



(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 공개특허공보(A)

(11) 공개번호 10-2013-0108183
 (43) 공개일자 2013년10월02일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)
C07D 251/24 (2006.01) *C09K 11/06* (2006.01)
H01L 51/50 (2006.01) *B32B 27/06* (2006.01)
 (21) 출원번호 10-2013-0030889
 (22) 출원일자 2013년03월22일
 심사청구일자 없음
 (30) 우선권주장
 61/614,039 2012년03월22일 미국(US)

(71) 출원인
 다우 글로벌 테크놀로지스 엘엘씨
 미국 48674 미시건주 미들랜드 다운 센터 2040
 톰엔드하스전자재료코리아유한회사
 충청남도 천안시 서북구 3공단1로 56 (백석동)
 (72) 발명자
 웰시 던 엠.
 미국, 미시건 48642, 미들랜드, 랜턴 레인 5605
 은다리 마크 이.
 미국, 미시건 48642, 미들랜드, 페더럴 스트리트
 209
 (뒷면에 계속)
 (74) 대리인
 김영, 양영준

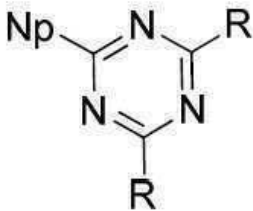
전체 청구항 수 : 총 15 항

(54) 발명의 명칭 전자 수송층 및 이를 함유하는 필름

(57) 요약

본 발명은 2개 이상의 층, 층 A 및 층 B를 포함하고,
 층 A는 하기 화학식 A로부터 선택된 1종 이상의 화합물을 포함하는 조성물 A로부터 형성되고,
 층 B는 1종 이상의 "HTL 화합물"을 포함하는 조성물 B로부터 형성되고,
 층 A는 층 B에 인접하여 있지 않은 필름을 제공한다.

<화학식 A>



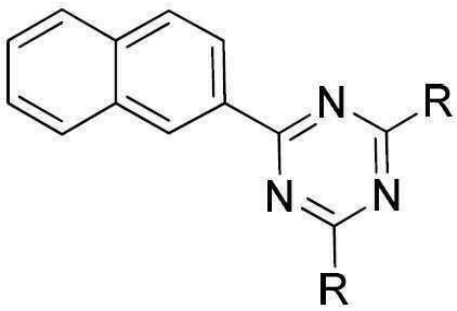
상기 식에서,

Np는 1-나프틸 또는 2-나프틸로부터 선택되고,

R은 각각 본 명세서에서 기술한 바와 같다.

본 발명은 또한 Tg가 115 °C 이상인 하기 화학식 A로부터 선택된 1종 이상의 화합물을 포함하는 조성물을 제공한다.

<화학식 A>



상기 식에서, R은 각각 본 명세서에서 기술한 바와 같다.

(72) 발명자

지 무근

대한민국, 서울, 서초구, 잠원동 65-8

김 봉욱

대한민국, 서울, 강남구, 삼성동50, 힐스테이트
208-401

프로스 로버트 디.

미국, 미시건 48640, 미들랜드, 올슨 로드 200 E.

메이어 매튜 엠.

미국, 미시건 48642, 미들랜드, 콜로라도 스트리트
1610

권 혁주

대한민국 143760, 서울, 강남구, 삼성동, 힐스테이
트 105-2003

최 경훈

대한민국, 화성, 경기도, 화성시, 반송동, 시범단
지 월드반도 아파트 337-801

조 영준

대한민국, 463892, 성남, 봇들마을 2 단지 이지 더
원 아파트, 204-701

특허청구의 범위

청구항 1

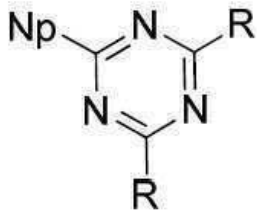
2개 이상의 층, 층 A 및 층 B를 포함하고,

층 A는 하기 화학식 A로부터 선택된 1종 이상의 화합물을 포함하는 조성물 A로부터 형성되고,

층 B는 1종 이상의 "HTL 화합물"을 포함하는 조성물 B로부터 형성되고,

층 A는 층 B에 인접하여 있지 않은 필름.

<화학식 A>



상기 식에서,

Np는 1-나프틸 또는 2-나프틸로부터 선택되고,

R은 각각 독립적으로

- i) 치환기(들)이 있거나 없는 (C6-C30)아릴,
- ii) 치환기(들)이 있거나 없고, 하나 이상의 (C3-C30)시클로알킬과 융합된 치환 또는 미치환 (C6-C30)아릴,
- iii) 치환기(들)이 있거나 없는 (C3-C30)헤테로아릴,
- iv) 치환기(들)이 있거나 없는 5원 내지 7원 헤테로시클로알킬,
- v) 하나 이상의 방향족환(들)과 융합된 치환 또는 미치환 5원 내지 7원 헤테로시클로알킬,
- vi) 치환기(들)이 있거나 없는 (C3-C30)시클로알킬,
- vii) 하나 이상의 방향족환(들)과 융합된 치환 또는 미치환 (C3-C30)시클로알킬,
- viii) 치환기(들)이 있거나 없는 아다만틸, 또는
- ix) 치환기(들)이 있거나 없는 (C7-C30)비시클로알킬로부터 선택된다.

청구항 2

제1항에 있어서, 화학식 A의 R은 각각 독립적으로

- i) 치환기(들)이 있거나 없는 (C6-C30)아릴,
- ii) 치환기(들)이 있거나 없고, 하나 이상의 (C3-C30)시클로알킬과 융합된 치환 또는 미치환 (C6-C30)아릴,
- iii) 치환기(들)이 있거나 없는 (C3-C30)헤테로아릴,
- iv) 치환기(들)이 있거나 없는 5원 내지 7원 헤테로시클로알킬, 또는
- v) 하나 이상의 방향족환(들)과 융합된 치환 또는 미치환 5원 내지 7원 헤테로시클로알킬로부터 선택되는 필름.

청구항 3

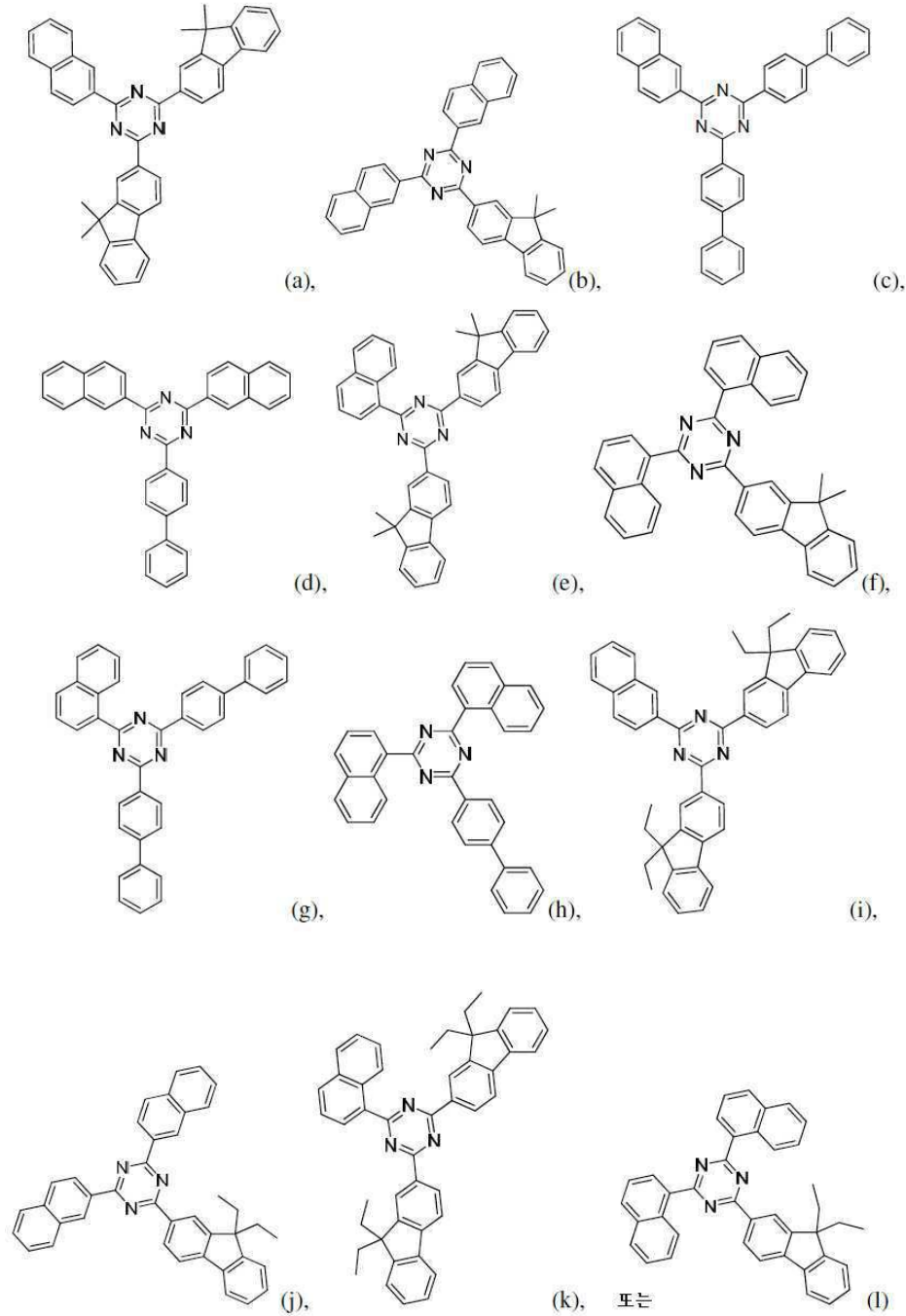
제1항 또는 제2항에 있어서, 화학식 A의 R은 각각 독립적으로

- i) 치환기(들)이 있거나 없는 (C6-C30)아릴, 또는
- ii) 치환기(들)이 있거나 없고, 하나 이상의 (C3-C30)시클로알킬과 융합된 치환 또는 미치환 (C6-C30)아릴로부

터 선택되는 필름.

청구항 4

제1항 내지 제3항 중 어느 한 항에 있어서, 화학식 A는 하기 화합물 (a) 내지(l)로부터 선택되는 필름.



청구항 5

제1항 내지 제4항 중 어느 한 항에 있어서, 조성물 A가 금속 퀴놀레이트를 더 포함하는 필름.

청구항 6

제1항 내지 제5항 중 어느 한 항에 따른 필름으로부터 형성된 하나 이상의 구성 요소를 포함하는 물품.

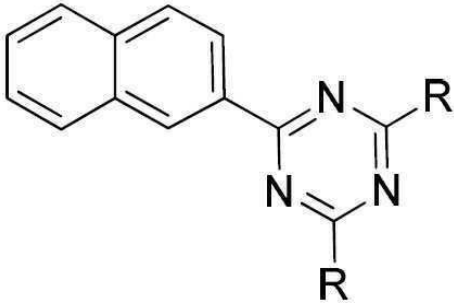
청구항 7

제6항에 있어서, 유기 전계 발광 소자인 물품.

청구항 8

Tg가 115 °C 이상인 하기 화학식 A로부터 선택된 1종 이상의 화합물을 포함하는 조성물.

<화학식 A>



상기 식에서,

R은 각각 독립적으로

- i) 치환기(들)이 있거나 없는 (C6-C30)아릴,
- ii) 치환기(들)이 있거나 없고, 하나 이상의 (C3-C30)시클로알킬과 융합된 치환 또는 미치환 (C6-C30)아릴,
- iii) 치환기(들)이 있거나 없는 (C3-C30)헤테로아릴,
- iv) 치환기(들)이 있거나 없는 5원 내지 7원 헤테로시클로알킬,
- v) 하나 이상의 방향족환(들)과 융합된 치환 또는 미치환 5원 내지 7원 헤테로시클로알킬,
- vi) 치환기(들)이 있거나 없는 (C3-C30)시클로알킬,
- vii) 하나 이상의 방향족환(들)과 융합된 치환 또는 미치환 (C3-C30)시클로알킬,
- viii) 치환기(들)이 있거나 없는 아다만틸, 또는
- ix) 치환기(들)이 있거나 없는 (C7-C30)비시클로알킬로부터 선택된다.

청구항 9

제8항에 있어서, 화학식 A의 R은 각각 독립적으로

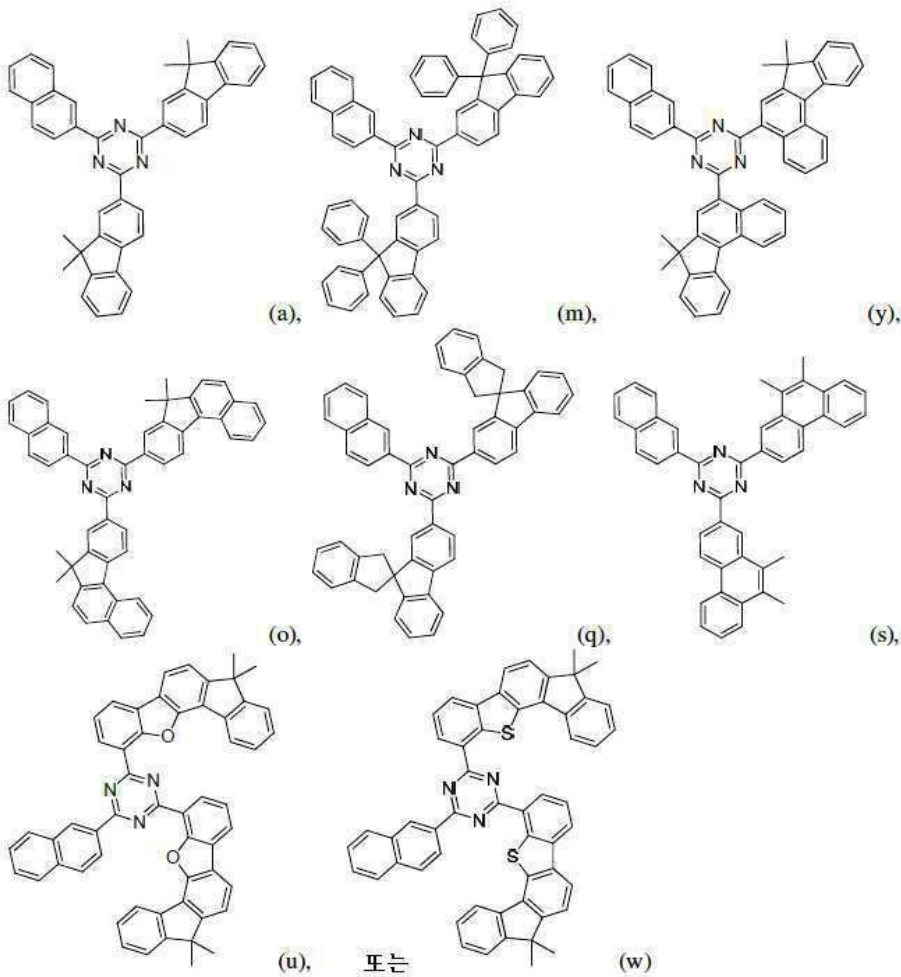
- i) 치환기(들)이 있거나 없는 (C6-C30)아릴, 또는
- iii) 치환기(들)이 있거나 없는 (C3-C30)헤테로아릴로부터 선택되는 조성물.

청구항 10

제8항 또는 제9항에 있어서, 화합물의 삼중항 에너지가 2.1 eV를 넘는 조성물.

청구항 11

제8항 내지 제10항 중 어느 한 항에 있어서, 화합물이 다음



으로 이루어진 군으로부터

터 선택되는 조성물.

청구항 12

제8항 내지 제11항 중 어느 한 항에 있어서, 금속 퀴놀레이트를 더 포함하는 조성물.

청구항 13

제8항 내지 제12항 중 어느 한 항에 따른 조성물로부터 형성된 하나 이상의 구성 요소를 포함하는 필름.

청구항 14

제8항 내지 제12항 중 어느 한 항에 따른 조성물로부터 형성된 하나 이상의 구성 요소를 포함하는 물품.

청구항 15

제14항에 있어서, 유기 전계 발광 소자인 물품.

명세서

기술분야

[0001] 본 발명은 2012년 3월 22일 출원된 미국 가특허출원 제 61/614,039 호의 이점을 주장한다.

배경기술

[0002] 전계 발광 (EL) 소자는 유기 방향족 화합물을 함유하는 필름의 스택을 전계 발광 층으로서 사용하는 디스플레이 소자이다. 그러한 화합물은 일반적으로 전계 발광 물질 및 전하 수송 물질로서 분류된다. 그러한 전계 발광

및 전하 수송 화합물에 요구되는 여러 특성에는 고체 상태에서 높은 형광 양자 수율, 전자 및 정공의 높은 이동도, 진공에서 증착 중 화학적 안정성, 및 안정한 필름을 형성하는 능력이 포함된다. 상기 요구되는 특징은 EL 소자의 수명을 증가시킨다. 향상된 전계 발광 화합물 및 이를 함유하는 필름에 대한 지속적인 필요성이 있다. 출원인은 특정 트리아진-기반의 화합물을 함유하는 특정 필름 구성이 향상된 발광 특성을 가짐을 발견했다.

[0003] 국제 공보 WO 2010/126270은 유기 전계 발광 화합물에 사용하는 치환된 트리아진 화합물, 및 상기 화합물을 사용하는 유기 전계 발광 소자를 개시하였다. 유기 전계발광 소자의 전자 수송 층에 사용될 경우, 그 화합물은 상기 소자의 소비 전력 및 작동 전압을 감소시킨다.

[0004] U.S. 공보 2006/0251919A1은 전계 발광 물질 층 및 전자 수송 층을 포함하는 유기 발광 소자 (OLED)를 개시하였고, 여기서 전계 발광 물질 층은 상이한 전자 및 정공 수송 능력을 가진 2종 이상의 물질의 혼합물을 포함하고, 전자 수송 층은 트리아진을 포함한다. 개시된 OLED는 트리아진을 함유한 전자 수송 층을 포함할 수 있다.

[0005] U.S. 특허 6,225,467은 트리아진 화합물을 포함한 전자 수송 구성 요소를 함유한 EL 소자를 개시하였다. 그러한 소자는 TV 스크린, 컴퓨터 스크린 등을 비롯한 평판 자발광형 디스플레이 기술에 사용에 가능한 것으로 개시되었다. U.S. 특허 7,807,276은 유기 LED를 위한 발광층을 개시하였고, 여기서 발광층은 1종 이상의 전자 수송 화합물, 1종 이상의 정공 수송 화합물 및 희토류 금속 이온 화합물을 포함한다. 발광층은 1종 이상의 엑시톤 전도 화합물을 더 포함한다. 특정 트리아진이 전자 수송 화합물로서 개시되어 있다. 또한, US 특허 7,994,316B2는 유기 전계 발광 소자의 구성 요소로서 사용하는 1,3,5-트리아진 유도체를 개시하고 있다.

발명의 내용

해결하려는 과제

[0006] 그러나, 상기 기술된 바와 같이, 새로운 전계 발광 화합물을 함유하고, 향상된 발광 특성을 가진, 새로운 필름 구성에 대한 필요성이 남아있다. 상기의 필요성 및 그외는 하기 본 발명에 의해 충족되었다.

과제의 해결 수단

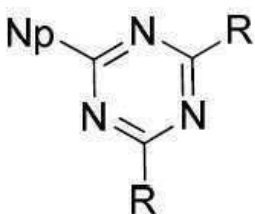
[0007] 본 발명은 첫째로 2개 이상의 층, 층 A 및 층 B를 포함하고,

[0008] 층 A는 하기 화학식 A로부터 선택된 1종 이상의 화합물을 포함하는 조성물 A로부터 형성되고,

[0009] 층 B는 1종 이상의 "HTL 화합물"을 포함하는 조성물 B로부터 형성되고,

[0010] 층 A는 층 B에 인접하여 있지 않은 필름을 제공한다.

[0011] <화학식 A>



[0012]

[0013] 상기 식에서,

[0014] Np는 1-나프틸 또는 2-나프틸로부터 선택되고,

[0015] R은 각각 독립적으로

[0016] i) 치환기(들)이 있거나 없는 (C6-C30)아릴,

[0017] ii) 치환기(들)이 있거나 없고, 하나 이상의 (C3-C30)시클로알킬과 융합된 치환 또는 미치환 (C6-C30)아릴,

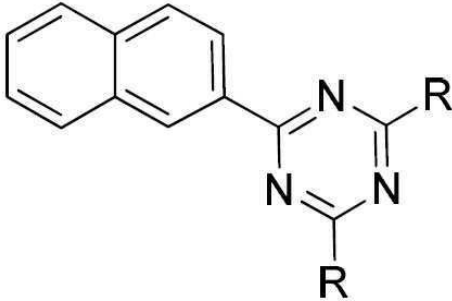
[0018] iii) 치환기(들)이 있거나 없는 (C3-C30)헤테로아릴,

[0019] iv) 치환기(들)이 있거나 없는 5원 내지 7원 헤테로시클로알킬,

[0020] v) 하나 이상의 방향족환(들)과 융합된 치환 또는 미치환 5원 내지 7원 헤테로시클로알킬,

- [0021] vi) 치환기(들)이 있거나 없는 (C3-C30)시클로알킬,
- [0022] vii) 하나 이상의 방향족환(들)과 융합된 치환 또는 미치환 (C3-C30)시클로알킬,
- [0023] viii) 치환기(들)이 있거나 없는 아다만틸, 또는
- [0024] ix) 치환기(들)이 있거나 없는 (C7-C30)비시클로알킬로부터 선택된다.
- [0025] 본 발명은 둘째로 Tg가 115 °C 이상인 하기 화학식 A로부터 선택된 1종 이상의 화합물을 포함하는 조성물을 제공한다.

[0026] <화학식 A>



- [0027] 상기 식에서,
- [0028] R은 각각 독립적으로
- [0030] i) 치환기(들)이 있거나 없는 (C6-C30)아릴,
- [0031] ii) 치환기(들)이 있거나 없고, 하나 이상의 (C3-C30)시클로알킬과 융합된 치환 또는 미치환 (C6-C30)아릴,
- [0032] iii) 치환기(들)이 있거나 없는 (C3-C30)헤테로아릴,
- [0033] iv) 치환기(들)이 있거나 없는 5원 내지 7원 헤테로시클로알킬,
- [0034] v) 하나 이상의 방향족환(들)과 융합된 치환 또는 미치환 5원 내지 7원 헤테로시클로알킬,
- [0035] vi) 치환기(들)이 있거나 없는 (C3-C30)시클로알킬,
- [0036] vii) 하나 이상의 방향족환(들)과 융합된 치환 또는 미치환 (C3-C30)시클로알킬,
- [0037] viii) 치환기(들)이 있거나 없는 아다만틸, 또는
- [0038] ix) 치환기(들)이 있거나 없는 (C7-C30)비시클로알킬로부터 선택된다.

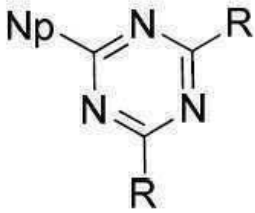
발명의 효과

[0039] 본 발명의 화합물은 OLED 소자와 같은 전자 소자에서 전하 수송 층 및 다른 층으로서 사용될 수 있다. 예를 들어, 본 발명의 화합물은 전하 차단 층 및 전하 생성 층으로서 사용될 수 있다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

- [0040] 상기한 바와 같이, 본 발명은 첫째로 2개 이상의 층, 층 A 및 층 B를 포함하고,
- [0041] 층 A는 하기 화학식 A로부터 선택된 1종 이상의 화합물을 포함하는 조성물 A로부터 형성되고,
- [0042] 층 B는 1종 이상의 "HTL 화합물"을 포함하는 조성물 B로부터 형성되고,
- [0043] 층 A는 층 B에 인접하여 있지 않은 필름을 제공한다.

[0044] <화학식 A>



[0045]

[0046] 상기 식에서,

[0047] Np는 1-나프틸 또는 2-나프틸로부터 선택되고,

[0048] R은 각각 독립적으로

[0049] i) 치환기(들)이 있거나 없는 (C6-C30)아릴,

[0050] ii) 치환기(들)이 있거나 없고, 하나 이상의 (C3-C30)시클로알킬과 융합된 치환 또는 미치환 (C6-C30)아릴,

[0051] iii) 치환기(들)이 있거나 없는 (C3-C30)헤테로아릴,

[0052] iv) 치환기(들)이 있거나 없는 5원 내지 7원 헤테로시클로알킬,

[0053] v) 하나 이상의 방향족환(들)과 융합된 치환 또는 미치환 5원 내지 7원 헤테로시클로알킬,

[0054] vi) 치환기(들)이 있거나 없는 (C3-C30)시클로알킬,

[0055] vii) 하나 이상의 방향족환(들)과 융합된 치환 또는 미치환 (C3-C30)시클로알킬,

[0056] viii) 치환기(들)이 있거나 없는 아다만틸, 또는

[0057] ix) 치환기(들)이 있거나 없는 (C7-C30)비시클로알킬로부터 선택된다.

[0058] 한 실시양태에서, 조성물 A는 화학식 A로부터 선택된 2종 이상의 화합물을 포함한다.

[0059] 한 실시양태에서, 조성물 A는 화학식 A로부터 선택된 1종의 화합물을 포함한다.

[0060] 한 실시양태에서, 조성물 A는 조성물의 중량을 기준으로 하여 10 내지 90 중량%의 화학식 A의 1종 이상의 화합물을 포함한다. 다른 실시양태에서, 조성물 A는 조성물의 중량을 기준으로 하여 50 내지 90 중량%의 화학식 A의 1종 이상의 화합물을 포함한다. 또 다른 실시양태에서, 조성물 A는 조성물의 중량을 기준으로 하여 50 내지 80 중량%의 화학식 A의 1종 이상의 화합물을 포함한다.

[0061] 한 실시양태에서, 조성물 A는 금속 퀴놀레이트를 더 포함한다. 다른 실시양태에서, 금속 퀴놀레이트는 리튬 퀴놀레이트이다.

[0062] 한 실시양태에서, 조성물 A는 조성물의 중량을 기준으로 하여 10 내지 90 중량%의 금속 퀴놀레이트를 포함한다. 다른 실시양태에서, 조성물 A는 조성물의 중량을 기준으로 하여 10 내지 50 중량%의 금속 퀴놀레이트를 포함한다. 또 다른 실시양태에서, 조성물 A는 조성물의 중량을 기준으로 하여 20 내지 50 중량%의 금속 퀴놀레이트를 포함한다.

[0063] 한 실시양태에서, 조성물 A는 화학식 A의 화합물과 금속 퀴놀레이트의 합계 중량을 기준으로 하여 10 내지 90 중량%의 금속 퀴놀레이트를 포함한다. 다른 실시양태에서, 조성물 A는 화학식 A의 화합물과 금속 퀴놀레이트의 합계 중량을 기준으로 하여 10 내지 50 중량%의 금속 퀴놀레이트를 포함한다. 또 다른 실시양태에서, 조성물 A는 화학식 A의 화합물과 금속 퀴놀레이트의 합계 중량을 기준으로 하여 20 내지 50 중량%의 금속 퀴놀레이트를 포함한다.

[0064] 한 실시양태에서, 조성물 A는 조성물의 중량을 기준으로 하여 10 내지 90 중량%의 리튬 퀴놀레이트를 포함한다. 다른 실시양태에서, 조성물 A는 조성물의 중량을 기준으로 하여 10 내지 50 중량%의 리튬 퀴놀레이트를 포함한다. 또 다른 실시양태에서, 조성물 A는 조성물의 중량을 기준으로 하여 20 내지 50 중량%의 리튬 퀴놀레이트를 포함한다.

[0065] 한 실시양태에서, 조성물 A는 화학식 A의 화합물과 리튬 퀴놀레이트의 합계 중량을 기준으로 하여 10 내지 90

중량%의 리튬 퀴놀레이트를 포함한다. 다른 실시양태에서, 조성물 A는 화학식 A의 화합물과 리튬 퀴놀레이트의 합계 중량을 기준으로 하여 10 내지 50 중량%의 리튬 퀴놀레이트를 포함한다. 또 다른 실시양태에서, 조성물 A는 화학식 A의 화합물과 리튬 퀴놀레이트의 합계 중량을 기준으로 하여 20 내지 50 중량%의 리튬 퀴놀레이트를 포함한다.

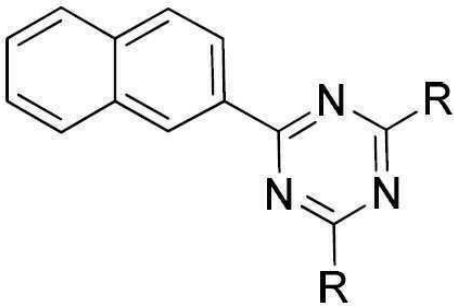
[0066] 또한, 본 발명은 본 발명의 필름으로부터 형성된 1종 이상의 구성 요소를 포함하는 물품을 제공한다. 다른 실시양태에서, 물품은 유기 전계 발광 소자이다.

[0067] 본 발명의 필름은 본 명세서에서 기술하는 2 이상의 실시양태의 조합일 수 있다.

[0068] 본 발명의 물품은 본 명세서에서 기술하는 2 이상의 실시양태의 조합일 수 있다.

[0069] 본 발명은 둘째로 Tg가 115 °C 이상인 하기 화학식 A로부터 선택된 1종 이상의 화합물을 포함하는 조성물을 제공한다.

[0070] <화학식 A>



[0071]

[0072] 상기 식에서,

[0073] R은 각각 독립적으로

[0074] i) 치환기(들)이 있거나 없는 (C6-C30)아릴,

[0075] ii) 치환기(들)이 있거나 없고, 하나 이상의 (C3-C30)시클로알킬과 융합된 치환 또는 미치환 (C6-C30)아릴,

[0076] iii) 치환기(들)이 있거나 없는 (C3-C30)헤테로아릴,

[0077] iv) 치환기(들)이 있거나 없는 5원 내지 7원 헤테로시클로알킬,

[0078] v) 하나 이상의 방향족환(들)과 융합된 치환 또는 미치환 5원 내지 7원 헤테로시클로알킬,

[0079] vi) 치환기(들)이 있거나 없는 (C3-C30)시클로알킬,

[0080] vii) 하나 이상의 방향족환(들)과 융합된 치환 또는 미치환 (C3-C30)시클로알킬,

[0081] viii) 치환기(들)이 있거나 없는 아다만틸, 또는

[0082] ix) 치환기(들)이 있거나 없는 (C7-C30)비시클로알킬로부터 선택된다.

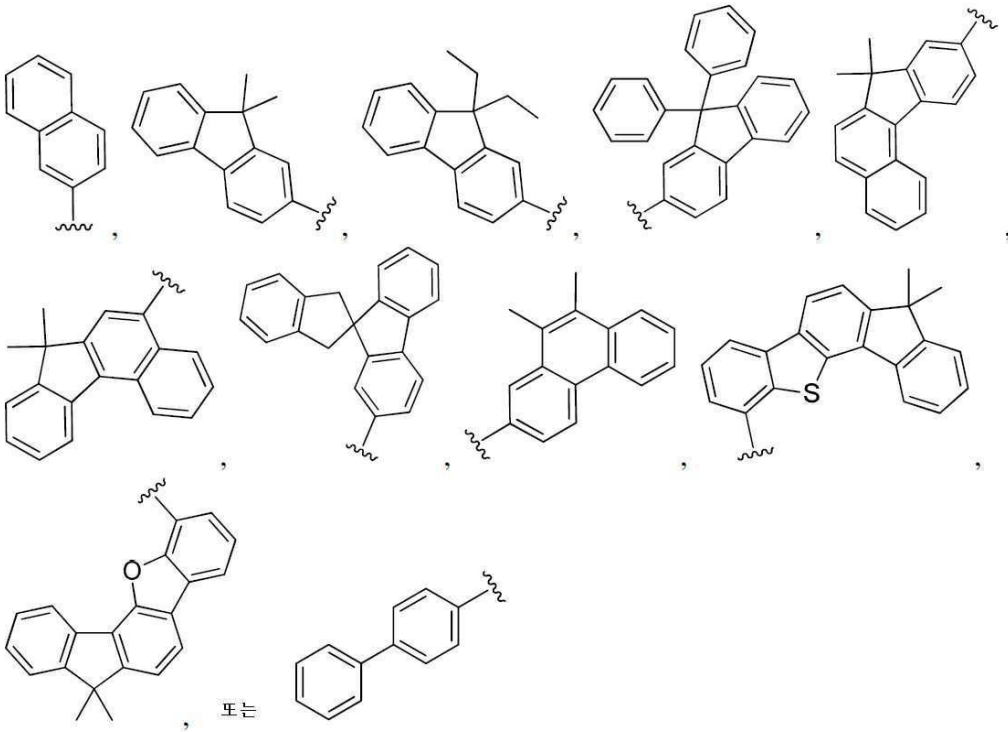
[0083] 한 실시양태에서, 화학식 A의 R은 각각 독립적으로

[0084] i) 치환기(들)이 있거나 없는 (C6-C30)아릴, 또는

[0085] iii) 치환기(들)이 있거나 없는 (C3-C30)헤테로아릴로부터 선택된다.

[0086] 한 실시양태에서, 화합물의 삼중항 에너지가 2.1 eV 초과이다.

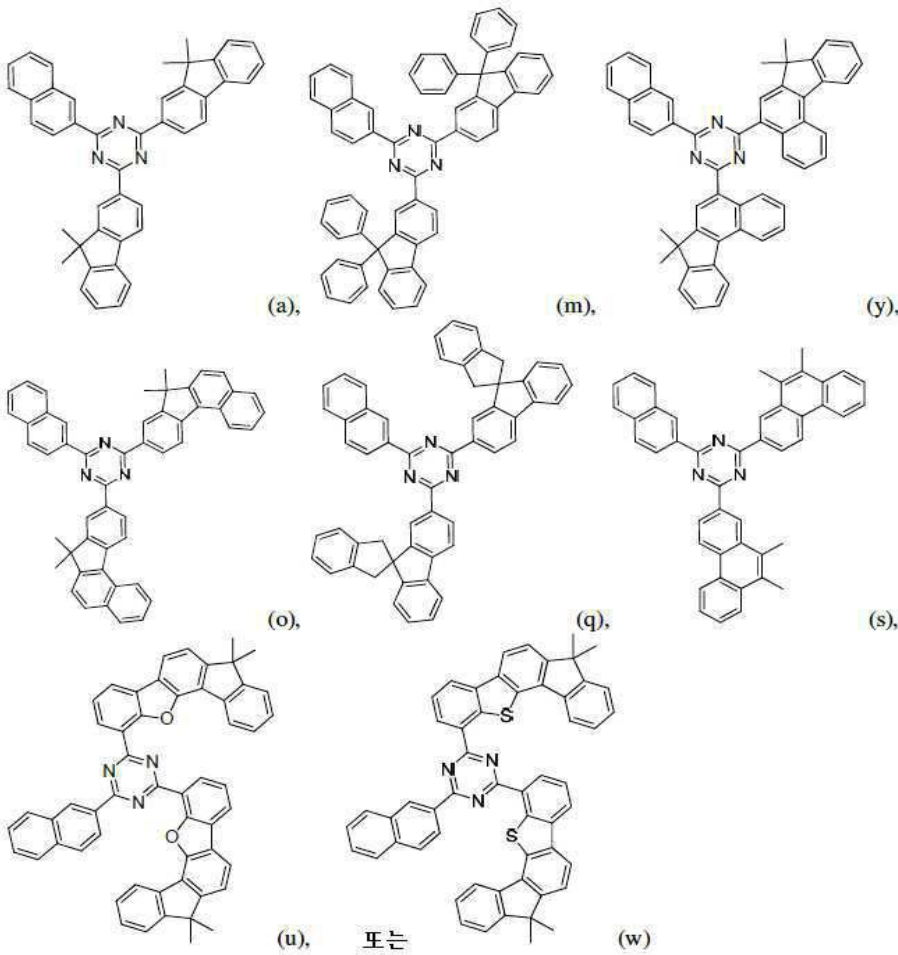
[0087] 한 실시양태에서, 화학식 A의 R은 각각 독립적으로



[0088] 로부터 선택된다.

[0089] 상기 구조식에서, 현행의 IUPAC 표준 [문헌: *Pure Appl. Chem.*, 2008, 80, 277 (*Graphical representation standards for chemical structural diagrams*)]이 권장하는 대로, 각 치환기의 외부 연결 지점은 물결모양 선으로 나타낸다.

[0090] 한 실시양태에서, 화합물은 다음



- [0091] 으로 이루어진 군으로부터 선택된다.
- [0092] 한 실시양태에서, 화학식 A의 화합물의 분자량은 450 g/몰 이상이다.
- [0093] 한 실시양태에서, 화학식 A의 화합물의 분자량은 450 내지 800 g/몰이다.
- [0094] 한 실시양태에서, 화학식 A의 화합물은 하나 이상의 중수소 원자를 포함한다.
- [0095] 한 실시양태에서, 화학식 A의 화합물의 순도는 99 %를 넘는다.
- [0096] 한 실시양태에서, 화학식 A의 화합물의 HOMO 준위는 -5.3 eV 내지 -5.9 eV이다.
- [0097] 한 실시양태에서, 화학식 A의 화합물의 LUMO 준위는 -1.80 eV 내지 -2.05 eV이다.
- [0098] 한 실시양태에서, 화학식 A의 화합물의 λ 값은 0.30 이하이다.
- [0099] 한 실시양태에서, 조성물은 화학식 A로부터 선택된 2종 이상의 화합물을 포함한다.
- [0100] 한 실시양태에서, 조성물은 화학식 A로부터 선택된 1종의 화합물을 포함한다.
- [0101] 한 실시양태에서, 조성물은 조성물의 중량을 기준으로 하여 10 내지 90 중량%의 화학식 A의 1종 이상의 화합물을 포함한다. 다른 실시양태에서, 조성물은 조성물의 중량을 기준으로 하여 50 내지 90 중량%의 화학식 A의 1종 이상의 화합물을 포함한다. 또 다른 실시양태에서, 조성물은 조성물의 중량을 기준으로 하여 50 내지 80 중량%의 화학식 A의 1종 이상의 화합물을 포함한다.
- [0102] 한 실시양태에서, 조성물은 금속 퀴놀레이트를 더 포함한다. 다른 실시양태에서, 금속 퀴놀레이트는 리튬 퀴놀레이트이다.
- [0103] 한 실시양태에서, 조성물은 조성물의 중량을 기준으로 하여 10 내지 90 중량%의 금속 퀴놀레이트를 포함한다. 다른 실시양태에서, 조성물은 조성물의 중량을 기준으로 하여 10 내지 50 중량%의 금속 퀴놀레이트를 포함한다.

또 다른 실시양태에서, 조성물은 조성물의 중량을 기준으로 하여 20 내지 50 중량%의 금속 퀴놀레이트를 포함한다.

[0104] 한 실시양태에서, 조성물은 화학식 A의 화합물과 금속 퀴놀레이트의 합계 중량을 기준으로 하여 10 내지 90 중량%의 금속 퀴놀레이트를 포함한다. 다른 실시양태에서, 조성물은 화학식 A의 화합물과 금속 퀴놀레이트의 합계 중량을 기준으로 하여 10 내지 50 중량%의 금속 퀴놀레이트를 포함한다. 또 다른 실시양태에서, 조성물은 화학식 A의 화합물과 금속 퀴놀레이트의 합계 중량을 기준으로 하여 20 내지 50 중량%의 금속 퀴놀레이트를 포함한다.

[0105] 한 실시양태에서, 조성물은 조성물의 중량을 기준으로 하여 10 내지 90 중량%의 리튬 퀴놀레이트를 포함한다. 다른 실시양태에서, 조성물은 조성물의 중량을 기준으로 하여 10 내지 50 중량%의 리튬 퀴놀레이트를 포함한다. 또 다른 실시양태에서, 조성물은 조성물의 중량을 기준으로 하여 20 내지 50 중량%의 리튬 퀴놀레이트를 포함한다.

[0106] 한 실시양태에서, 조성물은 화학식 A의 화합물과 리튬 퀴놀레이트의 합계 중량을 기준으로 하여 10 내지 90 중량%의 리튬 퀴놀레이트를 포함한다. 다른 실시양태에서, 조성물은 화학식 A의 화합물과 리튬 퀴놀레이트의 합계 중량을 기준으로 하여 10 내지 50 중량%의 리튬 퀴놀레이트를 포함한다. 또 다른 실시양태에서, 조성물은 화학식 A의 화합물과 리튬 퀴놀레이트의 합계 중량을 기준으로 하여 20 내지 50 중량%의 리튬 퀴놀레이트를 포함한다.

[0107] 또한, 본 발명은 본 발명의 조성물로부터 형성된 필름을 제공한다. 본 발명은 또한 본 발명의 조성물로부터 형성된 1종 이상의 구성 요소를 포함하는 물품을 제공한다. 다른 실시양태에서, 물품은 유기 전계 발광 소자이다.

[0108] 화학식 A의 화합물은 본 명세서에서 기술하는 2 이상의 실시양태의 조합일 수 있다.

[0109] 본 발명의 조성물은 본 명세서에서 기술하는 2 이상의 실시양태의 조합일 수 있다.

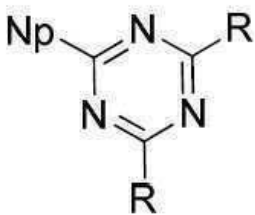
[0110] 본 발명의 필름은 본 명세서에서 기술하는 2 이상의 실시양태의 조합일 수 있다.

[0111] 본 발명의 물품은 본 명세서에서 기술하는 2 이상의 실시양태의 조합일 수 있다.

[0112] 조성물 A

[0113] 조성물 A는 하기 화학식 A로부터 선택된 1종 이상의 화합물을 포함한다.

[0114] <화학식 A>



[0115]

[0116] 상기 식에서,

[0117] Np는 1-나프틸 또는 2-나프틸로부터 선택되고,

[0118] R은 각각 독립적으로

[0119] i) 치환기(들)이 있거나 없는 (C6-C30)아릴,

[0120] ii) 치환기(들)이 있거나 없고, 하나 이상의 (C3-C30)시클로알킬과 융합된 치환 또는 미치환 (C6-C30)아릴,

[0121] iii) 치환기(들)이 있거나 없는 (C3-C30)헤테로아릴,

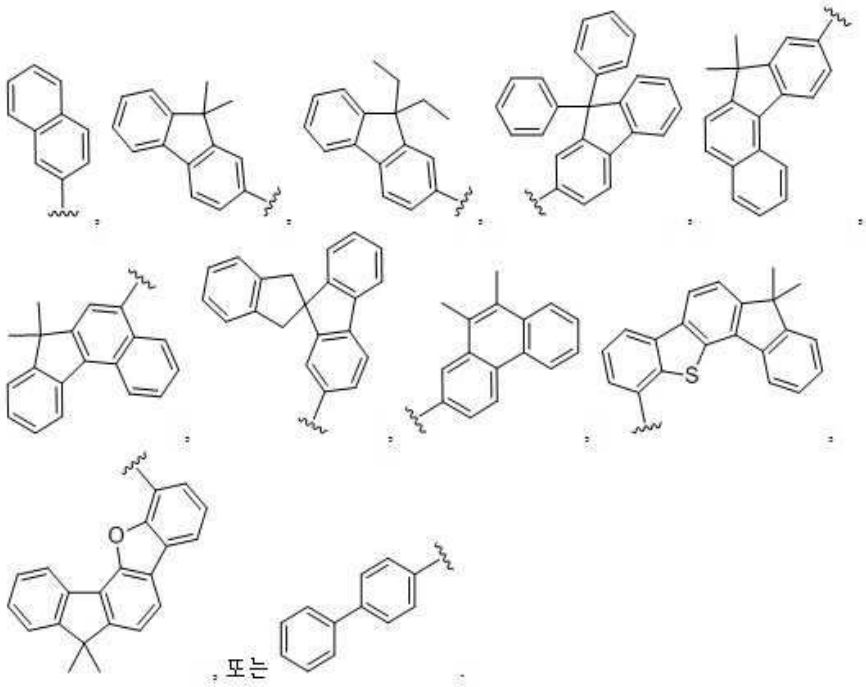
[0122] iv) 치환기(들)이 있거나 없는 5원 내지 7원 헤테로시클로알킬,

[0123] v) 하나 이상의 방향족환(들)과 융합된 치환 또는 미치환 5원 내지 7원 헤테로시클로알킬,

[0124] vi) 치환기(들)이 있거나 없는 (C3-C30)시클로알킬,

- [0125] vii) 하나 이상의 방향족환(들)과 융합된 치환 또는 미치환 (C3-C30)시클로알킬,
- [0126] viii) 치환기(들)이 있거나 없는 아다만틸, 또는
- [0127] ix) 치환기(들)이 있거나 없는 (C7-C30)비시클로알킬로부터 선택된다.
- [0128] 한 실시양태에서, 화학식 A의 R은 각각 독립적으로
- [0129] i) 치환기(들)이 있거나 없는 (C6-C30)아릴,
- [0130] ii) 치환기(들)이 있거나 없고, 하나 이상의 (C3-C30)시클로알킬과 융합된 치환 또는 미치환 (C6-C30)아릴,
- [0131] iii) 치환기(들)이 있거나 없는 (C3-C30)헤테로아릴,
- [0132] iv) 치환기(들)이 있거나 없는 5원 내지 7원 헤테로시클로알킬,
- [0133] v) 하나 이상의 방향족환(들)과 융합된 치환 또는 미치환 5원 내지 7원 헤테로시클로알킬,
- [0134] vi) 치환기(들)이 있거나 없는 (C3-C30)시클로알킬, 또는
- [0135] vii) 하나 이상의 방향족환(들)과 융합된 치환 또는 미치환 (C3-C30)시클로알킬로부터 선택된다.
- [0136] 한 실시양태에서, 화학식 A의 R은 각각 독립적으로
- [0137] i) 치환기(들)이 있거나 없는 (C6-C30)아릴,
- [0138] ii) 치환기(들)이 있거나 없고, 하나 이상의 (C3-C30)시클로알킬과 융합된 치환 또는 미치환 (C6-C30)아릴,
- [0139] iii) 치환기(들)이 있거나 없는 (C3-C30)헤테로아릴,
- [0140] iv) 치환기(들)이 있거나 없는 5원 내지 7원 헤테로시클로알킬, 또는
- [0141] v) 하나 이상의 방향족환(들)과 융합된 치환 또는 미치환 5원 내지 7원 헤테로시클로알킬로부터 선택된다.
- [0142] 한 실시양태에서, 화학식 A의 R은 각각 독립적으로
- [0143] i) 치환기(들)이 있거나 없는 (C6-C30)아릴,
- [0144] ii) 치환기(들)이 있거나 없고, 하나 이상의 (C3-C30)시클로알킬과 융합된 치환 또는 미치환 (C6-C30)아릴로부터 선택된다.
- [0145] 한 실시양태에서, 화학식 A의 R은 각각 독립적으로
- [0146] i) 치환기(들)이 있거나 없는 (C6-C30)아릴,
- [0147] iii) 치환기(들)이 있거나 없는 (C3-C30)헤테로아릴로부터 선택된다.
- [0148] 한 실시양태에서, 화학식 A의 R은 각각 독립적으로
- [0149] iii) 치환기(들)이 있거나 없는 하나 이상의 (C3-C30)시클로알킬과 융합된 치환 또는 미치환 (C6-C30)아릴로부터 선택된다.

[0150] 한 실시양태에서, 화학식 A의 R은 각각 독립적으로



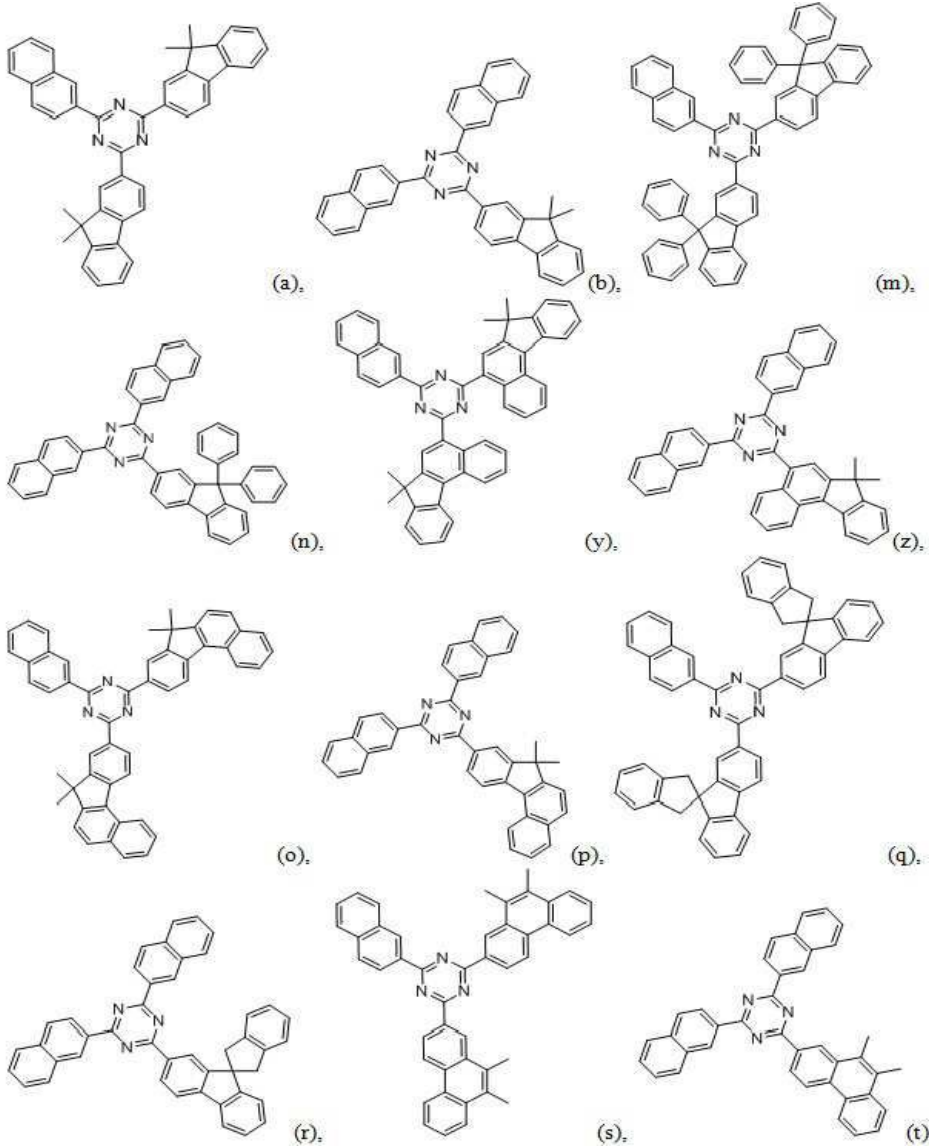
[0151]

[0152]로부터 선택된다.

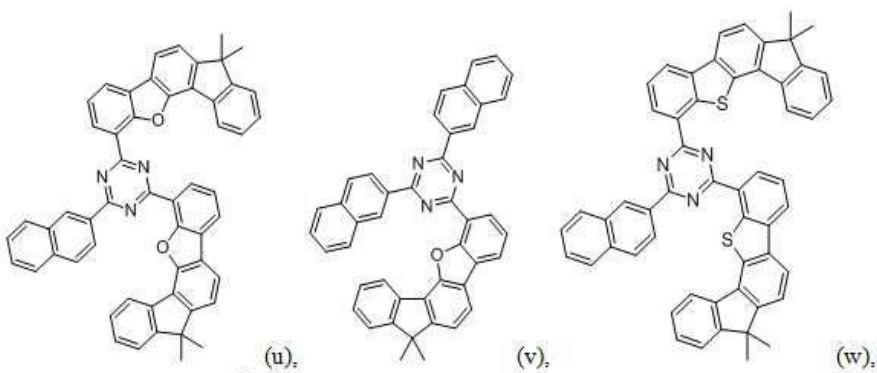
[0153] 상기 구조식에서, 현행의 IUPAC 표준 [문헌: *Pure Appl. Chem.*, **2008**, *80*, 277 (*Graphical representation standards for chemical structural diagrams*)]이 권장하는 대로, 각 치환기의 외부 연결 지점은 물결모양 선으로 나타낸다.

[0154] 한 실시양태에서, 화학식 A는 다음 화합물 (a)에서 (x)로부터 선택된다. 각각의 구조는 하기와 같다.

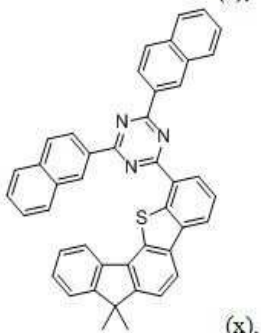
[0155] 한 실시양태에서, 화학식 A는 다음 화합물 (a), (b), (m) 내지 (z)로부터 선택된다.



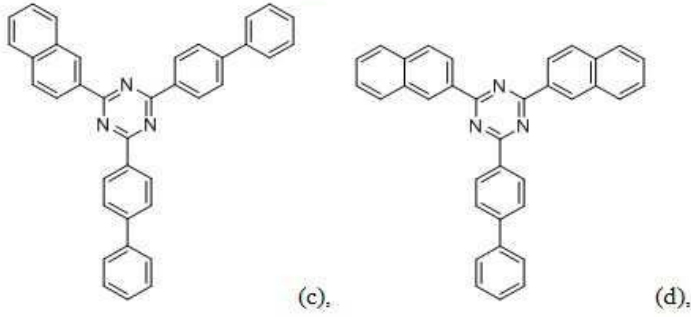
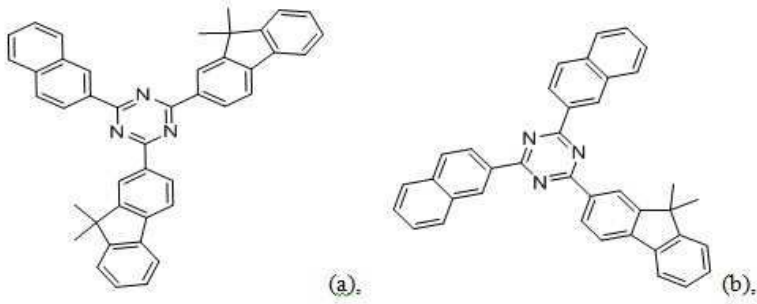
[0156]



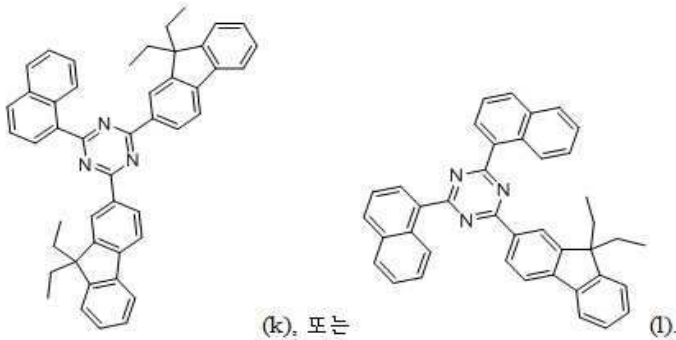
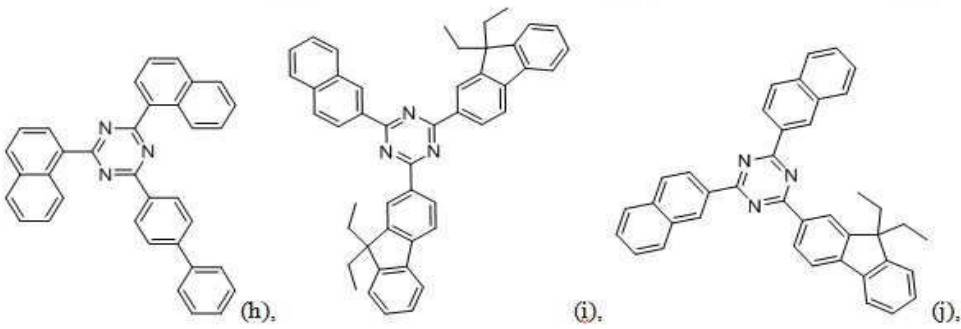
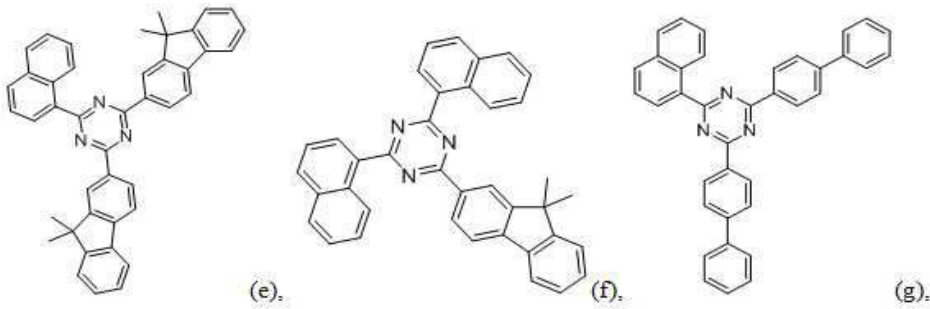
[0157] 또는 (x).



[0158] 한 실시양태에서, 화학식 A는 다음 화합물 (a) 내지 (l)로부터 선택된다.

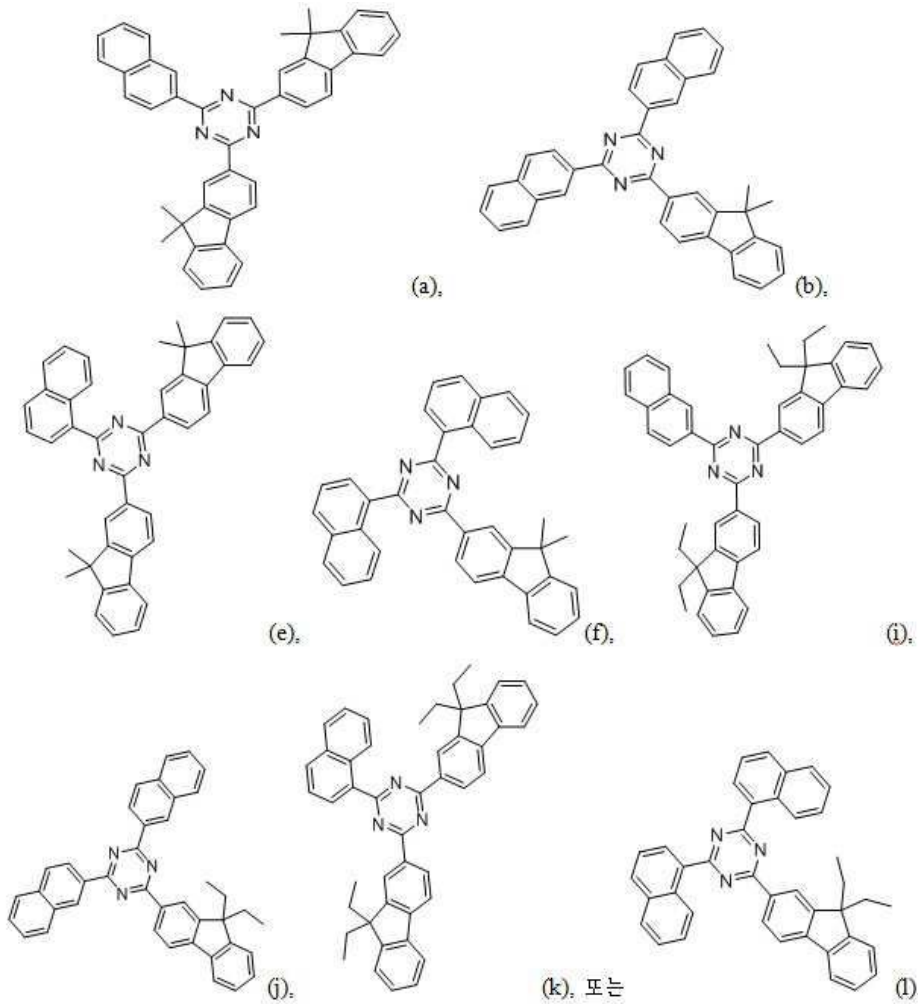


[0159]



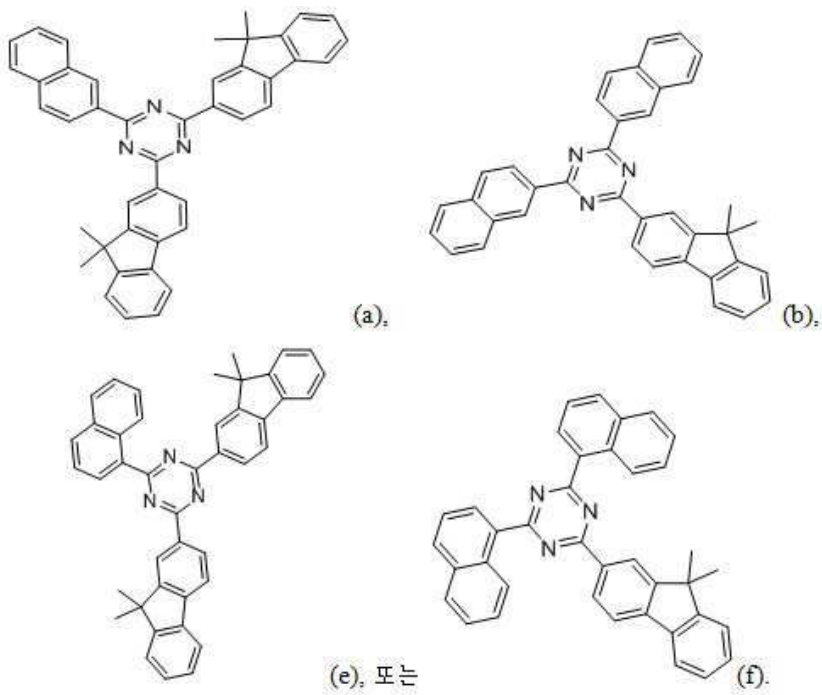
[0160]

[0161] 한 실시양태에서, 화학식 A는 다음 화합물 (a), (b), (e), (f), (i), (j), (k), 또는 (l)로부터 선택된다.



[0162]

[0163] 한 실시양태에서, 화학식 A는 다음 화합물 (a), (b), (e), 또는 (f)로부터 선택된다.



[0164]

[0165] 한 실시양태에서, 화학식 A는 다음 화합물 (a), (m), (e), (o), (q), (s), (u), 또는 (w)로부터 선택된다. 각

각의 구조는 상기와 같다.

- [0166] 한 실시양태에서, 화합물의 삼중항 에너지가 2.1 eV 초과이다.
- [0167] 한 실시양태에서, 화합물의 유리전이온도 (Tg)가 115 °C 이상이다.
- [0168] 한 실시양태에서, 화합물의 삼중항 에너지가 2.1 eV 초과이다.
- [0169] 한 실시양태에서, 화학식 A의 화합물의 분자량은 450 g/몰 이상이다.
- [0170] 한 실시양태에서, 화학식 A의 화합물의 분자량은 450 내지 800 g/몰이다.
- [0171] 한 실시양태에서, 화학식 A의 화합물은 하나 이상의 중수소 원자를 포함한다.
- [0172] 한 실시양태에서, 화학식 A의 화합물의 순도는 99 %를 넘는다.
- [0173] 한 실시양태에서, 화학식 A의 화합물의 HOMO 준위는 -5.3 eV 내지 -5.9 eV이다.
- [0174] 한 실시양태에서, 화학식 A의 화합물의 LUMO 준위는 -1.80 eV 내지 -2.05 eV이다.
- [0175] 한 실시양태에서, 화학식 A의 화합물의 λ^{-1} 값은 0.30 이하이다.
- [0176] 화학식 A의 화합물은 본 명세서에서 기술하는 2 이상의 실시양태의 조합일 수 있다.
- [0177] 조성물 A는 본 명세서에서 기술하는 2 이상의 실시양태의 조합일 수 있다.
- [0178] 조성물 A로 형성된 층 A는 본 명세서에서 기술하는 2 이상의 실시양태의 조합일 수 있다.
- [0179] 본 발명의 화합물은 OLED 소자와 같은 전자 소자에서 전하 수송 층 및 다른 층으로서 사용될 수 있다. 예를 들어, 본 발명의 화합물은 전하 차단 층 및 전하 생성 층으로서 사용될 수 있다.
- [0180] 조성물 B
- [0181] 조성물 B는 1종 이상의 "HTL 화합물"을 포함한다. HTL 화합물은 낮은 구동전압으로 정공을 수송하는 물질이다. 높은 정공 이동도가 추천된다. HTL은 발광층에 의해 수송된 전자의 통로의 차단을 돕는데 사용된다. 낮은 전자 친화도가 통상적으로 전자를 차단하는데 필요하다. HTL은 바람직하게는 인접한 EML 층으로부터 엑시톤 이동을 차단하기 위해 더 큰 삼중항을 가져야한다. HTL 화합물의 예에는, 비제한적으로, 디(p-톨릴)아미노페닐]시클로hex산 (TPAC), N,N-디페닐-N,N-비스(3-메틸페닐)-1,1-비페닐-4,4-디아민 (TPD), 및 N,N'-디페닐-N,N'-비스(1-나프틸)-(1,1'-비페닐)-4,4'-디아민 (NPB)이 있다.
- [0182] 한 실시양태에서, HTL 화합물은 디(p-톨릴)아미노페닐]시클로hex산 (TPAC), N,N-디페닐-N,N-비스(3-메틸페닐)-1,1-비페닐-4,4-디아민 (TPD), 또는 N,N'-디페닐-N,N'-비스(1-나프틸)-(1,1'-비페닐)-4,4'-디아민 (NPB)으로부터 선택된다. 다른 실시양태에서, HTL 화합물은 N,N-디페닐-N,N-비스(3-메틸페닐)-1,1-비페닐-4,4-디아민 (TPD), 또는 N,N'-디페닐-N,N'-비스(1-나프틸)-(1,1'-비페닐)-4,4'-디아민 (NPB)로부터 선택된다. 또 다른 실시양태에서 HTL 화합물은 N,N'-디페닐-N,N'-비스(1-나프틸)-(1,1'-비페닐)-4,4'-디아민 (NPB)이다.
- [0183] 바람직하게는, 조성물 B는 조성물 B의 중량을 기준으로 하여 100 중량 %의 HTL 화합물을 포함한다.
- [0184] 조성물 B는 본 명세서에서 기술하는 2 이상의 실시양태의 조합일 수 있다.
- [0185] 조성물 B로부터 형성되는 층 B는 본 명세서에서 기술하는 2 이상의 실시양태의 조합일 수 있다.
- [0186] 정의
- [0187] 본 명세서에서 기술하는 용어 "아릴"은 방향족 탄화수소로부터 하나의 수소 원자를 제거함으로써 유도된 유기 라디칼을 나타낸다. 아릴 기는 모노시클릭 및/또는 융합된 환 시스템일 수 있으며, 각각의 환은 적합하게는 4 개 내지 7 개, 바람직하게는 5 개 또는 6 개의 원자를 함유한다. 2 개 이상의 아릴 기가 단일 결합(들)을 통해 결합된 구조도 또한 포함된다. 특정 예에는, 비제한적으로, 페닐, 나프틸, 비페닐, 안트릴, 인데닐, 플루오레닐, 벤조플루오레닐, 페난트릴, 트리페닐레닐, 피레닐, 페릴레닐, 크리세닐, 나프타세닐, 플루오란테닐 등이 포함되나, 이것으로 국한되지는 않는다. 나프틸은 1-나프틸 또는 2-나프틸일 수 있고, 안트릴은 1-안트릴, 2-안트릴 또는 9-안트릴일 수 있고, 플루오레닐은 1-플루오레닐, 2-플루오레닐, 3-플루오레닐, 4-플루오레닐 및 9-플루오레닐 중 임의의 하나 일 수 있다.
- [0188] 본 명세서에서 기술하는 용어 "헤테로아릴"은 방향족 시클릭 골격 원자로 하나 이상의 헤테로원자, 예를 들어

B, N, O, S, P(=O), Si 및 P, 및 나머지 방향족 시클릭 골격 원자로 탄소 원자(들)를 함유하는 아릴 기를 의미한다. 헤테로아릴은 5원 또는 6원 모노시클릭 헤테로아릴 또는 하나 이상의 벤젠 환(들)과 융합된 폴리시클릭 헤테로아릴일 수 있고, 부분적으로 포화될 수 있다. 단일 결합을 통해 결합된 하나 이상의 헤테로아릴 기(들)을 갖는 구조도 또한 포함된다. 헤테로아릴 기(들)은 헤테로원자가 산화되거나 4차화되어 N-옥시드, 4급 염 등을 형성하는 2가의 아릴 기를 포함할 수 있다. 특정 예에는, 비제한적으로, 모노시클릭 헤테로아릴 기, 예를 들어 푸릴, 티오펜, 피롤, 이미다졸릴, 피라졸릴, 티아졸릴, 티아디아졸릴, 이소티아졸릴, 이속사졸릴, 옥사졸릴, 옥사디아졸릴, 트리아지닐, 테트라지닐, 트리아졸릴, 테트라졸릴, 푸라자닐, 피리디닐, 피라지닐, 피리미디닐, 피리다지닐; 폴리시클릭 헤테로아릴 기, 예를 들어 벤조푸라닐, 플루오레노[4,3-b]벤조푸라닐, 벤조티오펜, 플루오레노[4,3-b]벤조티오펜, 이소벤조푸라닐, 벤즈이미다졸릴, 벤조티아졸릴, 벤즈이소티아졸릴, 벤즈이속사졸릴, 벤즈옥사졸릴, 이소인돌릴, 인돌릴, 인다졸릴, 벤조티아디아졸릴, 퀴놀릴, 이소퀴놀릴, 시놀리닐, 퀴나졸리닐, 퀴놀살리닐, 카르바졸릴, 페난트리디닐 및 벤조디옥솔릴; 및 상응하는 N-옥시드 (예를 들어, 피리디닐 N-옥시드, 퀴놀릴 N-옥시드) 및 그들의 4급 염이 포함된다.

[0189] 치환기는 비제한적으로 다음을 포함한다: 중수소, 할로젠, 할로겐 치환기(들)이 있거나 없는 (C1-C30)알킬, (C6-C30)아릴, (C6-C30)아릴 치환기(들)이 있거나 없는 (C3-C30)헤테로아릴, 예를 들어 B, N, O, S, P(=O), Si 및 P로부터 선택된 하나 이상의 헤테로원자(들)를 함유하는 5원 내지 7원 헤테로시클로알킬, 하나 이상의 방향족 환(들)과 융합된 5원 내지 7원 헤테로시클로알킬, (C3-C30)시클로알킬, 하나 이상의 방향족 환(들)과 융합된 (C5-C30)시클로알킬, 트리(C1-C30)알킬실릴, 디(C1-C30)알킬(C6-C30)아릴실릴, 트리(C6-C30)아릴실릴, 아다만틸, (C7-C30)비시클로알킬, (C2-C30)알케닐, (C2-C30)알키닐, 시아노, 카르바졸릴, NR_{2i}R₂₂, BR₂₃R₂₄, PR₂₅R₂₆, P(=O)R₂₇R₂₈ [여기서 R_{2i} 내지 R₂₈는 각각 (C1-C30)알킬, (C6-C30)아릴 또는 (C3-C30)헤테로아릴을 나타낸다], (C6-C30)아르(C1-C30)알킬, (C1-C30)알킬(C6-C30)아릴, (C1-C30)알킬옥시, (C1-C30)알킬티오, (C6-C30)아릴옥시, (C6-C30)아릴티오, (C1-C30)알콕시카르보닐, (C1-C30)알킬카르보닐, (C6-C30)아릴카르보닐, (C6-C30)아릴옥시카르보닐, (C1-C30)알콕시카르보닐옥시, (C1-C30)알킬카르보닐옥시, (C6-C30)아릴카르보닐옥시, (C6-C30)아릴옥시카르보닐옥시, 카르복실, 니트로 및 히드록실; 또는 인접한 치환기들이 함께 연결되어 환을 형성하도록 된 것. 예를 들어, 치환기는 상기 치환기를 포함하는 골격 분자의 하나 이상의 원자들과 환 구조를 형성할 수 있다.

[0190] 실험

[0191] **시약 및 시험 방법**

[0192] 모든 용매 및 시약은 시그마-알드리치(Sigma-Aldrich), 피셔 사이언티픽(Fisher Scientific), 아크로스(Acros), TCI, AK 사이언티픽(AK Scientific), 및 알파 아사르(Alfa Aesar)를 비롯한 시판업체로부터 취득하였고, 최고 가능한 순도로 사용되었고, 필요한 경우 사용 전 재결정화되었다. 무수 용매를 자체 정제/분배 시스템 (헥산, 톨루엔, 및 테트라히드로푸란)으로부터 취득하거나, 또는 시그마-알드리치에서 구매하였다. "물에 민감한 화합물"이 관련된 모든 실험은 "오븐 건조한" 유리용기에서, 질소 분위기 하에서, 또는 글로브박스 안에서 수행하였다. 반응을 프리코팅된 알루미늄 판 (VWR 60 F254)에서 분석용 박막 크로마토그래피 (TLC)로 모니터링하고, UV 광 및/또는 과망간산칼륨 착색으로 시각화하였다. 플래시(Flash) 크로마토그래피를 그라스리졸브 (GRACERESOLV) 카트리지를 갖는 ISCO 콤비플래시(COMBIFLASH) 시스템 상에서 수행하였다.

[0193] ¹H-NMR-스펙트럼 (500 MHz 또는 400 MHz)을 달리 명시되지 않는 한, 30 °C에서 배리언(Varian) VNMRS-500 또는 VNMRS-400 분광계로 취득하였다. 케미칼 시프트는 CDCl₃ 중 TMS (δ=0.00)를 기준으로 하였다.

[0194] ¹³C-NMR 스펙트럼 (125 MHz 또는 100 MHz)을 배리언 VNMRS-500 또는 VNRMS-400 분광계로 취득하였고, CDCl₃ 중 TMS (δ=0.00)를 기준으로 하였다.

[0195] 통상의 LC/MS 연구도 다음과 같이 수행하였다. 5 마이크로리터 분취량의 샘플을 "THF 중 3 mg/ml 용액"으로 PI 모드에서 작동하는 듀얼 분무 전기 분무 (ESI) 인터페이스를 통해 애질런트(AGILENT) 6520 QToF, 사중극자-비행 시간 MS 시스템에 커플링된 애질런트 1200SL 바이너리 구배 액체 크로마토그래피에 주입하였다. 하기의 분석 조건을 이용하였다: 칼럼: 150 x 4.6 mm ID, 3.5 μm ZORBAX SB-C8; 칼럼 온도: 40 °C; 이동상: 40 분에 75/25 A/B에서 15/85 A/B; 용매 A = 물 중에 0.1 v% 포름산; 용매 B = THF; 유량 1.0 mL/분; UV 검출: 다이오드 어레이 210 내지 600 nm (추출된 파장 250,280 nm); ESI 조건: 기체 온도 365 °C; 기체 유량 - 8 ml/분; 모세관 - 3.5 kV; 분무기 -40 PSI; 단편화기 -145 V.

[0196] DSC 값은 모든 사이클에 대해 10 °C/분 스캔 속도 및 질소 분위기에서 TA 인스트루먼트(TA Instruments) Q2000 기기 상에서 측정하였다. 샘플을 실온에서 300 °C까지 스캔하고, -60 °C로 냉각시키고, 300 °C로 다시 가열하였다. 유리전이온도(T_g)를 두 번째 가열 스캔으로 측정하였다. 데이터 분석을 TA 유니버설 어널리시스(TA Universal Analysis) 소프트웨어를 이용하여 수행하였다. T_g 를 "온셋-엣-인플렉션(onset-at-inflection)" 방법을 사용하여 계산하였다.

[0197] 모든 계산 (오비탈 에너지 등)은 가우시안09(Gaussian09) 프로그램¹을 활용하였다. 계산은 혼성 밀도 함수론(DFT) 방법, B3LYP,² 및 6-31G* (5d) 기본 세트³로 수행하였다. 단일항 상태 계산은 폐쇄 셸 근사법(closed shell approximation)을 사용했고, 삼중항 상태 계산은 개방 셸 근사법을 사용했다. 모든 값은 전자볼트 (eV)로 나타내었다. HOMO 및 LUMO 값은 단일항 바닥 상태의 최적화된 기하학적 구조의 오비탈 에너지로부터 결정되었다. 삼중항 에너지는 최적화된 삼중항 상태와 최적화된 단일항 상태의 총 에너지 간의 차이로 결정되었다.

[0198] 주석 1. [문헌: Gaussian 09, Revision A.02, Frisch, M.J.; Trucks, G.W.; Schlegel, H.B.; Scuseria, G.E.; Robb, M.A.; Cheeseman, J.R.; Scalmani, G.; Barone, V.; Mennucci, B.; Petersson, G.A.; Nakatsuji, H.; Caricato, M.; Li, X.; Hratchian, H.P.; Izmaylov, A.F.; Bloino, J.; Zheng, G.; Sonnenberg, J.L.; Hada, M.; Ehara, M.; Toyota, K.; Fukuda, R.; Hasegawa, J.; Ishida, M.; Nakajima, T.; Honda, Y.; Kitao, O.; Nakai, N.; Vreven, T.; Montgomery, Jr., J.A.; Peralta, J.E.; Ogliaro, F.; Bearpark, M.; Heyd, J.J.; Brothers, E.; Kudin, K.N.; Staroverov, V.N.; Kobayashi, R.; Normand, J.; Raghavachari, K.; Rendell, A.; Burant, J.C.; Iyengar, S.S.; Tomasi, J.; Cossi, M.; Rega, N.; Millam, J.M.; Klene, M.; Knox, J.E.; Cross, J.B.; Bakken, V.; Adamo, C.; Jaramillo, J.; Gomperts, R.; Stratmann, R.E.; Yazyev, O.; Austin, A.J.; Cammi, R.; Pomelli, C.; Ochterski, J.W.; Martin, R.L.; Morokuma, K.; Zakrzewski, V.G.; Voth, G.A.; Salvador, P.; Dannenberg, J.J.; Dapprich, S.; Daniels, A.D.; Farkas, O.; Foresman, J.B.; Ortiz, J.V.; Cioslowski, J.; Fox, D.J., Gaussian, Inc., Wallingford CT, 2009].

[0199] 주석 2. (a) [문헌: Becke, A.D. *J. Chem. Phys.* **1993**, *98*, 5648]. (b) [문헌: Lee, C.; Yang, W.; Parr, R.G. *Phys. Rev B* **1988**, *37*, 785]. (c) [문헌: Miehlich, B.; Savin, A.; Stoll, H.; Preuss, H. *Chem. Phys. Lett.* **1989**, *157*, 200].

[0200] 주석 3. (a) [문헌: Ditchfield, R.; Hehre, W.J.; Pople, J.A. *J. Chem. Phys.* **1971**, *54*, 724]. (b) [문헌: Hehre, W.J.; Ditchfield, R.; Pople, J.A. *J. Chem. Phys.* **1972**, *56*, 2257]. (c) [문헌: Gordon, M.S. *Chem. Phys. Lett.* **1980**, *76*, 163].

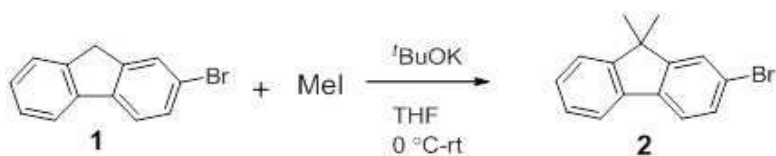
[0201] 문헌 (*J. Phys. Chem. A*, **2003**, *107*, 5241-5251)에 기술된 절차를 적용하여 전자 이동도의 지표인 각 분자의 재편성 에너지(λ^-)를 계산하였다.

[0202] 상기 화합물의 다수는 2-단계 절차를 이용하여 합성할 수 있다. 첫 번째 단계는 통상 아릴 그리나르(Grignard) 시약 2 당량체와 시아누릭 클로라이드의 반응으로 디아릴-치환된 클로로트리아진을 형성한다. 최종 생성물은 디아릴-치환된 클로로트리아진과 아릴 보론산 또는 보론 에스테르의 팔라듐 촉매 스즈키(Suzuki) 커플링 반응에 의해 두 번째 단계에서 형성된다.

[0203] 본 발명의 화합물은 OLED 소자에서 전하 수송 층 및 다른 층으로서, 예를 들어 전하 차단 층 및 전하 생성 층으로서 사용될 수 있다.

[0204] **개별 반응**

[0205] **화합물 2의 합성**

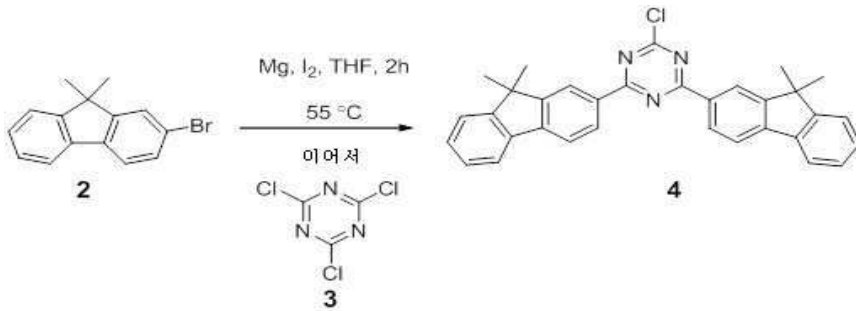


[0206]

[0207] 1 리터, 3-목, 둥근 바닥 플라스크에 2-브로모플루오렌 (TCI 아메리카(TCI America)) 1 (20 g, 82 mmol) 및 무수 테트라히드로푸란 (THF) (200 mL)를 첨가하고, 생성된 용액을 빙냉 수조로 0 °C로 냉각시켰다. 칼륨 tert-

부톡시드 (^tBuOK) (시그마 알드리치) (분말, 27.4 g, 225 mmol, 3 당량)을 조금씩 첨가하였다 (용액이 붉은색으로 변했다). 용액을 10 분 동안 교반하고, 그 후에 요오도메탄 (MeI) (시그마 알드리치) (34.7 g, 15.2 mmol, 225 mmol, 3 당량)을 10 분 동안 주의하여 첨가(발열 공정)하고, 반응물을 1 시간 동안 교반하면서 실온으로 가온하였다. 반응 혼합물을 물 (200 mL)로 켄칭하고, 에틸 아세테이트 (EtOAc) (200 mL)로 두 번 추출하였다. EtOAc를 감압 하에 제거하여, 붉은색 오일 (20 mL)를 수득하였고 이를 헥산을 용리액으로 하여 플래시 칼럼 크로마토그래피로 정제하였다. 용매를 감압 하에 증발시킨 후, 맑은 오일을 수득하였고, 이를 진공 하에 결정화시켜, 목적하는 화합물 **2** (22 g, GC/LC-MS에 의해 96 % 단리된 수율 및 99 % 순도)를 수득하였다. ¹H NMR (400 MHz, CDCl₃) δ 7.74 - 7.67 (m, 1H), 7.63 - 7.55 (m, 2H), 7.51 - 7.46 (m, 1H), 7.46 - 7.42 (m, 1H), 7.39 - 7.32 (m, 2H), 1.50 (s, 6H). ¹³C NMR (101 MHz, CDCl₃) δ 155.65, 155.24, 153.20, 138.19, 138.11, 130.31, 130.04, 127.63, 127.13, 126.16, 126.11, 122.59, 121.47, 121.41, 121.33, 120.99, 120.02, 47.29, 47.07, 26.97, 26.83. 계산된 질량: 272.02; 측정된 질량: 272.80.

[0208] 화합물 4의 합성

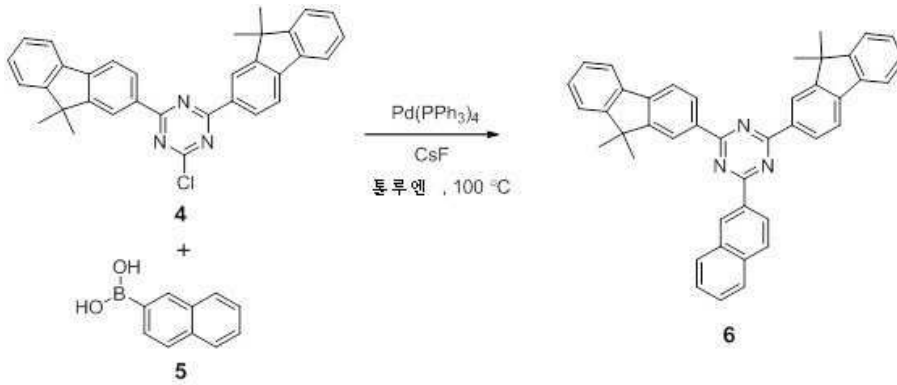


[0209]

[0210]

글로브박스 안에서, 유리병에 2-브로모-9,9-디메틸플루오렌 **2** (11 g, 40 mmol) 및 무수 THF (100 mL)를 첨가하였다. 마그네슘 조각 (시그마 알드리치) (1.9 g, 80 mmol) 및 요오드 결정 (시그마 알드리치)을 용액에 첨가하고, 생성된 용액을 55 °C에서 교반하였다. 한 시간 후에, 반응 혼합물 (물로 켄칭 및 EtOAc로 추출함)의 분취량을 GC-MS 분석한 결과, 목적하는 그리나르의 완전한 전환이 나타났다. 반응 혼합물을 THF (10 mL) 중 1,3,5-트리클로로트리아진 (시그마 알드리치) **3** (3.68 g, 20 mmol)의 용액에 서서히 첨가(발열)하였다 (첨가 순서에 주의). 반응물 분취량을 한 시간 동안 LC-MS로 분석하였고, 그 후에 추가의 THF (40 mL)를 혼합물에 첨가하였고, 반응물을 55 °C에서 밤새 교반하였다. 밤새 교반한 후에, 생성물 분취량의 LC-MS 분석 결과, 출발 물질의 목적 생성물로의 95 % 전환이 나타났다. 용매를 감압 하에 제거하고, 생성물을 뜨거운 클로로포름에 용해시키고, 물로 세척하고, 용매를 감압 하에 제거하였다. 생성물을 칼럼 크로마토그래피 (10-50 % 클로로포름/헥산 구매)로 정제하여 목적 생성물 **4** 9 g (90 % 단리된 수율)를 수득하였다. ¹H NMR (400 MHz, CDCl₃) δ 8.72 - 8.63 (m, 4H), 7.88 (dd, *J* = 8.0, 0.6 Hz, 2H), 7.85 - 7.78 (m, 2H), 7.53 - 7.45 (m, 2H), 7.44 - 7.35 (m, 4H), 1.60 (s, 12H). ¹³C NMR (101 MHz, CDCl₃) δ 173.40, 171.92, 154.92, 154.11, 144.74, 138.07, 133.34, 129.05, 128.62, 127.24, 123.55, 122.83, 120.97, 120.18, 47.12, 27.04. 계산된 질량: 499.18; 측정된 질량: 499.37.

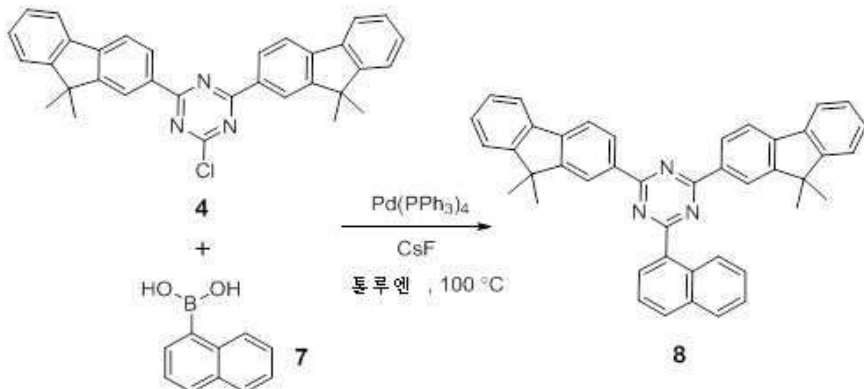
[0211] 화합물 6의 합성



[0212]

[0213] 글로브 박스 안에서, 유리병에 3,5-비스(9,9-디메틸-플루오레닐)-1-클로로트리아진 (5 g, 10 mmol), 2-나프틸보론산 (AK 사이언티픽) (2.6 g, 15 mmol, 1.5 당량), 및 CsF (시그마 알드리치) (분말, 4.6 g, 30 mmol, 3 당량)의 혼합물을 첨가하였다. 무수 톨루엔 (100 mL)에 이어서 Pd(PPh₃)₄ (시그마 알드리치) (578 mg, 0.5 mmol, 5 mol%)을 첨가하였다. 반응 혼합물을 100 °C로 가열하고, 분취량을 주기적으로 LC-MS 분석하여 반응 진행을 확인하였다. 6 시간 후에, LC-MS 분석 결과, 출발 물질의 목적 생성물로의 99 % 전환이 나타났다. 반응 혼합물을 냉각시키고, 클로로포름 (300 mL)로 희석하고, 물 (200 mL)로 세척하고, 수성 층을 클로로포름 (3 x 200 mL)으로 추출하였다. 용매를 진공 하에 제거한 후, 생성물을 ISCO 정제 시스템에 도입하고, 헥산 중 30 % 클로로포름으로 용리시켜, 5 g (84 % 회수)을 99.67 % 순도로 수득하였다. ¹H NMR (400 MHz, CDCl₃) δ 9.37 (d, *J* = 0.8 Hz, 1H), 8.87 (dt, *J* = 5.0, 1.5 Hz, 5H), 8.19 - 8.11 (m, 1H), 8.06 (d, *J* = 8.7 Hz, 1H), 7.99 - 7.90 (m, 3H), 7.89 - 7.81 (m, 2H), 7.65 - 7.56 (m, 2H), 7.56 - 7.49 (m, 2H), 7.45 - 7.36 (m, 4H), 1.68 (s, 12H). ¹³C NMR (101 MHz, CDCl₃) δ 171.83, 171.52, 154.80, 153.96, 143.66, 138.47, 135.68, 135.40, 133.90, 133.16, 129.97, 129.59, 128.59, 128.31, 128.25, 127.87, 127.78, 127.18, 126.41, 125.26, 123.10, 122.80, 120.82, 120.10, 47.11, 27.23. 계산된 질량: 591.26; 측정된 질량: 591.47.

[0214] 화합물 8의 합성

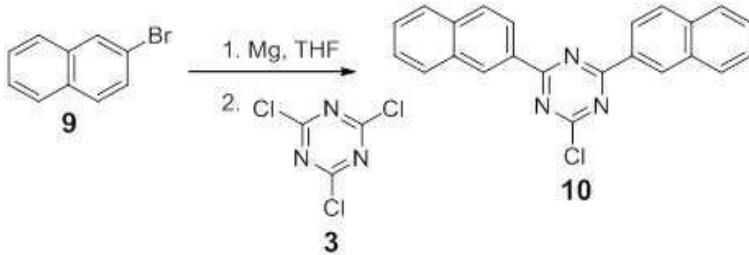


[0215]

[0216] 질소 퍼징 글로브박스 안에서, 유리병에 3,5-비스(9,9-디메틸플루오레닐)-1-클로로트리아진 (3.50 g, 7.00 mmol), 1-나프틸 보론산 (1.81 g, 10.5 mmol, 1.5 당량) 및 CsF (분말, 3.19 g, 21.0 mmol, 3 당량)의 혼합물을 첨가하였다. 무수 톨루엔 (100 mL)에 이어서, Pd(PPh₃)₄ (시그마 알드리치) (0.41 g, 0.35 mmol, 5 mol%)을 첨가하였다. 반응 혼합물을 밤새 90 °C로 가열하였다. 18 시간 후에 LC/MS 및 TLC 분석하여 반응의 완료를 확인하였다. 반응 혼합물을 냉각시키고, 클로로포름으로 희석하고, 물로 세척하고, 수성 층을 클로로포름으로 추출하였다. 유기 층을 물로 세척한 후 MgSO₄ 상에서 건조시켰다. 용매를 감압 하에 제거하였다. 건조된 조성물을 헥산 중 40 % 클로로포름을 용리액으로 하여 칼럼 크로마토그래피를 사용하여 정제하였다. 정제 후, 화합물 8 3.20 g을 수득하였다 (수율은 77.26 % 이었다). ¹H NMR (400 MHz, CDCl₃) δ 9.22 - 9.18 (d, 1H),

8.82 - 8.88 (m, 4H), 8.57 - 8.60 (dd, 1H), 8.08 - 8.12 (ddd, 1H), 7.98 - 8.02 (ddd, 1H), 7.93 - 7.96 (dd, 2H), 7.83 - 7.88 (m, 2H), 7.69 - 7.74 (m, 1H), 7.57 - 7.68 (m, 2H), 7.50 - 7.56 (m, 2H), 7.36 - 7.44 (m, 4H), 1.66 (s, 12H). ¹³C NMR (101 MHz, CDCl₃) δ 174.15, 171.65, 154.80, 154.02, 143.78, 138.40, 135.23, 134.28, 132.16, 131.41, 130.56, 128.67, 128.58, 128.28, 127.18, 127.05, 126.29, 126.08, 125.21, 123.20, 122.81, 120.83, 120.15, 47.09, 27.15.

[0217] 화합물 10의 합성

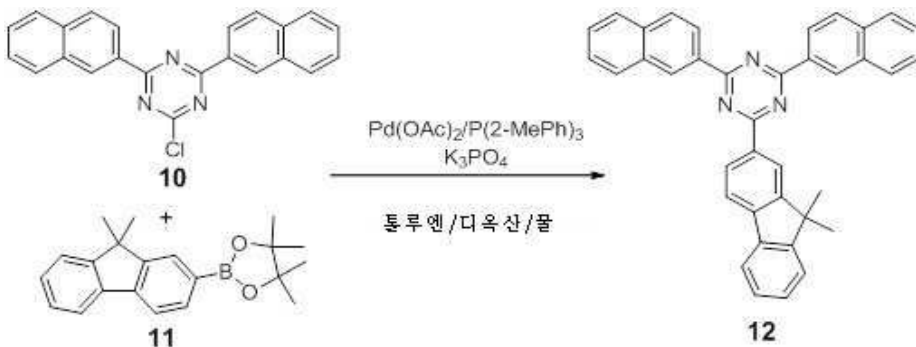


[0218]

[0219] 질소 충전된 드라이박스 안에서, 유리병에 Mg (2.05 g, 84.5 mmol) 및 THF (40 mL)를 첨가하였다. 여기에 THF (35 mL)에 용해시킨 2-브로모나프탈렌 (15.0 g, 72.4 mmol)을 40 분에 걸쳐서 교반하면서 조금씩 첨가하였다. 서서히 첨가하는 중에 반응은 발열이 되기 시작하여, 아릴 브로마이드 용액의 각 추가의 첨가마다 반응이 격렬하게 버블링되었다. 버블링이 사라지면 다시 첨가하였다. 첨가를 완료하고 반응물을 30 분 동안 교반한 후, 분취량을 취해 D₂O로 킨칭하였다. 유기 상을 수집하고, MgSO₄ 상에서 건조시키고, 여과하고 GC로 분석하였다. GC 추적 결과, 98.5 면적 % 순도로 나프탈렌 (4.8 분)이 나타났다.

[0220] 그리나르 용액을 실온으로 냉각시키고, 셀라이트 상에서 여과하고, 셀라이트 패드를 새 THF의 최소량으로 세척하였다. 두 번째 유리병에 시아누릭 클로라이드 (4.45 g, 24.1 mmol), THF (40 mL)을 첨가하고, 내용물이 균질해질 때까지 실온에서 교반하였다. 그리나르 용액의 일부분 (2 eq) (47 mL)을 20 분에 걸쳐서 서서히 첨가한 후, 분취량을 취하고, 물로 킨칭하고, HPLC로 분석하였다. 그 시간에 반응물을 H₂O (60 mL)로 킨칭하고, CH₂Cl₂로 추출하였다. 에멀전이 형성되었고, 이를 셀라이트 상에서 여과하였다. 유기 층을 MgSO₄ 상에서 건조시키고, 여과하고 회전 증발기로 농축 건조시켜, 갈색 고체 8.9 g을 수득하였다. 고체를 THF에 용해시키고, 셀라이트와 혼합하였다. THF를 회전 증발기로 제거하여, 덩어리진 갈색 고체를 수득하여 절구공이로 분쇄하였다. 생성된 분말을 플래시 크로마토그래피로 정제하였다. 분획물을 합하고 (박막 크로마토그래피 분석에 기초하여) 농축 건조시켰다. 잔류물을 CH₂Cl₂에 용해시켜 재결정화하고, 탁해질 때까지 헥산을 첨가하였다. 탁해진 용액을 냉동고 (-15 °C)에 밤새 두어, 백색 고체를 수득하였다. 고체를 여과하여 수집하고, 진공 오븐 (50 °C)에서 건조시켜, 전구체 화합물 10 1.9g (11 % 수율)을 수득하였다. ¹H NMR (500 MHz, 클로로포름-*d*) δ 9.21 (s, 2H), 8.66 (d, *J* = 8.6 Hz, 2H), 8.07 (d, *J* = 7.8 Hz, 2H), 7.98 (d, *J* = 8.5 Hz, 2H), 7.91 (d, *J* = 7.8 Hz, 2H), 7.74 - 7.47 (m, 4H). ¹³C NMR (126 MHz, 클로로포름-*d*) δ 173.69, 172.39, 136.36, 133.26, 132.08, 131.24, 129.91, 128.76, 128.65, 128.05, 126.90, 125.20.

[0221] 화합물 12의 합성



[0222]

[0223] 질소 충전된 드라이박스 안에서, 유리병에 2-클로로-4,6-디(나프탈렌-2-일)-1,3,5-트리아진 (1.90 g, 5.17

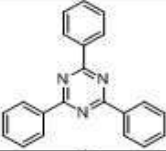
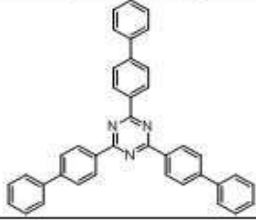
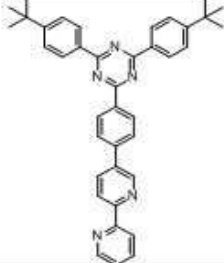
mmol), 2-(9,9-디메틸-9H-플루오렌-2-일)-4,4,5,5-테트라메틸-1,3,2-디옥사보롤레인 (2.32 g, 7.23 mmol), K_3PO_4 (3.84 g, 18.1 mmol), $Pd(OAc)_2$ (0.058 g, 0.26 mmol) 및 트리-*o*-톨릴포스핀 (0.472 g, 1.55 mmol)을 첨가하였다. 상기 분말 혼합물에 톨루엔 (50 mL), 1,4-디옥산 (50 mL) 및 탈기된 H_2O (1 mL)을 첨가하였다. 상기 슬러리를 2 시간 동안 80 °C에서 가열 및 교반하자 황녹색 슬러리가 되었다. 분취량을 HPLC 분석하자, 디(나프틸)모노(클로로) 트리아진 (8.27 분)이 측정가능한 수준으로 검출되지 않았다. 반응물을 실온으로 냉각시키고, 농축 건조시키고, 잔류물을 메틸렌 클로라이드에 용해시켰다. 메틸렌 클로라이드 층을 물로 세척하고, $MgSO_4$ 상에서 건조시키고, 회전 증발기로 농축 건조시켰다. 생성물을 칼럼 크로마토그래피로 정제하였다. 생성물을 메틸렌 클로라이드/헥산으로부터 재결정화하였다. 고체를 수집하고, 새 헥산으로 세정하였다. 고체를 진공 오븐에서 건조시켜, 백색 고체 2.3 g을 수득하였고, "고체 2.1 g"을 승화시켜, 황백색 고체 **12** 1.1g (LC-MS 분석에 의한 99.3 % 순도)를 수득하였다. 1H NMR (500 MHz, 클로로포름-*d*) δ 9.41 - 9.33 (m, 2H), 8.97 - 8.79 (m, 4H), 8.22 - 8.07 (m, 2H), 8.04 (d, J = 8.7 Hz, 2H), 7.99 - 7.90 (m, 3H), 7.88 - 7.82 (m, 1H), 7.65 - 7.56 (m, 4H), 7.55 - 7.48 (m, 1H), 7.44 - 7.37 (m, 2H), 1.69 (s, 6H); ^{13}C NMR (126 MHz, $cdCl_3$) δ = 172.28, 171.95, 155.15, 154.30, 143.97, 138.74, 136.01, 135.73, 134.22, 133.51, 130.25, 129.79, 128.87, 128.49, 128.46, 128.06, 127.95, 127.37, 126.58, 125.51, 123.36, 122.96, 121.01, 120.26, 47.35, 27.43.

[0224] **본 발명 및 비교 화합물의 모델링**

[0225] 표 1 및 2는 비교 및 본 발명의 화합물에 대한 각각의 에너지 준위를 열거한다.

표 1

비교 화합물의 모델링 데이터

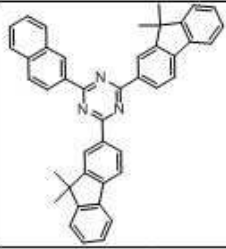
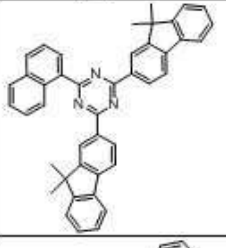
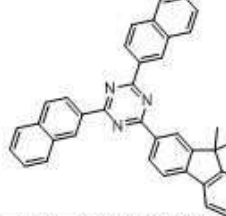
번호	구조	분자량 (g/몰)	HOMO (eV) ^a	LUMO (eV) ^b	(λ) ^c
A		309.36	-6.65	-1.80	0.28
B		537.65	-6.10	-1.89	0.24
C		575.74	-6.12	-1.94	0.36

^{a, b} 상기와 같이 계산된 HOMO 및 LUMO 준위, ^c 상기와 같이 계산된 재편성 에너지.

[0226]

표 2

본 발명 화합물의 모델링 데이터 및 열적 분석

번호	구조	분자량 (g/몰)	HOMO (eV) ^a	LUMO (eV) ^b	삼중항 에너지 (eV) ^c	(λ) ^d	T _g (°C) ^e
6		591.74	-5.81	-1.89	2.59	0.18	119
8		591.74	-5.79	-1.92	2.33	0.22	110
12		525.64	-5.79	-1.89	2.38	0.25	98

^{a, b} 상기와 같이 계산된 HOMO 및 LUMO 준위. ^c 상기와 같이 계산된 삼중항 에너지. ^d 상기와 같이 계산된 재편성 에너지. ^e 상기와 같이 DSC로 측정된 유리 전이 온도.

[0227]

[0228]

비교 화합물과는 대조적으로, 본 발명의 화합물은 적절한 LUMO 에너지 (-1.8 내지 -2.05 eV), HOMO 에너지 (-5.3 내지 -5.9 eV) 및 낮은 재편성 에너지 (λ⁻) 값 (<0.30)의 바람직한 조합을 나타낸다. 본 발명의 화합물 6은 요구되는 T_g>115 °C를 가져서, 소자 제작 및 작동 중 더 높은 온도가 가해질 때, 보다 견고한 소자로 이어질 수 있어, 가장 바람직하다. 비교 화합물 A 및 B는 또한 유리 전이가 없는 결정형 화합물로 알려져 있는데 (문헌 [Zeng, L.; Lee, T.; Merkel, P.B.; Chen, S.H. *J. Mater. Chem.* **2009**, *19*, 8772. / Ishi-I, T.; Yaguma, K.; Thiemann, T.; Yashima, M.; Ueno, K.; Mataka, S. *Chem. Lett.* **2004**, *33*, 1244]), 안정하고, 무정형인 유리가 소자 제작 및 작동 중 안정한 필름 모폴로지를 위해 바람직하므로, 상기 특성으로 인해 화합물 A 및 B는 불리하게 된다. 비교 화합물 A는 또한 바람직한 분자량 범위인 450 내지 800 g/몰을 벗어난다.

[0229]

OLED 소자 제작 및 테스트

[0230]

모든 유기 물질을 증착 전에 승화시켜 정제하였다. OLED를 애노드로 작용하는 ITO 코팅된 유리 기판 위에 형성하고, 알루미늄 캐소드로 덮었다. 모든 유기 층을 진공 챔버에서, 기저압 <10⁻⁷ 토르로, 화학 증착에 의해 열적으로 증착시켰다. 유기 층의 증착 속도를 0.1~0.05 nm/s로 유지하였다. 알루미늄 캐소드를 0.5 nm/s로 증착시켰다. OLED 소자의 활성 면적은 캐소드 증착을 위한 새도우 마스크에 따라 정의된 바와 같이 "3 mm x 3 mm"이었다. 유리 기판 (20 mm x 20 mm)은 삼성 코닝(Samsung Corning)에서 두께 1500 옴스트롬 ITO 층으로 수득하였다. 5 층 필름을 다음의 구성으로 형성하였다: HIL(600Å) / NPB(200Å) / "2 % 도판트로 도핑된 ADN"(350Å) / "ETL:Liq"(300Å) / Liq(10Å). 표 3을 참조.

[0231]

HIL, HTL, EML 호스트, EML 도판트, ETL, 또는 EIL을 함유한 각각의 셀을 진공 챔버 안에 10⁻⁶ 토르에 도달할 때까지 두었다. 각각의 물질을 증발시키기 위해, 제어 전류를 물질을 함유한 셀에 인가하여 셀의 온도를 높였다. 충분한 온도를 적용하여 물질의 증발 속도를 증발 과정 동안 일정하게 유지하였다. HIL 층에서, 층의 두께가 600 옴스트롬에 도달할 때까지, N1,N1'-([1,1'-비페닐]-4,4'-디일)비스(N1-(나프탈렌-1-일)-N4,N4'-디페닐

벤젠-1,4-디아민)을 1 A/s의 일정한 속도로 증발시켰다. 동시에, N4,N4'-디(나프탈렌-1-일)-N4,N4'-디페닐-[1,1'-비페닐]-4,4'-디아민 (NPB) 층을 두께가 200 옹스트롬에 도달할 때까지, 1 A/s의 일정한 속도로 증발시켰다. EML 층에서, 두께가 350 옹스트롬에 도달할 때까지, 9,10-디(나프탈렌-2-일)안트라센 (ADN, 호스트) 및 (E)-4,4'-(에텐-1,2-디일)비스(N,N-디페닐아닐린) (DPAVB, 도판트)을 함께 증발시켰다. 호스트 물질의 증착 속도는 0.98 A/s이고, 도판트 물질의 증착은 0.02 A/s으로, 호스트 물질의 2 % 도핑 결과를 냈다. ETL 층에서, 두께가 300 옹스트롬에 도달할 때까지, ETL 화합물을 리튬 퀴놀레이트(Liq)와 함께 증발시켰다. ETL 화합물 및 Liq의 증발 속도는 0.5 A/s이었다. Alq3를 기준 물질로 사용하여 본 발명의 화합물과 비교하였다. Alq3를 300 옹스트롬까지 1 A/s의 속도로 단독으로 증발시켰다. 최종적으로 "20 옹스트롬"의 얇은 전자 주입 층 (Liq)가 0.2 A/s의 속도로 증발되었다.

[0232] OLED 소자에 대한 전류-전압-휘도 (J-V-L) 특성을 소스 측정기 (KEITHLY 238) 및 발광 측정기 (MINOLTA CS-100A)로 측정하였다. OLED 소자의 EL 스펙트럼을 보정된 CCD 스펙트로그래프로 수집하였다. 결과를 하기 표 4에 나타내었다. 화합물 6, 8, 및 12를 함유하는 ETL (전자 수송 층) 필름 층을 함유하는 본 발명의 필름은 더 우수한 (더 낮은) 턴 온 전압과 더 우수한 (더 높은) 발광 효율을 나타내었다.

표 3

	이름	시판명
정공 주입 물질	N1,N1'-([1,1'-비페닐]-4,4'-디일)비스(N1-(나프탈렌-1-일)-N4,N4'-디페닐벤젠-1,4-디아민)	KR 10-2008-0041682 참조
정공 수송 물질	N4,N4'-디(나프탈렌-1-일)-N4,N4'-디페닐-[1,1'-비페닐]-4,4'-디아민	NPB
F1 Blue 호스트	9,10-디(나프탈렌-2-일)안트라센	ADN
F1 Blue 도판트	(E)-4,4'-(에텐-1,2-디일)비스(N,N-디페닐아닐린)	DPAVB
Ref ETL	트리스(8-히드록시퀴놀리나토)알루미늄	Alq3
전자 주입 물질	리튬 퀴놀레이트	Liq

[0233]

표 4

	전압 @1000nit [V]	전류 밀도 @1000nit [mA/cm ²]	발광 효율 @ 1000nit [Cd/A]	CIE (X,Y)
Alq3(ref)	6.6	22.4	4.0	149,150
화합물 6 :Liq	5.0	14.8	5.4	149,149
화합물 8:Liq	5.2	17.3	5.2	149,150
화합물 12 :Liq	5	17.6	5.4	149,149

[0234]