

(12) 특허협력조약에 의하여 공개된 국제출원

(19) 세계지식재산권기구  
국제사무국

(43) 국제공개일  
2017년 6월 8일 (08.06.2017)



(10) 국제공개번호  
**WO 2017/095100 A1**

- (51) 국제특허분류:  
C07D 251/12 (2006.01) C09K 11/06 (2006.01)  
C07D 403/10 (2006.01) H01L 51/50 (2006.01)  
C07D 471/04 (2006.01) H01L 51/00 (2006.01)
- (21) 국제출원번호: PCT/KR2016/013827
- (22) 국제출원일: 2016년 11월 29일 (29.11.2016)
- (25) 출원언어: 한국어
- (26) 공개언어: 한국어
- (30) 우선권정보:  
10-2015-0171591 2015년 12월 3일 (03.12.2015) KR
- (71) 출원인: 주식회사 두산 (DOOSAN CORPORATION)  
[KR/KR]; 04563 서울시 중구 장충단로 275, Seoul (KR).
- (72) 발명자: 손호준 (SON, Hojun); 16811 경기도 용인시 수지구 신봉 2로 115-21, 402 호, Gyeonggi-do (KR). 김충한 (KIM, Choong-Hahn); 08275 서울시 구로구 경인로 390, 203 동 503 호, Seoul (KR).
- (74) 대리인: 특허법인 정안 (HONESTY & JR PARTNERS INTELLECTUAL PROPERTY LAW GROUP); 06103 서울시 강남구 선릉로 615, 5층, Seoul (KR).
- (81) 지정국 (별도의 표시가 없는 한, 가능한 모든 종류의 국내 권리의 보호를 위하여): AE, AG, AL, AM, AO,

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

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

공개:

- 국제조사보고서와 함께 (조약 제 21 조(3))
- 청구범위 보정 기한 만료 전의 공개이며, 보정서를 접수하는 경우 그에 관하여 별도 공개함 (규칙 48.2(h))



WO 2017/095100 A1

(54) Title: ORGANIC COMPOUND AND ORGANIC ELECTROLUMINESCENT ELEMENT COMPRISING SAME

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

(57) Abstract: The present invention relates to a novel compound and an organic electroluminescent element comprising the same. The compound according to the present invention is used for an organic material layer, preferably an electron transport layer, of an organic electroluminescent element, and thus, can improve the light emitting efficiency, a driving voltage, lifetime, and the like, of the organic electroluminescent element.

(57) 요약서: 본 발명은 신규 화합물 및 이를 포함하는 유기 전계 발광 소자에 관한 것으로서, 본 발명에 따른 화합물은 유기 전계 발광 소자의 유기물층, 바람직하게는 전자 수송층에 사용됨에 따라 유기 전계 발광 소자의 발광 효율, 구동 전압, 수명 등을 향상시킬 수 있다.

## 명세서

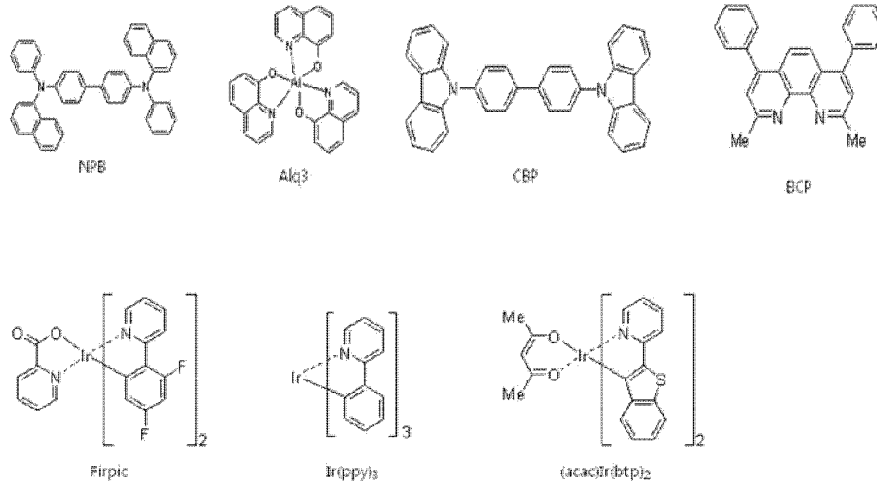
### 발명의 명칭: 유기 화합물 및 이를 포함하는 유기 전계 발광 소자 기술분야

- [1] 본 발명은 유기 전계 발광 소자용 재료로서 사용될 수 있는 신규 유기 화합물 및 이를 포함하는 유기 전계 발광 소자에 관한 것이다.

#### 배경기술

- [2] 1950년대 베르나소스(Bernanose)의 유기 박막 발광 관측을 시점으로 하여, 1965년 안트라센 단결정을 이용한 청색 전기발광으로 이어진 유기 전계 발광(electroluminescent, EL) 소자에 대한 연구가 이어져 오다가, 1987년 탕(Tang)에 의하여 정공층과 발광층의 기능층으로 나눈 적층구조의 유기 전계 발광 소자가 제시되었다. 이후, 고효율, 고수명의 유기 전계 발광 소자를 만들기 위하여, 소자 내 각각의 특징적인 유기물층을 도입하는 형태로 발전하여 왔으며, 이에 사용되는 특화된 물질의 개발로 이어졌다.
- [3] 유기 전계 발광 소자는 두 전극 사이에 전압을 걸어주면 양극에서는 정공이 유기물층으로 주입되고, 음극에서는 전자가 유기물층으로 주입된다. 주입된 정공과 전자가 만났을 때 엑시톤(exciton)이 형성되며, 이 엑시톤이 바닥상태로 떨어질 때 빛이 나게 된다. 이때, 유기물층으로 사용되는 물질은 그 기능에 따라, 발광 물질, 정공주입 물질, 정공수송 물질, 전자수송 물질, 전자주입 물질 등으로 분류될 수 있다.
- [4] 발광 물질은 발광색에 따라 청색, 녹색, 적색 발광 물질과, 보다 나은 천연색을 구현하기 위한 노란색 및 주황색 발광 물질로 구분될 수 있다. 또한, 색순도의 증가와 에너지 전이를 통한 발광 효율을 증가시키기 위하여, 발광 물질로서 호스트/도펀트 계를 사용할 수 있다.
- [5] 도펀트 물질은 유기 물질을 사용하는 형광 도펀트와 Ir, Pt 등의 중원자(heavy atoms)가 포함된 금속 착체 화합물을 사용하는 인광 도펀트로 나눌 수 있다. 이때, 인광 재료의 개발은 이론적으로 형광에 비해 4배까지 발광 효율을 향상시킬 수 있기 때문에, 인광 도펀트 뿐만 아니라 인광 호스트 재료들에 대한 연구도 많이 진행되고 있다.
- [6] 현재까지 정공 주입층, 정공 수송층, 정공 차단층, 전자 수송층 재료로는 NPB, BCP, Alq<sub>3</sub> 등이 널리 알려져 있으며, 발광층 재료로는 안트라센 유도체들이 보고되고 있다. 특히, 발광층 재료 중 효율 향상 측면에서 장점을 가지고 있는 Firpic, Ir(ppy)<sub>3</sub>, (acac)Ir(btp)<sub>2</sub> 등과 같은 Ir을 포함하는 금속 착체 화합물이 청색(blue), 녹색(green), 적색(red)의 인광 도펀트 재료로 사용되고 있으며, 4,4-디카바졸리비페닐(4,4-dicarbazolybiphenyl, CBP)은 인광 호스트 재료로 사용되고 있다.

[7]



[8] 그러나 종래의 유기물층 재료들은 발광 특성 측면에서는 유리한 면이 있으나, 유리전이온도가 낮아 열적 안정성이 매우 좋지 않기 때문에, 유기 전계 발광 소자의 수명 측면에서 만족할 만한 수준이 되지 못하고 있다. 따라서, 성능이 뛰어난 유기물층 재료의 개발이 요구되고 있다.

### 발명의 상세한 설명

#### 기술적 과제

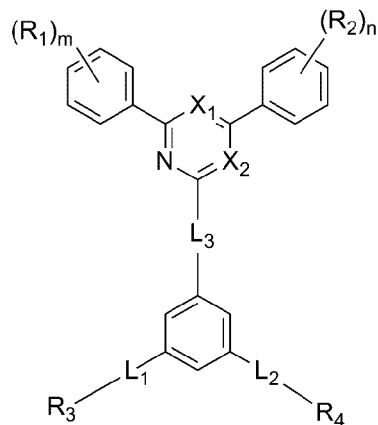
[9] 본 발명은 상기한 문제점을 해결하기 위해, 유기 전계 발광 소자의 효율, 수명 및 안정성 등을 향상시킬 수 있는 신규 화합물 및 상기 화합물을 이용한 유기 전계 발광 소자를 제공하는 것을 목적으로 한다.

#### 과제 해결 수단

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

[11] [화학식 1]

[12]



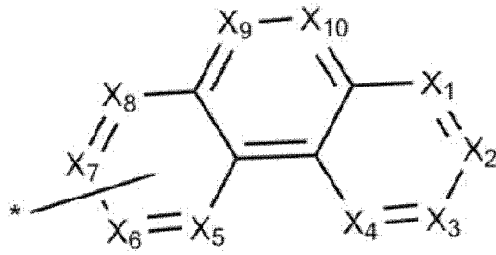
[13] 상기 화학식 1에서,

[14]  $X_1$  및  $X_2$ 는 각각 독립적으로 N 또는  $C(R_5)$ 이나, 상기  $X_1$  및  $X_2$  중 적어도 하나는 N이고;

[15]  $m$  및  $n$ 은 각각 독립적으로 0 내지 5의 정수이며;

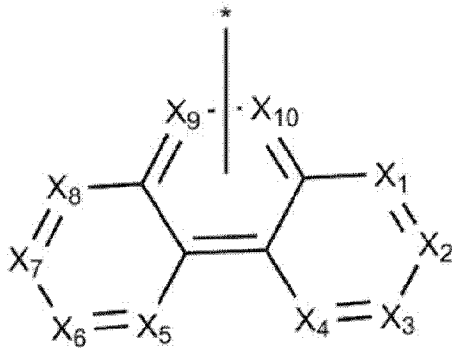
- [16]  $R_1$  및  $R_2$ 는 각각 독립적으로 중수소, 할로젠, 시아노기, 니트로기,  $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬기,  $C_2\sim C_{40}$ 의 알케닐기,  $C_2\sim C_{40}$ 의 알키닐기,  $C_3\sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기,  $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기,  $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬옥시기,  $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴옥시기,  $C_3\sim C_{40}$ 의 알킬실릴기,  $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴실릴기,  $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬보론기,  $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴보론기,  $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴포스파닐기,  $C_6\sim C_{60}$ 의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및  $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택되고, 상기  $R_1$  및  $R_2$  각각이 복수 개인 경우 이들은 서로 동일하거나 상이하며;
- [17]  $L_1$  내지  $L_3$ 는 각각 독립적으로 단일결합,  $C_6\sim C_{30}$ 의 아릴렌기 및 핵원자수 5 내지 30개의 헤테로아릴렌기로 이루어진 군에서 선택되며;
- [18]  $R_3$  내지  $R_5$ 는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 시아노기, 니트로기,  $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬기,  $C_2\sim C_{40}$ 의 알케닐기,  $C_2\sim C_{40}$ 의 알키닐기,  $C_3\sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기,  $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기,  $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬옥시기,  $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴옥시기,  $C_3\sim C_{40}$ 의 알킬실릴기,  $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴실릴기,  $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬보론기,  $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴보론기,  $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴포스파닐기,  $C_6\sim C_{60}$ 의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및  $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택되며;
- [19] 상기  $L_1$  내지  $L_3$ 의 아릴렌기 및 헤테로아릴렌기와,  $R_1$  내지  $R_5$ 의 알킬기, 알케닐기, 알키닐기, 아릴기, 헤테로아릴기, 아릴옥시기, 알킬옥시기, 시클로알킬기, 헤테로시클로알킬기, 아릴아민기, 알킬실릴기, 알킬보론기, 아릴보론기, 아릴포스파닐기, 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 아릴실릴기는 각각 독립적으로 중수소, 할로젠, 시아노기, 니트로기,  $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬기,  $C_2\sim C_{40}$ 의 알케닐기,  $C_2\sim C_{40}$ 의 알키닐기,  $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기,  $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴옥시기,  $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬옥시기,  $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴아민기,  $C_3\sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기,  $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬실릴기,  $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬보론기,  $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴보론기,  $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴포스파닐기,  $C_6\sim C_{60}$ 의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및  $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상의 치환기로 치환되거나 비치환되고, 복수 개의 치환기로 치환되는 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이할 수 있으며;
- [20] 상기  $R_3$  및  $R_4$  중 적어도 하나는 하기 화학식 2 또는 3으로 표시되는 치환기에서 선택되고;
- [21] [화학식 2]

[22]



[23] [화학식 3]

[24]



[25] 상기 화학식 2 및 3에서,

[26] \*은 결합이 이루어지는 부분을 의미하고;

[27]  $X_1$  내지  $X_{10}$ 은 각각 독립적으로 N 또는  $C(R_6)$ 이나, 상기  $X_1$  내지  $X_{10}$  중 적어도 하나는 N이며;[28] 상기 화학식 2에서  $L_1$  또는  $L_2$ 에 결합되는  $X_5$  내지  $X_8$  중 어느 하나는  $C(R_6)$ 이고, 이때 상기  $R_6$ 는 부재이며;[29] 상기 화학식 3에서  $L_1$  또는  $L_2$ 에 결합되는  $X_9$  및  $X_{10}$  중 어느 하나는  $C(R_6)$ 이고, 이때 상기  $R_6$ 는 부재이며;[30]  $R_6$ 은 수소, 중수소, 할로젠, 시아노기, 니트로기,  $C_1$ ~ $C_{40}$ 의 알킬기,  $C_2$ ~ $C_{40}$ 의 알케닐기,  $C_2$ ~ $C_{40}$ 의 알키닐기,  $C_3$ ~ $C_{40}$ 의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기,  $C_6$ ~ $C_{60}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기,  $C_1$ ~ $C_{40}$ 의 알킬옥시기,  $C_6$ ~ $C_{60}$ 의 아릴옥시기,  $C_3$ ~ $C_{40}$ 의 알킬실릴기,  $C_6$ ~ $C_{60}$ 의 아릴실릴기,  $C_1$ ~ $C_{40}$ 의 알킬보론기,  $C_6$ ~ $C_{60}$ 의 아릴보론기,  $C_6$ ~ $C_{60}$ 의 아릴포스파닐기,  $C_6$ ~ $C_{60}$ 의 모노 또는 디아릴포스파닐기 및  $C_6$ ~ $C_{60}$ 의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택되고, 상기  $R_6$ 이 복수 개인 경우 이들은 서로 동일하거나 상이하며;[31] 상기  $R_6$ 의 알킬기, 알케닐기, 알키닐기, 아릴기, 헤테로아릴기, 아릴옥시기, 알킬옥시기, 시클로알킬기, 헤테로시클로알킬기, 아릴아민기, 알킬실릴기, 알킬보론기, 아릴보론기, 아릴포스파닐기, 모노 또는 디아릴포스파닐기 및 아릴실릴기는 각각 독립적으로 중수소, 할로젠, 시아노기, 니트로기,  $C_1$ ~ $C_{40}$ 의 알킬기,  $C_2$ ~ $C_{40}$ 의 알케닐기,  $C_2$ ~ $C_{40}$ 의 알키닐기,  $C_6$ ~ $C_{60}$ 의 아릴기, 핵원자수 5

내지 60개의 헤테로아릴기, C<sub>6</sub>~C<sub>60</sub>의 아릴옥시기, C<sub>1</sub>~C<sub>40</sub>의 알킬옥시기, C<sub>6</sub>~C<sub>60</sub>의 아릴아민기, C<sub>3</sub>~C<sub>40</sub>의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, C<sub>1</sub>~C<sub>40</sub>의 알킬실릴기, C<sub>1</sub>~C<sub>40</sub>의 알킬보론기, C<sub>6</sub>~C<sub>60</sub>의 아릴보론기, C<sub>6</sub>~C<sub>60</sub>의 아릴포스파닐기, C<sub>6</sub>~C<sub>60</sub>의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 C<sub>6</sub>~C<sub>60</sub>의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상의 치환기로 치환되거나 비치환되고, 복수 개의 치환기로 치환되는 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

- [32] 본 발명은 양극, 음극 및 상기 양극과 음극 사이에 개재(介在)된 1층 이상의 유기물층을 포함하며, 상기 1층 이상의 유기물층 중에서 적어도 하나는 상기 화학식 1의 화합물을 포함하는 유기 전계 발광 소자를 제공한다.
- [33] 본 발명에서의 "알킬"은 탄소수 1 내지 40개의 직쇄 또는 측쇄의 포화 탄화수소에서 유래되는 1개의 치환기이며, 이의 예로는 메틸, 에틸, 프로필, 이소부틸, sec-부틸, 펜틸, iso-아밀, 헥실 등이 있는데, 이에 한정되지 않는다.
- [34] 본 발명에서의 "알케닐(alkenyl)"은 탄소-탄소 이중 결합을 1개 이상 가진, 탄소수 2 내지 40개의 직쇄 또는 측쇄의 불포화 탄화수소에서 유래되는 1개의 치환기이며, 이의 예로는 비닐(vinyl), 알릴(allyl), 이소프로펜일(isopropenyl), 2-부텐일(2-butenyl) 등이 있는데, 이에 한정되지 않는다.
- [35] 본 발명에서의 "알키닐(alkynyl)"은 탄소-탄소 삼중 결합을 1개 이상 가진, 탄소수 2 내지 40개의 직쇄 또는 측쇄의 불포화 탄화수소에서 유래되는 1개의 치환기이며, 이의 예로는 에티닐(ethynyl), 2-프로파닐(2-propynyl) 등이 있는데, 이에 한정되지 않는다.
- [36] 본 발명에서의 "아릴"은 단독 고리 또는 2 이상의 고리가 조합된, 탄소수 6 내지 60개의 방향족 탄화수소로부터 유래된 1개의 치환기를 의미한다. 또한, 2 이상의 고리가 서로 축합되어 있고, 고리 형성 원자로서 탄소만을 포함(예를 들어, 탄소수는 8 내지 60개일 수 있음)하고, 분자 전체가 비-방향족성(non-aromaticity)를 갖는 1개 치환기도 포함될 수 있다. 이러한 아릴의 예로는 페닐, 나프틸, 페난트릴, 안트릴, 플루오레닐 등이 있는데, 이에 한정되지 않는다.
- [37] 본 발명에서의 "헤테로아릴"은 핵원자수 5 내지 60개의 모노헤테로사이클릭 또는 폴리헤테로사이클릭 방향족 탄화수소로부터 유래된 1개의 치환기를 의미한다. 이때, 고리 중 하나 이상의 탄소, 바람직하게는 1 내지 3개의 탄소가 N, O, P, S 및 Se 중에서 선택된 헤테로원자로 치환된다. 또한, 2 이상의 고리가 서로 단순 부착(pendant)되거나 축합되어 있고, 고리 형성 원자로서 탄소 외에 N, O, P, S 및 Se 중에서 선택된 헤테로 원자를 포함하고, 분자 전체가 비-방향족성(non-aromaticity)를 갖는 1개 그룹도 포함하는 것으로 해석된다. 이러한 헤테로아릴의 예로는 피리딜, 피라지닐, 피리미디닐, 피리다지닐, 트리아지닐과 같은 6-원 모노사이클릭 고리; 페녹사티에닐(phenoxathienyl), 인돌리지닐(indoliziny), 인돌릴(indolyl), 퓨리닐(puriny), 퀴놀릴(quinolyl), 벤조티아졸(벤조thiazole), 카바졸릴(carbazolyl)과 같은 폴리사이클릭 고리;

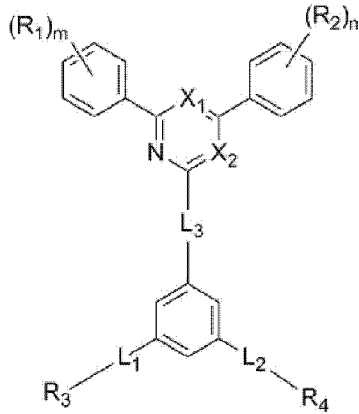
- 2-푸라닐, N-이미다졸릴, 2-이속사졸릴, 2-피리디닐, 2-피리미디닐 등이 있는데, 이에 한정되지 않는다.
- [38] 본 발명에서의 "아릴옥시"는 RO-로 표시되는 1가의 치환기로, 상기 R은 탄소수 5 내지 60개의 아릴을 의미한다. 이러한 아릴옥시의 예로는 페닐옥시, 나프틸옥시, 디페닐옥시 등이 있는데, 이에 한정되지 않는다.
- [39] 본 발명에서의 "알킬옥시"는 R'O-로 표시되는 1가의 치환기로, 상기 R'는 1 내지 40개의 알킬을 의미하며, 직쇄(linear), 측쇄(branched) 또는 사이클릭(cyclic) 구조를 포함하는 것으로 해석한다. 이러한 알킬옥시의 예로는 메톡시, 에톡시, n-프로폭시, 1-프로폭시, t-부톡시, n-부톡시, 펜톡시 등이 있는데, 이에 한정되지 않는다.
- [40] 본 발명에서의 "아릴아민"은 탄소수 6 내지 60개의 아릴로 치환된 아민을 의미한다.
- [41] 본 발명에서의 "시클로알킬"은 탄소수 3 내지 40개의 모노사이클릭 또는 폴리사이클릭 비-방향족 탄화수소로부터 유래된 1가의 치환기를 의미한다. 이러한 사이클로알킬의 예로는 사이클로프로필, 사이클로펜틸, 사이클로헥실, 놀보닐(norbornyl), 아다만틴(adamantine) 등이 있는데, 이에 한정되지 않는다.
- [42] 본 발명에서의 "헤테로시클로알킬"은 핵원자수 3 내지 40개의 비-방향족 탄화수소로부터 유래된 1가의 치환기를 의미하며, 고리 중 하나 이상의 탄소, 바람직하게는 1 내지 3개의 탄소가 N, O, S 또는 Se와 같은 헤테로 원자로 치환된다. 이러한 헤테로시클로알킬의 예로는 모르폴린, 피페라진 등이 있는데, 이에 한정되지 않는다.
- [43] 본 발명에서의 "알킬실릴"은 탄소수 1 내지 40개의 알킬로 치환된 실릴이고, "아릴실릴"은 탄소수 5 내지 60개의 아릴로 치환된 실릴을 의미한다.
- [44] 본 발명에서의 "축합 고리"는 축합 지방족 고리, 축합 방향족 고리, 축합 헤테로지방족 고리, 축합 헤테로방향족 고리 또는 이들의 조합된 형태를 의미한다.

### 발명의 효과

- [45] 본 발명에 따른 화학식 1로 표시되는 화합물은 열적 안정성, 정공 수송, 정공 주입 성능, 전자 수송 및 전자 주입 성능이 우수하고, 전자 이동도가 빠르기 때문에 유기 전계 발광 소자의 유기물층 재료, 바람직하게는 발광층 재료, 정공 주입층, 정공 수송층, 전자 주입층 및 전자 수송층으로 이용될 수 있다.
- [46] 본 발명의 화학식 1로 표시되는 신규 화합물은 발광층 재료, 정공 주입층, 정공 수송층, 전자 주입층 및 전자 수송층으로 사용할 경우, 종래 물질에 비해 우수한 발광 성능, 낮은 구동전압, 높은 효율 및 장수명을 갖는 유기 전계 발광 소자를 제조할 수 있고, 나아가 성능 및 수명이 크게 향상된 풀 칼라 디스플레이 패널도 제조할 수 있다.

### 발명의 실시를 위한 최선의 형태

- [47] 본 발명은 하기 화학식 1로 표시되는 화합물을 제공한다:  
 [48] [화학식 1]  
 [49]



- [50] 상기 화학식 1에서,  
 [51]  $X_1$  및  $X_2$ 는 각각 독립적으로 N 또는  $C(R_5)$ 이나, 상기  $X_1$  및  $X_2$  중 적어도 하나는 N이고;  
 [52] m 및 n은 각각 독립적으로 0 내지 5의 정수이며;  
 [53]  $R_1$  및  $R_2$ 는 각각 독립적으로 중수소, 할로젠, 시아노기, 니트로기,  $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬기,  $C_2\sim C_{40}$ 의 알케닐기,  $C_2\sim C_{40}$ 의 알키닐기,  $C_3\sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기,  $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기,  $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬옥시기,  $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴옥시기,  $C_3\sim C_{40}$ 의 알킬실릴기,  $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴실릴기,  $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬보론기,  $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴보론기,  $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴포스파닐기,  $C_6\sim C_{60}$ 의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및  $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택되고, 상기  $R_1$  및  $R_2$  각각이 복수 개인 경우 이들은 서로 동일하거나 상이하며;  
 [54]  $L_1$  내지  $L_3$ 는 각각 독립적으로 단일결합,  $C_6\sim C_{30}$ 의 아릴렌기 및 핵원자수 5 내지 30개의 헤테로아릴렌기로 이루어진 군에서 선택되며;  
 [55]  $R_3$  내지  $R_5$ 는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 시아노기, 니트로기,  $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬기,  $C_2\sim C_{40}$ 의 알케닐기,  $C_2\sim C_{40}$ 의 알키닐기,  $C_3\sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기,  $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기,  $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬옥시기,  $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴옥시기,  $C_3\sim C_{40}$ 의 알킬실릴기,  $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴실릴기,  $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬보론기,  $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴보론기,  $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴포스파닐기,  $C_6\sim C_{60}$ 의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및  $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택되며;  
 [56] 상기  $L_1$  내지  $L_3$ 의 아릴렌기 및 헤테로아릴렌기와,  $R_1$  내지  $R_5$ 의 알킬기, 알케닐기, 알키닐기, 아릴기, 헤테로아릴기, 아릴옥시기, 알킬옥시기, 시클로알킬기, 헤테로시클로알킬기, 아릴아민기, 알킬실릴기, 알킬보론기, 아릴보론기, 아릴포스파닐기, 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 아릴실릴기는

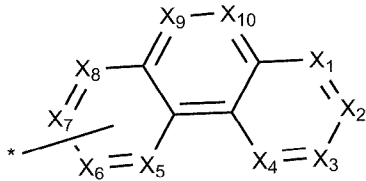


각각 독립적으로 중수소, 할로젠, 시아노기, 니트로기, C<sub>1</sub>~C<sub>40</sub>의 알킬기, C<sub>2</sub>~C<sub>40</sub>의 알케닐기, C<sub>2</sub>~C<sub>40</sub>의 알키닐기, C<sub>6</sub>~C<sub>60</sub>의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기, C<sub>6</sub>~C<sub>60</sub>의 아릴옥시기, C<sub>1</sub>~C<sub>40</sub>의 알킬옥시기, C<sub>6</sub>~C<sub>60</sub>의 아릴아민기, C<sub>3</sub>~C<sub>40</sub>의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, C<sub>1</sub>~C<sub>40</sub>의 알킬실릴기, C<sub>1</sub>~C<sub>40</sub>의 알킬보론기, C<sub>6</sub>~C<sub>60</sub>의 아릴보론기, C<sub>6</sub>~C<sub>60</sub>의 아릴포스파닐기, C<sub>6</sub>~C<sub>60</sub>의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 C<sub>6</sub>~C<sub>60</sub>의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상의 치환기로 치환되거나 비치환되고, 복수 개의 치환기로 치환되는 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이할 수 있으며;

[57] 상기 R<sub>3</sub> 및 R<sub>4</sub> 중 적어도 하나는 하기 화학식 2 또는 3으로 표시되는 치환기에서 선택되고;

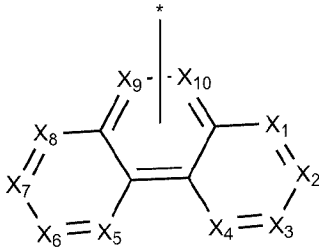
[58] [화학식 2]

[59]



[60] [화학식 3]

[61]



[62] 상기 화학식 2 및 3에서,

[63] \*은 결합이 이루어지는 부분을 의미하고;

[64] X<sub>1</sub> 내지 X<sub>10</sub>은 각각 독립적으로 N 또는 C(R<sub>6</sub>)이나, 상기 X<sub>1</sub> 내지 X<sub>10</sub> 중 적어도 하나는 N이며;

[65] 상기 화학식 2에서 L<sub>1</sub> 또는 L<sub>2</sub>에 결합되는 X<sub>5</sub> 내지 X<sub>8</sub> 중 어느 하나는 C(R<sub>6</sub>)이고, 이때 상기 R<sub>6</sub>는 부재이며;

[66] 상기 화학식 3에서 L<sub>1</sub> 또는 L<sub>2</sub>에 결합되는 X<sub>9</sub> 및 X<sub>10</sub> 중 어느 하나는 C(R<sub>6</sub>)이고, 이때 상기 R<sub>6</sub>는 부재이며;

[67] R<sub>6</sub>은 수소, 중수소, 할로젠, 시아노기, 니트로기, C<sub>1</sub>~C<sub>40</sub>의 알킬기, C<sub>2</sub>~C<sub>40</sub>의 알케닐기, C<sub>2</sub>~C<sub>40</sub>의 알키닐기, C<sub>3</sub>~C<sub>40</sub>의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, C<sub>6</sub>~C<sub>60</sub>의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기, C<sub>1</sub>~C<sub>40</sub>의 알킬옥시기, C<sub>6</sub>~C<sub>60</sub>의 아릴옥시기, C<sub>3</sub>~C<sub>40</sub>의 알킬실릴기, C<sub>6</sub>~C<sub>60</sub>의 아릴실릴기, C<sub>1</sub>~C<sub>40</sub>의 알킬보론기, C<sub>6</sub>~C<sub>60</sub>의 아릴보론기, C<sub>6</sub>~C<sub>60</sub>의 아릴포스파닐기, C<sub>6</sub>~C<sub>60</sub>의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 C<sub>6</sub>~C<sub>60</sub>의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택되고, 상기 R<sub>6</sub>이 복수 개인 경우 이들은 서로

동일하거나 상이하며;

- [68] 상기 R<sub>6</sub>의 알킬기, 알케닐기, 알키닐기, 아릴기, 헤테로아릴기, 아릴옥시기, 알킬옥시기, 시클로알킬기, 헤테로시클로알킬기, 아릴아민기, 알킬실릴기, 알킬보론기, 아릴보론기, 아릴포스파닐기, 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 아릴실릴기는 각각 독립적으로 중수소, 할로젠, 시아노기, 니트로기, C<sub>1</sub>~C<sub>40</sub>의 알킬기, C<sub>2</sub>~C<sub>40</sub>의 알케닐기, C<sub>2</sub>~C<sub>40</sub>의 알키닐기, C<sub>6</sub>~C<sub>60</sub>의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기, C<sub>6</sub>~C<sub>60</sub>의 아릴옥시기, C<sub>1</sub>~C<sub>40</sub>의 알킬옥시기, C<sub>6</sub>~C<sub>60</sub>의 아릴아민기, C<sub>3</sub>~C<sub>40</sub>의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, C<sub>1</sub>~C<sub>40</sub>의 알킬실릴기, C<sub>1</sub>~C<sub>40</sub>의 알킬보론기, C<sub>6</sub>~C<sub>60</sub>의 아릴보론기, C<sub>6</sub>~C<sub>60</sub>의 아릴포스파닐기, C<sub>6</sub>~C<sub>60</sub>의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 C<sub>6</sub>~C<sub>60</sub>의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상의 치환기로 치환되거나 비치환되고, 복수 개의 치환기로 치환되는 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

### 발명의 실시를 위한 형태

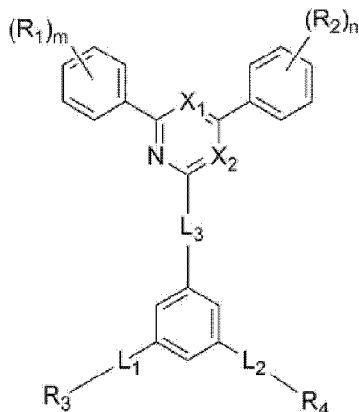
- [69] 이하, 본 발명을 상세히 설명한다.

#### [70] 1. 신규 유기 화합물

- [71] 본 발명에 따른 신규 유기 화합물은 피리미딘 또는 트리아진을 축으로 Y자 형태의 기본 골격에 아릴기 및 헤테로아릴기가 결합된 구조를 갖는다. 본 발명에서는 상기한 기본 골격에 헤테로 원자의 위치와 수를 변화시켜(예컨대, 페난트리딘, 벤조나프티리딘, 피리도퀴녹살린 등)과 같이 전자 흡수성이 큰 전자 끌개기(EWG)가 결합되어 분자 전체가 전자 이동도를 높일 수 있다. 구체적으로, 본 발명의 신규 화합물은 하기 화학식 1로 표시되는 화합물인 것을 특징으로 한다.

- [72] [화학식 1]

[73]

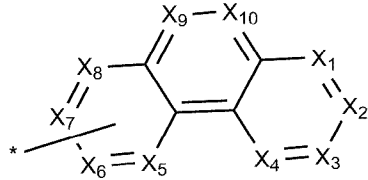


- [74] 상기 화학식 1에서,

- [75] X<sub>1</sub> 및 X<sub>2</sub>는 각각 독립적으로 N 또는 C(R<sub>5</sub>)이나, 상기 X<sub>1</sub> 및 X<sub>2</sub> 중 적어도 하나는 N이고;

- [76] m 및 n은 각각 독립적으로 0 내지 5의 정수이며;
- [77]  $R_1$  및  $R_2$ 는 각각 독립적으로 중수소, 할로젠, 시아노기, 니트로기,  $C_1$ ~ $C_{40}$ 의 알킬기,  $C_2$ ~ $C_{40}$ 의 알케닐기,  $C_2$ ~ $C_{40}$ 의 알키닐기,  $C_3$ ~ $C_{40}$ 의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기,  $C_6$ ~ $C_{60}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기,  $C_1$ ~ $C_{40}$ 의 알킬옥시기,  $C_6$ ~ $C_{60}$ 의 아릴옥시기,  $C_3$ ~ $C_{40}$ 의 알킬실릴기,  $C_6$ ~ $C_{60}$ 의 아릴실릴기,  $C_1$ ~ $C_{40}$ 의 알킬보론기,  $C_6$ ~ $C_{60}$ 의 아릴보론기,  $C_6$ ~ $C_{60}$ 의 아릴포스파닐기,  $C_6$ ~ $C_{60}$ 의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및  $C_6$ ~ $C_{60}$ 의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택되고, 상기  $R_1$  및  $R_2$  각각이 복수 개인 경우 이들은 서로 동일하거나 상이하며;
- [78]  $L_1$  내지  $L_3$ 는 각각 독립적으로 단일결합,  $C_6$ ~ $C_{30}$ 의 아릴렌기 및 핵원자수 5 내지 30개의 헤테로아릴렌기로 이루어진 군에서 선택되며;
- [79]  $R_3$  내지  $R_5$ 는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 시아노기, 니트로기,  $C_1$ ~ $C_{40}$ 의 알킬기,  $C_2$ ~ $C_{40}$ 의 알케닐기,  $C_2$ ~ $C_{40}$ 의 알키닐기,  $C_3$ ~ $C_{40}$ 의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기,  $C_6$ ~ $C_{60}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기,  $C_1$ ~ $C_{40}$ 의 알킬옥시기,  $C_6$ ~ $C_{60}$ 의 아릴옥시기,  $C_3$ ~ $C_{40}$ 의 알킬실릴기,  $C_6$ ~ $C_{60}$ 의 아릴실릴기,  $C_1$ ~ $C_{40}$ 의 알킬보론기,  $C_6$ ~ $C_{60}$ 의 아릴보론기,  $C_6$ ~ $C_{60}$ 의 아릴포스파닐기,  $C_6$ ~ $C_{60}$ 의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및  $C_6$ ~ $C_{60}$ 의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택되며;
- [80] 상기  $L_1$  내지  $L_3$ 의 아릴렌기 및 헤테로아릴렌기와,  $R_1$  내지  $R_5$ 의 알킬기, 알케닐기, 알키닐기, 아릴기, 헤테로아릴기, 아릴옥시기, 알킬옥시기, 시클로알킬기, 헤테로시클로알킬기, 아릴아민기, 알킬실릴기, 알킬보론기, 아릴보론기, 아릴포스파닐기, 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 아릴실릴기는 각각 독립적으로 중수소, 할로젠, 시아노기, 니트로기,  $C_1$ ~ $C_{40}$ 의 알킬기,  $C_2$ ~ $C_{40}$ 의 알케닐기,  $C_2$ ~ $C_{40}$ 의 알키닐기,  $C_6$ ~ $C_{60}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기,  $C_6$ ~ $C_{60}$ 의 아릴옥시기,  $C_1$ ~ $C_{40}$ 의 알킬옥시기,  $C_6$ ~ $C_{60}$ 의 아릴아민기,  $C_3$ ~ $C_{40}$ 의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기,  $C_1$ ~ $C_{40}$ 의 알킬실릴기,  $C_1$ ~ $C_{40}$ 의 알킬보론기,  $C_6$ ~ $C_{60}$ 의 아릴보론기,  $C_6$ ~ $C_{60}$ 의 아릴포스파닐기,  $C_6$ ~ $C_{60}$ 의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및  $C_6$ ~ $C_{60}$ 의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상의 치환기로 치환되거나 비치환되고, 복수 개의 치환기로 치환되는 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이할 수 있다.
- [81] 본 발명의 바람직한 한 구현 예에 따르면, 상기  $R_3$  및  $R_4$  중 적어도 하나는 하기 화학식 2 또는 화학식 3으로 표시되는 치환기인 것이 발광 효율 측면에서 바람직하나, 이에 제한되는 것은 아니다:
- [82] [화학식 2]

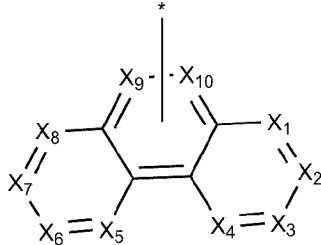
[83]



[84]

[화학식 3]

[85]



[86]

상기 화학식 2 및 화학식 3에서,

[87]

\*은 결합이 이루어지는 부분을 의미하고;

[88]

$X_1$  내지  $X_{10}$ 은 각각 독립적으로 N 또는  $C(R_6)$ 이나, 상기  $X_1$  내지  $X_{10}$  중 적어도 하나는 N이며;

[89]

상기 화학식 2에서  $L_1$  또는  $L_2$ 에 결합되는  $X_5$  내지  $X_8$  중 어느 하나는  $C(R_6)$ 이고, 이때 상기  $R_6$ 는 부재이며;

[90]

상기 화학식 3에서  $L_1$  또는  $L_2$ 에 결합되는  $X_9$  및  $X_{10}$  중 어느 하나는  $C(R_6)$ 이고, 이때 상기  $R_6$ 는 부재이며;

[91]

$R_6$ 은 수소, 중수소, 할로젠, 시아노기, 니트로기,  $C_1$ ~ $C_{40}$ 의 알킬기,  $C_2$ ~ $C_{40}$ 의 알케닐기,  $C_2$ ~ $C_{40}$ 의 알키닐기,  $C_6$ ~ $C_{60}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기,  $C_6$ ~ $C_{60}$ 의 아릴옥시기,  $C_1$ ~ $C_{40}$ 의 알킬옥시기,  $C_3$ ~ $C_{40}$ 의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기,  $C_6$ ~ $C_{60}$ 의 아릴아민기,  $C_1$ ~ $C_{40}$ 의 알킬실릴기,  $C_1$ ~ $C_{40}$ 의 알킬보론기,  $C_6$ ~ $C_{60}$ 의 아릴보론기,  $C_6$ ~ $C_{60}$ 의 아릴포스파닐기,  $C_6$ ~ $C_{60}$ 의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및  $C_6$ ~ $C_{60}$ 의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택되거나, 또는 인접하는 기(예컨대,  $L_2$ , 인접하는 다른  $R_6$  등)와 결합하여 축합 고리를 형성할 수 있고, 상기  $R_6$ 이 복수 개인 경우 이들은 서로 동일하거나 상이하며;

[92]

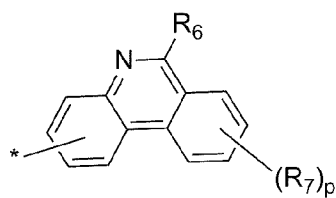
상기  $R_6$ 의 알킬기, 알케닐기, 알키닐기, 아릴기, 헤테로아릴기, 아릴옥시기, 알킬옥시기, 시클로알킬기, 헤테로시클로알킬기, 아릴아민기, 알킬실릴기, 알킬보론기, 아릴보론기, 아릴포스파닐기, 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 아릴실릴기는 각각 독립적으로 중수소, 할로젠, 시아노기, 니트로기,  $C_1$ ~ $C_{40}$ 의 알킬기,  $C_2$ ~ $C_{40}$ 의 알케닐기,  $C_2$ ~ $C_{40}$ 의 알키닐기,  $C_6$ ~ $C_{60}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기,  $C_6$ ~ $C_{60}$ 의 아릴옥시기,  $C_1$ ~ $C_{40}$ 의 알킬옥시기,  $C_6$ ~ $C_{60}$ 의 아릴아민기,  $C_3$ ~ $C_{40}$ 의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기,  $C_1$ ~ $C_{40}$ 의 알킬실릴기,  $C_1$ ~ $C_{40}$ 의 알킬보론기,  $C_6$ ~ $C_{60}$ 의 아릴보론기,  $C_6$ ~ $C_{60}$ 의 아릴포스파닐기,  $C_6$ ~ $C_{60}$ 의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및  $C_6$ ~ $C_{60}$ 의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상의 치환기로

치환되거나 비치환되고, 복수 개의 치환기로 치환되는 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

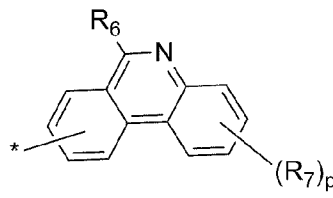
[93] 본 발명의 화합물은 페난트렌 치환기의 기본 골격에 질소의 개수 및 위치를 변화시켜 빠른 전자 이동도를 가질 수 있다. 이로 인해 전자 수송층의 성능을 높여 유기 전계 발광 소자의 효율을 높일 수 있다. 또한 발광층으로 엑시톤의 수 증가에 기여하여 소자의 발광 효율이 개선될 수 있고, 소자의 내구성 및 안정성이 향상되어 소자의 수명이 효율적으로 증가될 수 있다.

[94] 본 발명의 바람직한 한 구현 예에 따르면, 상기 화학식 2로 표시되는 치환기는 하기 화학식 A-1 내지 A-11 중 적어도 하나로 표시되는 치환기일 수 있다:

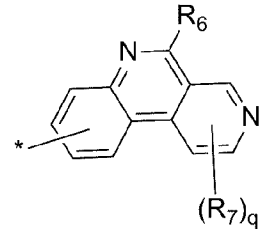
[95]



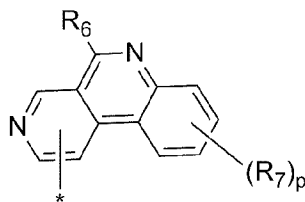
A-1



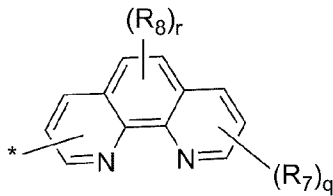
A-2



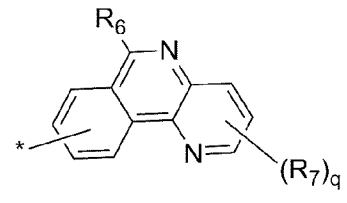
A-3



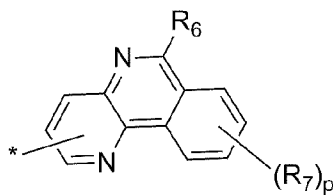
A-4



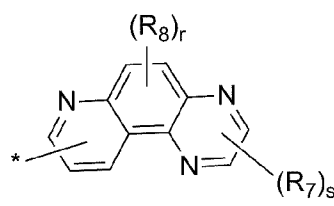
A-5



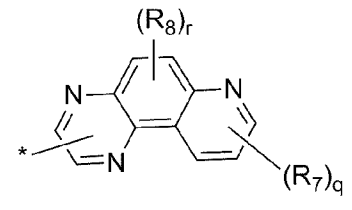
A-6



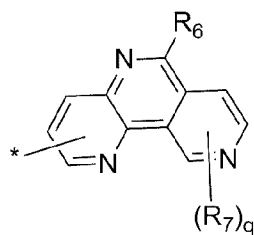
A-7



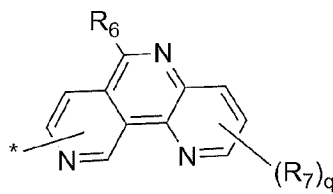
A-8



A-9



A-10



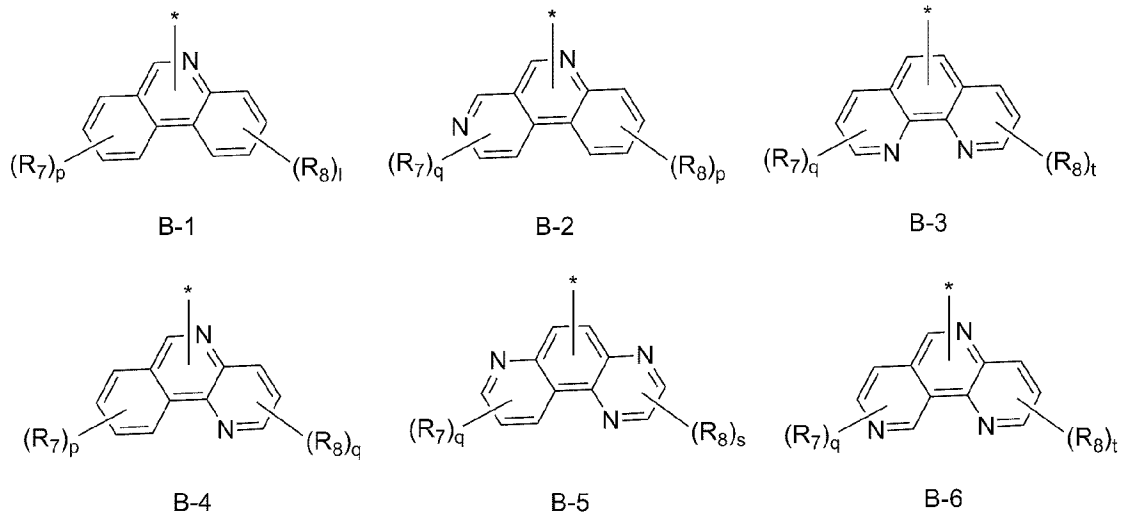
A-11

[96] 상기 화학식 A-1 내지 A-11에서,

[97] p는 0 내지 4의 정수이며;

- [98]  $q$ 는 0 내지 3의 정수이며;
- [99]  $r$  및  $s$ 는 각각 독립적으로 0 내지 2의 정수이며;
- [100]  $R_7$  및  $R_8$ 은 각각 독립적으로 중수소, 할로젠, 시아노기, 니트로기,  $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬기,  $C_2\sim C_{40}$ 의 알케닐기,  $C_2\sim C_{40}$ 의 알키닐기,  $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기,  $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴옥시기,  $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬옥시기,  $C_3\sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기,  $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴아민기,  $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬실릴기,  $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬보론기,  $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴보론기,  $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴포스파닐기,  $C_6\sim C_{60}$ 의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및  $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택되거나, 또는 인접하는 기(예컨대,  $L_2$ , 인접하는 다른  $R_7$  또는  $R_8$  등)와 결합하여 축합 고리를 형성할 수 있고, 상기  $R_7$  및  $R_8$  각각이 복수 개인 경우 이들은 서로 동일하거나 상이하며;
- [101] 상기  $R_7$  및  $R_8$ 의 알킬기, 알케닐기, 알키닐기, 아릴기, 헤테로아릴기, 아릴옥시기, 알킬옥시기, 시클로알킬기, 헤테로시클로알킬기, 아릴아민기, 알킬실릴기, 알킬보론기, 아릴보론기, 아릴포스파닐기, 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 아릴실릴기는 각각 독립적으로 중수소, 할로젠, 시아노기, 니트로기,  $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬기,  $C_2\sim C_{40}$ 의 알케닐기,  $C_2\sim C_{40}$ 의 알키닐기,  $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기,  $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴옥시기,  $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬옥시기,  $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴아민기,  $C_3\sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기,  $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬실릴기,  $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬보론기,  $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴보론기,  $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴포스파닐기,  $C_6\sim C_{60}$ 의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및  $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상의 치환기로 치환되거나 비치환되고, 복수 개의 치환기로 치환되는 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이할 수 있으며,
- [102] \* 및  $R_6$ 은 상기 화학식 2에서 정의된 바와 같다.
- [103] 본 발명의 바람직한 한 구현 예에 따르면, 상기 화학식 3으로 표시되는 치환기는 하기 화학식 B-1 내지 B-6 중 적어도 하나로 표시되는 치환기일 수 있다:

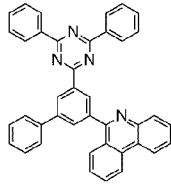
[104]



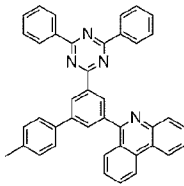
- [105] 상기 화학식 B-1 내지 B-6에서,
- [106] \*은 결합이 이루어지는 부분을 의미하고;
- [107] p 및 1은 각각 독립적으로 0 내지 4의 정수이며;
- [108] q 및 t는 각각 독립적으로 0 내지 3의 정수이며;
- [109] s는 0 내지 2의 정수이며;
- [110]  $R_7$  및  $R_8$ 은 각각 독립적으로 중수소, 할로젠, 시아노기, 니트로기,  $C_1$ ~ $C_{40}$ 의 알킬기,  $C_2$ ~ $C_{40}$ 의 알케닐기,  $C_2$ ~ $C_{40}$ 의 알키닐기,  $C_6$ ~ $C_{60}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기,  $C_6$ ~ $C_{60}$ 의 아릴옥시기,  $C_1$ ~ $C_{40}$ 의 알킬옥시기,  $C_3$ ~ $C_{40}$ 의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기,  $C_6$ ~ $C_{60}$ 의 아릴아민기,  $C_1$ ~ $C_{40}$ 의 알킬실릴기,  $C_1$ ~ $C_{40}$ 의 알킬보론기,  $C_6$ ~ $C_{60}$ 의 아릴보론기,  $C_6$ ~ $C_{60}$ 의 아릴포스파닐기,  $C_6$ ~ $C_{60}$ 의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및  $C_6$ ~ $C_{60}$ 의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택되거나, 또는 인접하는 기(예컨대,  $L_2$ , 인접하는 다른  $R_7$  또는  $R_8$  등)와 결합하여 축합 고리를 형성할 수 있고, 상기  $R_7$  및  $R_8$  각각이 복수 개인 경우 이들은 서로 동일하거나 상이하며;
- [111] 상기  $R_7$  및  $R_8$ 의 알킬기, 알케닐기, 알키닐기, 아릴기, 헤테로아릴기, 아릴옥시기, 알킬옥시기, 시클로알킬기, 헤테로시클로알킬기, 아릴아민기, 알킬실릴기, 알킬보론기, 아릴보론기, 아릴포스파닐기, 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 아릴실릴기는 각각 독립적으로 중수소, 할로젠, 시아노기, 니트로기,  $C_1$ ~ $C_{40}$ 의 알킬기,  $C_2$ ~ $C_{40}$ 의 알케닐기,  $C_2$ ~ $C_{40}$ 의 알키닐기,  $C_6$ ~ $C_{60}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기,  $C_6$ ~ $C_{60}$ 의 아릴옥시기,  $C_1$ ~ $C_{40}$ 의 알킬옥시기,  $C_6$ ~ $C_{60}$ 의 아릴아민기,  $C_3$ ~ $C_{40}$ 의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기,  $C_1$ ~ $C_{40}$ 의 알킬실릴기,  $C_1$ ~ $C_{40}$ 의 알킬보론기,  $C_6$ ~ $C_{60}$ 의 아릴보론기,  $C_6$ ~ $C_{60}$ 의 아릴포스파닐기,  $C_6$ ~ $C_{60}$ 의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및  $C_6$ ~ $C_{60}$ 의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상의 치환기로 치환되거나 비치환되고, 복수 개의 치환기로 치환되는 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이할 수 있다.
- [112] 본 발명의 바람직한 한 구현 예에 따르면, 상기  $L_1$  내지  $L_3$ 는 각각 독립적으로 단일결합 또는  $C_6$ ~ $C_{18}$ 의 아릴렌기일 수 있다.
- [113] 본 발명의 바람직한 한 구현 예에 따르면, 상기  $L_1$  내지  $L_3$ 는 각각 독립적으로 단일결합, 페닐렌기, 비페닐렌기, 나프탈레닐기 및 안트라세닐기로 이루어진 군에서 선택될 수 있다.
- [114] 본 발명의 바람직한 한 구현 예에 따르면, 상기  $R_3$ 는  $C_1$ ~ $C_{40}$ 의 알킬기,  $C_2$ ~ $C_{40}$ 의 알케닐기,  $C_2$ ~ $C_{40}$ 의 알키닐기,  $C_6$ ~ $C_{60}$ 의 아릴기 또는 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기일 수 있다.
- [115] 본 발명의 바람직한 한 구현 예에 따르면, 상기  $R_3$ 는 메틸, 프로필, 부틸, 페닐기, 비페닐기, 나프탈레닐기, 안트라세닐기, 페난트레닐기, 피레닐기, 트리페닐레닐기, 플루오레닐기, 스파이로비플루오레닐기 및 벤조플루오레닐기로 이루어진 군에서 선택될 수 있다.

[116] 본 발명의 화학식 1로 표시되는 화합물은 하기 화합물로 나타낼 수 있으나 이에 한정되는 것은 아니다:

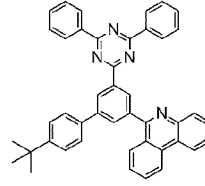
[117]



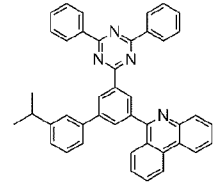
1



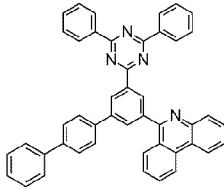
2



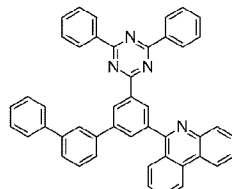
3



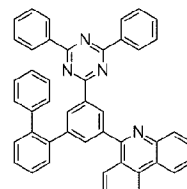
4



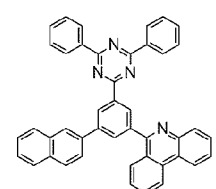
5



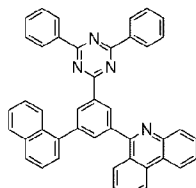
6



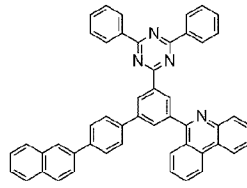
7



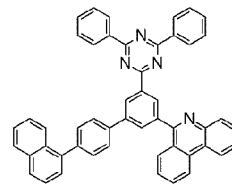
8



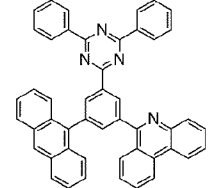
9



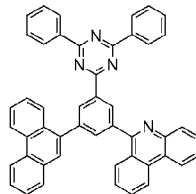
10



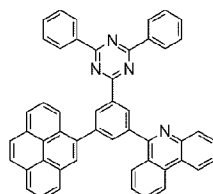
11



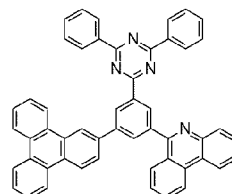
12



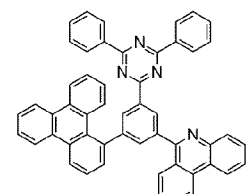
13



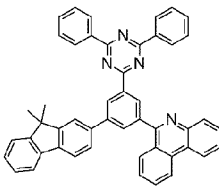
14



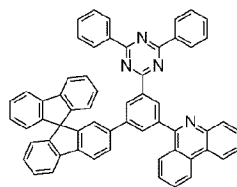
15



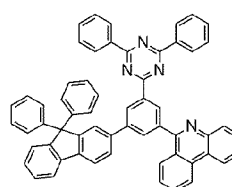
16



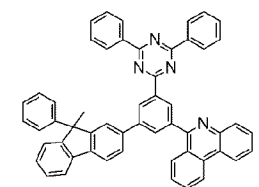
17



18



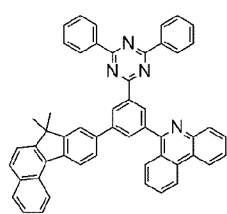
19



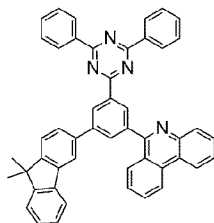
20



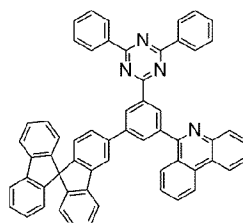
[118]



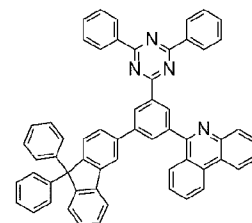
21



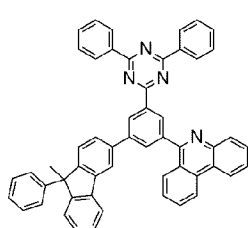
22



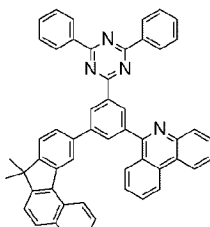
23



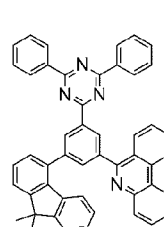
24



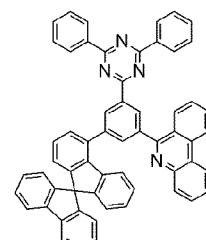
25



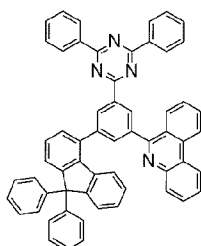
26



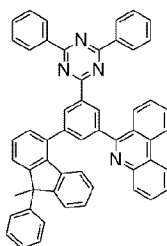
27



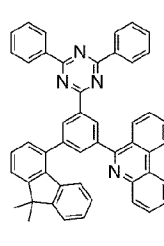
28



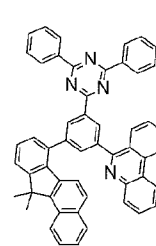
29



30

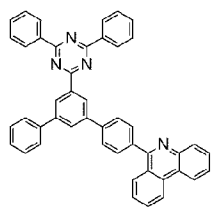


31

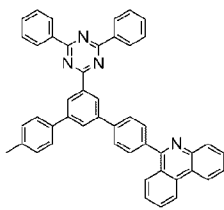


32

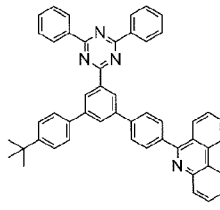
[119]



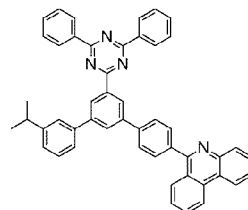
33



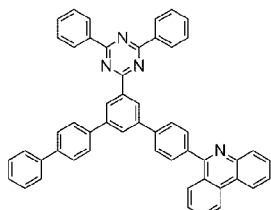
34



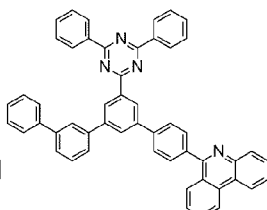
35



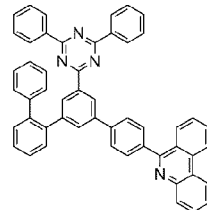
36



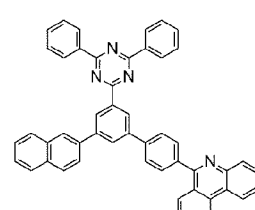
37



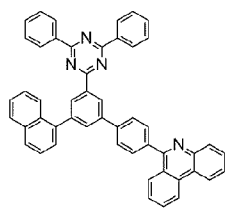
38



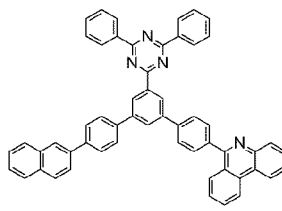
39



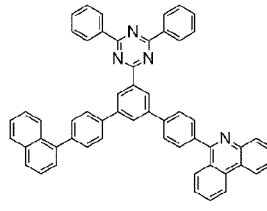
40



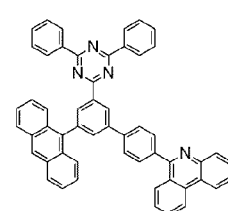
41



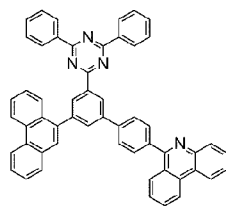
42



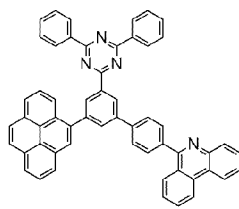
43



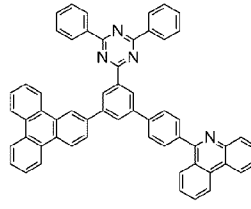
44



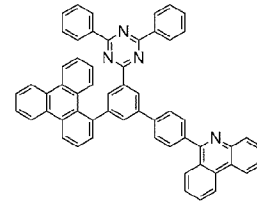
45



46

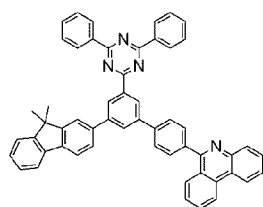


47

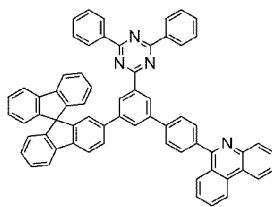


48

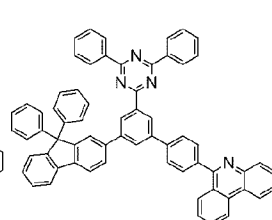
[120]



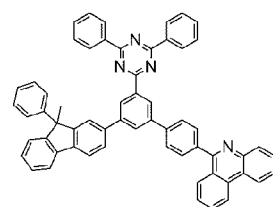
49



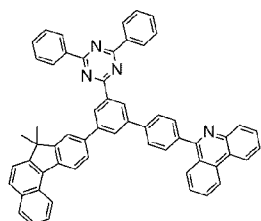
50



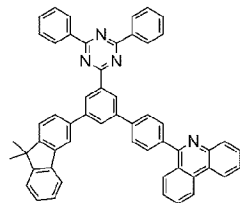
51



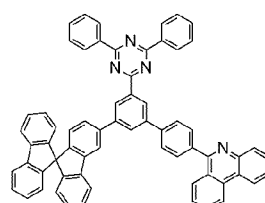
52



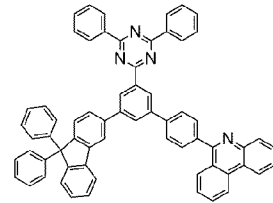
53



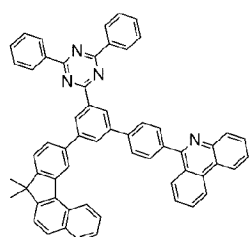
54



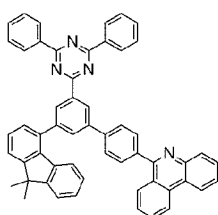
55



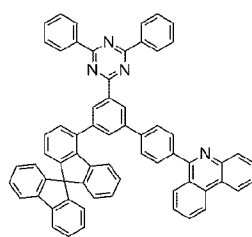
56



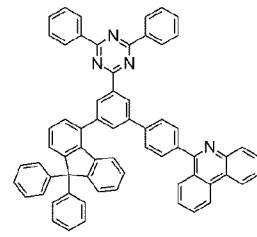
57



58

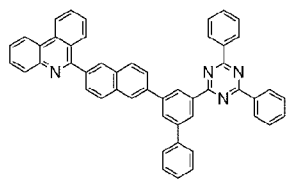


59

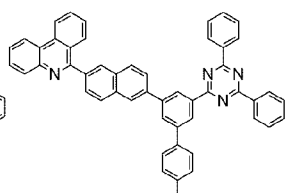


60

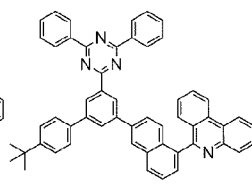
[121]



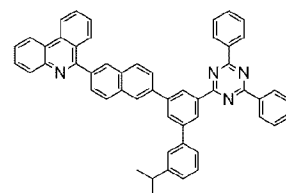
61



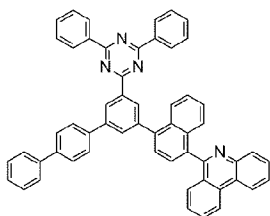
62



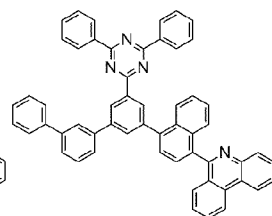
63



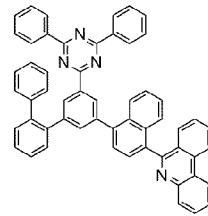
64



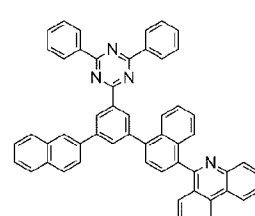
65



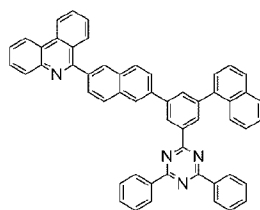
66



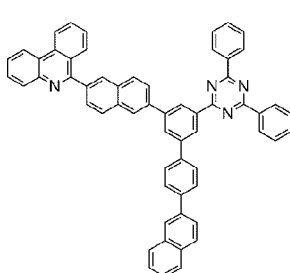
67



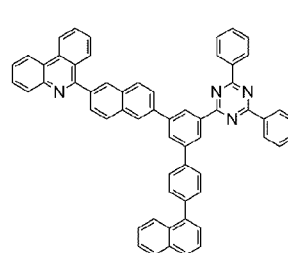
68



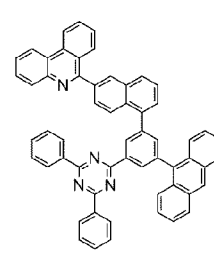
69



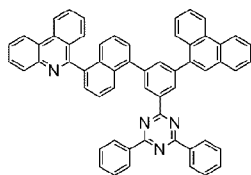
70



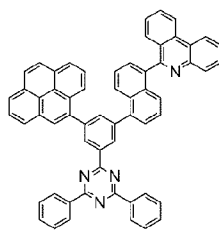
71



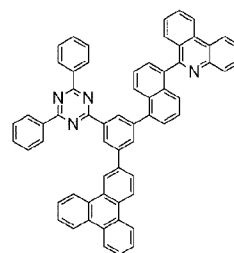
72



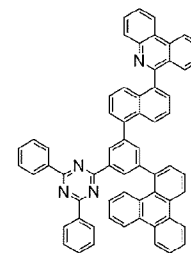
73



74

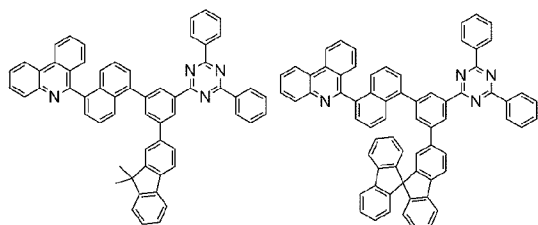


75

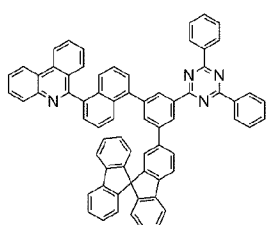


76

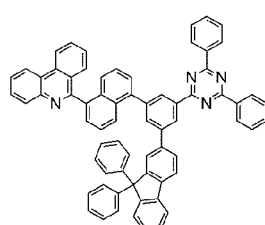
[122]



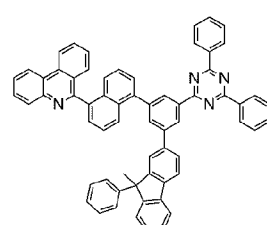
77



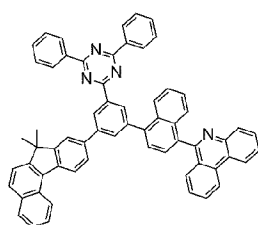
78



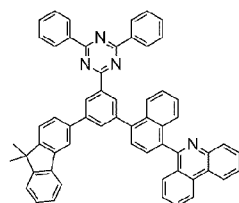
79



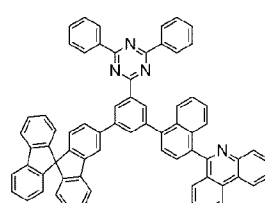
80



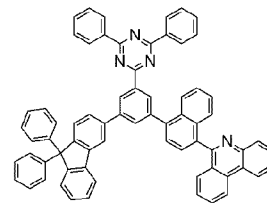
81



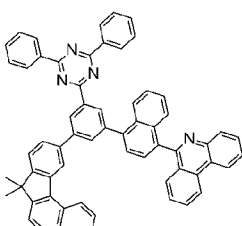
82



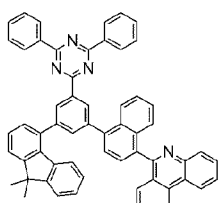
83



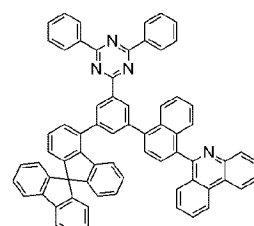
84



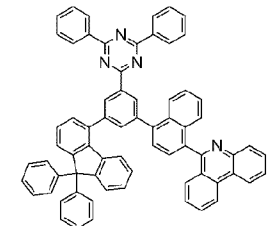
85



86

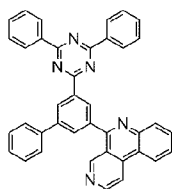


87

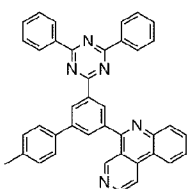


88

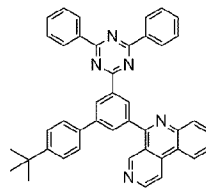
[123]



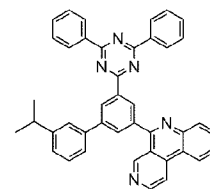
89



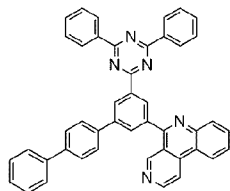
90



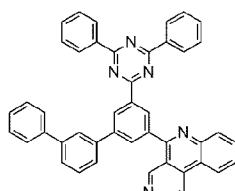
91



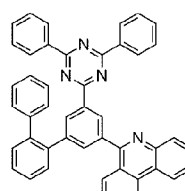
92



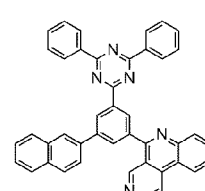
93



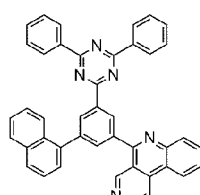
94



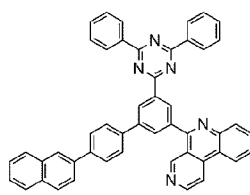
95



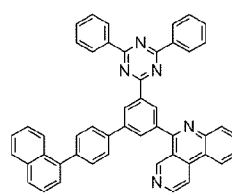
96



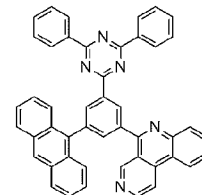
97



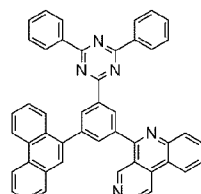
98



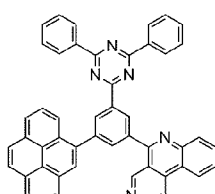
99



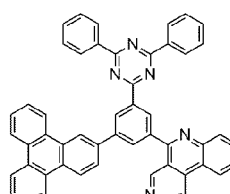
100



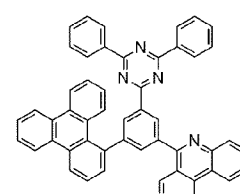
101



102

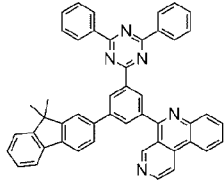


103

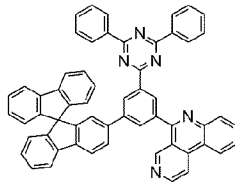


104

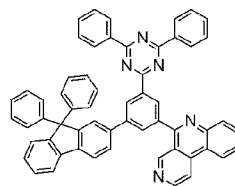
[124]



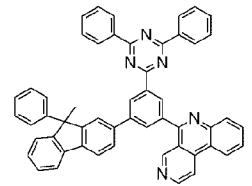
105



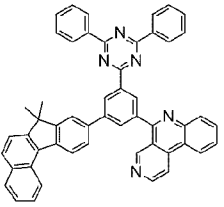
106



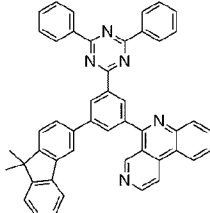
107



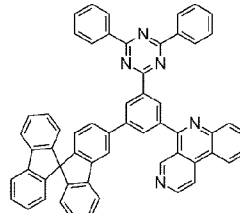
108



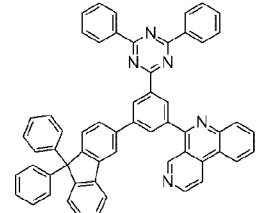
109



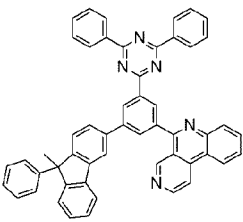
110



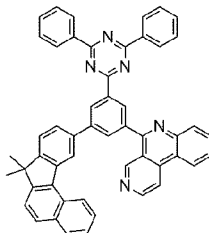
111



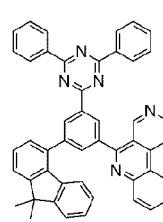
112



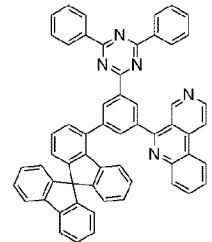
113



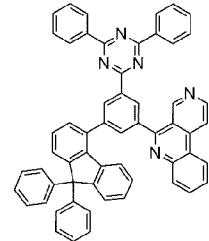
114



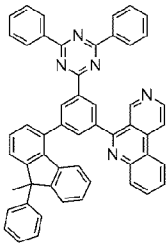
115



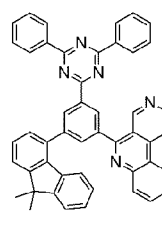
116



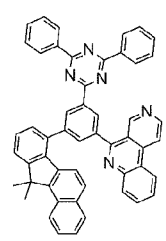
117



118

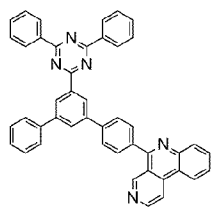


119

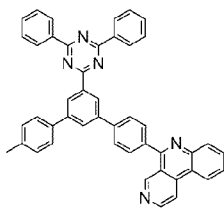


120

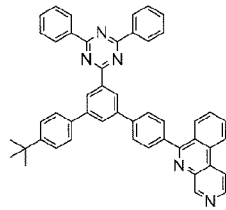
[125]



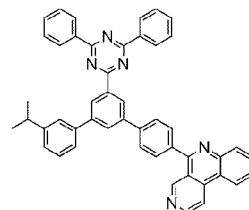
121



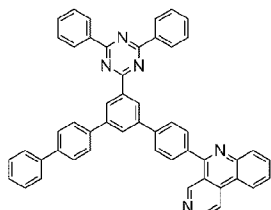
122



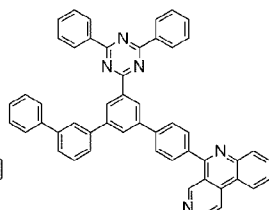
123



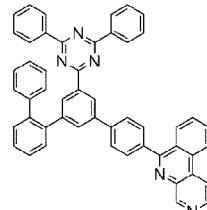
124



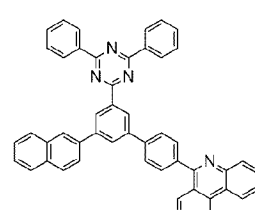
125



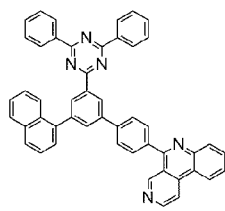
126



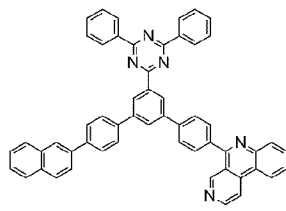
127



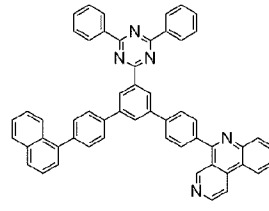
128



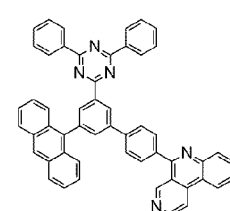
129



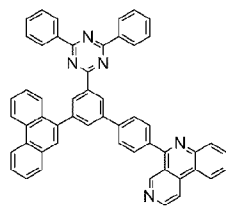
130



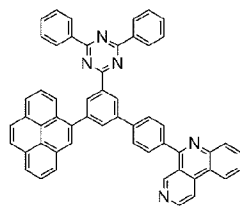
131



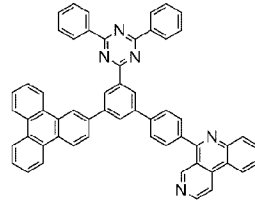
132



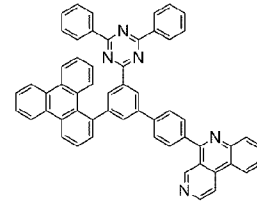
133



134



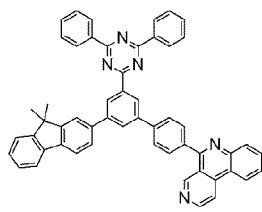
135



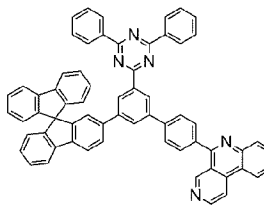
136



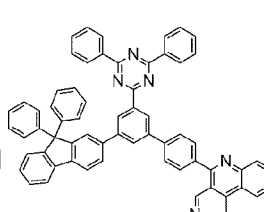
[126]



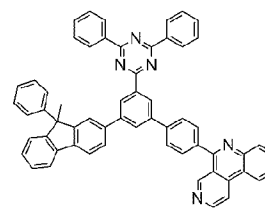
137



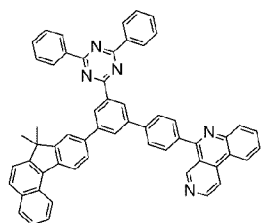
138



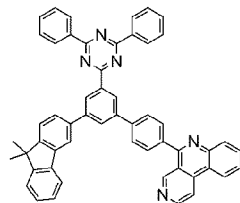
139



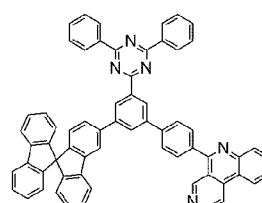
140



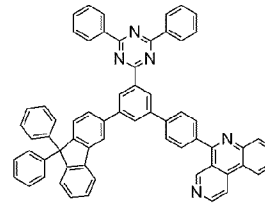
141



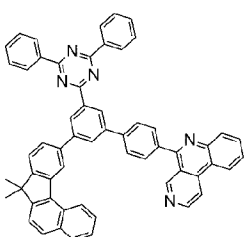
142



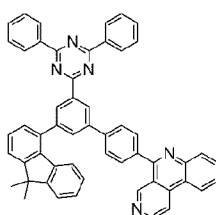
143



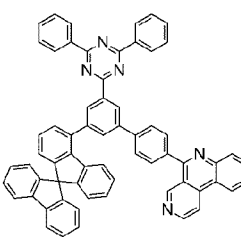
144



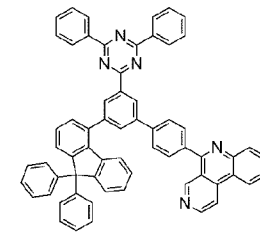
145



146

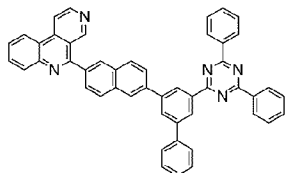


147

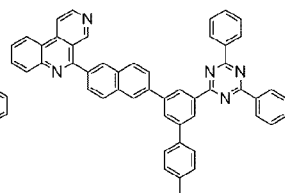


148

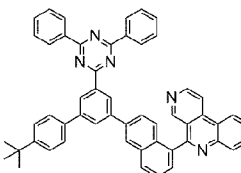
[127]



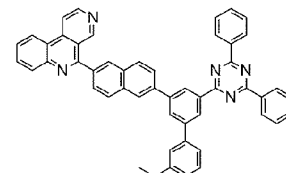
149



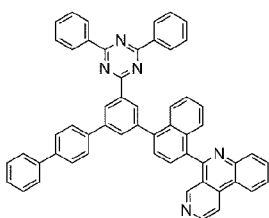
150



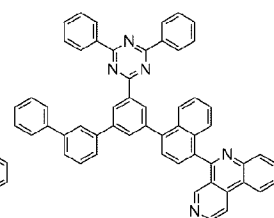
151



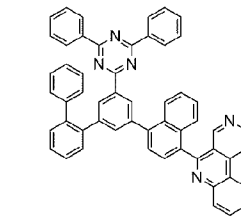
152



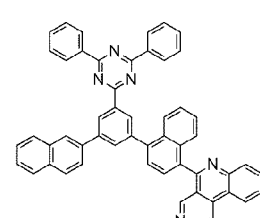
153



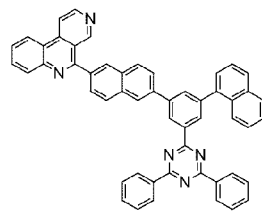
154



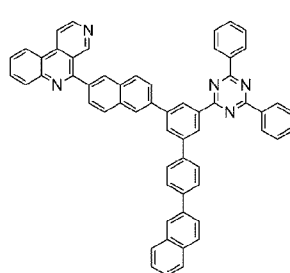
155



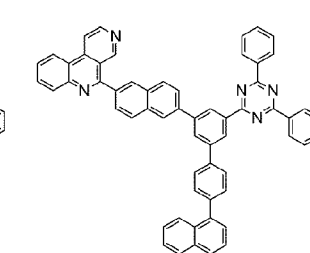
156



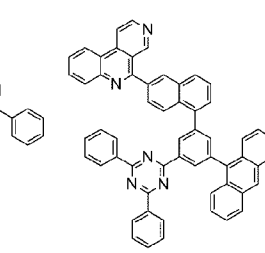
157



158

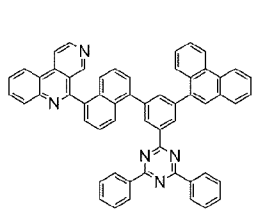


159

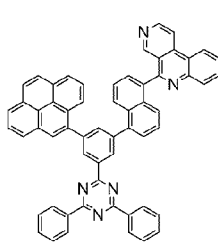


160

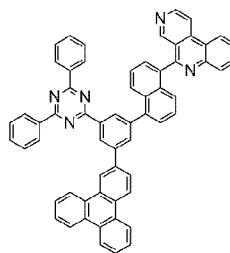
[128]



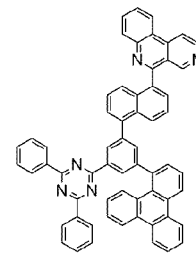
161



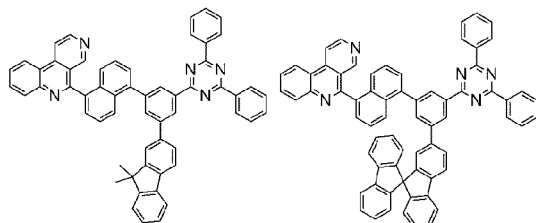
162



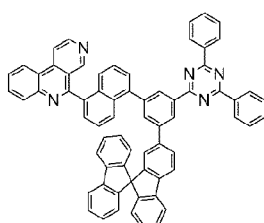
163



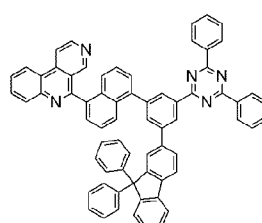
164



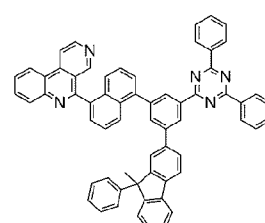
165



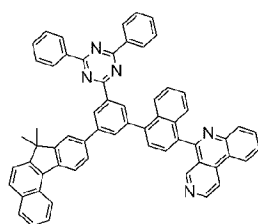
166



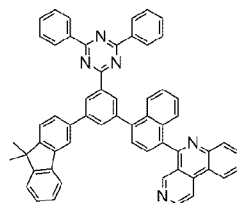
167



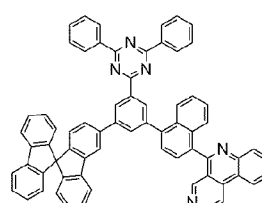
168



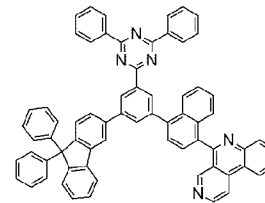
169



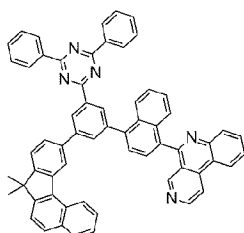
170



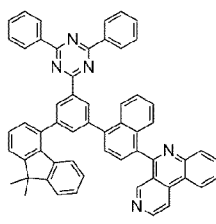
171



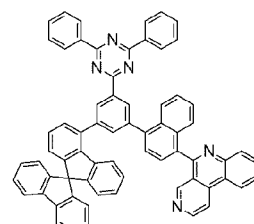
172



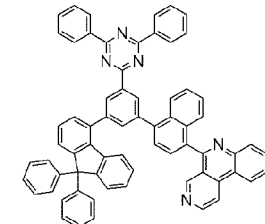
173



174

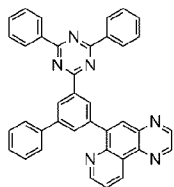


175

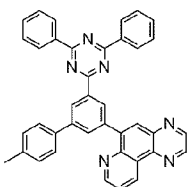


176

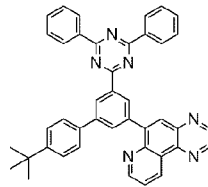
[129]



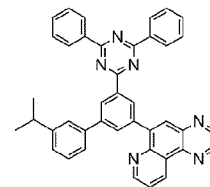
177



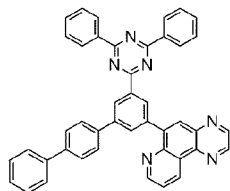
178



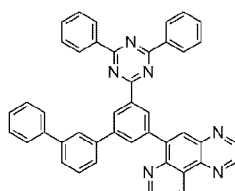
179



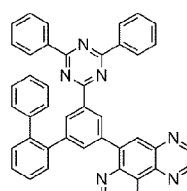
180



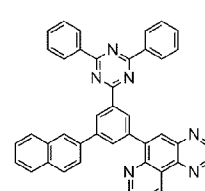
181



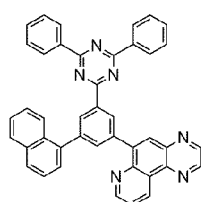
182



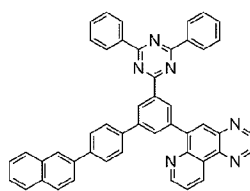
183



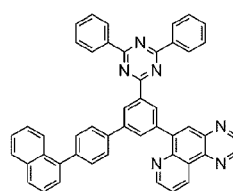
184



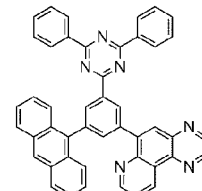
185



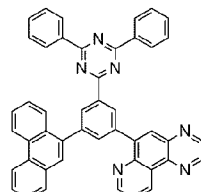
186



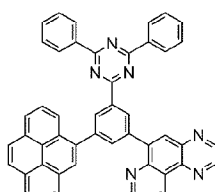
187



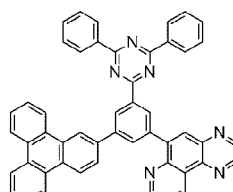
188



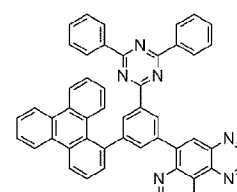
189



190

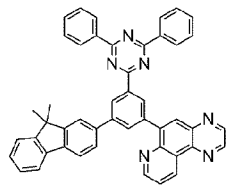


191

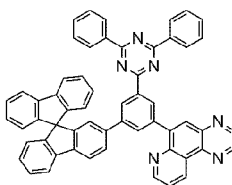


192

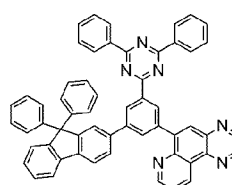
[130]



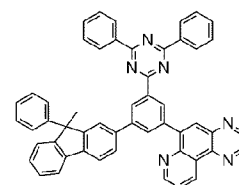
193



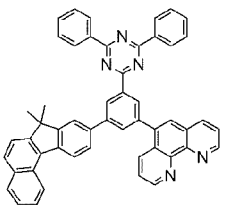
194



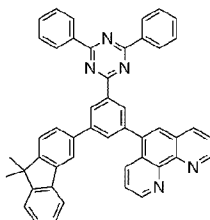
195



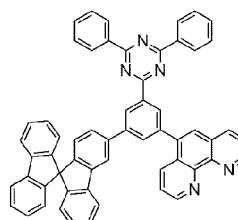
196



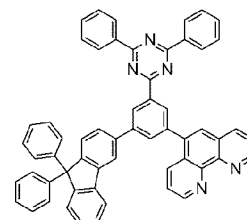
197



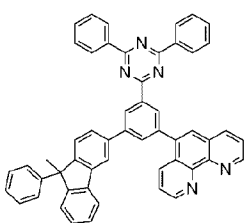
198



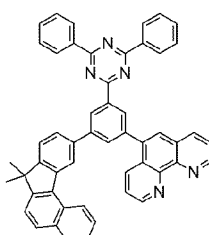
199



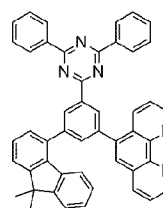
200



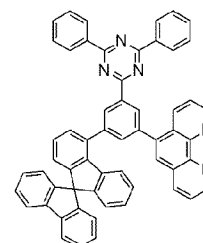
201



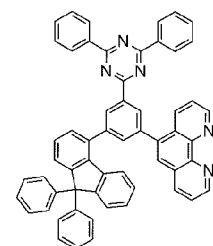
202



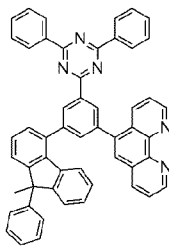
203



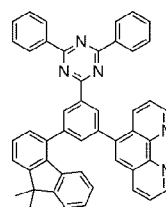
204



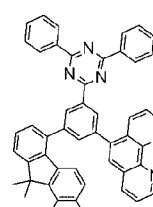
205



206

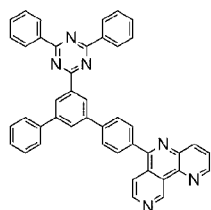


207

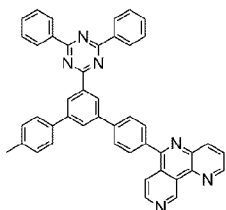


208

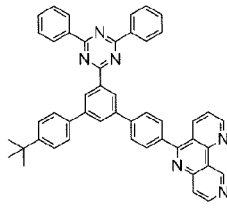
[131]



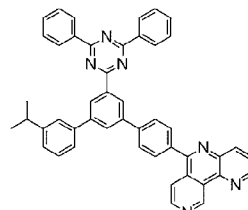
209



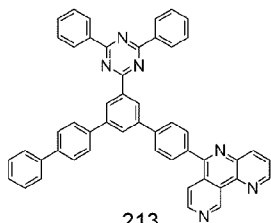
210



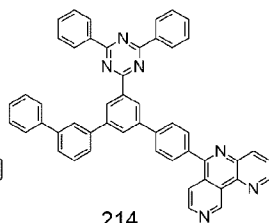
211



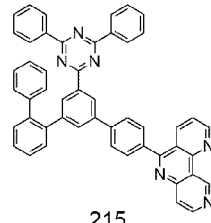
212



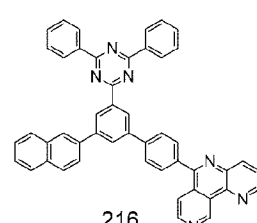
213



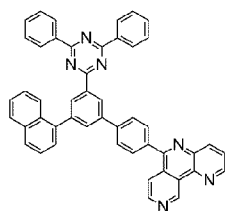
214



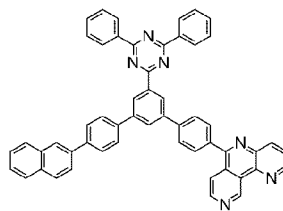
215



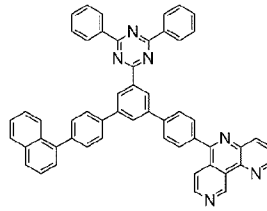
216



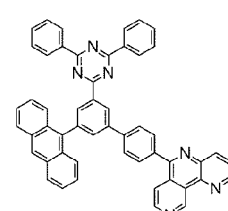
217



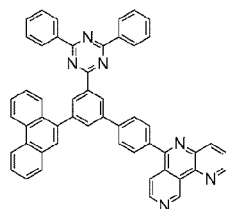
218



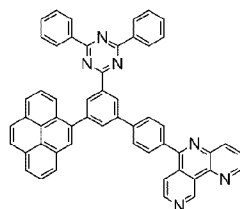
219



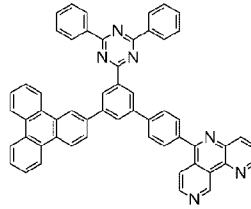
220



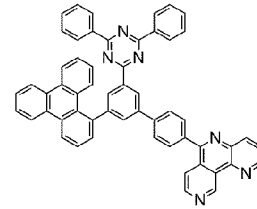
221



222

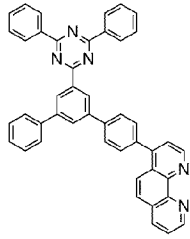


223

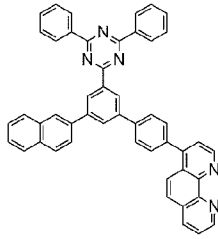


224

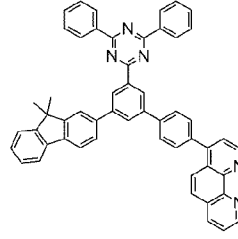
[132]



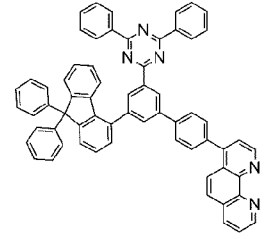
225



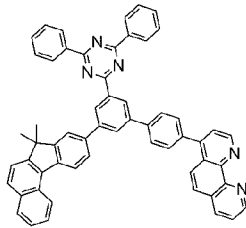
226



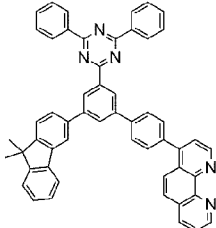
227



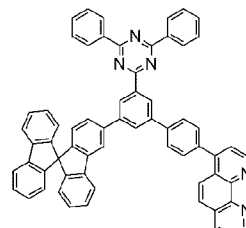
228



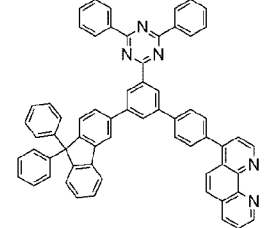
229



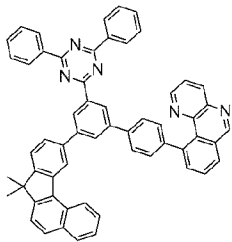
230



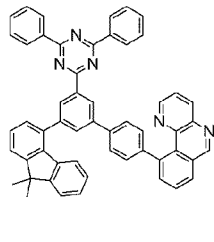
231



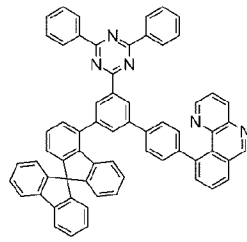
232



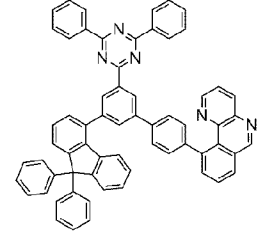
233



234

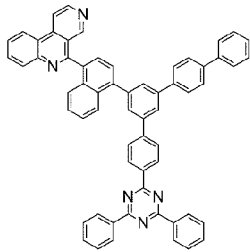


235

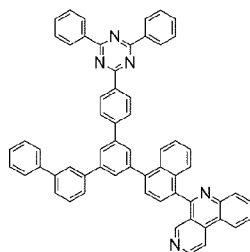


236

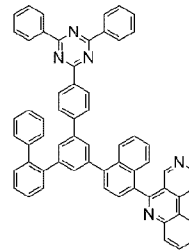
[133]



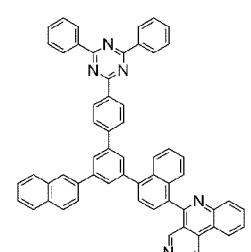
237



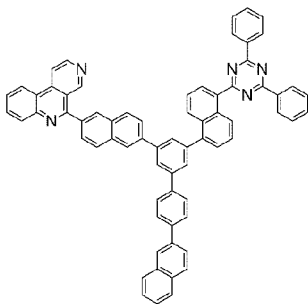
238



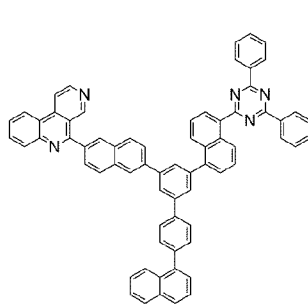
239



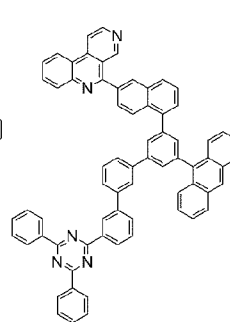
240



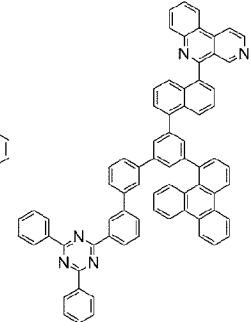
241



242



243



244

[134]

본 발명에서 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 일반적인 합성방법에 따라 합성될 수 있다(Chem. Rev., 60:313 (1960); J. Chem. SOC. 4482 (1955); Chem. Rev.

95: 2457 (1995) 등 참조). 본 발명의 화합물에 대한 상세한 합성 과정은 후술하는 합성예에서 구체적으로 기술하도록 한다.

[135]

[136] **2. 유기 전계 발광 소자**

[137] 한편, 본 발명의 다른 측면은 상기한 본 발명에 따른 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하는 유기 전계 발광 소자(유기 EL 소자)에 관한 것이다.

[138] 구체적으로, 본 발명은 양극(anode), 음극(cathode), 및 상기 양극과 음극 사이에 개재(介在)된 1층 이상의 유기물층을 포함하는 유기 전계 발광 소자로서, 상기 1층 이상의 유기물층 중 적어도 하나는 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함한다. 이때, 상기 화합물은 단독 또는 2 이상 혼합되어 사용될 수 있다.

[139] 본 발명에 따른 유기 전계 발광 소자의 구조는 특별히 한정되지 않으며, 예컨대 기판, 양극, 정공 주입층, 정공 수송층, 발광층, 전자 수송층 및 음극이 순차적으로 적층된 구조일 수 있다. 이때, 상기 발광층과 전자 수송층 사이에는 전자 수송 보조층이 추가로 적층될 수 있고, 상기 전자 수송층 위에는 전자 주입층이 추가로 적층될 수 있다. 본 발명에서 상기 정공 주입층, 정공 수송층, 발광층, 발광 보조층, 수명 개선층, 전자 수송층, 전자 수송 보조층 및 전자 주입층 중 하나 이상은 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함할 수 있다.

[140] 본 발명의 화학식 1로 표시되는 화합물은 트리아진을 축으로 Y자 형태의 기본 골격에 아릴기 및 헤테로아릴기와 같이 전자 흡수성이 큰 전자 끌개기(EWG)가 결합되어 분자 전체가 전자 이동도를 높일 수 있다. 즉, 본 발명의 화학식 1로 표시되는 화합물은 전자 이동도가 빨라 전자 수송층의 성능을 높여 이를 전자 수송층 또는 전자 수송 보조층의 재료로 사용하는 경우 유기 전계 발광 소자의 효율을 높일 수 있다. 또한, 발광층으로 엑시톤의 수 증가에 기여하여 발광 효율이 개선될 수 있으며, 소자의 내구성 및 안정성이 향상되어 소자의 수명 또한 효율적으로 증가될 수 있다.

[141] 또, 본 발명의 유기 전계 발광 소자의 구조는 양극, 1층 이상의 유기물층 및 음극이 순차적으로 적층될 뿐만 아니라, 전극과 유기물층 계면에 절연층 또는 접착층이 삽입된 구조일 수 있다.

[142] 본 발명의 유기 전계 발광 소자는 상기 유기물층 중 적어도 하나 이상(예컨대, 전자 수송층 또는 전자 수송 보조층)이 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하도록 형성하는 것을 제외하고는, 당 기술 분야에 알려져 있는 재료 및 방법을 이용하여 다른 유기물층 및 전극을 형성하여 제조될 수 있다.

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

[144] 본 발명에서 사용 가능한 기판으로는 특별히 한정되지 않으며, 실리콘 웨이퍼, 석영, 유리판, 금속판, 플라스틱 필름 및 시트 등이 사용될 수 있다.

[145] 또, 양극 물질로는 바나듐, 크롬, 구리, 아연, 금과 같은 금속 또는 이들의 합금;

아연산화물, 인듐산화물, 인듐 주석 산화물(ITO), 인듐 아연 산화물(IZO)과 같은 금속 산화물; ZnO:Al 또는 SnO<sub>2</sub>:Sb와 같은 금속과 산화물의 조합; 폴리티오펜, 폴리(3-메틸티오펜), 폴리[3,4-(에틸렌-1,2-디옥시)티오펜](PEDT), 폴리피롤 또는 폴리아닐린과 같은 전도성 고분자; 및 카본블랙 등이 있으나, 이에 한정되지는 않는다.

[146] 또, 음극 물질로는 마그네슘, 칼슘, 나트륨, 칼륨, 타이타늄, 인듐, 이트륨, 리튬, 가돌리늄, 알루미늄, 은, 주석, 또는 납과 같은 금속 또는 이들의 합금; 및 LiF/Al 또는 LiO<sub>2</sub>/Al과 같은 다층 구조 물질 등이 있으나, 이에 한정되지는 않는다.

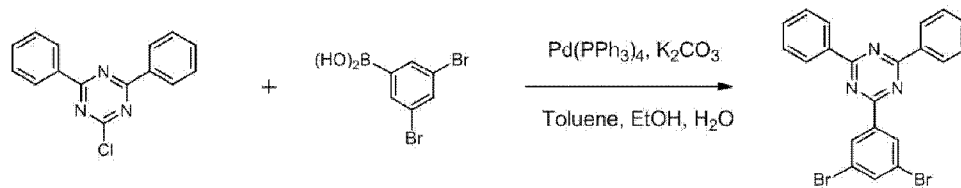
[147]

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

[149]

[150] [준비에 1] 2-(3,5-디브로모페닐)-4,6-디페닐-1,3,5-트리아진의 합성

[151]



[152] 2-클로로-4,6-디페닐-1,3,5-트리아진 (100 g, 373.5 mmol)와 (3,5-디브로모페닐)보로닉산 (104.5 g, 373.5 mmol) 및 Pd(PPh<sub>3</sub>)<sub>4</sub> (21.6 g, 18.6 mmol), K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> (103.3 g, 747.0 mmol)을 톨루엔 1000ml, EtOH 200ml, H<sub>2</sub>O 200ml에 넣고 2시간 동안 가열 환류하였다. 반응 종결 후 메틸렌클로라이드로 추출하고 MgSO<sub>4</sub>를 넣고 필터하였다. 필터된 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피를 이용하여 목적 화합물인 2-(3,5-디브로모페닐)-4,6-디페닐-1,3,5-트리아진 (104.7 g, 수율 60%)을 얻었다.

[153] <sup>1</sup>H-NMR: δ 7.40-7.41 (m, 4H), 7.51 (m, 4H), 7.96 (s, 1H), 8.27-8.28 (m, 4H)

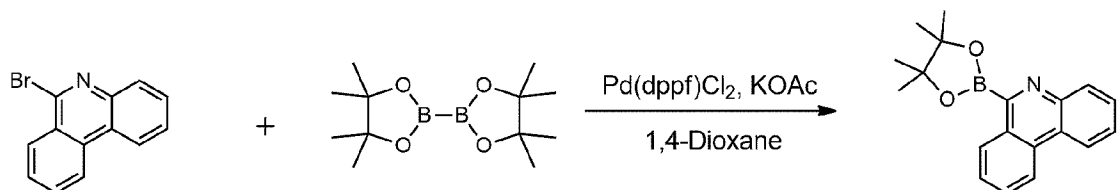
[154] [LCMS] : 467

[155]

[156] [준비에 2] 6-(3-브로모-5-(4,6-디페닐-1,3,5-트리아진-2-일)페닐)페난트리딘의 합성

[157] <단계 1> 6-(4,4,5,5-테트라메틸-1,3,2-디옥사보로란-2-일)페난트리딘의 합성

[158]



[159] 6-브로모페난트리딘 (15.4 g, 59.6 mmol)와



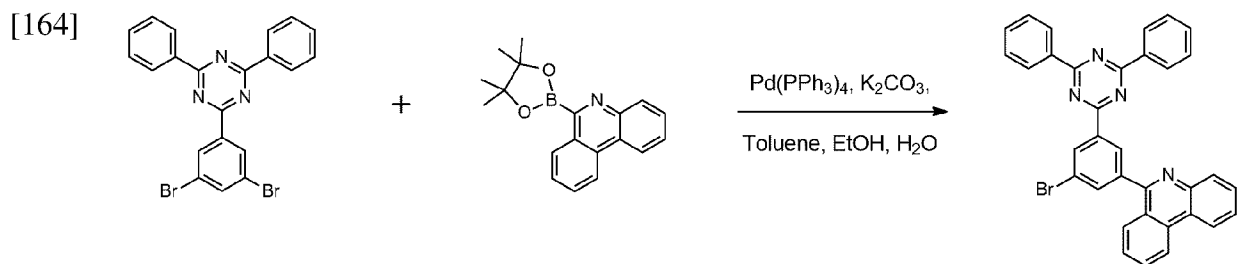
4,4,4',4',5,5,5',5'-옥타메틸-2,2'-비(1,3,2-디옥사보로란) (18.0 g, 70.8 mmol) 및 Pd(dppf)Cl<sub>2</sub> (2.4 g, 3.0 mmol), KOAc (11.6 g, 118.8 mmol)을 1,4-디옥산 300ml에 넣고 12시간 동안 가열환류하였다. 반응 종결 후 메틸렌클로라이드로 추출하고 MgSO<sub>4</sub>를 넣고 필터하였다. 필터된 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피를 이용하여 목적 화합물인 6-(4,4,5,5-테트라메틸-1,3,2-디옥사보로란-2-일)페난트리딘 (5.4 g, 수율 30 %)을 얻었다.

[160] <sup>1</sup>H-NMR: δ 1.24 (s, 12H), 7.41-7.42 (m, 1H), 7.48-7.49(m, 1H), 7.59-7.60 (m, 1H), 7.76-7.78 (m, 2H), 7.92 (d, 1H), 7.98 (d, 1H), 8.06(d, 1H)

[161] [LCMS] : 305

[162]

[163] <단계 2> 6-(3-브로모-5-(4,6-디페닐-1,3,5-트리아진-2-일)페닐)페난트리딘의 합성



[165] 준비에 1에서 합성된 2-(3,5-디브로모페닐)-4,6-디페닐-1,3,5-트리아진 (7.6 g, 16.3 mmol)와 상기에서 합성된 6-(4,4,5,5-테트라메틸-1,3,2-디옥사보로란-2-일)페난트리딘 (5.0 g, 16.3 mmol) 및 Pd(PPh<sub>3</sub>)<sub>4</sub> (0.9 g, 0.8 mmol), K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> (4.5 g, 32.6 mmol)을 톨루엔 200ml, EtOH 40ml, H<sub>2</sub>O 40ml에 넣고 12시간 동안 가열 환류하였다. 반응 종결 후 메틸렌클로라이드로 추출하고 MgSO<sub>4</sub>를 넣고 필터하였다. 필터된 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피를 이용하여 목적 화합물인 6-(3-브로모-5-(4,6-디페닐-1,3,5-트리아진-2-일)페닐)페난트리딘 (6.4 g, 수율 70 %)을 얻었다.

[166] <sup>1</sup>H-NMR: δ 7.41-7.42 (m, 3H), 7.48-7.49 (m, 2H), 7.50-7.51 (m, 4H), 7.59-7.60 (m, 1H), 7.76-7.78 (m, 2H), 7.92-7.93 (m, 2H), 7.98 (d, 1H), 8.06 (s, 1H), 8.15 (s, 1H), 8.27-8.28 (m, 4H)

[167] [LCMS] : 565

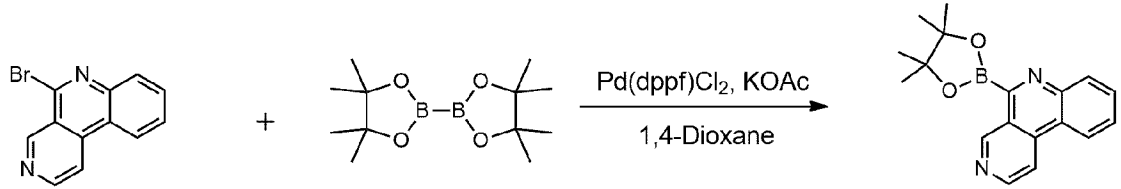
[168]

[169] [준비에 3] 5-(3-브로모-5-(4,6-디페닐-1,3,5-트리아진-2-일)페닐)벤조[c][2,7]나프티리딘의 합성

[170] <단계 1>

5-(4,4,5,5-테트라메틸-1,3,2-디옥사보로란-2-일)벤조[c][2,7]나프티리딘의 합성

[171]



[172] 5-브로모벤조[c][2,7]나프티리딘 (15.4 g, 59.6 mmol)와 4,4,4',4',5,5,5',5'-옥타메틸-2,2'-비(1,3,2-디옥사보로란) (18.0 g, 70.8 mmol) 및 Pd(dppf)Cl<sub>2</sub> (2.4 g, 3.0 mmol), KOAc (11.6 g, 118.8 mmol)을 1,4-디옥산 300ml에 넣고 12시간 동안 가열 환류하였다. 반응 종결 후 메틸렌클로라이드로 추출하고 MgSO<sub>4</sub>를 넣고 필터하였다. 필터된 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피를 이용하여 목적 화합물인 5-(4,4,5,5-테트라메틸-1,3,2-디옥사보로란-2-일)벤조[c][2,7]나프티리딘 (5.6 g, 수율 35%)을 얻었다.

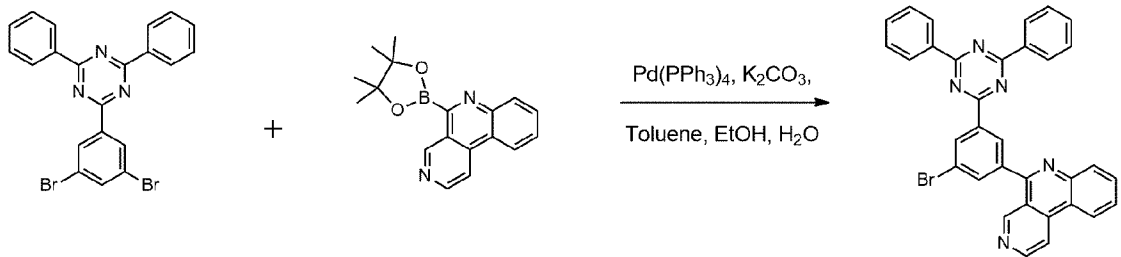
[173] <sup>1</sup>H-NMR: δ 1.24 (s, 12H), 7.38 (d, 1H), 7.60 (t, 1H), 7.78 (t, 1H), 7.96 (d, 1H), 8.06(d, 1H), 8.43(d, 1H), 9.51 (s, 1H)

[174] [LCMS] : 306

[175]

[176] <단계 2> 5-(3-브로모-5-(4,6-디페닐-1,3,5-트리아진-2-일)페닐)벤조[c][2,7]나프티리딘의 합성

[177]



[178] 준비예 1에서 합성된 2-(3,5-디브로모페닐)-4,6-디페닐-1,3,5-트리아진 (7.6 g, 16.3 mmol)와 상기에서 합성된 5-(4,4,5,5-테트라메틸-1,3,2-디옥사보로란-2-일)벤조[c][2,7]나프티리딘 (5.0 g, 16.3 mmol) 및 Pd(PPh<sub>3</sub>)<sub>4</sub> (0.9 g, 0.8 mmol), K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> (4.5 g, 32.6 mmol)을 톨루엔 200ml, EtOH 40ml, H<sub>2</sub>O 40ml에 넣고 12시간 동안 가열 환류하였다. 반응 종결 후 메틸렌클로라이드로 추출하고 MgSO<sub>4</sub>를 넣고 필터하였다. 필터된 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피를 이용하여 목적 화합물인 5-(3-브로모-5-(4,6-디페닐-1,3,5-트리아진-2-일)페닐)벤조[c][2,7]나프티리딘 (6.0 g, 수율 65%)을 얻었다.

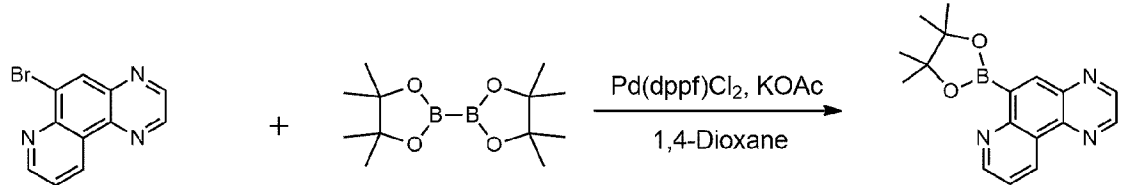
[179] <sup>1</sup>H-NMR: δ 7.38 (d, 1H), 7.41-7.42 (m, 2H), 7.48 (s, 1H), 7.50-7.51 (m, 4H), 7.60-7.61 (m, 1H), 7.78 (t, 1H), 7.93 (s, 1H), 7.98 (d, 1H), 8.08 (d, 1H), 8.15 (s, 1H), 8.27-8.28 (m, 4H), 8.43 (d, 1H), 9.34 (s, 1H)

[180] [LCMS] : 566

[181]

[182] [준비에 4] 6-(3-브로모-5-(4,6-디페닐-1,3,5-트리아진-2-일)페닐)피리도[3,2-f]퀴녹살린의 합성[183] <단계 1>6-(4,4,5,5-테트라메틸-1,3,2-디옥사보로란-2-일)피리도[3,2-f]퀴녹살린의 합성

[184]



[185]

6-브로모피리도[3,2-f]퀴녹살린 (15.4 g, 59.6 mmol)와 4,4,4',4',5,5,5',5'-옥타메틸-2,2'-비(1,3,2-디옥사보로란) (18.0 g, 70.8 mmol) 및 Pd(dppf)Cl<sub>2</sub> (2.4 g, 3.0 mmol), KOAc (11.6 g, 118.8 mmol)을 1,4-디옥산 300ml에 넣고 12시간 동안 가열 환류하였다. 반응 종결 후 메틸렌클로라이드로 추출하고 MgSO<sub>4</sub>를 넣고 필터하였다. 필터된 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피를 이용하여 목적 화합물인 6-(4,4,5,5-테트라메틸-1,3,2-디옥사보로란-2-일)피리도[3,2-f]퀴녹살린 (8.8 g, 수율 49 %)을 얻었다.

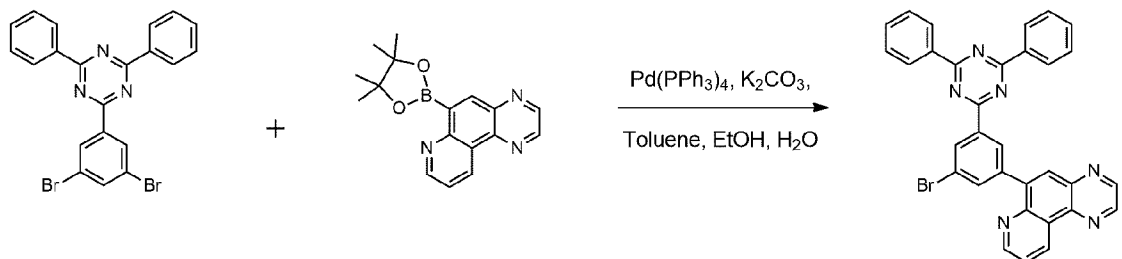
[186] <sup>1</sup>H-NMR: δ 1.24 (s, 12H), 7.58 (t, 1H), 8.06(d, 1H), 8.38(d, 1H), 8.70 (s, 2H), 8.83(d, 1H)

[187] [LCMS] : 307

[188]

[189] <단계 2> 6-(3-브로모-5-(4,6-디페닐-1,3,5-트리아진-2-일)페닐)피리도[3,2-f]퀴녹살린의 합성

[190]



[191]

준비에 1에서 합성된 2-(3,5-디브로모페닐)-4,6-디페닐-1,3,5-트리아진 (7.6 g, 16.3 mmol)와 상기에서 합성된 6-(4,4,5,5-테트라메틸-1,3,2-디옥사보로란-2-일)피리도[3,2-f]퀴녹살린 (5.0 g, 16.3 mmol) 및 Pd(PPh<sub>3</sub>)<sub>4</sub> (0.9 g, 0.8 mmol), K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> (4.5 g, 32.6 mmol)을 톨루엔 200ml, EtOH 40ml, H<sub>2</sub>O 40ml에 넣고 12시간 동안 가열 환류하였다. 반응 종결 후 메틸렌클로라이드로 추출하고 MgSO<sub>4</sub>를 넣고 필터하였다. 필터된 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피를 이용하여 목적 화합물인 6-(3-브로모-5-(4,6-디페닐-1,3,5-트리아진-2-일)페닐)피리도[3,2-f]퀴녹살린 (5.5

g, 수율 60%)을 얻었다.

[192]  $^1\text{H-NMR}$ :  $\delta$  7.41-7.42 (m, 4H), 7.50-7.51 (m, 4H), 7.58 (t, 1H), 7.64 (s, 1H), 8.28-8.29 (m, 5H), 8.38 (d, 1H), 8.74 (s, 2H), 8.83 (d, 1H)

[193] [LCMS] : 567

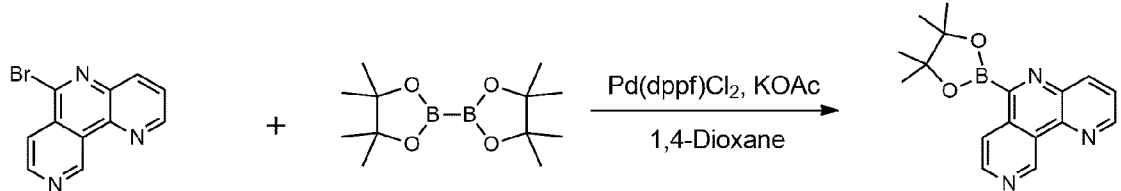
[194]

[195] [준비에 5] 6-(3-브로모-5-(4,6-디페닐-1,3,5-트리아진-2-일)페닐)피리도[4,3-c][1,5]나프티리딘의 합성

[196] <단계 1>

6-(4,4,5,5-테트라메틸-1,3,2-디옥사보로란-2-일)피리도[4,3-c][1,5]나프티리딘의 합성

[197]



[198] 6-브로모피리도[4,3-c][1,5]나프티리딘 (15.4 g, 59.6 mmol)와 4,4,4',4',5,5,5'-옥타메틸-2,2'-비(1,3,2-디옥사보로란) (18.0 g, 70.8 mmol) 및 Pd(dppf)Cl<sub>2</sub> (2.4 g, 3.0 mmol), KOAc (11.6 g, 118.8 mmol)을 1,4-디옥산 300ml에 넣고 12시간 동안 가열 환류하였다. 반응 종결 후 메틸렌클로라이드로 추출하고 MgSO<sub>4</sub>를 넣고 필터하였다. 필터된 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피를 이용하여 목적 화합물인 6-(4,4,5,5-테트라메틸-1,3,2-디옥사보로란-2-일)피리도[4,3-c][1,5]나프티리딘 (5.4 g, 수율 30%)을 얻었다.

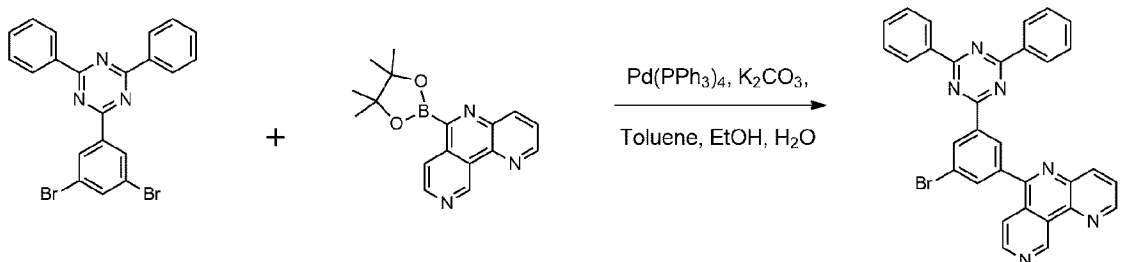
[199]  $^1\text{H-NMR}$ :  $\delta$  1.24 (s, 12H), 7.78 (d, 1H), 7.91 (t, 1H), 8.50(d, 1H), 8.75(d, 1H), 9.10 (d, 1H), 9.39 (s, 1H)

[200] [LCMS] : 307

[201]

[202] <단계 2> 6-(3-브로모-5-(4,6-디페닐-1,3,5-트리아진-2-일)페닐)피리도[4,3-c][1,5]나프티리딘의 합성

[203]



[204] 준비에 1에서 합성된 2-(3,5-디브로모페닐)-4,6-디페닐-1,3,5-트리아진 (7.6 g, 16.3 mmol)와 상기에서 합성된 6-(4,4,5,5-테트라메틸-1,3,2-디옥사보로란-2-일)피리도[4,3-c][1,5]나프티리딘 (5.0

g, 16.3 mmol) 및 Pd(PPh<sub>3</sub>)<sub>4</sub> (0.9 g, 0.8 mmol), K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> (4.5 g, 32.6 mmol)을 톨루엔 200ml, EtOH 40ml, H<sub>2</sub>O 40ml에 넣고 12시간 동안 가열 환류하였다. 반응 종결 후 메틸렌클로라이드로 추출하고 MgSO<sub>4</sub>를 넣고 필터하였다. 필터된 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피를 이용하여 목적 화합물인 6-(3-브로모-5-(4,6-디페닐-1,3,5-트리아진-2-일)페닐)피리도[4,3-c][1,5]나프티리딘 (5.5 g, 수율 60%)을 얻었다.

[205] <sup>1</sup>H-NMR: δ 7.41-7.42 (m, 2H), 7.48 (s, 1H), 7.50-7.51 (m, 4H), 7.78 (d, 1H), 7.91-7.93 (m, 2H), 8.15 (s, 1H), 8.27-8.28 (m, 4H), 8.50 (s, 1H), 8.75 (d, 1H), 9.10 (d, 1H), 9.39 (s, 1H)

[206] [LCMS] : 567

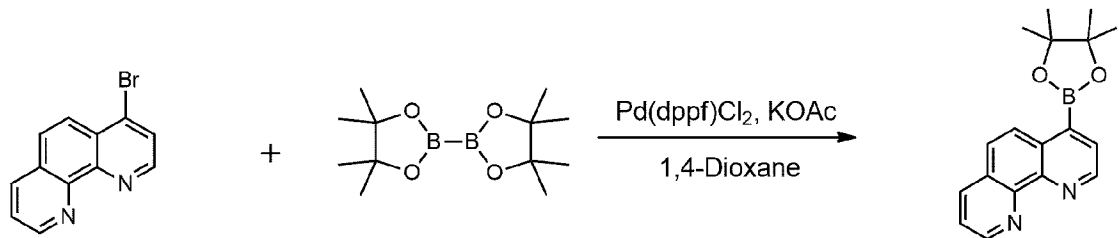
[207]

[208] [준비에 6] 4-(3-브로모

-5-(4,6-디페닐-1,3,5-트리아진-2-일)페닐)-1,10-페난트롤린의 합성

[209] <단계 1> 4-(4,4,5,5-테트라메틸-1,3,2-디옥사보로란-2-일)-1,10-페난트롤린의 합성

[210]



[211] 4-브로모-1,10-페난트롤린 (15.4 g, 59.6 mmol)와 4,4,4',4',5,5,5',5'-옥타메틸-2,2'-bi(1,3,2-디옥사보로란) (18.0 g, 70.8 mmol) 및 Pd(dppf)Cl<sub>2</sub> (2.4 g, 3.0 mmol), KOAc (11.6 g, 118.8 mmol)을 1,4-디옥산 300ml에 넣고 12시간 동안 가열 환류하였다. 반응 종결 후 메틸렌클로라이드로 추출하고 MgSO<sub>4</sub>를 넣고 필터하였다. 필터된 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피를 이용하여 목적 화합물인 4-(4,4,5,5-테트라메틸-1,3,2-디옥사보로란-2-일)-1,10-페난트롤린 (8.6 g, 수율 49%)을 얻었다.

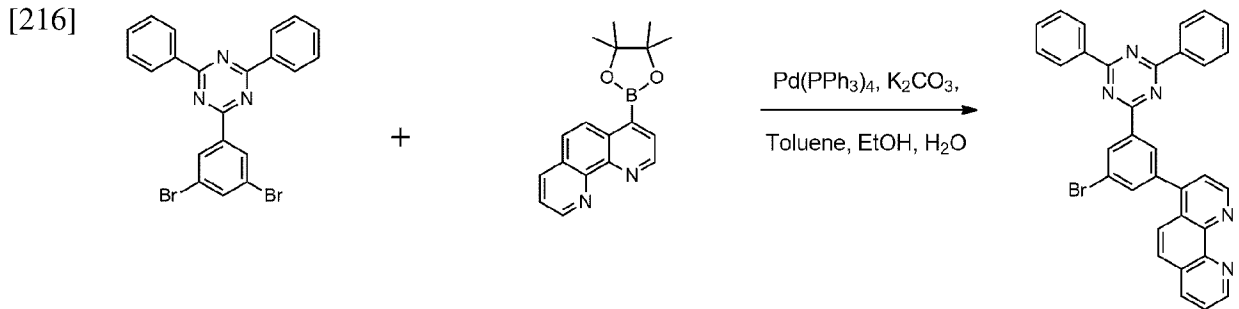
[212] <sup>1</sup>H-NMR: δ 1.24 (s, 12H), 7.48 (d, 1H), 7.58 (t, 1H), 7.81 (d, 1H), 8.06 (d, 1H), 8.38(d, 1H), 8.83(d, 2H)

[213] [LCMS] : 306

[214]

[215] <단계 2> 4-(3-브로모

-5-(4,6-디페닐-1,3,5-트리아진-2-일)페닐)-1,10-페난트롤린의 합성



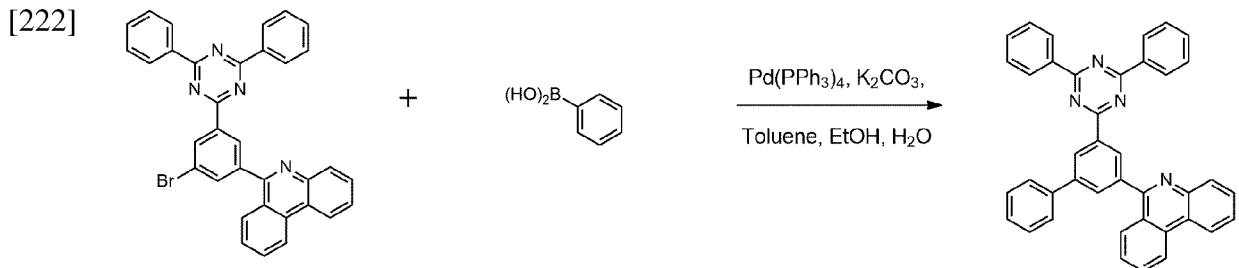
[217] 준비예 1에서 합성된 2-(3,5-디브로모페닐)-4,6-디페닐-1,3,5-트리아진 (7.6 g, 16.3 mmol)와 상기에서 합성된 4-(4,4,5,5-테트라메틸-1,3,2-디옥사보로란-2-일)-1,10-페난트롤린 (5.0 g, 16.3 mmol) 및 Pd(PPh<sub>3</sub>)<sub>4</sub> (0.9 g, 0.8 mmol), K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> (4.5 g, 32.6 mmol)을 톨루엔 200ml, EtOH 40ml, H<sub>2</sub>O 40ml에 넣고 12시간 동안 가열 환류하였다. 반응 종결 후 메틸렌클로라이드로 추출하고 MgSO<sub>4</sub>를 넣고 필터하였다. 필터된 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피를 이용하여 목적 화합물인 4-(3-브로모-5-(4,6-디페닐-1,3,5-트리아진-2-일)페닐)-1,10-페난트롤린 (6.0 g, 수율 65 %)을 얻었다.

[218] <sup>1</sup>H-NMR: δ 7.41-7.42 (m, 4H), 7.48 (d, 1H), 7.50-7.51 (m, 4H), 7.58 (t, 1H), 7.64 (s, 1H), 7.81 (d, 1H), 8.06 (d, 1H), 8.27-8.28 (m, 4H), 8.38 (d, 1H), 8.83 (d, 1H), 8.89 (d, 1H)

[219] [LCMS] : 566

[220]

[221] 【합성예 1】 화합물 1의 합성



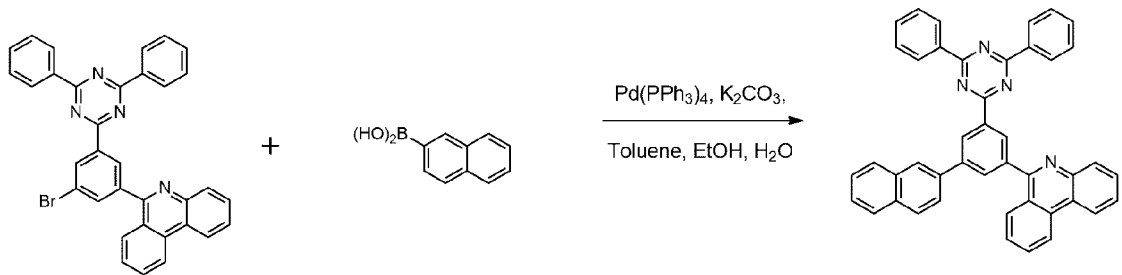
[223] 준비예 2의 6-(3-브로모-5-(4,6-디페닐-1,3,5-트리아진-2-일)페닐)페난트리딘 (5 g, 8.8 mmol)와 페닐 보로닉산 (1.2 g, 9.7 mmol) 및 Pd(PPh<sub>3</sub>)<sub>4</sub> (0.5 g, 0.4 mmol), K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> (2.4 g, 17.6 mmol)을 톨루엔 200ml, EtOH 40ml, H<sub>2</sub>O 40ml에 넣고 12시간 동안 가열 환류하였다. 반응 종결 후 메틸렌클로라이드로 추출하고 MgSO<sub>4</sub>를 넣고 필터하였다. 필터된 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피를 이용하여 목적 화합물인 6-(5-(4,6-디페닐-1,3,5-트리아진-2-일)-[1,1'-비페닐]-3-일)페난트리딘 (3.4 g, 수율 70 %)을 얻었다.

[224] [LCMS] : 562

[225]

[226] 【합성예 2】 화합물 8 합성

[227]



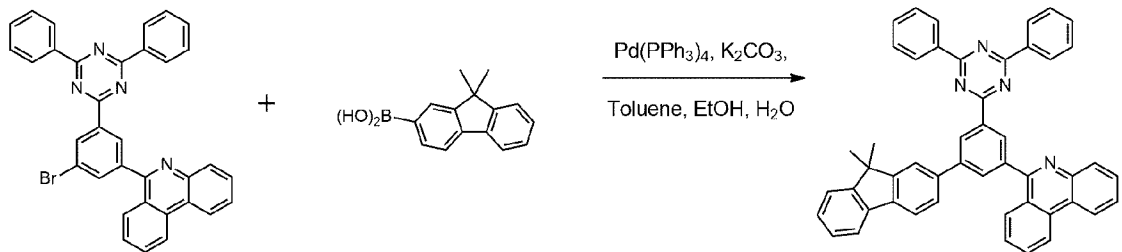
[228] 준비예 2의 6-(3-브로모-5-(4,6-디페닐-1,3,5-트리아진-2-일)페닐)페난트리딘 (5 g, 8.8 mmol)와 나프탈렌-2-일보로닉산 (1.7 g, 9.7 mmol) 및 Pd(PPh<sub>3</sub>)<sub>4</sub> (0.5 g, 0.4 mmol), K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> (2.4 g, 17.6 mmol)을 톨루엔 200ml, EtOH 40ml, H<sub>2</sub>O 40ml에 넣고 12시간 동안 가열 환류하였다. 반응 종결 후 메틸렌클로라이드로 추출하고 MgSO<sub>4</sub>를 넣고 필터하였다. 필터된 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피를 이용하여 목적 화합물인 6-(3-(4,6-디페닐-1,3,5-트리아진-2-일)-5-(나프탈렌-2-일)페닐)페난트리딘 (3.9 g, 수율 73%)을 얻었다.

[229] [LCMS] : 612

[230]

[231] 【합성예 3】 화합물 17의 합성

[232]



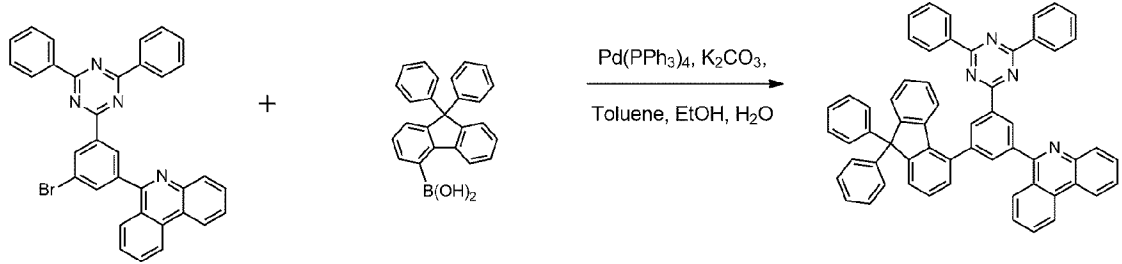
[233] 준비예 2의 6-(3-브로모-5-(4,6-디페닐-1,3,5-트리아진-2-일)페닐)페난트리딘 (5 g, 8.8 mmol)와 (9,9-디메틸-9H-플루오렌-2-일)보로닉산 (2.3 g, 9.7 mmol) 및 Pd(PPh<sub>3</sub>)<sub>4</sub> (0.5 g, 0.4 mmol), K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> (2.4 g, 17.6 mmol)을 톨루엔 200ml, EtOH 40ml, H<sub>2</sub>O 40ml에 넣고 12시간 동안 가열 환류하였다. 반응 종결 후 메틸렌클로라이드로 추출하고 MgSO<sub>4</sub>를 넣고 필터하였다. 필터된 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피를 이용하여 목적 화합물인 6-(3-(9,9-디메틸-9H-플루오렌-2-일)-5-(4,6-디페닐-1,3,5-트리아진-2-일)페닐)페난트리딘 (4.2 g, 수율 71%)을 얻었다.

[234] [LCMS] : 678

[235]

[236] 【합성예 4】 화합물 29의 합성

[237]



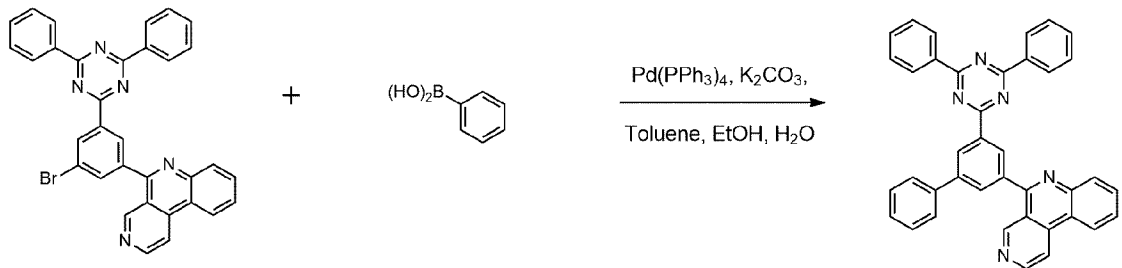
[238] 준비예 2의 6-(3-브로모-5-(4,6-디페닐-1,3,5-트리아진-2-일)페닐)페난트리딘 (5 g, 8.8 mmol)와 (9,9-디페닐-9H-플루오렌-4-일)보로닉산 (3.5 g, 9.7 mmol) 및 Pd(PPh<sub>3</sub>)<sub>4</sub> (0.5 g, 0.4 mmol), K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> (2.4 g, 17.6 mmol)을 톨루엔 200ml, EtOH 40ml, H<sub>2</sub>O 40ml에 넣고 12시간 동안 가열 환류하였다. 반응 종결 후 메틸렌클로라이드로 추출하고 MgSO<sub>4</sub>를 넣고 필터하였다. 필터된 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피를 이용하여 목적 화합물인 6-(3-(4,6-디페닐-1,3,5-트리아진-2-일)-5-(9,9-디페닐-9H-플루오렌-4-일)페닐)페난트리딘 (4.6 g, 수율 65 %)을 얻었다.

[239] [LCMS] : 802

[240]

[241] [합성예 5] 화합물 89의 합성

[242]



[243] 준비예 3의

5-(3-브로모-5-(4,6-디페닐-1,3,5-트리아진-2-일)페닐)벤조[c][2,7]나프티리딘 (5 g, 8.8 mmol)와 페닐 보로닉산 (1.2 g, 9.7 mmol) 및 Pd(PPh<sub>3</sub>)<sub>4</sub> (0.5 g, 0.4 mmol), K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> (2.4 g, 17.6 mmol)을 톨루엔 200ml, EtOH 40ml, H<sub>2</sub>O 40ml에 넣고 12시간 동안 가열 환류하였다. 반응 종결 후 메틸렌클로라이드로 추출하고 MgSO<sub>4</sub>를 넣고 필터하였다. 필터된 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피를 이용하여 목적 화합물인 5-(5-(4,6-디페닐-1,3,5-트리아진-2-일)-[1,1'-비페닐]-3-일)벤조[c][2,7]나프티리딘 (3.4 g, 수율 70 %)을 얻었다.

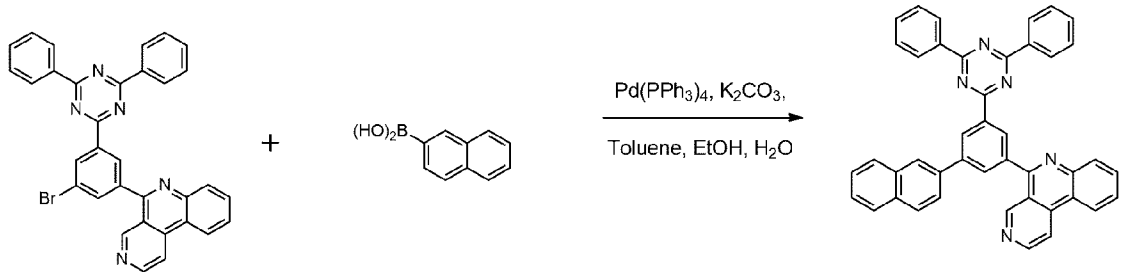
[244] [LCMS] : 563

[245]

[246] [합성예 6] 화합물 96 합성



[247]



[248] 준비예 3의

5-(3-브로모-5-(4,6-디페닐-1,3,5-트리아진-2-일)페닐)벤조[c][2,7]나프티리딘 (5 g, 8.8 mmol)와 나프탈렌-2-일보로닉산 (1.7 g, 9.7 mmol) 및 Pd(PPh<sub>3</sub>)<sub>4</sub> (0.5 g, 0.4 mmol), K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> (2.4 g, 17.6 mmol)을 톨루엔 200ml, EtOH 40ml, H<sub>2</sub>O 40ml에 넣고 12시간 동안 가열 환류하였다. 반응 종결 후 메틸렌클로라이드로 추출하고 MgSO<sub>4</sub>를 넣고 필터하였다. 필터된 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피를 이용하여 목적 화합물인

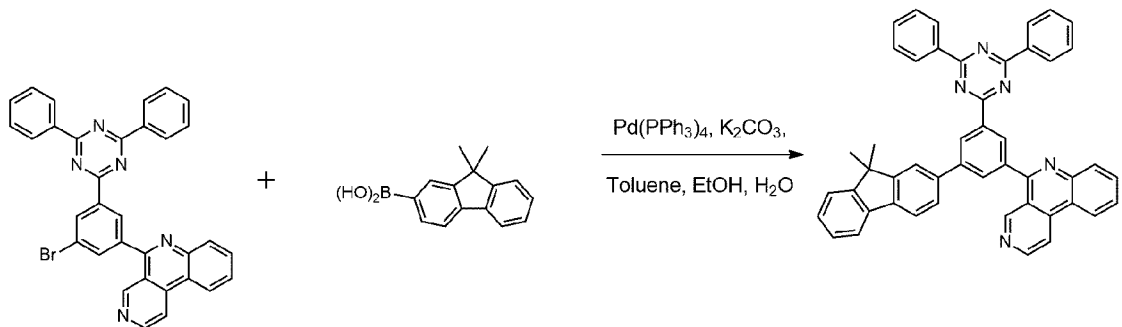
5-(3-(4,6-디페닐-1,3,5-트리아진-2-일)-5-(나프탈렌-2-일)페닐)벤조[c][2,7]나프티리딘 (3.9 g, 수율 73 %)을 얻었다.

[249] [LCMS] : 613

[250]

[251] [합성에 7] 화합물 105의 합성

[252]



[253] 준비예 3의

5-(3-브로모-5-(4,6-디페닐-1,3,5-트리아진-2-일)페닐)벤조[c][2,7]나프티리딘 (5 g, 8.8 mmol)와 (9,9-디메틸-9H-플루오렌-2-일)보로닉산 (2.3 g, 9.7 mmol) 및 Pd(PPh<sub>3</sub>)<sub>4</sub> (0.5 g, 0.4 mmol), K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> (2.4 g, 17.6 mmol)을 톨루엔 200ml, EtOH 40ml, H<sub>2</sub>O 40ml에 넣고 12시간 동안 가열 환류하였다. 반응 종결 후 메틸렌클로라이드로 추출하고 MgSO<sub>4</sub>를 넣고 필터하였다. 필터된 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피를 이용하여 목적 화합물인

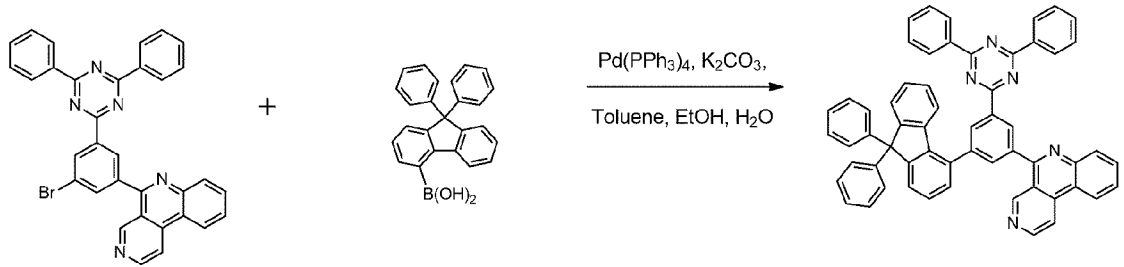
5-(3-(9,9-디메틸-9H-플루오렌-2-일)-5-(4,6-디페닐-1,3,5-트리아진-2-일)페닐)벤조[c][2,7]나프티리딘 (4.2 g, 수율 71 %)을 얻었다.

[254] [LCMS] : 679

[255]

[256] [합성에 8] 화합물 117의 합성

[257]



[258]

준비예 3의

5-(3-브로모-5-(4,6-디페닐-1,3,5-트리아진-2-일)페닐)벤조[c][2,7]나프티리딘 (5 g, 8.8 mmol)와 (9,9-디페닐-9H-플루오렌-4-일)보로닉산 (3.5 g, 9.7 mmol) 및 Pd(PPh<sub>3</sub>)<sub>4</sub> (0.5 g, 0.4 mmol), K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> (2.4 g, 17.6 mmol)을 톨루엔 200ml, EtOH 40ml, H<sub>2</sub>O 40ml에 넣고 12시간 동안 가열 환류하였다. 반응 종결 후 메틸렌클로라이드로 추출하고 MgSO<sub>4</sub>를 넣고 필터하였다. 필터된 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피를 이용하여 목적 화합물인 5-(3-(4,6-디페닐-1,3,5-트리아진-2-일)-5-(9,9-디페닐-9H-플루오렌-4-일)페닐)벤조[c][2,7]나프티리딘 (4.6 g, 수율 65%)을 얻었다.

[259]

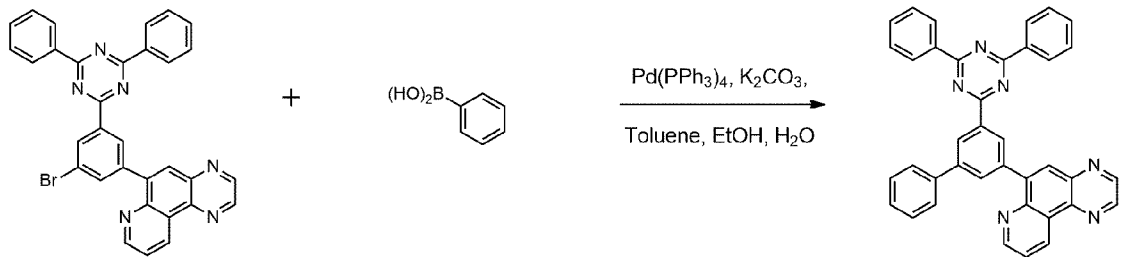
[LCMS] : 803

[260]

[261]

[합성예 9] 화합물 177의 합성

[262]



[263]

준비예 4의

6-(3-브로모-5-(4,6-디페닐-1,3,5-트리아진-2-일)페닐)피리도[3,2-f]퀴녹살린 (5 g, 8.8 mmol)와 페닐 보로닉산 (1.2 g, 9.7 mmol) 및 Pd(PPh<sub>3</sub>)<sub>4</sub> (0.5 g, 0.4 mmol), K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> (2.4 g, 17.6 mmol)을 톨루엔 200ml, EtOH 40ml, H<sub>2</sub>O 40ml에 넣고 12시간 동안 가열 환류하였다. 반응 종결 후 메틸렌클로라이드로 추출하고 MgSO<sub>4</sub>를 넣고 필터하였다. 필터된 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피를 이용하여 목적 화합물인 6-(5-(4,6-디페닐-1,3,5-트리아진-2-일)-[1,1'-비페닐]-3-일)피리도[3,2-f]퀴녹살린 (3.4 g, 수율 70%)을 얻었다.

[264]

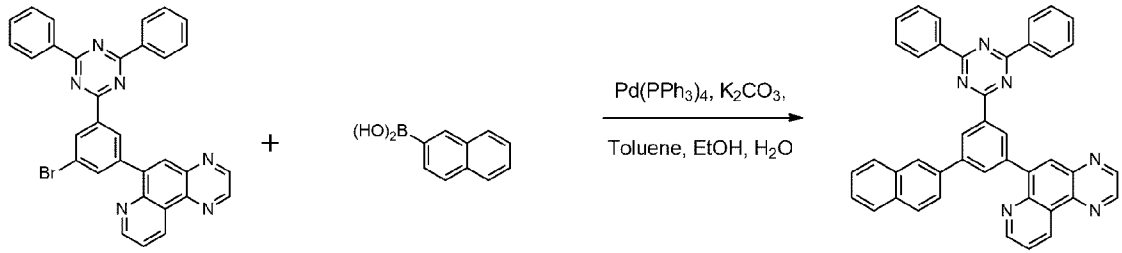
[LCMS] : 564

[265]

[266]

[합성예 10] 화합물 184 합성

[267]



[268]

준비에 4의

6-(3-브로모-5-(4,6-디페닐-1,3,5-트리아진-2-일)페닐)피리도[3,2-f]퀴녹살린 (5 g, 8.8 mmol)와 나프탈렌-2-일보로닉산 (1.7 g, 9.7 mmol) 및 Pd(PPh<sub>3</sub>)<sub>4</sub> (0.5 g, 0.4 mmol), K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> (2.4 g, 17.6 mmol)을 톨루엔 200ml, EtOH 40ml, H<sub>2</sub>O 40ml에 넣고 12시간 동안 가열 환류하였다. 반응 종결 후 메틸렌클로라이드로 추출하고 MgSO<sub>4</sub>를 넣고 필터하였다. 필터된 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피를 이용하여 목적 화합물인 6-(3-(4,6-디페닐-1,3,5-트리아진-2-일)-5-(나프탈렌-2-일)페닐)피리도[3,2-f]퀴녹살린 (3.9 g, 수율 73 %)을 얻었다.

[269]

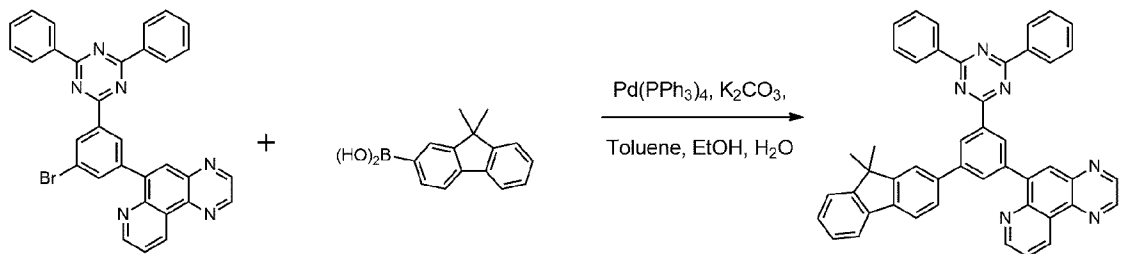
[LCMS] : 614

[270]

[271]

[합성예 11] 화합물 193의 합성

[272]



[273]

준비에 4의

6-(3-브로모-5-(4,6-디페닐-1,3,5-트리아진-2-일)페닐)피리도[3,2-f]퀴녹살린 (5 g, 8.8 mmol)와 (9,9-디메틸-9H-플루오렌-2-일)보로닉산 (2.3 g, 9.7 mmol) 및 Pd(PPh<sub>3</sub>)<sub>4</sub> (0.5 g, 0.4 mmol), K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> (2.4 g, 17.6 mmol)을 톨루엔 200ml, EtOH 40ml, H<sub>2</sub>O 40ml에 넣고 12시간동안 가열환류하였다. 반응 종결 후 메틸렌클로라이드로 추출하고 MgSO<sub>4</sub>를 넣고 필터하였다. 필터된 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피를 이용하여 목적 화합물인 6-(3-(9,9-디메틸-9H-플루오렌-2-일)-5-(4,6-디페닐-1,3,5-트리아진-2-일)페닐)피리도[3,2-f]퀴녹살린 (4.2 g, 수율 71 %)을 얻었다.

[274]

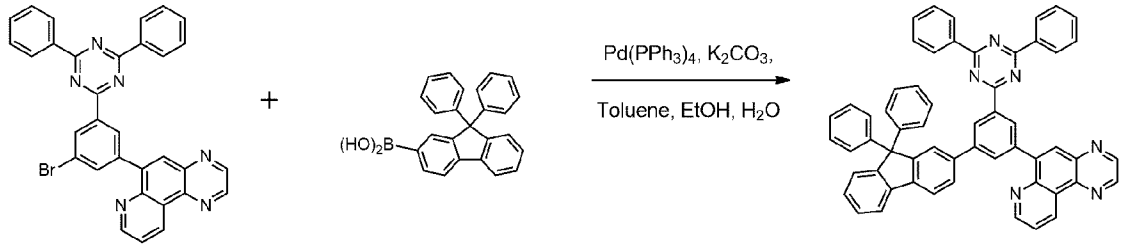
[LCMS] : 680

[275]

[276]

[합성예 12] 화합물 195의 합성

[277]



[278]

준비에 4의

6-(3-브로모-5-(4,6-디페닐-1,3,5-트리아진-2-일)페닐)피리도[3,2-f]퀴녹살린 (5 g, 8.8 mmol)와 (9,9-디페닐-9H-플루오렌-2-일)보로닉산 및 Pd(PPh<sub>3</sub>)<sub>4</sub> (0.5 g, 0.4 mmol), K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> (2.4 g, 17.6 mmol)을 톨루엔 200ml, EtOH 40ml, H<sub>2</sub>O 40ml에 넣고 12시간 동안 가열 환류하였다. 반응 종결 후 메틸렌클로라이드로 추출하고 MgSO<sub>4</sub>를 넣고 필터하였다. 필터된 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피를 이용하여 목적 화합물인 6-(3-(4,6-디페닐-1,3,5-트리아진-2-일)-5-(9,9-디페닐-9H-플루오렌-2-일)페닐)피리도[3,2-f]퀴녹살린 (4.6 g, 수율 65 %)을 얻었다.

[279]

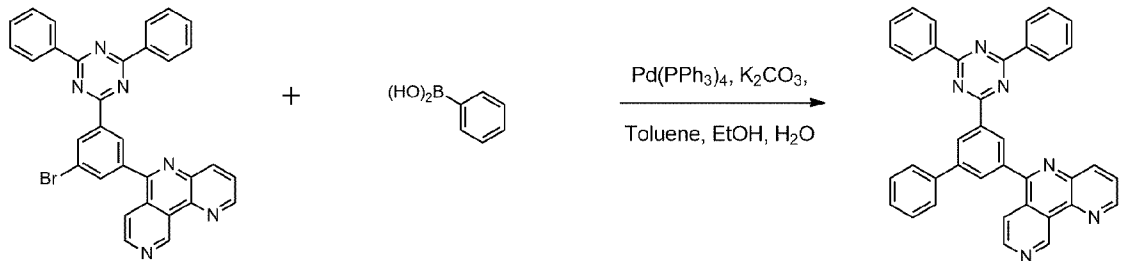
[LCMS] : 804

[280]

[281]

[합성예 13] 화합물 209의 합성

[282]



[283]

준비에 5의

6-(3-브로모-5-(4,6-디페닐-1,3,5-트리아진-2-일)페닐)피리도[4,3-c][1,5]나프티리딘 (5 g, 8.8 mmol)와 페닐 보로닉산 (1.2 g, 9.7 mmol) 및 Pd(PPh<sub>3</sub>)<sub>4</sub> (0.5 g, 0.4 mmol), K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> (2.4 g, 17.6 mmol)을 톨루엔 200ml, EtOH 40ml, H<sub>2</sub>O 40ml에 넣고 12시간 동안 가열 환류하였다. 반응 종결 후 메틸렌클로라이드로 추출하고 MgSO<sub>4</sub>를 넣고 필터하였다. 필터된 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피를 이용하여 목적 화합물인 6-(5-(4,6-디페닐-1,3,5-트리아진-2-일)-[1,1'-비페닐]-3-일)피리도[4,3-c][1,5]나프티리딘 (3.4 g, 수율 70 %)을 얻었다.

[284]

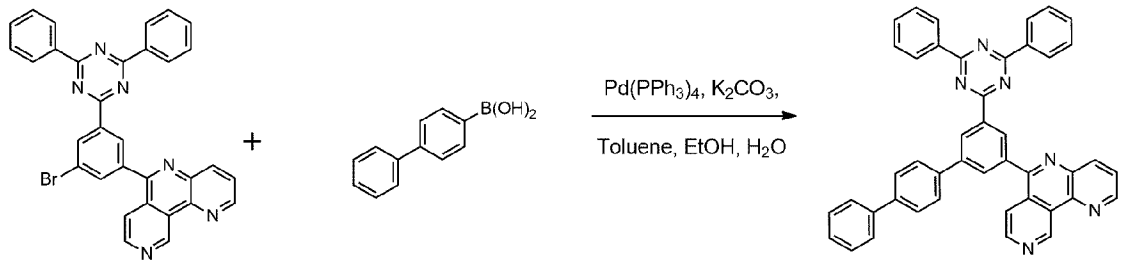
[LCMS] : 564

[285]

[286]

[합성예 14] 화합물 213의 합성

[287]



[288]

준비에 5의

6-(3-브로모-5-(4,6-디페닐-1,3,5-트리아진-2-일)페닐)피리도[4,3-c][1,5]나프티리딘 (5 g, 8.8 mmol)와 [1,1'-비페닐]-4-일보로닉산 (1.9 g, 9.7 mmol) 및 Pd(PPh<sub>3</sub>)<sub>4</sub> (0.5 g, 0.4 mmol), K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> (2.4 g, 17.6 mmol)을 톨루엔 200ml, EtOH 40ml, H<sub>2</sub>O 40ml에 넣고 12시간 동안 가열 환류하였다. 반응 종결 후 메틸렌클로라이드로 추출하고 MgSO<sub>4</sub>를 넣고 필터하였다. 필터된 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피를 이용하여 목적 화합물인 6-(5-(4,6-디페닐-1,3,5-트리아진-2-일)-[1,1':4',1''-터페닐]-3-일)피리도[4,3-c][1,5]나프티리딘 (2.8 g, 수율 50%)을 얻었다.

[289]

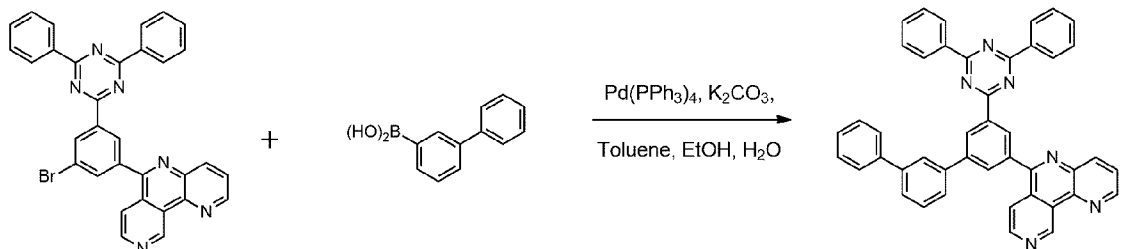
[LCMS] : 640

[290]

[291]

[합성에 15] 화합물 214 합성

[292]



[293]

준비에 5의

6-(3-브로모-5-(4,6-디페닐-1,3,5-트리아진-2-일)페닐)피리도[4,3-c][1,5]나프티리딘 (5 g, 8.8 mmol)와 [1,1'-비페닐]-3-일보로닉산 (1.9 g, 9.7 mmol) 및 Pd(PPh<sub>3</sub>)<sub>4</sub> (0.5 g, 0.4 mmol), K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> (2.4 g, 17.6 mmol)을 톨루엔 200ml, EtOH 40ml, H<sub>2</sub>O 40ml에 넣고 12시간 동안 가열 환류하였다. 반응 종결 후 메틸렌클로라이드로 추출하고 MgSO<sub>4</sub>를 넣고 필터하였다. 필터된 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피를 이용하여 목적 화합물인 6-(5-(4,6-디페닐-1,3,5-트리아진-2-일)-[1,1':3',1''-터페닐]-3-일)피리도[4,3-c][1,5]나프티리딘 (2.8 g, 수율 50%)을 얻었다.

[294]

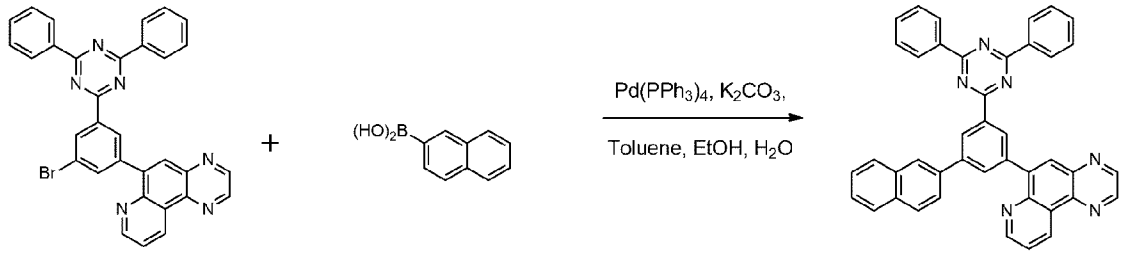
[LCMS] : 640

[295]

[296]

[합성에 16] 화합물 216 합성

[297]



[298]

준비에 5의

6-(3-브로모-5-(4,6-디페닐-1,3,5-트리아진-2-일)페닐)피리도[4,3-c][1,5]나프티리딘 (5 g, 8.8 mmol)와 나프탈렌-2-일보로닉산 (1.7 g, 9.7 mmol) 및 Pd(PPh<sub>3</sub>)<sub>4</sub> (0.5 g, 0.4 mmol), K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> (2.4 g, 17.6 mmol)을 톨루엔 200ml, EtOH 40ml, H<sub>2</sub>O 40ml에 넣고 12시간 동안 가열 환류하였다. 반응 종결 후 메틸렌클로라이드로 추출하고 MgSO<sub>4</sub>를 넣고 필터하였다. 필터된 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피를 이용하여 목적 화합물인 6-(3-(4,6-디페닐-1,3,5-트리아진-2-일)-5-(나프탈렌-2-일)페닐)피리도[4,3-c][1,5]나프티리딘 (3.9 g, 수율 73 %)을 얻었다.

[299]

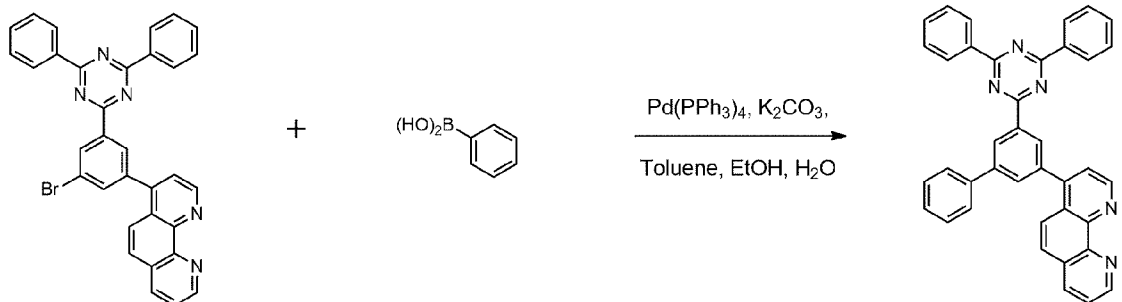
[LCMS] : 614

[300]

[301]

[합성에 17] 화합물 225의 합성

[302]



[303]

준비에 6의

4-(3-브로모-5-(4,6-디페닐-1,3,5-트리아진-2-일)페닐)-1,10-페난트롤린 (5 g, 8.8 mmol)와 페닐 보로닉산 (1.2 g, 9.7 mmol) 및 Pd(PPh<sub>3</sub>)<sub>4</sub> (0.5 g, 0.4 mmol), K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> (2.4 g, 17.6 mmol)을 톨루엔 200ml, EtOH 40ml, H<sub>2</sub>O 40ml에 넣고 12시간 동안 가열 환류하였다. 반응 종결 후 메틸렌클로라이드로 추출하고 MgSO<sub>4</sub>를 넣고 필터하였다. 필터된 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피를 이용하여 목적 화합물인 4-(5-(4,6-디페닐-1,3,5-트리아진-2-일)-[1,1'-비페닐]-3-일)-1,10-페난트롤린 (3.4 g, 수율 370 %)을 얻었다.

[304]

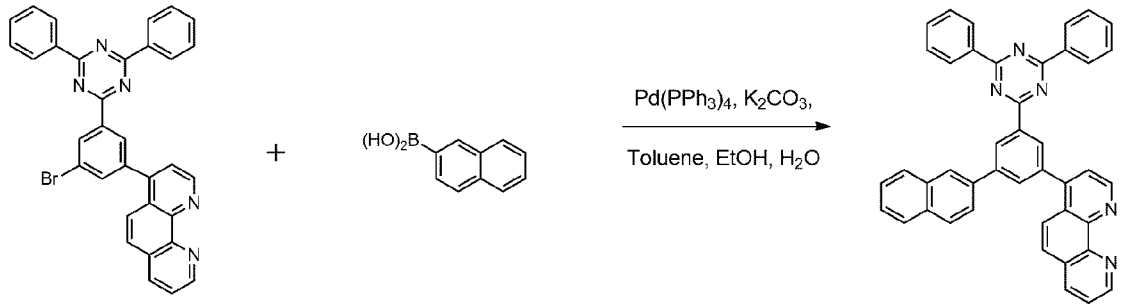
[LCMS] : 563

[305]

[306]

[합성에 18] 화합물 226 합성

[307]



[308]

준비예 6의

4-(3-브로모-5-(4,6-디페닐-1,3,5-트리아진-2-일)페닐)-1,10-페난트롤린 (5 g, 8.8 mmol)와 나프탈렌-2-일보로닉산 (1.7 g, 9.7 mmol) 및 Pd(PPh<sub>3</sub>)<sub>4</sub> (0.5 g, 0.4 mmol), K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> (2.4 g, 17.6 mmol)을 톨루엔 200ml, EtOH 40ml, H<sub>2</sub>O 40ml에 넣고 12시간 동안 가열 환류하였다. 반응 종결 후 메틸렌클로라이드로 추출하고 MgSO<sub>4</sub>를 넣고 필터하였다. 필터된 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피를 이용하여 목적 화합물인

4-(3-(4,6-디페닐-1,3,5-트리아진-2-일)-5-(나프탈렌-2-일)페닐)-1,10-페난트롤린 (3.9 g, 수율 73 %)을 얻었다.

[309]

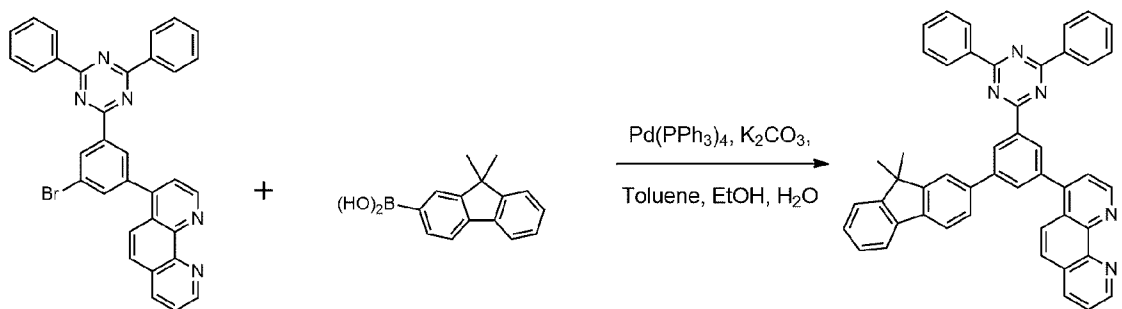
[LCMS] : 613

[310]

[311]

[합성에 19] 화합물 227의 합성

[312]



[313]

준비예 6의

4-(3-브로모-5-(4,6-디페닐-1,3,5-트리아진-2-일)페닐)-1,10-페난트롤린 (5 g, 8.8 mmol)와 (9,9-디메틸-9H-플루오렌-2-일)보로닉산 (2.3 g, 9.7 mmol) 및 Pd(PPh<sub>3</sub>)<sub>4</sub> (0.5 g, 0.4 mmol), K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> (2.4 g, 17.6 mmol)을 톨루엔 200ml, EtOH 40ml, H<sub>2</sub>O 40ml에 넣고 12시간 동안 가열 환류하였다. 반응 종결 후 메틸렌클로라이드로 추출하고 MgSO<sub>4</sub>를 넣고 필터하였다. 필터된 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피를 이용하여 목적 화합물인

4-(3-(9,9-디메틸-9H-플루오렌-2-일)-5-(4,6-디페닐-1,3,5-트리아진-2-일)페닐)-1,10-페난트롤린 (4.2 g, 수율 71 %)을 얻었다.

[314]

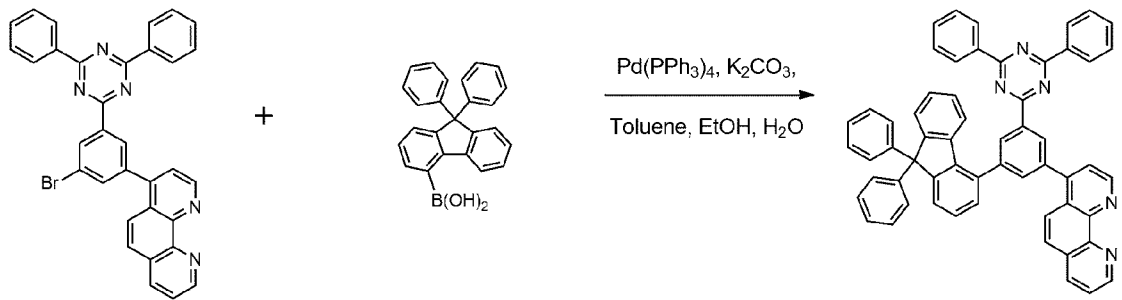
[315]

[LCMS] : 679

[316]

[317] [합성예 20] 화합물 228의 합성

[318]



[319] 준비예 6의

4-(3-브로모-5-(4,6-디페닐-1,3,5-트리아진-2-일)페닐)-1,10-페난트롤린 (5 g, 8.8 mmol)와 (9,9-디페닐-9H-플루오렌-4-일)보로닉산 (3.5 g, 9.7 mmol) 및 Pd(PPh<sub>3</sub>)<sub>4</sub> (0.5 g, 0.4 mmol), K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> (2.4 g, 17.6 mmol)을 톨루엔 200ml, EtOH 40ml, H<sub>2</sub>O 40ml에 넣고 12시간 동안 가열 환류하였다. 반응 종결 후 메틸렌클로라이드로 추출하고 MgSO<sub>4</sub>를 넣고 필터하였다. 필터된 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피를 이용하여 목적 화합물인 4-(3-(4,6-디페닐-1,3,5-트리아진-2-일)-5-(9,9-디페닐-9H-플루오렌-4-일)페닐)-1,10-페난트롤린 (4.6 g, 수율 65 %)을 얻었다.

[320] [LCMS] : 803

[321]

[322] [실시예 1 ~ 20] 청색 유기 전계 발광 소자의 제작

[323] 합성예에서 합성된 화합물 1, 8, 17, 29, 89, 96, 105, 117, 177, 184, 193, 195, 209, 213, 214, 216, 225, 226, 227, 228을 통상적으로 알려진 방법으로 고순도 승화정제를 한 후, 하기와 같이 청색 유기 전계 발광 소자를 제작하였다.

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

[325] 상기와 같이 준비된 ITO 투명 전극 위에, DS-205 (㈜두산전자, 80 nm)/NPB (15 nm)/ADN + 5 % DS-405 (㈜두산전자, 30nm)/화합물 1, 8, 17, 29, 89, 96, 105, 117, 177, 184, 193, 195, 209, 213, 214, 216, 225, 226, 227, 228 각각의 화합물 (30 nm)/LiF (1 nm)/Al (200 nm) 순으로 적층하여 유기 전계 발광 소자를 제작하였다.

[326]

[327] [비교예 1] 청색 유기 전계 발광 소자의 제작

[328] 전자 수송층 물질로서 화합물 1 대신 Alq<sub>3</sub>을 사용하는 것을 제외하고는, 상기 실시예 1과 동일하게 수행하여 청색 유기 전계 발광 소자를 제작하였다.

[329]

[330] [비교예 2] 청색 유기 전계 발광 소자의 제작

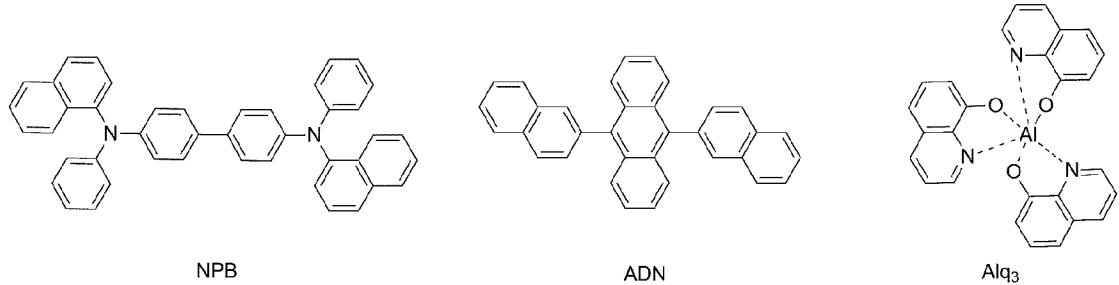


[331] 전자 수송층 물질로서 화합물 1을 사용하지 않은 것을 제외하고는, 상기 실시예 1과 동일하게 수행하여 청색 유기 전계 발광 소자를 제작하였다.

[332]

[333] 상기 실시예 1 내지 20 및 비교예 1, 2에서 사용된 NPB, ADN 및 Alq<sub>3</sub>의 구조는 하기와 같다.

[334]



[335] **[평가예 1]**

[336] 실시예 1 내지 20 및 비교예 1, 2에서 제작한 각각의 청색 유기 전계 발광 소자에 대하여 전류밀도 (10) mA/cm<sup>2</sup>에서의 구동전압, 전류효율 및 발광 피크를 측정하고, 그 결과를 하기 표 1에 나타내었다.

[337]

[338] [표1]

샘플	전자 수송층	구동 전압(V)	EL 피크(nm)	전류효율(cd/A)
실시예 1	1	4.5	458	7.0
실시예 2	8	4.6	459	7.1
실시예 3	17	4.1	458	7.1
실시예 4	29	4.0	455	6.8
실시예 5	89	4.3	456	6.7
실시예 6	96	4.4	457	6.7
실시예 7	105	3.9	456	6.9
실시예 8	117	3.8	452	7.1
실시예 9	177	4.0	448	7.3
실시예 10	184	4.1	460	7.3
실시예 11	193	3.6	468	6.8
실시예 12	195	3.5	465	6.9
실시예 13	209	3.9	457	6.8
실시예 14	213	4.1	456	6.4
실시예 15	214	4.1	455	6.5
실시예 16	216	4.2	459	6.5
실시예 17	225	4.1	461	6.9
실시예 18	226	3.9	464	7.1
실시예 19	227	3.6	467	7.1
실시예 20	228	3.9	467	6.7
비교예 1	Alq <sub>3</sub>	4.7	458	5.6
비교예 2	-	4.8	460	6.2

[339]

[340]

상기 표 1에 나타낸 바와 같이, 본 발명의 화합물을 전자 수송층에 사용한 청색 유기 전계 발광 소자(실시예 1 내지 20)는 종래의 Alq<sub>3</sub>를 전자 수송층에 사용한 청색 유기 전계 발광 소자(비교예 1) 및 전자 수송층이 없는 청색 유기 전계 발광 소자(비교예 2)에 비해 구동전압, 발광피크 및 전류효율 면에서 우수한 성능을 나타내는 것을 알 수 있었다.

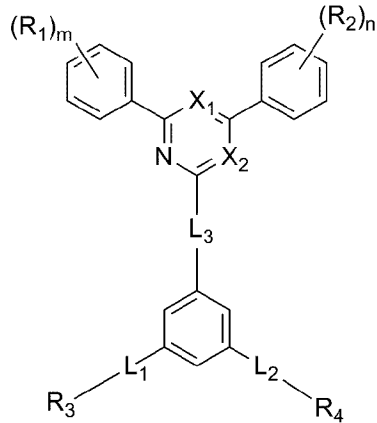
**산업상 이용가능성**

[341] 본 발명은 유기 전계 발광 소자용 재료로서 사용될 수 있는 신규 유기 화합물 및 이를 포함하는 유기 전계 발광 소자에 관한 것이다.

## 청구범위

[청구항 1] 하기 화학식 1로 표시되는 화합물:

[화학식 1]



상기 화학식 1에서,

$X_1$  및  $X_2$ 는 각각 독립적으로 N 또는  $C(R_5)$ 이나, 상기  $X_1$  및  $X_2$  중 적어도 하나는 N이고;

$m$  및  $n$ 은 각각 독립적으로 0 내지 5의 정수이며;

$R_1$  및  $R_2$ 는 각각 독립적으로 중수소, 할로젠, 시아노기, 니트로기,  $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬기,  $C_2\sim C_{40}$ 의 알케닐기,  $C_2\sim C_{40}$ 의 알키닐기,  $C_3\sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기,  $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기,  $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬옥시기,  $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴옥시기,  $C_3\sim C_{40}$ 의 알킬실릴기,  $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴실릴기,  $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬보론기,  $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴보론기,  $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴포스파닐기,  $C_6\sim C_{60}$ 의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및  $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택되고, 상기  $R_1$  및  $R_2$  각각이 복수 개인 경우 이들은 서로 동일하거나 상이하며;

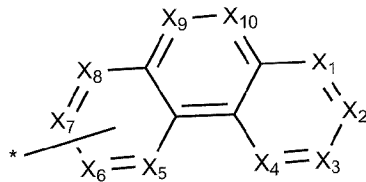
$L_1$  내지  $L_3$ 는 각각 독립적으로 단일결합,  $C_6\sim C_{30}$ 의 아릴렌기 및 핵원자수 5 내지 30개의 헤테로아릴렌기로 이루어진 군에서 선택되며;

$R_3$  내지  $R_5$ 는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 시아노기, 니트로기,  $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬기,  $C_2\sim C_{40}$ 의 알케닐기,  $C_2\sim C_{40}$ 의 알키닐기,  $C_3\sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기,  $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기,  $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬옥시기,  $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴옥시기,  $C_3\sim C_{40}$ 의 알킬실릴기,  $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴실릴기,  $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬보론기,  $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴보론기,  $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴포스파닐기,  $C_6\sim C_{60}$ 의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및  $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택되며;

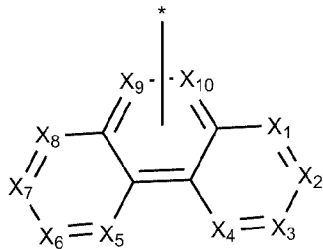
상기  $L_1$  내지  $L_3$ 의 아릴렌기 및 헤테로아릴렌기와,  $R_1$  내지  $R_5$ 의 알킬기, 알케닐기, 알키닐기, 아릴기, 헤테로아릴기, 아릴옥시기, 알킬옥시기,

시클로알킬기, 헤테로시클로알킬기, 아릴아민기, 알킬실릴기, 알킬보론기, 아릴보론기, 아릴포스파닐기, 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 아릴실릴기는 각각 독립적으로 중수소, 할로젠, 시아노기, 니트로기, C<sub>1</sub>~C<sub>40</sub>의 알킬기, C<sub>2</sub>~C<sub>40</sub>의 알케닐기, C<sub>2</sub>~C<sub>40</sub>의 알키닐기, C<sub>6</sub>~C<sub>60</sub>의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기, C<sub>6</sub>~C<sub>60</sub>의 아릴옥시기, C<sub>1</sub>~C<sub>40</sub>의 알킬옥시기, C<sub>6</sub>~C<sub>60</sub>의 아릴아민기, C<sub>3</sub>~C<sub>40</sub>의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, C<sub>1</sub>~C<sub>40</sub>의 알킬실릴기, C<sub>1</sub>~C<sub>40</sub>의 알킬보론기, C<sub>6</sub>~C<sub>60</sub>의 아릴보론기, C<sub>6</sub>~C<sub>60</sub>의 아릴포스파닐기, C<sub>6</sub>~C<sub>60</sub>의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 C<sub>6</sub>~C<sub>60</sub>의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상의 치환기로 치환되거나 비치환되고, 복수 개의 치환기로 치환되는 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이할 수 있으며; 상기 R<sub>3</sub> 및 R<sub>4</sub> 중 적어도 하나는 하기 화학식 2 또는 3으로 표시되는 치환기에서 선택되고;

[화학식 2]



[화학식 3]



상기 화학식 2 및 3에서,

\*은 결합이 이루어지는 부분을 의미하고;

X<sub>1</sub> 내지 X<sub>10</sub>은 각각 독립적으로 N 또는 C(R<sub>6</sub>)이나, 상기 X<sub>1</sub> 내지 X<sub>10</sub> 중 적어도 하나는 N이며;

상기 화학식 2에서 L<sub>1</sub> 또는 L<sub>2</sub>에 결합되는 X<sub>5</sub> 내지 X<sub>8</sub> 중 어느 하나는 C(R<sub>6</sub>)이고, 이때 상기 R<sub>6</sub>는 부재이며;

상기 화학식 3에서 L<sub>1</sub> 또는 L<sub>2</sub>에 결합되는 X<sub>9</sub> 및 X<sub>10</sub> 중 어느 하나는 C(R<sub>6</sub>)이고, 이때 상기 R<sub>6</sub>는 부재이며;

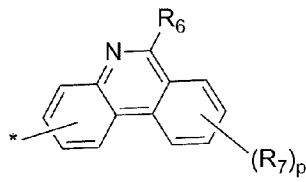
R<sub>6</sub>은 수소, 중수소, 할로젠, 시아노기, 니트로기, C<sub>1</sub>~C<sub>40</sub>의 알킬기, C<sub>2</sub>~C<sub>40</sub>의 알케닐기, C<sub>2</sub>~C<sub>40</sub>의 알키닐기, C<sub>3</sub>~C<sub>40</sub>의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, C<sub>6</sub>~C<sub>60</sub>의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기, C<sub>1</sub>~C<sub>40</sub>의 알킬옥시기, C<sub>6</sub>~C<sub>60</sub>의 아릴옥시기, C<sub>3</sub>~C<sub>40</sub>의 알킬실릴기, C<sub>6</sub>~C<sub>60</sub>의 아릴실릴기, C<sub>1</sub>~C<sub>40</sub>의 알킬보론기, C<sub>6</sub>~C<sub>60</sub>의

아릴보론기,  $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴포스파닐기,  $C_6\sim C_{60}$ 의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및  $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택되고, 상기  $R_6$ 이 복수 개인 경우 이들은 서로 동일하거나 상이하며; 상기  $R_6$ 의 알킬기, 알케닐기, 알키닐기, 아릴기, 헤테로아릴기, 아릴옥시기, 알킬옥시기, 시클로알킬기, 헤테로시클로알킬기, 아릴아민기, 알킬실릴기, 알킬보론기, 아릴보론기, 아릴포스파닐기, 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 아릴실릴기는 각각 독립적으로 중수소, 할로젠, 시아노기, 니트로기,  $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬기,  $C_2\sim C_{40}$ 의 알케닐기,  $C_2\sim C_{40}$ 의 알키닐기,  $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기,  $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴옥시기,  $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬옥시기,  $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴아민기,  $C_3\sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기,  $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬실릴기,  $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬보론기,  $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴보론기,  $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴포스파닐기,  $C_6\sim C_{60}$ 의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및  $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상의 치환기로 치환되거나 비치환되고, 복수 개의 치환기로 치환되는 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

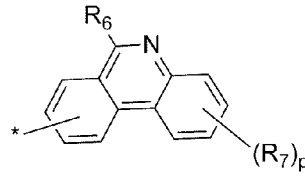
[청구항 2]

제1항에 있어서,

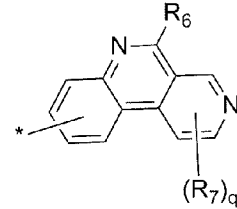
상기 화학식 2로 표시되는 치환기는 하기 화학식 A-1 내지 A-11 중 적어도 하나로 표시되는 치환기인 화합물:



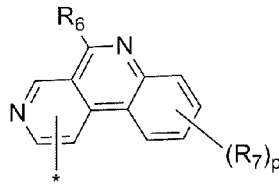
A-1



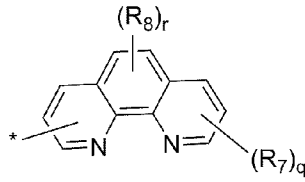
A-2



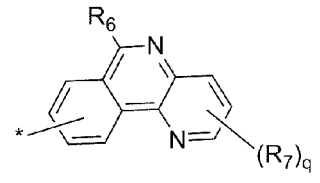
A-3



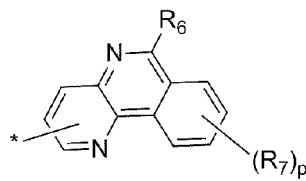
A-4



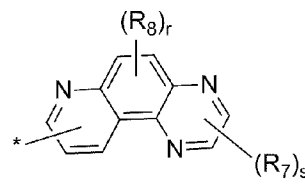
A-5



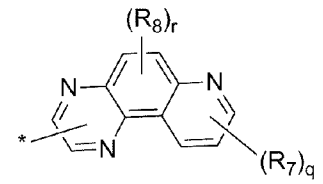
A-6



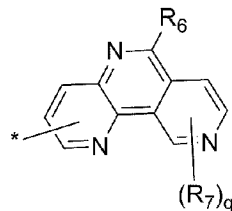
A-7



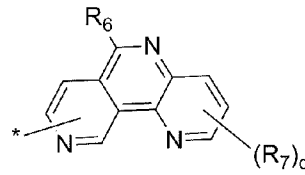
A-8



A-9



A-10



A-11

상기 화학식 A-1 내지 A-11에서,

p는 0 내지 4의 정수이며;

q는 0 내지 3의 정수이며;

r 및 s는 각각 독립적으로 0 내지 2의 정수이며;

R<sub>7</sub> 및 R<sub>8</sub>은 각각 독립적으로 중수소, 할로젠, 시아노기, 니트로기, C<sub>1</sub>~C<sub>40</sub>의 알킬기, C<sub>2</sub>~C<sub>40</sub>의 알케닐기, C<sub>2</sub>~C<sub>40</sub>의 알키닐기, C<sub>6</sub>~C<sub>60</sub>의 아릴기,

핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기, C<sub>6</sub>~C<sub>60</sub>의 아릴옥시기, C<sub>1</sub>~C<sub>40</sub>의 알킬옥시기, C<sub>3</sub>~C<sub>40</sub>의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의

헤테로시클로알킬기, C<sub>6</sub>~C<sub>60</sub>의 아릴아민기, C<sub>1</sub>~C<sub>40</sub>의 알킬실릴기, C<sub>1</sub>~C<sub>40</sub>의 알킬보론기, C<sub>6</sub>~C<sub>60</sub>의 아릴보론기, C<sub>6</sub>~C<sub>60</sub>의 아릴포스파닐기, C<sub>6</sub>~C<sub>60</sub>의

모노 또는 디아릴포스피닐기 및 C<sub>6</sub>~C<sub>60</sub>의 아릴실릴기로 이루어진 군에서

선택되거나, 인접하는 기와 결합하여 축합 고리를 형성할 수 있고, 상기 R<sub>7</sub> 및 R<sub>8</sub> 각각이 복수 개인 경우 이들은 서로 동일하거나 상이하며;

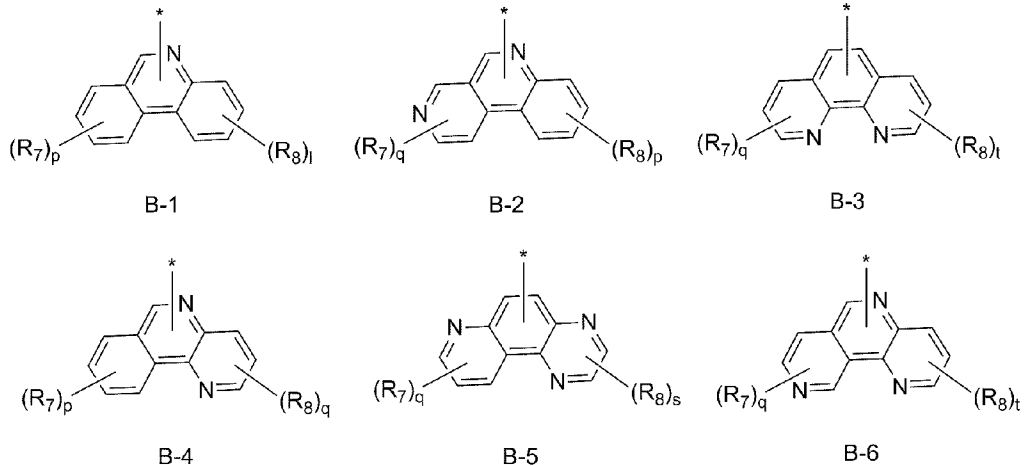
상기  $R_7$  및  $R_8$ 의 알킬기, 알케닐기, 알키닐기, 아릴기, 헤테로아릴기, 아릴옥시기, 알킬옥시기, 시클로알킬기, 헤테로시클로알킬기, 아릴아민기, 알킬실릴기, 알킬보론기, 아릴보론기, 아릴포스파닐기, 모노 또는 디아릴포스파닐기 및 아릴실릴기는 각각 독립적으로 중수소, 할로젠, 시아노기, 니트로기,  $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬기,  $C_2\sim C_{40}$ 의 알케닐기,  $C_2\sim C_{40}$ 의 알키닐기,  $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기,  $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴옥시기,  $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬옥시기,  $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴아민기,  $C_3\sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기,  $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬실릴기,  $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬보론기,  $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴보론기,  $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴포스파닐기,  $C_6\sim C_{60}$ 의 모노 또는 디아릴포스파닐기 및  $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상의 치환기로 치환되거나 비치환되고, 복수 개의 치환기로 치환되는 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이할 수 있으며,

\* 및  $R_6$ 은 제1항에서 정의된 바와 같다.

[청구항 3]

제1항에 있어서,

상기 화학식 3으로 표시되는 치환기는 하기 화학식 B-1 내지 B-6 중 적어도 하나로 표시되는 치환기인 화합물:



상기 화학식 B-1 내지 B-6에서,

\*은 결합이 이루어지는 부분을 의미하고;

p 및 l은 각각 독립적으로 0 내지 4의 정수이며;

q 및 t는 각각 독립적으로 0 내지 3의 정수이며;

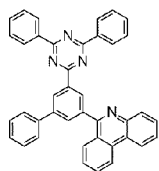
s는 0 내지 2의 정수이며;

$R_7$  및  $R_8$ 은 각각 독립적으로 중수소, 할로젠, 시아노기, 니트로기,  $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬기,  $C_2\sim C_{40}$ 의 알케닐기,  $C_2\sim C_{40}$ 의 알키닐기,  $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기,  $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴옥시기,  $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬옥시기,  $C_3\sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기,  $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴아민기,  $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬실릴기,  $C_1\sim C_{40}$

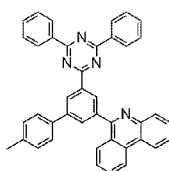


의 알킬보론기,  $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴보론기,  $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴포스파닐기,  $C_6\sim C_{60}$ 의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및  $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택되거나, 인접하는 기와 결합하여 축합 고리를 형성할 수 있고, 상기  $R_7$  및  $R_8$  각각이 복수 개인 경우 이들은 서로 동일하거나 상이하며; 상기  $R_7$  및  $R_8$ 의 알킬기, 알케닐기, 알키닐기, 아릴기, 헤테로아릴기, 아릴옥시기, 알킬옥시기, 시클로알킬기, 헤테로시클로알킬기, 아릴아민기, 알킬실릴기, 알킬보론기, 아릴보론기, 아릴포스파닐기, 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 아릴실릴기는 각각 독립적으로 중수소, 할로젠, 시아노기, 니트로기,  $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬기,  $C_2\sim C_{40}$ 의 알케닐기,  $C_2\sim C_{40}$ 의 알키닐기,  $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기,  $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴옥시기,  $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬옥시기,  $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴아민기,  $C_3\sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기,  $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬실릴기,  $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬보론기,  $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴보론기,  $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴포스파닐기,  $C_6\sim C_{60}$ 의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및  $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상의 치환기로 치환되거나 비치환되고, 복수 개의 치환기로 치환되는 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

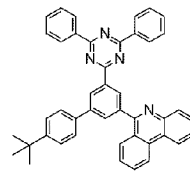
- [청구항 4] 제1항에 있어서,  
상기  $L_1$  내지  $L_3$ 는 각각 독립적으로 단일결합 또는  $C_6\sim C_{18}$ 의 아릴렌기인 화합물.
- [청구항 5] 제4항에 있어서,  
상기  $L_1$  내지  $L_3$ 는 각각 독립적으로 단일결합, 페닐렌기, 비페닐렌기, 나프탈레닐기 및 안트라세닐기로 이루어진 군에서 선택되는 화합물.
- [청구항 6] 제1항에 있어서,  
상기  $R_3$ 는  $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬기,  $C_2\sim C_{40}$ 의 알케닐기,  $C_2\sim C_{40}$ 의 알키닐기,  $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴기 또는 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기인 화합물.
- [청구항 7] 제6항에 있어서,  
상기  $R_3$ 는 메틸, 프로필, 부틸, 페닐기, 비페닐기, 나프탈레닐기, 안트라세닐기, 페난트레닐기, 피레닐기, 트리페닐레닐기, 플루오레닐기, 스파이로비플루오레닐기 및 벤조플루오레닐기로 이루어진 군에서 선택되는 화합물.
- [청구항 8] 제1항에 있어서,  
상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 아래의 화합물로 이루어진 군에서 선택되는 것을 특징으로 하는 화합물:



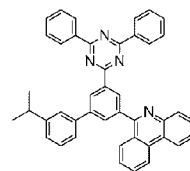
1



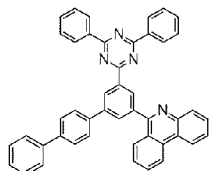
2



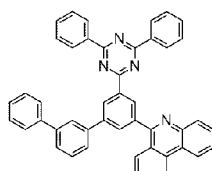
3



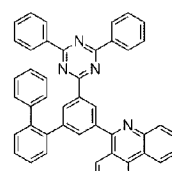
4



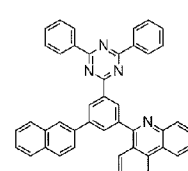
5



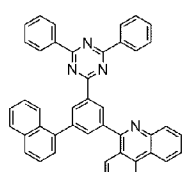
6



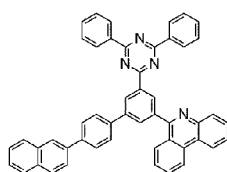
7



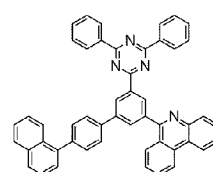
8



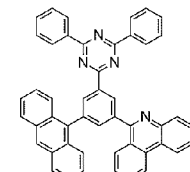
9



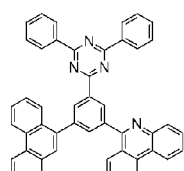
10



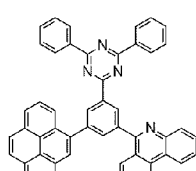
11



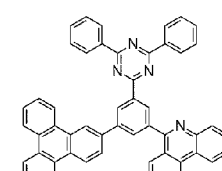
12



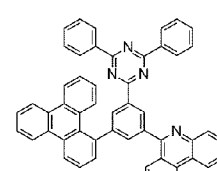
13



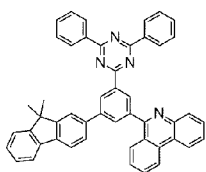
14



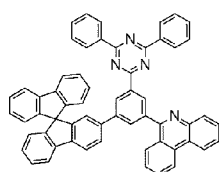
15



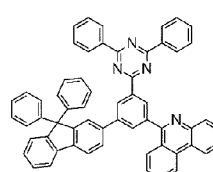
16



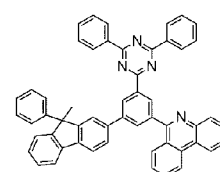
17



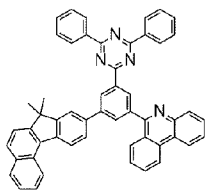
18



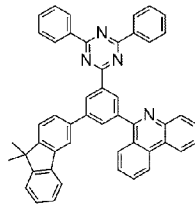
19



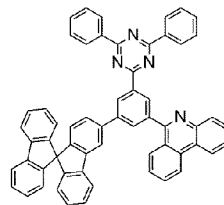
20



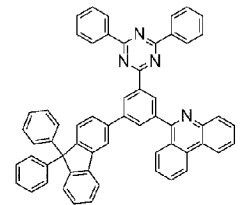
21



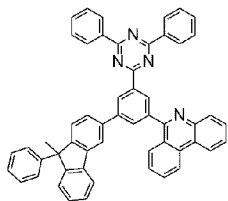
22



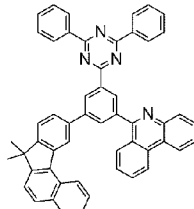
23



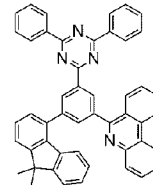
24



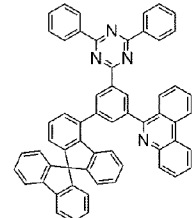
25



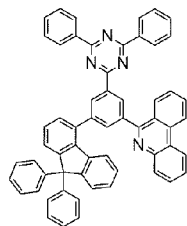
26



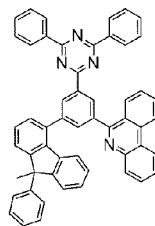
27



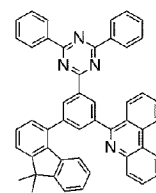
28



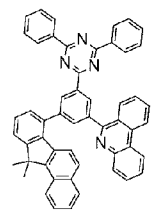
29



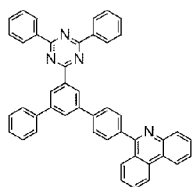
30



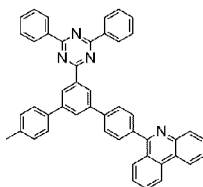
31



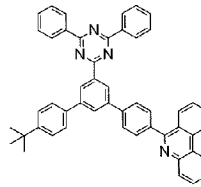
32



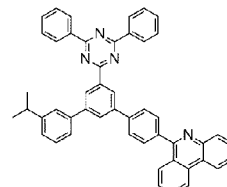
33



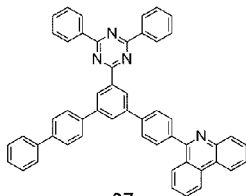
34



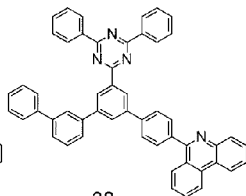
35



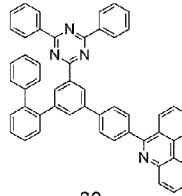
36



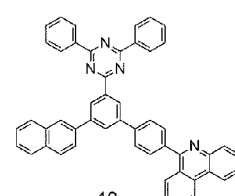
37



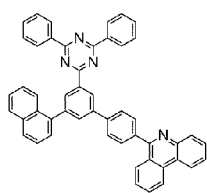
38



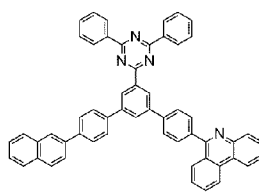
39



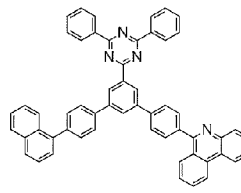
40



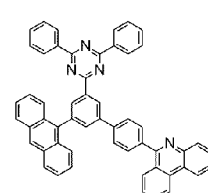
41



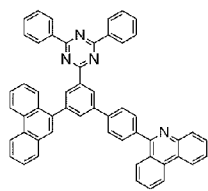
42



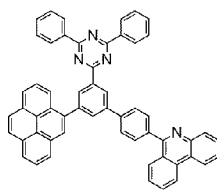
43



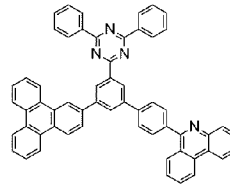
44



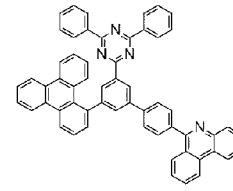
45



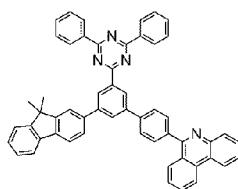
46



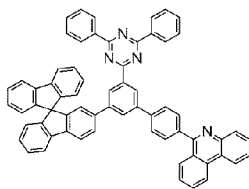
47



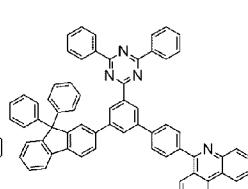
48



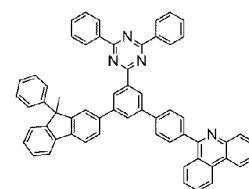
49



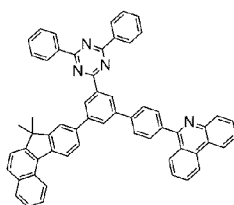
50



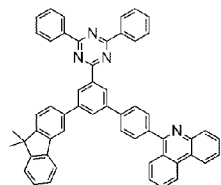
51



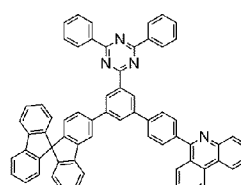
52



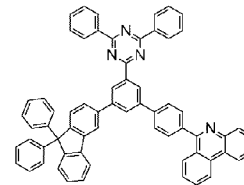
53



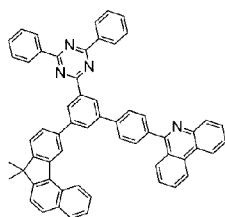
54



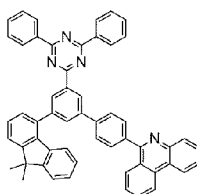
55



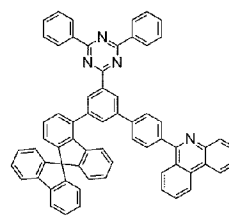
56



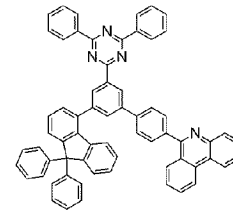
57



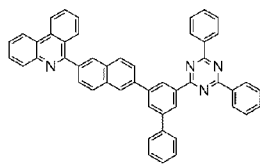
58



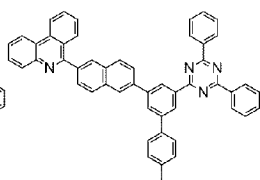
59



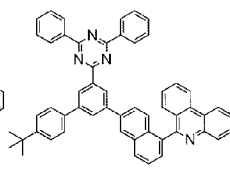
60



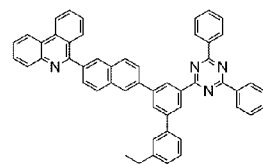
61



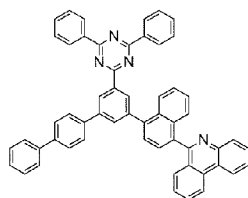
62



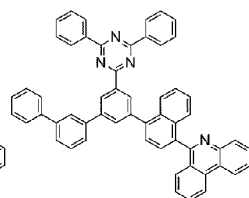
63



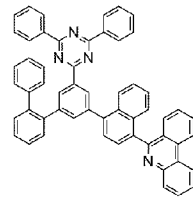
64



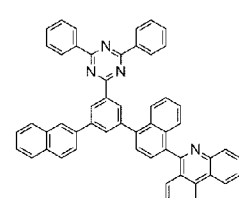
65



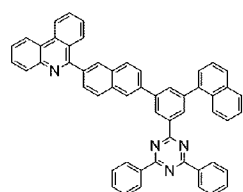
66



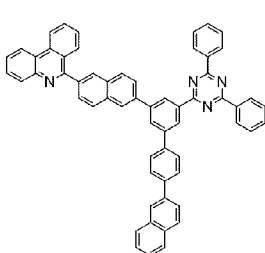
67



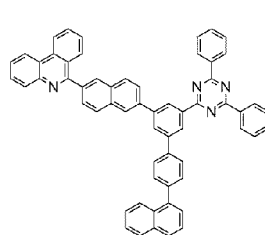
68



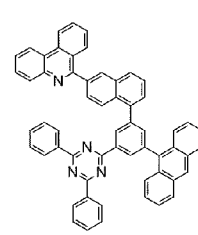
69



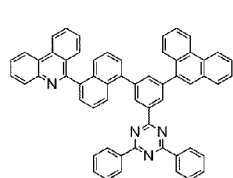
70



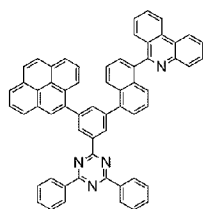
71



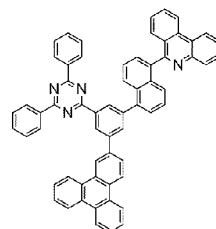
72



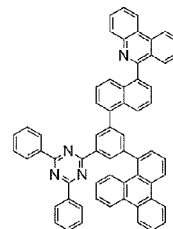
73



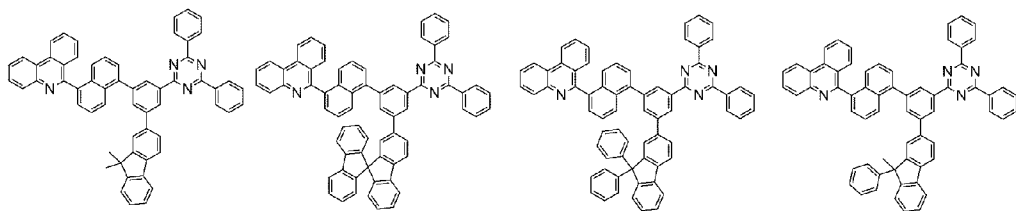
74



75



76

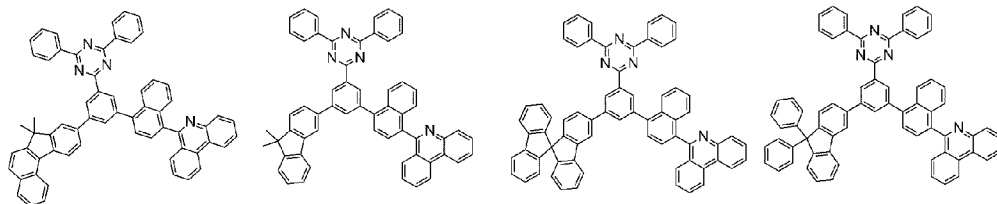


77

78

79

80

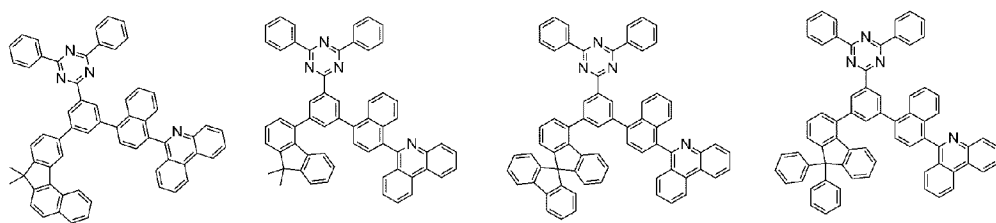


81

82

83

84

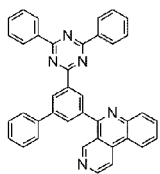


85

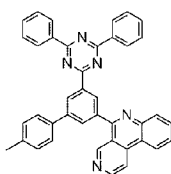
86

87

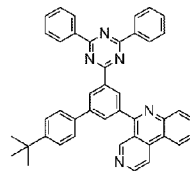
88



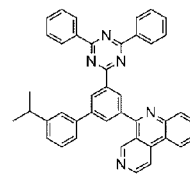
89



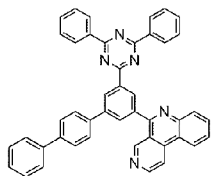
90



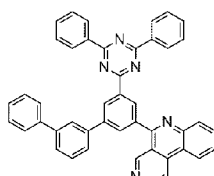
91



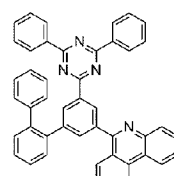
92



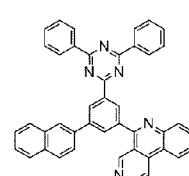
93



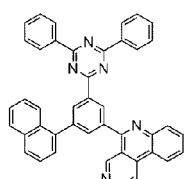
94



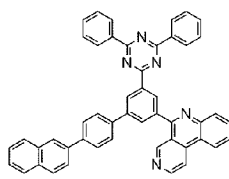
95



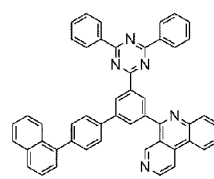
96



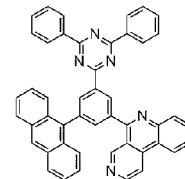
97



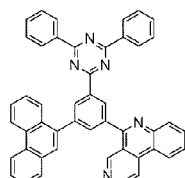
98



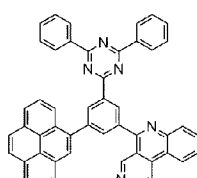
99



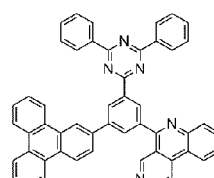
100



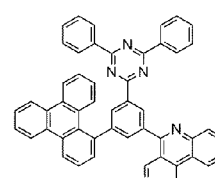
101



102

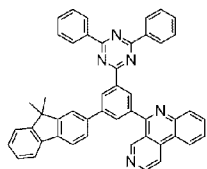


103

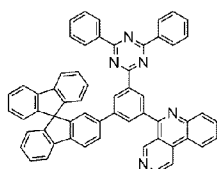


104

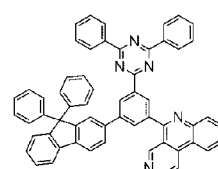




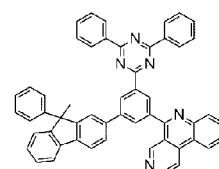
105



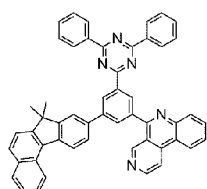
106



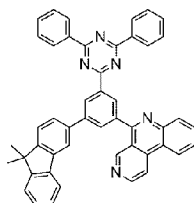
107



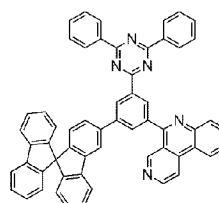
108



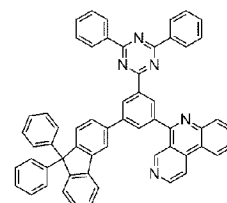
109



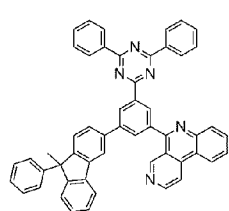
110



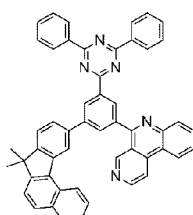
111



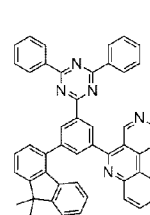
112



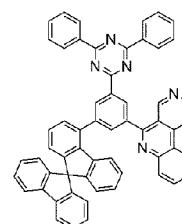
113



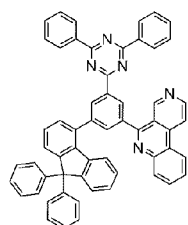
114



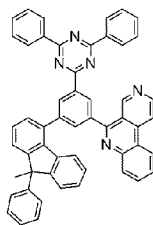
115



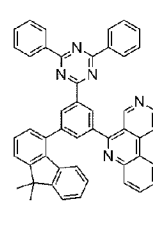
116



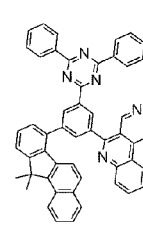
117



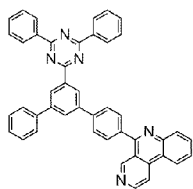
118



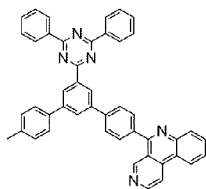
119



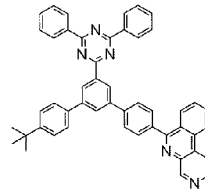
120



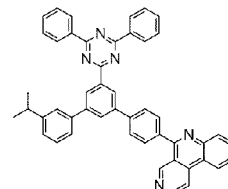
121



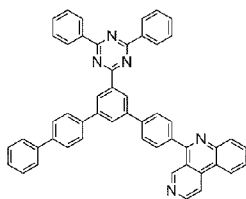
122



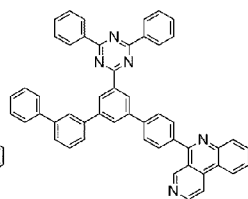
123



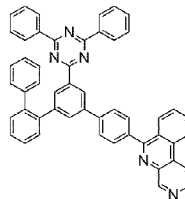
124



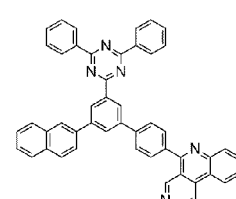
125



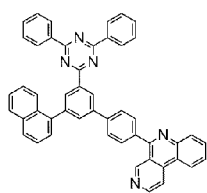
126



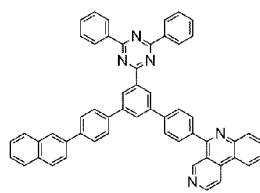
127



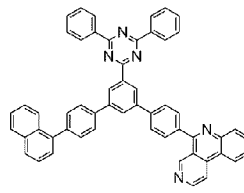
128



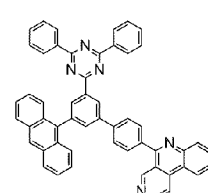
129



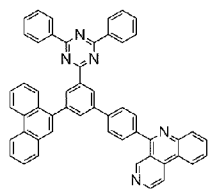
130



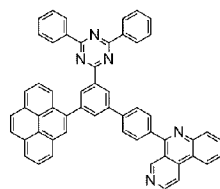
131



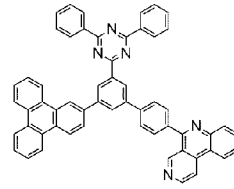
132



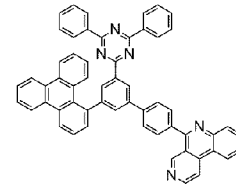
133



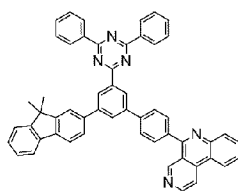
134



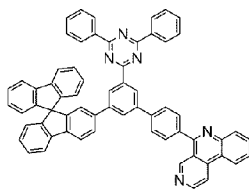
135



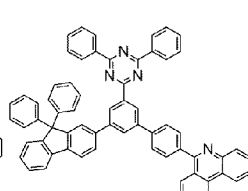
136



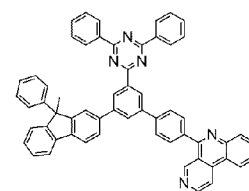
137



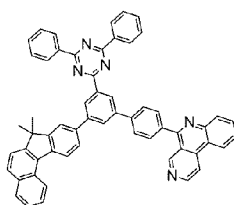
138



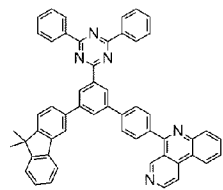
139



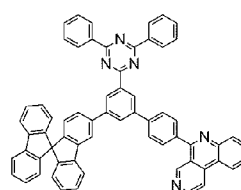
140



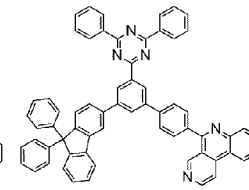
141



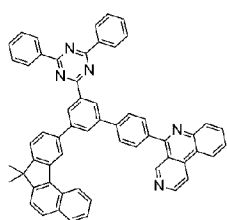
142



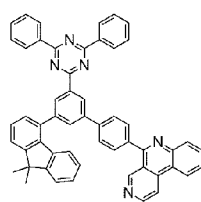
143



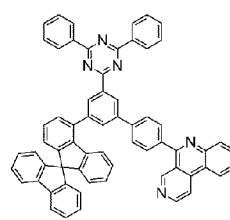
144



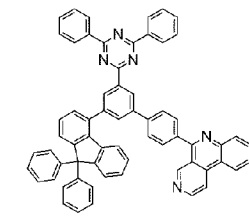
145



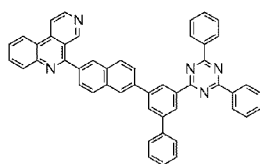
146



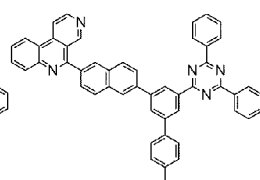
147



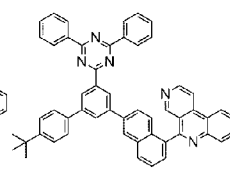
148



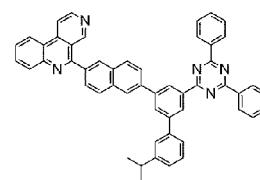
149



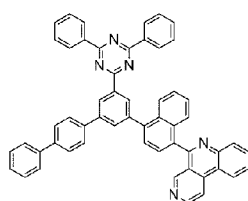
150



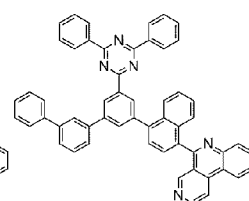
151



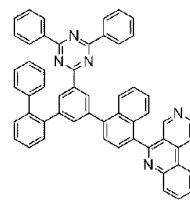
152



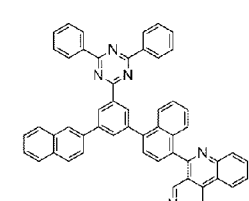
153



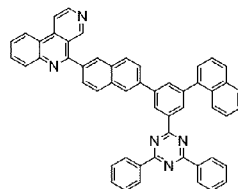
154



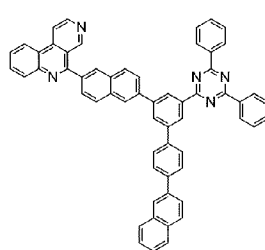
155



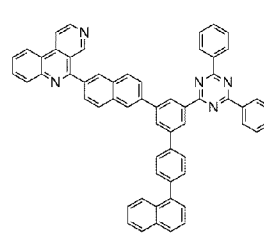
156



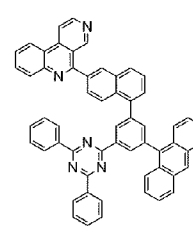
157



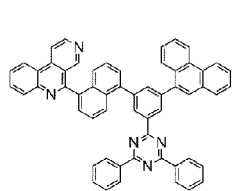
158



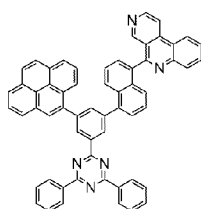
159



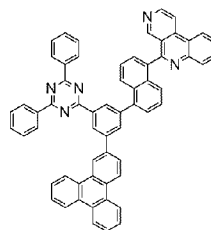
160



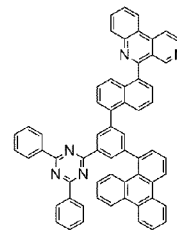
161



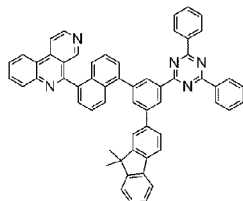
162



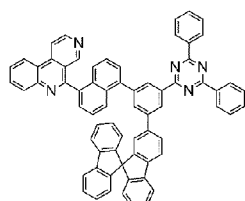
163



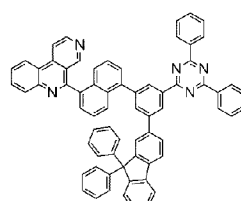
164



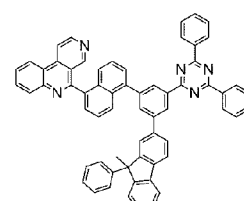
165



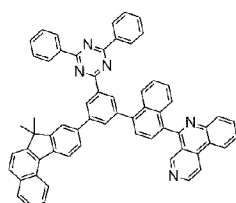
166



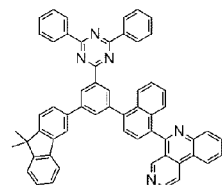
167



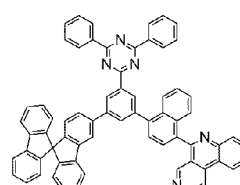
168



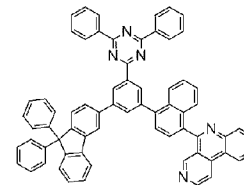
169



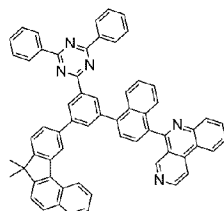
170



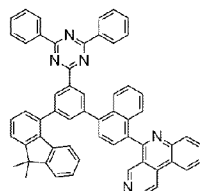
171



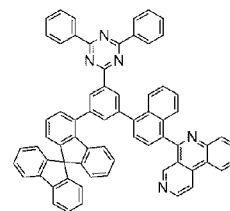
172



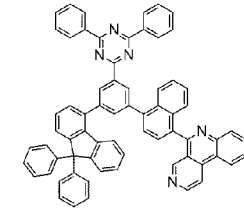
173



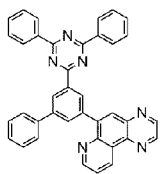
174



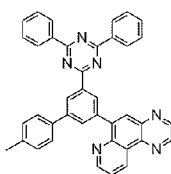
175



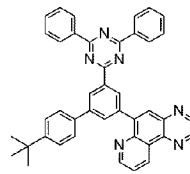
176



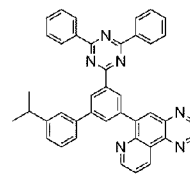
177



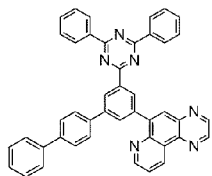
178



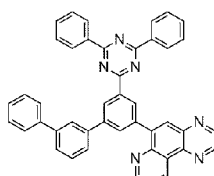
179



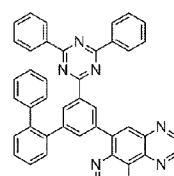
180



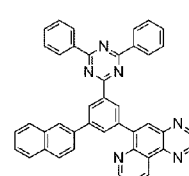
181



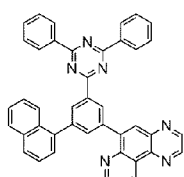
182



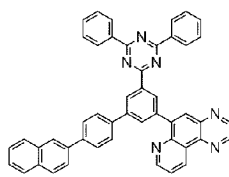
183



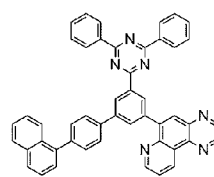
184



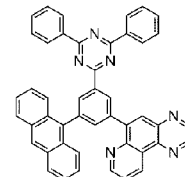
185



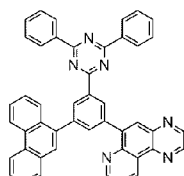
186



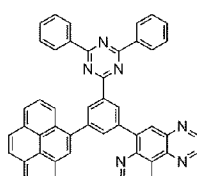
187



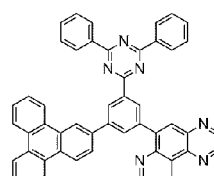
188



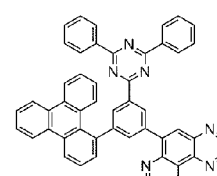
189



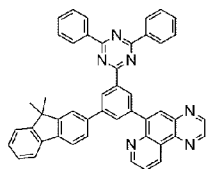
190



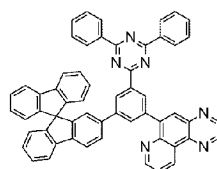
191



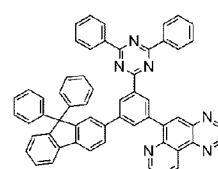
192



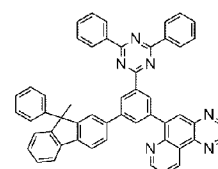
193



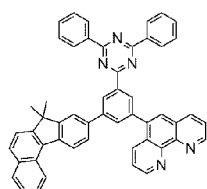
194



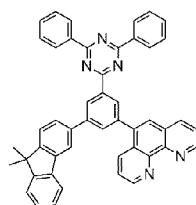
195



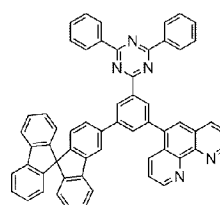
196



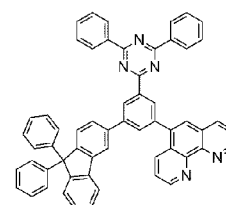
197



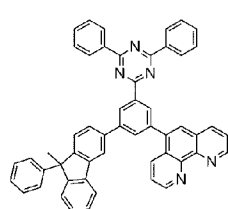
198



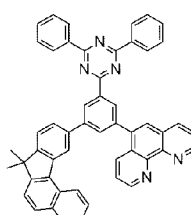
199



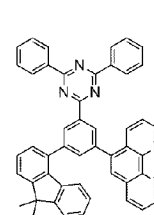
200



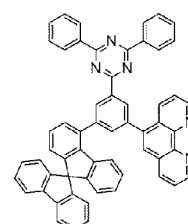
201



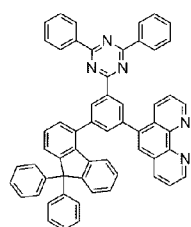
202



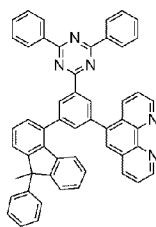
203



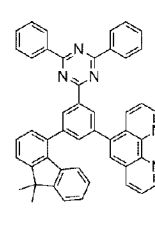
204



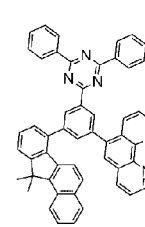
205



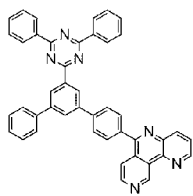
206



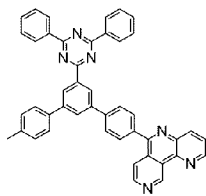
207



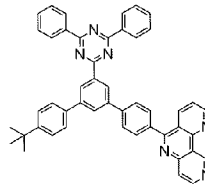
208



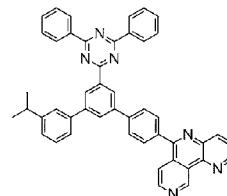
209



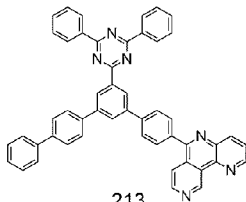
210



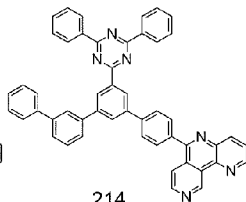
211



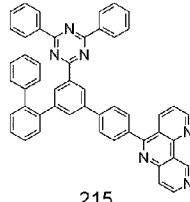
212



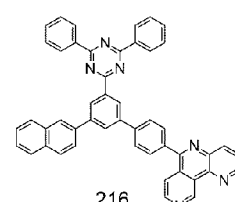
213



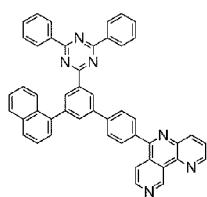
214



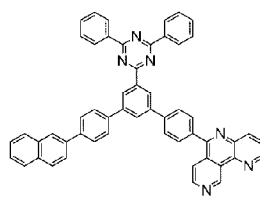
215



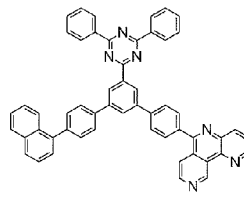
216



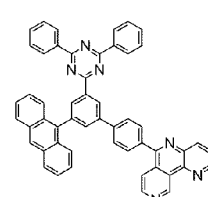
217



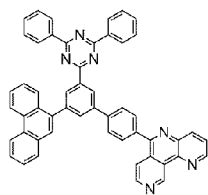
218



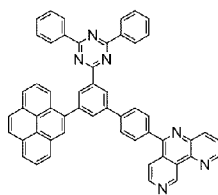
219



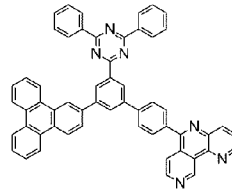
220



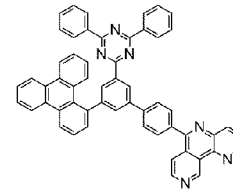
221



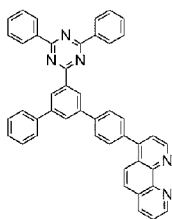
222



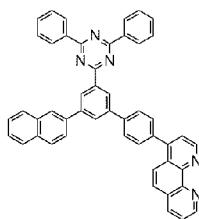
223



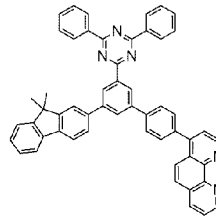
224



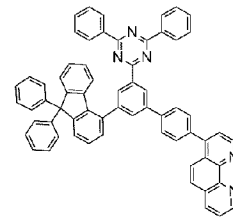
225



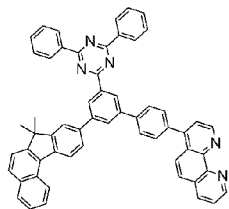
226



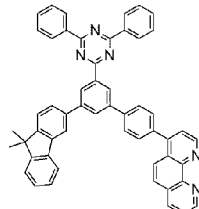
227



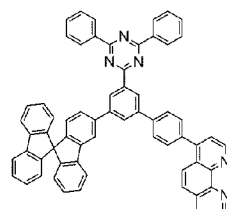
228



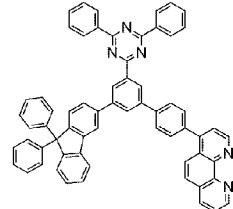
229



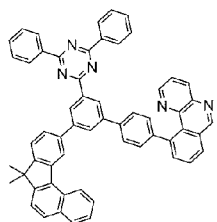
230



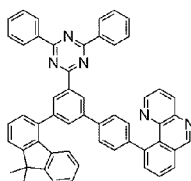
231



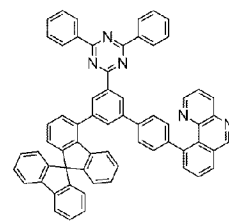
232



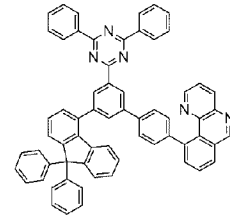
233



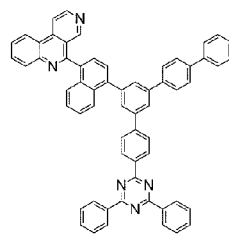
234



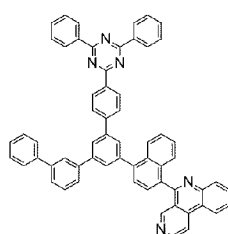
235



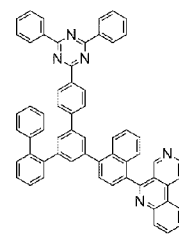
236



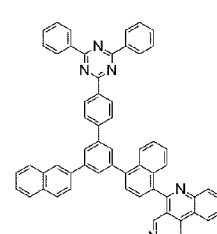
237



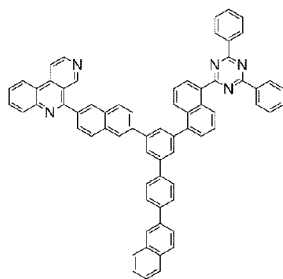
238



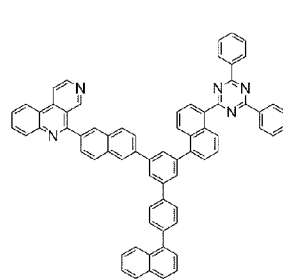
239



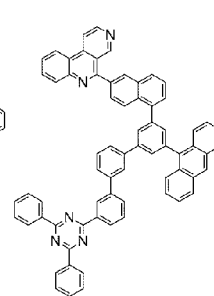
240



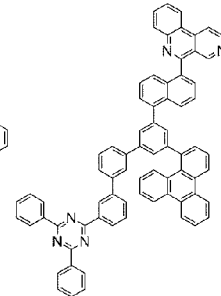
241



242



243



244



## INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/KR2016/013827

## A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER

*C07D 251/12(2006.01)i, C07D 403/10(2006.01)i, C07D 471/04(2006.01)i, C09K 11/06(2006.01)i, H01L 51/50(2006.01)i, H01L 51/00(2006.01)i*

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

## B. FIELDS SEARCHED

Minimum documentation searched (classification system followed by classification symbols)

C07D 251/12; C07D 403/10; C07D 239/70; H01L 51/00; C07D 209/82; C07D 251/24; C07D 239/72; C09K 11/06; C07D 401/14; C07D 401/10; B01D 15/00; C07D 471/04; H01L 51/50

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

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

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

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

eKOMPASS (KIPO internal), STN(Registry, Caplus) & Google & Keywords: organic electric device, organic layer, long lifespan, efficiency

## C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
X	KR 10-2015-0122343 A (DUK SAN NEOLUX CO., LTD.) 02 November 2015 See claims 1, 2, 4, 5; and compounds P-91, P-92.	1-8
X	JP 2010-090034 A (TOSOH CORP. et al.) 22 April 2010 See claims 1, 9; and examples 1, 2.	1-8
X	KR 10-2014-0091049 A (TOSOH CORP. et al.) 18 July 2014 See claims 1, 15; and examples 1, 2, 12-18.	1-8
X	JP 2015-205235 A (TOSOH CORP.) 19 November 2015 See claim 1; and example 3 .	1,3-6
PX	KR 10-2016-0090262 A (LG CHEM. LTD.) 29 July 2016 See claims 1, 6-9; and compounds 1-42, 3-42, 3-44.	1-8
PX	KR 10-2016-0069993 A (LG DISPLAY CO., LTD.) 17 June 2016 See claims 1, 3-7; and compounds E04-E10.	1-8



Further documents are listed in the continuation of Box C.



See patent family annex.

\* Special categories of cited documents:

“A” document defining the general state of the art which is not considered to be of particular relevance

“E” earlier application or patent but published on or after the international filing date

“L” document which may throw doubts on priority claim(s) or which is cited to establish the publication date of another citation or other special reason (as specified)

“O” document referring to an oral disclosure, use, exhibition or other means

“P” document published prior to the international filing date but later than the priority date claimed

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

“X” document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered novel or cannot be considered to involve an inventive step when the document is taken alone

“Y” document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered to involve an inventive step when the document is combined with one or more other such documents, such combination being obvious to a person skilled in the art

“&” document member of the same patent family


Date of the actual completion of the international search

29 MARCH 2017 (29.03.2017)

Date of mailing of the international search report

**29 MARCH 2017 (29.03.2017)**

Name and mailing address of the ISA/KR

 Korean Intellectual Property Office  
Government Complex-Daejeon, 189 Seonsa-ro, Daejeon 302-701,  
Republic of Korea

Facsimile No. 82-42-472-7140

Authorized officer

Telephone No.

**INTERNATIONAL SEARCH REPORT**  
Information on patent family members

International application No.

**PCT/KR2016/013827**

Patent document cited in search report	Publication date	Patent family member	Publication date
KR 10-2015-0122343 A	02/11/2015	NONE	
JP 2010-090034 A	22/04/2010	NONE	
KR 10-2014-0091049 A	18/07/2014	CN 104039773 A	10/09/2014
		CN 104039773 B	24/08/2016
		EP 2778160 A1	17/09/2014
		EP 2778160 A4	18/11/2015
		JP 2014-111548 A	19/06/2014
		JP 6034146 B2	30/11/2016
		TW 201339149 A	01/10/2013
		US 2014-0330013 A1	06/11/2014
		US 9252368 B2	02/02/2016
		WO 2013-069762 A1	16/05/2013
JP 2015-205235 A	19/11/2015	NONE	
KR 10-2016-0090262 A	29/07/2016	NONE	
KR 10-2016-0069993 A	17/06/2016	CN 105679950 A	15/06/2016
		EP 3032605 A1	15/06/2016
		US 2016-0164004 A1	09/06/2016

**A. 발명이 속하는 기술분류(국제특허분류(IPC))**

C07D 251/12(2006.01)i, C07D 403/10(2006.01)i, C07D 471/04(2006.01)i, C09K 11/06(2006.01)i, H01L 51/50(2006.01)i, H01L 51/00(2006.01)i

**B. 조사된 분야**

조사된 최소문헌(국제특허분류를 기재)

C07D 251/12; C07D 403/10; C07D 239/70; H01L 51/00; C07D 209/82; C07D 251/24; C07D 239/72; C09K 11/06; C07D 401/14; C07D 401/10; B01D 15/00; C07D 471/04; H01L 51/50

조사된 기술분야에 속하는 최소문헌 이외의 문헌

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

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

eKOMPASS(특허청 내부 검색시스템) & STN(Registry, Caplus) & Google & 키워드: 유기 전기 소자, 유기물층, 고수명, 효율

**C. 관련 문헌**

카테고리*	인용문헌명 및 관련 구절(해당하는 경우)의 기재	관련 청구항
X	KR 10-2015-0122343 A (덕산네오룩스 주식회사) 2015.11.02 청구항 1, 2, 4, 5; 및 화합물 P-91, P-92 참조.	1-8
X	JP 2010-090034 A (TOSOH CORP. 등) 2010.04.22 청구항 1, 9; 및 실시예 1, 2 참조.	1-8
X	KR 10-2014-0091049 A (토소가부시키가이샤 등) 2014.07.18 청구항 1, 15; 및 실시예 1, 2, 12-18 참조.	1-8
X	JP 2015-205235 A (TOSOH CORP.) 2015.11.19 청구항 1; 및 실시예 3 참조.	1,3-6
PX	KR 10-2016-0090262 A (주식회사 엘지화학) 2016.07.29 청구항 1, 6-9; 및 화합물 1-42, 3-42, 3-44 참조.	1-8
PX	KR 10-2016-0069993 A (엘지디스플레이 주식회사) 2016.06.17 청구항 1, 3-7; 및 화합물 E04-E10 참조.	1-8

추가 문헌이 C(계속)에 기재되어 있습니다.

대응특허에 관한 별지를 참조하십시오.

\* 인용된 문헌의 특별 카테고리:

“A” 특별히 관련이 없는 것으로 보이는 일반적인 기술수준을 정의한 문헌

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

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

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

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

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

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

“&” 동일한 대응특허문헌에 속하는 문헌

“P” 우선일 이후에 공개되었으나 국제출원일 이전에 공개된 문헌

국제조사의 실제 완료일

2017년 03월 29일 (29.03.2017)

국제조사보고서 발송일

2017년 03월 29일 (29.03.2017)

ISA/KR의 명칭 및 우편주소



대한민국 특허청  
(35208) 대전광역시 서구 청사로 189,  
4동 (둔산동, 정부대전청사)

팩스 번호 +82-42-481-8578

심사관

이기철

전화번호 +82-42-481-3353



국제조사보고서에서 인용된 특허문헌	공개일	대응특허문헌	공개일
KR 10-2015-0122343 A	2015/11/02	없음	
JP 2010-090034 A	2010/04/22	없음	
KR 10-2014-0091049 A	2014/07/18	CN 104039773 A CN 104039773 B EP 2778160 A1 EP 2778160 A4 JP 2014-111548 A JP 6034146 B2 TW 201339149 A US 2014-0330013 A1 US 9252368 B2 WO 2013-069762 A1	2014/09/10 2016/08/24 2014/09/17 2015/11/18 2014/06/19 2016/11/30 2013/10/01 2014/11/06 2016/02/02 2013/05/16
JP 2015-205235 A	2015/11/19	없음	
KR 10-2016-0090262 A	2016/07/29	없음	
KR 10-2016-0069993 A	2016/06/17	CN 105679950 A EP 3032605 A1 US 2016-0164004 A1	2016/06/15 2016/06/15 2016/06/09