AD-1과 AD-2의 조합으로 정공/전자 이동도를 조절하기에는 한계가 있다. 이는 높은 전자 이동도를 가지지만 소자에 따라 더 높은 이동도가 필요로 할 수 있기 때문이다. 따라서, 카바졸릴기에 정공형성 능력이 좋은 카바졸릴기를 더하여 정공형성이 더 잘되게 하여 정공의 수송능력을 올리거나, -O-, 또는 -S-가 치환된 치환기를 이용하여 더 좋은 정공/전자 이동도를 가지게 할 수 있다. 이러한 구조적 변화를 통해 상기 화합물을 더 많은 소자에 널리 적용할 수 있다.

[0107] [화학식 AD-3] [화학식 AD-2]



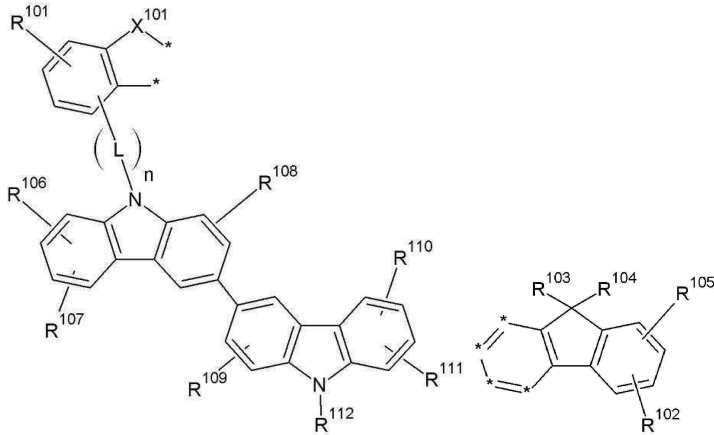
[0108]

[0109] 상기 화학식 AD-3 및 AD-2에서, X^{101} 은 -O-, -S-, -S(O)- 또는 -S(O)₂-이고, X^{102} 는 -O-, -S-, -S(O)-, -S(O)₂-, -CR'R''- 또는 -NR'-이며, 상기 R' 및 R''는 독립적으로, 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C10 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기 또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴기이고, R¹⁰¹ 내지 R¹¹¹는 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C10 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기 또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴기이고, L은 단일결합, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C10 알케닐렌기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C10 알키닐렌기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아틸렌기 또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아틸렌기이고, n은 0 내지 3의 정수 중 어느 하나이고, 상기 화학식 AD-3의 두개의 *는 상기 화학식 AD-2의 네개의 * 중 인접한 두개와 결합하여 융합고리를 형성한다.

[0110] 보다 구체적으로, 상기 유기광전자소자용 화합물은 하기 화학식 AD-4 및 AD-2의 조합으로 표시될 수 있다.

[0111] 상기 화학식 AD-3 및 AD-2의 조합으로도 이동도가 부족할 경우 상기 R¹¹²에 이동도가 빠른 치환기를 연결해 정공/전자 이동도를 높일 수 있다. 또한 카바졸릴기의 N위치에 어떤 치환체를 붙이는 것에 따라 전체 분자내의 HOMO 준위를 용이하게 변화시킬 수 있다. 따라서, 상기 AD-3 및 AD-2의 조합으로 HOMO준위에 변화를 주기 어려울 경우 AD-4 및 AD-2의 조합으로 이를 해결 할 수 있다.

[0112] [화학식 AD-4] [화학식 AD-2]



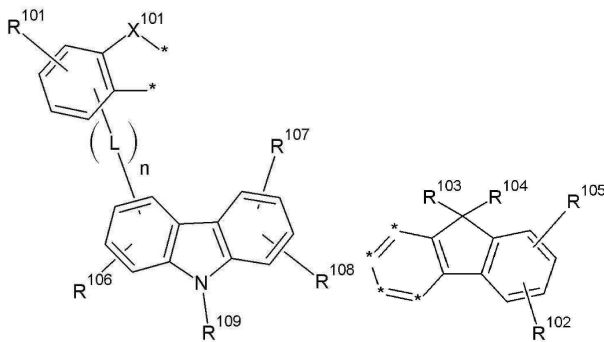
[0113]

[0114] 상기 화학식 AD-4 및 AD-2에서, X¹⁰¹은 -O-, -S-, -S(O)- 또는 -S(O)₂-이고, R¹⁰¹ 내지 R¹¹²는 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C10 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기 또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴기이고, L은 단일결합, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C10 알케닐렌기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C10 알킬닐렌기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴렌기 또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴렌기이고, n은 0 내지 3의 정수 중 어느 하나이고, 상기 화학식 AD-4의 두개의 *는 상기 화학식 AD-2의 네개의 * 중 인접한 두개와 결합하여 융합고리를 형성한다.

[0115] 본 발명의 또 다른 일 구현예에서는, 하기 화학식 AD-5 및 AD-2의 조합으로 표시되는 유기광전자소자용 화합물을 제공한다.

[0116] 다양한 유기발광소자에 적용하기 위해서는 분자 내의 밴드갭을 조절할 수 있는 부분이 필요하다. 하기 화학식 AD-5 및 AD-2의 조합처럼 카바졸릴기의 N방향이 아닌 다른부분으로 연결하게 되면 분자내의 HOMO준위를 올릴 수 있다. 예를 들어 카바졸 N결합의 HOMO준위가 -5.3 eV 내지 -5.5 eV 정도 나온다고 하면 하기 화학식의 경우 -5.0 eV 내지 -5.2 eV 정도 나올 수 있다.

[0117] [화학식 AD-5] [화학식 AD-2]



[0118]

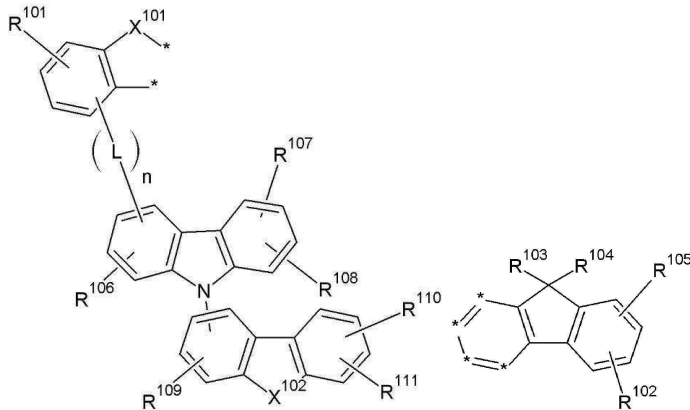
[0119] 상기 화학식 AD-5 및 AD-2에서, X¹⁰¹은 -O-, -S-, -S(O)- 또는 -S(O)₂-이고, R¹⁰¹ 내지 R¹⁰⁹는 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C10 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기 또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴기이고, L은 단일결합, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C10 알케닐렌기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C10 알킬닐렌기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴렌기 또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴렌기이고, n은 0 내지 3의 정수 중 어느 하나이고, 상기 화학식 AD-5의 두개의 *는 상기 화학식 AD-2의 네개의 * 중 인접한 두개와 결합하여 융합고리를 형성한다.

[0120] 상기 유기광전자소자용 화합물은 하기 화학식 AD-6 및 AD-2의 조합으로 표시될 수 있다.

[0121] 상기 화학식 AD-5 및 AD-2의 조합으로도 이동도가 부족할 경우 R¹⁰²에 이동도가 빠른 치환기를 연결해 정공/전자 이동도를 높일 수 있다. 또한 카바졸릴기의 N위치에 어떤 치환체를 붙이는 것에 따라 전체 분자 내의 HOMO준위

를 용이하게 변화시킬 수 있다. 따라서, 상기 AD-5 및 AD-2의 조합으로 HOMO준위에 변화를 주기 어려운 경우 AD-6 및 AD-2의 조합으로 이를 해결 할 수 있다.

[0122] [화학식 AD-6] [화학식 AD-2]



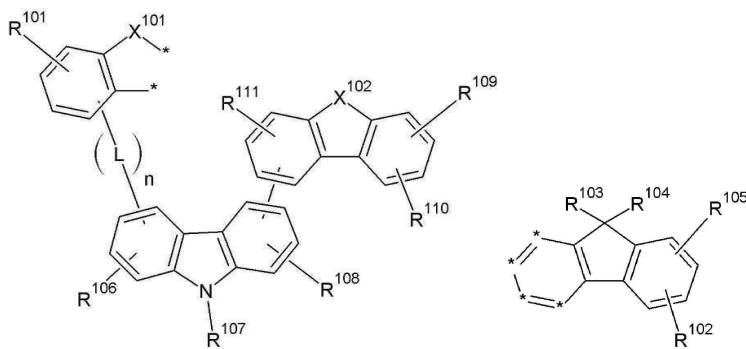
[0123]

[0124] 상기 화학식 AD-6 및 AD-2에서, X^{101} 은 -O-, -S-, -S(O)- 또는 -S(O)₂-이고, X^{102} 는 -O-, -S-, -S(O)-, -CR'R"-, -S(O)₂- 또는 -NR'-이며, 상기 R' 및 R"는 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C10 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기 또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴기이고, R¹⁰¹ 내지 R¹¹¹는 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C10 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기 또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴기이고, L은 단일결합, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C10 알케닐렌기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C10 알킬닐렌기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아틸렌기 또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아틸렌기이고, n은 0 내지 3의 정수 중 어느 하나이고, 상기 화학식 AD-6의 두개의 *는 상기 화학식 AD-2의 네개의 * 중 인접한 두개와 결합하여 융합고리를 형성한다.

[0125] 상기 유기광전자소자용 화합물은 하기 화학식 AD-7 및 AD-2의 조합으로 표시될 수 있다.

[0126] 상기 AD-6 및 AD-2의 조합이 정공/전자 이동도를 높일 수 있는 변화의 조합이라면 하기 화학식 AD-7 및 AD-2의 조합은 정공 형성 능력을 크게 올릴 수 있는 조합이다. 보다 구체적으로, 카바졸릴기에 카바졸릴기를 더함으로써 이런 효과를 볼 수 있다.

[0127] [화학식 AD-7] [화학식 AD-2]



[0128]

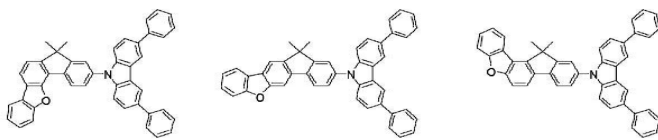
[0129] 상기 화학식 AD-7 및 AD-2에서, X^{101} 은 -O-, -S-, -S(O)- 또는 -S(O)₂-이고, X^{102} 는 -O-, -S-, -S(O)-, -S(O)₂-, -CR'R"- 또는 -NR'-이며, 상기 R' 및 R"는 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C10 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기 또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴기이고, R¹⁰¹ 내지 R¹¹¹는 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C10 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기 또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴기이고, L은 단일결합, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C10 알케닐렌기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C10 알킬닐렌기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아틸렌기 또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아틸렌기이고, n은 0 내지 3의 정수 중 어느 하나이고, 상기 화학식

AD-7의 두개의 *는 상기 화학식 AD-2의 네개의 * 중 인접한 두개와 결합하여 융합고리를 형성한다.

[0130] 상기 R¹⁰¹ 내지 R¹⁰⁹는 독립적으로 치환 또는 비치환된 페닐기, 치환 또는 비치환된 나프틸기, 치환 또는 비치환된 안트라세닐기, 치환 또는 비치환된 페난트릴기, 치환 또는 비치환된 나프타세닐기, 치환 또는 비치환된 피레닐기, 치환 또는 비치환된 바이페닐일기, 치환 또는 비치환된 p-터페닐기, 치환 또는 비치환된 m-터페닐기, 치환 또는 비치환된 크리세닐기, 치환 또는 비치환된 트리페닐레닐기, 치환 또는 비치환된 페틸레닐기, 치환 또는 비치환된 인데닐기, 치환 또는 비치환된 퓨라닐기, 치환 또는 비치환된 티오펜기, 치환 또는 비치환된 피롤릴기, 치환 또는 비치환된 피라졸릴기, 치환 또는 비치환된 이미다졸일기, 치환 또는 비치환된 트리아졸일기, 치환 또는 비치환된 옥사졸일기, 치환 또는 비치환된 티아졸일기, 치환 또는 비치환된 옥사디아졸일기, 치환 또는 비치환된 티아디아졸일기, 치환 또는 비치환된 피리딜기, 치환 또는 비치환된 피리미디닐기, 치환 또는 비치환된 피라지닐기, 치환 또는 비치환된 트리아지닐기, 치환 또는 비치환된 벤조퓨라닐기, 치환 또는 비치환된 벤조티오펜기, 치환 또는 비치환된 벤즈이미다졸일기, 치환 또는 비치환된 인돌일기, 치환 또는 비치환된 퀴놀리닐기, 치환 또는 비치환된 이소퀴놀리닐기, 치환 또는 비치환된 퀴나졸리닐기, 치환 또는 비치환된 퀴녹살리닐기, 치환 또는 비치환된 나프티리디닐기, 치환 또는 비치환된 벤즈옥사진일기, 치환 또는 비치환된 벤즈티아진일기, 치환 또는 비치환된 아크리디닐기, 치환 또는 비치환된 페나진일기, 치환 또는 비치환된 페노티아진일기, 치환 또는 비치환된 페독사진일기 또는 이들의 조합일 수 있다.

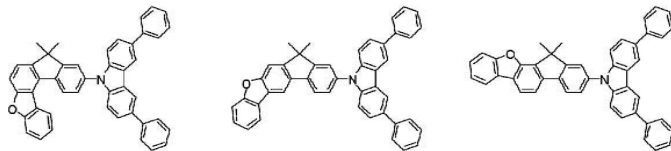
[0131] 보다 구체적으로, 상기 유기광전자소자용 화합물은 하기 화학식 A-1 내지 A-136 중 어느 하나로 표시될 수 있다. 다만, 이에 제한되는 것은 아니다.

[0132] [화학식 A-1] [화학식 A-2] [화학식 A-3]



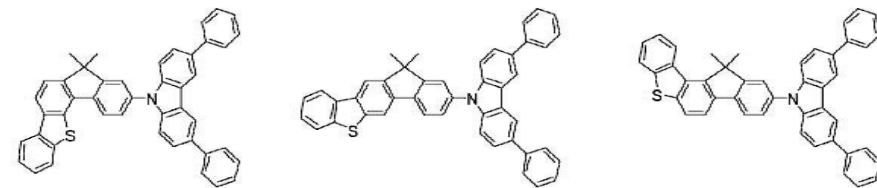
[0133]

[0134] [화학식 A-4] [화학식 A-5] [화학식 A-6]



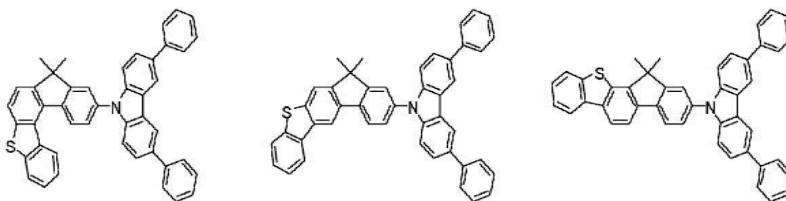
[0135]

[0136] [화학식 A-7] [화학식 A-8] [화학식 A-9]



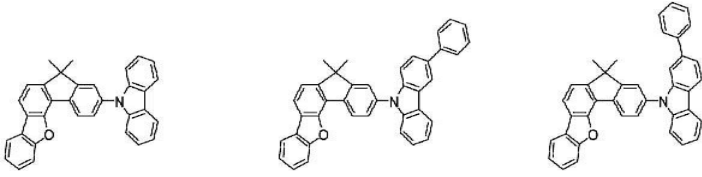
[0137]

[0138] [화학식 A-10] [화학식 A-11] [화학식 A-12]



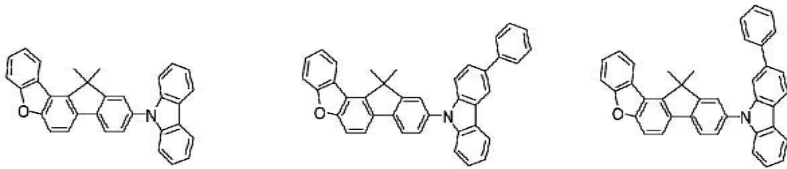
[0139]

[0140] [화학식 A-13] [화학식 A-14] [화학식 A-15]



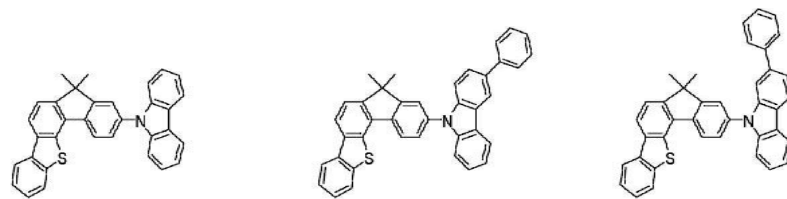
[0141]

[0142] [화학식 A-16] [화학식 A-17] [화학식 A-18]



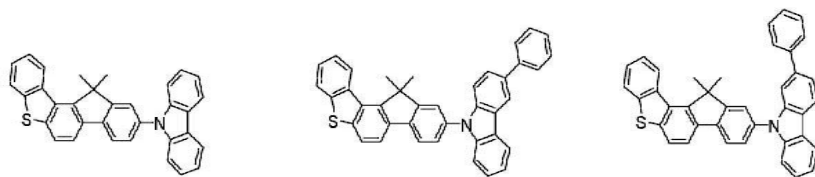
[0143]

[0144] [화학식 A-19] [화학식 A-20] [화학식 A-21]



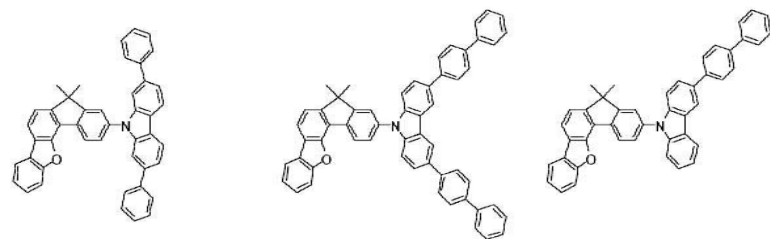
[0145]

[0146] [화학식 A-22] [화학식 A-23] [화학식 A-24]



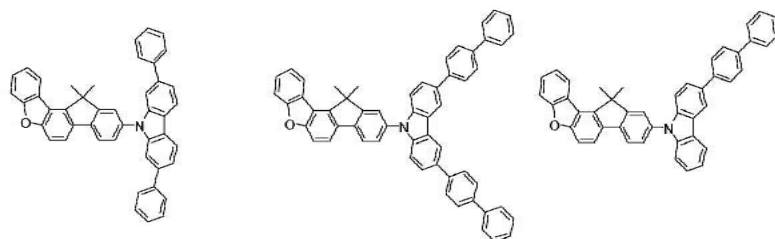
[0147]

[0148] [화학식 A-25] [화학식 A-26] [화학식 A-27]



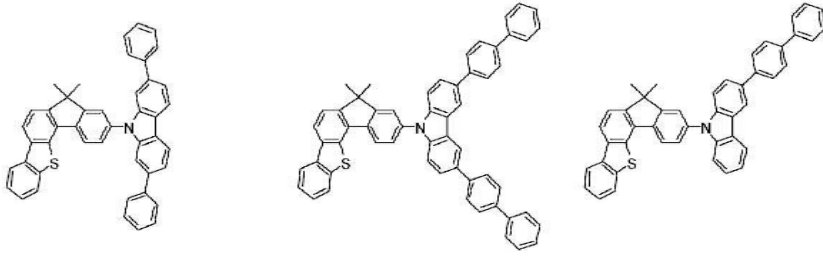
[0149]

[0150] [화학식 A-28] [화학식 A-29] [화학식 A-30]



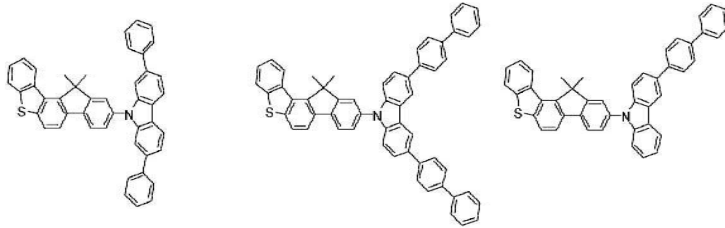
[0151]

[0152] [화학식 A-31] [화학식 A-32] [화학식 A-33]



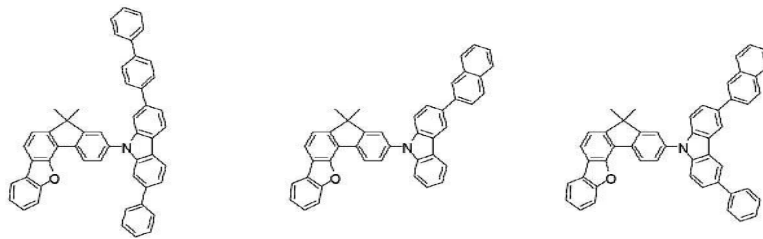
[0153]

[0154] [화학식 A-34] [화학식 A-35] [화학식 A-36]



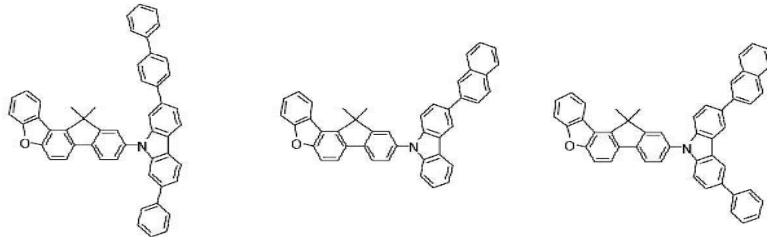
[0155]

[0156] [화학식 A-37] [화학식 A-38] [화학식 A-39]



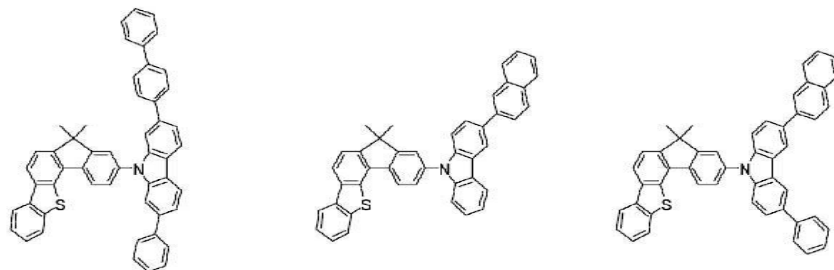
[0157]

[0158] [화학식 A-40] [화학식 A-41] [화학식 A-42]



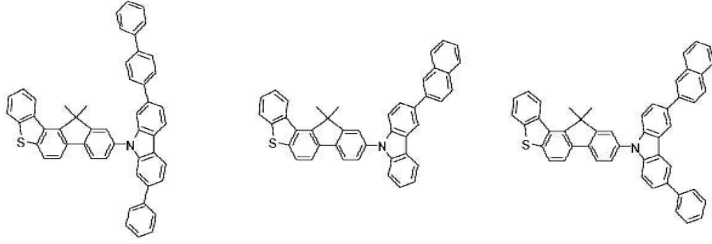
[0159]

[0160] [화학식 A-43] [화학식 A-44] [화학식 A-45]



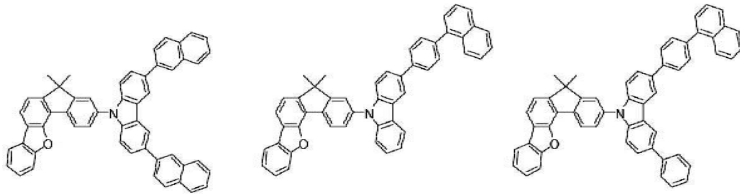
[0161]

[0162] [화학식 A-46] [화학식 A-47] [화학식 A-48]



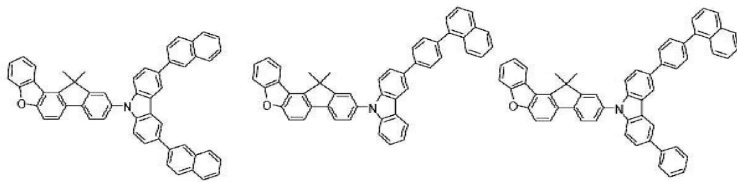
[0163]

[0164] [화학식 A-49] [화학식 A-50] [화학식 A-51]



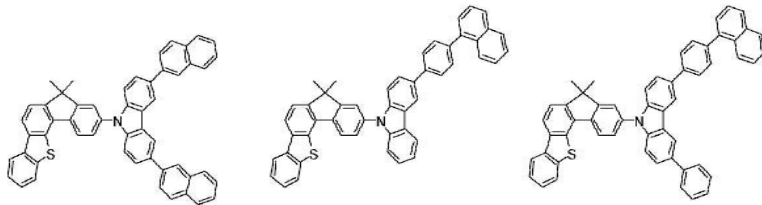
[0165]

[0166] [화학식 A-52] [화학식 A-53] [화학식 A-54]



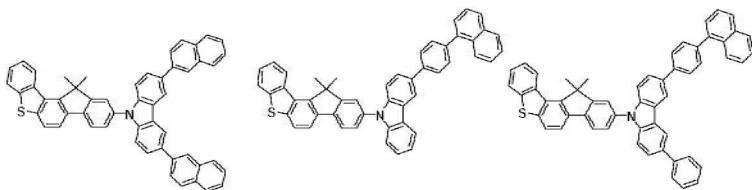
[0167]

[0168] [화학식 A-55] [화학식 A-56] [화학식 A-57]



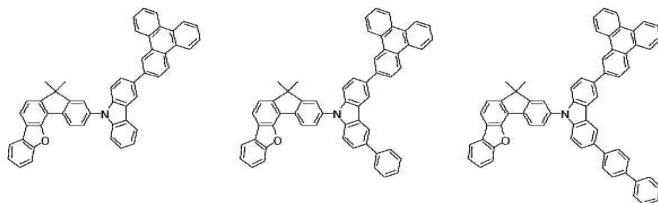
[0169]

[0170] [화학식 A-58] [화학식 A-59] [화학식 A-60]



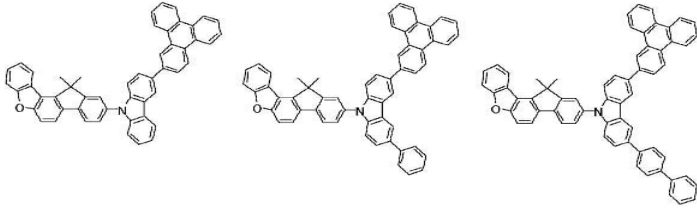
[0171]

[0172] [화학식 A-61] [화학식 A-62] [화학식 A-63]



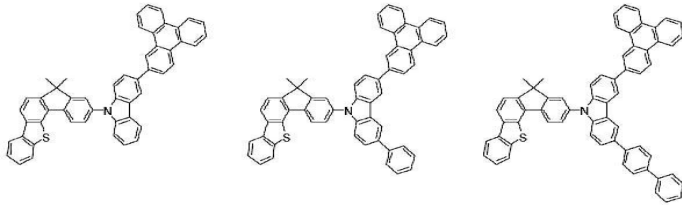
[0173]

[0174] [화학식 A-64] [화학식 A-65] [화학식 A-66]



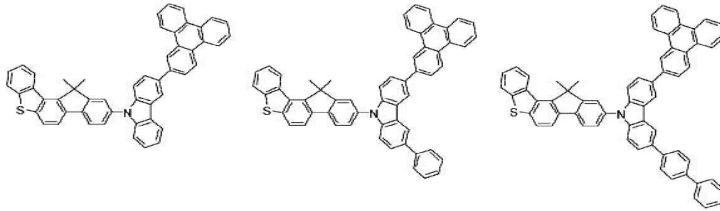
[0175]

[0176] [화학식 A-67] [화학식 A-68] [화학식 A-69]



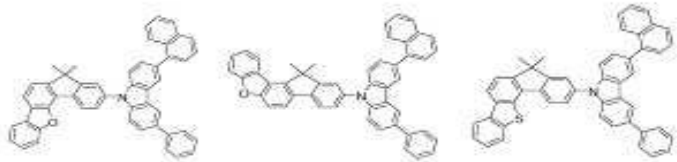
[0177]

[0178] [화학식 A-70] [화학식 A-71] [화학식 A-72]



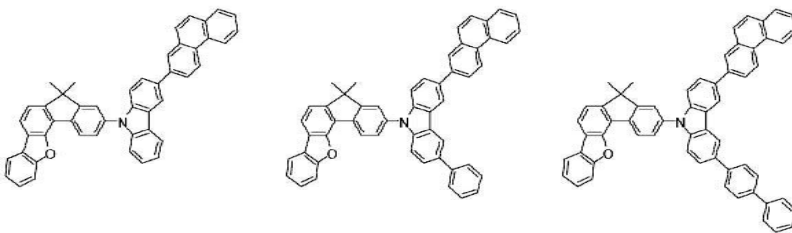
[0179]

[0180] [화학식 A-73] [화학식 A-74] [화학식 A-75]



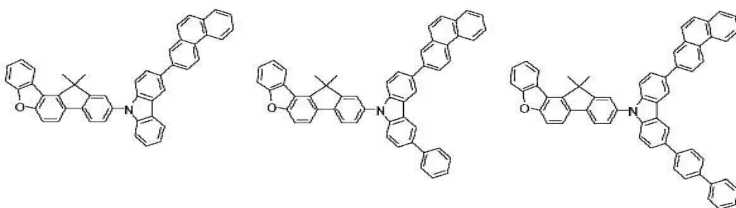
[0181]

[0182] [화학식 A-76] [화학식 A-77] [화학식 A-78]



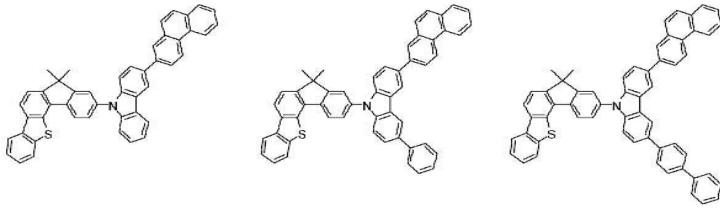
[0183]

[0184] [화학식 A-79] [화학식 A-80] [화학식 A-81]



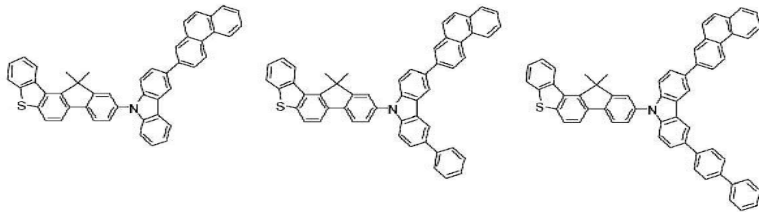
[0185]

[0186] [화학식 A-82] [화학식 A-83] [화학식 A-84]



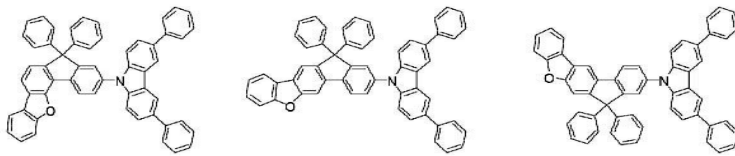
[0187]

[0188] [화학식 A-85] [화학식 A-86] [화학식 A-87]



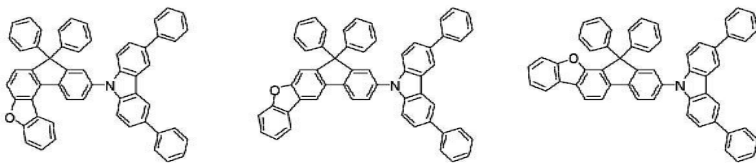
[0189]

[0190] [화학식 A-88] [화학식 A-89] [화학식 A-90]



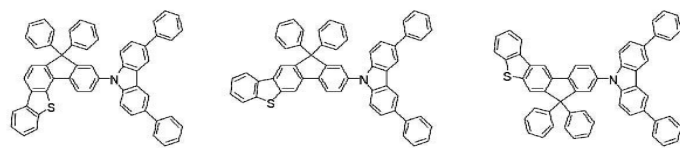
[0191]

[0192] [화학식 A-91] [화학식 A-92] [화학식 A-93]



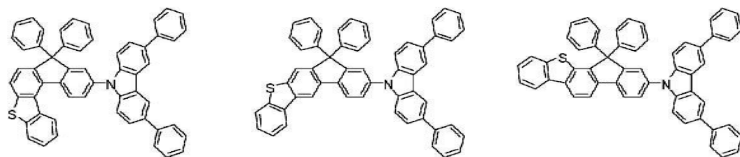
[0193]

[0194] [화학식 A-94] [화학식 A-95] [화학식 A-96]



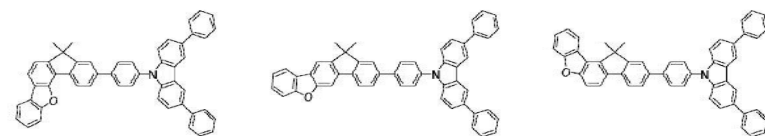
[0195]

[0196] [화학식 A-97] [화학식 A-98] [화학식 A-99]



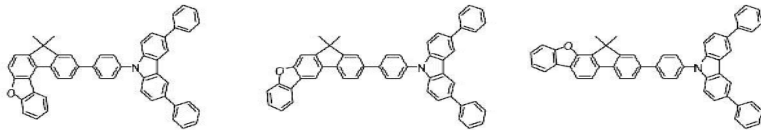
[0197]

[0198] [화학식 A-100] [화학식 A-101] [화학식 A-102]



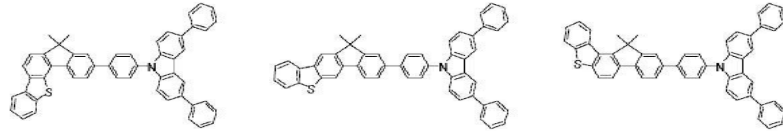
[0199]

[0200] [화학식 A-103] [화학식 A-104] [화학식 A-105]



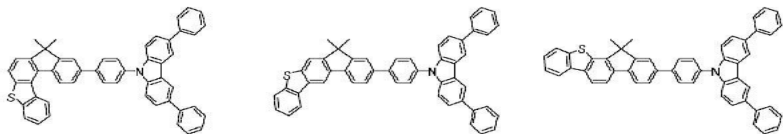
[0201]

[0202] [화학식 A-106] [화학식 A-107] [화학식 A-108]



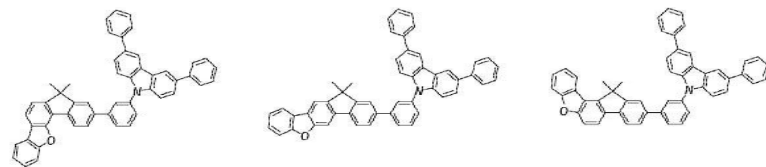
[0203]

[0204] [화학식 A-109] [화학식 A-110] [화학식 A-111]



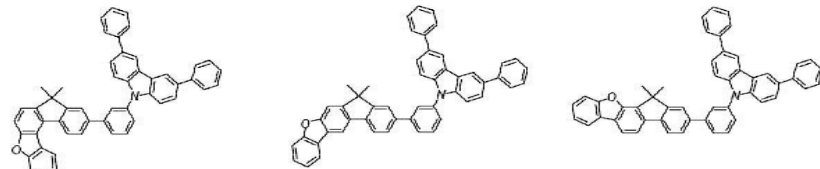
[0205]

[0206] [화학식 A-112] [화학식 A-113] [화학식 A-114]



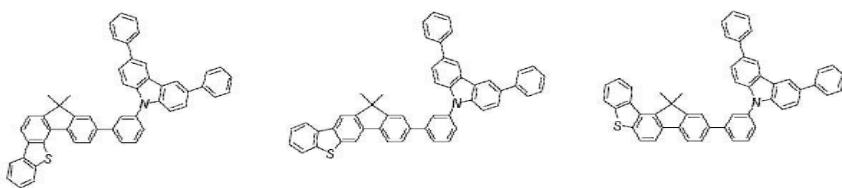
[0207]

[0208] [화학식 A-115] [화학식 A-116] [화학식 A-117]



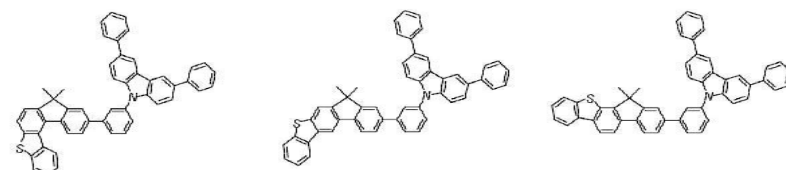
[0209]

[0210] [화학식 A-118] [화학식 A-119] [화학식 A-120]



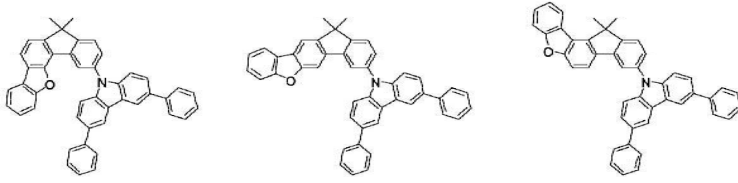
[0211]

[0212] [화학식 A-121] [화학식 A-122] [화학식 A-123]



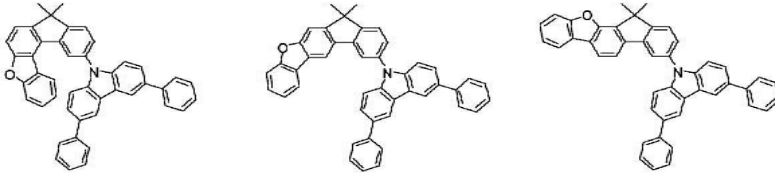
[0213]

[0214] [화학식 A-124] [화학식 A-125] [화학식 A-126]



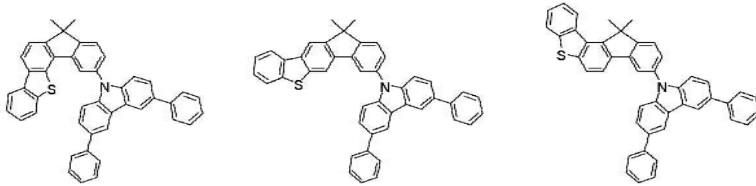
[0215]

[0216] [화학식 A-127] [화학식 A-128] [화학식 A-129]



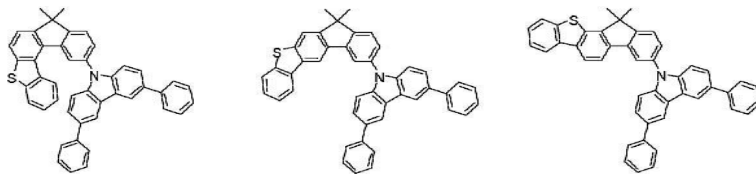
[0217]

[0218] [화학식 A-130] [화학식 A-131] [화학식 A-132]



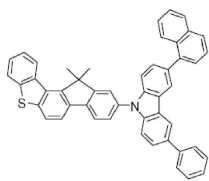
[0219]

[0220] [화학식 A-133] [화학식 A-134] [화학식 A-135]



[0221]

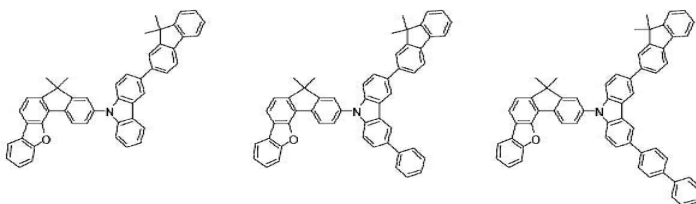
[0222] [화학식 A-136]



[0223]

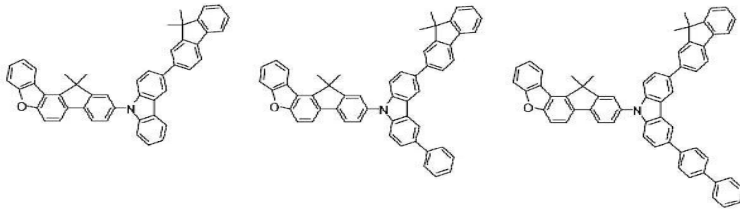
[0224] 보다 구체적으로, 상기 유기광전자소자용 화합물은 하기 화학식 B-1 내지 B-68 중 어느 하나로 표시될 수 있다. 다만, 이에 제한되는 것은 아니다.

[0225] [화학식 B-1] [화학식 B-2] [화학식 B-3]



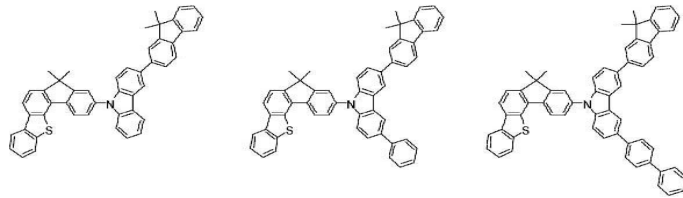
[0226]

[0227] [화학식 B-4] [화학식 B-5] [화학식 B-6]



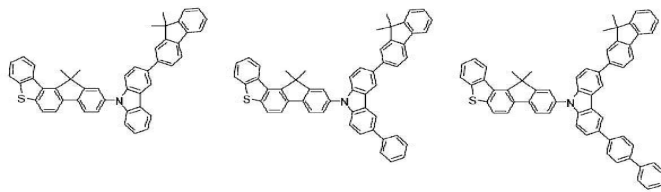
[0228]

[0229] [화학식 B-7] [화학식 B-8] [화학식 B-9]



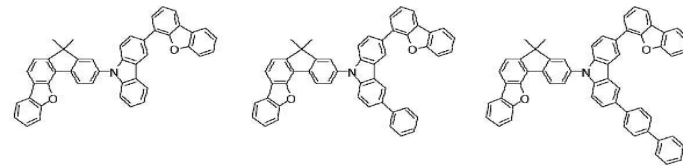
[0230]

[0231] [화학식 B-10] [화학식 B-11] [화학식 B-12]



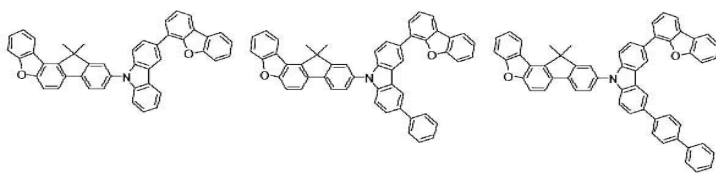
[0232]

[0233] [화학식 B-13] [화학식 B-14] [화학식 B-15]



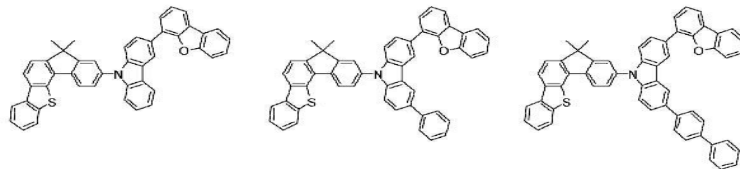
[0234]

[0235] [화학식 B-16] [화학식 B-17] [화학식 B-18]



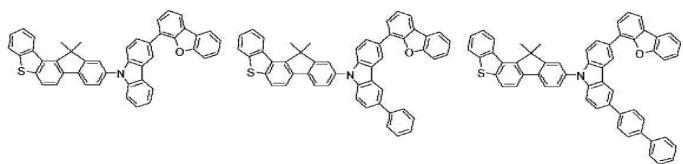
[0236]

[0237] [화학식 B-19] [화학식 B-20] [화학식 B-21]



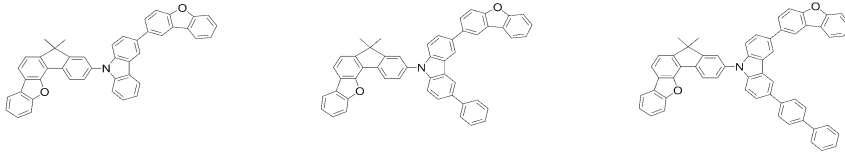
[0238]

[0239] [화학식 B-22] [화학식 B-23] [화학식 B-24]



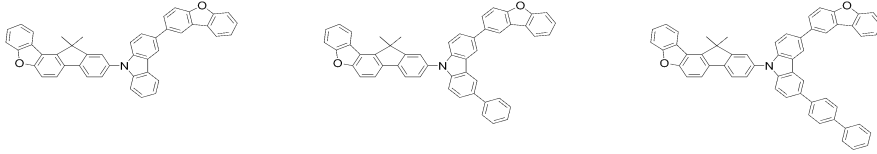
[0240]

[0241] [화학식 B-25] [화학식 B-26] [화학식 B-27]



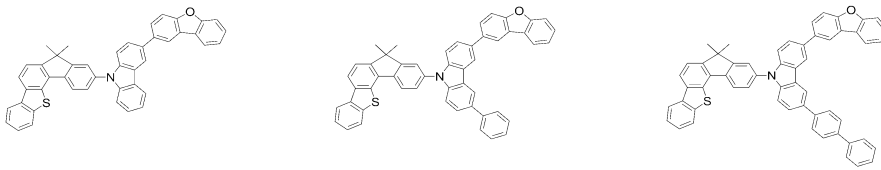
[0242]

[0243] [화학식 B-28] [화학식 B-29] [화학식 B-30]



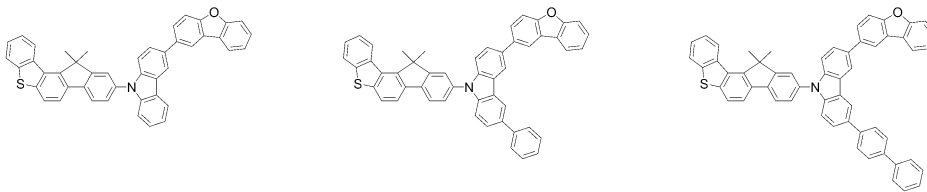
[0244]

[0245] [화학식 B-31] [화학식 B-32] [화학식 B-33]



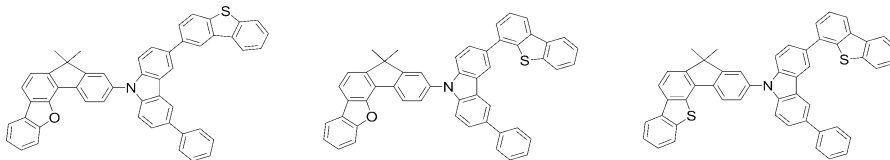
[0246]

[0247] [화학식 B-34] [화학식 B-35] [화학식 B-36]



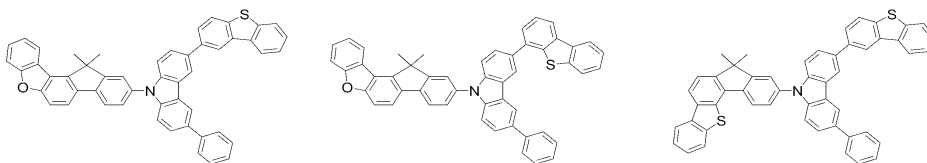
[0248]

[0249] [화학식 B-37] [화학식 B-38] [화학식 B-39]



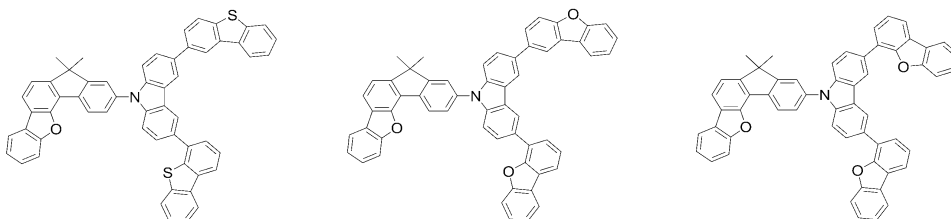
[0250]

[0251] [화학식 B-40] [화학식 B-41] [화학식 B-42]



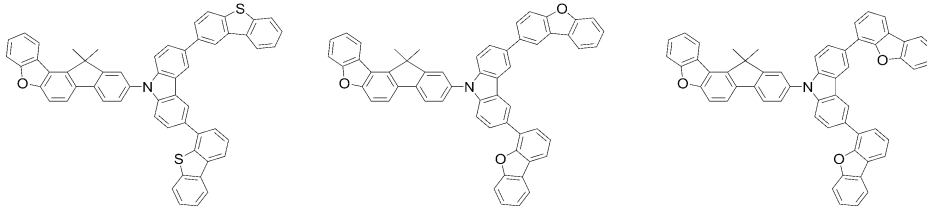
[0252]

[0253] [화학식 B-43] [화학식 B-44] [화학식 B-45]



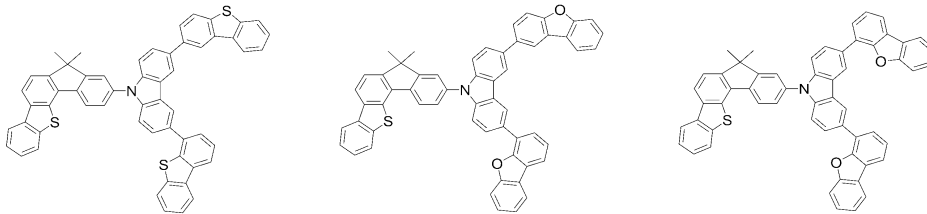
[0254]

[0255] [화학식 B-46] [화학식 B-47] [화학식 B-48]



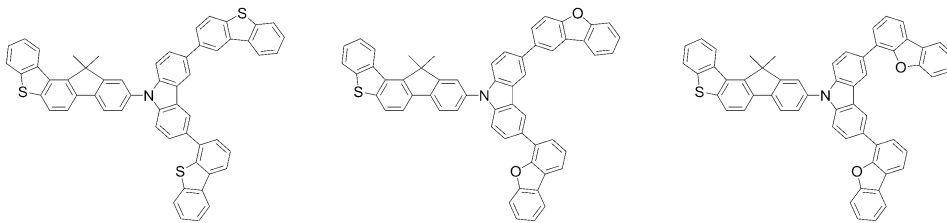
[0256]

[0257] [화학식 B-49] [화학식 B-50] [화학식 B-51]



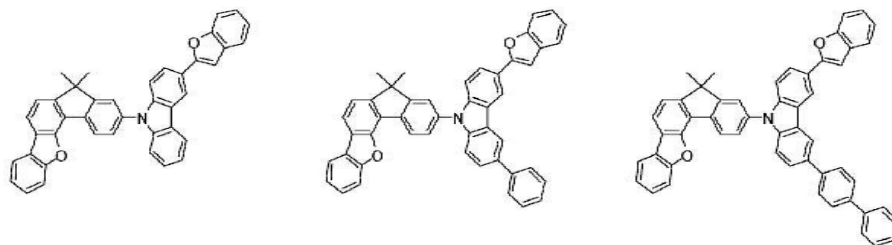
[0258]

[0259] [화학식 B-52] [화학식 B-53] [화학식 B-54]



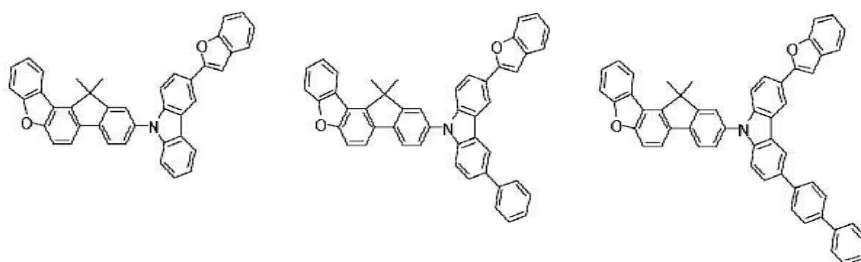
[0260]

[0261] [화학식 B-55] [화학식 B-56] [화학식 B-57]



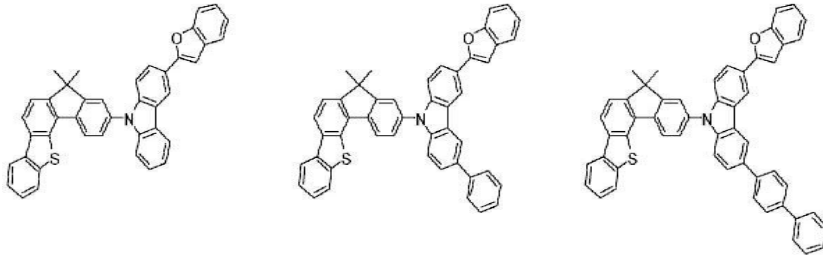
[0262]

[0263] [화학식 B-58] [화학식 B-59] [화학식 B-60]



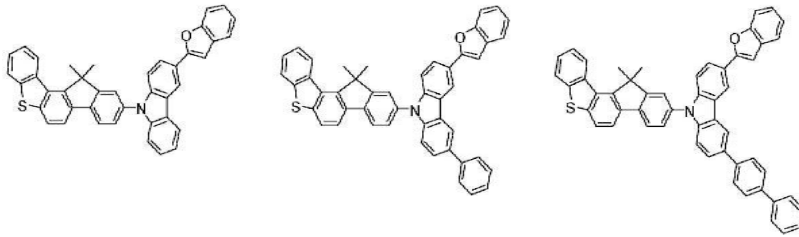
[0264]

[0265] [화학식 B-61] [화학식 B-62] [화학식 B-63]



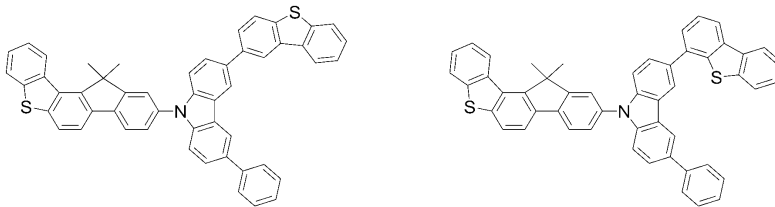
[0266]

[0267] [화학식 B-64] [화학식 B-65] [화학식 B-66]



[0268]

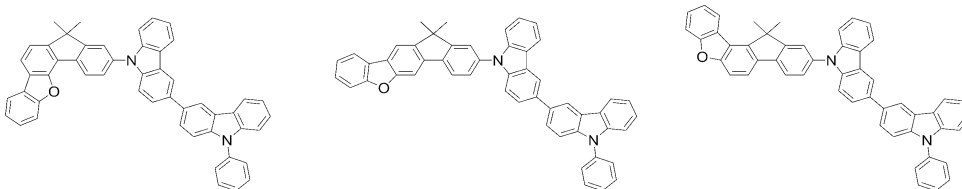
[0269] [화학식 B-67] [화학식 B-68]



[0270]

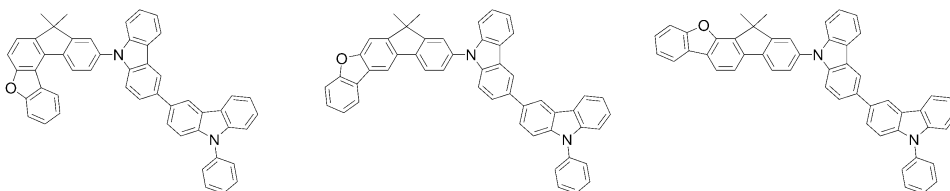
[0271] 보다 구체적으로, 상기 유기광전자소자용 화합물은 하기 화학식 C-1 내지 C-78 중 어느 하나로 표시될 수 있다. 다만, 이에 제한되는 것은 아니다.

[0272] [화학식 C-1] [화학식 C-2] [화학식 C-3]



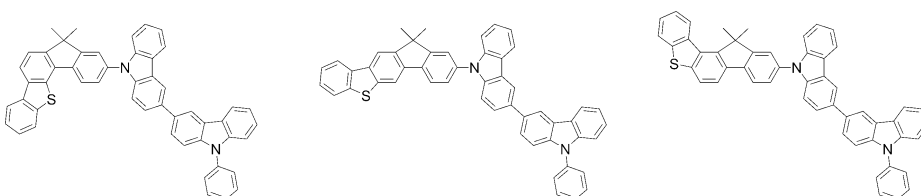
[0273]

[0274] [화학식 C-4] [화학식 C-5] [화학식 C-6]



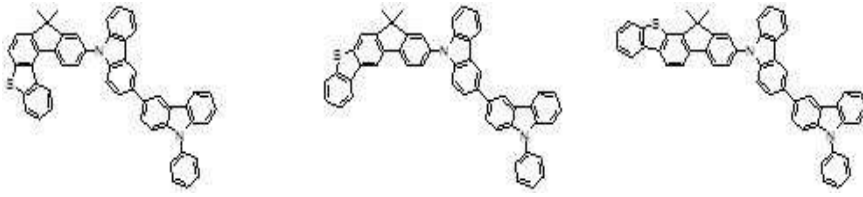
[0275]

[0276] [화학식 C-7] [화학식 C-8] [화학식 C-9]



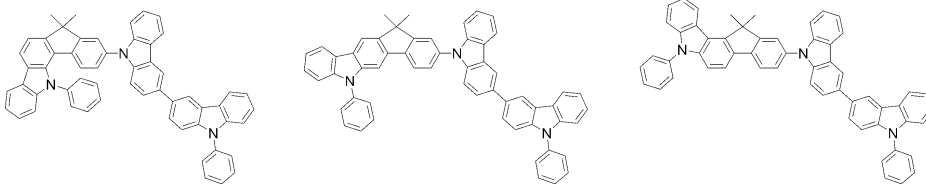
[0277]

[0278] [화학식 C-10] [화학식 C-11] [화학식 C-12]



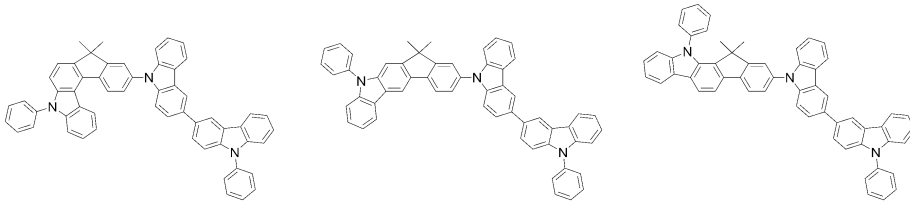
[0279]

[0280] [화학식 C-13] [화학식 C-14] [화학식 C-15]



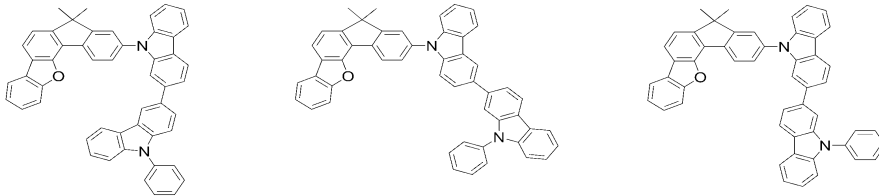
[0281]

[0282] [화학식 C-16] [화학식 C-17] [화학식 C-18]



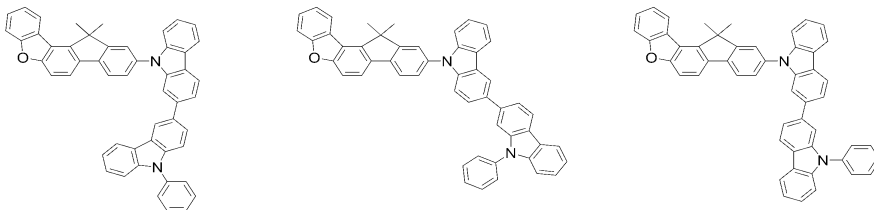
[0283]

[0284] [화학식 C-19] [화학식 C-20] [화학식 C-21]



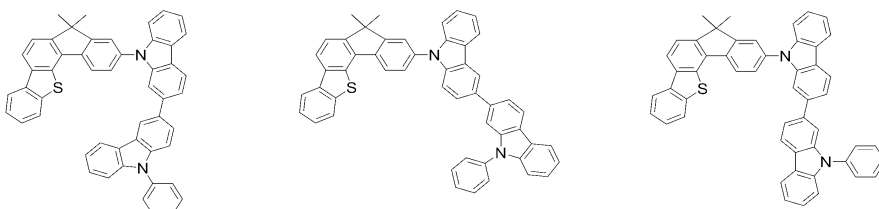
[0285]

[0286] [화학식 C-22] [화학식 C-23] [화학식 C-24]



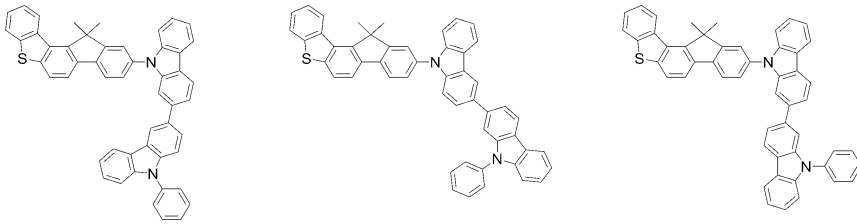
[0287]

[0288] [화학식 C-25] [화학식 C-26] [화학식 C-27]



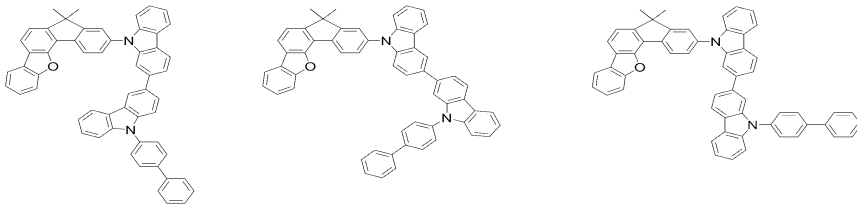
[0289]

[0290] [화학식 C-28] [화학식 C-29] [화학식 C-30]



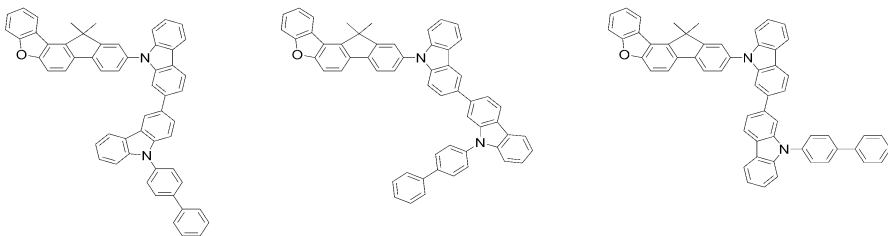
[0291]

[0292] [화학식 C-31] [화학식 C-32] [화학식 C-33]



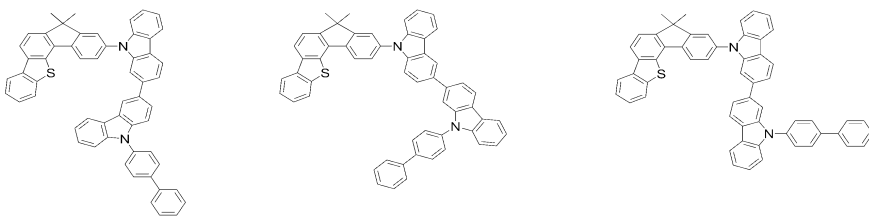
[0293]

[0294] [화학식 C-34] [화학식 C-35] [화학식 C-36]



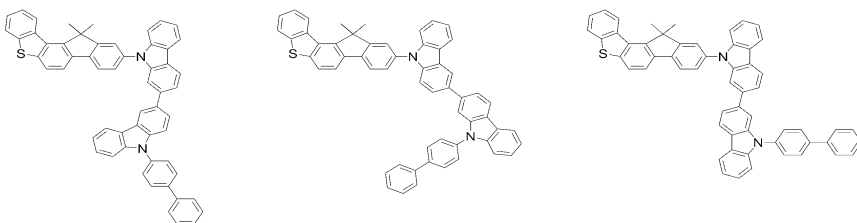
[0295]

[0296] [화학식 C-37] [화학식 C-38] [화학식 C-39]



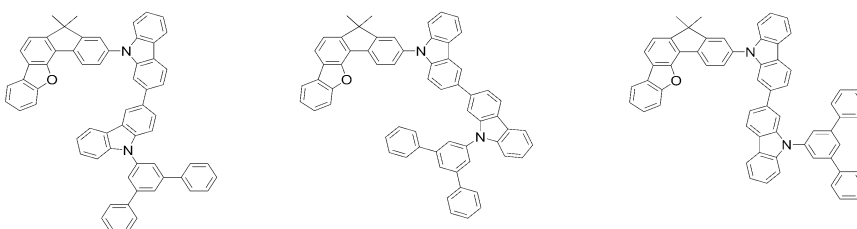
[0297]

[0298] [화학식 C-40] [화학식 C-41] [화학식 C-42]



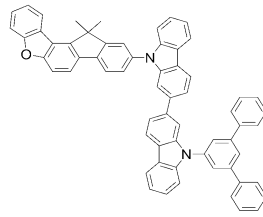
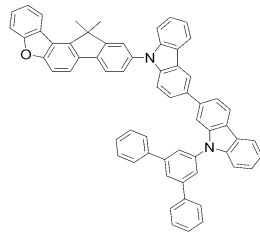
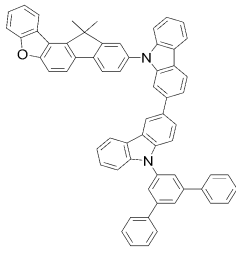
[0299]

[0300] [화학식 C-43] [화학식 C-44] [화학식 C-45]



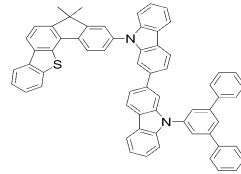
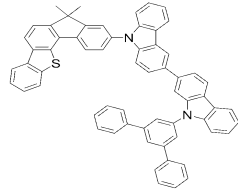
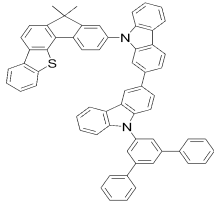
[0301]

[0302] [화학식 C-46] [화학식 C-47] [화학식 C-48]



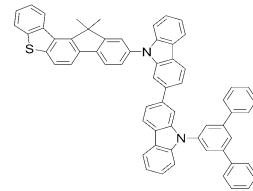
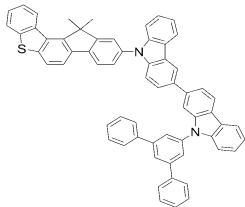
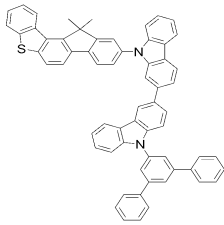
[0303]

[0304] [화학식 C-49] [화학식 C-50] [화학식 C-51]



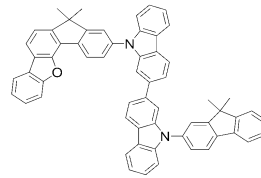
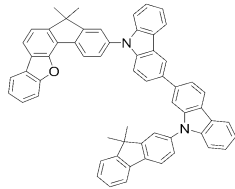
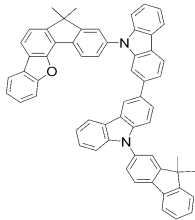
[0305]

[0306] [화학식 C-52] [화학식 C-53] [화학식 C-54]



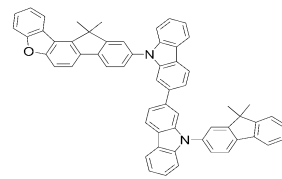
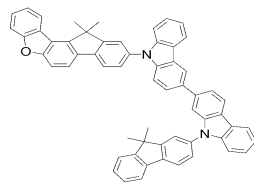
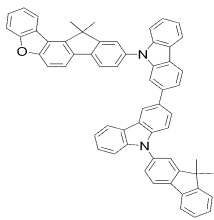
[0307]

[0308] [화학식 C-55] [화학식 C-56] [화학식 C-57]



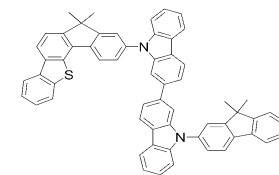
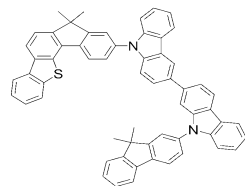
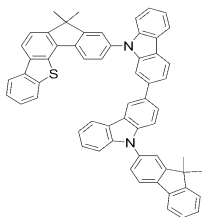
[0309]

[0310] [화학식 C-58] [화학식 C-59] [화학식 C-60]



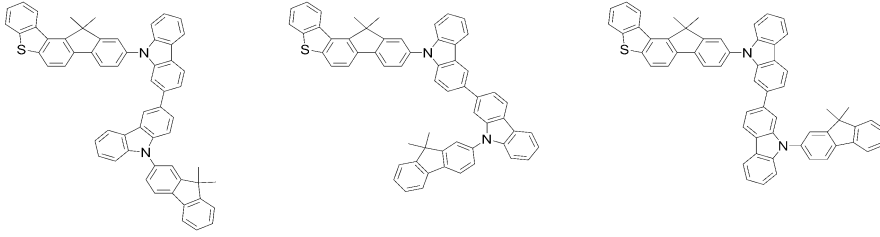
[0311]

[0312] [화학식 C-61] [화학식 C-62] [화학식 C-63]



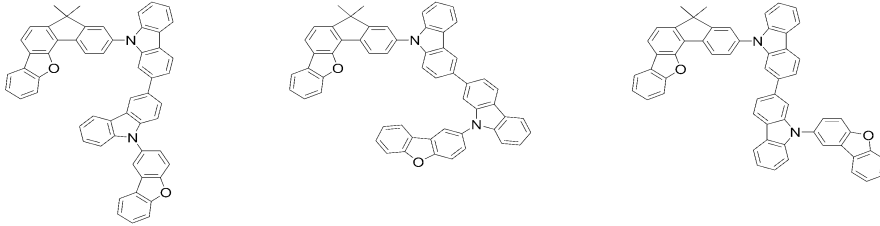
[0313]

[0314] [화학식 C-64] [화학식 C-65] [화학식 C-66]



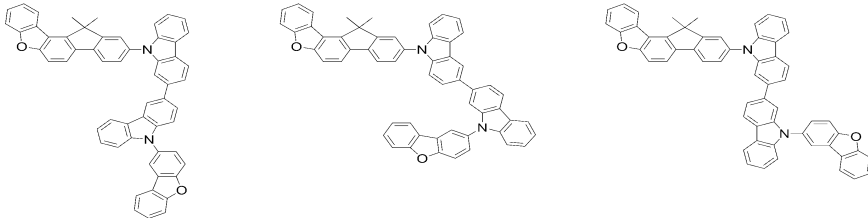
[0315]

[0316] [화학식 C-67] [화학식 C-68] [화학식 C-69]



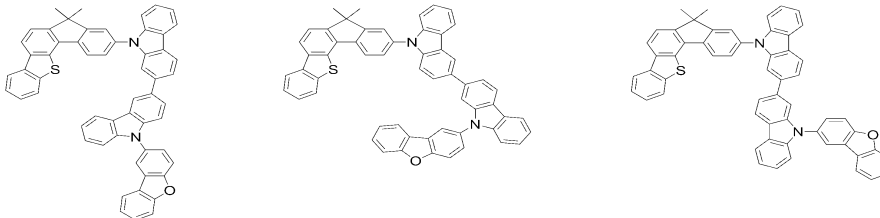
[0317]

[0318] [화학식 C-70] [화학식 C-71] [화학식 C-72]



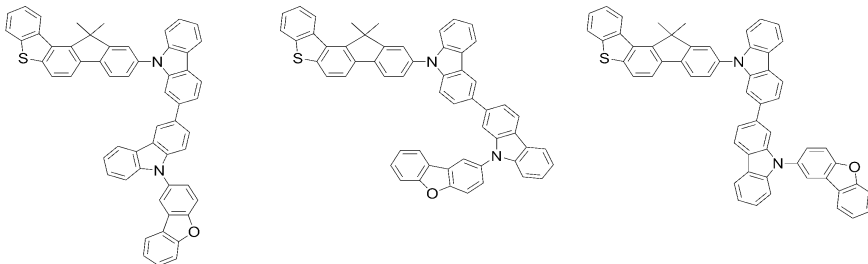
[0319]

[0320] [화학식 C-73] [화학식 C-74] [화학식 C-75]



[0321]

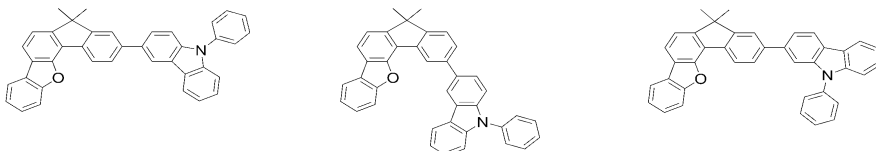
[0322] [화학식 C-76] [화학식 C-77] [화학식 C-78]



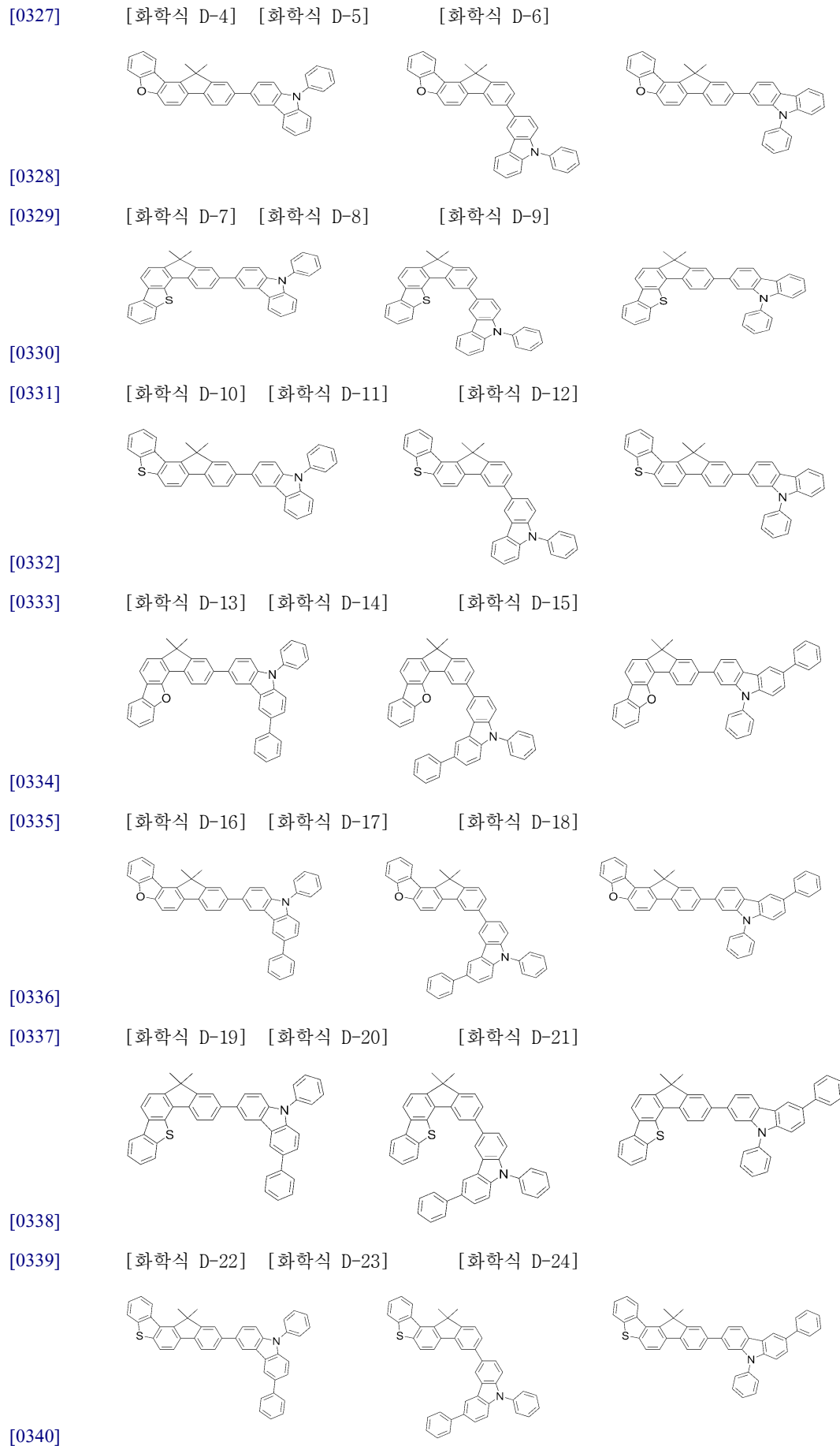
[0323]

[0324] 보다 구체적으로, 상기 유기광전자소자용 화합물은 하기 화학식 D-1 내지 D-210 중 어느 하나로 표시될 수 있다. 다만, 이에 제한되는 것은 아니다.

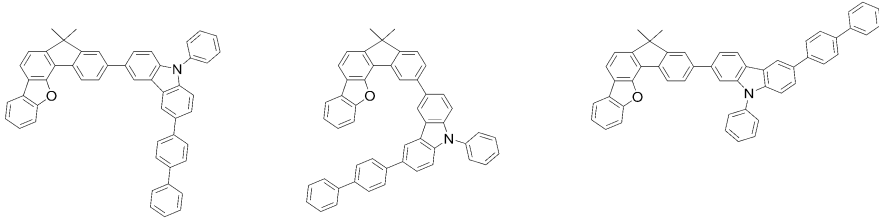
[0325] [화학식 D-1] [화학식 D-2] [화학식 D-3]



[0326]

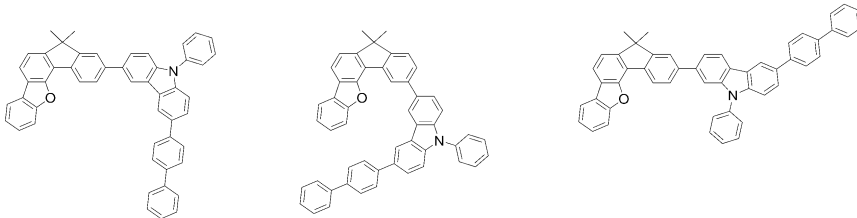


[0341] [화학식 D-25] [화학식 D-26] [화학식 D-27]



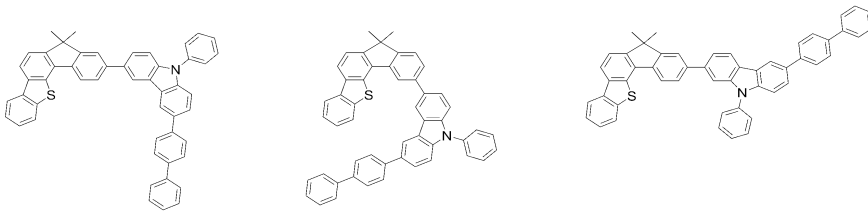
[0342]

[0343] [화학식 D-28] [화학식 D-29] [화학식 D-30]



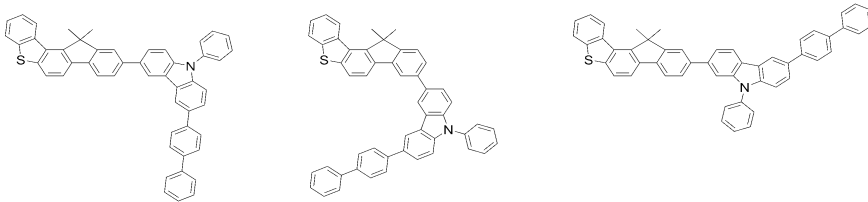
[0344]

[0345] [화학식 D-31] [화학식 D-32] [화학식 D-33]



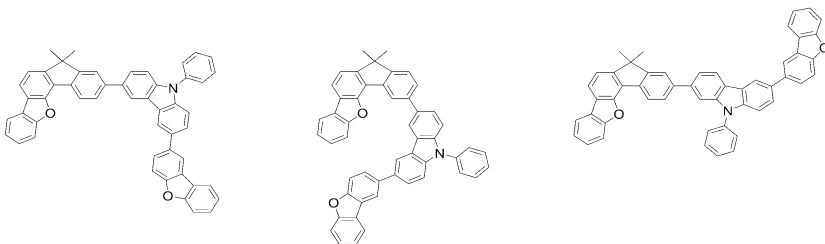
[0346]

[0347] [화학식 D-34] [화학식 D-35] [화학식 D-36]



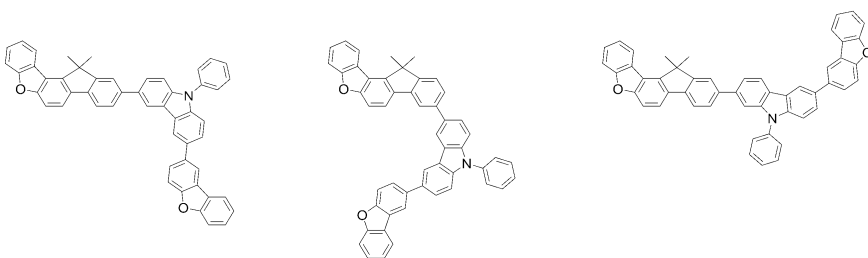
[0348]

[0349] [화학식 D-37] [화학식 D-38] [화학식 D-39]



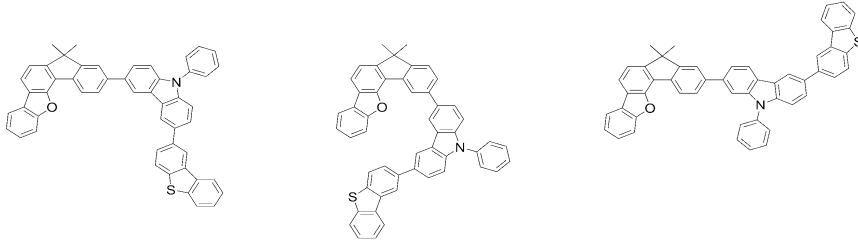
[0350]

[0351] [화학식 D-40] [화학식 D-41] [화학식 D-42]



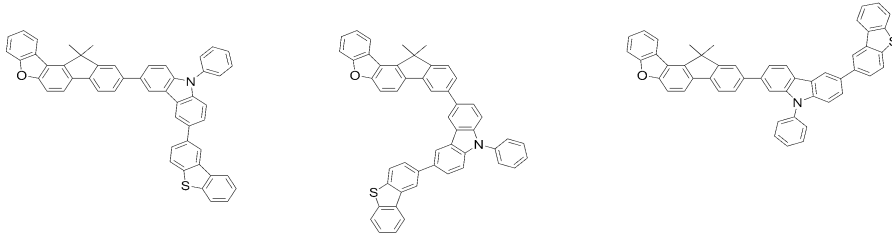
[0352]

[0353] [화학식 D-43] [화학식 D-44] [화학식 D-45]



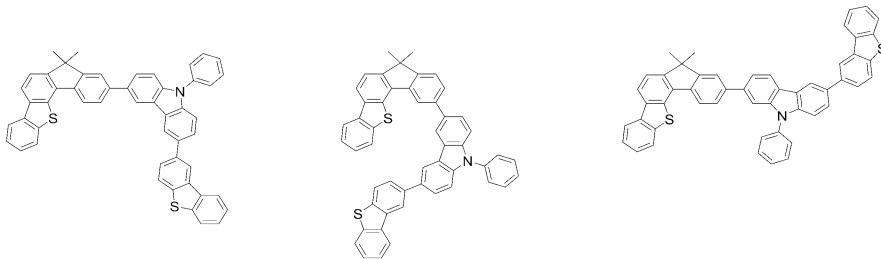
[0354]

[0355] [화학식 D-46] [화학식 D-47] [화학식 D-48]



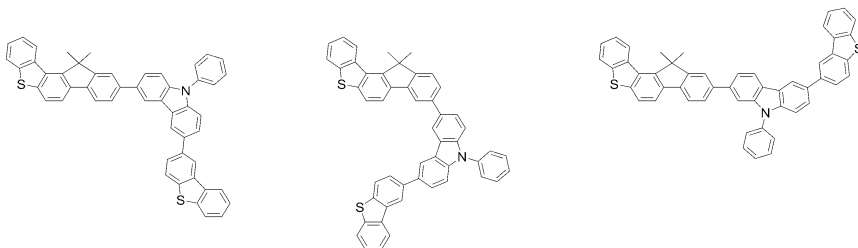
[0356]

[0357] [화학식 D-49] [화학식 D-50] [화학식 D-51]



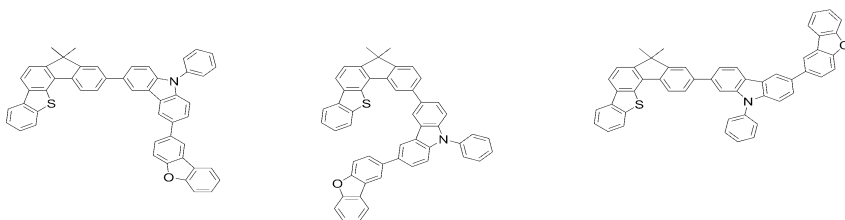
[0358]

[0359] [화학식 D-52] [화학식 D-53] [화학식 D-54]



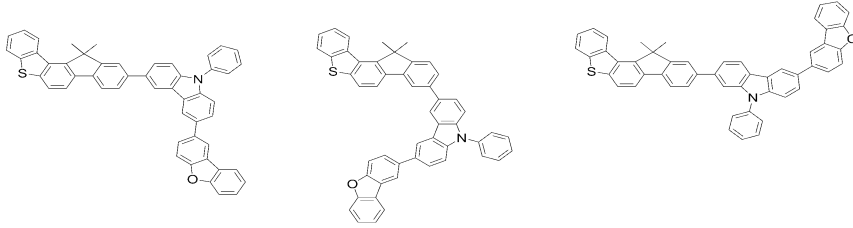
[0360]

[0361] [화학식 D-55] [화학식 D-56] [화학식 D-57]



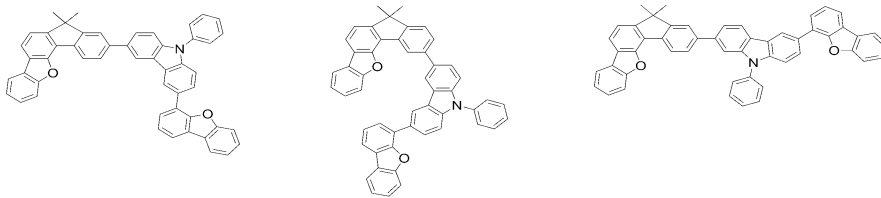
[0362]

[0363] [화학식 D-58] [화학식 D-59] [화학식 D-60]



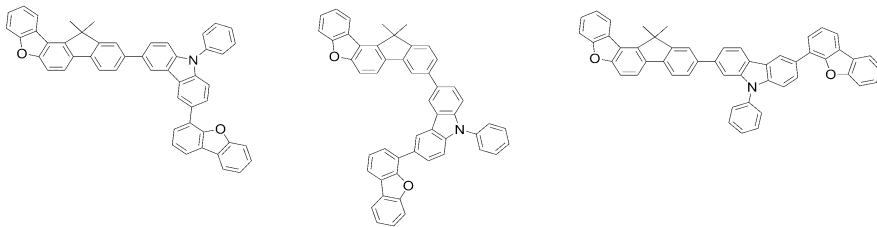
[0364]

[0365] [화학식 D-61] [화학식 D-62] [화학식 D-63]



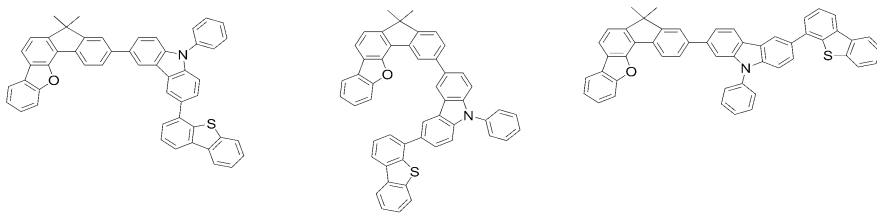
[0366]

[0367] [화학식 D-64] [화학식 D-65] [화학식 D-66]



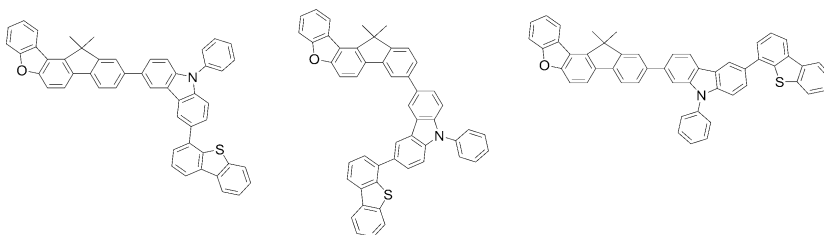
[0368]

[0369] [화학식 D-67] [화학식 D-68] [화학식 D-69]



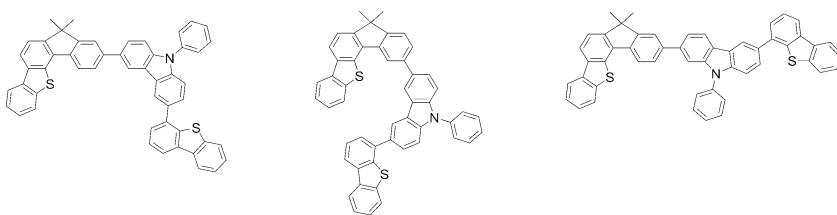
[0370]

[0371] [화학식 D-70] [화학식 D-71] [화학식 D-72]



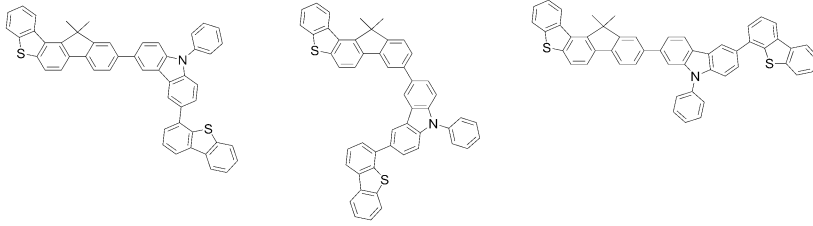
[0372]

[0373] [화학식 D-73] [화학식 D-74] [화학식 D-75]



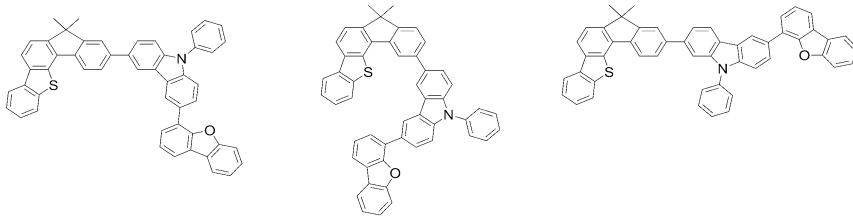
[0374]

[0375] [화학식 D-76] [화학식 D-77] [화학식 D-78]



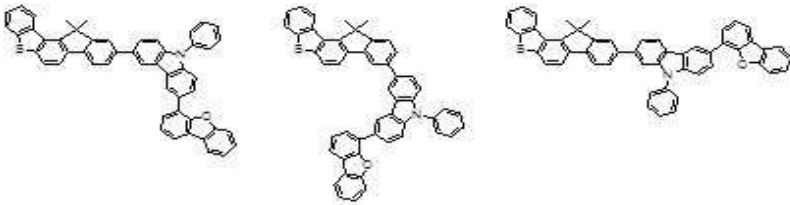
[0376]

[0377] [화학식 D-79] [화학식 D-80] [화학식 D-81]



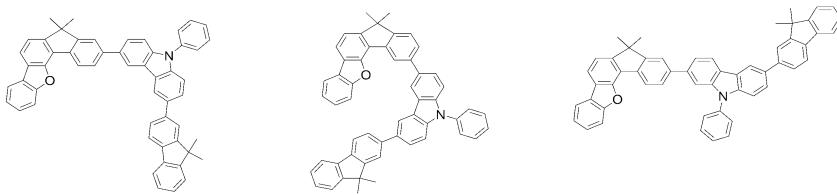
[0378]

[0379] [화학식 D-82] [화학식 D-83] [화학식 D-84]



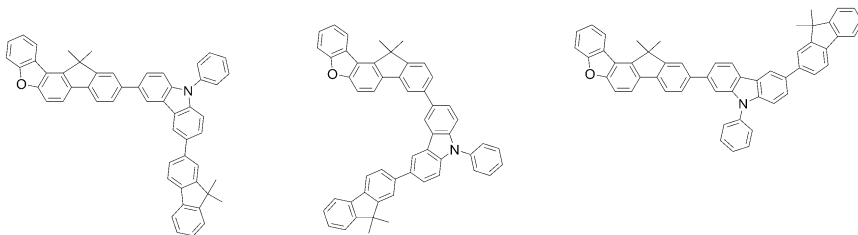
[0380]

[0381] [화학식 D-85] [화학식 D-86] [화학식 D-87]



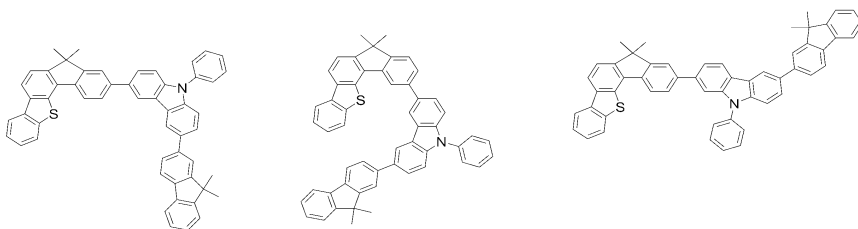
[0382]

[0383] [화학식 D-88] [화학식 D-89] [화학식 D-90]



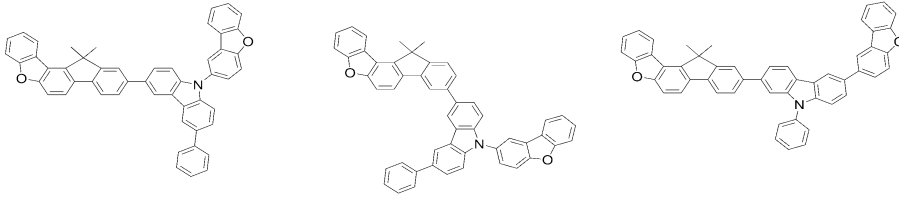
[0384]

[0385] [화학식 D-91] [화학식 D-92] [화학식 D-93]



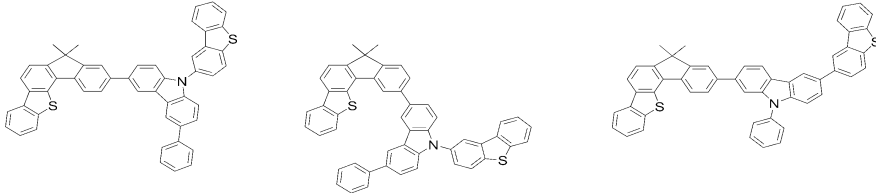
[0386]

[0399] [화학식 D-112] [화학식 D-113] [화학식 D-114]



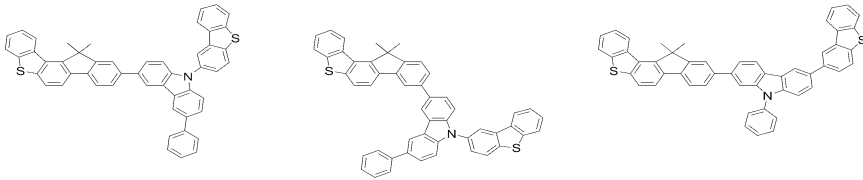
[0400]

[0401] [화학식 D-115] [화학식 D-116] [화학식 D-117]



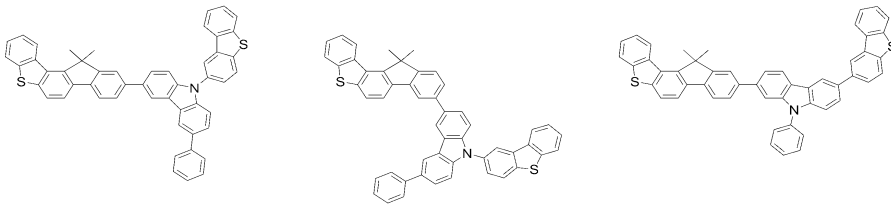
[0402]

[0403] [화학식 D-118] [화학식 D-119] [화학식 D-120]



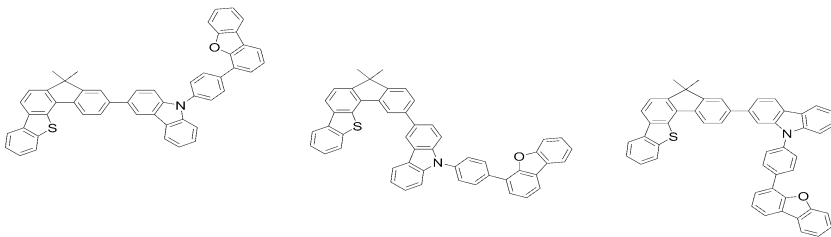
[0404]

[0405] [화학식 D-121] [화학식 D-122] [화학식 D-123]



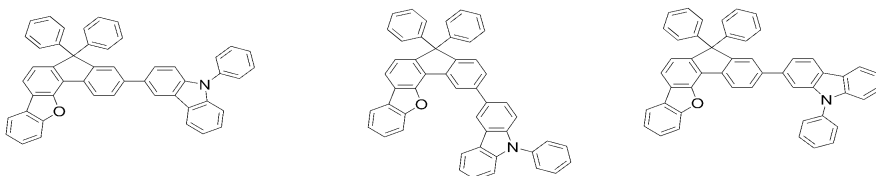
[0406]

[0407] [화학식 D-124] [화학식 D-125] [화학식 D-126]



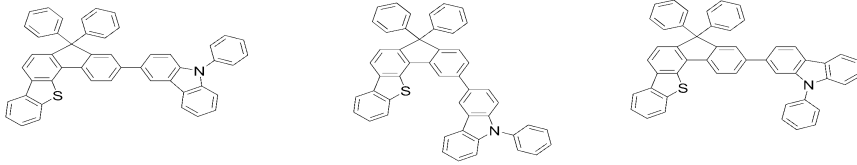
[0408]

[0409] [화학식 D-127] [화학식 D-128] [화학식 D-129]



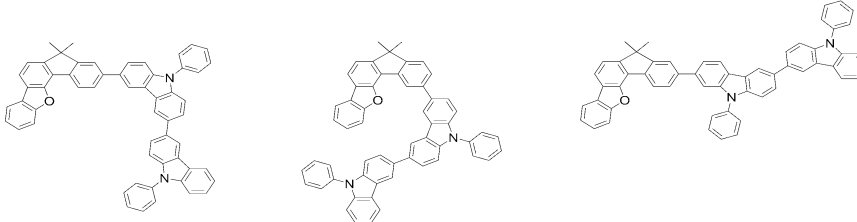
[0410]

[0411] [화학식 D-130] [화학식 D-131] [화학식 D-132]



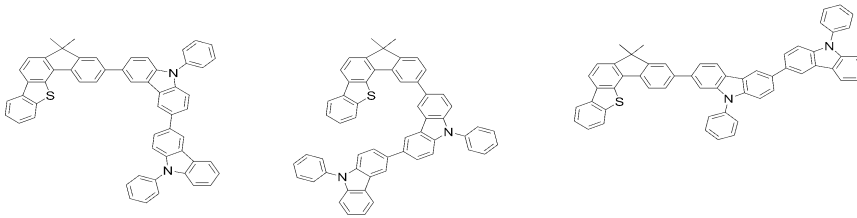
[0412]

[0413] [화학식 D-133] [화학식 D-134] [화학식 D-135]



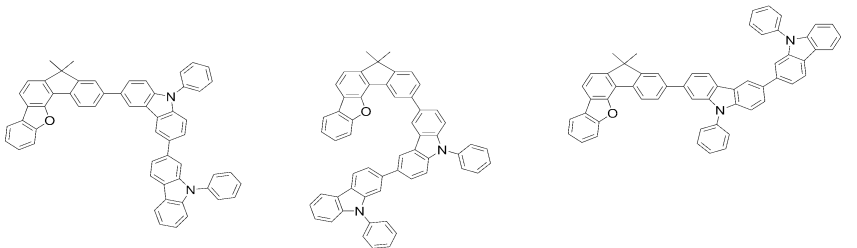
[0414]

[0415] [화학식 D-136] [화학식 D-137] [화학식 D-138]



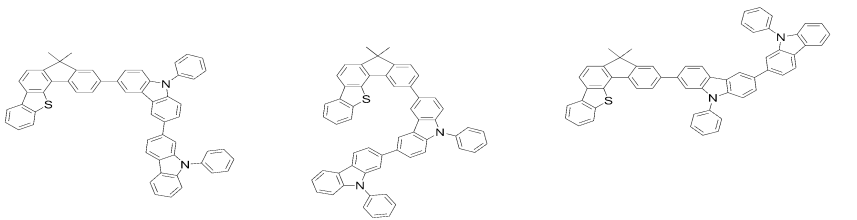
[0416]

[0417] [화학식 D-139] [화학식 D-140] [화학식 D-141]



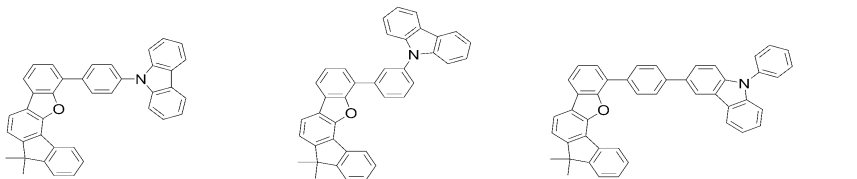
[0418]

[0419] [화학식 D-142] [화학식 D-143] [화학식 D-144]



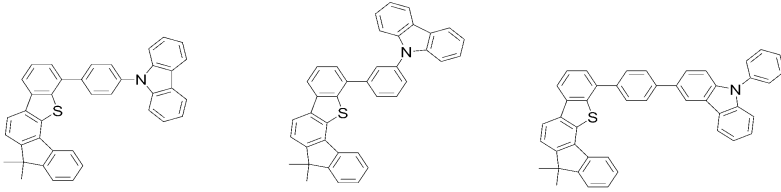
[0420]

[0421] [화학식 D-145] [화학식 D-146] [화학식 D-147]



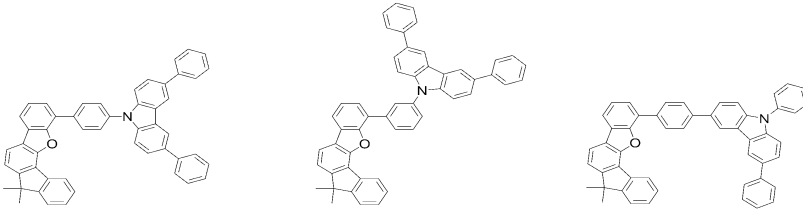
[0422]

[0423] [화학식 D-148] [화학식 D-149] [화학식 D-150]



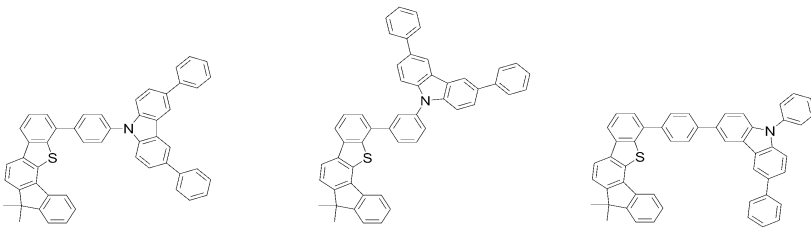
[0424]

[0425] [화학식 D-151] [화학식 D-152] [화학식 D-153]



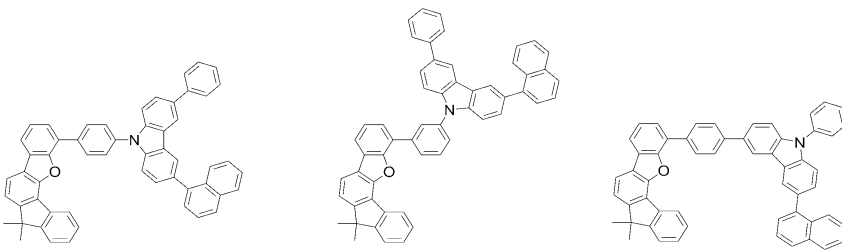
[0426]

[0427] [화학식 D-154] [화학식 D-155] [화학식 D-156]



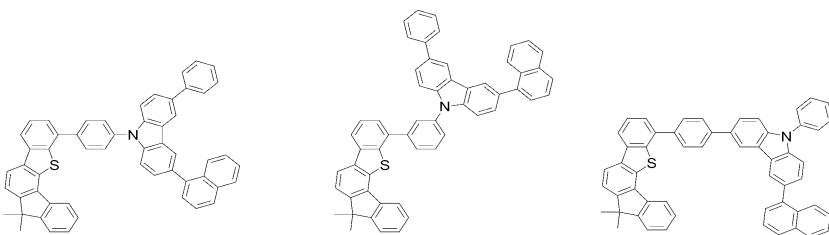
[0428]

[0429] [화학식 D-157] [화학식 D-158] [화학식 D-159]



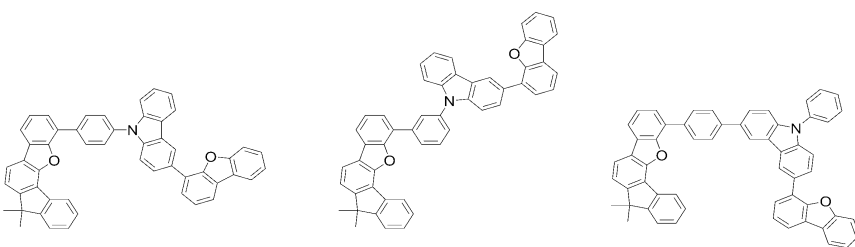
[0430]

[0431] [화학식 D-160] [화학식 D-161] [화학식 D-162]



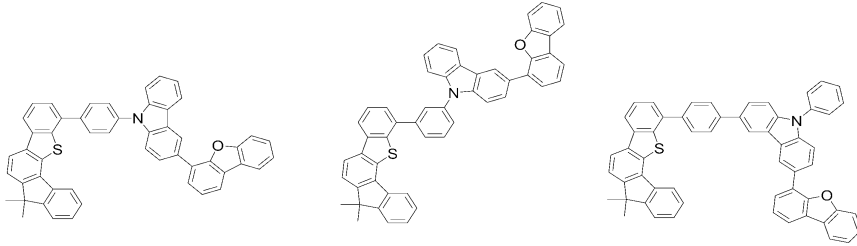
[0432]

[0433] [화학식 D-163] [화학식 D-164] [화학식 D-165]



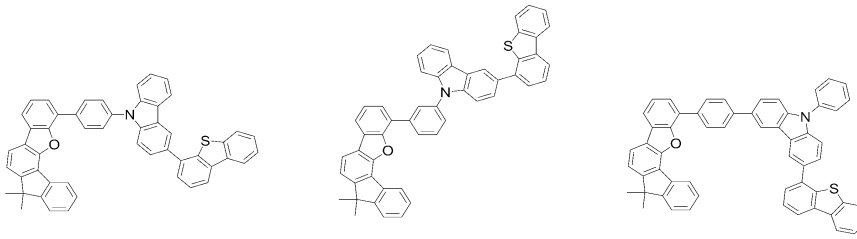
[0434]

[0435] [화학식 D-166] [화학식 D-167] [화학식 D-168]



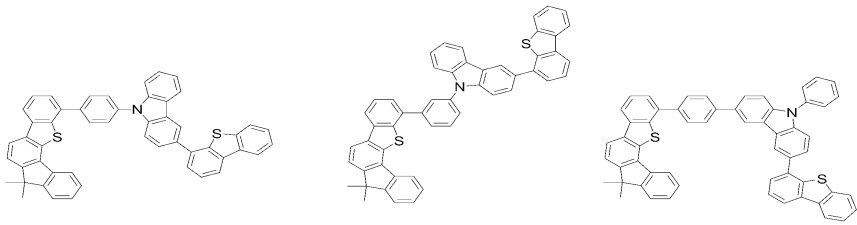
[0436]

[0437] [화학식 D-169] [화학식 D-170] [화학식 D-171]



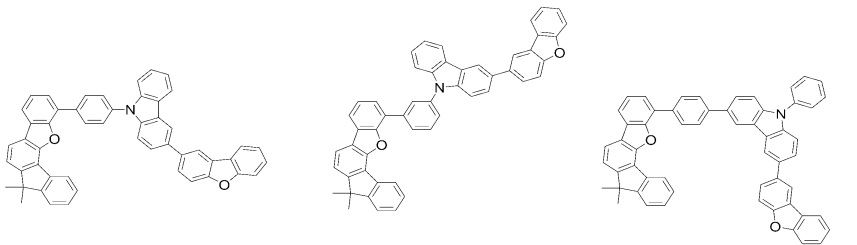
[0438]

[0439] [화학식 D-172] [화학식 D-173] [화학식 D-174]



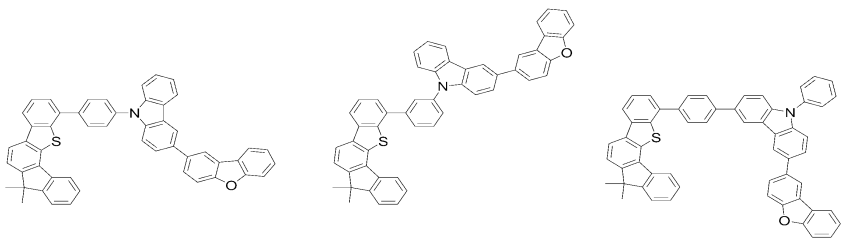
[0440]

[0441] [화학식 D-175] [화학식 D-176] [화학식 D-177]



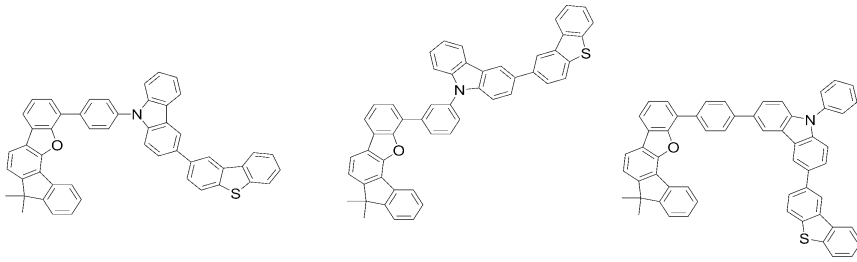
[0442]

[0443] [화학식 D-178] [화학식 D-179] [화학식 D-180]



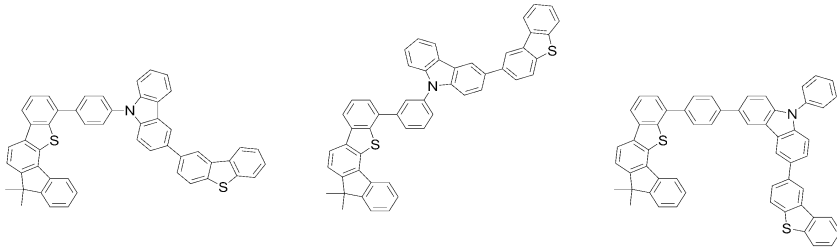
[0444]

[0445] [화학식 D-181] [화학식 D-182] [화학식 D-183]



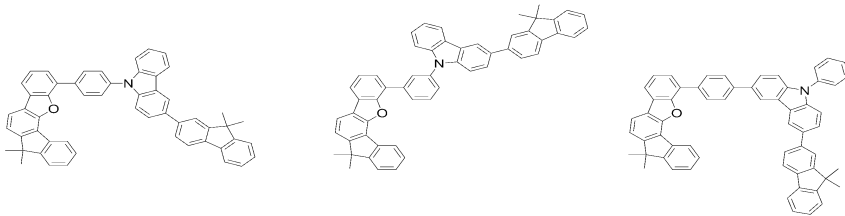
[0446]

[0447] [화학식 D-184] [화학식 D-185] [화학식 D-186]



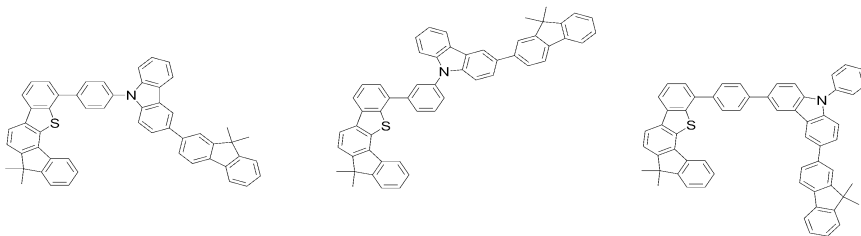
[0448]

[0449] [화학식 D-187] [화학식 D-188] [화학식 D-189]



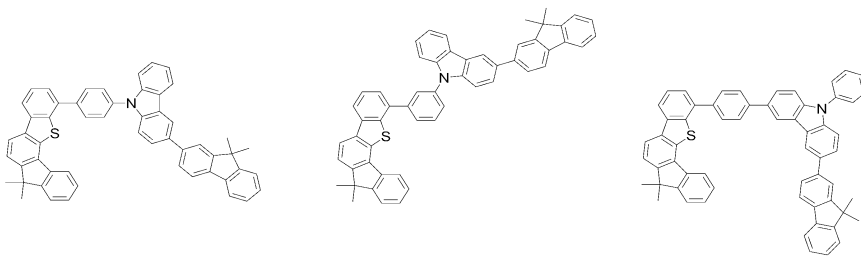
[0450]

[0451] [화학식 D-190] [화학식 D-191] [화학식 D-192]



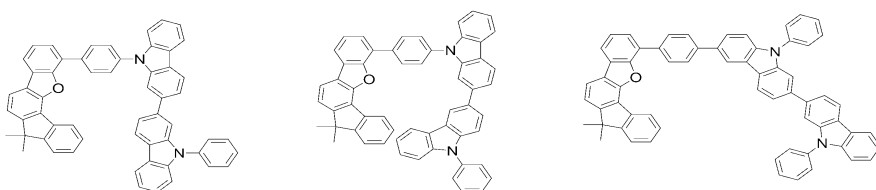
[0452]

[0453] [화학식 D-193] [화학식 D-194] [화학식 D-195]



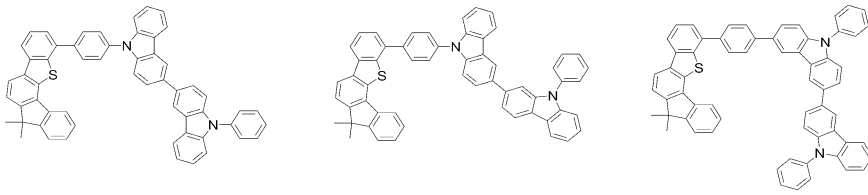
[0454]

[0455] [화학식 D-196] [화학식 D-197] [화학식 D-198]



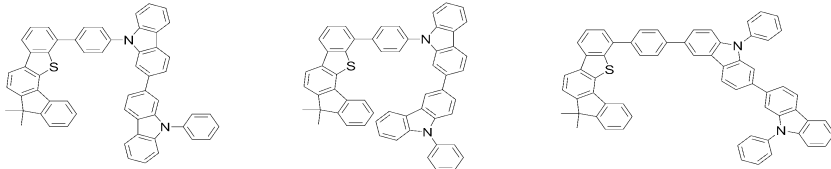
[0456]

[0457] [화학식 D-199] [화학식 D-200] [화학식 D-201]



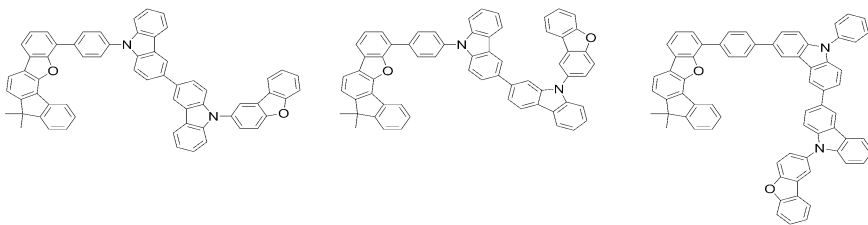
[0458]

[0459] [화학식 D-202] [화학식 D-203] [화학식 D-204]



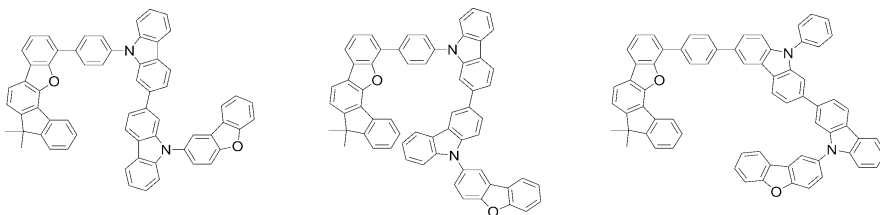
[0460]

[0461] [화학식 D-205] [화학식 D-206] [화학식 D-207]



[0462]

[0463] [화학식 D-208] [화학식 D-209] [화학식 D-210]



[0464]

[0465] 전술한 본 발명의 일 구현예에 따른 화합물이 전자특성, 정공특성 양쪽을 모두 요구하는 경우에는 상기 전자 특성을 가지는 작용기를 도입하는 것이 유기발광소자의 수명 향상 및 구동 전압 감소에 효과적이다.

[0466] 전술한 본 발명의 일 구현예에 따른 유기광전자소자용 화합물은 최대 발광 파장이 약 320 내지 500 nm 범위를 나타내고, 3중항 여기에너지(T1)가 2.0 eV 이상, 보다 구체적으로 2.0 내지 4.0 eV 범위인 것으로, 높은 3중항 여기 에너지를 가지는 호스트의 전하가 도판트에 잘 전달되어 도판트의 발광효율을 높일 수 있고, 재료의 호모(HOMO)와 루모(LUMO) 에너지 준위를 자유롭게 조절하여 구동전압을 낮출 수 있는 이점이 있기 때문에 호스트 재료 또는 전하수송재료로 매우 유용하게 사용될 수 있다.

[0467] 뿐만 아니라, 상기 유기광전자소자용 화합물은 광활성 및 전기적인 활성을 갖고 있으므로, 비선형 광학소재, 전극 재료, 변색재료, 광 스위치, 센서, 모듈, 웨이브 가이드, 유기 트랜지스터, 레이저, 광 흡수체, 유전체 및 분리막(membrane) 등의 재료로도 매우 유용하게 적용될 수 있다.

[0468] 상기와 같은 화합물을 포함하는 유기광전자소자용 화합물은 유리전이온도가 90℃ 이상이며, 열분해온도가 400℃ 이상으로 열적 안정성이 우수하다. 이로 인해 고효율의 유기광전자소자의 구현이 가능하다.

[0469] 상기와 같은 화합물을 포함하는 유기광전자소자용 화합물은 발광, 또는 전자 주입 및/또는 수송역할을 할 수 있으며, 적절한 도판트와 함께 발광 호스트로서의 역할도 할 수 있다. 즉, 상기 유기광전자소자용 화합물은 인광 또는 형광의 호스트 재료, 청색의 발광도판트 재료, 또는 전자수송 재료로 사용될 수 있다.

[0470] 본 발명의 일 구현예에 따른 유기광전자소자용 화합물은 유기박막층에 사용되어 유기광전자소자의 수명 특성, 효율 특성, 전기화학적 안정성 및 열적 안정성을 향상시키며, 구동전압을 낮출 수 있다.

[0471] 이에 따라 본 발명의 일 구현예는 상기 유기광전자소자용 화합물을 포함하는 유기광전자소자를 제공한다. 이

때, 상기 유기광전자소자라 함은 유기광전소자, 유기발광소자, 유기 태양 전지, 유기 트랜지스터, 유기 감광체 드럼, 유기 메모리 소자 등을 의미한다. 특히, 유기 태양 전지의 경우에는 본 발명의 일 구현예에 따른 유기광 전자소자용 화합물이 전극이나 전극 버퍼층에 포함되어 양자 효율을 증가시키며, 유기 트랜지스터의 경우에는 게이트, 소스-드레인 전극 등에서 전극 물질로 사용될 수 있다.

[0472] 이하에서는 유기발광소자에 대하여 구체적으로 설명한다.

[0473] 본 발명의 다른 일 구현예는 양극, 음극 및 상기 양극과 음극 사이에 개재되는 적어도 한 층 이상의 유기박막층을 포함하는 유기발광소자에 있어서, 상기 유기박막층 중 적어도 어느 한 층은 본 발명의 일 구현예에 따른 유기광전자소자용 화합물을 포함하는 유기발광소자를 제공한다.

[0474] 상기 유기광전자소자용 화합물을 포함할 수 있는 유기박막층으로는 발광층, 정공수송층, 정공주입층, 전자수송층, 전자주입층, 정공차단층 및 이들의 조합으로 이루어진 군에서 선택되는 층을 포함할 수 있는 바, 이 중에서 적어도 어느 하나의 층은 본 발명에 따른 유기광전자소자용 화합물을 포함한다. 특히, 정공수송층 또는 정공주입층에 본 발명의 일 구현예에 따른 유기광전자소자용 화합물을 포함할 수 있다. 또한, 상기 유기광전자소자용 화합물이 발광층 내에 포함되는 경우 상기 유기광전자소자용 화합물은 인광 또는 형광호스트로서 포함될 수 있고, 특히, 형광 청색 도펀트 재료로서 포함될 수 있다.

[0475] 도 1 및 도 2는 본 발명의 일 구현예에 따른 유기광전자소자용 화합물을 포함하는 유기발광소자의 단면도이다.

[0476] 도 1 및 도 2를 참조하면, 본 발명의 일 구현예에 따른 유기발광소자(100 및 200)는 양극(120), 음극(110) 및 이 양극과 음극 사이에 개재된 적어도 1층의 유기박막층(105)을 포함하는 구조를 갖는다.

[0477] 상기 양극(120)은 양극 물질을 포함하며, 이 양극 물질로는 통상 유기박막층으로 정공주입이 원활할 수 있도록 일함수가 큰 물질이 바람직하다. 상기 양극 물질의 구체적인 예로는 니켈, 백금, 바나듐, 크롬, 구리, 아연, 금과 같은 금속 또는 이들의 합금을 들 수 있고, 아연산화물, 인듐산화물, 인듐주석산화물(ITO), 인듐아연산화물(IZO)과 같은 금속 산화물을 들 수 있고, ZnO와 Al 또는 SnO₂와 Sb와 같은 금속과 산화물의 조합을 들 수 있고, 폴리(3-메틸티오펜), 폴리[3,4-(에틸렌-1,2-디옥시)티오펜](polyethylenedioxythiophene: PEDT), 폴리피롤 및 폴리아닐린과 같은 전도성 고분자 등을 들 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다. 바람직하게는 상기 양극으로 ITO(indium tin oxide)를 포함하는 투명전극을 사용할 수 있다.

[0478] 상기 음극(110)은 음극 물질을 포함하며, 이 음극 물질로는 통상 유기박막층으로 전자주입이 용이하도록 일함수가 작은 물질인 것이 바람직하다. 음극 물질의 구체적인 예로는 마그네슘, 칼슘, 나트륨, 칼륨, 타이타늄, 인듐, 이트륨, 리튬, 가돌리늄, 알루미늄, 은, 주석, 납, 세슘, 바륨 등과 같은 금속 또는 이들의 합금을 들 수 있고, LiF/Al, LiO₂/Al, LiF/Ca, LiF/Al 및 BaF₂/Ca과 같은 다층 구조 물질 등을 들 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다. 바람직하게는 상기 음극으로 알루미늄 등과 같은 금속전극을 사용할 수 있다.

[0479] 먼저 도 1을 참조하면, 도 1은 유기박막층(105)으로서 발광층(130)만이 존재하는 유기발광소자(100)를 나타낸 것으로, 상기 유기박막층(105)은 발광층(130)만으로 존재할 수 있다.

[0480] 도 2를 참조하면, 도 2는 유기박막층(105)으로서 전자수송층을 포함하는 발광층(230)과 정공수송층(140)이 존재하는 2층형 유기발광소자(200)를 나타낸 것으로, 도 2에 나타난 바와 같이, 유기박막층(105)은 발광층(230) 및 정공 수송층(140)을 포함하는 2층형일 수 있다. 이 경우 발광층(130)은 전자 수송층의 기능을 하며, 정공 수송층(140)은 ITO와 같은 투명전극과의 접합성 및 정공수송성을 향상시키는 기능을 한다. 또한 도 1 및 도2에서 도시하지는 않았지만, 본 발명의 소자는 도1 또는 도2의 유기박막층(105)에서 정공주입층, 보조정공수송층, 보조전자수송층, 전자주입층 등을 추가로 포함하여 다층으로 형성된 소자일 수 있다.

[0481] 상기 도 1 및 도 2에서 상기 유기박막층(105)을 이루는 발광층(130, 230), 정공 수송층(140)과 이에 추가될 수 있는 전자수송층, 보조전자수송층, 전자주입층, 보조정공수송층, 정공 주입층 및 이들의 조합으로 이루어진 군에서 선택되는 어느 하나는 상기 유기광전자소자용 화합물을 포함한다. 이 때 상기 유기광전자소자용 화합물은 상기 전자 수송층(150) 또는 전자주입층을 포함하는 전자수송층(150)에 사용될 수 있으며, 그중에서도 전자수송층에 포함될 경우 정공 차단층(도시하지 않음)을 별도로 형성할 필요가 없어 보다 단순화된 구조의 유기발광소자를 제공할 수 있어 바람직하다.

[0482] 또한, 상기 유기광전자소자용 화합물이 발광층(130, 230) 내에 포함되는 경우 상기 유기광전자소자용 화합물은 인광 또는 형광호스트로서 포함될 수 있으며, 또는 형광 청색 도펀트로서 포함될 수 있다.

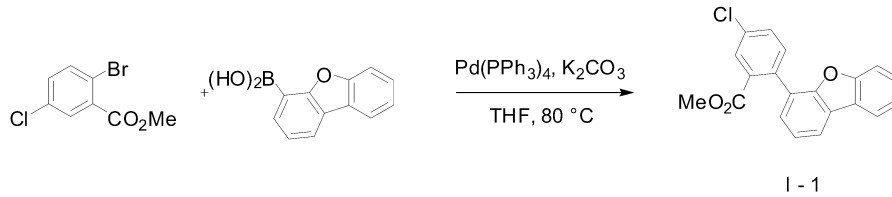
[0483] 상기에서 설명한 유기발광소자는, 기판에 양극을 형성한 후, 진공증착법(evaporation), 스퍼터링(sputtering), 플라즈마 도금 및 이온도금과 같은 건식성막법; 또는 스핀코팅(spin coating), 침지법(dipping), 유동코팅법(flow coating)과 같은 습식성막법 등으로 유기박막층을 형성한 후, 그 위에 음극을 형성하여 제조할 수 있다.

[0484] 본 발명의 또 다른 일 구현예에 따르면, 상기 유기발광소자를 포함하는 표시장치를 제공한다.

[0485] 이하에서는 본 발명의 구체적인 실시예들을 제시한다. 다만, 하기에 기재된 실시예들은 본 발명을 구체적으로 예시하거나 설명하기 위한 것에 불과하며, 이로서 본 발명이 제한되어서는 아니된다.

[0487] **(유기광전자소자용 화합물의 제조)**

[0488] **합성예 1: 중간체 I-1의 제조**



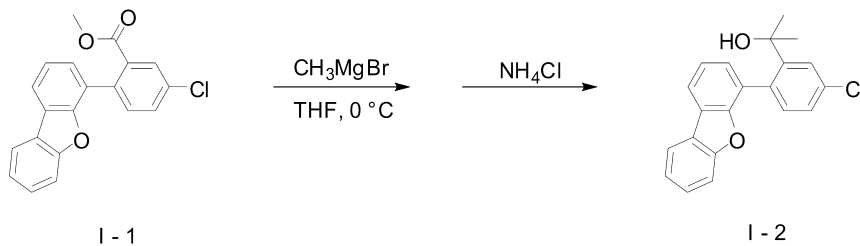
[0489]

[0490] 질소 환경에서 메틸-2-브로모-5-클로로벤조에이트(methyl-2-bromo-5-chlorobenzoate)(50 g, 200 mmol)을 테트라하이드로퓨란(THF) 0.5 L에 녹인 후, 여기에 디벤조퓨라-4-닐-보론산(dibenzofuran-4-ylboronic acid) (51 g, 241 mmol)와 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐(tetrakis(triphenylphosphine)palladium)(7.0 g, 6.0 mmol)을 넣고 교반시켰다. 물에 포화된 칼륨 카보네이트(potassium carbonate)(59 g, 401 mmol)을 넣고 80 °C에서 24시간 동안 가열하여 환류 시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 디클로로메탄(DCM)로 추출한 다음 무수 MgSO₄로 수분을 제거한 후, 필터하고 감압 농축하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 컬럼 크로마토그래피(flash column chromatography)로 분리 정제하여 화합물 I-1(55g, 81 %)을 얻었다.

[0491] HRMS (70 eV, EI+): m/z calcd for C₂₀H₁₃C₁₀O₃: 336.0553, found: 336.1.

[0492] Elemental Analysis: C, 71 %; H, 4 %

[0494] **합성예 2: 중간체 I-2의 제조**



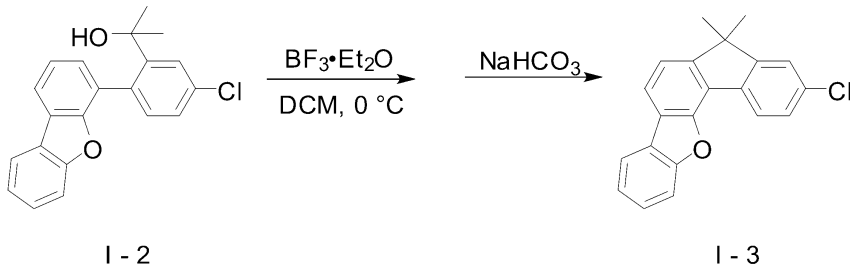
[0495]

[0496] 질소 환경에서 중간체 I-1(110 g, 327 mmol)을 테트라하이드로퓨란(THF) 1 L에 녹인 후, 0 °C로 감온하였다. 여기에 디에틸 에테르(diethyl ether)에 녹아있는 메틸마그네슘브로마이드(methylmagnesium bromide) 3.0 M(0.27 L, 817 mmol)을 1시간에 걸쳐 천천히 적가 하였다. 이후 상온에서 29시간 동안 교반 하였다. 반응 완료 후, 물 0.25 L에 녹인 암모늄 클로라이드(ammonium chloride)(52.4 g, 980 mmol)를 첨가하여 반응액을 중화 시켰다. 그리고 디클로로메탄(DCM)로 추출한 다음 무수 MgSO₄로 수분을 제거한 후, 필터하고 감압 농축하였다. 혼합물 I-2(113 g, 102 %)을 얻었다.

[0497] HRMS (70 eV, EI+): m/z calcd for C₂₁H₁₇C₁₀O₂: 336.0917, found: 336.1.

[0498] Elemental Analysis: C, 75 %; H, 5 %

[0500] **합성예 3: 중간체 I-3의 제조**



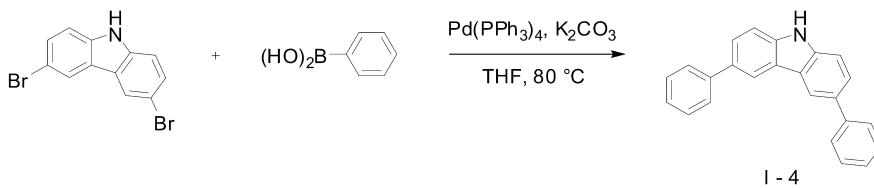
[0501]

[0502] 질소 환경에서 중간체 I-2(113 g, 373 mmol)을 디클로로메탄(DCM) 0.6 L에 녹인 후, 0 °C로 감온하였다. 여기에 디에틸 에테르(diethyl ether)에 녹아있는 보론 트리플루오라이드(boron trifluoride)(52.9 g, 373 mmol)을 1 시간에 걸쳐 천천히 적가 하였다. 이후 상온에서 12시간 동안 교반 하였다. 반응 완료 후, 물 0.25 L에 녹인 소듐 바이카보네이트(sodium bicarbonate)(31.3 g, 373 mmol)를 첨가하여 반응액을 중화 시켰다. 그리고 디클로로메탄(DCM)로 추출한 다음 무수 MgSO₄로 수분을 제거한 후, 이렇게 얻어진 잔사를 컬럼 크로마토그래피(flash column chromatography)로 분리 정제하여 화합물 I-3(67g, 69 %)을 얻었다.

[0503] HRMS (70 eV, EI⁺): m/z calcd for C₂₁H₁₅C₁₀: 318.0811, found: 318.1.

[0504] Elemental Analysis: C, 79 %; H, 5 %

[0506] **합성예 4: 중간체 I-4의 제조**



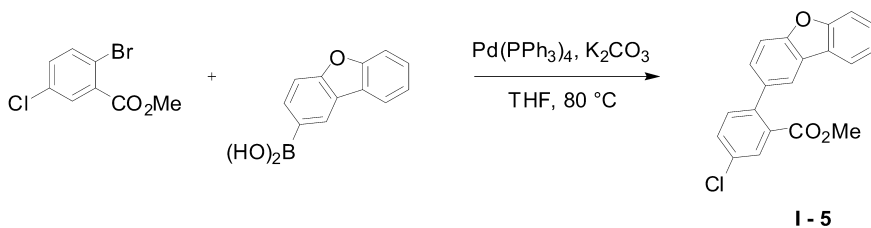
[0507]

[0508] 질소 환경에서 3,6-디브로모-9H-카바졸 (3,6-dibromo-9H-carbazol)(30 g, 92.3 mmol)을 테트라하이드로퓨란 (THF) 0.3 L에 녹인 후, 여기에 페닐 보론산 (phenyl boronic acid) (28 g, 231 mmol)와 테트라키스(트리페닐 포스핀)팔라듐(tetrakis(triphenylphosphine)palladium)(3.2 g, 2.8 mmol)을 넣고 교반시켰다. 물에 포화된 칼륨 카보네이트(potassium carbonate)(40.8 g, 277 mmol)을 넣고 80 °C에서 10시간 동안 가열하여 환류 시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 디클로로메탄(DCM)로 추출한 다음 무수 MgSO₄로 수분을 제거한 후, 필터하고 감압 농축하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 컬럼 크로마토그래피(flash column chromatography)로 분리 정제하여 화합물 I-4(14.3g, 48 %)을 얻었다.

[0509] HRMS (70 eV, EI⁺): m/z calcd for C₂₄H₁₇N: 319.1361, found: 319.1.

[0510] Elemental Analysis: C, 90 %; H, 5 %

[0512] **합성예 5: 중간체 I-5의 제조**



[0513]

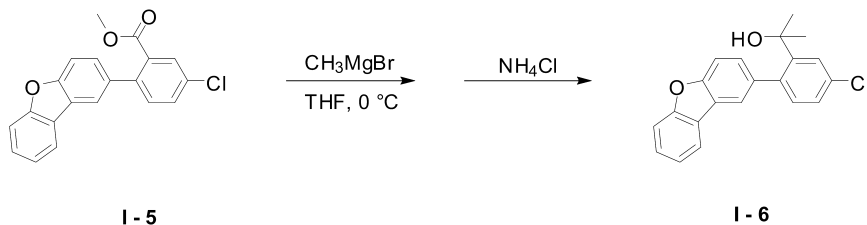
[0514] 질소 환경에서 메틸-2-브로모-5-클로로벤조에이트(methyl-2-bromo-5-chlorobenzoate)(50 g, 200 mmol)을 테트라하이드로퓨란(THF) 0.5 L에 녹인 후, 여기에 디벤조퓨라-2-닐-보론산(dibenzofuran-2-ylboronic acid) (51 g, 241 mmol)와 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐(tetrakis(triphenylphosphine)palladium)(7.0 g, 6.0 mmol)을 넣고 교반시켰다. 물에 포화된 칼륨 카보네이트(potassium carbonate)(59 g, 401 mmol)을 넣고 80 °C에서

24시간 동안 가열하여 환류 시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 디클로로메탄(DCM)로 추출한 다음 무수 MgSO₄로 수분을 제거한 후, 필터하고 감압 농축하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 컬럼 크로마토그래피(flash column chromatography)로 분리 정제하여 화합물 I-5(63.4g, 94 %)을 얻었다.

[0515] HRMS (70 eV, EI⁺): m/z calcd for C₂₀H₁₃C₁₀O₃: 336.0553, found: 336.1.

[0516] Elemental Analysis: C, 71 %; H, 4 %

[0518] **합성예 6: 중간체 I-6의 제조**



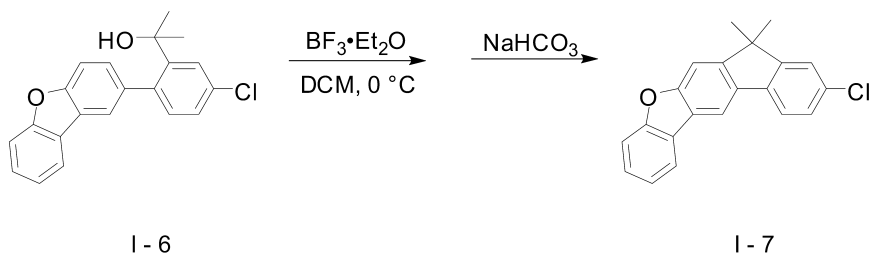
[0519]

[0520] 질소 환경에서 중간체 I-5(63.4 g, 188 mmol)을 테트라하이드로퓨란(THF) 0.6 L에 녹인 후, 0 °C로 감온하였다. 여기에 디에틸 에테르(diethyl ether)에 녹아있는 메틸마그네슘브로마이드(methylmagnesium bromide) 3.0 M(0.16 L, 470 mmol)을 1시간에 걸쳐 천천히 적가 하였다. 이후 상온에서 25시간 동안 교반 하였다. 반응 완료 후, 물 0.15 L에 녹인 암모늄 클로라이드(ammonium chloride)(30.2 g, 564 mmol)를 첨가하여 반응액을 중화 시켰다. 그리고 디클로로메탄(DCM)로 추출한 다음 무수 MgSO₄로 수분을 제거한 후, 필터하고 감압 농축하였다. 혼합물 I-6(63.3 g, 100 %)을 얻었다.

[0521] HRMS (70 eV, EI⁺): m/z calcd for C₂₁H₁₇C₁₀O₂: 336.0917, found: 336.1.

[0522] Elemental Analysis: C, 75 %; H, 5 %

[0524] **합성예 7: 중간체 I-7의 제조**



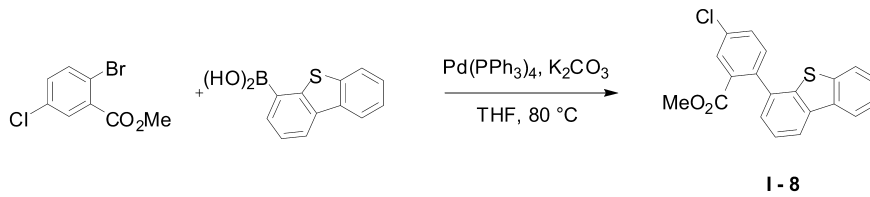
[0525]

[0526] 질소 환경에서 중간체 I-6(63.3 g, 188 mmol)을 디클로로메탄(DCM) 0.3 L에 녹인 후, 0 °C로 감온하였다. 여기에 디에틸 에테르(diethyl ether)에 녹아있는 보론 트리플루오라이드(boron trifluoride)(29.4 g, 207 mmol)을 1시간에 걸쳐 천천히 적가 하였다. 이후 상온에서 10시간 동안 교반 하였다. 반응 완료 후, 물 0.25 L에 녹인 소듐 바이카보네이트(sodium bicarbonate)(17.4 g, 207 mmol)를 첨가하여 반응액을 중화 시켰다. 그리고 디클로로메탄(DCM)로 추출한 다음 무수 MgSO₄로 수분을 제거한 후, 이렇게 얻어진 잔사를 컬럼 크로마토그래피(flash column chromatography)로 분리 정제하여 화합물 I-7(48.5 g, 81 %)을 얻었다.

[0527] HRMS (70 eV, EI⁺): m/z calcd for C₂₁H₁₅C₁₀: 318.0811, found: 318.1.

[0528] Elemental Analysis: C, 79 %; H, 5 %

[0530] **합성예 8: 중간체 I-8의 제조**



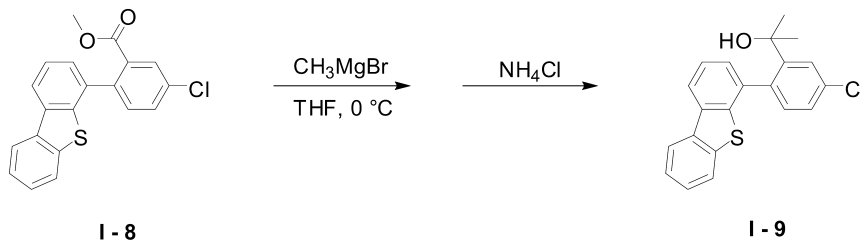
[0531]

[0532] 질소 환경에서 메틸-2-브로모-5-클로로벤조이트(methyl-2-bromo-5-chlorobenzoate)(50 g, 200 mmol)을 테트라하이드로퓨란(THF) 0.5 L에 녹인 후, 여기에 디벤조티오펜-4-일-보론산(dibenzothiophene-4-ylboronic acid)(50.2 g, 220 mmol)와 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐(tetrakis(triphenylphosphine)palladium)(4.62 g, 4.0 mmol)을 넣고 교반시켰다. 물에 포화된 칼륨 카보네이트(potassium carbonate)(58.9 g, 400 mmol)을 넣고 80 °C에서 21시간 동안 가열하여 환류 시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 디클로로메탄(DCM)로 추출한 다음 무수 MgSO₄로 수분을 제거한 후, 필터하고 감압 농축하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 컬럼 크로마토그래피(flash column chromatography)로 분리 정제하여 화합물 I-5(60 g, 85 %)을 얻었다.

[0533] HRMS (70 eV, EI⁺): m/z calcd for C₂₀H₁₃C₁₀S: 352.0325, found: 352.0.

[0534] Elemental Analysis: C, 68 %; H, 4 %

[0536] **합성예 9: 중간체 I-9의 제조**



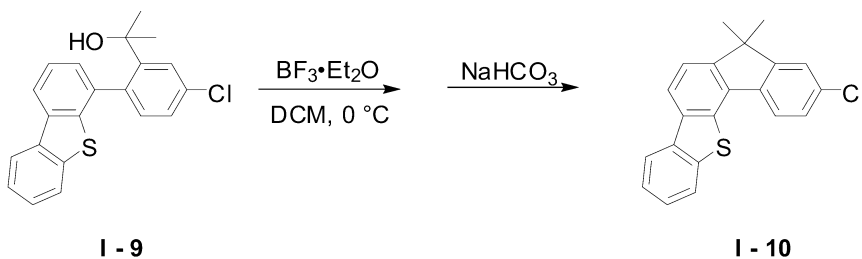
[0537]

[0538] 질소 환경에서 중간체 I-8(60 g, 170 mmol)을 테트라하이드로퓨란(THF) 0.6 L에 녹인 후, 0 °C로 감온하였다. 여기에 디에틸 에테르(diethyl ether)에 녹아있는 메틸마그네슘브로마이드(methylmagnesium bromide) 3.0 M(0.14 L, 425 mmol)을 1시간에 걸쳐 천천히 적가 하였다. 이후 상온에서 10시간 동안 교반 하였다. 반응 완료 후, 물 0.14 L에 녹인 암모늄 클로라이드(ammonium chloride)(27.3 g, 510 mmol)를 첨가하여 반응액을 중화 시켰다. 그리고 디클로로메탄(DCM)로 추출한 다음 무수 MgSO₄로 수분을 제거한 후, 필터하고 감압 농축하였다. 혼합물 I-9(60 g, 100 %)을 얻었다.

[0539] HRMS (70 eV, EI⁺): m/z calcd for C₂₁H₁₇C₁₀S: 352.0689, found: 352.1.

[0540] Elemental Analysis: C, 71 %; H, 5 %

[0542] **합성예 10: 중간체 I-10의 제조**



[0543]

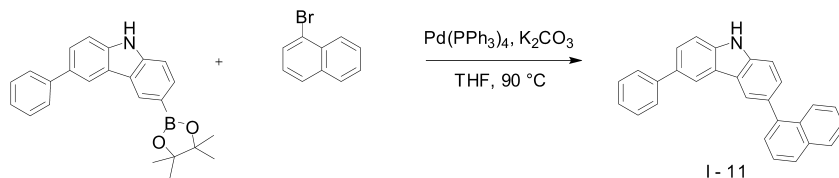
[0544] 질소 환경에서 중간체 I-9(60 g, 170 mmol)을 디클로로메탄(DCM) 0.85 L에 녹인 후, 0 °C로 감온하였다. 여기에 디에틸 에테르(diethyl ether)에 녹아있는 보론 트리플루오라이드(boron trifluoride)(26.5 g, 187 mmol)을 1

시간에 걸쳐 천천히 적가 하였다. 이후 상온에서 6시간 동안 교반 하였다. 반응 완료 후, 물 0.16 L에 녹인 소듐 바이카보네이트(sodium bicarbonate)(15.7 g, 187 mmol)를 첨가하여 반응액을 중화 시켰다. 그리고 디클로로메탄(DCM)로 추출한 다음 무수 MgSO₄로 수분을 제거한 후, 이렇게 얻어진 잔사를 컬럼 크로마토그래피(flash column chromatography)로 분리 정제하여 화합물 I-10(43.8 g, 77 %)을 얻었다.

[0545] HRMS (70 eV, EI+): m/z calcd for C₂₁H₁₅C₁S: 334.0583, found: 334.1.

[0546] Elemental Analysis: C, 75 %; H, 5 %

[0548] **합성예 11: 중간체 I-11의 제조**



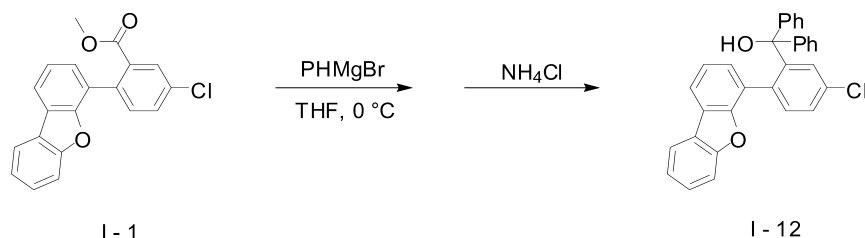
[0549]

[0550] 질소 환경에서 1-브로모나프탈렌(1-bromonaphthalene)(15 g, 72.4 mmol)을 테트라하이드로퓨란(THF) 0.2 L에 녹인 후, 여기에 3-페닐-6-(4,4,5,5-테트라메틸-1,3,2-디옥사보롤란-2-일)-9H-카바졸(3-phenyl-6-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-9H-carbazole)(29.4 g, 79.7 mmol)와 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐(tetrakis(triphenylphosphine)palladium)(0.84 g, 0.72 mmol)을 넣고 교반시켰다. 물에 포화된 칼륨 카보네이트(potassium carbonate)(21.3 g, 155 mmol)을 넣고 90 °C에서 50시간 동안 가열하여 환류 시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 디클로로메탄(DCM)로 추출한 다음 무수 MgSO₄로 수분을 제거한 후, 필터하고 감압 농축하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 컬럼 크로마토그래피(flash column chromatography)로 분리 정제하여 화합물 I-11(7 g, 26 %)을 얻었다.

[0551] HRMS (70 eV, EI+): m/z calcd for C₂₈H₁₉N: 369.1517, found: 369.5.

[0552] Elemental Analysis: C, 91 %; H, 5 %

[0554] **합성예 12: 중간체 I-12의 제조**



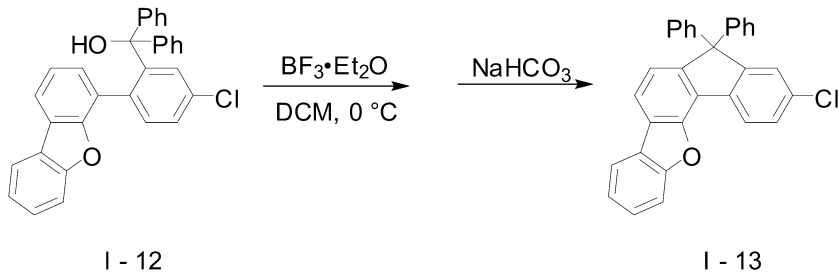
[0555]

[0556] 질소 환경에서 중간체 I-1(50 g, 148 mmol)을 테트라하이드로퓨란(THF) 0.5 L에 녹인 후, 0 °C로 감온하였다. 여기에 디에틸 에테르(diethyl ether)에 녹아있는 페닐마그네슘 브로마이드(phenylmagnesium bromide) 3.0 M(0.12 L, 370 mmol)을 1시간에 걸쳐 천천히 적가 하였다. 이후 상온에서 30시간 동안 교반 하였다. 반응 완료 후, 물 0.12 L에 녹인 암모늄 클로라이드(ammonium chloride)(23.7 g, 444 mmol)를 첨가하여 반응액을 중화 시켰다. 그리고 디클로로메탄(DCM)로 추출한 다음 무수 MgSO₄로 수분을 제거한 후, 필터하고 감압 농축하였다. 혼합물 I-2(68.2 g, 100 %)을 얻었다.

[0557] HRMS (70 eV, EI+): m/z calcd for C₃₁H₂₁C₁O₂: 460.1230, found: 460.1.

[0558] Elemental Analysis: C, 81 %; H, 5 %

[0560] **합성예 13: 중간체 I-13의 제조**



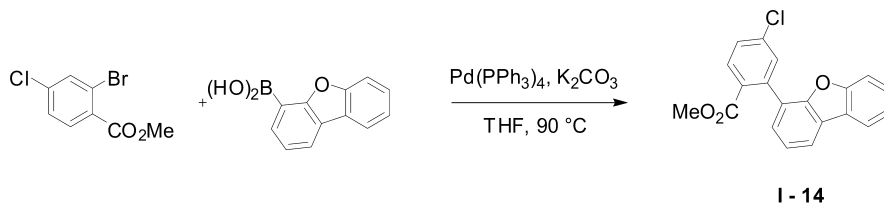
[0561]

[0562] 질소 환경에서 중간체 I-12(68.2 g, 148 mmol)을 디클로로메탄(DCM) 0.34 L에 녹인 후, 0 °C로 감온하였다. 여기에 디에틸 에테르(diethyl ether)에 녹아있는 보론 트리플루오라이드(boron trifluoride)(23.1 g, 163 mmol)을 1시간에 걸쳐 천천히 적가 하였다. 이후 상온에서 6시간 동안 교반 하였다. 반응 완료 후, 물 0.14 L에 녹인 소듐 바이카보네이트(sodium bicarbonate)(13.7 g, 163 mmol)를 첨가하여 반응액을 중화 시켰다. 그리고 디클로로메탄(DCM)로 추출한 다음 무수 MgSO₄로 수분을 제거한 후, 이렇게 얻어진 잔사를 컬럼 크로마토그래피(flash column chromatography)로 분리 정제하여 화합물 I-13(60.3 g, 92 %)을 얻었다.

[0563] HRMS (70 eV, EI⁺): m/z calcd for C₃₁H₁₉ClO: 442.1124, found: 442.1.

[0564] Elemental Analysis: C, 84 %; H, 4 %

[0566] **합성예 14: 중간체 I-14의 제조**



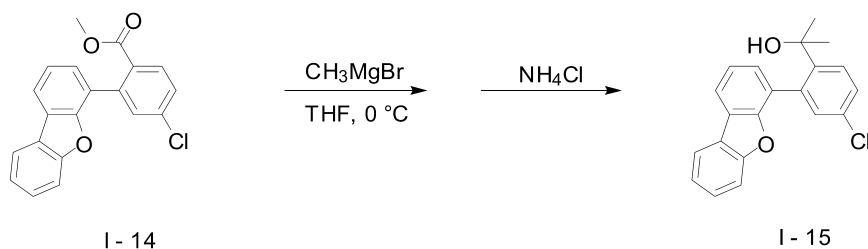
[0567]

[0568] 질소 환경에서 메틸-2-브로모-4-클로로벤조에이트(methyl-2-bromo-4-chlorobenzoate)(50 g, 200 mmol)을 테트라하이드로퓨란(THF) 0.5 L에 녹인 후, 여기에 디벤조퓨라-4-닐-보론산(dibenzofuran-4-ylboronic acid) (46.7 g, 220 mmol)와 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐(tetrakis(triphenylphosphine)palladium)(4.63 g, 4.01 mmol)을 넣고 교반시켰다. 물에 포화된 칼륨 카보네이트(potassium carbonate)(59.0 g, 401 mmol)을 넣고 90 °C에서 21시간 동안 가열하여 환류 시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 디클로로메탄(DCM)로 추출한 다음 무수 MgSO₄로 수분을 제거한 후, 필터하고 감압 농축하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 컬럼 크로마토그래피(flash column chromatography)로 분리 정제하여 화합물 I-14(47.7 g, 71 %)을 얻었다.

[0569] HRMS (70 eV, EI⁺): m/z calcd for C₂₀H₁₃ClO₃: 336.0553, found: 336.1.

[0570] Elemental Analysis: C, 71 %; H, 4 %

[0572] **합성예 15: 중간체 I-15의 제조**



[0573]

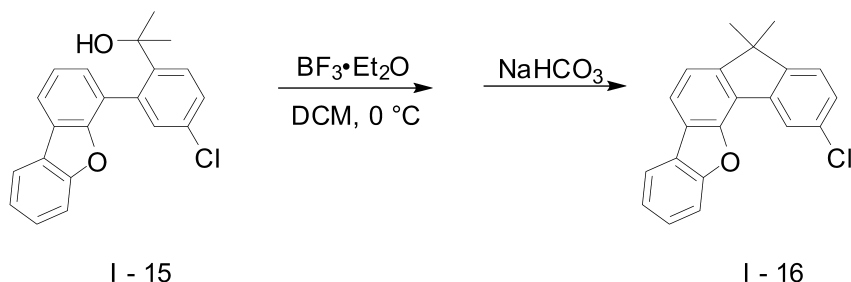
[0574] 질소 환경에서 중간체 I-14(47.7 g, 142 mmol)을 테트라하이드로퓨란(THF) 0.5 L에 녹인 후, 0 °C로 감온하였다. 여기에 디에틸 에테르(diethyl ether)에 녹아있는 메틸마그네슘브로마이드(methylmagnesium

bromide) 3.0 M(0.12 L, 354 mmol)을 1시간에 걸쳐 천천히 적가 하였다. 이후 상온에서 19시간 동안 교반 하였다. 반응 완료 후, 물 0.12 L에 녹인 암모늄 클로라이드(ammonium chloride)(22.7 g, 425 mmol)를 첨가하여 반응액을 중화 시켰다. 그리고 디클로로메탄(DCM)로 추출한 다음 무수 MgSO₄로 수분을 제거한 후, 필터하고 감압 농축하였다. 혼합물 I-15(49.4 g, 104 %)을 얻었다.

[0575] HRMS (70 eV, EI+): m/z calcd for C₂₁H₁₇ClO₂: 336.0917, found: 336.1.

[0576] Elemental Analysis: C, 75 %; H, 5 %

[0578] **합성예 16:중간체 I-16의 제조**



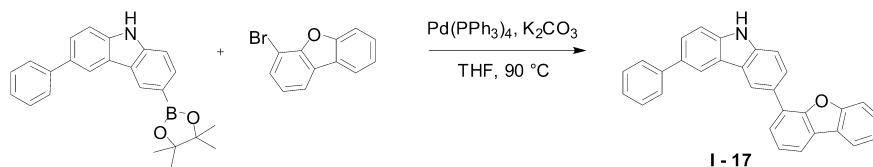
[0579]

[0580] 질소 환경에서 중간체 I-15(49.4 g, 147 mmol)을 디클로로메탄(DCM) 0.25 L에 녹인 후, 0 °C로 감온하였다. 여기에 디에틸 에테르(diethyl ether)에 녹아있는 보론 트리플루오라이드(boron trifluoride)(22.9 g, 161 mmol)을 1시간에 걸쳐 천천히 적가 하였다. 이후 상온에서 6시간 동안 교반 하였다. 반응 완료 후, 물 0.14 L에 녹인 소듐 바이카보네이트(sodium bicarbonate)(13.6 g, 161 mmol)를 첨가하여 반응액을 중화 시켰다. 그리고 디클로로메탄(DCM)로 추출한 다음 무수 MgSO₄로 수분을 제거한 후, 이렇게 얻어진 잔사를 컬럼 크로마토그래피(flash column chromatography)로 분리 정제하여 화합물 I-16(34 g, 73 %)을 얻었다.

[0581] HRMS (70 eV, EI+): m/z calcd for C₂₁H₁₅ClO: 318.0811, found: 318.1.

[0582] Elemental Analysis: C, 79 %; H, 5 %

[0584] **합성예 17:중간체 I-17의 제조**



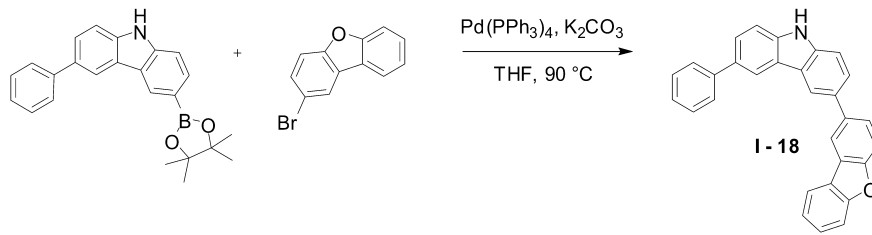
[0585]

[0586] 질소 환경에서 4-브로모디벤조퓨란(4-bromodibenzofuran)(15 g, 60.7 mmol)을 테트라하이드로퓨란(THF) 0.2 L에 녹인 후, 여기에 3-페닐-6-(4,4,5,5-테트라메틸-1,3,2-디옥사보롤란-2-일)-9H-카바졸(3-phenyl-6-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-9H-carbazole)(24.7 g, 66.8 mmol)와 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐(tetrakis(triphenylphosphine)palladium)(0.70 g, 0.61 mmol)을 넣고 교반시켰다. 물에 포화된 칼륨 카보네이트(potassium carbonate)(17.9 g, 121 mmol)을 넣고 90 °C에서 26시간 동안 가열하여 환류 시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 디클로로메탄(DCM)로 추출한 다음 무수 MgSO₄로 수분을 제거한 후, 필터하고 감압 농축하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 컬럼 크로마토그래피(flash column chromatography)로 분리 정제하여 화합물 I-17(22.6 g, 91 %)을 얻었다.

[0587] HRMS (70 eV, EI+): m/z calcd for C₃₀H₁₉NO: 409.1467, found: 409.1.

[0588] Elemental Analysis: C, 88 %; H, 5 %

[0590] **합성예 18: 중간체 I-18의 제조**



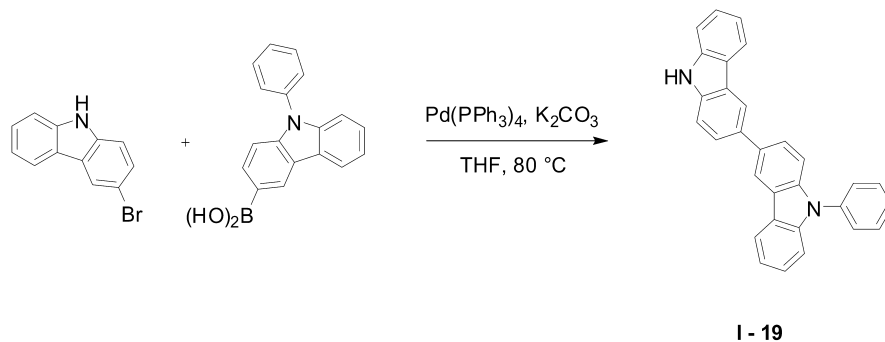
[0591]

[0592] 질소 환경에서 2-브로모디벤조퓨란(2-bromodibenzofuran)(15 g, 60.7 mmol)을 테트라하이드로퓨란(THF) 0.2 L에 녹인 후, 여기에 3-페닐-6-(4,4,5,5-테트라메틸-1,3,2-디옥사보롤란-2-일)-9H-카바졸(3-phenyl-6-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-9H-carbazole)(24.7 g, 66.8 mmol)와 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐(tetrakis(triphenylphosphine)palladium)(0.70 g, 0.61 mmol)을 넣고 교반시켰다. 물에 포화된 칼륨 카보네이트(potassium carbonate)(17.9 g, 121 mmol)을 넣고 90 °C에서 24시간 동안 가열하여 환류 시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 디클로로메탄(DCM)로 추출한 다음 무수 MgSO₄로 수분을 제거한 후, 필터하고 감압 농축하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 컬럼 크로마토그래피(flash column chromatography)로 분리 정제하여 화합물 I-17(22.4 g, 90 %)을 얻었다.

[0593] HRMS (70 eV, EI⁺): m/z calcd for C₃₀H₁₉NO: 409.1467, found: 409.1.

[0594] Elemental Analysis: C, 88 %; H, 5 %

[0596] **합성예 19: 중간체 I-19의 제조**



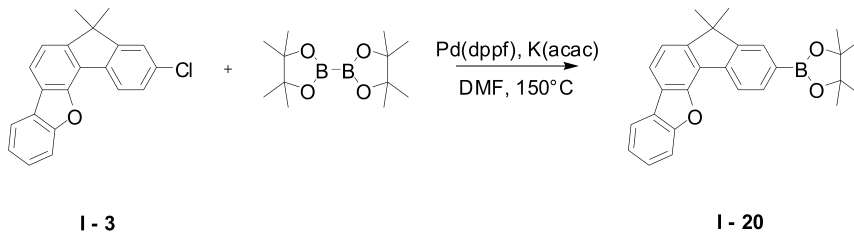
[0597]

[0598] 질소 환경에서 3-브로모-9H-카바졸(3-bromo-9H-carbazole)(100 g, 406 mmol)을 테트라하이드로퓨란(THF) 1.2 L에 녹인 후, 여기에 9-페닐-9H-카바졸-3-일-보론산(9-phenyl-9H-carbazol-3-ylboronic acid)(128 g, 447 mmol)와 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐(tetrakis(triphenylphosphine)palladium)(4.69 g, 4.06 mmol)을 넣고 교반시켰다. 물에 포화된 칼륨 카보네이트(potassium carbonate)(120 g, 812 mmol)을 넣고 80 °C에서 24시간 동안 가열하여 환류 시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 디클로로메탄(DCM)로 추출한 다음 무수 MgSO₄로 수분을 제거한 후, 필터하고 감압 농축하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 컬럼 크로마토그래피(flash column chromatography)로 분리 정제하여 화합물 I-19(74.6 g, 45 %)을 얻었다.

[0599] HRMS (70 eV, EI⁺): m/z calcd for C₃₀H₂₀N₂: 408.1626, found: 408.2.

[0600] Elemental Analysis: C, 88 %; H, 5 %

[0602] **합성예 20: 중간체 I-20의 제조**



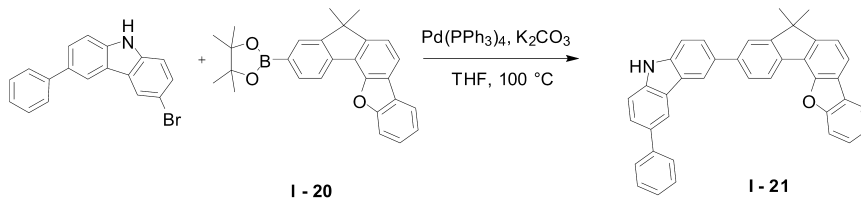
[0603]

[0604] 질소 환경에서 중간체 I-3(20 g, 62.7 mmol)을 디메틸포름아미드(DMF) 0.2 L에 녹인 후, 여기에 비스(피나콜라토)디보론(bis(pinacolato)diboron) (23.9 g, 94.1 mmol)와 (1,1'-비스(디페닐포스핀)페로센)디클로로팔라듐(II)((1,1'-bis(diphenylphosphine)ferrocene)dichloropalladium(II))(1.54 g, 1.88 mmol) 그리고 칼륨 아세테이트(potassium acetate)(12.3 g, 125 mmol)을 넣고 150 °C에서 24시간 동안 가열하여 환류 시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 혼합물을 필터한 후, 진공오븐에서 건조하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 컬럼 크로마토그래피(flash column chromatography)로 분리 정제하여 화합물 I-20(14.1 g, 55 %)을 얻었다.

[0605] HRMS (70 eV, EI+): m/z calcd for C₂₇H₂₇B₂O₃: 410.2053, found: 410.2.

[0606] Elemental Analysis: C, 79 %; H, 7 %

[0608] **합성예 21: 중간체 I-21의 제조**



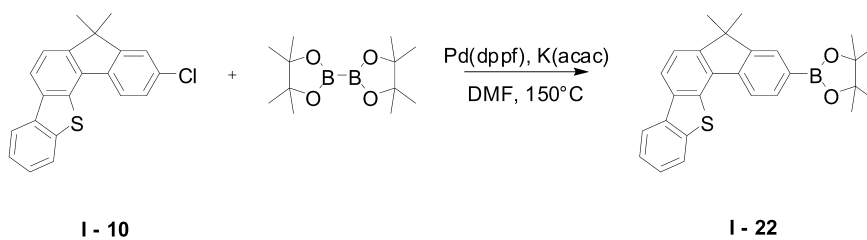
[0609]

[0610] 질소 환경에서 3-브로모-6-페닐-9H-카바졸(3-bromo-6-phenyl-9H-carbazole)(15 g, 46.6 mmol)을 테트라하이드로퓨란(THF) 0.2 L에 녹인 후, 여기에 중간체 I-20(21.0 g, 51.3 mmol)와 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐(tetrakis(triphenylphosphine)palladium)(0.54 g, 0.47 mmol)을 넣고 교반시켰다. 물에 포화된 칼륨 카보네이트(potassium carbonate)(13.7 g, 93.2 mmol)을 넣고 100 °C에서 94시간 동안 가열하여 환류 시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 디클로로메탄(DCM)로 추출한 다음 무수 MgSO₄로 수분을 제거한 후, 필터하고 감압 농축하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 컬럼 크로마토그래피(flash column chromatography)로 분리 정제하여 화합물 I-21(13.5 g, 55 %)을 얻었다.

[0611] HRMS (70 eV, EI+): m/z calcd for C₃₉H₂₇N₃O₃: 525.2093, found: 525.2.

[0612] Elemental Analysis: C, 89 %; H, 5 %

[0614] **합성예 22: 중간체 I-22의 제조**



[0615]

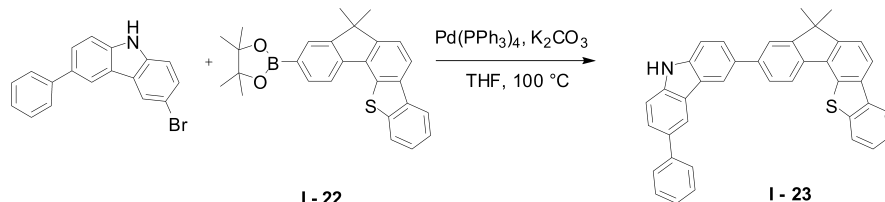
[0616] 질소 환경에서 중간체 I-10(50 g, 149 mmol)을 디메틸포름아미드(DMF) 0.5 L에 녹인 후, 여기에 비스(피나콜라토)디보론(bis(pinacolato)diboron) (56.9 g, 224 mmol)와 (1,1'-비스(디페닐포스핀)페로센)디클로로팔라듐(II)((1,1'-bis(diphenylphosphine)ferrocene)dichloropalladium(II))(3.65 g, 4.47 mmol) 그리고 칼륨 아세테이트(potassium acetate)(29.2 g, 298 mmol)을 넣고 150 °C에서 22시간 동안 가열하여 환류 시켰다. 반응 완

료 후 반응액에 물을 넣고 혼합물을 필터한 후, 진공오븐에서 건조하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 컬럼 크로마토그래피(flash column chromatography)로 분리 정제하여 화합물 I-22(34.3 g, 54 %)을 얻었다.

[0617] HRMS (70 eV, EI+): m/z calcd for C27H27B02S: 426.1825, found: 426.2.

[0618] Elemental Analysis: C, 76 %; H, 6 %

[0620] **합성예 23: 중간체 I-23의 제조**



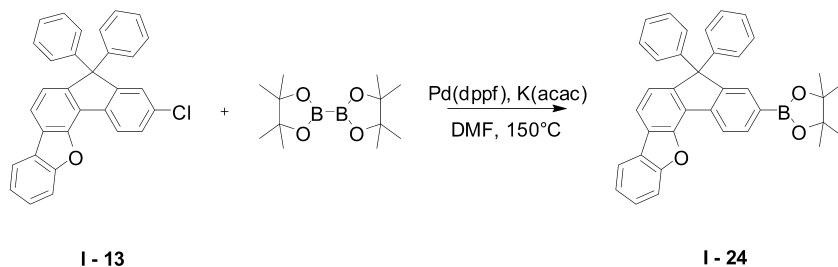
[0621]

[0622] 질소 환경에서 3-브로모-6-페닐-9H-카바졸(3-bromo-6-phenyl-9H-carbazole)(15 g, 46.6 mmol)을 테트라하이드로퓨란(THF) 0.2 L에 녹인 후, 여기에 중간체 I-22(21.9 g, 51.3 mmol)와 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐(tetrakis(triphenylphosphine)palladium)(0.54 g, 0.47 mmol)을 넣고 교반시켰다. 물에 포화된 칼륨 카보네이트(potassium carbonate)(13.7 g, 93.2 mmol)을 넣고 100 °C에서 82시간 동안 가열하여 환류 시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 디클로로메탄(DCM)로 추출한 다음 무수 MgSO₄로 수분을 제거한 후, 필터하고 감압 농축하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 컬럼 크로마토그래피(flash column chromatography)로 분리 정제하여 화합물 I-21(12.1 g, 48 %)을 얻었다.

[0623] HRMS (70 eV, EI+): m/z calcd for C39H27NS: 541.1864, found: 541.2.

[0624] Elemental Analysis: C, 86 %; H, 5 %

[0626] **합성예 24: 중간체 I-24의 제조**



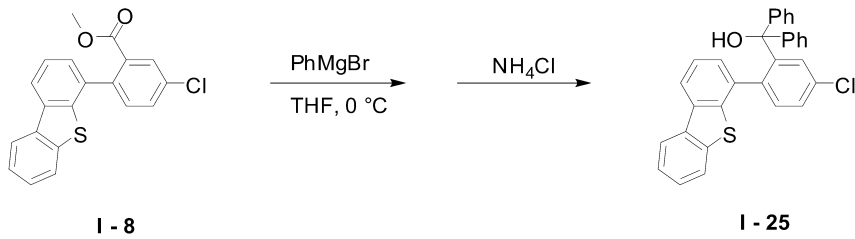
[0627]

[0628] 질소 환경에서 중간체 I-13(20 g, 45.2 mmol)을 디메틸포름아미드(DMF) 0.2 L에 녹인 후, 여기에 비스(피나콜라토)디보론(bis(pinacolato)diboron) (17.2 g, 67.7 mmol)와 (1,1'-비스(디페닐포스핀)페로센)디클로로팔라듐(II)((1,1'-bis(diphenylphosphine)ferrocene)dichloropalladium(II))(1.11 g, 1.36 mmol) 그리고 칼륨 아세테이트(potassium acetate)(8.87 g, 90.4 mmol)을 넣고 150 °C에서 29시간 동안 가열하여 환류 시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 혼합물을 필터한 후, 진공오븐에서 건조하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 컬럼 크로마토그래피(flash column chromatography)로 분리 정제하여 화합물 I-24(12.8 g, 53 %)을 얻었다.

[0629] HRMS (70 eV, EI+): m/z calcd for C37H31B03: 534.2366, found: 534.2.

[0630] Elemental Analysis: C, 83 %; H, 6 %

[0632] **합성예 25: 중간체 I-25의 제조**



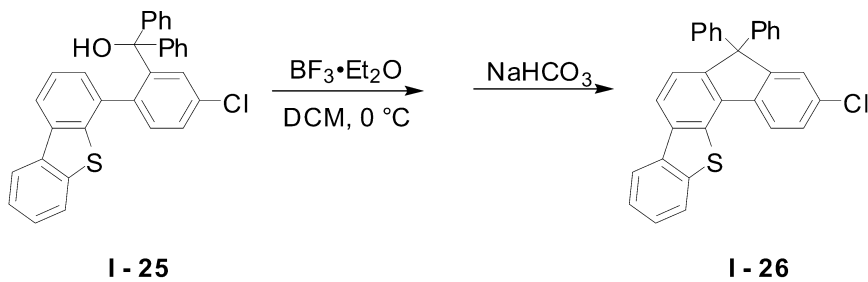
[0633]

[0634] 질소 환경에서 중간체 I-8(50 g, 142 mmol)을 테트라하이드로퓨란(THF) 0.5 L에 녹인 후, 0 °C로 감온하였다. 여기에 디에틸 에테르(diethyl ether)에 녹아있는 페닐마그네슘 브로마이드(phenylmagnesium bromide) 3.0 M(0.12 L, 355 mmol)을 1시간에 걸쳐 천천히 적가 하였다. 이후 상온에서 12시간 동안 교반 하였다. 반응 완료 후, 물 0.14 L에 녹인 암모늄 클로라이드(ammonium chloride)(22.8 g, 426 mmol)를 첨가하여 반응액을 중화 시켰다. 그리고 디클로로메탄(DCM)로 추출한 다음 무수 MgSO₄로 수분을 제거한 후, 필터하고 감압 농축하였다. 혼합물 I-25(67.7 g, 100 %)을 얻었다.

[0635] HRMS (70 eV, EI⁺): m/z calcd for C₃₁H₂₁ClSO: 476.1002, found: 476.1.

[0636] Elemental Analysis: C, 78 %; H, 4 %

[0638] **합성예 26: 중간체 I-26의 제조**



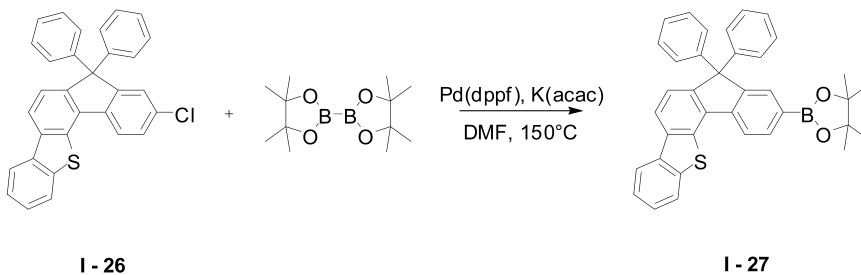
[0639]

[0640] 질소 환경에서 중간체 I-25(67.7 g, 142 mmol)을 디클로로메탄(DCM) 0.3 L에 녹인 후, 0 °C로 감온하였다. 여기에 디에틸 에테르(diethyl ether)에 녹아있는 보론 트리플루오라이드(boron trifluoride)(22.2 g, 156 mmol)을 1시간에 걸쳐 천천히 적가 하였다. 이후 상온에서 6시간 동안 교반 하였다. 반응 완료 후, 물 0.14 L에 녹인 소듐 바이카보네이트(sodium bicarbonate)(13.1 g, 156 mmol)를 첨가하여 반응액을 중화 시켰다. 그리고 디클로로메탄(DCM)로 추출한 다음 무수 MgSO₄로 수분을 제거한 후, 이렇게 얻어진 잔사를 컬럼 크로마토그래피(flash column chromatography)로 분리 정제하여 화합물 I-26(53.4 g, 82 %)을 얻었다.

[0641] HRMS (70 eV, EI⁺): m/z calcd for C₃₁H₁₉ClS: 458.0896, found: 458.1.

[0642] Elemental Analysis: C, 81 %; H, 4 %

[0644] **합성예 27: 중간체 I-27의 제조**



[0645]

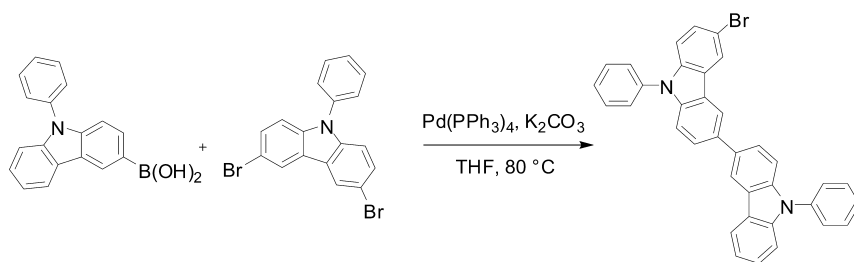
[0646] 질소 환경에서 중간체 I-26(50 g, 109 mmol)을 디메틸포름아미드(DMF) 0.5 L에 녹인 후, 여기에 비스(피나콜라

토)디보론(bis(pinacolato)diboron) (41.5 g, 163 mmol)와 (1,1'-비스(디페닐포스핀)페로센)디클로로팔라듐(II)((1,1'-bis(diphenylphosphine)ferrocene)dichloropalladium(II))(2.67 g, 3.27 mmol) 그리고 칼륨 아세테이트(potassium acetate)(21.4 g, 218 mmol)을 넣고 150 °C에서 23시간 동안 가열하여 환류 시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 혼합물을 필터한 후, 진공오븐에서 건조하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 컬럼 크로마토그래피(flash column chromatography)로 분리 정제하여 화합물 I-27(31.2 g, 52 %)을 얻었다.

[0647] HRMS (70 eV, EI+): m/z calcd for C₃₇H₃₁B₀S₂: 550.2138, found: 550.2.

[0648] Elemental Analysis: C, 81 %; H, 6 %

[0650] **합성예 28: 중간체 I-28의 제조**



I - 28

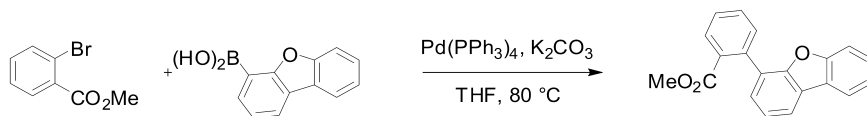
[0651]

[0652] 질소 환경에서 여기에 9-페닐-9H-카바졸-3-일-보론산(9-phenyl-9H-carbazol-3-ylboronic acid)(100 g, 348 mmol)을 테트라하이드로퓨란(THF) 1.3 L에 녹인 후, 여기에 3,6-디브로모-9-페닐-9H-카바졸(3,6-dibromo-9-phenyl-9H-carbazole)(168 g, 418 mmol)와 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐(tetrakis(triphenylphosphine)palladium)(4.02 g, 3.48 mmol)을 넣고 교반시켰다. 물에 포화된 칼륨 카보네이트(potassium carbonate)(102 g, 696 mmol)을 넣고 80 °C에서 16시간 동안 가열하여 환류 시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 디클로로메탄(DCM)로 추출한 다음 무수 MgSO₄로 수분을 제거한 후, 필터하고 감압 농축하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 컬럼 크로마토그래피(flash column chromatography)로 분리 정제하여 화합물 I-28(62.8 g, 32 %)을 얻었다.

[0653] HRMS (70 eV, EI+): m/z calcd for C₃₆H₂₃BrN₂: 562.1045, found: 562.1.

[0654] Elemental Analysis: C, 77 %; H, 4 %

[0656] **합성예 29: 중간체 I-29의 제조**



I - 29

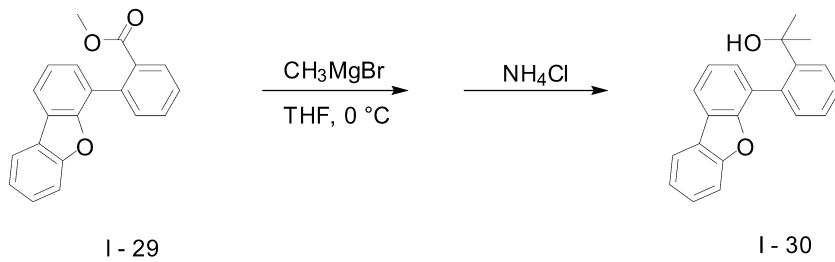
[0657]

[0658] 질소 환경에서 메틸 2-브로모벤조에이트(methyl 2-bromobenzoate)(50 g, 233 mmol)을 테트라하이드로퓨란(THF) 0.5 L에 녹인 후, 여기에 디벤조퓨라-4-닐-보론산(dibenzofuran-4-ylboronic acid) (54.3 g, 256 mmol)와 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐(tetrakis(triphenylphosphine)palladium)(2.69 g, 2.33 mmol)을 넣고 교반시켰다. 물에 포화된 칼륨 카보네이트(potassium carbonate)(68.6 g, 466 mmol)을 넣고 80 °C에서 27시간 동안 가열하여 환류 시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 디클로로메탄(DCM)로 추출한 다음 무수 MgSO₄로 수분을 제거한 후, 필터하고 감압 농축하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 컬럼 크로마토그래피(flash column chromatography)로 분리 정제하여 화합물 I-29(54.9 g, 78 %)을 얻었다.

[0659] HRMS (70 eV, EI+): m/z calcd for C₂₀H₁₄O₃: 302.0943, found: 302.1.

[0660] Elemental Analysis: C, 79 %; H, 5 %

[0662] **합성예 30: 중간체 I-30의 제조**



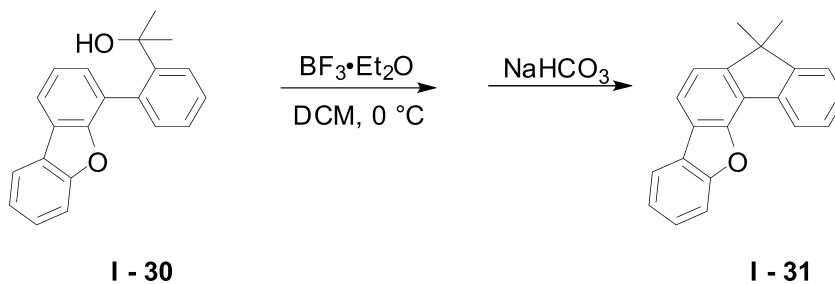
[0663]

[0664] 질소 환경에서 중간체 I-29(54.9 g, 182 mmol)을 테트라하이드로퓨란(THF) 0.5 L에 녹인 후, 0 °C로 감온하였다. 여기에 디에틸 에테르(diethyl ether)에 녹아있는 메틸마그네슘브로마이드(methylmagnesium bromide) 3.0 M(0.15 L, 454 mmol)을 1시간에 걸쳐 천천히 적가 하였다. 이후 상온에서 17시간 동안 교반 하였다. 반응 완료 후, 물 0.15 L에 녹인 암모늄 클로라이드(ammonium chloride)(29.2 g, 546 mmol)를 첨가하여 반응액을 중화 시켰다. 그리고 디클로로메탄(DCM)로 추출한 다음 무수 MgSO₄로 수분을 제거한 후, 필터하고 감압 농축하였다. 혼합물 I-30(55.6 g, 101 %)을 얻었다.

[0665] HRMS (70 eV, EI⁺): m/z calcd for C₂₁H₁₈O₂: 302.1307, found: 302.1.

[0666] Elemental Analysis: C, 83 %; H, 6 %

[0668] **합성예 31: 중간체 I-31의 제조**



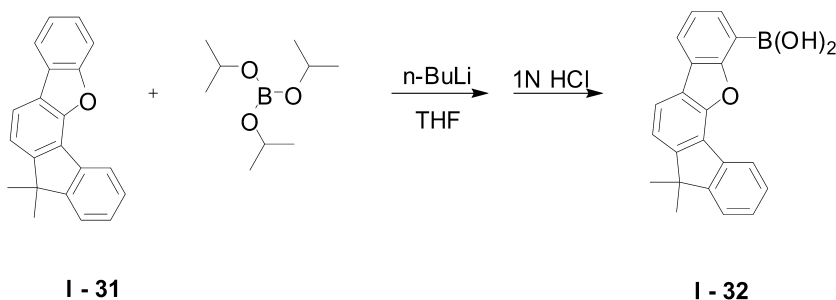
[0669]

[0670] 질소 환경에서 중간체 I-30(55.6 g, 184 mmol)을 디클로로메탄(DCM) 0.3 L에 녹인 후, 0 °C로 감온하였다. 여기에 디에틸 에테르(diethyl ether)에 녹아있는 보론 트리플루오라이드(boron trifluoride)(28.7 g, 202 mmol)을 1시간에 걸쳐 천천히 적가 하였다. 이후 상온에서 5시간 동안 교반 하였다. 반응 완료 후, 물 0.1 L에 녹인 소듐 바이카보네이트(sodium bicarbonate)(17.0 g, 202 mmol)를 첨가하여 반응액을 중화 시켰다. 그리고 디클로로메탄(DCM)로 추출한 다음 무수 MgSO₄로 수분을 제거한 후, 이렇게 얻어진 잔사를 컬럼 크로마토그래피(flash column chromatography)로 분리 정제하여 화합물 I-31(37.7 g, 72 %)을 얻었다.

[0671] HRMS (70 eV, EI⁺): m/z calcd for C₂₁H₁₆O: 284.1201, found: 284.1.

[0672] Elemental Analysis: C, 89 %; H, 6 %

[0674] **합성예 32: 중간체 I-32의 제조**



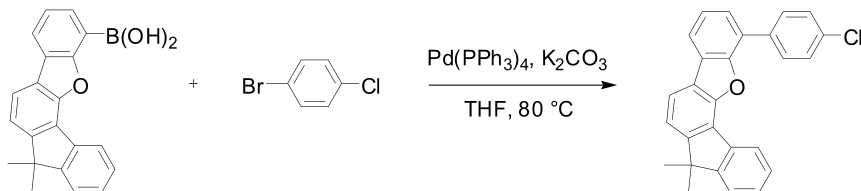
[0675]

[0676] 질소 환경에서 중간체 I-31(37.7 g, 133 mmol)을 테트라하이드로퓨란(THF) 0.3 L에 녹인 후, -78 °C로 감온하였다. 여기에 헥산(hexane)에 녹아있는 n-BuLi 2.5 M(80 mL, 200 mmol)을 10분에 걸쳐 천천히 적가 하였다. 이후 상온에서 16시간 동안 교반 하였다. 반응 완료 후, 물 1N HCl(200 mL, 200 mmol)를 첨가하여 반응액을 중화시켰다. 그리고 에틸렌 아세테이트(ethylacetate, EA)로 추출한 다음 무수 MgSO₄로 수분을 제거한 후, 이렇게 얻어진 잔사를 헥산(hexane)과 디클로로메탄(DCM)로 불순물을 씻어내어 화합물 I-32(34.5 g, 79 %)을 얻었다.

[0677] HRMS (70 eV, EI+): m/z calcd for C₂₁H₁₇O₃: 328.1271, found: 328.1.

[0678] Elemental Analysis: C, 77 %; H, 5 %

[0680] **합성예 33:중간체 I-33의 제조**



I - 32

I - 33

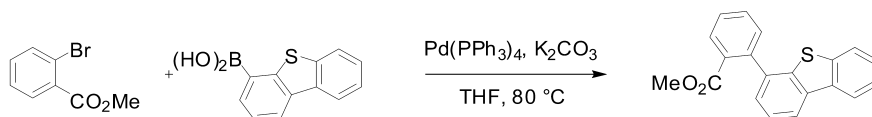
[0681]

[0682] 질소 환경에서 중간체 I-32(34.5 g, 105 mmol)을 테트라하이드로퓨란(THF) 0.3 L에 녹인 후, 여기에 1-브로모-4-클로로벤젠(1-bromo-4-chlorobenzene)(20.1 g, 105 mmol)와 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐(tetrakis(triphenylphosphine)palladium)(1.21 g, 1.05 mmol)을 넣고 교반시켰다. 물에 포화된 칼륨 카보네이트(potassium carbonate)(30.9 g, 210 mmol)을 넣고 80 °C에서 23시간 동안 가열하여 환류 시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 디클로로메탄(DCM)로 추출한 다음 무수 MgSO₄로 수분을 제거한 후, 필터하고 감압 농축하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 컬럼 크로마토그래피(flash column chromatography)로 분리 정제하여 화합물 I-33(33.2 g, 80 %)을 얻었다.

[0683] HRMS (70 eV, EI+): m/z calcd for C₂₇H₁₉C₁₀: 394.1124, found: 394.1.

[0684] Elemental Analysis: C, 82 %; H, 5 %

[0686] **합성예 34:중간체 I-34의 제조**



I - 34

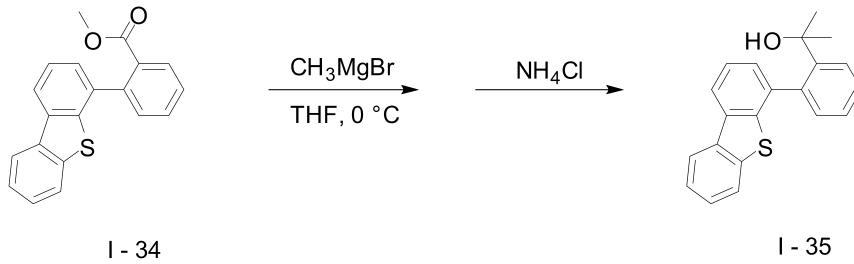
[0687]

[0688] 질소 환경에서 메틸 2-브로모벤조에이트(methyl 2-bromobenzoate)(50 g, 233 mmol)을 테트라하이드로퓨란(THF) 0.3 L에 녹인 후, 여기에 디벤조티오펜-4-일-보론산(dibenzothiophene-4-ylboronic acid) (58.4 g, 256 mmol)와 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐(tetrakis(triphenylphosphine)palladium)(2.69 g, 2.33 mmol)을 넣고 교반시켰다. 물에 포화된 칼륨 카보네이트(potassium carbonate)(68.6 g, 466 mmol)을 넣고 80 °C에서 23시간 동안 가열하여 환류 시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 디클로로메탄(DCM)로 추출한 다음 무수 MgSO₄로 수분을 제거한 후, 필터하고 감압 농축하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 컬럼 크로마토그래피(flash column chromatography)로 분리 정제하여 화합물 I-34(69.7 g, 94 %)을 얻었다.

[0689] HRMS (70 eV, EI+): m/z calcd for C₂₀H₁₄O₂S: 318.0715, found: 318.1.

[0690] Elemental Analysis: C, 75 %; H, 4 %

[0692] **합성예 35:중간체 I-35의 제조**



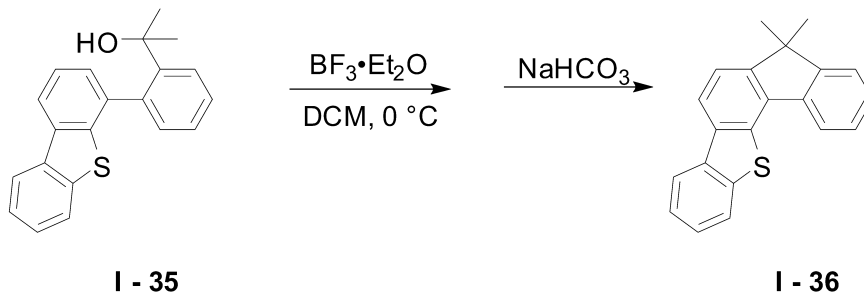
[0693]

[0694] 질소 환경에서 중간체 I-34(69.7 g, 219 mmol)을 테트라하이드로퓨란(THF) 0.7 L에 녹인 후, 0 °C로 감온하였다. 여기에 디에틸 에테르(diethyl ether)에 녹아있는 메틸마그네슘브로마이드(methylmagnesium bromide) 3.0 M(0.18 L, 547 mmol)을 1시간에 걸쳐 천천히 적가 하였다. 이후 상온에서 8시간 동안 교반 하였다. 반응 완료 후, 물 0.18 L에 녹인 암모늄 클로라이드(ammonium chloride)(35.1 g, 657 mmol)를 첨가하여 반응액을 중화 시켰다. 그리고 디클로로메탄(DCM)로 추출한 다음 무수 MgSO₄로 수분을 제거한 후, 필터하고 감압 농축하였다. 혼합물 I-35(69.7 g, 100 %)을 얻었다.

[0695] HRMS (70 eV, EI+): m/z calcd for C₂₁H₁₈O₂S: 318.1078, found: 318.1.

[0696] Elemental Analysis: C, 79 %; H, 6 %

[0698] **합성예 36:중간체 I-36의 제조**



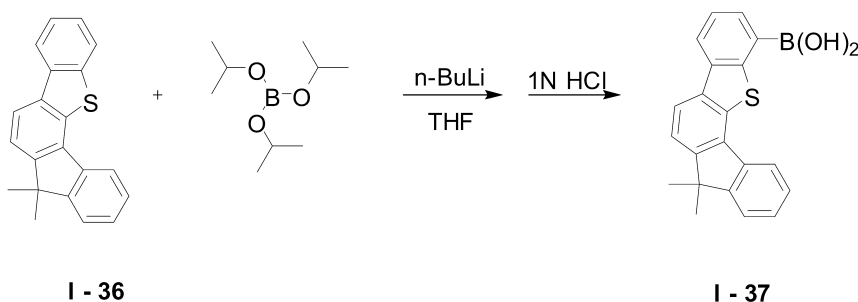
[0699]

[0700] 질소 환경에서 중간체 I-35(69.7 g, 219 mmol)을 디클로로메탄(DCM) 0.35 L에 녹인 후, 0 °C로 감온하였다. 여기에 디에틸 에테르(diethyl ether)에 녹아있는 보론 트리플루오라이드(boron trifluoride)(34.2 g, 241 mmol)을 1시간에 걸쳐 천천히 적가 하였다. 이후 상온에서 6시간 동안 교반 하였다. 반응 완료 후, 물 0.1 L에 녹인 소듐 바이카보네이트(sodium bicarbonate)(20.2 g, 241 mmol)를 첨가하여 반응액을 중화 시켰다. 그리고 디클로로메탄(DCM)로 추출한 다음 무수 MgSO₄로 수분을 제거한 후, 이렇게 얻어진 잔사를 컬럼 크로마토그래피(flash column chromatography)로 분리 정제하여 화합물 I-36(52.6 g, 80 %)을 얻었다.

[0701] HRMS (70 eV, EI+): m/z calcd for C₂₁H₁₆S: 300.0973, found: 300.1.

[0702] Elemental Analysis: C, 84 %; H, 5 %

[0704] **합성예 37:중간체 I-37의 제조**



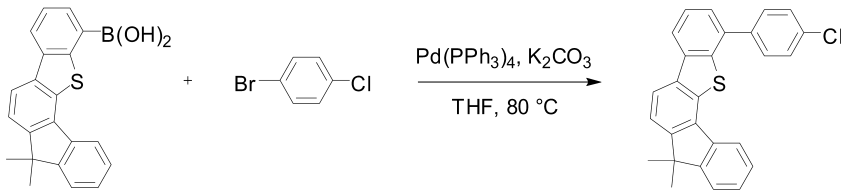
[0705]

[0706] 질소 환경에서 중간체 I-36(52.6 g, 175 mmol)을 테트라하이드로퓨란(THF) 0.5 L에 녹인 후, -78 °C로 감온하였다. 여기에 헥산(hexane)에 녹아있는 n-BuLi 2.5 M(105 mL, 263 mmol)을 10분에 걸쳐 천천히 적가 하였다. 이후 상온에서 12시간 동안 교반 하였다. 반응 완료 후, 물 1N HCl(263 mL, 263 mmol)를 첨가하여 반응액을 중화 시켰다. 그리고 에틸렌 아세테이트(ethylacetate, EA)로 추출한 다음 무수 MgSO₄로 수분을 제거한 후, 이렇게 얻어진 잔사를 헥산(hexane)과 디클로로메탄(DCM)로 불순물을 씻어내어 화합물 I-37(53.6 g, 89 %)을 얻었다.

[0707] HRMS (70 eV, EI⁺): m/z calcd for C₂₁H₁₇O₂S: 344.1042, found: 300.1.

[0708] Elemental Analysis: C, 73 %; H, 5 %

[0710] **합성예 38:중간체 I-38의 제조**



I-37

I-38

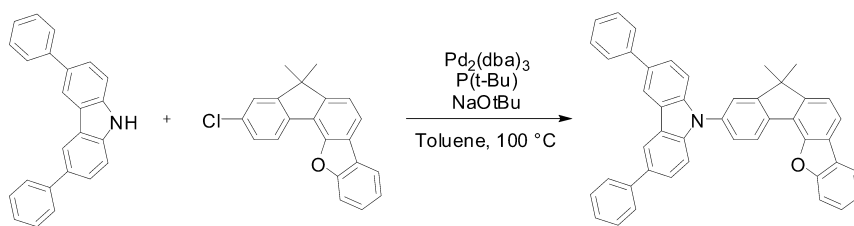
[0711]

[0712] 질소 환경에서 중간체 I-37(53.6 g, 156 mmol)을 테트라하이드로퓨란(THF) 0.3 L에 녹인 후, 여기에 1-브로모-4-클로로벤젠(1-bromo-4-chlorobenzene)(29.8 g, 156 mmol)와 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐(tetrakis(triphenylphosphine)palladium)(1.80 g, 1.56 mmol)을 넣고 교반시켰다. 물에 포화된 칼륨 카보네이트(potassium carbonate)(45.9 g, 312 mmol)을 넣고 80 °C에서 21시간 동안 가열하여 환류 시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 디클로로메탄(DCM)로 추출한 다음 무수 MgSO₄로 수분을 제거한 후, 필터하고 감압 농축 하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 컬럼 크로마토그래피(flash column chromatography)로 분리 정제하여 화합물 I-38(58.3 g, 91 %)을 얻었다.

[0713] HRMS (70 eV, EI⁺): m/z calcd for C₂₇H₁₉ClS: 410.0896, found: 410.1.

[0714] Elemental Analysis: C, 79 %; H, 5 %

[0716] **실시예 1:화합물 A-1의 제조**



I-4

I-3

A-1

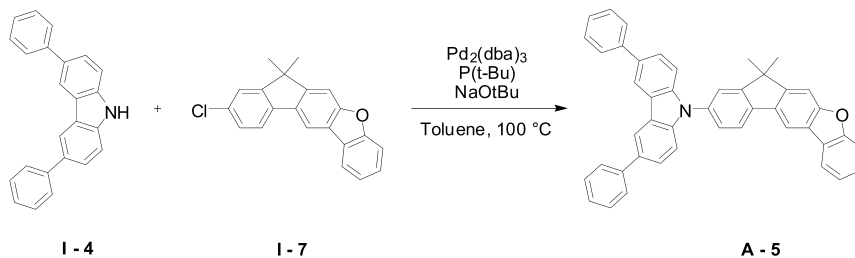
[0717]

[0718] 질소 환경에서 중간체 I-4(11 g, 34.4 mmol)을 톨루엔(toluene) 0.11 L에 녹인 후, 여기에 중간체 I-3(11.5 g, 36.2 mmol), 트리스(디벤질리덴아세테이트)디팔라듐(0)(tris(dibenzylideneacetone)dipalladium(0))(0.95 g, 1.03 mmol), 트리스-터셔리부틸포스핀(tris-tert butylphosphine)(0.83 g, 4.12 mmol) 그리고 소듐 터셔리부톡사이드(sodium tert-butoxide)(3.97 g, 41.3 mmol)을 순차적으로 넣고 100 °C에서 16시간 동안 가열하여 환류시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 디클로로메탄(DCM)로 추출한 다음 무수 MgSO₄로 수분을 제거한 후, 필터하고 감압 농축하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 컬럼 크로마토그래피(flash column chromatography)로 분리 정제하여 화합물 A-1(14.5 g, 70 %)을 얻었다.

[0719] HRMS (70 eV, EI⁺): m/z calcd for C₄₅H₃₁NO: 601.2406, found: 602.2.

[0720] Elemental Analysis: C, 90 %; H, 5 %

[0722] 실시예 2: 화합물 A-5의 제조



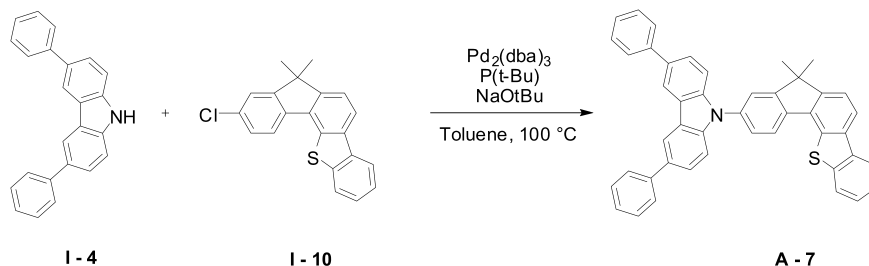
[0723]

[0724] 질소 환경에서 중간체 I-4(10 g, 31.3 mmol)을 톨루엔(toluene) 0.1 L에 녹인 후, 여기에 중간체 I-7(10.5 g, 32.9 mmol), 트리스(디벤질리덴아세테이트)디팔라듐(0)(tris(dibenzylideneacetone)dipalladium(0))(0.86 g, 0.94 mmol), 트리스-터셔리부틸포스핀(tris-tert butylphosphine)(0.76 g, 3.76 mmol) 그리고 소듐 터셔리부톡사이드(sodium tert-butoxide)(3.61 g, 37.6 mmol)을 순차적으로 넣고 100 °C에서 12시간 동안 가열하여 환류시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 디클로로메탄(DCM)로 추출한 다음 무수 MgSO₄로 수분을 제거한 후, 필터하고 감압 농축하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 컬럼 크로마토그래피(flash column chromatography)로 분리 정제하여 화합물 A-5(16.6 g, 88 %)을 얻었다.

[0725] HRMS (70 eV, EI+): m/z calcd for C₄₅H₃₁NO: 601.2406, found: 601.2.

[0726] Elemental Analysis: C, 90 %; H, 5 %

[0728] 실시예 3: 화합물 A-7의 제조



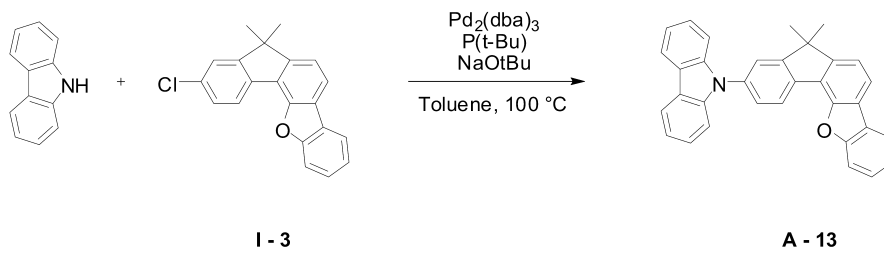
[0729]

[0730] 질소 환경에서 중간체 I-4(10 g, 31.3 mmol)을 톨루엔(toluene) 0.1 L에 녹인 후, 여기에 중간체 I-10(11.0 g, 32.9 mmol), 트리스(디벤질리덴아세테이트)디팔라듐(0)(tris(dibenzylideneacetone)dipalladium(0))(0.86 g, 0.94 mmol), 트리스-터셔리부틸포스핀(tris-tert butylphosphine)(0.76 g, 3.76 mmol) 그리고 소듐 터셔리부톡사이드(sodium tert-butoxide)(3.61 g, 37.6 mmol)을 순차적으로 넣고 100 °C에서 6시간 동안 가열하여 환류시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 디클로로메탄(DCM)로 추출한 다음 무수 MgSO₄로 수분을 제거한 후, 필터하고 감압 농축하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 컬럼 크로마토그래피(flash column chromatography)로 분리 정제하여 화합물 A-7(15.9 g, 82 %)을 얻었다.

[0731] HRMS (70 eV, EI+): m/z calcd for C₄₅H₃₁NS: 617.2177, found: 617.2.

[0732] Elemental Analysis: C, 87 %; H, 5 %

[0734] **실시예 4: 화합물 A-13의 제조**



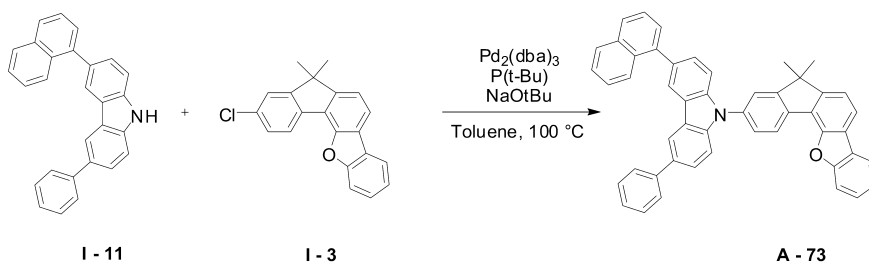
[0735]

[0736] 질소 환경에서 중간체 9H-카바졸(10 g, 59.8 mmol)을 톨루엔(toluene) 0.15 L에 녹인 후, 여기에 중간체 I-3(20.0 g, 62.8 mmol), 트리스(디벤질리덴아세테이트)디팔라듐(0)(tris(dibenzylideneacetone)dipalladium(0))(1.64 g, 1.79 mmol), 트리스-터셔리부틸포스핀(tris-tert butylphosphine)(1.45 g, 7.18 mmol) 그리고 소듐 터셔리부톡사이드(sodium tert-butoxide)(6.90 g, 71.8 mmol)을 순차적으로 넣고 100 °C에서 15시간 동안 가열하여 환류시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 디클로로메탄(DCM)로 추출한 다음 무수 MgSO₄로 수분을 제거한 후, 필터하고 감압 농축하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 컬럼 크로마토그래피(flash column chromatography)로 분리 정제하여 화합물 A-13(22.6 g, 85 %)을 얻었다.

[0737] HRMS (70 eV, EI⁺): m/z calcd for C₃₃H₂₃NO: 449.1780, found: 449.2.

[0738] Elemental Analysis: C, 88 %; H, 5 %

[0740] **실시예 5: 화합물 A-73의 제조**



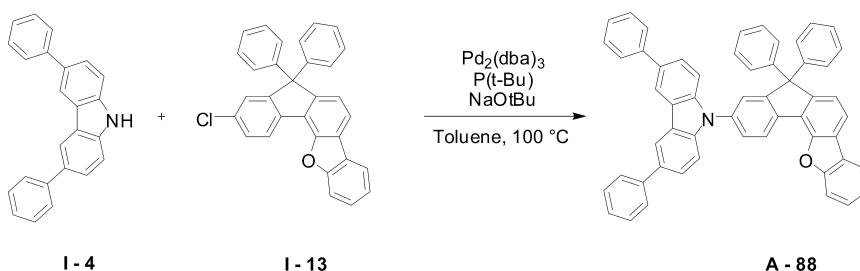
[0741]

[0742] 질소 환경에서 중간체 I-11(7 g, 19.0 mmol)을 톨루엔(toluene) 0.07 L에 녹인 후, 여기에 중간체 I-3(6.32 g, 19.9 mmol), 트리스(디벤질리덴아세테이트)디팔라듐(0)(tris(dibenzylideneacetone)dipalladium(0))(0.52 g, 0.57 mmol), 트리스-터셔리부틸포스핀(tris-tert butylphosphine)(0.46 g, 2.27 mmol) 그리고 소듐 터셔리부톡사이드(sodium tert-butoxide)(2.18 g, 22.7 mmol)을 순차적으로 넣고 100 °C에서 90시간 동안 가열하여 환류시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 디클로로메탄(DCM)로 추출한 다음 무수 MgSO₄로 수분을 제거한 후, 필터하고 감압 농축하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 컬럼 크로마토그래피(flash column chromatography)로 분리 정제하여 화합물 A-73(9.5 g, 77 %)을 얻었다.

[0743] HRMS (70 eV, EI⁺): m/z calcd for C₄₉H₃₃NO: 651.2562, found: 651.3.

[0744] Elemental Analysis: C, 90 %; H, 5 %

[0746] **실시예 6: 화합물 A-88의 제조**



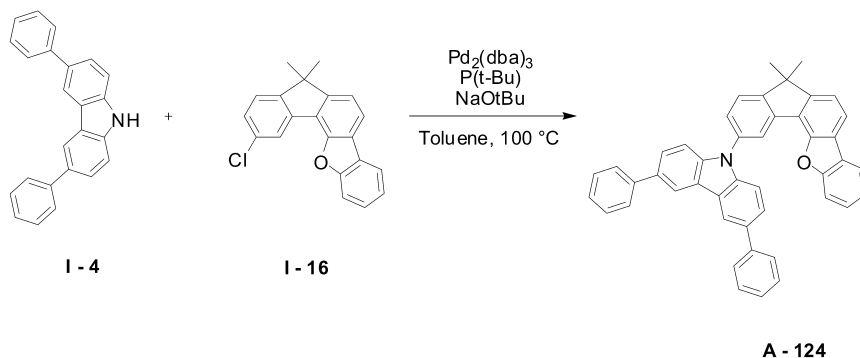
[0747]

[0748] 질소 환경에서 중간체 I-4(10 g, 31.3 mmol)을 톨루엔(toluene) 0.1 L에 녹인 후, 여기에 중간체 I-13(14.6 g, 32.9 mmol), 트리스(디벤질리덴아세테이트)디팔라듐(0)(tris(dibenzylideneacetone)dipalladium(0))(0.86 g, 0.94 mmol), 트리스-터셔리부틸포스핀(tris-tert butylphosphine)(0.76 g, 3.76 mmol) 그리고 소듐 터셔리부톡사이드(sodium tert-butoxide)(3.61 g, 37.6 mmol)을 순차적으로 넣고 100 °C에서 12시간 동안 가열하여 환류시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 디클로로메탄(DCM)로 추출한 다음 무수 MgSO₄로 수분을 제거한 후, 필터하고 감압 농축하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 컬럼 크로마토그래피(flash column chromatography)로 분리 정제하여 화합물 A-88(21.6 g, 95 %)을 얻었다.

[0749] HRMS (70 eV, EI⁺): m/z calcd for C₅₅H₃₅N₂O: 725.2719, found: 725.3.

[0750] Elemental Analysis: C, 91 %; H, 5 %

[0752] **실시예 7: 화합물 A-124의 제조**



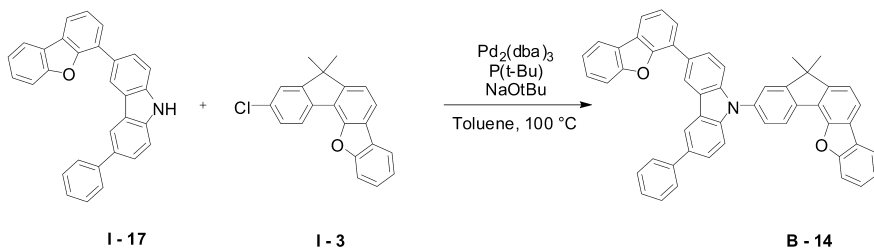
[0753]

[0754] 질소 환경에서 중간체 I-4(10 g, 31.3 mmol)을 톨루엔(toluene) 0.1 L에 녹인 후, 여기에 중간체 I-16(10.5 g, 32.9 mmol), 트리스(디벤질리덴아세테이트)디팔라듐(0)(tris(dibenzylideneacetone)dipalladium(0))(0.86 g, 0.94 mmol), 트리스-터셔리부틸포스핀(tris-tert butylphosphine)(0.76 g, 3.76 mmol) 그리고 소듐 터셔리부톡사이드(sodium tert-butoxide)(3.61 g, 37.6 mmol)을 순차적으로 넣고 100 °C에서 24시간 동안 가열하여 환류시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 디클로로메탄(DCM)로 추출한 다음 무수 MgSO₄로 수분을 제거한 후, 필터하고 감압 농축하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 컬럼 크로마토그래피(flash column chromatography)로 분리 정제하여 화합물 A-1(17.0 g, 90 %)을 얻었다.

[0755] HRMS (70 eV, EI⁺): m/z calcd for C₄₅H₃₁N₂O: 601.2406, found: 601.2.

[0756] Elemental Analysis: C, 90 %; H, 5 %

[0758] **실시예 8: 화합물 B-14의 제조**



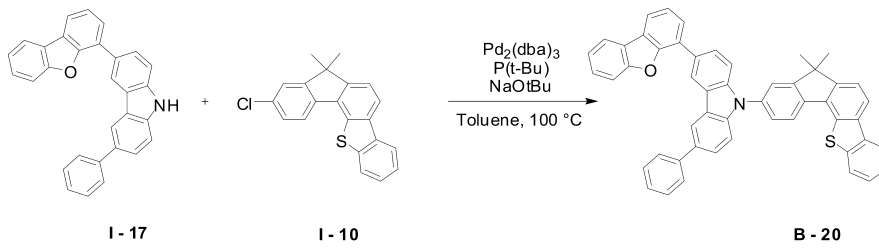
[0759]

[0760] 질소 환경에서 중간체 I-17(10 g, 24.4 mmol)을 톨루엔(toluene) 0.09 L에 녹인 후, 여기에 중간체 I-3(8.17 g, 25.6 mmol), 트리스(디벤질리덴아세테이트)디팔라듐(0)(tris(dibenzylideneacetone)dipalladium(0))(0.67 g, 0.73 mmol), 트리스-터셔리부틸포스핀(tris-tert butylphosphine)(0.59 g, 2.93 mmol) 그리고 소듐 터셔리부톡사이드(sodium tert-butoxide)(2.81 g, 29.3 mmol)을 순차적으로 넣고 100 °C에서 48시간 동안 가열하여 환류시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 디클로로메탄(DCM)로 추출한 다음 무수 MgSO₄로 수분을 제거한 후, 필터하고 감압 농축하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 컬럼 크로마토그래피(flash column chromatography)로 분리 정제하여 화합물 B-14(16.9 g, 81 %)을 얻었다.

[0761] HRMS (70 eV, EI+): m/z calcd for C₅₁H₃₃N₂O₂: 691.2511, found: 691.3.

[0762] Elemental Analysis: C, 89 %; H, 5 %

[0763] **실시예 9: 화합물 B-20의 제조**



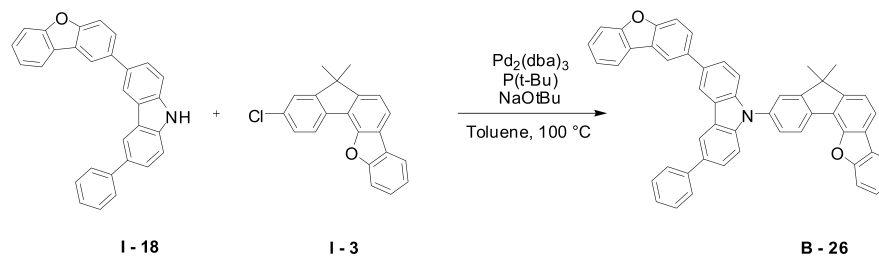
[0764]

[0765] 질소 환경에서 중간체 I-17(10 g, 24.4 mmol)을 톨루엔(toluene) 0.09 L에 녹인 후, 여기에 중간체 I-10(8.57 g, 25.6 mmol), 트리스(디벤질리덴아세테이트)디팔라듐(0)(tris(dibenzylideneacetone)dipalladium(0))(0.67 g, 0.73 mmol), 트리스-터셔리부틸포스핀(tris-tert butylphosphine)(0.59 g, 2.93 mmol) 그리고 소듐 터셔리부톡사이드(sodium tert-butoxide)(2.81 g, 29.3 mmol)을 순차적으로 넣고 100 °C에서 35시간 동안 가열하여 환류시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 디클로로메탄(DCM)로 추출한 다음 무수 MgSO₄로 수분을 제거한 후, 필터하고 감압 농축하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 컬럼 크로마토그래피(flash column chromatography)로 분리 정제하여 화합물 B-20(17.3 g, 96 %)을 얻었다.

[0766] HRMS (70 eV, EI+): m/z calcd for C₅₁H₃₃NOS: 707.2283, found: 707.2.

[0767] Elemental Analysis: C, 87 %; H, 5 %

[0769] **실시예 10: 화합물 B-26의 제조**



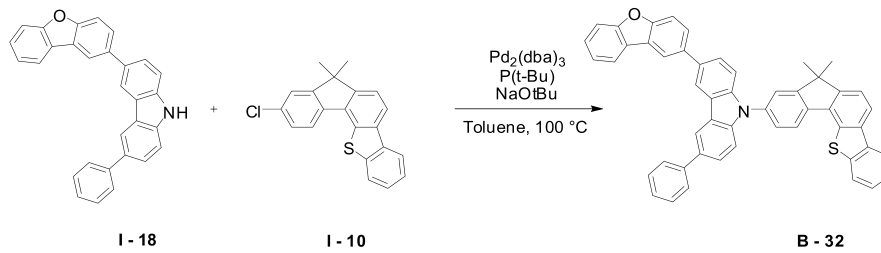
[0770]

[0771] 질소 환경에서 중간체 I-18(10 g, 24.4 mmol)을 톨루엔(toluene) 0.09 L에 녹인 후, 여기에 중간체 I-3(8.17 g, 25.6 mmol), 트리스(디벤질리덴아세테이트)디팔라듐(0)(tris(dibenzylideneacetone)dipalladium(0))(0.67 g, 0.73 mmol), 트리스-터셔리부틸포스핀(tris-tert butylphosphine)(0.59 g, 2.93 mmol) 그리고 소듐 터셔리부톡사이드(sodium tert-butoxide)(2.81 g, 29.3 mmol)을 순차적으로 넣고 100 °C에서 50시간 동안 가열하여 환류시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 디클로로메탄(DCM)로 추출한 다음 무수 MgSO₄로 수분을 제거한 후, 필터하고 감압 농축하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 컬럼 크로마토그래피(flash column chromatography)로 분리 정제하여 화합물 B-26(13.2 g, 78 %)을 얻었다.

[0772] HRMS (70 eV, EI+): m/z calcd for C₅₁H₃₃N₂O₂: 691.2511, found: 691.3.

[0773] Elemental Analysis: C, 89 %; H, 5 %

[0775] **실시예 11: 화합물 B-32의 제조**



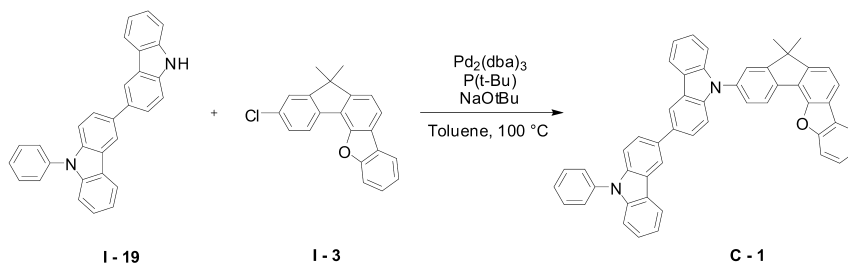
[0776]

[0777] 질소 환경에서 중간체 I-17(10 g, 24.4 mmol)을 톨루엔(toluene) 0.09 L에 녹인 후, 여기에 중간체 I-10(8.57 g, 25.6 mmol), 트리스(디벤질리덴아세테이트)디팔라듐(0)(tris(dibenzylideneacetone)dipalladium(0))(0.67 g, 0.73 mmol), 트리스-터셔리부틸포스핀(tris-tert butylphosphine)(0.59 g, 2.93 mmol) 그리고 소듐 터셔리부톡사이드(sodium tert-butoxide)(2.81 g, 29.3 mmol)을 순차적으로 넣고 100 °C에서 38시간 동안 가열하여 환류시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 디클로로메탄(DCM)로 추출한 다음 무수 MgSO₄로 수분을 제거한 후, 필터하고 감압 농축하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 컬럼 크로마토그래피(flash column chromatography)로 분리 정제하여 화합물 B-32(15.7 g, 91 %)을 얻었다.

[0778] HRMS (70 eV, EI⁺): m/z calcd for C₅₁H₃₃NOS: 707.2283, found: 707.2.

[0779] Elemental Analysis: C, 87 %; H, 5 %

[0781] **실시예 12: 화합물 C-1의 제조**



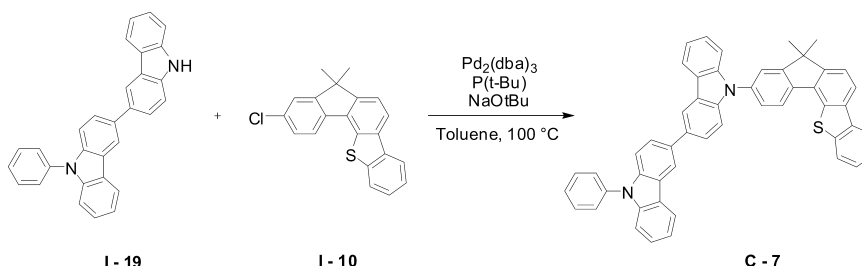
[0782]

[0783] 질소 환경에서 중간체 I-19(10 g, 24.5 mmol)을 톨루엔(toluene) 0.1 L에 녹인 후, 여기에 중간체 I-3(8.19 g, 25.7 mmol), 트리스(디벤질리덴아세테이트)디팔라듐(0)(tris(dibenzylideneacetone)dipalladium(0))(0.67 g, 0.74 mmol), 트리스-터셔리부틸포스핀(tris-tert butylphosphine)(0.59 g, 2.94 mmol) 그리고 소듐 터셔리부톡사이드(sodium tert-butoxide)(2.83 g, 29.4 mmol)을 순차적으로 넣고 100 °C에서 24시간 동안 가열하여 환류시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 디클로로메탄(DCM)로 추출한 다음 무수 MgSO₄로 수분을 제거한 후, 필터하고 감압 농축하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 컬럼 크로마토그래피(flash column chromatography)로 분리 정제하여 화합물 C-1(11.3 g, 67 %)을 얻었다.

[0784] HRMS (70 eV, EI⁺): m/z calcd for C₅₁H₃₄N₂O: 690.2671, found: 690.3.

[0785] Elemental Analysis: C, 89 %; H, 5 %

[0787] **실시예 13: 화합물 C-7의 제조**



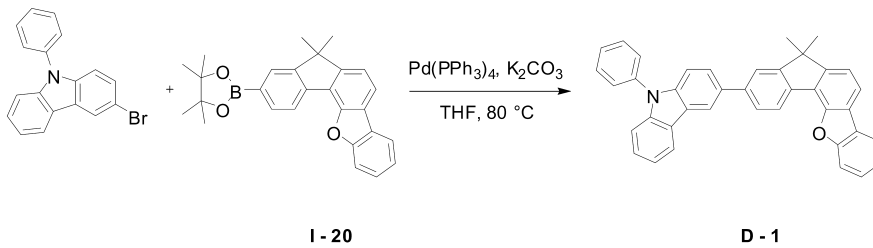
[0788]

[0789] 질소 환경에서 중간체 I-19(10 g, 24.5 mmol)을 톨루엔(toluene) 0.1 L에 녹인 후, 여기에 중간체 I-10(8.61 g, 25.7 mmol), 트리스(디벤질리덴아세테이트)디팔라듐(0)(tris(dibenzylideneacetone)dipalladium(0))(0.67 g, 0.74 mmol), 트리스-터셔리부틸포스핀(tris-tert butylphosphine)(0.59 g, 2.94 mmol) 그리고 소듐 터셔리부톡사이드(sodium tert-butoxide)(2.83 g, 29.4 mmol)을 순차적으로 넣고 100 °C에서 19시간 동안 가열하여 환류시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 디클로로메탄(DCM)로 추출한 다음 무수 MgSO₄로 수분을 제거한 후, 필터하고 감압 농축하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 컬럼 크로마토그래피(flash column chromatography)로 분리 정제하여 화합물 C-7(13.0 g, 75 %)을 얻었다.

[0790] HRMS (70 eV, EI+): m/z calcd for C₅₁H₃₄N₂S: 706.2443, found: 706.2.

[0791] Elemental Analysis: C, 87 %; H, 5 %

[0793] **실시예 14: 화합물 D-1의 제조**



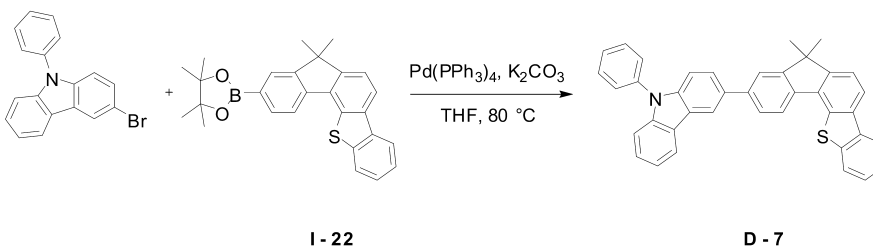
[0794]

[0795] 질소 환경에서 3-브로모-9-페닐-9H-카바졸(10 g, 31.0 mmol)을 테트라하이드로퓨란(THF) 0.12 L에 녹인 후, 여기에 중간체 I-20(14.0 g, 34.1 mmol)와 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐(tetrakis(triphenylphosphine)palladium)(0.36 g, 0.31 mmol)을 넣고 교반시켰다. 물에 포화된 칼륨 카보네이트(potassium carbonate)(5.48 g, 37.2 mmol)을 넣고 80 °C에서 26시간 동안 가열하여 환류 시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 디클로로메탄(DCM)로 추출한 다음 무수 MgSO₄로 수분을 제거한 후, 필터하고 감압 농축하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 컬럼 크로마토그래피(flash column chromatography)로 분리 정제하여 화합물 D-1(15.0 g, 92 %)을 얻었다.

[0796] HRMS (70 eV, EI+): m/z calcd for C₃₉H₂₇N₂O: 525.2093, found: 525.2.

[0797] Elemental Analysis: C, 89 %; H, 5 %

[0799] **실시예 15: 화합물 D-7의 제조**



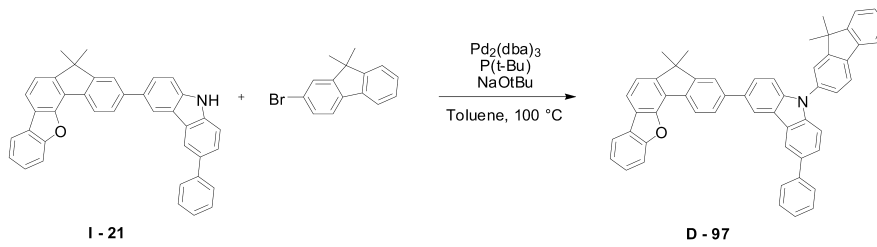
[0800]

[0801] 질소 환경에서 3-브로모-9-페닐-9H-카바졸(10 g, 31.0 mmol)을 테트라하이드로퓨란(THF) 0.12 L에 녹인 후, 여기에 중간체 I-22(14.5 g, 34.1 mmol)와 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐(tetrakis(triphenylphosphine)palladium)(0.36 g, 0.31 mmol)을 넣고 교반시켰다. 물에 포화된 칼륨 카보네이트(potassium carbonate)(5.48 g, 37.2 mmol)을 넣고 80 °C에서 24시간 동안 가열하여 환류 시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 디클로로메탄(DCM)로 추출한 다음 무수 MgSO₄로 수분을 제거한 후, 필터하고 감압 농축하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 컬럼 크로마토그래피(flash column chromatography)로 분리 정제하여 화합물 D-7(16.0 g, 95 %)을 얻었다.

[0802] HRMS (70 eV, EI+): m/z calcd for C₃₉H₂₇N₂S: 541.1864, found: 541.2.

[0803] Elemental Analysis: C, 86 %; H, 5 %

[0805] **실시예 16: 화합물 D-97의 제조**



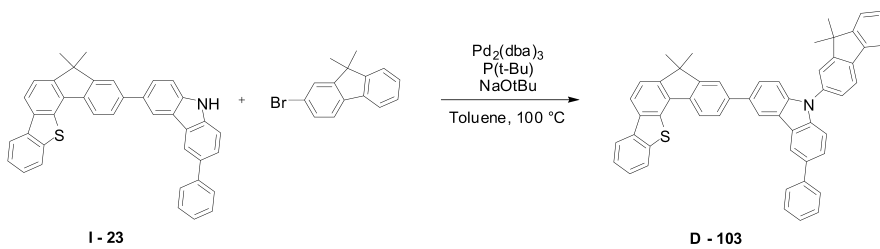
[0806]

[0807] 질소 환경에서 중간체 I-21(10 g, 19.0 mmol)을 톨루엔(toluene) 0.1 L에 녹인 후, 여기에 2-브로모-9,9-디메틸플루오렌(5.71 g, 20.9 mmol), 트리스(디벤질리덴아세테이트)디팔라듐(0)(tris(dibenzylideneacetone)dipalladium(0))(0.67 g, 0.57 mmol), 트리스-터셔리부틸포스핀(tris-tert-butylphosphine)(0.46 g, 2.28 mmol) 그리고 소듐 터셔리부톡사이드(sodium tert-butoxide)(2.19 g, 22.8 mmol)을 순차적으로 넣고 100 °C에서 25시간 동안 가열하여 환류시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 디클로로메탄(DCM)로 추출한 다음 무수 MgSO₄로 수분을 제거한 후, 필터하고 감압 농축하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 컬럼 크로마토그래피(flash column chromatography)로 분리 정제하여 화합물 D-97(12.7 g, 93 %)을 얻었다.

[0808] HRMS (70 eV, EI+): m/z calcd for C₅₄H₃₉N₂O: 717.3032, found: 717.3.

[0809] Elemental Analysis: C, 90 %; H, 5 %

[0811] **실시예 17: 화합물 D-103의 제조**



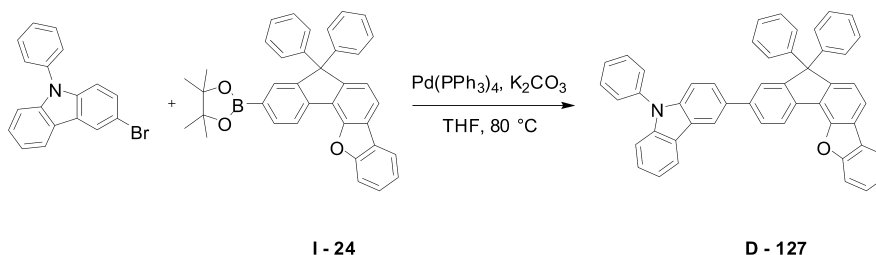
[0812]

[0813] 질소 환경에서 중간체 I-21(10 g, 18.5 mmol)을 톨루엔(toluene) 0.1 L에 녹인 후, 여기에 2-브로모-9,9-디메틸플루오렌(5.55 g, 20.3 mmol), 트리스(디벤질리덴아세테이트)디팔라듐(0)(tris(dibenzylideneacetone)dipalladium(0))(0.51 g, 0.56 mmol), 트리스-터셔리부틸포스핀(tris-tert-butylphosphine)(0.45 g, 2.22 mmol) 그리고 소듐 터셔리부톡사이드(sodium tert-butoxide)(2.13 g, 22.2 mmol)을 순차적으로 넣고 100 °C에서 23시간 동안 가열하여 환류시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 디클로로메탄(DCM)로 추출한 다음 무수 MgSO₄로 수분을 제거한 후, 필터하고 감압 농축하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 컬럼 크로마토그래피(flash column chromatography)로 분리 정제하여 화합물 D-103(12.4 g, 91 %)을 얻었다.

[0814] HRMS (70 eV, EI+): m/z calcd for C₅₄H₃₉NS: 733.2803, found: 733.3.

[0815] Elemental Analysis: C, 88 %; H, 5 %

[0817] **실시예 18: 화합물 D-127의 제조**



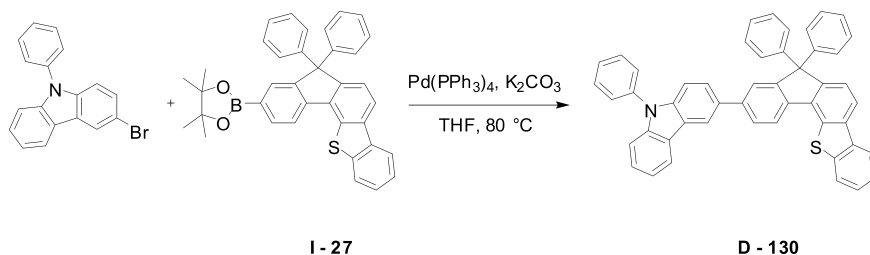
[0818]

[0819] 질소 환경에서 3-브로모-9-페닐-9H-카바졸(10 g, 31.0 mmol)을 테트라하이드로퓨란(THF) 0.14 L에 녹인 후, 여기에 중간체 I-24(18.2 g, 34.1 mmol)와 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐(tetrakis(triphenylphosphine)palladium)(0.36 g, 0.31 mmol)을 넣고 교반시켰다. 물에 포화된 칼륨 카보네이트(potassium carbonate)(5.48 g, 37.2 mmol)을 넣고 80 °C에서 24시간 동안 가열하여 환류 시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 디클로로메탄(DCM)로 추출한 다음 무수 MgSO₄로 수분을 제거한 후, 필터하고 감압 농축하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 컬럼 크로마토그래피(flash column chromatography)로 분리 정제하여 화합물 D-127(17.9 g, 89 %)을 얻었다.

[0820] HRMS (70 eV, EI⁺): m/z calcd for C₄₉H₃₁N₂O: 649.2406, found: 649.2.

[0821] Elemental Analysis: C, 91 %; H, 5 %

[0823] **실시예 19: 화합물 D-130의 제조**



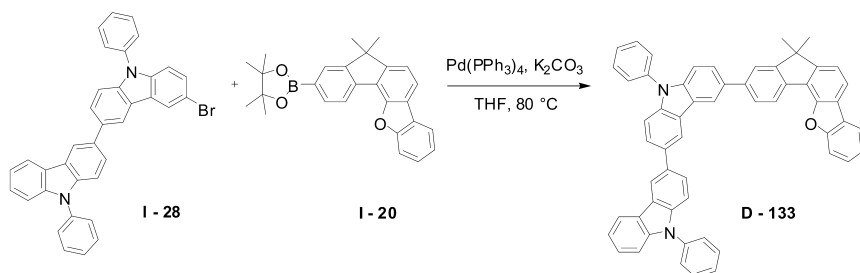
[0824]

[0825] 질소 환경에서 3-브로모-9-페닐-9H-카바졸(10 g, 31.0 mmol)을 테트라하이드로퓨란(THF) 0.14 L에 녹인 후, 여기에 중간체 I-27(18.8 g, 34.1 mmol)와 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐(tetrakis(triphenylphosphine)palladium)(0.36 g, 0.31 mmol)을 넣고 교반시켰다. 물에 포화된 칼륨 카보네이트(potassium carbonate)(5.48 g, 37.2 mmol)을 넣고 80 °C에서 22시간 동안 가열하여 환류 시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 디클로로메탄(DCM)로 추출한 다음 무수 MgSO₄로 수분을 제거한 후, 필터하고 감압 농축하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 컬럼 크로마토그래피(flash column chromatography)로 분리 정제하여 화합물 D-130(16.7 g, 81 %)을 얻었다.

[0826] HRMS (70 eV, EI⁺): m/z calcd for C₄₉H₃₁N₂S: 665.2177, found: 665.2.

[0827] Elemental Analysis: C, 88 %; H, 5 %

[0829] **실시예 20: 화합물 D-133의 제조**



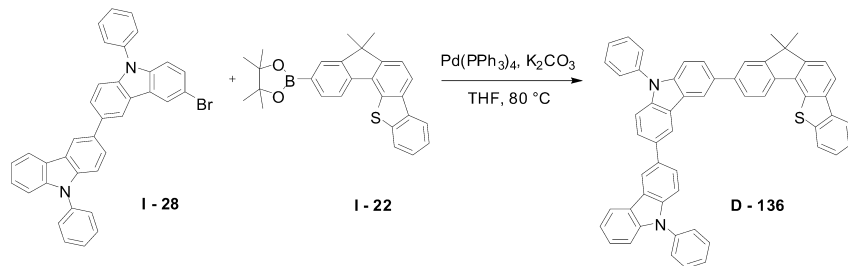
[0830]

[0831] 질소 환경에서 중간체 I-28(20 g, 35.5 mmol)을 테트라하이드로퓨란(THF) 0.2 L에 녹인 후, 여기에 중간체 I-20(16.0 g, 39.0 mmol)와 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐(tetrakis(triphenylphosphine)palladium)(0.41 g, 0.36 mmol)을 넣고 교반시켰다. 물에 포화된 칼륨 카보네이트(potassium carbonate)(10.5 g, 71.0 mmol)을 넣고 80 °C에서 13시간 동안 가열하여 환류 시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 디클로로메탄(DCM)로 추출한 다음 무수 MgSO₄로 수분을 제거한 후, 필터하고 감압 농축하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 컬럼 크로마토그래피(flash column chromatography)로 분리 정제하여 화합물 D-133(23.6 g, 88 %)을 얻었다.

[0832] HRMS (70 eV, EI⁺): m/z calcd for C₅₇H₃₈N₂O: 766.2984, found: 766.3.

[0833] Elemental Analysis: C, 89 %; H, 5 %

[0835] 실시예 21: 화합물 D-136의 제조



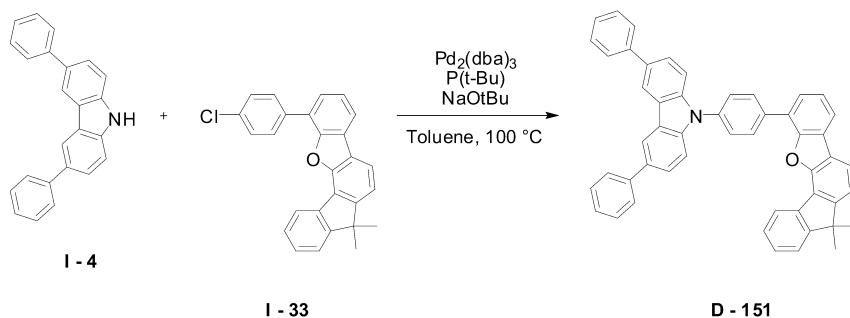
[0836]

[0837] 질소 환경에서 중간체 I-28(20 g, 35.5 mmol)을 테트라하이드로퓨란(THF) 0.2 L에 녹인 후, 여기에 중간체 I-22(16.6 g, 39.0 mmol)와 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐(tetrakis(triphenylphosphine)palladium)(0.41 g, 0.36 mmol)을 넣고 교반시켰다. 물에 포화된 칼륨 카보네이트(potassium carbonate)(10.5 g, 71.0 mmol)을 넣고 80 °C에서 15시간 동안 가열하여 환류 시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 디클로로메탄(DCM)로 추출한 다음 무수 MgSO₄로 수분을 제거한 후, 필터하고 감압 농축하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 컬럼 크로마토그래피(flash column chromatography)로 분리 정제하여 화합물 D-136(25.0 g, 90 %)을 얻었다.

[0838] HRMS (70 eV, EI⁺): m/z calcd for C₅₇H₃₈N₂S: 782.2756, found: 782.3.

[0839] Elemental Analysis: C, 87 %; H, 5 %

[0841] 실시예 22: 화합물 D-151의 제조



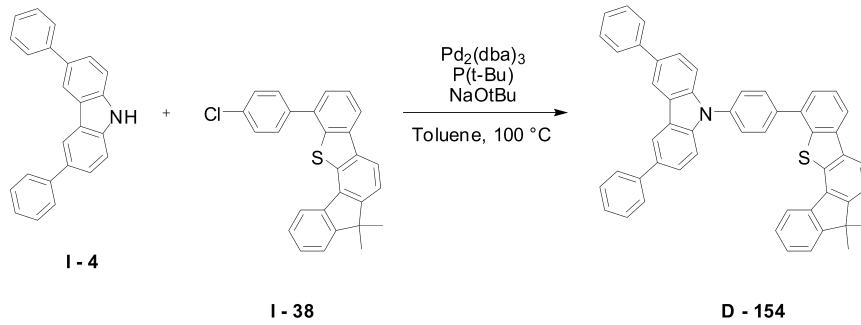
[0842]

[0843] 질소 환경에서 중간체 I-4(10 g, 31.3 mmol)을 톨루엔(toluene) 0.12 L에 녹인 후, 여기에 중간체 I-33(13.0 g, 32.9 mmol), 트리스(디벤질리덴아세테이트)디팔라듐(0)(tris(dibenzylideneacetone)dipalladium(0))(0.86 g, 0.94 mmol), 트리스-터셔리부틸포스핀(tris-tert butylphosphine)(0.76 g, 3.76 mmol) 그리고 소듐 터셔리부톡사이드(sodium tert-butoxide)(3.61 g, 37.6 mmol)을 순차적으로 넣고 100 °C에서 48시간 동안 가열하여 환류시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 디클로로메탄(DCM)로 추출한 다음 무수 MgSO₄로 수분을 제거한 후, 필터하고 감압 농축하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 컬럼 크로마토그래피(flash column chromatography)로 분리 정제하여 화합물 D-151(18.0 g, 85 %)을 얻었다.

[0844] HRMS (70 eV, EI⁺): m/z calcd for C₅₁H₃₅N₂O: 677.2719, found: 677.3.

[0845] Elemental Analysis: C, 90 %; H, 5 %

[0847] **실시예 23: 화합물 D-154의 제조**



[0848]

[0849] 질소 환경에서 중간체 I-4(10 g, 31.3 mmol)을 톨루엔(toluene) 0.12 L에 녹인 후, 여기에 중간체 I-38(13.5 g, 32.9 mmol), 트리스(디벤질리덴아세테이트)디팔라듐(0)(tris(dibenzylideneacetone)dipalladium(0))(0.86 g, 0.94 mmol), 트리스-터셔리부틸포스핀(tris-tert butylphosphine)(0.76 g, 3.76 mmol) 그리고 소듐 터셔리부톡사이드(sodium tert-butoxide)(3.61 g, 37.6 mmol)을 순차적으로 넣고 100 °C에서 37시간 동안 가열하여 환류시켰다. 반응 완료 후 반응액에 물을 넣고 디클로로메탄(DCM)로 추출한 다음 무수 MgSO₄로 수분을 제거한 후, 필터하고 감압 농축하였다. 이렇게 얻어진 잔사를 컬럼 크로마토그래피(flash column chromatography)로 분리 정제하여 화합물 D-154(19.3 g, 89 %)을 얻었다.

[0850] HRMS (70 eV, EI⁺): m/z calcd for C₅₁H₃₅NS: 693.2490, found: 693.2.

[0851] Elemental Analysis: C, 88 %; H, 5 %

[0853] **(유기발광소자의 제조)**

[0854] **실시예 24: 유기발광소자의 제조(블루)**

[0855] ITO(Indium tin oxide)가 1500 Å의 두께가 박막 코팅된 유리 기판을 증류수 초음파로 세척하였다. 증류수 세척이 끝나면 이소프로필 알코올, 아세톤, 메탄올 등의 용제로 초음파 세척을 하고 건조시킨 후 플라즈마 세정기로 이송 시킨 다음 산소 플라즈마를 이용하여 상기 기판을 5분간 세정 한 후 진공 증착기로 기판을 이송하였다. 이렇게 준비된 ITO 투명 전극을 양극으로 사용하여 ITO 기판 상부에 4,4'-bis[N-(4-(N,N-bis(3-methylphenyl)amino)-phenyl)-N-phenylamino]biphenyl (DNTPD)를 진공 증착하여 600 Å 두께의 정공 주입층을 형성하였다. 이어서 실시예 1에서 제조된 화합물 A-1을 사용하여 진공 증착으로 300 Å 두께의 정공 수송층을 형성하였다. 상기 정공 수송층 상부에 9,10-di-(2-naphthyl)anthracene(AND)을 호스트로 사용하고 도판트로 2,5,8,11-tetra(tert-butyl)perylene(TBPe)를 3중량 %로 도핑하여 진공 증착으로 250 Å 두께의 발광층을 형성하였다. 그 후 상기 발광층 상부에 Alq₃를 진공 증착하여 250 Å 두께의 전자 수송층을 형성하였다. 상기 전자 수송층 상부에 LiF 10 Å과 Al 1000 Å을 순차적으로 진공 증착하여 음극을 형성함으로써 유기발광소자를 제조하였다.

[0856] 상기 유기발광소자는 5층의 유기박막층을 가지는 구조로 되어 있으며, 구체적으로 Al (1000 Å) / LiF (10 Å) / Alq₃ (250 Å) / EML [AND : TBPe = 97 : 3] (250 Å) / HTL (300 Å) / DNTPD (600 Å) / ITO (1500 Å)의 구조로 제작하였다.

[0858] **실시예 25**

[0859] 상기 실시예 24에서, 실시예 1 대신 실시예 2를 사용한 점을 제외하고는 동일한 방법으로 유기발광소자를 제조하였다.

[0861] **실시예 26**

[0862] 상기 실시예 24에서, 실시예 1 대신 실시예 3을 사용한 점을 제외하고는 동일한 방법으로 유기발광소자를 제조하였다.

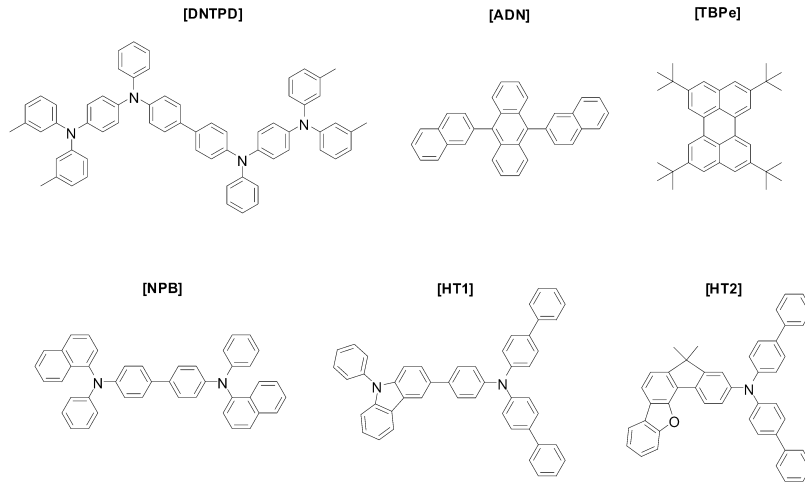
[0864] **실시예 27**

[0865] 상기 실시예 24에서, 실시예 1 대신 실시예 4를 사용한 점을 제외하고는 동일한 방법으로 유기발광소자를 제조

하였다.

- [0867] **실시 예 28**
- [0868] 상기 실시예 24에서, 실시예 1 대신 실시예 5를 사용한 점을 제외하고는 동일한 방법으로 유기발광소자를 제조하였다.
- [0870] **실시 예 29**
- [0871] 상기 실시예 24에서, 실시예 1 대신 실시예 6을 사용한 점을 제외하고는 동일한 방법으로 유기발광소자를 제조하였다.
- [0873] **실시 예 30**
- [0874] 상기 실시예 24에서, 실시예 1 대신 실시예 7을 사용한 점을 제외하고는 동일한 방법으로 유기발광소자를 제조하였다.
- [0876] **실시 예 31**
- [0877] 상기 실시예 24에서, 실시예 1 대신 실시예 8을 사용한 점을 제외하고는 동일한 방법으로 유기발광소자를 제조하였다.
- [0879] **실시 예 32**
- [0880] 상기 실시예 24에서, 실시예 1 대신 실시예 9를 사용한 점을 제외하고는 동일한 방법으로 유기발광소자를 제조하였다.
- [0882] **실시 예 33**
- [0883] 상기 실시예 24에서, 실시예 1 대신 실시예 10을 사용한 점을 제외하고는 동일한 방법으로 유기발광소자를 제조하였다.
- [0885] **실시 예 34**
- [0886] 상기 실시예 24에서, 실시예 1 대신 실시예 11을 사용한 점을 제외하고는 동일한 방법으로 유기발광소자를 제조하였다.
- [0888] **실시 예 35**
- [0889] 상기 실시예 24에서, 실시예 1 대신 실시예 22를 사용한 점을 제외하고는 동일한 방법으로 유기발광소자를 제조하였다.
- [0891] **실시 예 36**
- [0892] 상기 실시예 24에서, 실시예 1 대신 실시예 23을 사용한 점을 제외하고는 동일한 방법으로 유기발광소자를 제조하였다.
- [0894] **비교예 1**
- [0895] 상기 실시예 24에서, 실시예 1 대신 NPB를 사용한 점을 제외하고는 동일한 방법으로 유기발광소자를 제조하였다. 상기 NPB의 구조는 하기에 기재되어 있다.
- [0897] **비교예 2**
- [0898] 상기 실시예 24에서, 실시예 1 대신 HT1를 사용한 점을 제외하고는 동일한 방법으로 유기발광소자를 제조하였다. 상기 HT1의 구조는 하기에 기재되어 있다.
- [0900] **비교예 3**
- [0901] 상기 실시예 24에서, 실시예 1 대신 HT2를 사용한 점을 제외하고는 동일한 방법으로 유기발광소자를 제조하였다. 상기 HT2의 구조는 하기에 기재되어 있다

[0903] 상기 유기발광소자 제작에 사용된 DNTPD, AND, TBPe, NPB, HT1 및 HT2의 구조는 하기와 같다.



[0904]

[0905] (유기발광소자의 성능 측정)

[0906] 상기 실시예 24 내지 36와 비교예 1 내지 3에서 제조된 각각의 유기발광소자에 대하여 전압에 따른 전류밀도 변화, 휘도변화 및 발광효율을 측정하였다. 구체적인 측정방법은 하기와 같고, 그 결과는 하기 표 1에 나타내었다

[0908] (1) 전압변화에 따른 전류밀도의 변화 측정

[0909] 제조된 유기발광소자에 대해, 전압을 0V 부터 10V 까지 상승시키면서 전류-전압계(Keithley 2400)를 이용하여 단위소자에 흐르는 전류값을 측정하고, 측정된 전류값을 면적으로 나누어 결과를 얻었다.

[0911] (2) 전압변화에 따른 휘도변화 측정

[0912] 제조된 유기발광소자에 대해, 전압을 0V 부터 10V 까지 상승시키면서 휘도계(Minolta Cs-1000A)를 이용하여 그때의 휘도를 측정하여 결과를 얻었다.

[0914] (3) 발광효율 측정

[0915] 상기(1) 및 (2)로부터 측정된 휘도와 전류밀도 및 전압을 이용하여 동일 전류밀도(10 mA/cm²)의 전류 효율(cd/A) 을 계산하였다.

표 1

소자	정공 수송층에 사용한 화합물	전압 (V)	색 (EL color)	효율 (cd/A)	반감 수명 (h) At 1000 cd/m ²
실시예 24	A-1	6.3	Blue	6.5	1,550
실시예 25	A-5	5.8	Blue	7.0	1,400
실시예 26	A-7	5.8	Blue	6.9	1,400
실시예 27	A-13	6.7	Blue	5.0	1,350
실시예 28	A-73	6.5	Blue	6.0	1,600
실시예 29	A-88	6.5	Blue	6.6	1,550
실시예 30	A-124	5.0	Blue	7.0	1,450
실시예 31	B-14	5.7	Blue	7.2	1,200
실시예 32	B-20	5.6	Blue	7.4	1,100
실시예 33	B-26	5.7	Blue	7.2	1,150
실시예 34	B-32	5.6	Blue	7.0	1,000
실시예 35	D-151	6.7	Blue	6.9	1,650
실시예 36	D-154	6.5	Blue	7.0	1,550
비교예 1	NPB	7.1	Blue	4.9	1,250
비교예 2	HT1	6.6	Blue	5.7	1,340
비교예 3	HT2	6.0	Blue	6.9	830

- [0917] 상기 표 1의 결과에 따르면 상기 실시예 24 내지 30에서 정공 수송층에 사용된 재료의 경우, 비교예 3과 비교했을 때 수명이 현격히 증가하고 있음을 알 수 있다. 또한 일반적으로 널리 사용되고 있는 비교예 1 및 2와 비교해 보아도 수명이 또한 크게 증가되었다.
- [0918] 여기에 상기 실시예의 경우 비교예에 비해 구동전압도 낮아지며 효율도 다소 증가되었다.
- [0919] 보다 구체적으로, 실시예 35 및 실시예 36의 경우 비교예 1 내지 3에 비해 효율, 전압, 수명에 있어 모두 우수하고 그 중에서도 수명이 특히 우수하다.
- [0920] 이를 바탕으로 우수한 정공 주입 및 정공 전달 능력을 가지는 저전압, 고효율, 고휘도, 장수명의 유기발광소자를 제작할 수 있었다.
- [0922] **실시예 37: 유기발광소자의 제조 (그린인광)**
- [0923] 4,4'-di(9H-carbazol-9-yl)biphenyl(CBP)를 호스트로 사용하고, Ir(PPy)₃를 도펀트로 사용하여 유기발광소자를 제작하였다. 양극으로는 ITO를 1000 Å의 두께로 사용하였고, 음극으로는 알루미늄(Al)을 1000 Å의 두께로 사용하였다. 구체적으로, 유기발광소자의 제조방법을 설명하면, 양극은 15 Ω/cm²의 면저항값을 가진 ITO 유리 기판을 50mm × 50 mm × 0.7 mm의 크기로 잘라서 아세톤과 이소프로필알코올과 순수물 속에서 각 15 분 동안 초음파세정한 후, 30 분 동안 UV 오존 세정하여 사용하였다. 상기 기판 상부에 진공도 650×10⁻⁷Pa, 증착속도 0.1 내지 0.3 nm/s의 조건으로 N4,N4'-di(naphthalen-1-yl)-N4,N4'-diphenylbiphenyl-4,4'-diamine (NPB) (70 nm) 및 상기 실시예 12에서 합성된 화합물 C-1(10 nm)를 증착하여 800 Å의 정공수송층을 형성하였다. 이어서, 동일한 진공 증착조건에서 4,4'-di(9H-carbazol-9-yl)biphenyl(CBP)을 이용하여 막 두께 300 Å의 발광층을 형성하였고, 이 때, 인광 도펀트인 Ir(PPy)₃을 동시에 증착하였다. 이 때, 인광 도펀트의 증착속도를 조절하여, 발광층의 전체량을 100 중량% 하였을 때, 인광 도펀트의 배합량이 7 중량%가 되도록 증착하였다. 상기 발광층 상부에 동일한 진공 증착조건을 이용하여 Bis(2-methyl-8-quinolinolate)-4-(phenylphenolato)aluminium (BALq)를 증착하여 막 두께 50 Å의 정공저지층을 형성하였다. 이어서, 동일한 진공 증착조건에서 Alq₃를 증착하여, 막 두께 200 Å의 전자수송층을 형성하였다. 상기 전자수송층 상부에 음극으로서 LiF와 Al을 순차적으로 증착하여 유기발광소자를 제작하였다. 상기 유기발광소자의 구조는 ITO/ NPB (70 nm)/ 실시예 12 (10 nm)/ EML (CBP (93 중량%) + Ir(PPy)₃(7 중량%), 30 nm)/ Balq (5 nm)/ Alq₃ (20 nm)/ LiF (1 nm) / Al (100 nm) 의 구조로 제작하였다.
- [0924] **실시 예 38**
- [0925] 상기 실시예 37에서, 실시예 12 대신 실시예 13을 사용한 점을 제외하고는 동일한 방법으로 유기발광소자를 제조하였다.
- [0926] **실시 예 39**
- [0927] 상기 실시예 37에서, 실시예 12 대신 실시예 14를 사용한 점을 제외하고는 동일한 방법으로 유기발광소자를 제조하였다.
- [0928] **실시 예 40**
- [0929] 상기 실시예 37에서, 실시예 12 대신 실시예 15를 사용한 점을 제외하고는 동일한 방법으로 유기발광소자를 제조하였다.
- [0930] **실시 예 41**
- [0931] 상기 실시예 37에서, 실시예 12 대신 실시예 16을 사용한 점을 제외하고는 동일한 방법으로 유기발광소자를 제조하였다.
- [0932] **실시 예 42**
- [0933] 상기 실시예 37에서, 실시예 12 대신 실시예 17을 사용한 점을 제외하고는 동일한 방법으로 유기발광소자를 제조하였다.
- [0934] **실시 예 43**
- [0935] 상기 실시예 37에서, 실시예 12 대신 실시예 18을 사용한 점을 제외하고는 동일한 방법으로 유기발광소자를 제

조하였다.

[0936] **실시 예 44**

[0937] 상기 실시예 37에서, 실시예 12 대신 실시예 19를 사용한 점을 제외하고는 동일한 방법으로 유기발광소자를 제조하였다.

[0938] **실시 예 45**

[0939] 상기 실시예 37에서, 실시예 12 대신 실시예 20을 사용한 점을 제외하고는 동일한 방법으로 유기발광소자를 제조하였다.

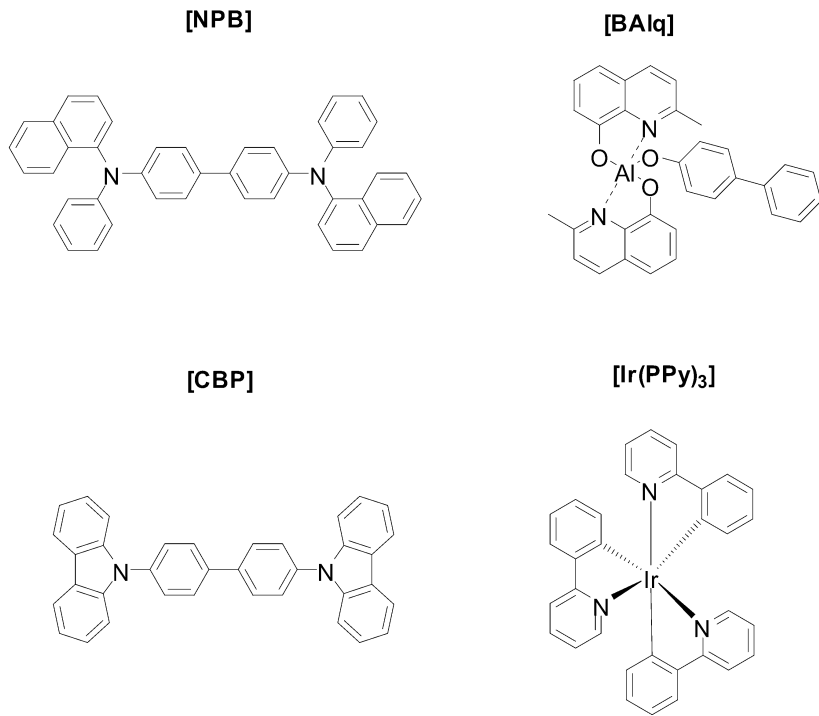
[0940] **실시 예 46**

[0941] 상기 실시예 37에서, 실시예 12 대신 실시예 21을 사용한 점을 제외하고는 동일한 방법으로 유기발광소자를 제조하였다.

[0942] **비교예 4**

[0943] 상기 실시예 37에서, 실시예 12 대신 NPB를 사용한 점을 제외하고는 동일한 방법으로 유기발광소자를 제조하였다. 상기 NPB의 구조는 하기에 기재되어 있다.

[0944] 상기 유기발광소자 제작에 사용된 NPB, BA1q, CBP 및 Ir(PPy)₃의 구조는 하기와 같다.



[0945]

[0946] **(유기발광소자의 성능 측정)**

[0947] 상기 실시예 37 내지 46와 비교예 4에서 제조된 각각의 유기발광소자에 대하여 전압에 따른 전류밀도 변화, 휘도변화 및 발광효율을 측정하였다. 구체적인 측정방법은 하기와 같고, 그 결과는 하기 표 2에 나타내었다.

[0948] (1) 전압변화에 따른 전류밀도의 변화 측정

[0949] 제조된 유기발광소자에 대해, 전압을 0V 부터 10V 까지 상승시키면서 전류-전압계(Keithley 2400)를 이용하여 단위소자에 흐르는 전류값을 측정하고, 측정된 전류값을 면적으로 나누어 결과를 얻었다.

[0950] (2) 전압변화에 따른 휘도변화 측정

[0951] 제조된 유기발광소자에 대해, 전압을 0V 부터 10V 까지 상승시키면서 휘도계(Minolta Cs-1000A)를 이용하여 그때의 휘도를 측정하여 결과를 얻었다.

[0952] (3) 발광효율 측정

[0953] 상기(1) 및 (2)로부터 측정된 휘도와 전류밀도 및 전압을 이용하여 동일 전류밀도(10 mA/cm²)의 전류 효율 (cd/A) 을 계산하였다.

표 2

소자	정공 수송층에 사 용한 화합물	전압 (V)	색 (EL color)	효율 (cd/A)	반감 수명 (h) At 5000 cd/m ²
실시예 37	NPB/C-1	4.2	Green	40.8	11,000
실시예 38	NPB/C-7	4.1	Green	41.0	9,500
실시예 39	NPB/D-1	4.9	Green	35.2	9,000
실시예 40	NPB/D-7	4.8	Green	37.2	8,800
실시예 41	NPB/D-97	4.5	Green	38.1	8,500
실시예 42	NPB/D-103	4.3	Green	38.0	8,800
실시예 43	NPB/D-127	5.0	Green	34.5	9,100
실시예 44	NPB/D-130	4.9	Green	35.0	8,500
실시예 45	NPB/D-133	4.1	Green	39.8	11,500
실시예 46	NPB/D-136	4.2	Green	40.0	10,000
비교예 4	NPB	4.8	Green	31.4	10,000

[0955] 상기 표 2의 결과에 따르면 상기 실시예 37 내지 46에서 정공 수송층의 보조층으로 사용된 재료의 경우, 비교예 4과 비교했을 때 발광효율이 현격히 증가하고 있음을 알 수 있다. 또한 대부분의 재료가 구동전압을 떨어뜨릴 수 있는 장점이 있음을 알 수 있다.

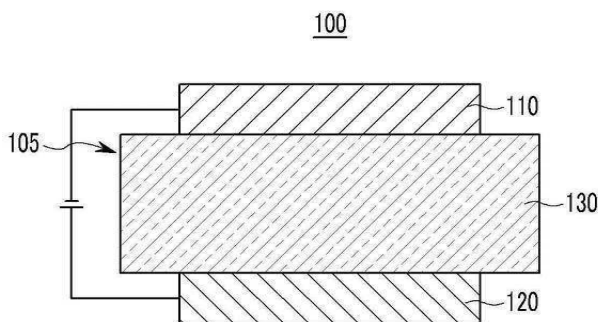
[0956] 본 발명은 상기 실시예들에 한정되는 것이 아니라 서로 다른 다양한 형태로 제조될 수 있으며, 본 발명이 속하는 기술분야에서 통상의 지식을 가진 자는 본 발명의 기술적 사상이나 필수적인 특징을 변경하지 않고서 다른 구체적인 형태로 실시될 수 있다는 것을 이해할 수 있을 것이다. 그러므로 이상에서 기술한 실시예들은 모든 면에서 예시적인 것이며 한정적이 아닌 것으로 이해해야만 한다.

부호의 설명

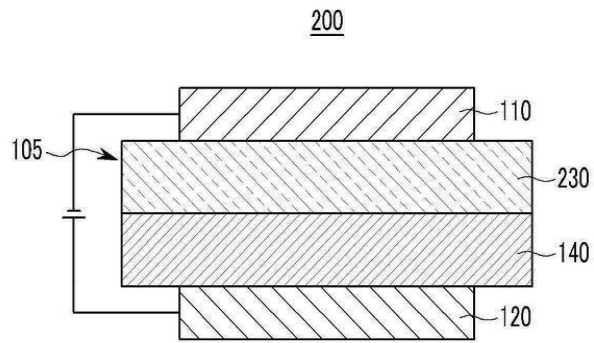
- [0957] 100 : 유기발광소자 110 : 음극
- 120 : 양극 105 : 유기박막층
- 130 : 발광층 140 : 정공 수송층
- 230 : 발광층 + 전자수송층

도면

도면1



도면2



专利名称(译)	标题：用于有机光电子器件的化合物，包括其的有机发光器件，以及包含有机发光器件的表		
公开(公告)号	KR101734460B1	公开(公告)日	2017-05-11
申请号	KR1020160091509	申请日	2016-07-19
[标]申请(专利权)人(译)	第一毛织株式会社		
申请(专利权)人(译)	第一毛织有限公司		
当前申请(专利权)人(译)	第一毛织有限公司		
[标]发明人	LEE HANILL 이한일 RYU DONG WAN 류동완 JUNG SUNG HYUN 정성현 CHAE MIYOUNG 채미영 HUH DALHO 허달호 HONG JINSEOK 홍진석 KIM JUN SEOK 김준석 RYU DONGKYU 유동규 JANG YUNA 장유나 JO YOUNGKYOUNG 조영경		
发明人	이한일 류동완 정성현 채미영 허달호 홍진석 김준석 유동규 장유나 조영경		
IPC分类号	C09K11/06 C07C309/36 C07D405/04 C07D409/04 H01L51/00 H01L51/50		
CPC分类号	C09K11/06 H01L51/0072 H01L51/0073 H01L51/0074 H01L51/0062 C07D405/04 C07D409/04 H01L51/5012 C07C309/36 H01L51/5024 H01L51/5056 C07D405/14 C07D409/14 C09K2211/1029 C09K2211/1088 C09K2211/1092 H01L51/0052 H01L51/0054 H01L51/0081 H01L51/5016 H01L51/5072 H01L2251/308 H05B33/10		
优先权	1020120091340 2012-08-21 KR		
其他公开文献	KR1020160092966A		
外部链接	Espacenet		

摘要(译)

本发明涉及用于有机光电子器件的化合物，包括该化合物的有机电致发光器件，以及包括该有机电致发光器件的显示器件，由此可以制造即使在低驱动电压下也由于稳定性和高发光效率而具有优异寿命特性的有机发光器件。 [化学式1] [式3] 金俊淑

