

(12) 특허협력조약에 의하여 공개된 국제출원

(19) 세계지식재산권기구
국제사무국

(43) 국제공개일
2012년 12월 27일 (27.12.2012)



(10) 국제공개번호
WO 2012/177006 A2

- (51) 국제특허분류:
C09K 11/06 (2006.01) H01L 51/50 (2006.01)
- (21) 국제출원번호: PCT/KR2012/004631
- (22) 국제출원일: 2012년 6월 12일 (12.06.2012)
- (25) 출원언어: 한국어
- (26) 공개언어: 한국어
- (30) 우선권정보:
10-2011-0060643 2011년 6월 22일 (22.06.2011) KR
10-2011-0069298 2011년 7월 13일 (13.07.2011) KR
- (71) 출원인 (US 을(를) 제외한 모든 지정국에 대하여): **덕산하이메탈(주) (DUKSAN HIGH METAL CO., LTD.)** [KR/KR]; 울산광역시 북구 연암동 597-3, 683-804 Ulsan (KR).
- (72) 발명자; 겸
- (75) 발명자/출원인 (US 에 한하여): **문성운 (MUN, Soungyun)** [KR/KR]; 경기도 용인시 수지구 풍덕천동 664번지 초입마을 동아아파트 111동 810호, 448-552 Gyeonggi-do (KR). **이선희 (LEE, Sunhee)** [KR/KR]; 서

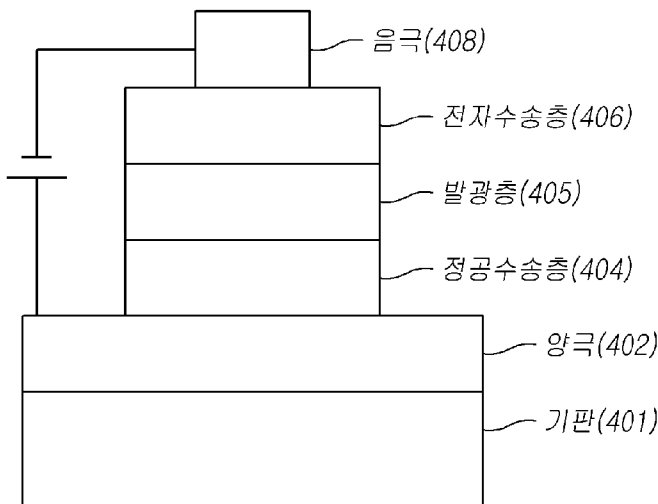
울시 중구 필동 3가 28-26 501호, 100-273 Seoul (KR). **이범성 (LEE, Bumsung)** [KR/KR]; 충청남도 천안시 서북구 백석동 백석마을 아이파크 아파트 112동 2101호, 331-793 Chungcheongnam-do (KR). **최대혁 (CHOI, Daehyuk)** [KR/KR]; 경기도 수원시 영통구 매탄동 신원천주공아파트 1단지 102동 1501호, 443-370 Gyeonggi-do (KR). **김동하 (KIM, Dongha)** [KR/KR]; 경기도 성남시 분당구 분당동 장안 건영아파트 108동 1102호, 463-907 Gyeonggi-do (KR). **박정환 (PARK, Junghwan)** [KR/KR]; 서울시 송파구 가락본동 80성원상떼빌 아파트 101동 703호, 138-803 Seoul (KR). **박정철 (PARK, Jungcheol)** [KR/KR]; 경기도 성남시 분당구 백현동 366-7번지 프린스타운 404호, 463-420 Gyeonggi-do (KR). **김기원 (KIM, Kiwon)** [KR/KR]; 경기도 수원시 영통구 영통1동 황골주공아파트 129동 1801호, 443-740 Gyeonggi-do (KR). **주진욱 (JU, Jinuk)** [KR/KR]; 경기도 성남시 분당구 백현동 366-7 프린스타운 204호, 463-420 Gyeonggi-do (KR). **박용욱 (PARK, Yongwook)** [KR/KR]; 경기도 안양시 동안구 갈산동 샘마을우방아파트 508동 202호, 431-703 Gyeonggi-do (KR). **박정근 (PARK, Jeongkeun)** [KR/KR]; 경기도 성남시 분당구 백현동 366-7번지 프

[다음 쪽 계속]

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

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

[Fig. 4]



(57) Abstract: The present invention relates to organic electronics including a hole injection layer material and a hole transport layer, having improved low-voltage driving of the organic electronics and device service life and high light emitting efficiency, by mixing and using a material including heavy hydrogen and having superior driving characteristics and a material having a superior service life.

(57) 요약서: 본 발명은 이를 정공 주입층 재료 및 정공 수송층로 포함하는 유기전기소자에 관한 것으로, 중수소를 포함하는 구동특성이 우수한 재료 및 수명이 우수한 재료를 혼합하여 사용함으로써 유기 전기 발광소자의 저전압 구동, 높은 발광효율 및 소자수명을 향상시키는 것이다.

- 401 ... Substrate
- 402 ... Anode
- 404 ... Hole transport layer
- 405 ... Light emitting layer
- 406 ... Electron transport layer
- 408 ... Cathode

WO 2012/177006 A2



립스타운 405 호, 463-420 Gyeonggi-do (KR). **지희선 (JI, Heesun)** [KR/KR]; 경기도 성남시 분당구 백현동 366-7 번지 B02 호, 463-420 Gyeonggi-do (KR). **김혜령 (KIM, Hyeryeong)** [KR/KR]; 경기도 성남시 분당구 백현동 366-7 번지, 463-420 Gyeonggi-do (KR). **소기호 (SO, Kiho)** [KR/KR]; 경상남도 진주시 봉곡동 464-18 번지, 660-040 Gyeongsangnam-do (KR). **강문성 (KANG, Moonsung)** [KR/KR]; 경기도 성남시 분당구 백현동 366-7 번지, 463-420 Gyeonggi-do (KR).

(74) **대리인: 김은구 (KIM, Eungu)** 등; 서울시 강남구 역삼동 636-15 상원빌딩 2 층, 135-908 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, BR, BW, BY, BZ, CA, CH, CL, CN, CO, CR, CU, CZ, DE, DK, DM, DO, DZ, EC, EE, EG, ES, FI, GB, GD, GE, GH, GM, GT, HN, HR, HU, ID, IL, IN, IS, JP, KE, KG, KM, KN, KP, KZ, LA, LC, LK, LR, LS, LT, LU, LY, MA, MD, ME, MG,

MK, MN, MW, MX, MY, MZ, NA, NG, NI, NO, NZ, OM, PE, PG, PH, PL, PT, QA, RO, RS, RU, RW, 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, 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, ML, MR, NE, SN, TD, TG).

공개:

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

명세서

발명의 명칭: 유기전기소자용 화합물, 이를 이용한 유기전기소자 및 그 전자 장치

기술분야

- [1] 본 발명은 저전압 구동, 높은 발광효율 및 소자수명을 향상시킬 수 있는 유기전기소자용 화합물과 조성물, 이를 포함하는 유기전기소자 및 그 전자 장치에 관한 것이다.

배경기술

- [2] 평판 표시소자는 최근 들어 급성장세를 보이고 있는 인터넷을 중심으로 고도의 영상 정보화 사회를 지탱하는 매우 중요한 역할을 수행하고 있다. 특히, 자체 발광형으로 저전압 구동이 가능한 유기전기발광소자(유기EL소자)는, 평판 표시소자의 주류인 액정디스플레이(liquid crystal display, LCD)에 비해 시야각 및 명암비 등이 우수하고, 백라이트가 불필요하여 경량 및 박형이 가능하며, 소비전력 측면에서도 유리한 장점을 가진다. 또한, 응답속도가 빠르며, 색 재현 범위가 넓어 차세대 표시소자로서 주목을 받고 있다. 일반적으로, 유기EL소자는 투명전극으로 이루어진 양극(anode), 발광영역을 포함하는 유기박막 및 금속전극(cathode)의 순으로 유리기판 위에 형성된다. 이때, 유기박막은 발광층(emitting layer, EML) 외에 정공 주입층(hole injection layer, HIL), 정공 수송층(hole transport layer, HTL), 전자 수송층(electron transport layer, ETL) 또는 전자 주입층(electron injection layer, EIL)을 포함할 수 있으며, 발광층의 발광특성상 전자 차단층(electron blocking layer, EBL) 또는 정공 차단층(hole blocking layer, HBL)을 추가로 포함할 수 있다. 이러한 구조의 유기EL소자에 전기장이 가해지면 양극으로부터 정공이 주입되고 음극으로부터 전자가 주입되며, 주입된 정공과 전자는 각각 정공 수송층과 전자 수송층을 거쳐 발광층에서 재조합(recombination)하여 발광 여기자(excitons)를 형성한다. 형성된 발광여기자는 바닥상태(ground states)로 전이하면서 빛을 방출하는데, 이때, 발광 상태의 효율과 안정성을 증가시키기 위해 발광 색소(게스트)를 발광층(호스트)에 도핑하기도 한다. 이러한 유기전기소자를 다양한 디스플레이 매체에 활용하기 위해서는 무엇보다 소자의 수명이 중요하며, 현재 유기전기소자의 수명을 증가시키기 위한 여러 연구들이 진행되고 있다. 특히, 유기전기소자의 우수한 수명 특성을 위해 정공 수송층 또는 완충층(buffer layer)으로 삽입되는 유기물질에 관해 여러 연구가 진행되고 있으며, 이를 위해 양극으로부터 유기층으로의 높은 정공 이동 특성을 부여하면서 증착 후 박막 형성시 균일도가 높고 결정화도가 낮은 정공 주입층 재료가 요구되고 있다.
- [3] 유기전기소자의 수명단축의 원인 중 하나인 양극전극(ITO)으로부터 금속 산화물이 유기층으로 침투 확산되는 것을 지연시키며, 소자 구동시 발생하는

주울열(Joule heating)에 대해서도 안정된 특성, 즉 높은 유리 전이 온도를 갖는 정공 주입층 재료에 대한 개발이 필요하다. 또한 정공 수송층 재료의 낮은 유리전이 온도는 소자 구동시에 박막 표면의 균일도가 무너지는 특성에 따라 소자수명에 큰 영향을 미치는 것으로 보고되고 있다. 또한, OLED 소자의 형성에 있어서 증착방법이 주류를 이루고 있으며, 이러한 증착방법에 오랫동안 견딜 수 있는 재료 즉 내열성 특성이 강한 재료가 필요한 실정이다.

- [4] 특히, 현재 유기발광소자의 주요 극복과제는 모바일용 휴대폰이나 테블릿 PC 등의 패널 사이즈가 대형화되면서, 소비전력 및 수명에 대한 문제 극복이 시급한 실정이다.
- [5] 그러나, 정공 수송층 물질로서 구동전압과 수명을 동시에 극복하기는 어려움이 있다. 그러한 이유는 구동전압을 낮추기 위해 정공 수송능력이 뛰어난, 즉 정공 이동도가 높은 재료들은 대부분은 전자가 풍부한 평면구조를 갖는 경우가 대부분이다. 예를 들면, 나프틸, 플루오렌 및 펜안쓰렌 들이다. 그러나 정공 수송물질에 위와 같은 구조의 화합물을 치환기로 도입하였을 때, 일정 개수까지는 정공 이동도가 높아지며, 수명에도 좋은 영향을 주지만, 현재 산업에서 요구되는 저전압 구동 목표에 도달하기 위해서 분자에 도입 개수를 늘리면, 구동전압이 내려가면서 저전압 구동이 가능 하지만 수명 특성이 급격히 나빠지는 결과들을 보인다. 이러한 이유는 전자가 풍부한 평면구조들이 과도하게 도입된 분자의 경우 소자 수명 평가시에 일정한 전류를 계속해서 공급할 때, 판상 구조들의 사이에 홀이 트랩되어 안정화되며, 이는 정공 이동도를 낮추게 되며, 따라서 일정 전류를 가하기 위해 구동전압이 상승하게 됨에 따라, 소자 수명이 급격히 안 좋아지는 결과를 보인다. 이는 하기식으로 표현된다.

$$[6] \quad J = \frac{9}{8} \epsilon \mu \frac{V^2}{d^3} \theta = \frac{9}{8} \epsilon \mu \frac{1}{d} F^2 \theta$$

[7] J = Space Charge limited current

[8] ϵ = Permittibility

[9] μ = Mobility Coefficient

[10] θ = Charge Trap Coefficient (Free Carrier/total Carrier)

[11] V = Voltage

[12] d = Thickness

- [13] 트랩(Trap) 현상으로 자유 전하(Free Carrier)의 숫자가 적어지면, θ 값이 적어지며 따라서 일정한 전류(current)가 필요한 전류구동방식의 유기전기발광소자에서는 구동전압이 상승하며 이는 수명에 매우 치명적인 결과를 가져올 수 있다. 따라서 전술한 바와 같이 정공 이동도를 높일 수 있는 전자가 풍부한 판상구조의 일정 이상의 도입은 수명에 악영향을 줌으로써 이를 이용해서 구동전압을 낮출 수 있는 가능성은 크지 않다.

발명의 상세한 설명

기술적 과제

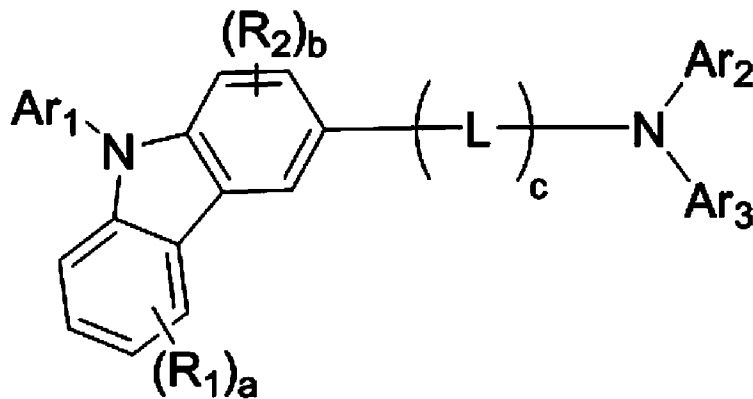
- [14] 본 발명은 소자의 높은 발광효율, 낮은 구동전압, 색순도 및 수명을 향상시킬 수 있는 화합물과 조성물 및 이를 이용한 유기전기소자 그리고 그 전자장치를 제공하는 것을 목적으로 한다.

과제 해결 수단

- [15] 상기 목적을 달성하기 위하여, 본 발명은 하기 화학식 1로 표시되는 화합물을 제공한다.

[16] <화학식 1>

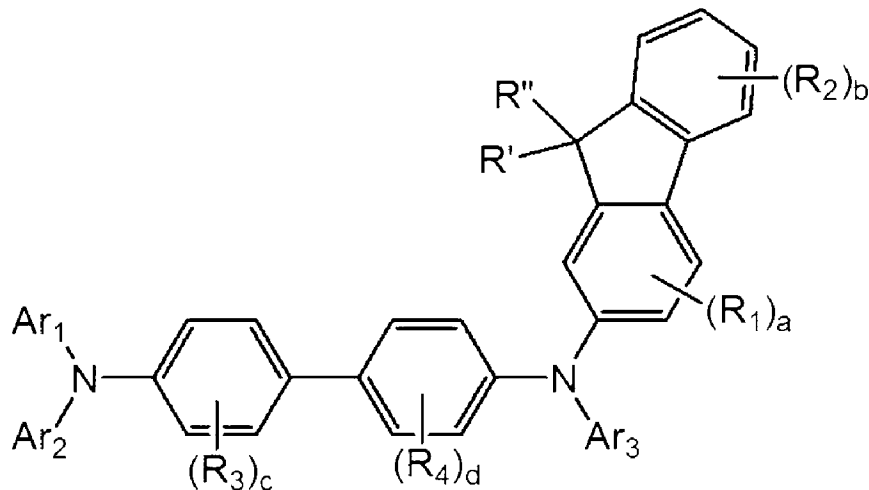
[17]



- [18] 다른 측면에서, 본 발명은 상기 화학식 1과 하기 화학식 2로 표시되는 화합물을 혼합한 조성물을 제공한다.

[19] <화학식 2>

[20]



- [21] 또 다른 측면에서, 본 발명은 상기 화학식 1로 표시되는 화합물들 중 서로 다른 2종 이상의 화합물이 혼합된 조성물을 함유하는 유기전기소자용 조성물을 제공한다. 이때, 서로 다른 2종 이상의 화합물 중 적어도 하나는 중수소를 포함하는 화합물일 수 있으며, 서로 다른 2종 이상의 화합물은 어느 하나의 화합물이 조성물 전체 중량의 90중량%를 초과하지 않는 범위에서 혼합될 수

있다.

- [22] 또 다른 측면에서, 본 발명은 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 이용하는 유기전기소자를 제공한다.
- [23] 또 다른 측면에서, 본 발명은 상기 화학식 1로 표시되는 화합물들 중 서로 다른 2종 이상의 화합물이 혼합된 조성물을 이용한 유기전기소자 또는/및 상기 화학식 1로 표시되는 화합물과 상기 화학식 2로 표시되는 화합물이 혼합된 조성물을 이용한 유기전기소자를 제공한다. 이때, 조성물을 이루는 적어도 하나의 화합물은 중수소로 치환된 화합물일 수 있으며, 조성물 전체 중량의 90중량%를 초과하지 않는 범위에서 혼합될 수 있다.
- [24] 또 다른 측면에서, 본 발명은 상기 화학식 1로 표시되는 화합물, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물들 중 서로 다른 2종 이상의 화합물이 혼합된 조성물, 또는/및 상기 화학식 1과 상기 화학식 2로 표시되는 화합물이 혼합된 조성물을 포함하는 유기전기소자를 포함하는 디스플레이장치; 및 상기 디스플레이장치를 구동하는 제어부;를 포함하는 전자장치를 제공한다.

발명의 효과

- [25] 본 발명에 따른 화합물 및/또는 조성물을 이용함으로써 소자의 높은 발광효율, 낮은 구동전압, 우수한 색순도 및 수명을 크게 향상시킬 수 있다.

도면의 간단한 설명

- [26] 도 1 내지 도 6은 본 발명의 화합물을 적용할 수 있는 유기전기발광소자의 예를 도시한 것이다.
- [27] 도 7 내지 도 9는 각각 중수소가 도입된 본 발명의 화합물과 중수소가 도입되지 않은 화합물의 휘도, 전류밀도 및 효율을 비교한 그래프이다.

발명의 실시를 위한 형태

- [28] 이하에서 본 발명의 일부 실시예들을 예시적인 도면을 통해 상세하게 설명한다.
- [29] 각 도면의 구성요소들에 참조부호를 부가함에 있어서, 동일한 구성요소들에 대해서는 비록 다른 도면상에 표시되더라도 가능한 한 동일한 부호를 가지도록 하고 있음에 유의해야 한다. 또한, 본 발명을 설명함에 있어, 관련된 공지 구성 또는 기능에 대한 구체적인 설명이 본 발명의 요지를 흐릴 수 있다고 판단되는 경우에는 그 상세한 설명은 생략한다.
- [30] 또한, 본 발명의 구성 요소를 설명하는 데 있어서, 제 1, 제 2, A, B, (a), (b) 등의 용어를 사용할 수 있다. 이러한 용어는 그 구성 요소를 다른 구성 요소와 구별하기 위한 것일 뿐, 그 용어에 의해 해당 구성 요소의 본질이나 차례 또는 순서 등이 한정되지 않는다. 어떤 구성 요소가 다른 구성 요소에 "연결", "결합" 또는 "접속"된다고 기재된 경우, 그 구성 요소는 그 다른 구성 요소에 직접적으로 연결되거나 또는 접속될 수 있지만, 각 구성 요소 사이에 또 다른 구성 요소가 "연결", "결합" 또는 "접속"될 수도 있다고 이해되어야 할 것이다.

- [31] 본 명세서에서 사용된 용어 "할로" 또는 "할로젠"은 불소, 염소, 브롬, 및 요오드를 포함한다.
- [32] 본 발명에 사용된 용어 "알킬" 또는 "알킬기"는 다른 설명이 없는 한 1 내지 60의 탄소수를 가지며, 여기에 제한되는 것은 아니다.
- [33] 본 발명에 사용된 용어 "알케닐" 또는 "알키닐"은 다른 설명이 없는 한 각각 2 내지 60의 탄소수의 이중결합 또는 삼중결합을 가지며, 여기에 제한되는 것은 아니다.
- [34] 본 발명에 사용된 용어 "시클로알킬"은 다른 설명이 없는 한 3 내지 60의 탄소수를 갖는 고리를 형성하는 알킬을 의미하며, 여기에 제한되는 것은 아니다.
- [35] 본 발명에 사용된 용어 "알콕시기"는 다른 설명이 없는 한 1 내지 60의 탄소수를 가지며, 여기에 제한되는 것은 아니다.
- [36] 본 발명에 사용된 용어 "아릴기" 및 "아릴렌기"는 다른 설명이 없는 한 각각 6 내지 60의 탄소수를 가지며, 이에 제한되는 것은 아니다.
- [37] 본 명세서에서 사용된 용어 "헤테로알킬"은 다른 설명이 없는 한 하나 또는 그 이상의 헤테로원자를 갖는 알킬을 의미한다.
- [38] 본 발명에 사용된 용어 "헤테로아릴기" 또는 "헤테로아릴렌기"는 다른 설명이 없는 한 각각 하나 또는 그 이상의 헤테로원자를 갖는 탄소수 3 내지 60의 아릴기 또는 아릴렌기를 의미하며, 여기에 제한되는 것은 아니다.
- [39] 본 발명에 사용된 용어 "헤테로시클로알킬", "헤테로고리기"는 다른 설명이 없는 한 하나 또는 그 이상의 헤테로원자를 포함하고, 2 내지 60의 탄소수를 갖는다.
- [40] 본 명세서에서 사용된 용어 "헤테로원자"는 N, O, S, P 및 Si를 나타낸다.
- [41] 다른 설명이 없는 한, 본 발명에 사용된 용어 "지방족"은 탄소수 1 내지 60의 지방족 탄화수소를 의미하며, "지방족고리"는 탄소수 3 내지 60의 지방족 탄화수소 고리를 의미한다.
- [42] 전술한 헤테로화합물 이외의 그 밖의 다른 헤테로화합물 또는 헤테로라디칼은 하나 이상의 헤테로원자를 포함하며, 여기에 제한되는 것은 아니다.
- [43] 또한 명시적인 설명이 없는 한, 본 발명에서 사용된 용어 "치환 또는 비치환된"에서 "치환"은 중수소, 할로젠, 아미노기, 니트릴기, 니트로기, C₁~C₂₀의 알킬기, C₁~C₂₀의 알콕시기, C₁~C₂₀의 알킬아민기, C₁~C₂₀의 알킬티오펜기, C₆~C₂₀의 아릴티오펜기, C₂~C₂₀의 알케닐기, C₂~C₂₀의 알키닐기, C₃~C₂₀의 시클로알킬기, C₆~C₆₀의 아릴기, 중수소로 치환된 C₆~C₂₀의 아릴기, C₈~C₂₀의 아릴알케닐기, 실란기, 붕소기, 게르마늄기, C₅~C₂₀의 헤테로고리기로 이루어진 군으로부터 선택되는 1개 이상의 치환기로 치환됨을 의미하며, 이들 치환기에 제한되는 것은 아니다.
- [44] 본 발명은 수명이 좋은 재료를 이용하여, 수명에 악영향을 주는 환상구조의 분자구조를 도입하지 않고, 구동전압을 낮출 수 있는 방법으로, 중수소를 적절한 비율로 치환하는 방법과, 중수소로 치환된 유사구조의 화합물을 혼합하여

사용함으로써, 구동전압을 낮추는 방법을 제시한다.

- [45] 중수소로 치환된 화합물은 비치환된 화합물과 비교하여 많은 열역학적 거동을 보이는 것을 확인하였다. 이러한 열역학적 특성 중, 이리듐 화합물이 중수소로 치환될 경우, 탄소, 수소 및 탄소, 중수소 결합길이의 차이에 따라서, 결합길이가 더욱 짧은 탄소, 중수소로 이루어진 화합물이 결합길이가 짧음에 따라 발생하는 분자간 반데르발스 힘의 약화로 인해 더 높은 발광효율을 가질 수 있음을 확인하였다.
- [46] 또한 중수소로 치환된 경우에는 제로포인트 에너지(Zero Point Energy) 즉 바닥상태의 에너지가 낮아지며, 중수소, 탄소의 결합길이가 짧아짐에 따라, 분자 중심 부피(Molecular hardcore volume)가 줄어들고, 이에 따라 전기적 극성화도(Electroical polarizability)를 줄일 수 있으며, 분자간 상호작용(Intermolecular interaction)을 약하게 함으로써, 박막 부피를 증가시킬 수 있음을 확인하였다. 이러한 특성은 박막의 결정화도를 낮추는 효과 즉, 비결정질(Amorphous) 상태를 만들 수 있으며, 일반적으로 OLED 수명 및 구동특성을 높이기 위하여, 반드시 필요한 비결정질 상태를 구현하는데 매우 효과적일 것이라고 판단하였다.
- [47] 그러나, 중수소로 치환하여 구동전압을 낮추는, 즉 정공 수송물질의 정공수송도(Mobility)를 높이는 방법은 현재 많은 연구가 진행되어 있지 않으며, 본 연구에서는 그러한 특성을 확인하기 위하여 다양한 종류의 화합물을 이용하여, 많은 실험을 진행하였다. 또한 중수소로 치환된 유사구조의 화합물을 혼합하여 박막을 형성하였을 때, 박막의 정공 이동도에 많은 영향을 줄 수 있는 비정질 유리상태(Amorphous glass)를 만들기 때문에, 매우 유리할 수 있으며, 이러한 비정질 유리상태는 등방성(Isotropic)과 균등질(Homogeneous) 특성을 통해서 결정립의 경계(Grain boundary)를 줄임으로써, 전하의 흐름 즉 정공 이동도를 빠르게 할 수 있다는 것을 확인하였다.
- [48] 본 발명을 좀더 상세히 설명하면, 수명의 우수한 재료로서 카바졸을 포함하는 아민화합물을 이용하였다. 특히 주목할 것은 카바졸계 아민 화합물은 본 연구에 따르면 수명 특성이 우수하나, 구동전압이 상승하는 단점이 있다. 그러나 종래 기술에서는 이러한 부분에 대한 개선의 효과를 입증한 바는 없으며, 특히 특정 위치에 중수소 치환을 통해 구동특성을 개선한 종래 기술은 아직 보고된 바가 없다.
- [49] 이러한 발명자들의 연구개발의 결과로 전술한 유기전기소자의 유기물층들의 뛰어난 특성을 유지하면서도 유기재료의 요구특성에 부합하도록 본 발명은 중수소로 치환된 아민기가 결합된 화합물을 제공한다.
- [50] 특히, 본 발명의 일 실시예에 따른 화합물 중 카바졸과 아릴아민이 아릴렌 등으로 연결된 코어구조의 경우, 아민기에 결합된 아릴기에 중수소를 도입함으로써 유기전기발광소자의 소자 특성을 향상시킬 수 있다. 예컨대, 아민기에 비페닐(bi-phenyl)이 결합되어 있고, 비페닐 중 말단 페닐기에 수소 대신

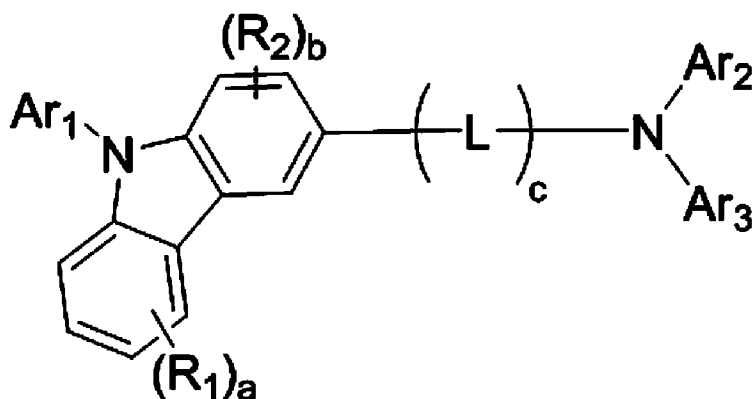
중수소를 도입함으로써 보다 안정적으로 유기물층을 증착시킬 수 있게 되고, 계면특성을 향상시킬 수 있으며, 에너지 밴드갭을 미세하게 조절하는 것이 용이하므로 우수한 유기전기 소자 특성을 갖는 유기전기소자를 제작할 수 있게 된다.

- [51] 아민기와 말단 아릴기 사이에 존재하는 아릴기에 중수소를 도입하더라도 우수한 소자 특성을 갖는 유기전기소자를 제작할 수 있지만, 아민기에 결합된 아릴기 중 말단의 아릴기, 예컨대 말단의 페닐기에 중수소를 도입하는 것이 보다 우수한 소자 제작에 유리하다. 또한, 아민기에 결합된 아릴기 중 말단의 아릴기, 예컨대 페닐기에 중수소를 도입하되 다른 치환기와 결합되는 탄소를 제외한 모든 탄소에 수소 대신 중수소를 치환하는 것이 보다 우수한 소자 제작에 유리하다.

[52]

[53] 본 발명은 하기 화학식 1로 표시되는 화합물을 제공한다.

[54] 화학식 1



[55] 상기 화학식 1에서,

[56] (1) Ar₁ 내지 Ar₃은 각각 독립적으로 동일하거나 상이하며,

[57] 수소, 중수소, 할로젠, 아미노기, 니트릴기, 니트로기, C₁~C₂₀의 알킬기, C₁~C₂₀의 알콕시기, C₁~C₂₀의 알킬아민기, C₁~C₂₀의 알킬티오펜기, C₆~C₂₀의 아릴티오펜기, C₂~C₂₀의 알케닐기, C₂~C₂₀의 알키닐기, C₃~C₂₀의 시클로알킬기, C₆~C₆₀의 아릴기, 중수소로 치환된 C₆~C₂₀의 아릴기, C₈~C₂₀의 아릴알케닐기, C₆~C₂₀의 아릴아민기, 실란기, 붕소기, 게르마늄기 및 C₃~C₂₀의 헤테로고리기로 이루어진 군으로부터 선택되는 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환된 C₆~C₆₀의 아릴기;

[58] 수소, 중수소, 할로젠기, C₁~C₂₀의 알킬기, C₂~C₂₀의 알케닐기, C₁~C₂₀의 알콕시기, C₆~C₂₀의 아릴아민기, C₆~C₆₀의 아릴기, 중수소로 치환된 C₆~C₂₀의 아릴기, C₇~C₂₀의 아릴알킬기, C₈~C₂₀의 아릴알케닐기, C₃~C₂₀의 헤테로고리기, 니트릴기 및 아세틸렌기로 이루어진 군에서 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환되고 O, N 및 S 중 적어도 하나를 포함하는 C₂~C₆₀의 헤테로고리기;

[59] 수소, 중수소, 할로젠기, 아미노기, 니트릴기, 니트로기, C₁~C₂₀의 알킬기, C₂~C

- 20의 알케닐기, C₁~C₂₀의 알콕시기, C₃~C₃₀의 시클로알킬기, C₂~C₃₀의 헤테로시클로알킬기, C₆~C₆₀의 아릴기, 중수소로 치환된 C₆~C₂₀의 아릴기 및 C₂~C₂₀의 헤테로고리기로 구성된 군에서 선택된 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환된 C₁~C₃₀의 알콕시기;
- [60] 수소, 중수소, 할로젠기, 아미노기, 니트릴기, 니트로기, C₁~C₂₀의 알킬기, C₂~C₂₀의 알케닐기, C₁~C₂₀의 알콕시기, C₃~C₃₀의 시클로알킬기, C₂~C₃₀의 헤테로시클로알킬기, C₆~C₆₀의 아릴기, 중수소로 치환된 C₆~C₂₀의 아릴기 및 C₂~C₂₀의 헤테로고리기로 구성된 군으로부터 선택된 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환된 C₆~C₃₀아릴옥시기;
- [61] 할로젠기, 아미노기, 니트릴기, 니트로기, C₁~C₂₀의 알킬기, C₂~C₂₀의 알케닐기, C₁~C₂₀의 알콕시기, C₃~C₃₀의 시클로알킬기, C₂~C₃₀의 헤테로시클로알킬기, C₆~C₆₀의 아릴기 및 C₂~C₂₀의 헤테로고리기로 구성된 군에서 선택된 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환된 C₆~C₆₀의 아릴아민기; 및
- [62] C₁~C₂₀의 알킬기, C₂~C₂₀의 알케닐기, C₁~C₂₀의 알콕시기, C₆~C₂₀의 아릴기, 중수소로 치환된 C₆~C₂₀의 아릴기, C₇~C₂₀의 아릴알킬기, C₈~C₂₀의 아릴알케닐기, C₃~C₂₀의 헤테로고리기, 니트릴기 및 아세틸렌기로 이루어진 군에서 선택된 치환기로 치환 또는 비치환된 C₁~C₃₀의 알킬기;로 이루어진 군에서 선택되며,
- [63] 여기서 Ar₁~Ar₃ 중 적어도 하나는 중수소를 1개 이상 포함하고,
- [64] (2) R₁ 및 R₂는 각각 독립적으로 동일하거나 상이하며, 수소; 중수소; 할로젠; 니트로기; 니트릴기; 아미노기;
- [65] 수소, 중수소, 할로젠, 아미노기, 니트릴기, 니트로기, C₁~C₂₀의 알킬기, C₁~C₂₀의 알콕시기, C₁~C₂₀의 알킬아민기, C₁~C₂₀의 알킬티오펜기, C₆~C₂₀의 아릴티오펜기, C₂~C₂₀의 알케닐기, C₂~C₂₀의 알키닐기, C₃~C₂₀의 시클로알킬기, C₆~C₆₀의 아릴기, 중수소로 치환된 C₆~C₂₀의 아릴기, C₈~C₂₀의 아릴알케닐기, C₆~C₂₀의 아릴아민기, 실란기, 붕소기, 게르마늄기 및 C₃~C₂₀의 헤테로고리기로 이루어진 군으로부터 선택되는 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환된 C₆~C₆₀의 아릴기;
- [66] 수소, 중수소, 할로젠기, C₁~C₂₀의 알킬기, C₂~C₂₀의 알케닐기, C₁~C₂₀의 알콕시기, C₆~C₂₀의 아릴아민기, C₆~C₆₀의 아릴기, 중수소로 치환된 C₆~C₂₀의 아릴기, C₇~C₂₀의 아릴알킬기, C₈~C₂₀의 아릴알케닐기, C₃~C₂₀의 헤테로고리기, 니트릴기 및 아세틸렌기로 이루어진 군에서 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환 되고 O, N 및 S 중 적어도 하나를 포함하는 C₂~C₆₀의 헤테로고리기;
- [67] 수소, 중수소, 할로젠기, 아미노기, 니트릴기, 니트로기, C₁~C₂₀의 알킬기, C₂~C₂₀의 알케닐기, C₁~C₂₀의 알콕시기, C₃~C₃₀의 시클로알킬기, C₂~C₃₀의 헤테로시클로알킬기, C₆~C₆₀의 아릴기, 중수소로 치환된 C₆~C₂₀의 아릴기 및 C₂~C₂₀의 헤테로고리기로 구성된 군으로부터 선택된 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환된 C₁~C₃₀의 알콕시기;
- [68] 수소, 중수소, 할로젠기, 아미노기, 니트릴기, 니트로기, C₁~C₂₀의 알킬기, C₂~C₂₀의 알케닐기, C₁~C₂₀의 알콕시기, C₃~C₃₀의 시클로알킬기, C₂~C₃₀의

헤테로시클로알킬기, C₆~C₆₀의 아릴기, 중수소로 치환된 C₆~C₂₀의 아릴기 및 C₂~C₂₀의 헤테로고리기로 구성된 군으로부터 선택된 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환된 C₆~C₃₀의 아릴옥시기; 및

[69] C₁~C₂₀의 알킬기, C₂~C₂₀의 알케닐기, C₁~C₂₀의 알콕시기, C₆~C₂₀의 아릴기, 중수소로 치환된 C₆~C₂₀의 아릴기, C₇~C₂₀의 아릴알킬기, C₈~C₂₀의 아릴알케닐기, C₃~C₂₀의 헤테로고리기, 니트릴기 및 아세틸렌기로 이루어진 군에서 선택된 치환기로 치환 또는 비치환된 C₁~C₅₀의 알킬기;로 이루어진 군에서 선택되며,

[70] 여기서, R₁ 및 R₂는 인접한 기와 서로 결합하여 지환족, 방향족 또는 헤테로고리를 형성할 수 있고,

[71] (3) L은 니트로기, 니트릴기, 할로젠기, 알킬기, 알콕시기, 아미노기, 아릴아민기 및 헤테로고리기로 이루어진 군에서 선택되는 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환된 C₆~C₆₀의 아릴렌기; 또는 니트로, 니트릴, 할로젠, 알킬기, 알콕시기, 아미노기 및 아릴기로 이루어진 군에서 선택되는 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환된 C₂~C₆₀의 헤테로고리기이며,

[72] (4) a는 0~4의 정수, b는 0~3의 정수, c는 0~2의 정수이다.

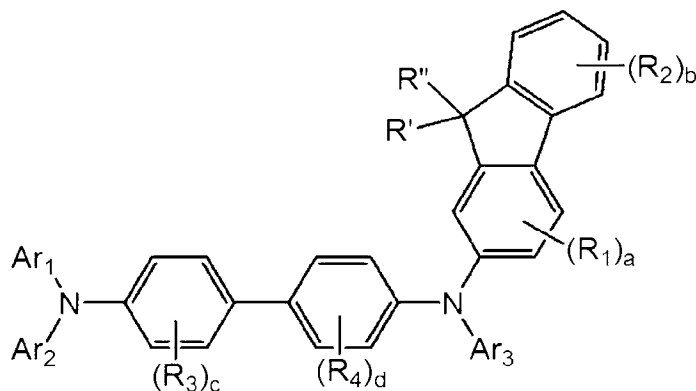
[73]

[74] 다른 측면에서, 본 발명은 상기 화학식 1로 표시되는 화합물들 중 서로 다른 2종 이상의 화합물이 혼합된 조성물을 제공한다. 이때, 서로 다른 2종 이상의 화합물은 하나의 화합물이 조성물 전체의 90중량%를 초과하지 않는 범위에서 혼합될 수 있다.

[75]

[76] 또 다른 측면에서, 본 발명은 상기 화학식 1로 표시되는 화합물과 하기 화학식 2로 표시되는 화합물이 혼합된 유기전기소자용 조성물을 제공한다. 이때, 조성물은 어느 하나의 화합물이 조성물 전체 중량의 90중량% 이하의 범위로 혼합될 수 있다.

[77] 화학식 2



[78] 상기 화학식 2에서,

[79] (1) Ar₁ 내지 Ar₃은 상기 화학식 1의 Ar₁ 내지 Ar₃의 치환기 정의와 동일하며,

[80] (2) R₁ 내지 R₄는 상기 화학식 1의 R₁ 또는 R₂의 치환기 정의와 동일하며, 여기서,

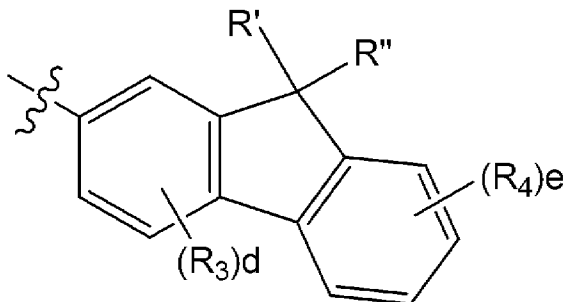
R₁ 내지 R₄는 인접한 기와 서로 결합하여 지환족, 방향족 또는 헤테로고리를 형성할 수 있으며,

- [81] (3) R' 및 R''는 각각 독립적으로 동일하거나 상이하며, 수소, 중수소, 할로젠, 아미노기, 니트릴기, 니트로기, C₁~C₂₀의 알킬기, C₁~C₂₀의 알콕시기, C₁~C₂₀의 알킬아민기, C₁~C₂₀의 알킬티오펜기, C₆~C₂₀의 아릴티오펜기, C₂~C₂₀의 알케닐기, C₂~C₂₀의 알키닐기, C₃~C₂₀의 시클로알킬기, C₆~C₆₀의 아릴기, 중수소로 치환된 C₂~C₂₀의 아릴기, C₈~C₂₀의 아릴알케닐기, C₆~C₂₀의 아릴아민기, 실란기, 붕소기, 게르마늄기, C₃~C₂₀의 헤테로고리기로 이루어진 군으로부터 선택되는 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환된 C₆~C₆₀의 아릴기; 또는 C₁~C₂₀의 알킬기, C₂~C₂₀의 알케닐기, C₁~C₂₀의 알콕시기, C₆~C₂₀의 아릴기, 중수소로 치환된 C₂~C₂₀의 아릴기, C₇~C₂₀의 아릴알킬기, C₈~C₂₀의 아릴알케닐기, C₃~C₂₀의 헤테로고리기, 니트릴기 및 아세틸렌기로 이루어진 군에서 선택된 치환기로 치환 또는 비치환된 C₁~C₅₀의 알킬기이며, 여기서, R' 및 R''는 서로 결합하여 지환족, 방향족, 헤테로고리, 또는 스피로화합물을 형성할 수 있으며,
- [82] (4) a는 1 내지 3의 정수이고, b, c 및 d는 각각 1 내지 4의 정수이다.

[83]

- [84] 더욱 구체적으로, 상기 화학식 1에서, Ar₃은 중수소를 1개 이상 포함하며, Ar₂는 다음 화학식으로 표시될 수 있다.

[85]



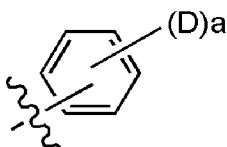
[86] 상기 화학식에서,

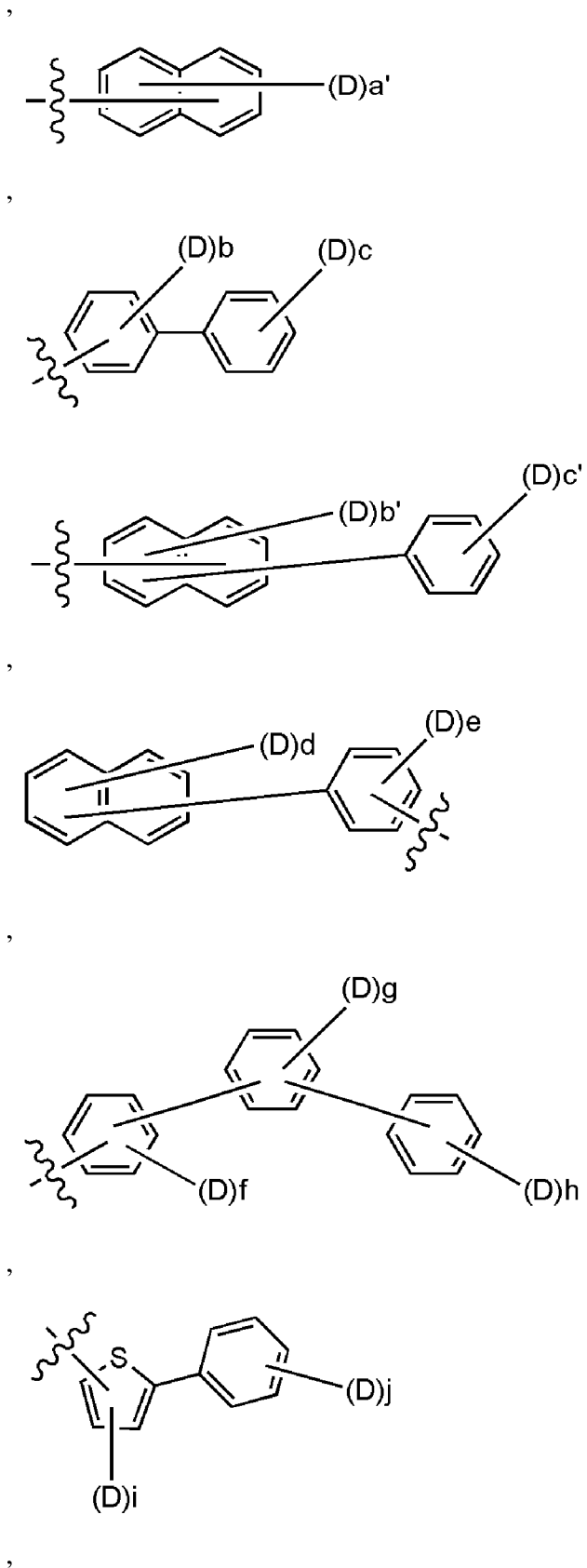
- [87] (1) R₃ 및 R₄는 각각 독립적으로 동일하거나 상이하며, 할로젠; 니트로기; 니트릴기; 아미노기;

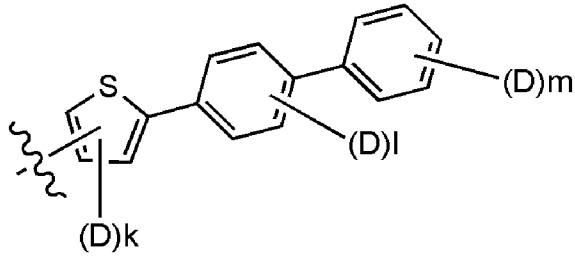
[88] 수소, 중수소, 할로젠, 아미노기, 니트릴기, 니트로기, C₁~C₂₀의 알킬기, C₁~C₂₀의 알콕시기, C₁~C₂₀의 알킬아민기, C₁~C₂₀의 알킬티오펜기, C₆~C₂₀의 아릴티오펜기, C₂~C₂₀의 알케닐기, C₂~C₂₀의 알키닐기, C₃~C₂₀의 시클로알킬기, C₆~C₆₀의 아릴기, 중수소로 치환된 C₆~C₂₀의 아릴기, C₈~C₂₀의 아릴알케닐기, C₆~C₂₀의 아릴아민기, 실란기, 붕소기, 게르마늄기 및 C₃~C₂₀의 헤테로고리기로 이루어진 군으로부터 선택되는 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환된 C₆~C₆₀의 아릴기;

[89] 수소, 중수소, 할로젠기, C₁~C₂₀의 알킬기, C₂~C₂₀의 알케닐기, C₁~C₂₀의 알콕시기, C₆~C₂₀의 아릴아민기, C₆~C₆₀의 아릴기, 중수소로 치환된 C₆~C₂₀의 아릴기, C₈~C₂₀의 아릴알킬기, C₈~C₂₀의 아릴알케닐기, C₃~C₂₀의 헤테로고리기, 니트릴기 및 아세틸렌기로 이루어진 군에서 1개 이상의 치환기로 치환 또는

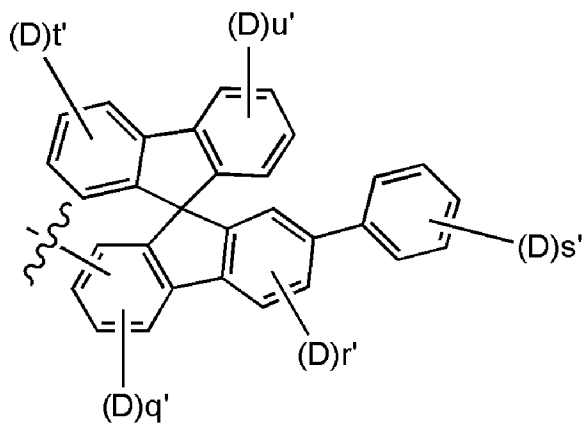
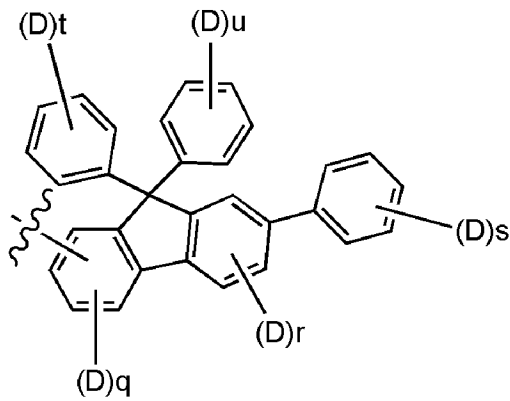
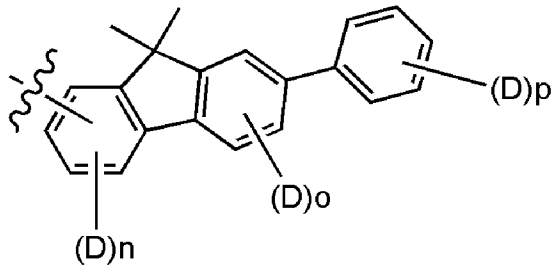
- 비치환 되고 O, N 및 S 중 적어도 하나를 포함하는 C_2 - C_{60} 의 헤테로고리기;
- [90] 수소, 중수소, 할로젠기, 아미노기, 니트릴기, 니트로기, C_1 - C_{20} 의 알킬기, C_2 - C_{20} 의 알케닐기, C_1 - C_{20} 의 알콕시기, C_3 - C_{30} 의 시클로알킬기, C_2 - C_{30} 의 헤테로시클로알킬기, C_6 - C_{60} 의 아릴기, 중수소로 치환된 C_6 - C_{20} 의 아릴기 및 C_2 - C_{20} 의 헤테로고리기로 구성된 군으로부터 선택된 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{30} 의 알콕시기;
- [91] 수소, 중수소, 할로젠기, 아미노기, 니트릴기, 니트로기, C_1 - C_{20} 의 알킬기, C_2 - C_{20} 의 알케닐기, C_1 - C_{20} 의 알콕시기, C_3 - C_{30} 의 시클로알킬기, C_2 - C_{30} 의 헤테로시클로알킬기, C_6 - C_{60} 의 아릴기, 중수소로 치환된 C_6 - C_{20} 의 아릴기 및 C_2 - C_{20} 의 헤테로고리기로 구성된 군으로부터 선택된 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환된 C_6 - C_{30} 의 아릴옥시기; 및
- [92] C_1 - C_{20} 의 알킬기, C_2 - C_{20} 의 알케닐기, C_1 - C_{20} 의 알콕시기, C_6 - C_{20} 의 아릴기, 중수소로 치환된 C_6 - C_{20} 의 아릴기, C_7 - C_{20} 의 아릴알킬기, C_8 - C_{20} 의 아릴알케닐기, C_3 - C_{20} 의 헤테로고리기, 니트릴기 및 아세틸렌기로 이루어진 군에서 선택된 치환기로 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{50} 의 알킬기;로 이루어진 군에서 선택되며,
- [93] 여기서, R_3 및 R_4 는 인접한 기와 서로 결합하여 지환족, 방향족 또는 헤테로고리를 형성할 수 있으며,
- [94] (2) R' 및 R'' 는 각각 독립적으로 동일하거나 상이하며, 수소, 중수소, 할로젠, 아미노기, 니트릴기, 니트로기, C_1 - C_{20} 의 알킬기, C_1 - C_{20} 의 알콕시기, C_1 - C_{20} 의 알킬아민기, C_1 - C_{20} 의 알킬티오펜기, C_6 - C_{20} 의 아릴티오펜기, C_2 - C_{20} 의 알케닐기, C_2 - C_{20} 의 알키닐기, C_3 - C_{20} 의 시클로알킬기, C_6 - C_{60} 의 아릴기, 중수소로 치환된 C_6 - C_{20} 의 아릴기, C_8 - C_{20} 의 아릴알케닐기, C_6 - C_{20} 의 아릴아민기, 실란기, 붕소기, 게르마늄기 및 C_3 - C_{20} 의 헤테로고리기로 이루어진 군으로부터 선택되는 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환된 C_6 - C_{60} 의 아릴기; 또는 C_1 - C_{20} 의 알킬기, C_2 - C_{20} 의 알케닐기, C_1 - C_{20} 의 알콕시기, C_6 - C_{20} 의 아릴기, 중수소로 치환된 C_6 - C_{20} 의 아릴기, C_7 - C_{20} 의 아릴알킬기, C_8 - C_{20} 의 아릴알케닐기, C_3 - C_{20} 의 헤테로고리기, 니트릴기 및 아세틸렌기로 이루어진 군에서 선택된 치환기로 치환 또는 비치환된 C_1 - C_{50} 의 알킬기이며, 여기서, R' , R'' 는 서로 결합하여 지환족, 방향족, 헤테로고리, 또는 스피로화합물을 형성할 수 있으며,
- [95] (3) e는 1~4의 정수, d는 1~3의 정수이다.
- [96]
- [97] 상기 화학식 1에서, Ar_1 , Ar_2 , 및 Ar_3 중 적어도 하나는 다음 화학식 3으로 구성된 군으로부터 선택될 수 있다.
- [98] [화학식 3]
- [99]







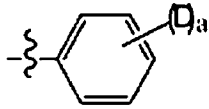
[100]



[101] 상기 화학식 3에서, D는 중수소이며, k 및 i는 0~2의 정수이고, n, o, q, r, q' 및 r'은 0~3의 정수이며, b, e, f, g, l, t' 및 u'은 0~4의 정수이고, a, c, c', h, j, m, p, s, t, u 및 s'은 0~5의 정수이며, b'은 0~6의 정수이며, a' 및 d는 0~7의 정수이다. 이때, Ar₁

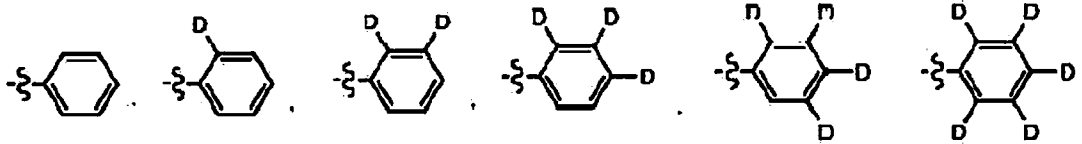
~Ar₃ 중 적어도 하나가 중수소를 포함하도록 상기 지수가 결정될 수 있을 것이다.

[102] 상기 화학식 3에 제시된 구조식에서, 예를 들어,



는 a가 0 내지 5인 경우 각각에 대하여 다음 구조식에 대응한다.

[103]

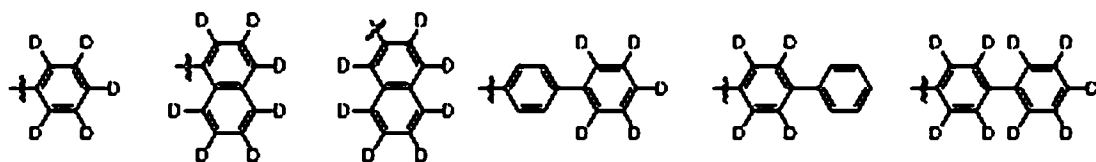


[104] 나머지 구조식에 대하여도 동일하게 적용된다.

[105]

[106] 더욱 구체적으로, 상기 화학식 1 및 화학식 2의 Ar₁ 내지 Ar₃에서 중수소를 함유하는 Ar₁ 내지 Ar₃은 하기와 같이 나타내어지며 그 종류가 이에 한정되는 것은 아니다.

[107] 화학식 4



D-1

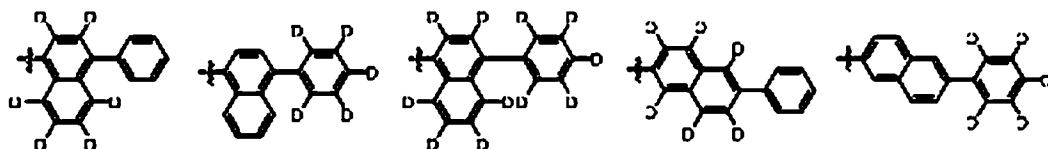
D-2

D-3

D-4

D-5

D-6



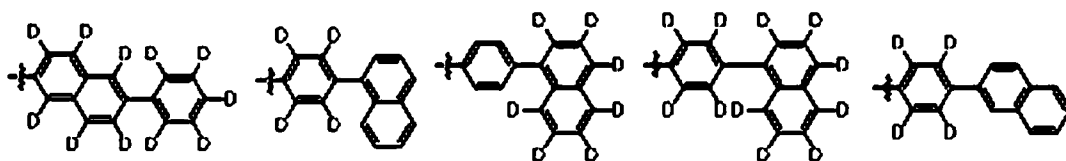
D-7

D-8

D-9

D-10

D-11



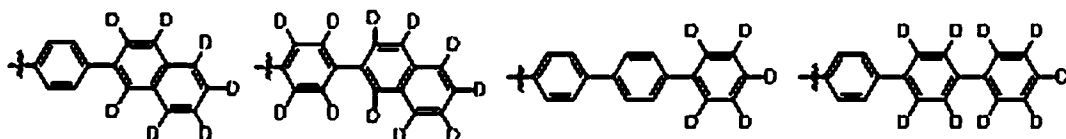
D-12

D-13

D-14

D-15

D-16

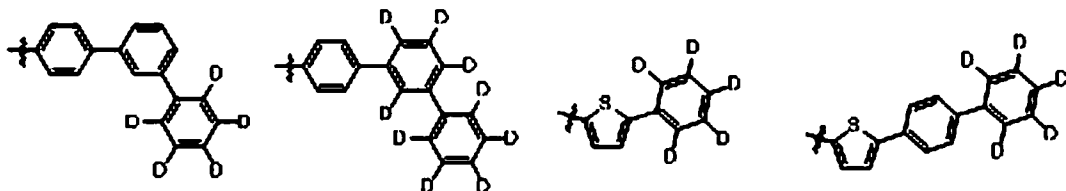


D-17

D-18

D-19

D-20

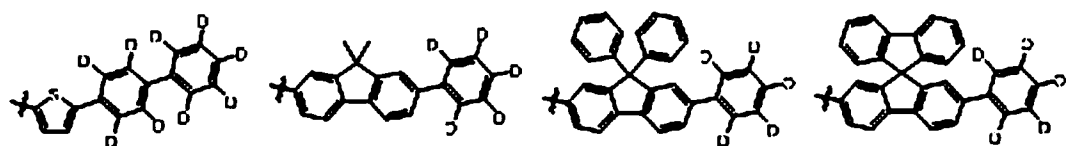


D-21

D-22

D-23

D-24



D-25

D-26

D-27

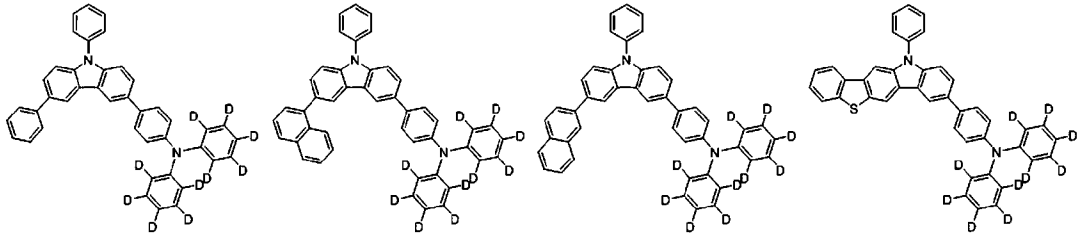
D-28

[108] 더욱 구체적으로, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 아래 화합물 (P-1) 내지

(P-132) 중 어느 하나일 수 있으며, 여기에 제한되는 것은 아니다.

[109]

[110] 화학식 5

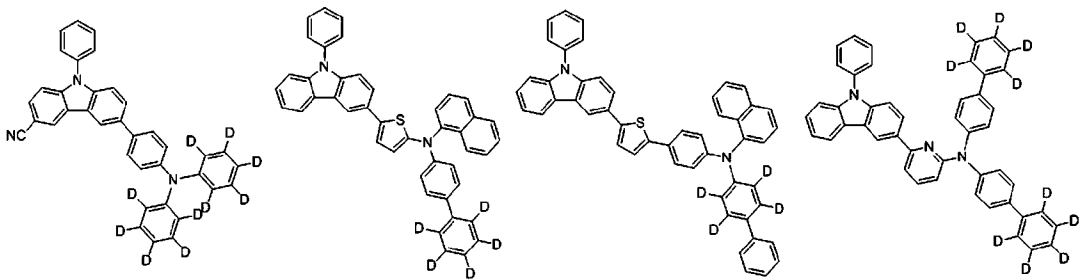


P-1

P-2

P-3

P-4



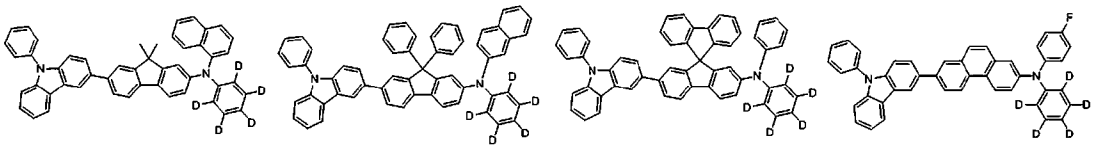
P-5

P-6

P-7

P-8

[111]

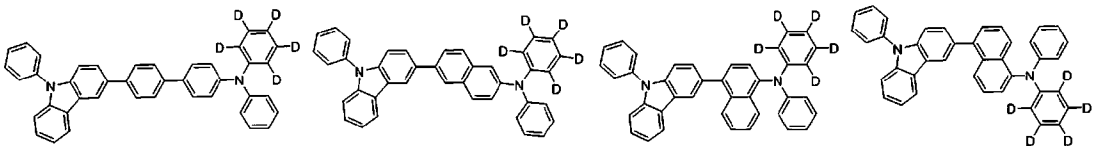


P-9

P-10

P-11

P-12

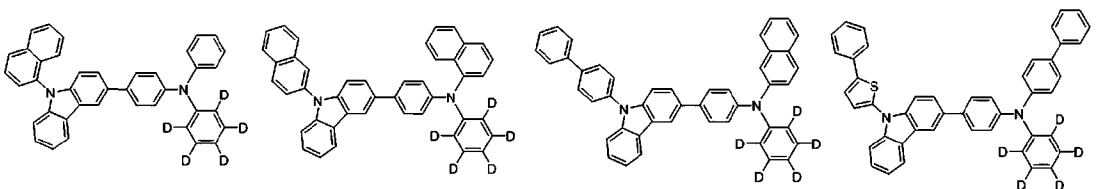


P-13

P-14

P-15

P-16



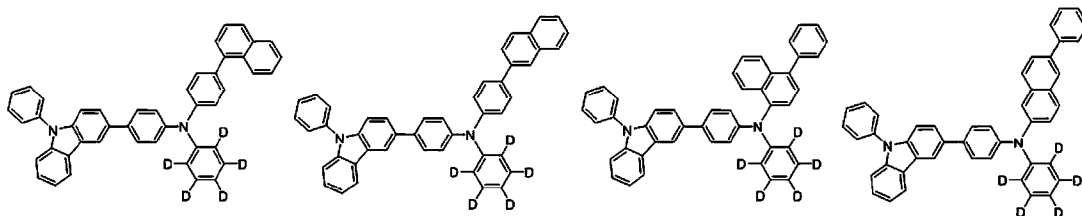
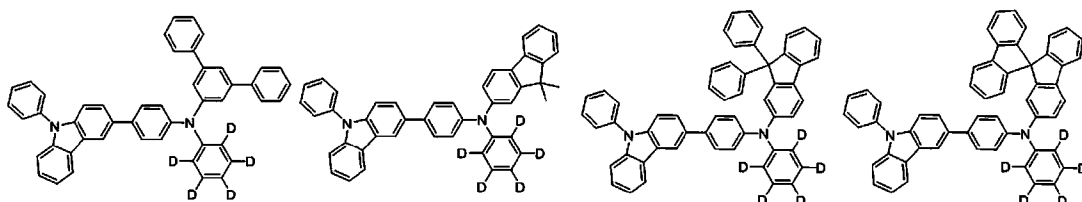
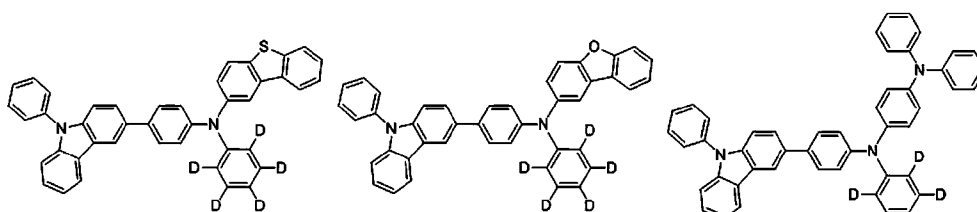
P-17

P-18

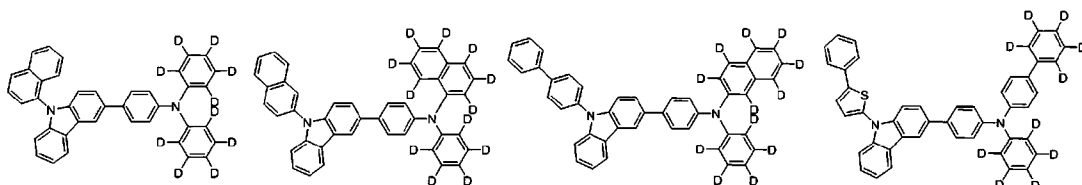
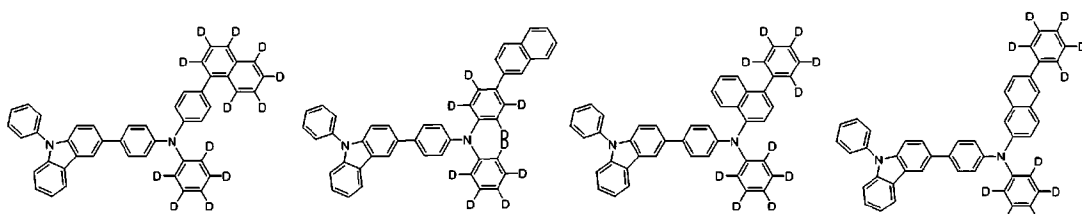
P-19

P-20

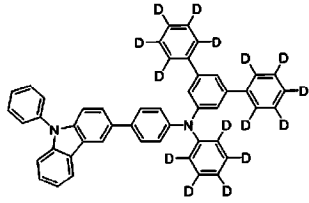
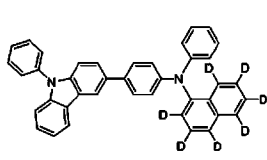
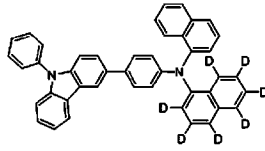
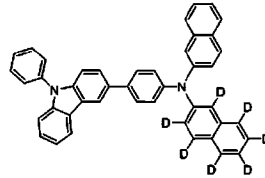
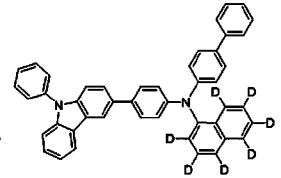
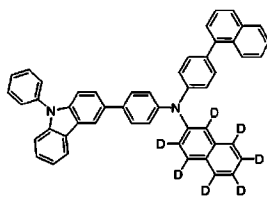
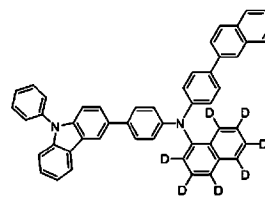
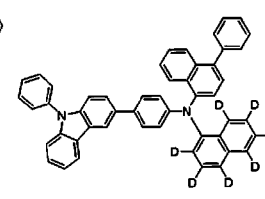
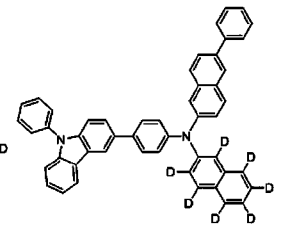
[112]

**P-17****P-18****P-19****P-20****P-21****P-22****P-23****P-24****P-25****P-26****P-27**

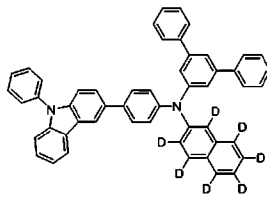
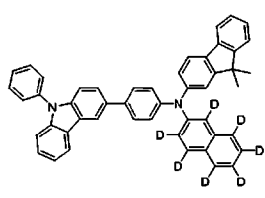
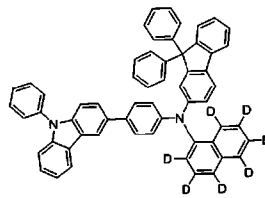
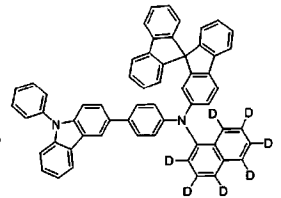
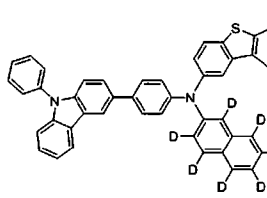
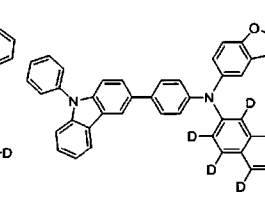
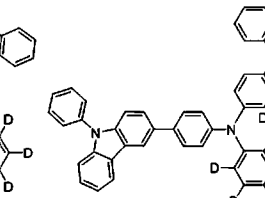
[113]

**P-28****P-29****P-30****P-31****P-32****P-33****P-34****P-35**

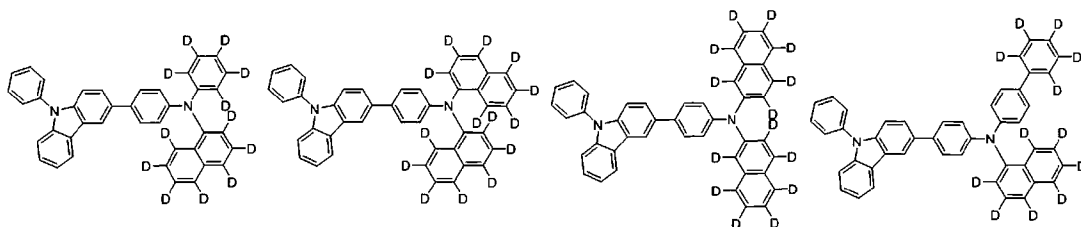
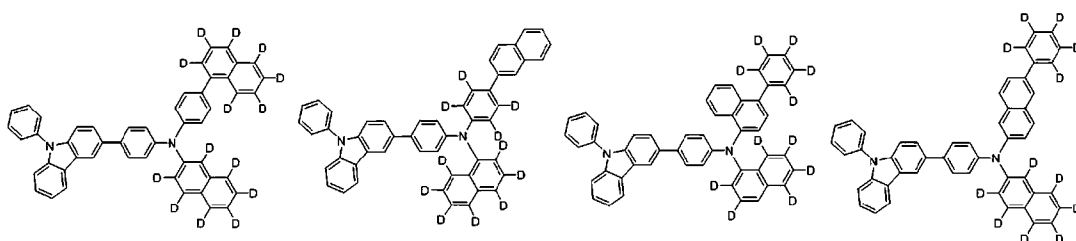
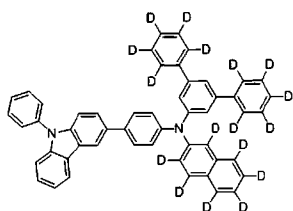
[114]

**P-36****P-37****P-38****P-39****P-40****P-41****P-42****P-43****P-44**

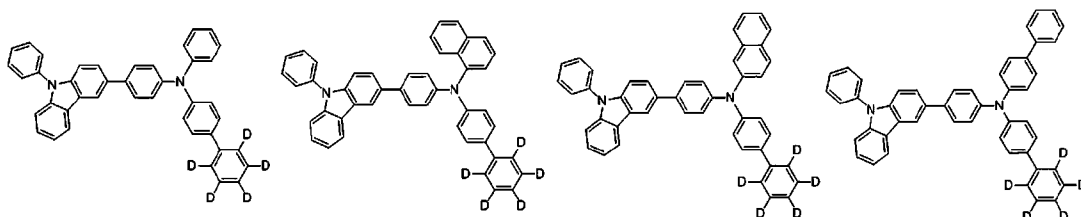
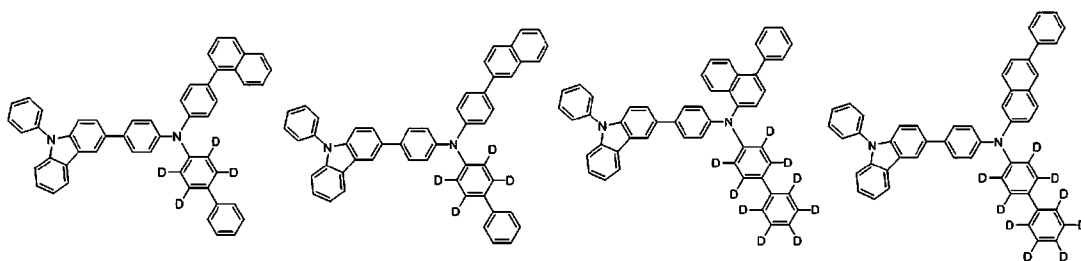
[115]

**P-45****P-46****P-47****P-48****P-49****P-50****P-51**

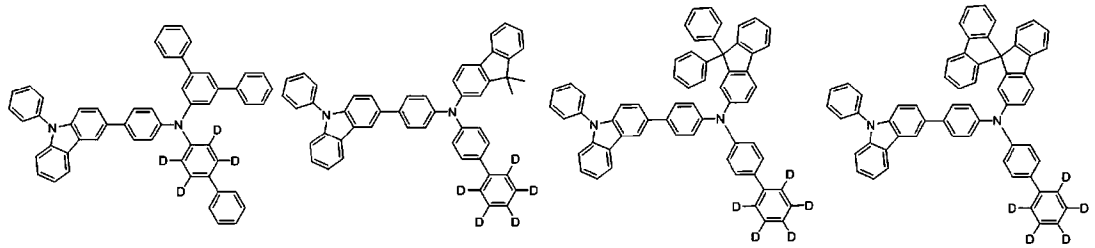
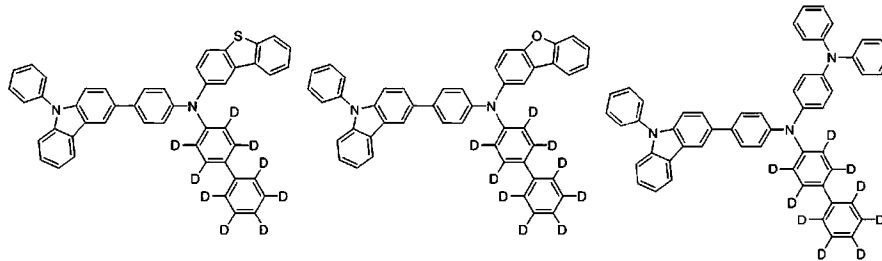
[116]

**P-52****P-53****P-54****P-55****P-56****P-57****P-58****P-59****P-60**

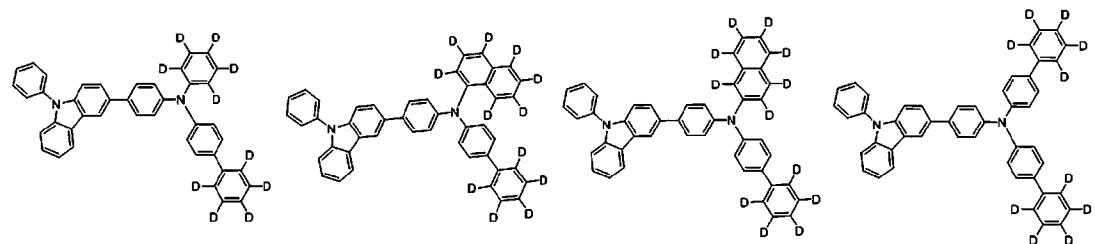
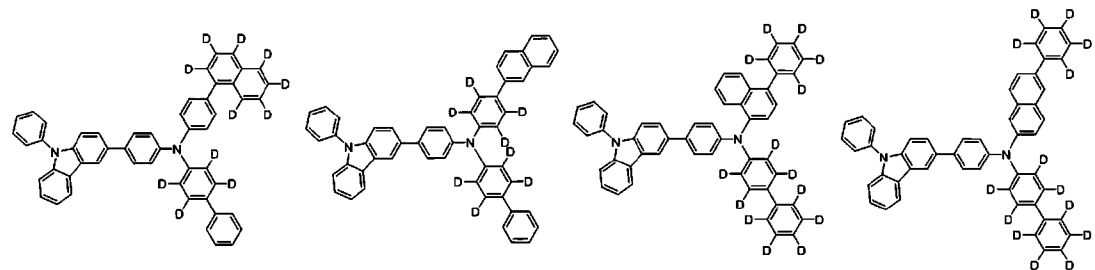
[117]

**P-61****P-62****P-63****P-64****P-65****P-66****P-67****P-68**

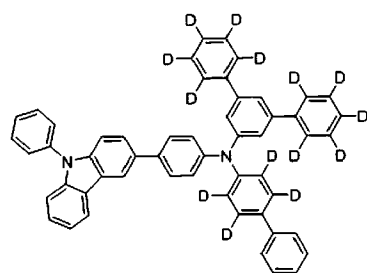
[118]

**P-69****P-70****P-71****P-72****P-73****P-74****P-75**

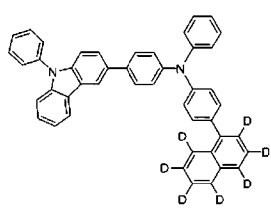
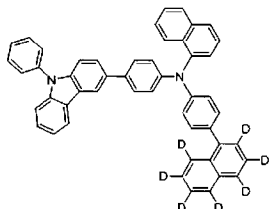
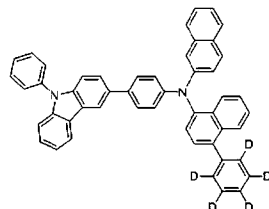
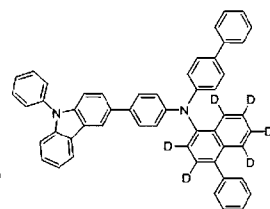
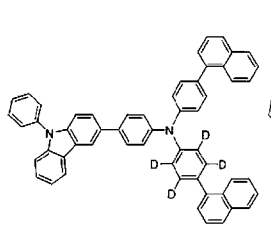
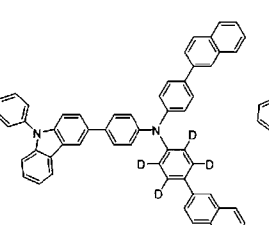
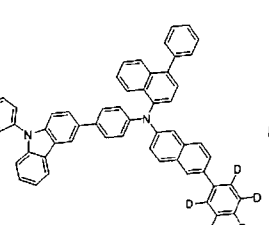
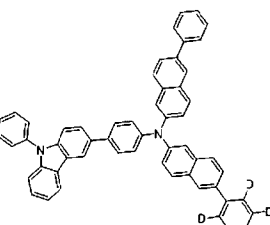
[119]

**P-76****P-77****P-78****P-79****P-80****P-81****P-82****P-83**

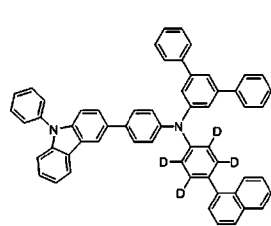
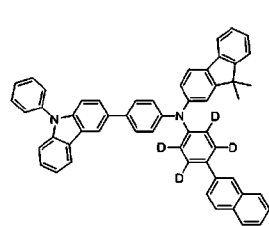
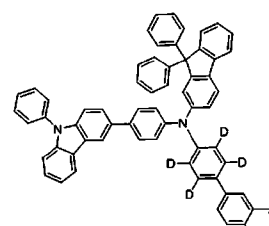
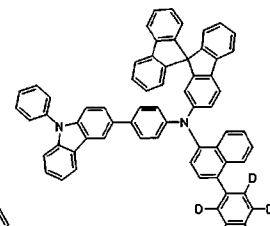
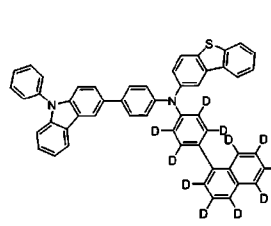
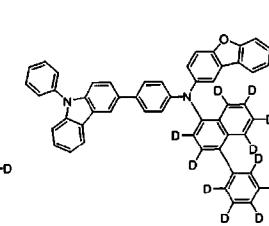
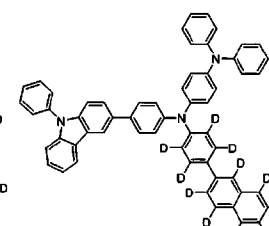
[120]

**P-84**

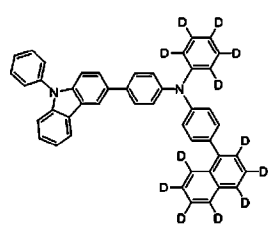
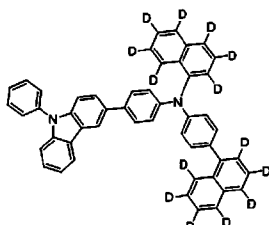
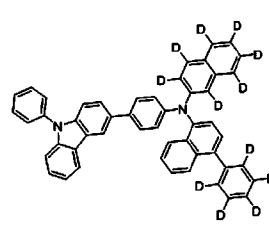
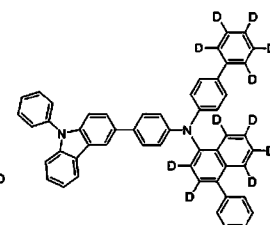
[121]

**P-85****P-86****P-87****P-88****P-89****P-90****P-91****P-92**

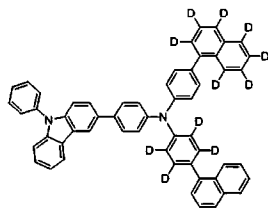
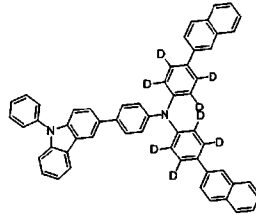
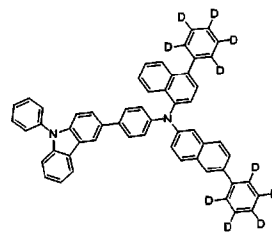
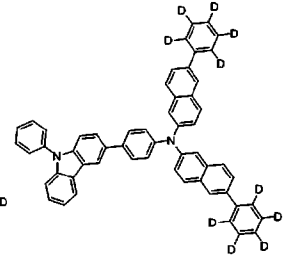
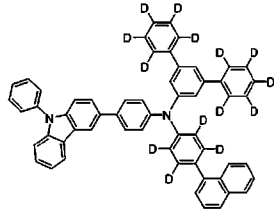
[122]

**P-93****P-94****P-95****P-96****P-97****P-98****P-99**

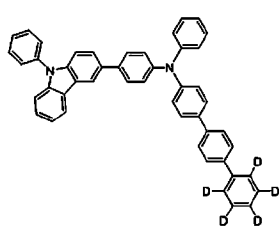
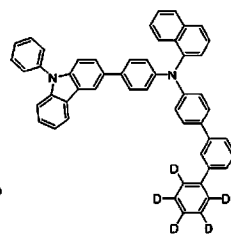
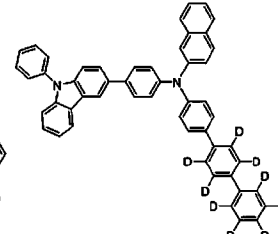
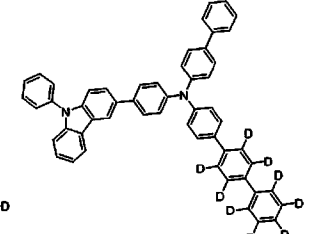
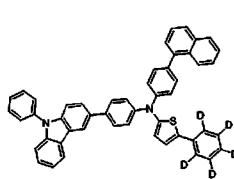
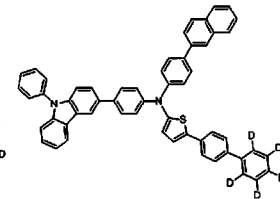
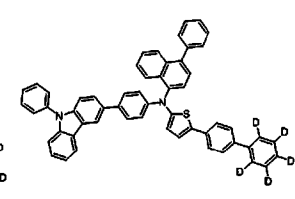
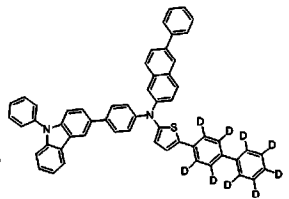
[123]

**P-100****P-101****P-102****P-103**

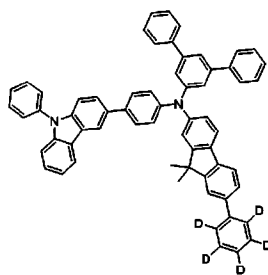
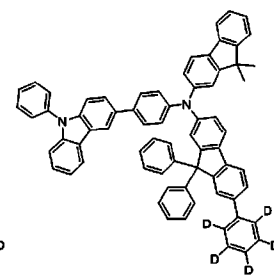
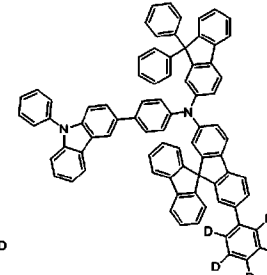
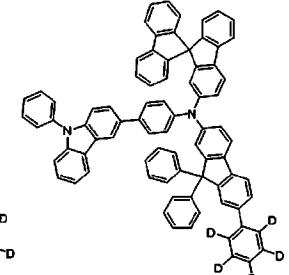
[124]

**P-104****P-105****P-106****P-107****P-108**

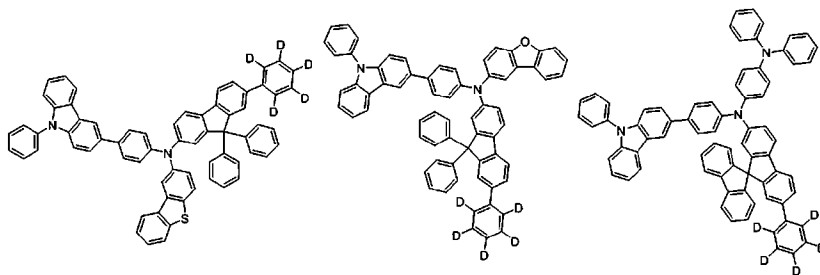
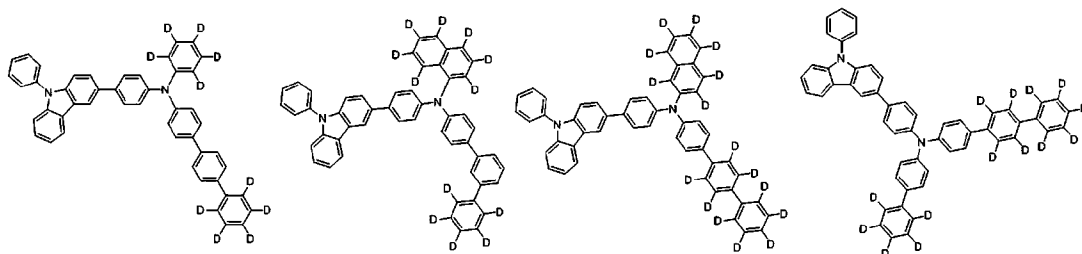
[125]

**P-109****P-110****P-111****P-112****P-113****P-114****P-115****P-116**

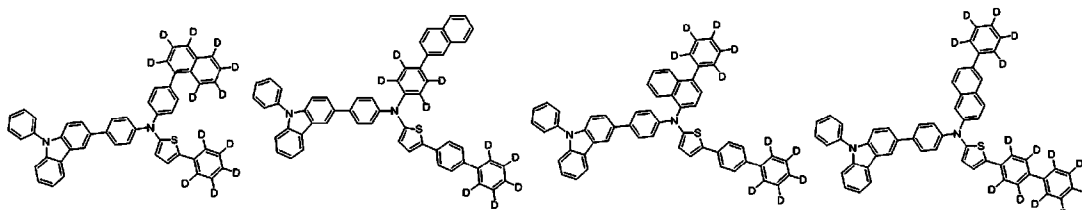
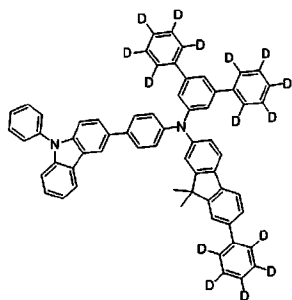
[126]

**P-117****P-118****P-119****P-120**

[127]

**P-121****P-122****P-123****P-124****P-125****P-126****P-127**

[128]

**P-128****P-129****P-130****P-131****P-132**

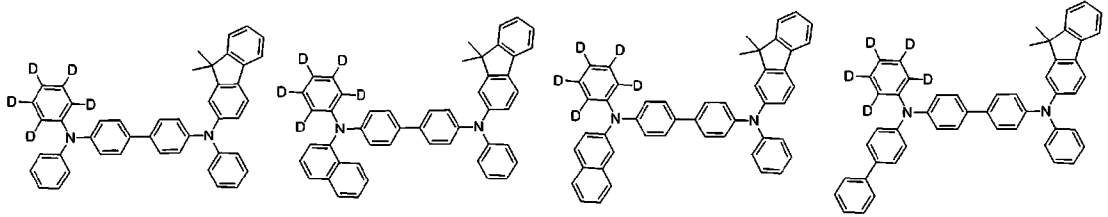
[129] 상기 화학식 1로 표시되는 화합물들은 상기 화학식 5에 제시된 화합물들 중 하나일 수 있으나 이에 제한되지 않는다. 이때 화학식 1로 표시되는 화합물들의 각 치환기들은 광범위한 관계로 모든 화합물들을 예시하는 것은 현실적으로 어려우므로 대표적인 화합물들을 예시적으로 설명한 것이나, 상기 화학식 5에 제시되지 않은 화학식 1로 표시되는 화합물들도 본 명세서의 일부를 구성할 수 있다.

[130]

[131] 더욱 구체적으로, 상기 화학식 2로 표시되는 화합물은 아래 화합물 (P2-1) 내지

(P2-120) 중 어느 하나일 수 있으며, 여기에 제한되는 것은 아니다.

[132] 화학식 6

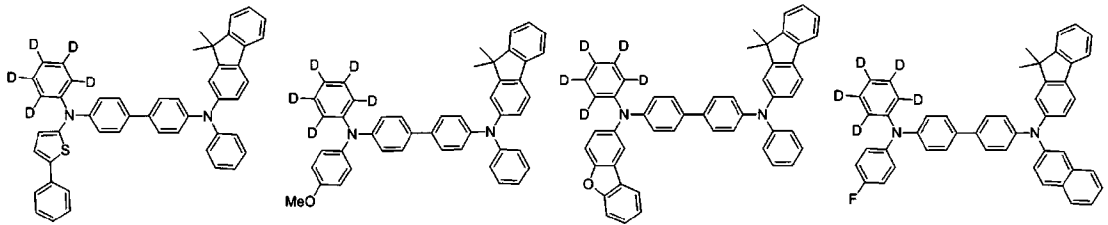


P2-1

P2-2

P2-3

P2-4



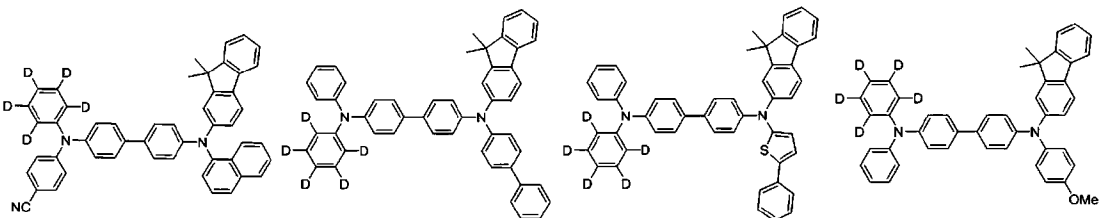
P2-5

P2-6

P2-7

P2-8

[133]

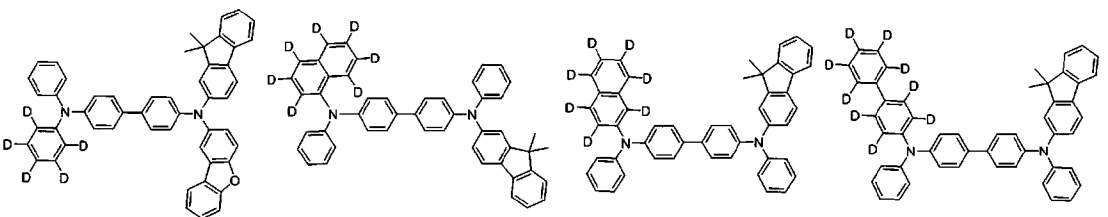


P2-9

P2-10

P2-11

P2-12



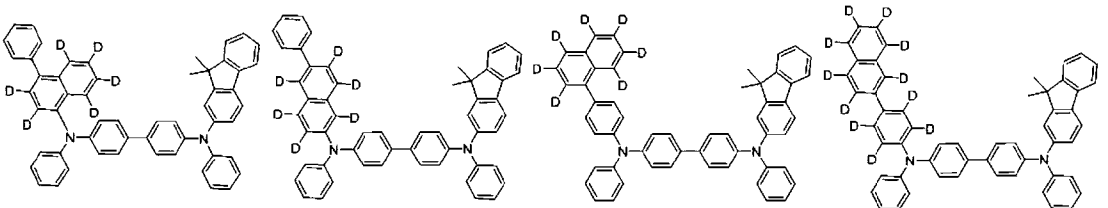
P2-13

P2-14

P2-15

P2-16

[134]



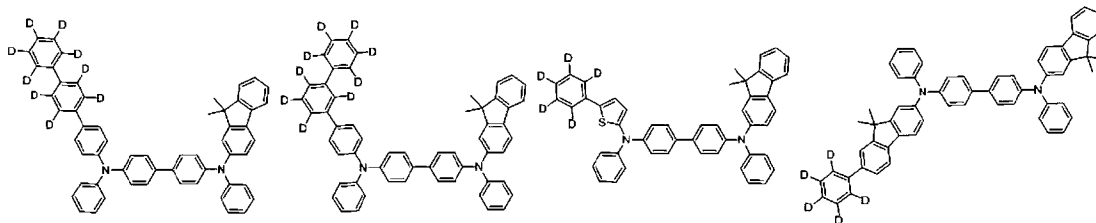
P2-17

P2-18

P2-19

P2-20

[135]

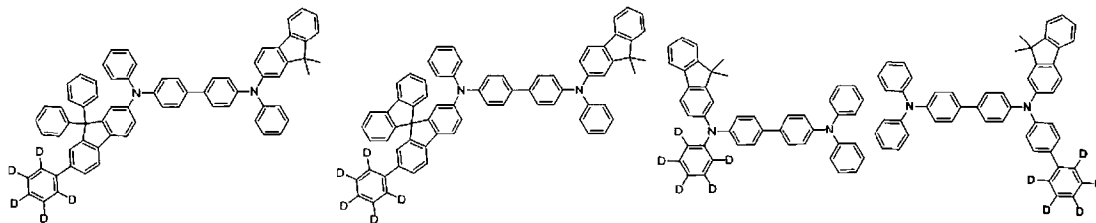


P2-21

P2-22

P2-23

P2-24



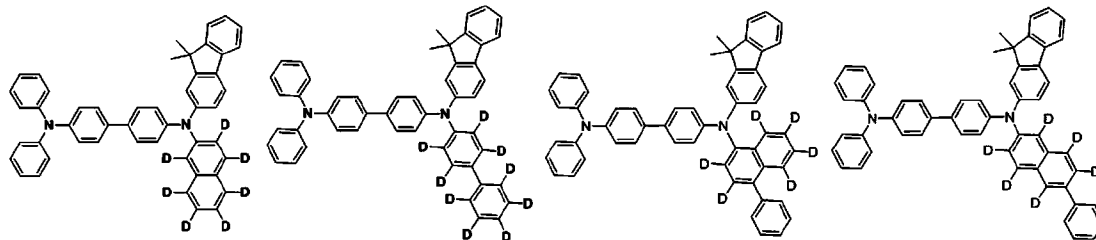
P2-25

P2-26

P2-27

P2-28

[136]

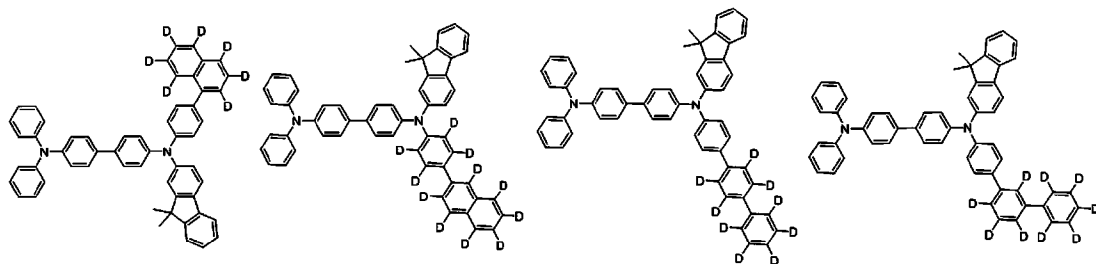


P2-29

P2-30

P2-31

P2-32



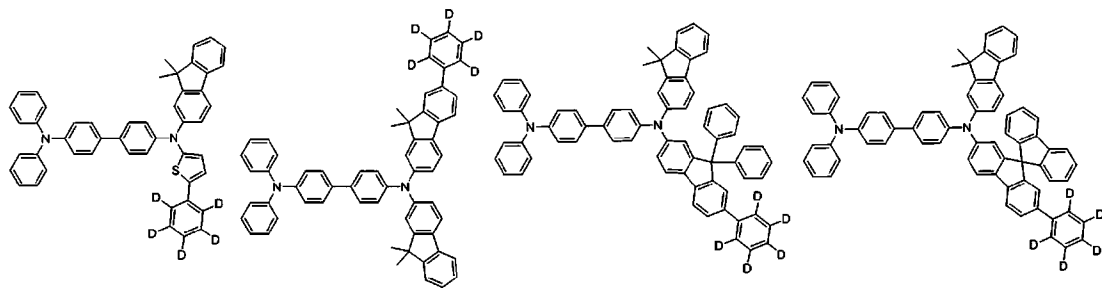
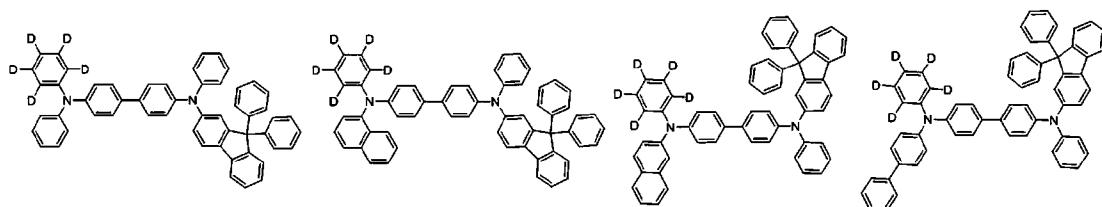
P2-33

P2-34

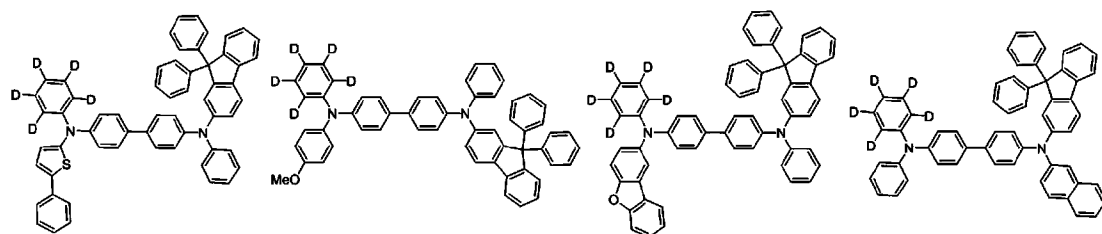
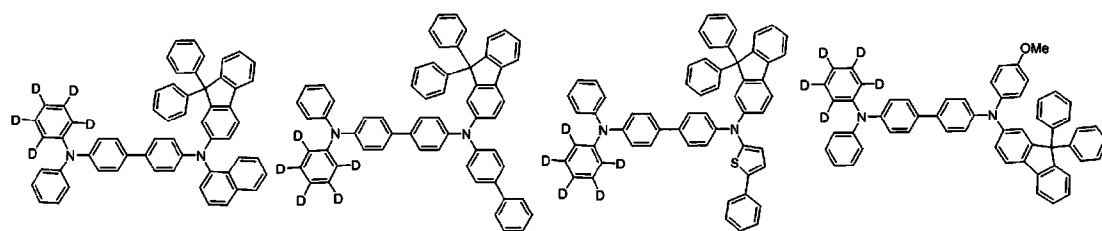
P2-35

P2-36

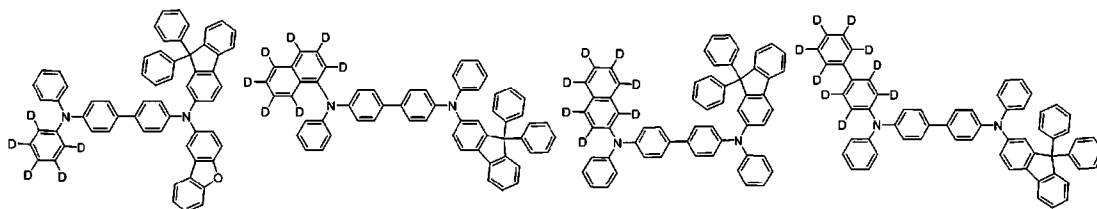
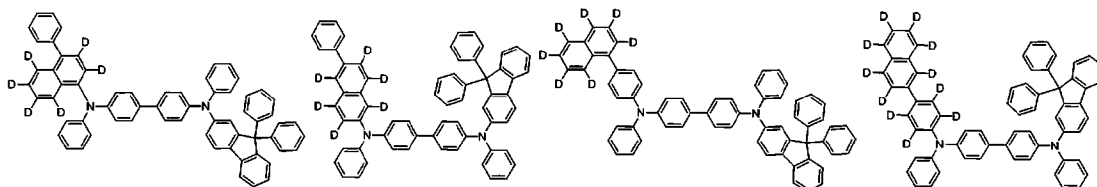
[137]

**P2-37****P2-38****P2-39****P2-40****P2-41****P2-42****P2-43****P2-44**

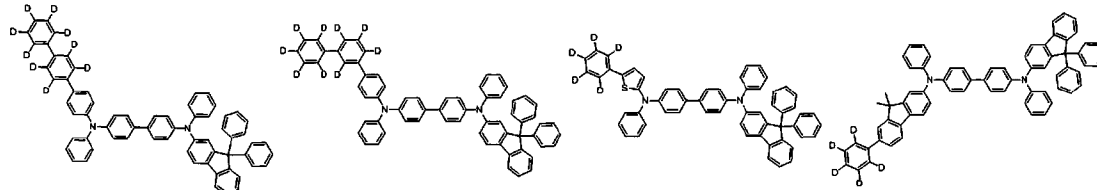
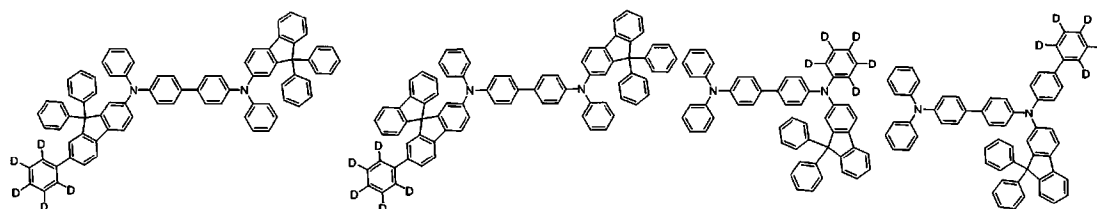
[138]

**P2-45****P2-46****P2-47****P2-48****P2-49****P2-50****P2-51****P2-52**

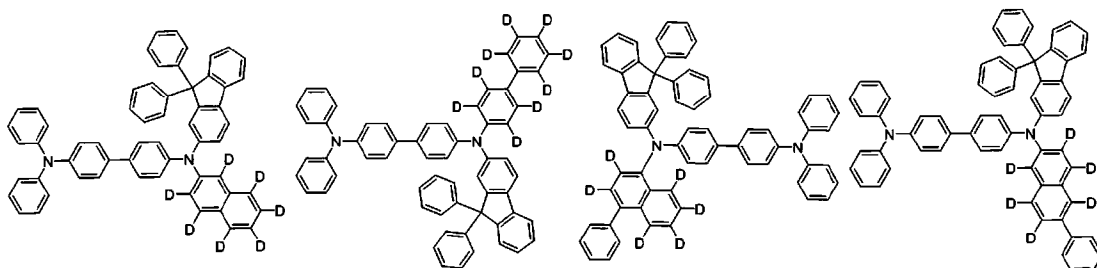
[139]

**P2-53****P2-54****P2-55****P2-56****P2-57****P2-58****P2-59****P2-60**

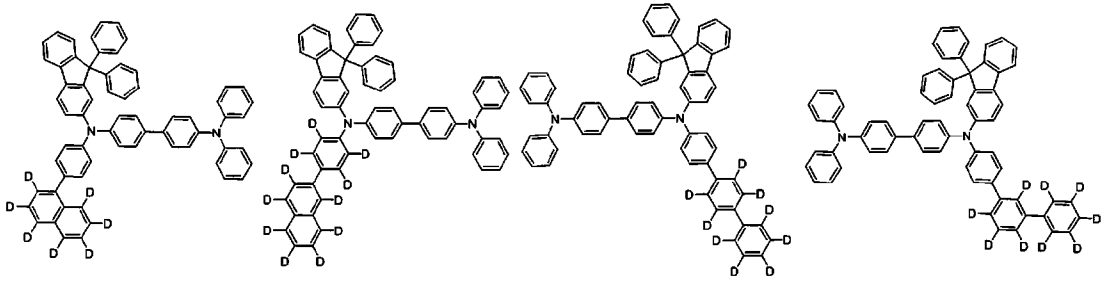
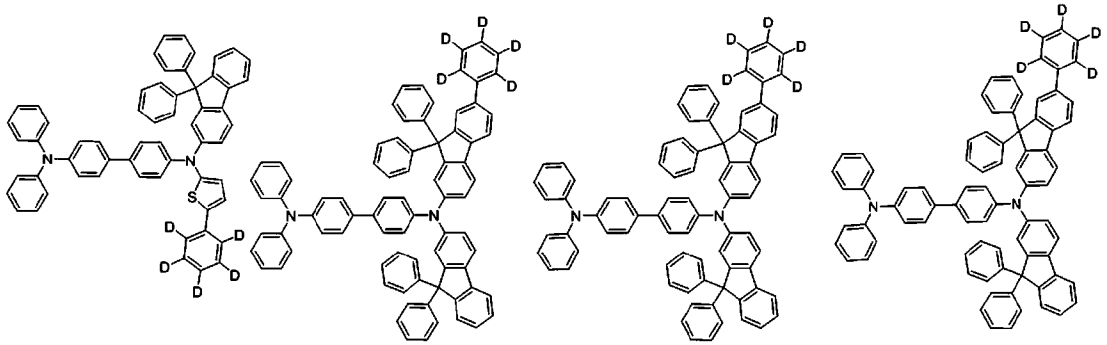
[140]

**P2-61****P2-62****P2-63****P2-64****P2-65****P2-66****P2-67****P2-68**

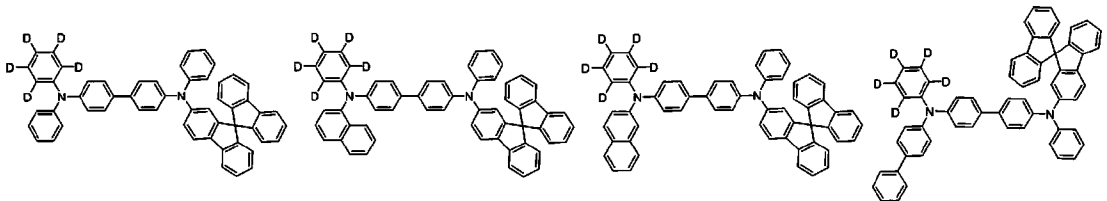
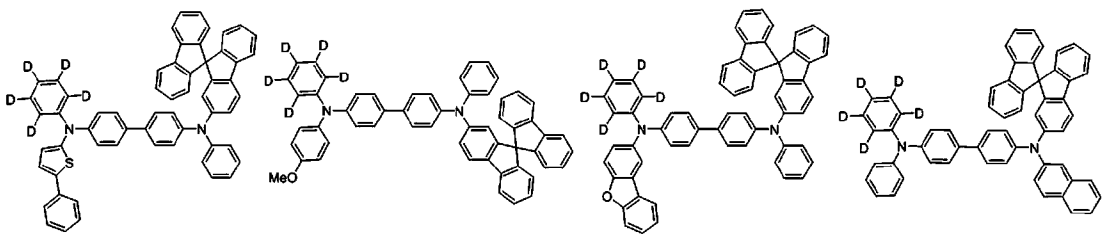
[141]

**P2-69****P2-70****P2-71****P2-72**

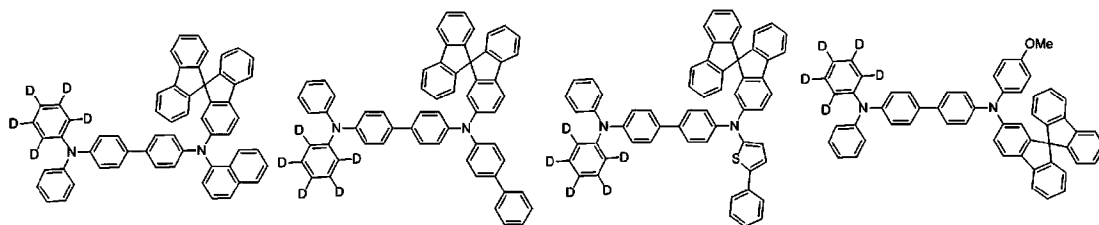
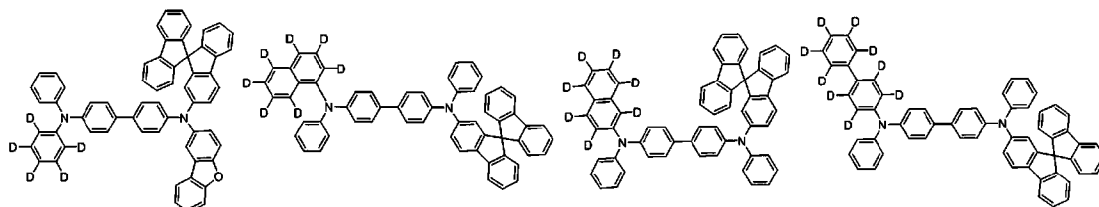
[142]

**P2-73****P2-74****P2-75****P2-76****P2-77****P2-78****P2-79****P2-80**

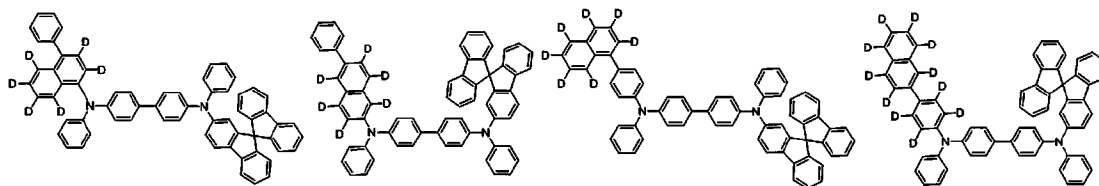
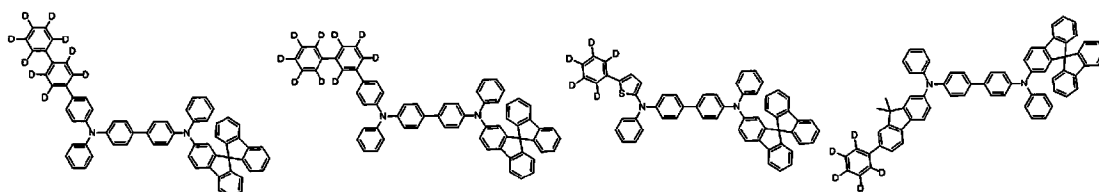
[143]

**P2-81****P2-82****P2-83****P2-84****P2-85****P2-86****P2-87****P2-88**

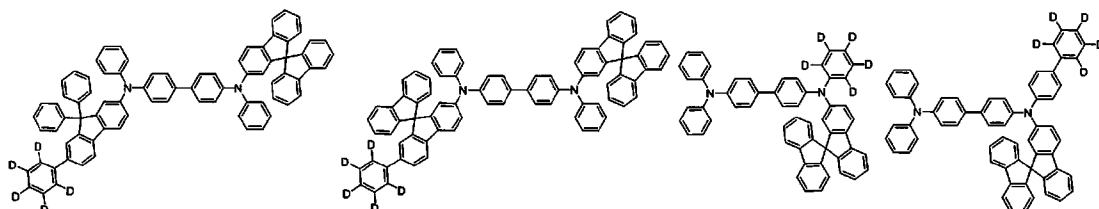
[144]

**P2-89****P2-90****P2-91****P2-92****P2-93****P2-94****P2-95****P2-96**

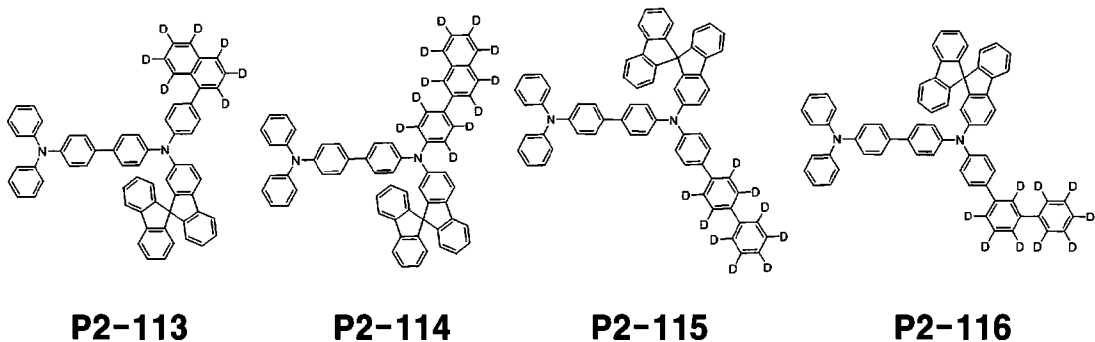
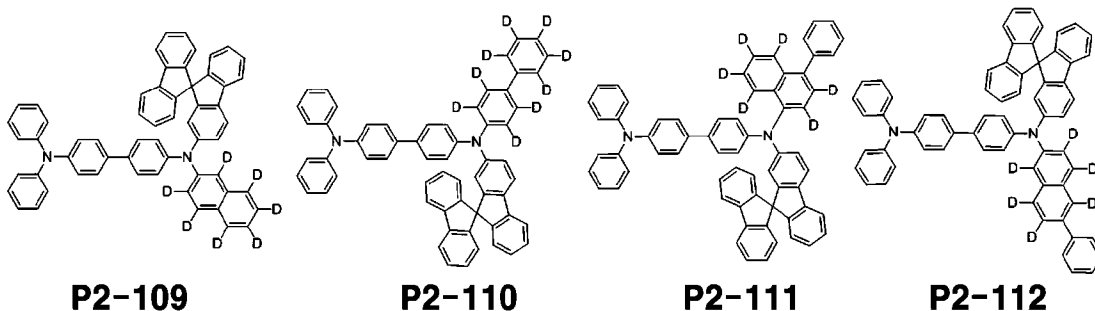
[145]

**P2-97****P2-98****P2-99****P2-100****P2-101****P2-102****P2-103****P2-104**

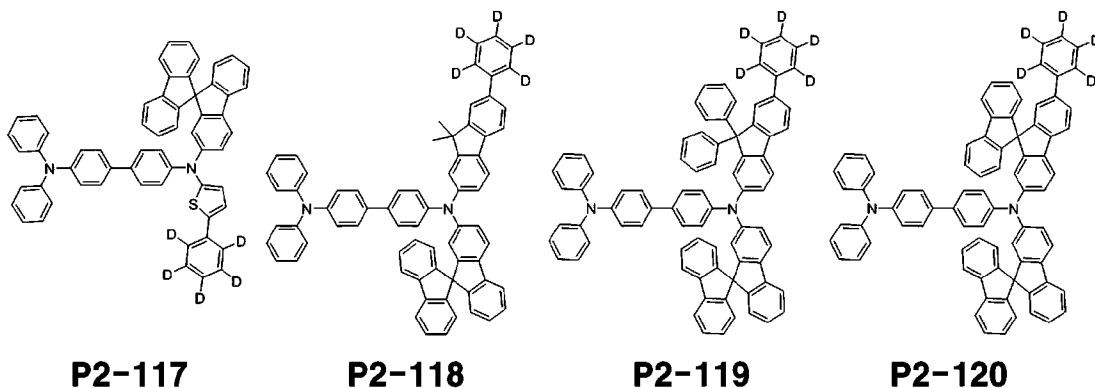
[146]

**P2-105****P2-106****P2-107****P2-108**

[147]



[148]



[149] 상기 화학식 2로 표시되는 화합물들은 상기 화학식 6에 제시된 화합물들 중 하나일 수 있으나 이에 제한되지 않는다. 이때 화학식 2로 표시되는 화합물들의 각 치환기들은 광범위한 관계로 모든 화합물들을 예시하는 것은 현실적으로 어려우므로 대표적인 화합물들을 예시적으로 설명한 것이나, 상기 화학식 6에 제시되지 않은 화학식 2로 표시되는 화합물들도 본 명세서의 일부를 구성할 수 있다.

[150] 상기 구조식을 가지는 화합물 또는 이들의 혼합물을 함유하는 조성물은 용액 공정(soluble process)에 사용될 수 있다. 다시 말해 상기 화합물 또는 이들의 혼합물을 함유하는 조성물은 용액 공정(soluble process)에 의해 후술할 유기전기소자의 유기물층을 형성할 수 있다. 즉 상기 화합물 또는 조성물을 유기물층으로 사용할 때 유기물층은 다양한 고분자 소재를 사용하여 증착법이 아닌 용액 공정 또는 솔벤트 프로세스(solvent process), 예컨대 스핀 코팅, 딥 코팅, 닥터 블레이딩, 스크린 프린팅, 잉크젯 프린팅 또는 열 전사법 등의 방법에

의하여 더 적은 수의 층으로 제조될 수 있다.

- [151] 또 다른 측면에서, 제 1전극, 제 2전극 및 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 단독 또는 혼합물로 함유하는 1층 이상의 유기물층을 포함하는 유기전기소자를 제공한다. 이때, 혼합물은 화학식 1로 표시되는 화합물들 중 서로 다른 2종 이상의 화합물이 혼합되거나 상기 화학식 1로 표시되는 화합물과 화학식 2로 표시되는 화합물의 혼합물일 수 있다. 유기물층은 발광층, 정공 주입층 및 정공 수송층 중 적어도 일층일 수 있다.
- [152] 본 발명에 따른 유기전기소자는 유기전기발광소자(OLED), 유기태양전지, 유기감광체(OPC), 유기트랜지스터(유기 TFT), 단색 또는 백색 조명용 소자 중 하나일 수 있다.
- [153] 본 발명의 조성물은 후술하는 바와 같이 유기전기소자의 유기물층의 특성을 최대한 살리면서 박막 형성시 균일도가 높고 결정화가 낮은 정공 주입층 재료의 요구, 수명단축의 원인 중 하나인 양극전극으로부터 금속산화물이 유기층에 침투 확산되는 것을 지연시키면서 소자 구동시 발생하는 주열열(Joule heating)에 대해서도 안정된 특성, 즉 높은 유리 전이 온도를 갖는 정공 주입층 재료의 요구, 유기전기발광소자의 형성에 있어서 증착 방법에 오랫동안 견딜 수 있는 재료 즉 내열성 특성이 강한 재료의 요구를 만족할 수 있다.
- [154] 전술한 바와 같이 본 발명자들은 중수소로 치환된 화합물의 혼합물을 포함하는 조성물을 중수소로 치환되지 않은 화합물 또는 중수소로 치환된 화합물 자체와 비교하여 많은 열역학적 거동을 확인하고, 탄소, 수소 및 탄소, 중수소 결합길이의 차이에 따라서, 결합길이가 보다 작은 탄소, 중수소로 이루어진 화합물이 결합길이가 짧음에 따라 발생하는 분자간 반데르발스 힘의 약화로 인해 더 높은 발광효율을 가짐을 확인하고 중수소로 치환된 경우에는 제로포인트 에너지(Zero Point Energy) 즉 바닥상태의 에너지가 낮아지며, 중수소, 탄소의 결합길이가 짧아짐에 따라, 분자 중심 부피(Molecular hardcore volume)가 줄어들고, 이에 따라 전기적 극성화도(Electroical polarizability)를 줄일 수 있으며, 분자간 상호작용(Intermolecular interaction)을 약하게 함으로써, 박막 부피를 증가시킬 수 있음을 확인하였다.
- [155] 이러한 중수소로 치환된 본 발명의 화합물의 특성은 박막의 결정화도를 낮추는 효과 즉, 비결정질(Amorphous) 상태를 만들 수 있으며, 일반적으로 유기전기발광소자의 수명 및 구동특성을 높이기 위하여, 반드시 필요한 비결정질 상태를 구현하는데 매우 효과적일 것이라고 판단하였다.
- [156] 결과적으로 중수소로 치환된 화합물의 혼합물의 특성 중에 낮은 탄소, 수소 결합물질보다 낮은 가시광선 흡수율 특성을 가지며, 이는 유기전기발광소자와 같은 발광소자에서 효율을 높일 수 있는 장점이 될 수 있다고 판단하였다. 또한 중수소로 치환된 본 발명의 화합물의 혼합물은 내열성도 많은 증가가 있을 것으로 판단하였다.
- [157]

[158] 제조예

[159] 이하에서 상기 화학식 1 또는 화학식 2에 속하는 화합물들에 대한 제조예 또는 합성예를 설명한다. 다만, 화학식 1 또는 화학식 2에 속하는 화합물들의 수가 많기 때문에 화학식 1 또는 화학식 2에 속하는 화합물들 중 일부를 예시적으로 설명한다. 본 발명이 속하는 기술분야의 통상의 지식을 가진 자, 즉 당업자라면 하기에서 설명한 제조예들을 통해, 예시하지 않은 본 발명에 속하는 화합물을 제조할 수 있다.

[160]

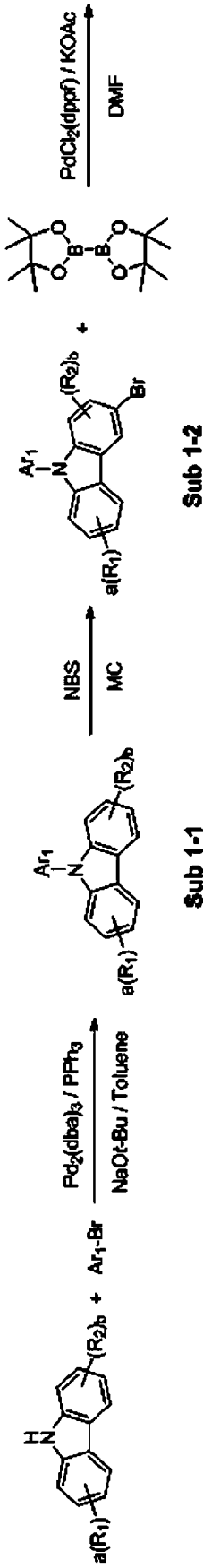
[161] 일반적인 합성 방법

[162] 본 발명의 화합물의 일반적인 합성 방법은 다음과 같다.

[163]

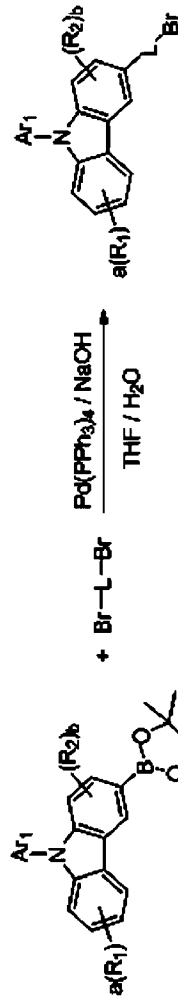
[164] i) 화학식 1 화합물의 일반적 합성 방법

[165]



Sub 1-2

Sub 1-1



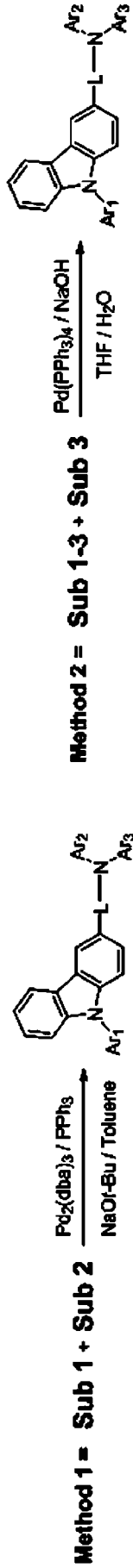
Sub 1

Sub 1-3



Sub 2

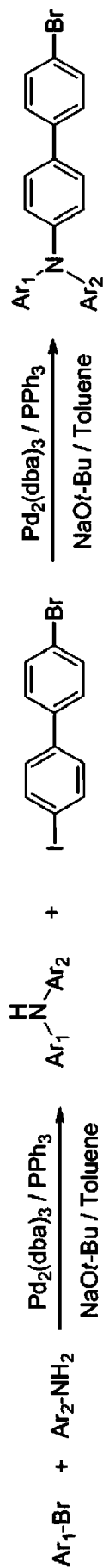
Sub 3



Final Product

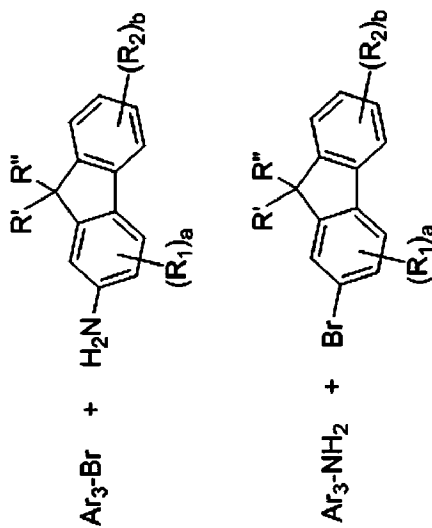
Final Product

- [166] ii) 화학식 2 화합물의 일반적 합성 방법
[167]

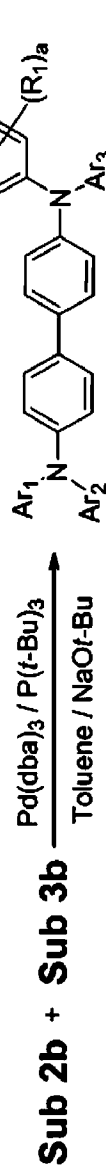


Sub 1b

Sub 2b



Sub 3b

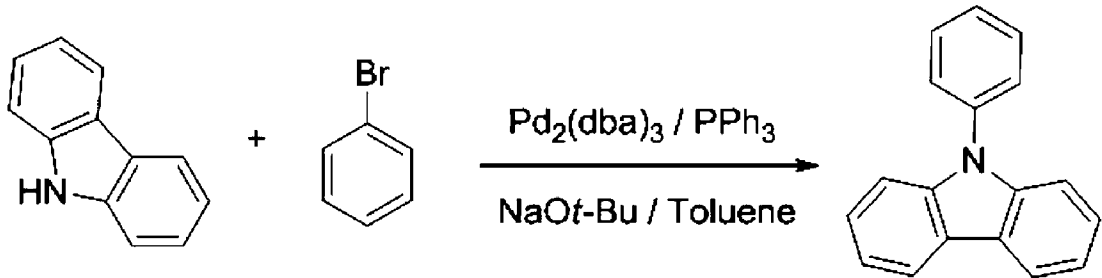


Product

[168]

[169] 화학식 1 화합물의 합성[170] 1) Sub 1 합성법 예시 : (Ar₁, L=Phenyl)[171] **Sub 1-1 합성 : 9-phenyl-9H-carbazole**

[172]

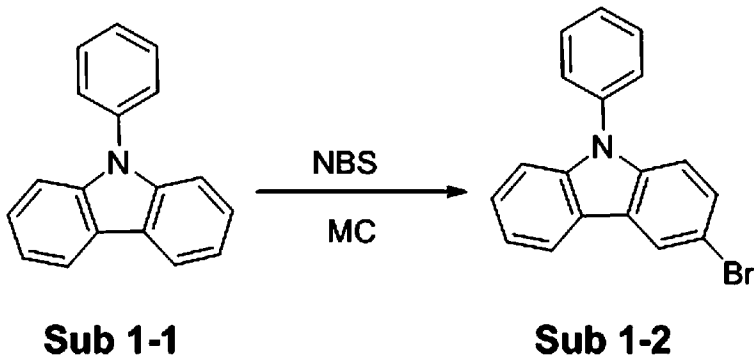


[173] 카바졸 (50.2 g, 300 mmol)과 브로모벤젠 (56.5 g, 360 mmol)을 톨루엔 2800mL에 혼합 후에 $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (8.24 g, 9 mmol), PPh_3 (7.87 g, 30 mmol), NaOt-Bu (86.5 g, 900mmol) 을 각각 첨가한 뒤, 100°C에서 24시간 교반 환류 시킨다. 에테르와 물로 추출한 후 유기층을 MgSO_4 로 건조하고 농축 한 후 생성된 유기물을 실리카겔 칼럼으로 정제 및 재결정하여 생성물을 52.5 g (75%) 얻었다.

[174]

[175] **Sub 1-2 합성 : 3-bromo-9-phenyl-9H-carbazole**

[176]



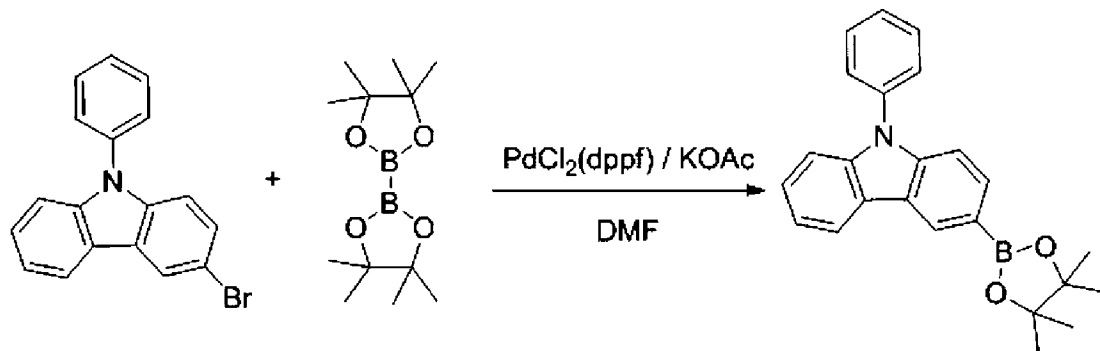
[177] 상기 합성에서 얻어진 Sub 1-1 (48.66 g, 200 mmol) 에 메틸렌 크로라이드 600 mL 에 녹인후, NBS(N-bromosuccimide) (59.4 g, 210 mmol) 을 서서히 첨가한 뒤, 상온에서 24시간 교반시킨다.

[178] 반응이 종료되면 5% 농도의 HCl 300 mL 을 첨가한 뒤, 물 300 mL 을 첨가하여, 잔존 NBS 를 제거한 뒤, 에테르와 물로 추출한 후 유기층을 MgSO_4 로 건조하고 농축 한 후 생성된 유기물을 실리카겔 칼럼으로 정제 및 재결정하여 생성물을 47.7 (74%) 얻었다.

[179]

[180] **Sub 1-3 합성 :****9-phenyl-3-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-9H-carbazole**

[181]

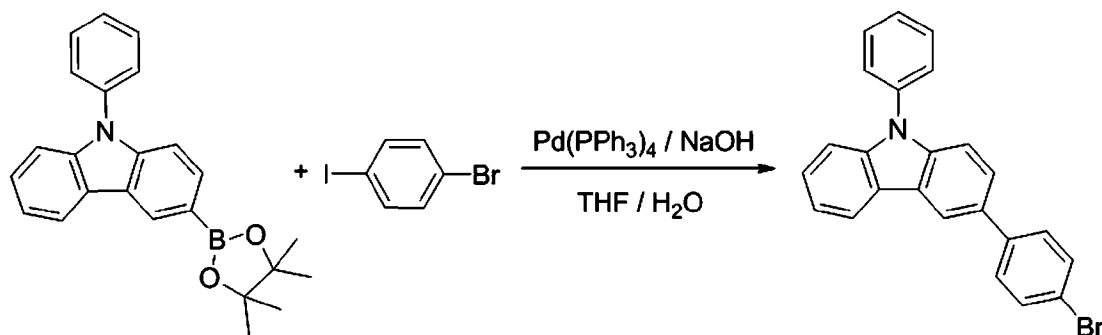
**Sub 1-2****Sub 1-3**

[182] 상기 합성에서 얻어진 Sub 1-2 (45.1 g, 140 mmol) 을 DMF 980mL 에 녹인 후에, 비스피나콜보레이트 (39.1 g, 154 mmol), PdCl₂(dppf) 촉매 (3.43 g, 4.2 mmol), KOAc (41.3 g, 420 mmol)을 순서대로 첨가한 후 24 시간 교반하여 보레이트 화합물을 합성한 후에, 얻어진 화합물을 실리카겔 칼럼 및 재결정을 걸쳐서 분리한 후 보레이트 화합물을 35.2 g (68 %) 얻는다.

[183]

[184] **Sub 1 합성 : 3-(4-bromophenyl)-9-phenyl-9H-carbazole**

[185]

**Sub 1-3****Sub 1**

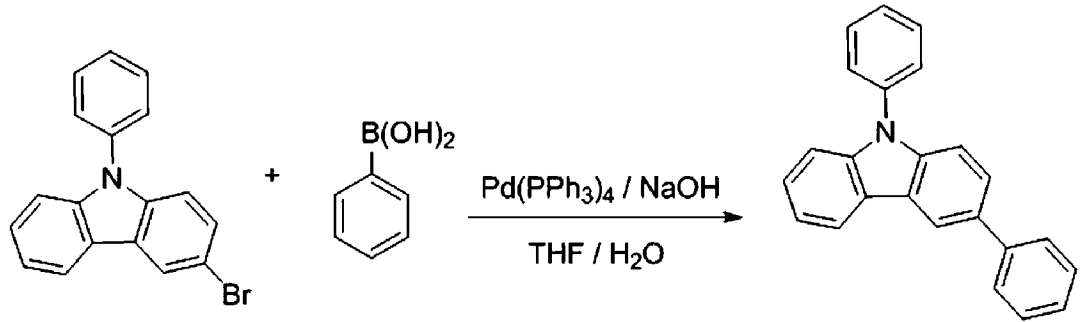
[186] 상기 합성에서 얻어진 Sub 1-3 (29.5 g, 80 mmol) 을 THF 360 mL 에 녹인 후에, 1-브로모-4-아이오도 벤젠 (23.8 g, 84 mmol), Pd(PPh₃)₄ (2.8 g, 2.4mmol), NaOH (9.6 g, 240mmol), 물 180 mL 을 첨가한 후, 교반 환류시킨다. 반응이 완료되면 에테르와 물로 추출한 후 유기층을 MgSO₄로 건조하고 농축한 후 생성된 유기물을 실리카겔 칼럼으로 정제 및 재결정하여 생성물을 22.9 g (72 %) 얻었다.

[187]

[188] 2) R₁ 치환 합성법 예시: (Ar₁, R₁, L=Phenyl)

[189] **Sub 1-1-1 합성 : 3,9-diphenyl-9H-carbazole**

[190]

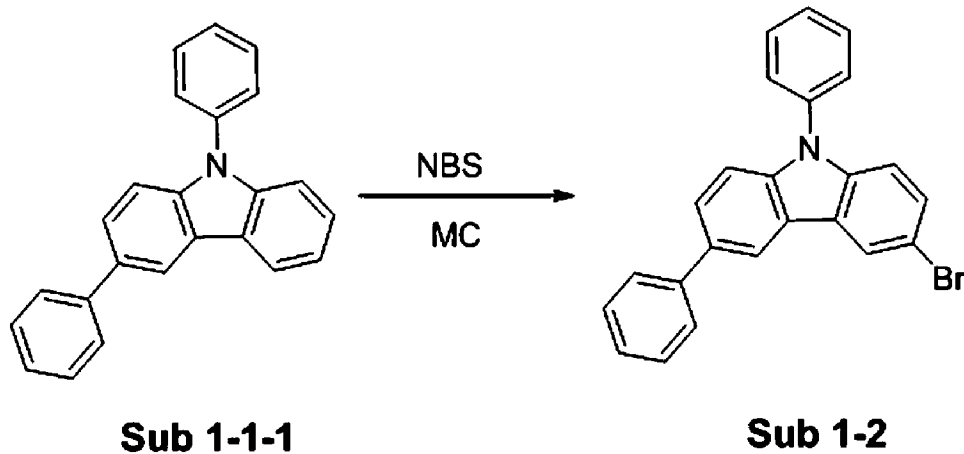
**실시예 1의 Sub 1-2****Sub 1-1-1**

[191] 상기 실시예 1에서 얻어진 Sub 1-2 (25.8 g, 80 mmol) 을 THF 360 mL 에 녹인 후에, Phenyl boronic acid (10.7 g, 88mmol), Pd(PPh₃)₄ (2.8 g, 2.4mmol), NaOH (9.6 g, 240mmol), 물 180 mL 을 실시예 sub 1 합성법을 사용하여 18.9 g (74 %) 의 생성물을 얻었으며, scale-up 반응 시 동일한 실험방법으로 진행하여 동일한 수득률을 나타냈다.

[192]

[193] **Sub 1-2 합성 : 3-bromo-6,9-diphenyl-9H-carbazole**

[194]

**Sub 1-1-1****Sub 1-2**

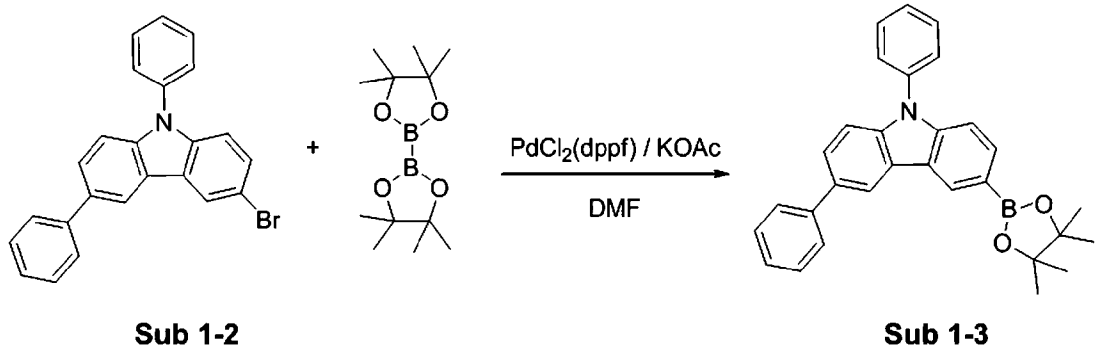
[195] 상기 합성에서 얻어진 Sub 1-1-1 (63.88 g, 200 mmol) 에 메틸렌 크로라이드 600 mL, NBS(N-bromosuccinimide) (59.4 g, 210 mmol) 을 상기 실시예 1의 sub 1-2 합성법을 사용하여 55.8 g (70%)의 생성물을 얻었다.

[196]

[197] **Sub 1-3 합성 :**

3,9-diphenyl-6-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-9H-carbazole

[198]

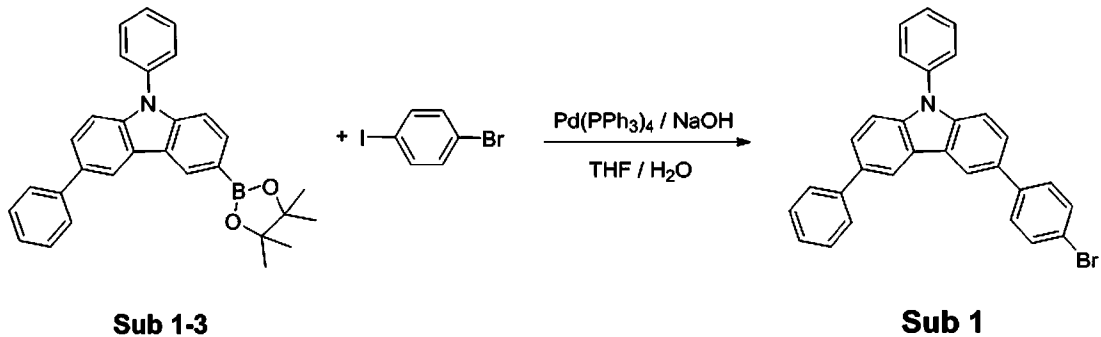


[199] 상기 합성에서 얻어진 Sub-1-2 (55.8 g, 140 mmol), DMF 980mL, 비스피나콜보레이트를 (39.1 g, 154 mmol), PdCl₂(dppf) 촉매 (3.43 g, 4.2 mmol), KOAc (41.3 g, 420 mmol)을 상기 실시예 1의 sub 1-3의 합성법을 사용하여 40.5 g (65 %)의 생성물을 얻었다.

[200]

[201] **Sub 1 합성 : 3-(4-bromophenyl)-6,9-diphenyl-9H-carbazole**

[202]

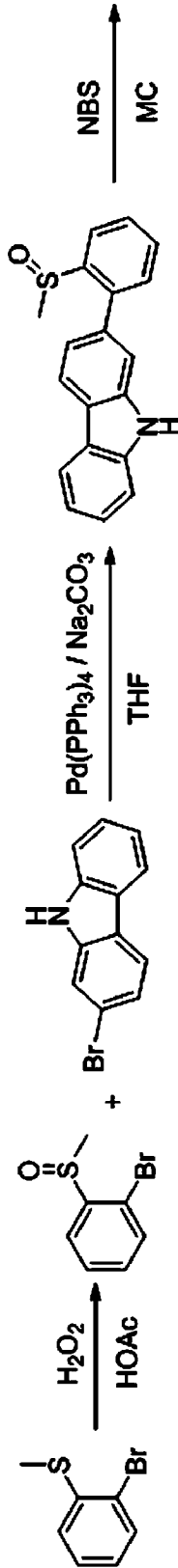


[203] 상기 합성에서 얻어진 Sub-1-3 (35.6 g, 80 mmol) 을 THF 360 mL 에 녹인 후에, 1-브로모-4-아이오도 벤젠 (23.8 g, 84 mmol), Pd(PPh₃)₄ (2.8 g, 2.4mmol), NaOH (9.6 g, 240mmol), 물 180 mL 을 첨가한 후, 교반 환류 시킨다. 반응이 완료되면 에테르와 물로 추출한 후 유기층을 MgSO₄로 건조하고 농축 한 후 생성된 유기물을 실리카겔 칼럼으로 정제 및 재결정하여 생성물을 27.7 g (73 %) 얻었다.

[204]

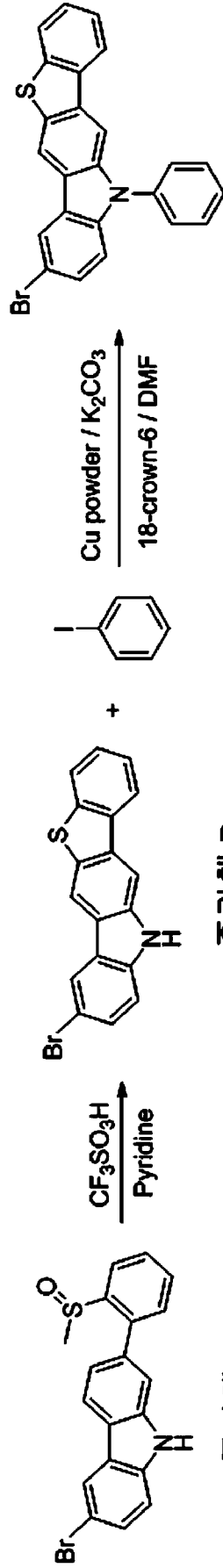
[205] **3) Dibenzothiophene 를 포함하는 출발물질 합성법 예시**

[206]



중간체 B

중간체 A



중간체 D

중간체 C

출발물질

[207] 중간체 A의 합성

[208] 2-Bromothioanisole을 glacial acetic acid 용매에 녹인 후, 반응물의 온도를 0°C로 낮춘 후에 Hydrogen peroxide 를 천천히 적가시킨다. 적가가 완료되면 반응물의 온도를 상온으로 올린 후 12시간동안 교반하면서 반응을 진행시켰다. 반응이 종료되면 감압장치를 이용하여 용매를 제거 한 후 CH₂Cl₂로 추출하고, NaHCO₃ 수용액으로 닦아주었다. 소량의 물을 무수 MgSO₄로 제거하고 감압 여과 후, 유기용매를 농축하여 생성된 생성물을 컬럼크로마토그래피를 이용하여 분리하여 원하는 중간체 A를 43 g (98%)의 수율로 얻었다.

[209]

[210] 중간체 B의 합성

[211] 중간체 A와 2-Bromocarbazole, Pd(PPh₃)₄, Na₂CO₃를 무수 THF와 소량의 물에 녹이고 난 후 24시간동안 환류시켰다. 반응이 종료되면 반응물의 온도를 상온으로 식히고, CH₂Cl₂로 추출하고 물로 닦아 주었다. 소량의 물을 무수 MgSO₄로 제거하고 감압 여과 후, 유기용매를 농축하여 생성된 생성물을 컬럼크로마토그래피를 이용하여 분리하여 원하는 중간체 B를 30.6 g (51%) 얻었다.

[212]

[213] 중간체 C의 합성

[214] 상기 합성에서 얻어진 중간체 B (30.5 g, 100 mmol) 에 메틸렌 크로라이드 300 mL, NBS(N-bromosuccimide) (29.7 g, 105 mmol) 을 상기 실시예 1의 sub 1-2 합성법을 사용하여 28.058 g (73%)의 생성물을 얻었다.

[215]

[216] 중간체 D의 합성

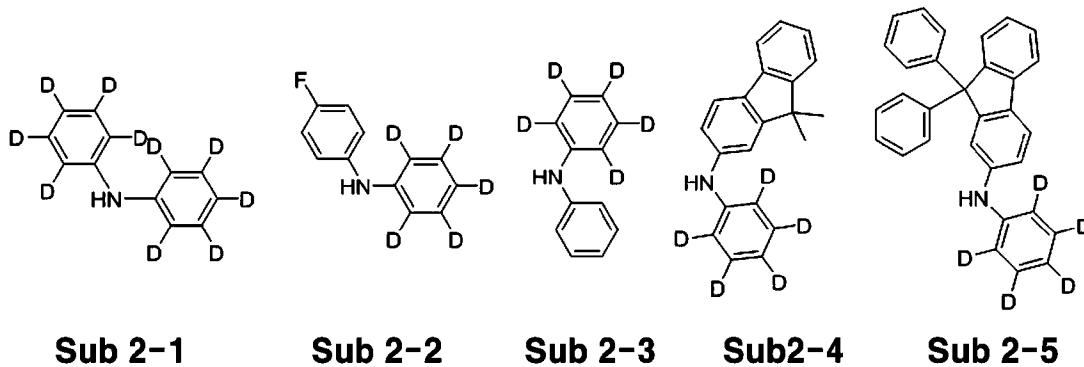
[217] 중간체 C를 trifluoromethanesulfonic acid 용매에 녹인 후 상온에서 48시간 동안 교반시켰다.

[218] 반응이 종료되면 반응물을 물과 pyridine 혼합용매를 붓고, 20분동안 환류시켰다. 반응물의 온도를 상온으로 식히고 CH₂Cl₂로 추출하고 물을 닦아주었다, 소량의 물을 MgSO₄로 제거하고 감압 여과후 유기용매를 농축하여 생성된 생성물을 컬럼크로마토그래피를 이용하여 분리하여 원하는 중간체 D를 21.1 g (82%)얻었다.

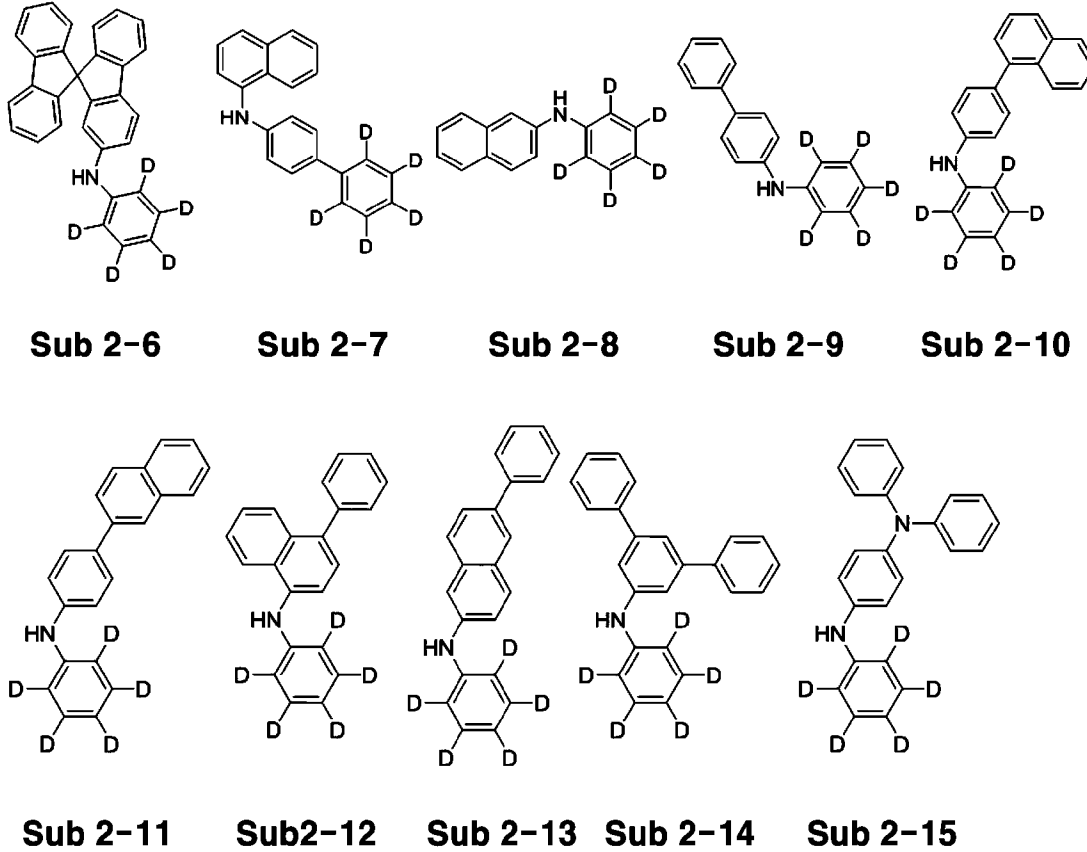
[219]

[220] 출발물질 합성

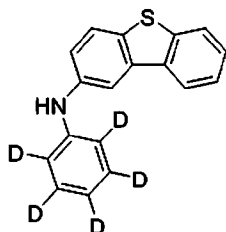
[221] 중간체 D (21.1g, 60 mmol), Iodobenzene (18.4 g, 90 mmol), DMF 300mL, K₂CO₃ (12.4 g, 90 mmol), Cu powder (4.2 g, 66 mmol), 18-crown-6 (1.6 g, 6 mmol)에 둥근바닥플라스크에 넣은 후에 170°C에서 24시간 환류시켰다. 반응이 완료되면 물과 CH₂Cl₂로 추출하고 5% HCl 수용액으로 닦아준다. 마지막으로 brine 으로 닦아준다. 얻어진 유기층을 MgSO₄로 수분제거 후 감압여과하여 농축하고 생성된 생성물을 컬럼크로마토그래피를 이용하여 분리하여 원하는 출발물질을



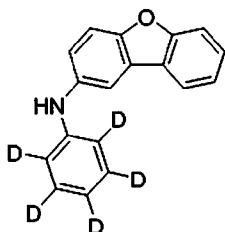
[240]



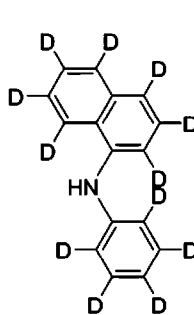
[241]



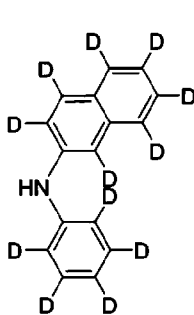
Sub 2-16



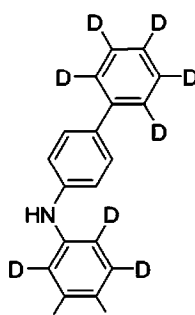
Sub 2-17



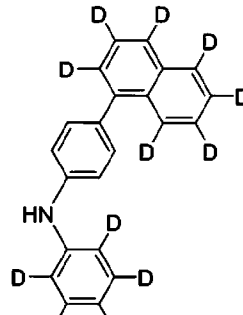
Sub 2-18



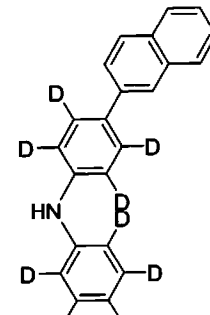
Sub 2-19



Sub 2-20

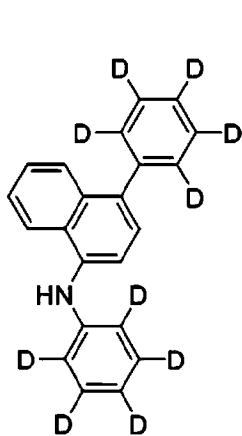


Sub 2-21

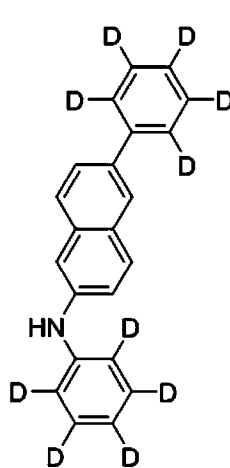


Sub 2-22

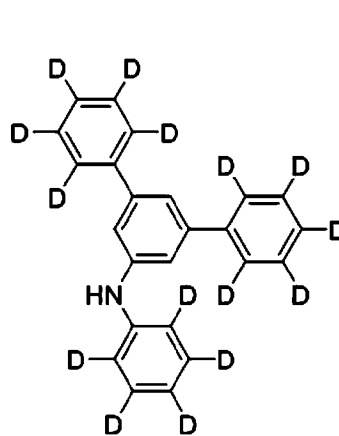
[242]



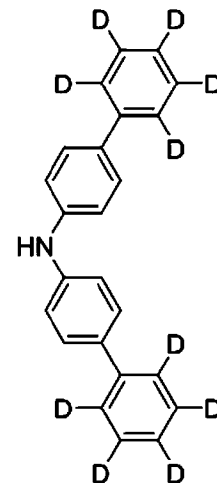
Sub 2-23



Sub 2-24



Sub 2-25



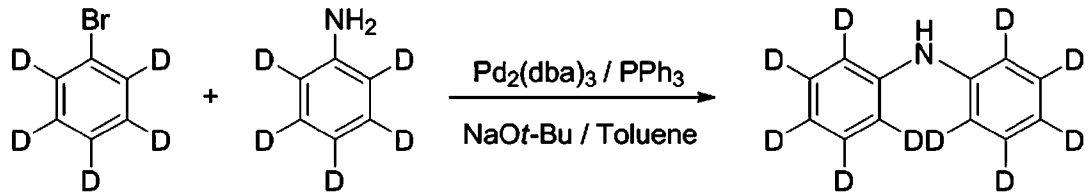
Sub 2-26

[243]

[244]

Sub 2-1 의 합성

[245]

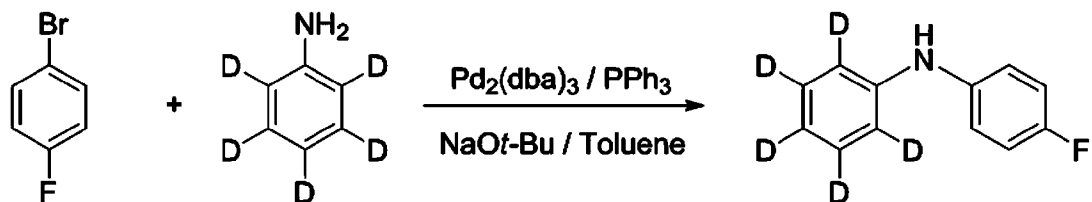
**Sub 2-1**

- [246] Aniline-d5 (23.56 g, 240 mmol), bromobenzene-d5 (32.41 g, 200 mmol)을 플라스크에 혼합후, Pd₂(dba)₃ (5.5 g, 6 mmol), PPh₃ (5.25 g, 20 mmol), NaOt-Bu (57.7 g, 600mmol), toluene (1930 mL) 을 첨가 한뒤 24시간 교반 환류시킨다. 반응이 완료되면 에테르와 물로 추출한 후 유기층을 MgSO₄로 건조하고 농축 한 후 생성된 유기물을 실리카겔 칼럼으로 정제 및 재결정하여 생성물을 26.17 g (73 %)얻었다.

[247]

[248] **Sub 2-2** 의 합성

[249]

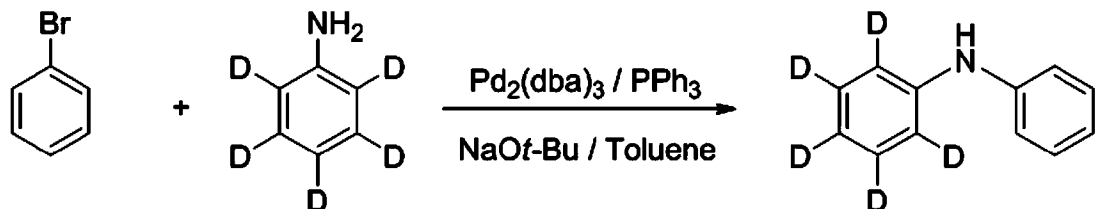
**Sub 2-2**

- [250] Aniline-d5 (23.56 g, 240 mmol), 1-bromo-4-fluorobenzene (35 g, 200 mmol), Pd₂(dba)₃ (5.5 g, 6 mmol), PPh₃ (5.25 g, 20 mmol), NaOt-Bu (57.7 g, 600mmol), toluene (1930 mL) 을 상기 Sub-2-1의 실험방법과 동일하게 하여 생성물을 26.14 g (68 %)얻었다.

[251]

[252] **Sub 2-3** 의 합성

[253]

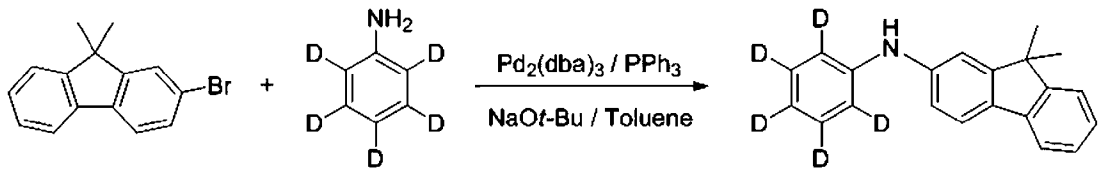
**Sub 2-3**

- [254] Aniline-d5 (23.56 g, 240 mmol), bromobenzene (31.4 g, 200 mmol), Pd₂(dba)₃ (5.5 g, 6 mmol), PPh₃ (5.25 g, 20 mmol), NaOt-Bu (57.7 g, 600mmol), toluene (1930 mL) 을 상기 Sub-2-1의 실험방법과 동일하게 하여 생성물을 26.14 g (75 %)얻었다.

[255]

[256] **Sub 2-4** 의 합성

[257]

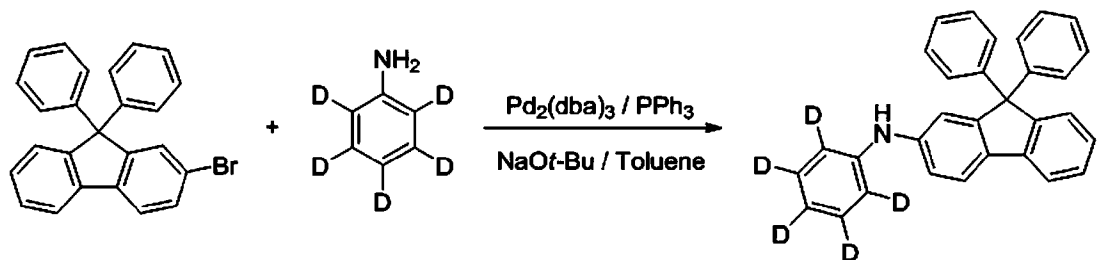
**Sub 2-4**

[258] Aniline-d5 (23.56 g, 240 mmol), 2-bromo-9,9-dimethyl-9H-fluorene (54.6 g, 200 mmol), Pd₂(dba)₃ (5.5 g, 6 mmol), PPh₃ (5.25 g, 20 mmol), NaOt-Bu (57.7 g, 600mmol), toluene (1930 mL) 을 상기 Sub-2-1의 실험방법과 동일하게 하여 생성물을 41.24 g (71 %) 얻었다.

[259]

[260] **Sub 2-5** 의 합성

[261]

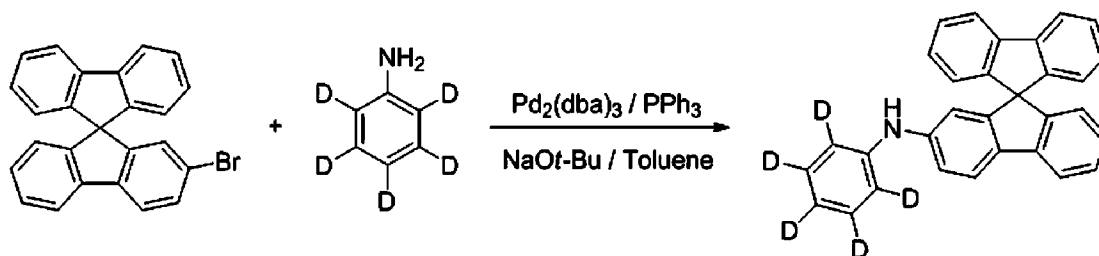
**Sub 2-5**

[262] Aniline-d5 (23.56 g, 240 mmol), 2-bromo-9,9-diphenyl-9H-fluorene (79.5 g, 200 mmol), Pd₂(dba)₃ (5.5 g, 6 mmol), PPh₃ (5.25 g, 20 mmol), NaOt-Bu (57.7 g, 600mmol), toluene (1930 mL) 을 상기 Sub-2-1의 실험방법과 동일하게 하여 생성물을 57.2 g (69 %) 얻었다.

[263]

[264] **Sub 2-6** 의 합성

[265]

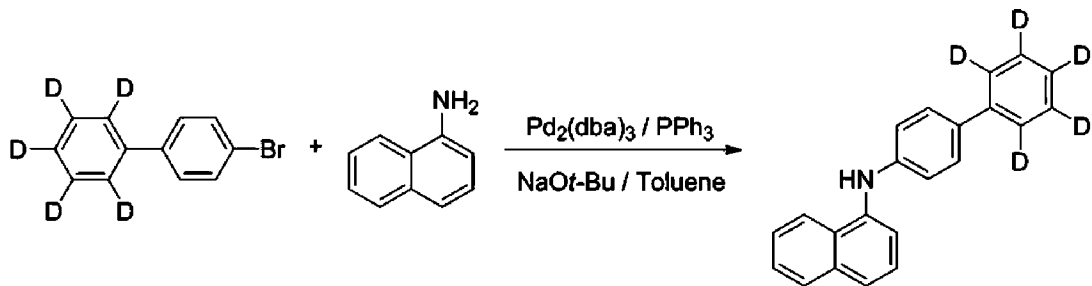
**Sub 2-6**

[266] Aniline-d5 (23.56 g, 240 mmol), 2-bromo-9,9-diphenyl-9H-fluorene (79.5 g, 200 mmol), Pd₂(dba)₃ (5.5 g, 6 mmol), PPh₃ (5.25 g, 20 mmol), NaOt-Bu (57.7 g, 600mmol), toluene (1930 mL) 을 상기 Sub-2-1의 실험방법과 동일하게 하여 생성물을 57.2 g (69 %) 얻었다.

[267]

[268] **Sub 2-7** 의 합성

[269]

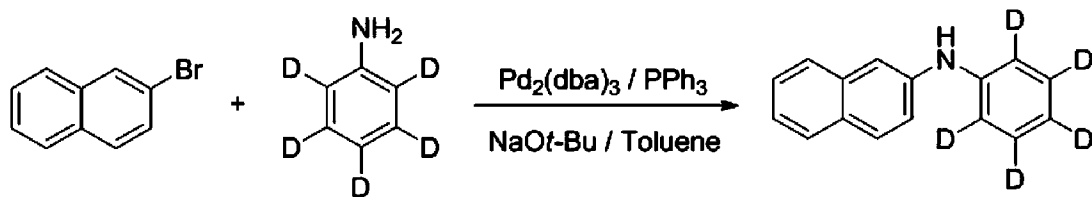
**Sub 2-7**

[270] 1-naphthylamine (34.37 g, 240 mmol), 4'-bromo-2,3,4,5,6-d5-biphenyl (47.63 g, 200 mmol), Pd₂(dba)₃ (5.5 g, 6 mmol), PPh₃ (5.25 g, 20 mmol), NaOt-Bu (57.7 g, 600mmol), toluene (1930 mL) 을 상기 Sub-2-1의 실험방법과 동일하게 하여 생성물을 44.5 g (74 %) 얻었다.

[271]

[272] **Sub 2-8** 의 합성

[273]

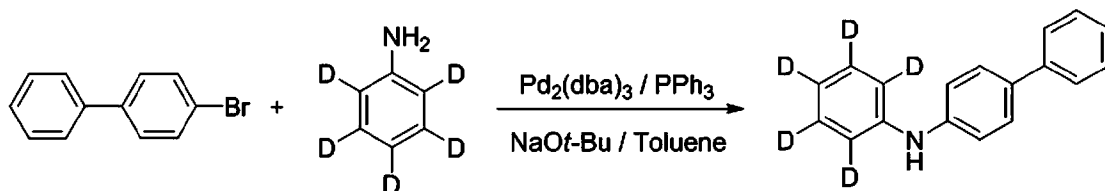
**Sub 2-8**

[274] Aniline-d₅ (23.56 g, 240 mmol), 2-bromonaphthalene (41.41 g, 200 mmol), Pd₂(dba)₃ (5.5 g, 6 mmol), PPh₃ (5.25 g, 20 mmol), NaOt-Bu (57.7 g, 600mmol), toluene (1930 mL) 을 상기 Sub-2-1의 실험방법과 동일하게 하여 생성물을 32.3 g (72 %) 얻었다.

[275]

[276] **Sub 2-9** 의 합성

[277]

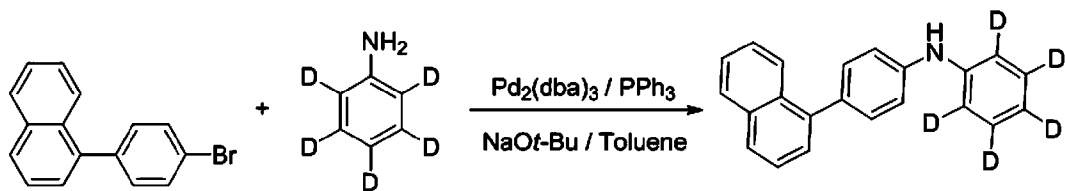
**Sub 2-9**

[278] Aniline-d₅ (23.56 g, 240 mmol), 4-bromobiphenyl (46.62 g, 200 mmol), Pd₂(dba)₃ (5.5 g, 6 mmol), PPh₃ (5.25 g, 20 mmol), NaOt-Bu (57.7 g, 600mmol), toluene (1930 mL) 을 상기 Sub-2-1의 실험방법과 동일하게 하여 생성물을 36.55 g (73 %) 얻었다.

[279]

[280] **Sub 2-10** 의 합성

[281]

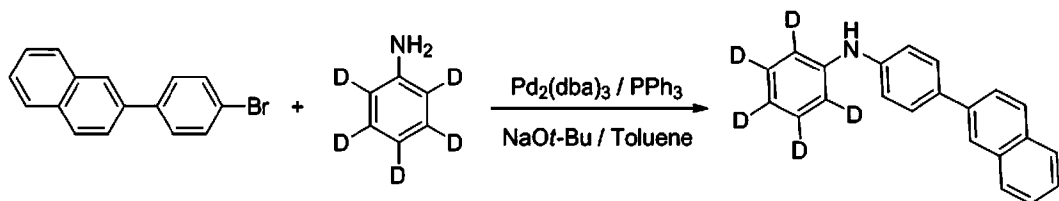
**Sub 2-10**

[282] Aniline-d5 (23.56 g, 240 mmol), 1-(4-bromophenyl)naphthalene (56.63 g, 200 mmol), Pd₂(dba)₃ (5.5 g, 6 mmol), PPh₃ (5.25 g, 20 mmol), NaOt-Bu (57.7 g, 600mmol), toluene (1930 mL) 을 상기 Sub-2-1의 실험방법과 동일하게 하여 생성물을 41.46 g (69%)얻었다.

[283]

[284] **Sub 2-11** 의 합성

[285]

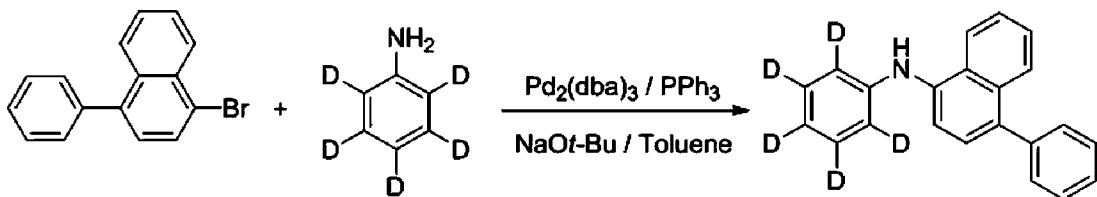
**Sub 2-11**

[286] Aniline-d5 (23.56 g, 240 mmol), 2-(4-bromophenyl)naphthalene (56.63 g, 200 mmol), Pd₂(dba)₃ (5.5 g, 6 mmol), PPh₃ (5.25 g, 20 mmol), NaOt-Bu (57.7 g, 600mmol), toluene (1930 mL) 을 상기 Sub-2-1의 실험방법과 동일하게 하여 생성물을 40.86 g (68%)얻었다.

[287]

[288] **Sub 2-12** 의 합성

[289]

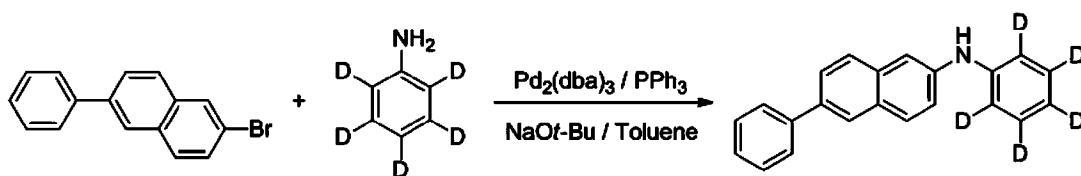
**Sub 2-12**

[290] Aniline-d5 (23.56 g, 240 mmol), 1-bromo-4-phenylnaphthalene (56.63 g, 200 mmol), Pd₂(dba)₃ (5.5 g, 6 mmol), PPh₃ (5.25 g, 20 mmol), NaOt-Bu (57.7 g, 600mmol), toluene (1930 mL) 을 상기 Sub-2-1의 실험방법과 동일하게 하여 생성물을 39.05 g (65 %)얻었다.

[291]

[292] **Sub 2-13** 의 합성

[293]

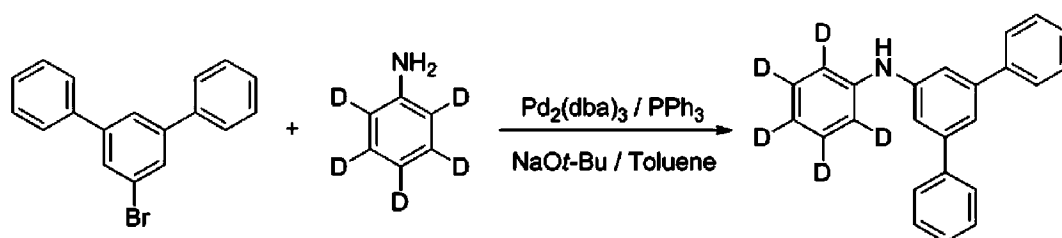
**Sub 2-13**

[294] Aniline-d5 (23.56 g, 240 mmol), 2-bromo-6-phenylnaphthalene (56.63 g, 200 mmol), Pd₂(dba)₃ (5.5 g, 6 mmol), PPh₃ (5.25 g, 20 mmol), NaOt-Bu (57.7 g, 600mmol), toluene (1930 mL) 을 상기 Sub-2-1의 실험방법과 동일하게 하여 생성물을 39.05 g (65 %) 얻었다.

[295]

[296] **Sub 2-14** 의 합성

[297]

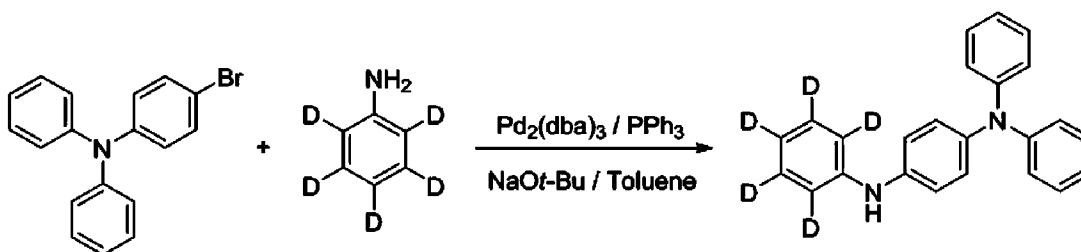
**Sub 2-14**

[298] Aniline-d5 (23.56 g, 240 mmol), 3,5-diphenyl bromobenzene (61.84 g, 200 mmol), Pd₂(dba)₃ (5.5 g, 6 mmol), PPh₃ (5.25 g, 20 mmol), NaOt-Bu (57.7 g, 600mmol), toluene (1930 mL) 을 상기 Sub-2-1의 실험방법과 동일하게 하여 생성물을 44.4 g (68 %) 얻었다.

[299]

[300] **Sub 2-15** 의 합성

[301]

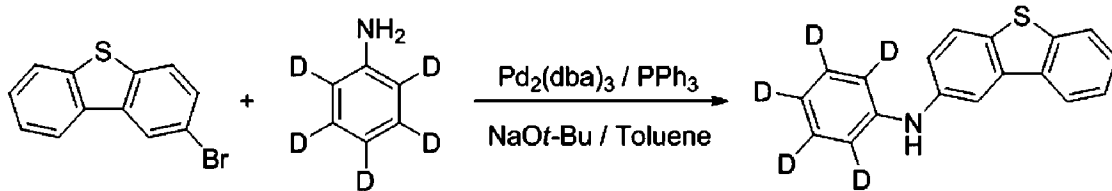
**Sub 2-15**

[302] Aniline-d5 (23.56 g, 240 mmol), 4-bromo-N,N-diphenylaniline (64.84 g, 200 mmol), Pd₂(dba)₃ (5.5 g, 6 mmol), PPh₃ (5.25 g, 20 mmol), NaOt-Bu (57.7 g, 600mmol), toluene (1930 mL) 을 상기 Sub-2-1의 실험방법과 동일하게 하여 생성물을 45.76 g (67 %) 얻었다.

[303]

[304] **Sub 2-16** 의 합성

[305]

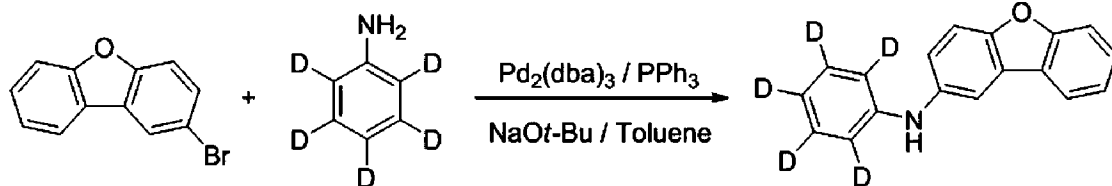
**Sub 2-16**

[306] Aniline-d5 (23.56 g, 240 mmol), 2-bromo-dibenzothiophene (52.63 g, 200 mmol), Pd₂(dba)₃ (5.5 g, 6 mmol), PPh₃ (5.25 g, 20 mmol), NaOt-Bu (57.7 g, 600mmol), toluene (1930 mL) 을 상기 Sub-2-1의 실험방법과 동일하게 하여 생성물을 39.82 g (71 %) 얻었다.

[307]

[308] **Sub 2-17** 의 합성

[309]

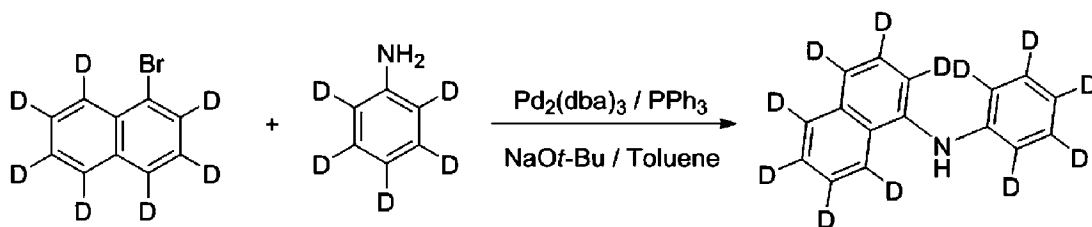
**Sub 2-17**

[310] Aniline-d5 (23.56 g, 240 mmol), 2-bromo-dibenzofuran (49.42 g, 200 mmol), Pd₂(dba)₃ (5.5 g, 6 mmol), PPh₃ (5.25 g, 20 mmol), NaOt-Bu (57.7 g, 600mmol), toluene (1930 mL) 을 상기 Sub-2-1의 실험방법과 동일하게 하여 생성물을 37 g (70 %) 얻었다.

[311]

[312] **Sub 2-18** 의 합성

[313]

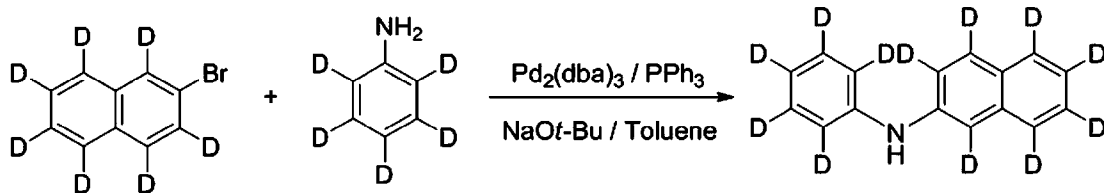
**Sub 2-18**

[314] Aniline-d5 (23.56 g, 240 mmol), 1-bromonaphthalene-d7 (42.82 g, 200 mmol), Pd₂(dba)₃ (5.5 g, 6 mmol), PPh₃ (5.25 g, 20 mmol), NaOt-Bu (57.7 g, 600mmol), toluene (1930 mL) 을 상기 Sub-2-1의 실험방법과 동일하게 하여 생성물을 34.24 g (74 %) 얻었다.

[315]

[316] **Sub 2-19** 의 합성

[317]

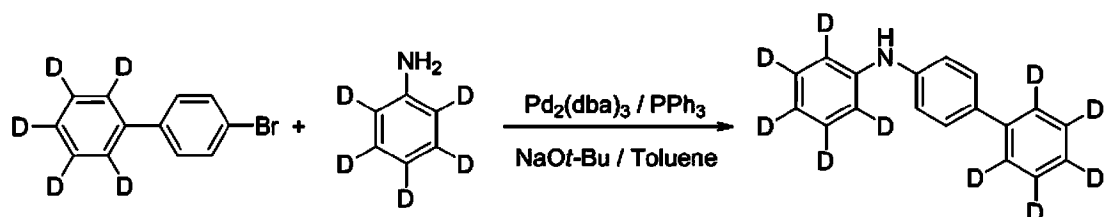
**Sub 2-19**

[318] Aniline-d5 (23.56 g, 240 mmol), 2-bromonaphthalene-d7 (42.82 g, 200 mmol), Pd₂(dba)₃ (5.5 g, 6 mmol), PPh₃ (5.25 g, 20 mmol), NaOt-Bu (57.7 g, 600mmol), toluene (1930 mL) 을 상기 Sub-2-1의 실험방법과 동일하게 하여 생성물을 33.32 g (72 %) 얻었다.

[319]

[320] **Sub 2-20** 의 합성

[321]

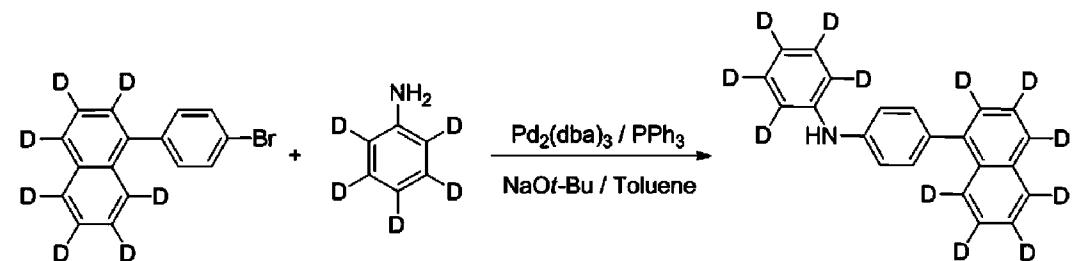
**Sub 2-20**

[322] Aniline-d5 (23.56 g, 240 mmol), 4'-bromo-2,3,4,5,6-d5-biphenyl (47.63 g, 200 mmol), Pd₂(dba)₃ (5.5 g, 6 mmol), PPh₃ (5.25 g, 20 mmol), NaOt-Bu (57.7 g, 600mmol), toluene (1930 mL) 을 상기 Sub-2-1의 실험방법과 동일하게 하여 생성물을 36.77 g (72 %) 얻었다.

[323]

[324] **Sub 2-21** 의 합성

[325]

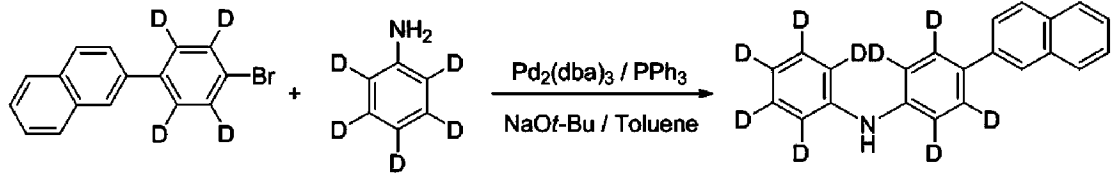
**Sub 2-21**

[326] Aniline-d5 (23.56 g, 240 mmol), 1-(4-bromophenyl)-2,3,4,5,6,7,8-d7-naphthalene (58.04 g, 200 mmol), Pd₂(dba)₃ (5.5 g, 6 mmol), PPh₃ (5.25 g, 20 mmol), NaOt-Bu (57.7 g, 600mmol), toluene (1930 mL) 을 상기 Sub-2-1의 실험방법과 동일하게 하여 생성물을 43.04 g (70 %) 얻었다.

[327]

[328] **Sub 2-22** 의 합성

[329]

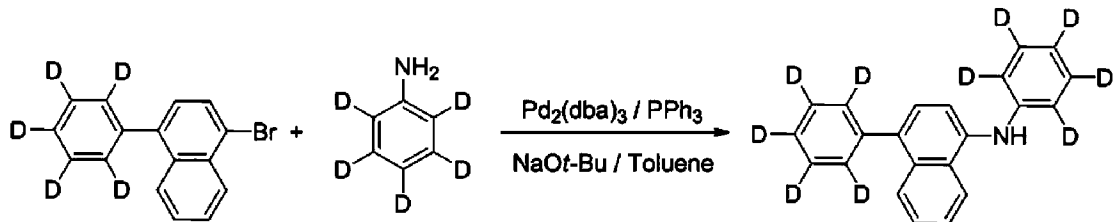
**Sub 2-22**

[330] Aniline-d5 (23.56 g, 240 mmol), 2-(4-bromo-2,3,5,6-d4-phenyl)naphthalene (57.44 g, 200 mmol), Pd₂(dba)₃ (5.5 g, 6 mmol), PPh₃ (5.25 g, 20 mmol), NaOt-Bu (57.7 g, 600mmol), toluene (1930 mL) 을 상기 Sub-2-1의 실험방법과 동일하게 하여 생성물을 43.23 g (71 %) 얻었다.

[331]

[332] **Sub 2-23** 의 합성

[333]

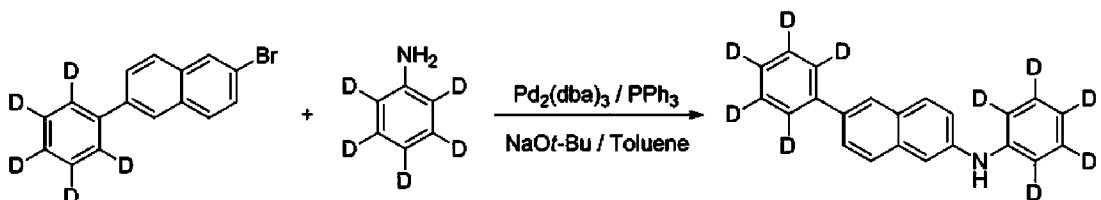
**Sub 2-23**

[334] Aniline-d5 (23.56 g, 240 mmol), 1-bromo-4-(2,3,4,5,6-d5-phenyl)naphthalene (57.64 g, 200 mmol), Pd₂(dba)₃ (5.5 g, 6 mmol), PPh₃ (5.25 g, 20 mmol), NaOt-Bu (57.7 g, 600mmol), toluene (1930 mL) 을 상기 Sub-2-1의 실험방법과 동일하게 하여 생성물을 42.15 g (69 %) 얻었다.

[335]

[336] **Sub 2-24** 의 합성

[337]

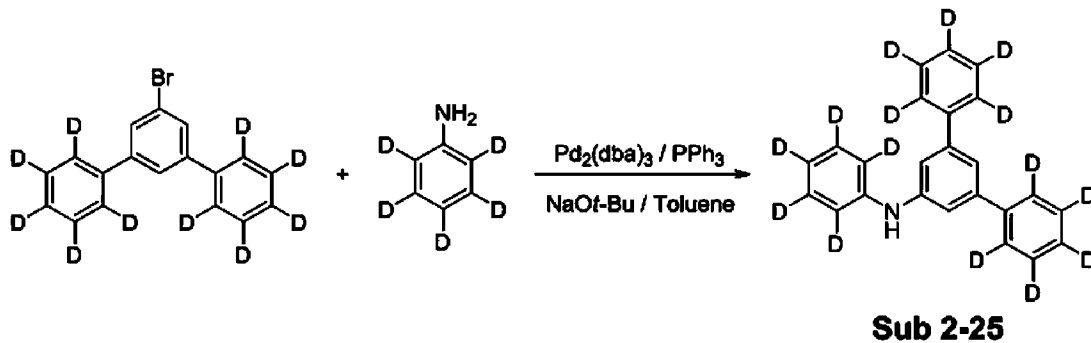
**Sub 2-24**

[338] Aniline-d5 (23.56 g, 240 mmol), 2-bromo-6-(2,3,4,5,6-d5-phenyl)naphthalene (57.64 g, 200 mmol), Pd₂(dba)₃ (5.5 g, 6 mmol), PPh₃ (5.25 g, 20 mmol), NaOt-Bu (57.7 g, 600mmol), toluene (1930 mL) 을 상기 Sub-2-1의 실험방법과 동일하게 하여 생성물을 42.15 g (69 %) 얻었다.

[339]

[340] **Sub 2-25** 의 합성

[341]

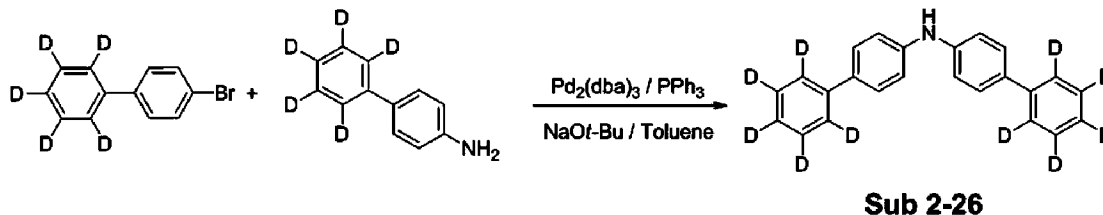


[342] Aniline-d5 (23.56 g, 240 mmol), 3,6-Diphenyl-d10-bromobenzene (63.85 g, 200 mmol), Pd₂(dba)₃ (5.5 g, 6 mmol), PPh₃ (5.25 g, 20 mmol), NaOt-Bu (57.7 g, 600mmol), toluene (1930 mL) 을 상기 Sub-2-1의 실험방법과 동일하게 하여 생성물을 43.07 g (64 %) 얻었다.

[343]

[344] **Sub 2-26** 의 합성

[345]



[346] 4-Phenyl-d5-Aniline (41.82 g, 240 mmol), 4'-bromo-2,3,4,5,6-d5-biphenyl (47.63 g, 200 mmol), Pd₂(dba)₃ (5.5 g, 6 mmol), PPh₃ (5.25 g, 20 mmol), NaOt-Bu (57.7 g, 600mmol), toluene (1930 mL) 을 상기 Sub-2-1의 실험방법과 동일하게 하여 생성물을 45.08 g (68 %) 얻었다.

[347]

[348] 표 1

[Table 1]

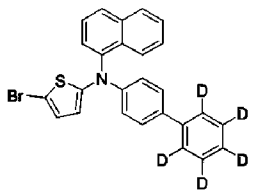
화합물	FD-MS	화합물	FD-MS
Sub 2-1	m/z=179.15 (C ₁₂ HD ₁₀ N=179.28)	Sub 2-2	m/z=192.11 (C ₁₂ H ₅ D ₅ FN=192.24)
Sub 2-3	m/z=174.12 (C ₁₂ H ₆ D ₅ N=174.25)	Sub 2-4	m/z=290.18 (C ₂₁ H ₁₄ D ₅ N=290.41)
Sub 2-5	m/z=414.21 (C ₃₁ H ₁₈ D ₅ N=414.55)	Sub 2-6	m/z=412.20 (C ₃₁ H ₁₆ D ₅ N=412.54)
Sub 2-7	m/z=300.17 (C ₂₂ H ₁₂ D ₅ N=300.41)	Sub 2-8	m/z=224.14 (C ₁₆ H ₈ D ₅ N=224.31)
Sub 2-9	m/z=250.15 (C ₁₈ H ₁₀ D ₅ N=250.35)	Sub 2-10	m/z=300.17 (C ₂₂ H ₁₂ D ₅ N=300.41)
Sub 2-11	m/z=300.17 (C ₂₂ H ₁₂ D ₅ N=300.41)	Sub 2-12	m/z=300.17 (C ₂₂ H ₁₂ D ₅ N=300.41)
Sub 2-13	m/z=300.17 (C ₂₂ H ₁₂ D ₅ N=300.41)	Sub 2-14	m/z=326.18 (C ₂₄ H ₁₄ D ₅ N=326.45)
Sub 2-15	m/z=341.19 (C ₂₄ H ₁₅ D ₅ N ₂ =341.46)	Sub 2-16	m/z=280.11 (C ₁₈ H ₈ D ₅ NS=280.40)
Sub 2-17	m/z=264.13 (C ₁₈ H ₅ D ₅ NO=264.33)	Sub 2-18	m/z=231.18 (C ₁₆ HD ₁₂ N=231.36)
Sub 2-19	m/z=231.18 (C ₁₆ HD ₁₂ N=231.36)	Sub 2-20	m/z=255.18 (C ₁₈ H ₅ D ₁₀ N=255.38)
Sub 2-21	m/z=307.21 (C ₂₂ H ₅ D ₁₂ N=307.45)	Sub 2-22	m/z=304.19 (C ₂₂ H ₈ D ₉ N=304.43)
Sub 2-23	m/z=305.20 (C ₂₂ H ₇ D ₁₀ N=305.44)	Sub 2-24	m/z=305.20 (C ₂₂ H ₇ D ₁₀ N=305.44)
Sub 2-25	m/z=336.25 (C ₂₄ H ₄ D ₁₅ N=336.51)	Sub 2-26	m/z=331.21 (C ₂₄ H ₉ D ₁₀ N=331.48)

[349]

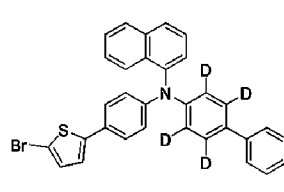
[350]

[351]

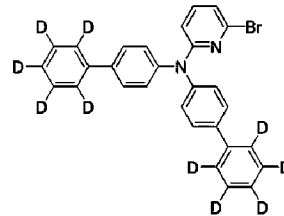
6) Sub 3 합성법 예시



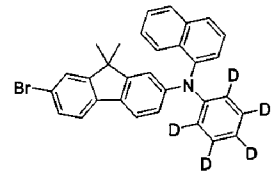
Sub 3-1



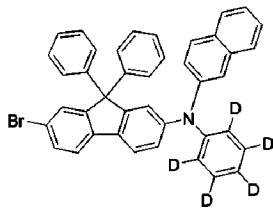
Sub 3-2



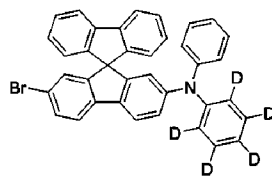
Sub 3-3



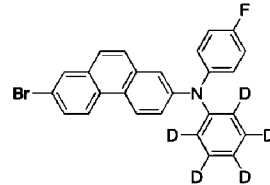
Sub 3-4



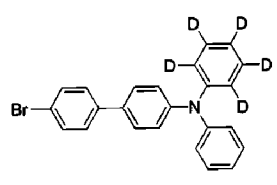
Sub 3-5



Sub 3-6

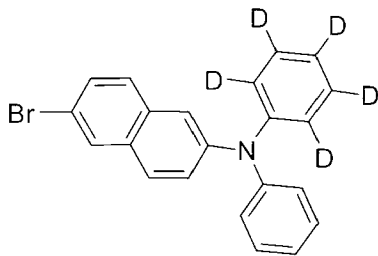


Sub 3-7

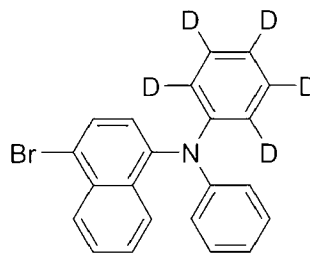


Sub 3-8

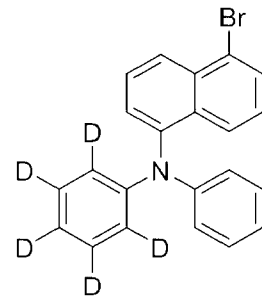
[352]



Sub 3-9



Sub 3-10

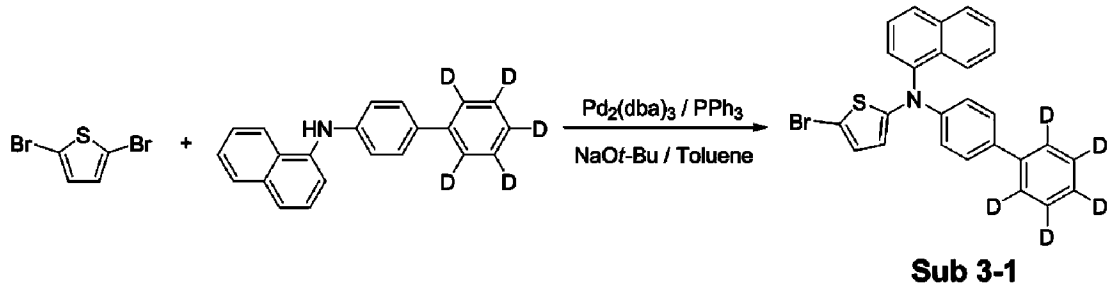


Sub 3-11

[353]

[354] **Sub 3-1** 의 합성

[355]

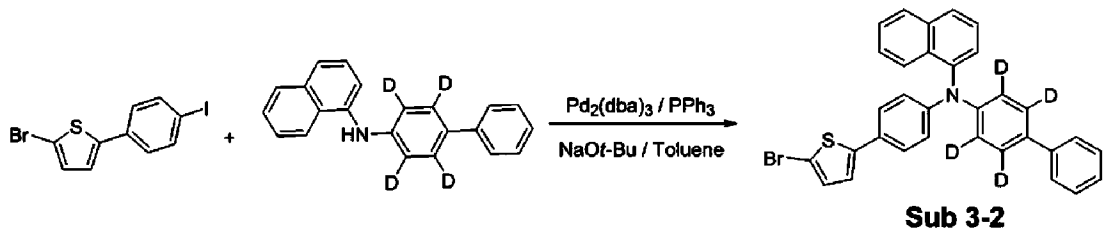


[356] Sub 2-7 (30.04 g, 100 mmol), 2,5-dibromothiophene (26.61 g, 110 mmol), Pd₂(dba)₃ (2.75 g, 3 mmol), PPh₃ (2.63 g, 10 mmol), NaOt-Bu (28.9 g, 300mmol), toluene (970 mL) 을 상기 Sub-2-1의 실험방법과 동일하게 하여 생성물을 30.92 g (67 %) 얻었다.

[357]

[358] **Sub 3-2** 의 합성

[359]



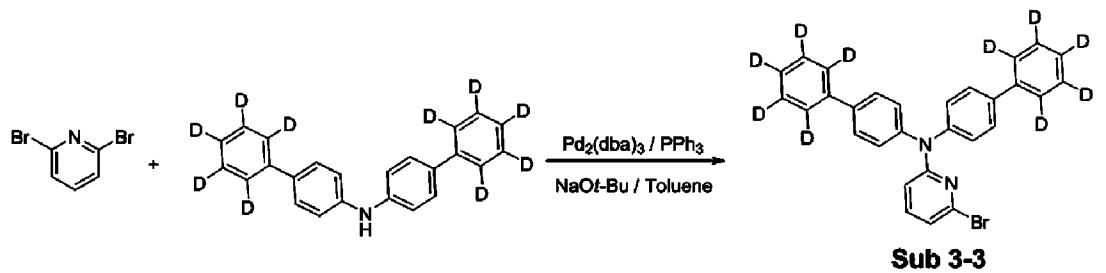
[360]

[361] N-(2,3,5,6-d4-biphenyl-4-yl)naphthalen-1-amine (29.94 g, 100 mmol), 2-bromo-5-(4-iodophenyl)thiophene (40.15 g, 110 mmol), Pd₂(dba)₃ (2.75 g, 3 mmol), PPh₃ (2.63 g, 10 mmol), NaOt-Bu (28.9 g, 300mmol), toluene (970 mL) 을 상기 Sub-2-1의 실험방법과 동일하게 하여 생성물을 33.80 g (63 %) 얻었다.

[362]

[363] **Sub 3-3** 의 합성

[364]

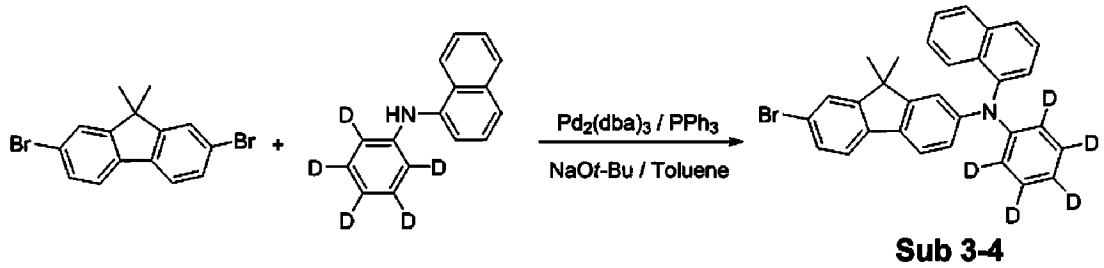


[365] bis(2,3,4,5,6'-d5-biphenyl-4-yl)amine (33.15 g, 100 mmol), 2,6-dibromopyridine (26.06 g, 110 mmol), Pd₂(dba)₃ (2.75 g, 3 mmol), PPh₃ (2.63 g, 10 mmol), NaOt-Bu (28.9 g, 300mmol), toluene (970 mL) 을 상기 Sub-2-1의 실험방법과 동일하게 하여 생성물을 31.68 g (65 %) 얻었다.

[366]

[367] **Sub 3-4** 의 합성

[368]

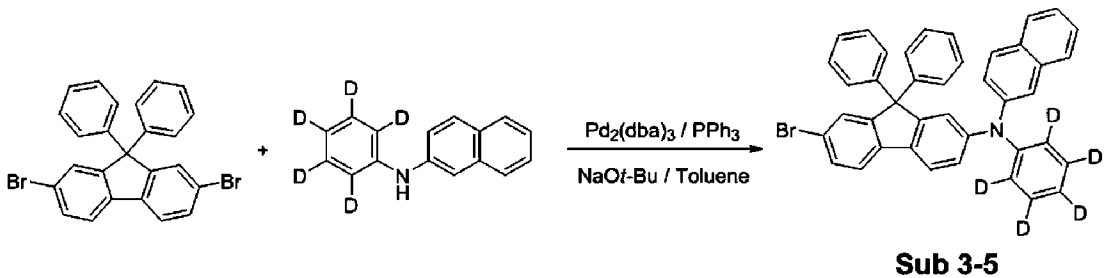


[369] N-phenyl-d₅-naphthalen-1-amine (22.43 g, 100 mmol), 2,7-dibromo-9,9-dimethyl fluorene (38.73 g, 110 mmol), Pd₂(dba)₃ (2.75 g, 3 mmol), PPh₃ (2.63 g, 10 mmol), NaOt-Bu (28.9 g, 300mmol), toluene (970 mL) 을 상기 Sub-2-1의 실험방법과 동일하게 하여 생성물을 34.19 g (69 %) 얻었다.

[370]

[371] **Sub 3-5** 의 합성

[372]

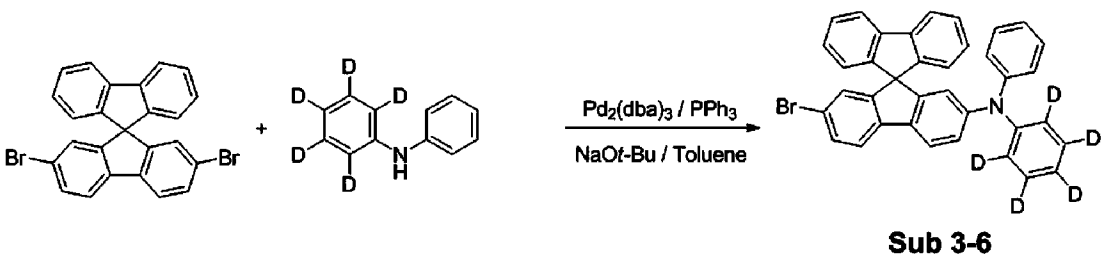


[373] N-phenyl-d₅-naphthalen-2-amine (22.43 g, 100 mmol), 2,7-dibromo-9,9-diphenyl fluorene (52.38 g, 110 mmol), Pd₂(dba)₃ (2.75 g, 3 mmol), PPh₃ (2.63 g, 10 mmol), NaOt-Bu (28.9 g, 300mmol), toluene (970 mL) 을 상기 Sub-2-1의 실험방법과 동일하게 하여 생성물을 41.51 g (67 %) 얻었다.

[374]

[375] **Sub 3-6** 의 합성

[376]

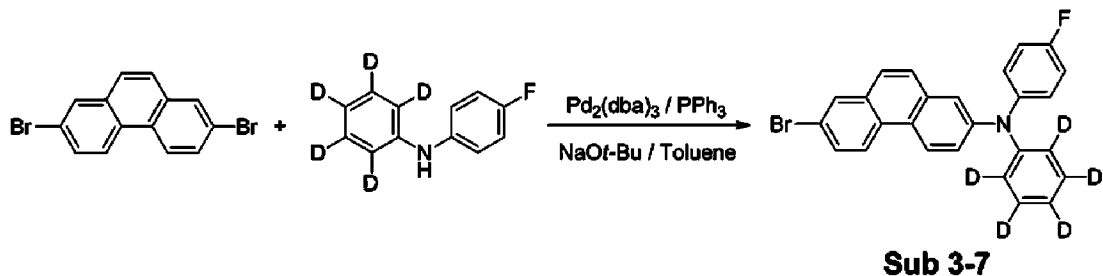


[377] Sub 2-3 (17.43 g, 100 mmol), 2,7-dibromo-9,9'-spirobi[fluorene] (52.16 g, 110 mmol), Pd₂(dba)₃ (2.75 g, 3 mmol), PPh₃ (2.63 g, 10 mmol), NaOt-Bu (28.9 g, 300mmol), toluene (970 mL) 을 상기 Sub-2-1의 실험방법과 동일하게 하여 생성물을 38.02 g (67 %) 얻었다.

[378]

[379] **Sub 3-7** 의 합성

[380]

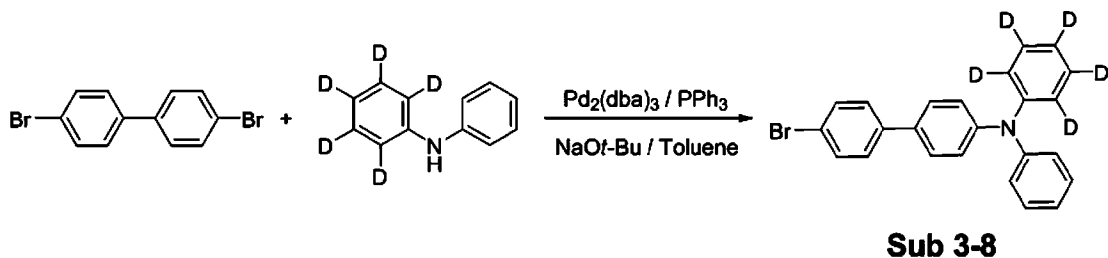


[381] Sub 2-2 (19.22 g, 100 mmol), 2,7-dibromophenanthrene (36.96 g, 110 mmol), Pd₂(dba)₃ (2.75 g, 3 mmol), PPh₃ (2.63 g, 10 mmol), NaOt-Bu (28.9 g, 300mmol), toluene (970 mL) 을 상기 Sub-2-1의 실험방법과 동일하게 하여 생성물을 29.53 g (66 %)얻었다.

[382]

[383] **Sub 3-8** 의 합성

[384]

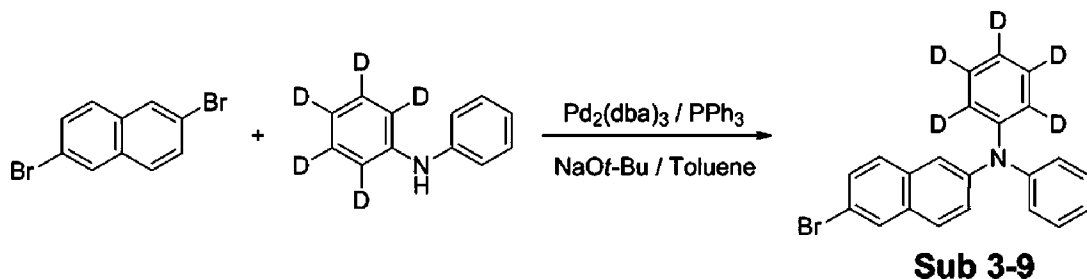


[385] Sub 2-3 (17.43 g, 100 mmol), 4,4'-dibromobiphenyl (34.32 g, 110 mmol), Pd₂(dba)₃ (2.75 g, 3 mmol), PPh₃ (2.63 g, 10 mmol), NaOt-Bu (28.9 g, 300mmol), toluene (970 mL) 을 상기 Sub-2-1의 실험방법과 동일하게 하여 생성물을 27.97 g (69 %)얻었다.

[386]

[387] **Sub 3-9** 의 합성

[388]

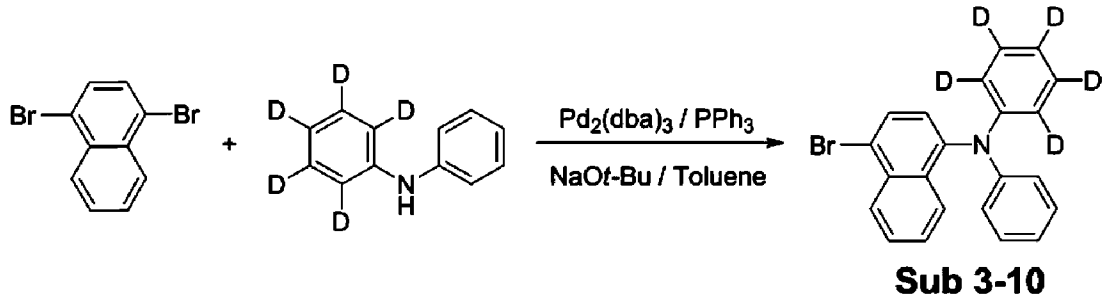


[389] Sub 2-3 (17.43 g, 100 mmol), 2,6-dibromonaphthalene (31.46 g, 110 mmol), Pd₂(dba)₃ (2.75 g, 3 mmol), PPh₃ (2.63 g, 10 mmol), NaOt-Bu (28.9 g, 300mmol), toluene (970 mL) 을 상기 Sub-2-1의 실험방법과 동일하게 하여 생성물을 26.17 g (69 %)얻었다.

[390]

[391] **Sub 3-10** 의 합성

[392]

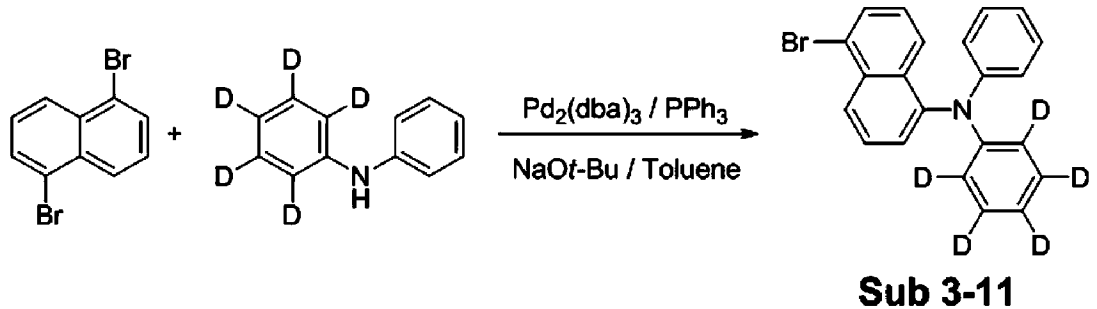


[393] Sub 2-3 (17.43 g, 100 mmol), 1,4-dibromonaphthalene (31.46 g, 110 mmol), Pd₂(dba)₃ (2.75 g, 3 mmol), PPh₃ (2.63 g, 10 mmol), NaOt-Bu (28.9 g, 300mmol), toluene (970 mL) 을 상기 Sub-2-1의 실험방법과 동일하게 하여 생성물을 25.79 g (68 %) 얻었다.

[394]

[395] **Sub 3-11** 의 합성

[396]



[397] Sub 2-3 (17.43 g, 100 mmol), 1,5-dibromonaphthalene (31.46 g, 110 mmol), Pd₂(dba)₃ (2.75 g, 3 mmol), PPh₃ (2.63 g, 10 mmol), NaOt-Bu (28.9 g, 300mmol), toluene (970 mL) 을 상기 Sub-2-1의 실험방법과 동일하게 하여 생성물을 25.41 g (67 %) 얻었다.

[398]

[399] 표 2

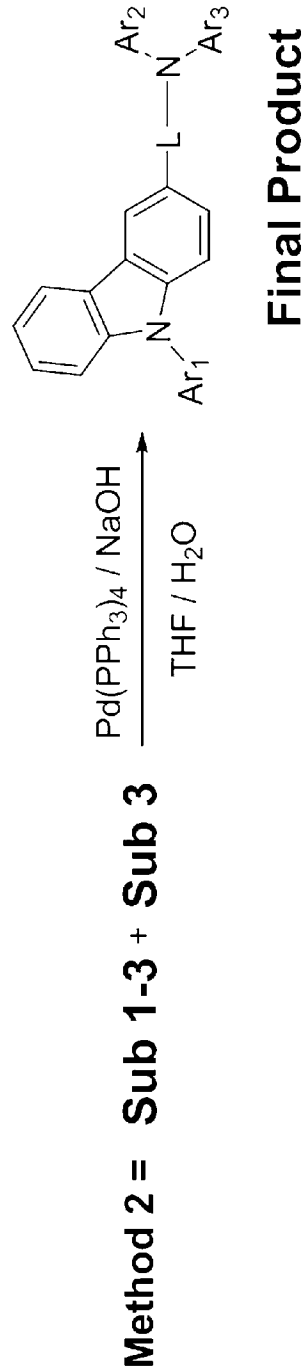
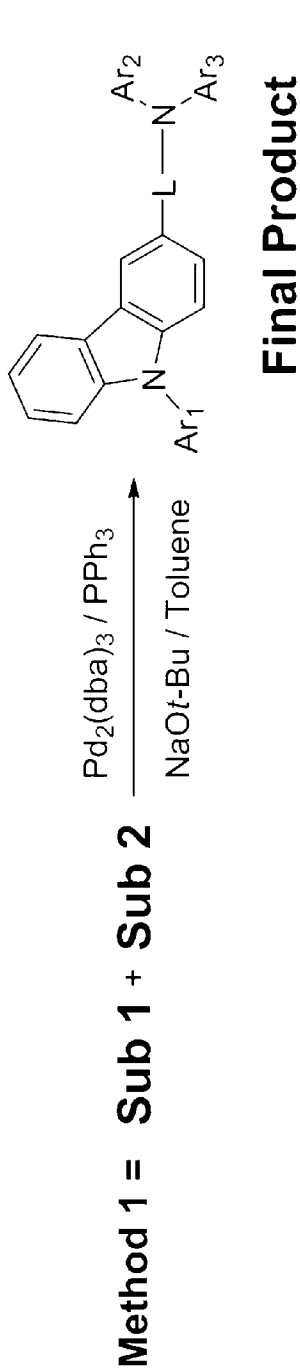
[Table 2]

화합물	FD-MS	화합물	FD-MS
Sub 3-1	m/z=486.15 (C ₂₆ H ₁₃ D ₅ BrNS=487.46)	Sub 3-2	m/z=535.09 C ₃₂ H ₁₈ D ₄ BrNS=536.52)
Sub 3-3	m/z=486.15 (C ₂₉ H ₁₁ D ₁₀ BrN ₂ =487.46)	Sub 3-4	m/z=494.14(C ₃₁ H ₁₉ D ₅ BrN=495.46)
Sub 3-5	m/z=618.17 (C ₄₁ H ₂₃ D ₅ BrN=619.60)	Sub 3-6	m/z=566.14 (C ₃₇ H ₁₉ D ₅ BrN=567.53)
Sub 3-7	m/z=446.08 (C ₂₆ H ₁₂ D ₅ BrFN=447.35)	Sub 3-8	m/z=404.09 (C ₂₄ H ₁₃ D ₅ BrN=405.34)
Sub 3-9	m/z=378.08 (C ₂₂ H ₁₁ D ₅ BrN=379.30)	Sub 3-10	m/z=378.08 (C ₂₂ H ₁₁ D ₅ BrN=379.30)
Sub 3-11	m/z=378.08 (C ₂₂ H ₁₁ D ₅ BrN=379.30)		

[400]

[401] 최종 생성물(Final Product) 합성법

[402]



[403]

[404] **Method 1 합성법**

[405] 둥근바닥플라스크에 Sub 1 (1 당량), Sub 2 (1 당량), Pd₂(dba)₃ (0.05 mol%), PPh₃ (0.1 당량), NaOt-Bu (3 당량), toluene (10.5 mL / 1 mmol) 을 넣은 후에 100 °C에서 반응을 진행한다. 반응이 완료되면 에테르와 물로 추출한 후 유기층을 MgSO₄로 건조하고 농축 한 후 생성된 유기물을 실리카겔 칼럼으로 정제 및 재결정하여 생성물을 얻었다.

[406]

[407] **Method 2 합성법**

[408] 둥근바닥플라스크에 Sub 1-3 (1당량), Sub 3 (1.1당량), Pd(PPh₃)₄ (0.05 당량), NaOH (3당량), THF (3 mL / 1 mmol), 물 (1.5 mL / 1 mmol)을 넣는다.

[409] 그런 후에 80°C~90°C 상태에서 가열 환류시킨다. 반응이 완료되면 상온에서 증류수를 넣어 희석시킨다. 그런후에 메틸렌클로라이드와 물로 추출하고 유기층을 MgSO₄로 건조하여 농축한 후 생성된 화합물을 실리카겔 칼럼으로 정제 및 재결정하여 생성물을 얻었다.

[410] 최종적으로 합성된 화합물의 구조분석을 위해 아래와 같이 질량분석법 HRMS 를 측정하였으며, 순도를 확인하기 위하여 시마츠사에 제조된 HPLC(Model, SPB-20A) 를 이용해서 THF 를 Eluent 용매로 사용하여 순도를 측정하였다.

[411]

[412] 표 3

[Table 3]

화합물	FD-MS	화합물	FD-MS
P-1	m/z=572.30 (C ₄₂ H ₂₀ D ₁₀ N ₂ =572.76)	P-2	m/z=622.32 (C ₄₆ H ₂₂ D ₁₀ N ₂ =622.82)
P-3	m/z=622.32 (C ₄₆ H ₂₂ D ₁₀ N ₂ =622.82)	P-4	m/z=602.26 (C ₄₂ H ₁₈ D ₁₀ N ₂ S=602.81)
P-5	m/z=521.27 (C ₃₇ H ₁₅ D ₁₀ N ₃ =521.68)	P-6	m/z=623.24 (C ₄₄ H ₂₅ D ₅ N ₂ S=623.82)
P-7	m/z=698.27 (C ₃₀ H ₃₀ D ₄ N ₂ S=698.91)	P-8	m/z=649.33 (C ₄₇ H ₂₃ D ₁₀ N ₃ =649.85)
P-9	m/z=657.32 (C ₄₉ H ₃₁ D ₅ N ₂ =657.85)	P-10	m/z=781.35 (C ₅₉ H ₃₅ D ₅ N ₂ =781.99)
P-11	m/z=729.32 (C ₅₅ H ₃₁ D ₅ N ₂ =729.92)	P-12	m/z=609.26 (C ₄₄ H ₂₄ D ₅ FN ₂ =609.74)
P-13	m/z=567.27 (C ₄₂ H ₂₅ D ₅ N ₂ =567.73)	P-14	m/z=541.26 (C ₄₀ H ₂₃ D ₅ N ₂ =541.69)
P-15	m/z=541.26 (C ₄₀ H ₂₃ D ₅ N ₂ =541.69)	P-16	m/z=541.26 (C ₄₀ H ₂₃ D ₅ N ₂ =541.69)
P-17	m/z=541.26 (C ₄₀ H ₂₃ D ₅ N ₂ =541.69)	P-18	m/z=591.27 (C ₄₄ H ₂₅ D ₅ N ₂ =591.75)
P-19	m/z=617.29 (C ₄₆ H ₂₇ D ₅ N ₂ =617.79)	P-20	m/z=649.26 (C ₄₆ H ₂₇ D ₅ N ₂ S=649.86)
P-21	m/z=643.30 (C ₄₈ H ₂₉ D ₅ N ₂ =643.83)	P-22	m/z=607.30 (C ₄₅ H ₂₉ D ₅ N ₂ =607.80)
P-23	m/z=731.33 (C ₅₅ H ₃₃ D ₅ N ₂ =731.93)	P-24	m/z=729.32 (C ₅₅ H ₃₁ D ₅ N ₂ =729.92)
P-25	m/z=597.23 (C ₄₂ H ₂₃ D ₅ N ₂ S=597.78)	P-26	m/z=581.25 (C ₄₂ H ₂₃ D ₅ N ₂ O=581.72)
P-27	m/z=658.31 (C ₄₈ H ₃₀ D ₅ N ₃ =658.84)	P-28	m/z=546.29 (C ₄₀ H ₁₈ D ₁₀ N ₂ =546.73)
P-29	m/z=598.32 (C ₄₄ H ₁₈ D ₁₂ N ₂ =598.80)	P-30	m/z=624.33 (C ₄₆ H ₂₀ D ₁₂ N ₂ =624.83)
P-31	m/z=654.29 (C ₄₆ H ₂₂ D ₁₀ N ₂ S=654.89)	P-32	m/z=624.33 (C ₄₆ H ₂₀ D ₁₂ N ₂ =624.83)
P-33	m/z=621.31 (C ₄₆ H ₂₃ D ₉ N ₂ =621.82)	P-34	m/z=622.32 (C ₄₆ H ₂₂ D ₁₀ N ₂ =622.82)
P-35	m/z=622.32 (C ₄₆ H ₂₂ D ₁₀ N ₂ =622.82)	P-36	m/z=653.37 (C ₄₈ H ₁₉ D ₁₅ N ₂ =653.89)
P-37	m/z=543.27 (C ₄₀ H ₂₁ D ₇ N ₂ =543.71)	P-38	m/z=593.28 (C ₄₄ H ₂₃ D ₇ N ₂ =593.77)
P-39	m/z=593.28 (C ₄₄ H ₂₃ D ₇ N ₂ =593.77)	P-40	m/z=619.30 (C ₄₆ H ₂₅ D ₇ N ₂ =619.80)
P-41	m/z=669.32 (C ₃₀ H ₂₇ D ₇ N ₂ =669.86)	P-42	m/z=669.32 (C ₃₀ H ₂₇ D ₇ N ₂ =669.86)
P-43	m/z=669.32 (C ₃₀ H ₂₇ D ₇ N ₂ =669.86)	P-44	m/z=669.32 (C ₃₀ H ₂₇ D ₇ N ₂ =669.86)
P-45	m/z=695.33 (C ₅₂ H ₂₉ D ₇ N ₂ =695.90)	P-46	m/z=659.33 (C ₄₉ H ₂₉ D ₇ N ₂ =659.87)
P-47	m/z=783.36 (C ₅₉ H ₃₃ D ₇ N ₂ =784.01)	P-48	m/z=781.35 (C ₅₉ H ₃₁ D ₇ N ₂ =781.99)
P-49	m/z=649.26 (C ₄₆ H ₂₃ D ₇ N ₂ S=649.85)	P-50	m/z=633.28 (C ₄₆ H ₂₃ D ₇ N ₂ O=633.79)
P-51	m/z=710.34 (C ₅₂ H ₃₀ D ₇ N ₃ =710.91)	P-52	m/z=548.30 (C ₄₀ H ₁₆ D ₁₂ N ₂ =548.74)
P-53	m/z=600.33 (C ₄₄ H ₁₆ D ₁₄ N ₃ =600.81)	P-54	m/z=600.33 (C ₄₄ H ₁₆ D ₁₄ N ₂ =600.81)
P-55	m/z=624.33 (C ₄₆ H ₂₀ D ₁₂ N ₂ =624.83)	P-56	m/z=676.36 (C ₅₀ H ₂₀ D ₁₄ N ₂ =676.90)
P-57	m/z=673.34 (C ₅₀ H ₂₃ D ₁₁ N ₂ =673.89)	P-58	m/z=673.34 (C ₅₀ H ₂₃ D ₁₁ N ₂ =673.89)
P-59	m/z=674.35 (C ₅₀ H ₂₂ D ₁₂ N ₂ =674.89)	P-60	m/z=705.39 (C ₅₂ H ₁₉ D ₁₇ N ₂ =705.96)
P-61	m/z=567.27 (C ₄₂ H ₂₅ D ₅ N ₂ =567.73)	P-62	m/z=617.29 (C ₄₆ H ₂₇ D ₅ N ₂ =617.79)
P-63	m/z=617.29 (C ₄₆ H ₂₇ D ₅ N ₂ =617.79)	P-64	m/z=643.30 (C ₄₈ H ₂₉ D ₅ N ₂ =643.83)
P-65	m/z=692.31 (C ₅₂ H ₃₂ D ₄ N ₂ =692.88)	P-66	m/z=692.31 (C ₅₂ H ₃₂ D ₄ N ₂ =692.88)
P-67	m/z=697.34 (C ₅₂ H ₂₇ D ₉ N ₂ =697.91)	P-68	m/z=697.34 (C ₅₂ H ₂₇ D ₉ N ₂ =697.91)
P-69	m/z=718.33 (C ₅₄ H ₃₄ D ₄ N ₂ =718.92)	P-70	m/z=683.33 (C ₅₁ H ₃₃ D ₅ N ₂ =683.89)
P-71	m/z=807.37 (C ₆₁ H ₃₇ D ₅ N ₂ =808.03)	P-72	m/z=805.35 (C ₆₁ H ₃₅ D ₅ N ₂ =806.01)
P-73	m/z=677.29 (C ₄₈ H ₂₃ D ₉ N ₂ S=677.90)	P-74	m/z=661.31 (C ₄₈ H ₂₃ D ₉ N ₂ O=661.84)

P-75	m/z=738.37 (C ₅₄ H ₃₀ D ₉ N ₃ =738.96)	P-76	m/z=572.30 (C ₄₂ H ₂₀ D ₁₀ N ₂ =572.76)
P-77	m/z=624.33 (C ₄₆ H ₂₀ D ₁₂ N ₂ =624.83)	P-78	m/z=624.33 (C ₄₆ H ₂₀ D ₁₂ N ₂ =624.83)
P-79	m/z=648.33 (C ₄₈ H ₂₄ D ₁₀ N ₂ =648.86)	P-80	m/z=699.36 (C ₅₂ H ₂₅ D ₁₁ N ₂ =699.92)
P-81	m/z=696.34 (C ₅₂ H ₂₈ D ₈ N ₂ =696.90)	P-82	m/z=702.38 (C ₅₂ H ₂₂ D ₁₄ N ₂ =702.94)
P-83	m/z=702.38 (C ₅₂ H ₂₂ D ₁₄ N ₂ =702.94)	P-84	m/z=728.39 (C ₅₄ H ₂₄ D ₁₄ N ₂ =728.98)
P-85	m/z=619.30 (C ₄₆ H ₂₅ D ₇ N ₂ =619.80)	P-86	m/z=669.32 (C ₅₀ H ₂₇ D ₇ N ₂ =669.86)
P-87	m/z=667.30 (C ₅₀ H ₂₉ D ₅ N ₂ =667.85)	P-88	m/z=694.33 (C ₅₂ H ₃₀ D ₆ N ₂ =694.89)
P-89	m/z=742.33 (C ₅₆ H ₃₄ D ₄ N ₂ =742.94)	P-90	m/z=742.33 (C ₅₆ H ₃₄ D ₄ N ₂ =742.94)
P-91	m/z=743.33 (C ₅₆ H ₃₃ D ₅ N ₂ =743.95)	P-92	m/z=743.33 (C ₅₆ H ₃₃ D ₅ N ₂ =743.95)
P-93	m/z=768.34 (C ₅₈ H ₃₆ D ₄ N ₂ =768.98)	P-94	m/z=732.34 (C ₅₅ H ₃₆ D ₄ N ₂ =732.94)
P-95	m/z=856.38 (C ₆₅ H ₄₀ D ₄ N ₂ =857.08)	P-96	m/z=855.37 (C ₆₅ H ₃₇ D ₅ N ₂ =856.07)
P-97	m/z=729.31 (C ₅₂ H ₂₃ D ₁₁ N ₂ S=729.97)	P-98	m/z=713.34 (C ₅₂ H ₂₃ D ₁₁ N ₂ O=713.91)
P-99	m/z=790.40 (C ₅₈ H ₃₀ D ₁₁ N ₃ =791.03)	P-100	m/z=624.33 (C ₄₆ H ₂₀ D ₁₂ N ₂ =624.83)
P-101	m/z=676.36 (C ₅₀ H ₂₀ D ₁₄ N ₂ =676.90)	P-102	m/z=674.35 (C ₅₀ H ₂₂ D ₁₂ N ₂ =674.89)
P-103	m/z=699.36 (C ₅₂ H ₂₅ D ₁₁ N ₂ =699.92)	P-104	m/z=749.37 (C ₅₆ H ₂₇ D ₁₁ N ₂ =749.98)
P-105	m/z=746.35 (C ₅₆ H ₃₀ D ₈ N ₂ =746.96)	P-106	m/z=748.37 (C ₅₆ H ₂₈ D ₁₀ N ₂ =748.98)
P-107	m/z=748.37 (C ₅₆ H ₂₈ D ₁₀ N ₂ =748.98)	P-108	m/z=778.41 (C ₅₈ H ₂₆ D ₁₄ N ₂ =779.04)
P-109	m/z=643.30 (C ₄₈ H ₂₉ D ₅ N ₂ =643.83)	P-110	m/z=693.32 (C ₅₂ H ₃₁ D ₅ N ₂ =693.89)
P-111	m/z=697.34 (C ₅₂ H ₂₇ D ₉ N ₂ =697.91)	P-112	m/z=723.36 (C ₅₄ H ₂₉ D ₉ N ₂ =723.95)
P-113	m/z=699.28 (C ₅₀ H ₂₉ D ₅ N ₂ S=699.91)	P-114	m/z=775.31 (C ₅₆ H ₃₃ D ₅ N ₂ S=776.01)
P-115	m/z=775.31 (C ₅₆ H ₃₃ D ₅ N ₂ S=776.01)	P-116	m/z=779.33 (C ₅₆ H ₂₉ D ₉ N ₂ S=780.03)
P-117	m/z=835.40 (C ₆₃ H ₄₁ D ₅ N ₂ =836.08)	P-118	m/z=923.43 (C ₇₀ H ₄₅ D ₅ N ₂ =924.19)
P-119	m/z=1045.44 (C ₈₀ H ₄₇ D ₅ N ₂ =1046.31)	P-120	m/z=1045.44 (C ₈₀ H ₄₇ D ₅ N ₂ =1046.31)
P-121	m/z=913.35 (C ₆₇ H ₃₉ D ₅ N ₂ S=914.18)	P-122	m/z=897.38 (C ₆₇ H ₃₉ D ₅ N ₂ O=898.11)
P-123	m/z=972.42 (C ₇₃ H ₄₄ D ₅ N ₃ =973.22)	P-124	m/z=648.33 (C ₄₈ H ₂₄ D ₁₀ N ₂ =648.86)
P-125	m/z=700.36 (C ₅₂ H ₂₄ D ₁₂ N ₂ =700.93)	P-126	m/z=704.39 (C ₅₂ H ₂₀ D ₁₆ N ₂ =704.95)
P-127	m/z=728.39 (C ₅₄ H ₂₄ D ₁₄ N ₂ =728.98)	P-128	m/z=706.32 (C ₅₀ H ₂₂ D ₁₂ N ₂ S=706.96)
P-129	m/z=779.33 (C ₅₆ H ₂₉ D ₉ N ₂ S=780.03)	P-130	m/z=780.34 (C ₅₆ H ₂₈ D ₁₀ N ₂ S=781.04)
P-131	m/z=784.36 (C ₅₆ H ₂₄ D ₁₄ N ₂ S=785.07)	P-132	m/z=845.46 (C ₆₃ H ₃₁ D ₁₅ N ₂ =846.15)

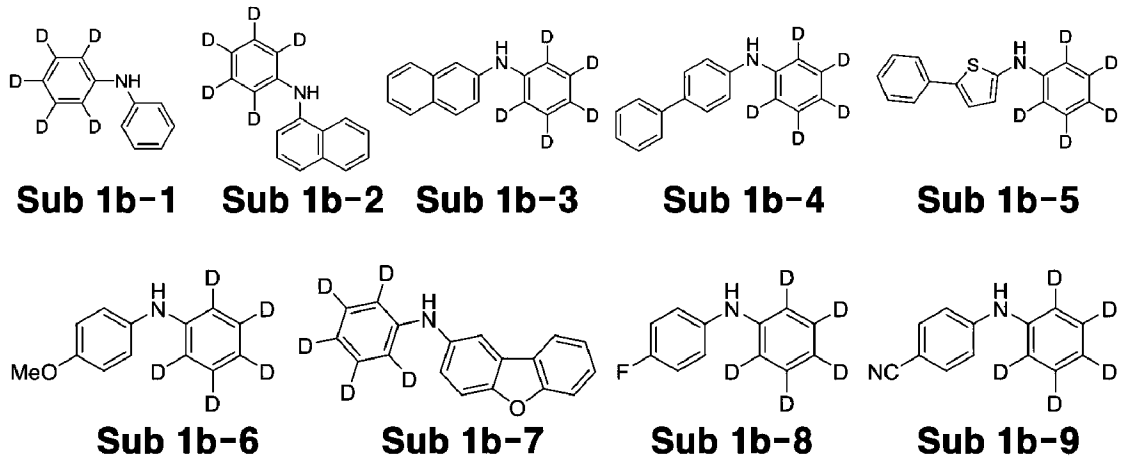
[414]

[415] 화학식 2 화합물의 합성

[416]

[417] 1) Sub 1b 합성법 예시:

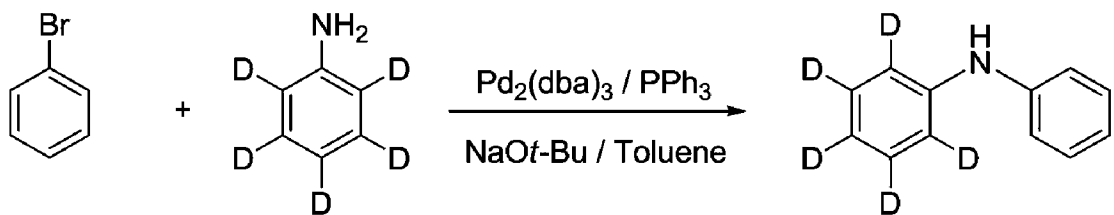
[418]



[419]

[420] **Sub 1b-1** 의 합성

[421]

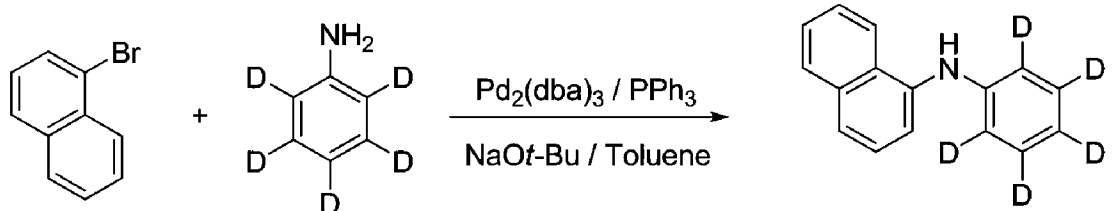


[422] Aniline-d₅ (19.63 g, 200 mmol), bromobenzene (37.68 g, 240 mmol), Pd₂(dba)₃ (5.5 g, 6 mmol), PPh₃ (5.25 g, 20 mmol), NaOt-Bu (57.7 g, 600mmol), toluene (1930 mL) 을 첨가 한 뒤 24시간 교반 환류시킨다. 반응이 완료되면 에테르와 물로 추출한 후 유기층을 MgSO₄로 건조하고 농축 한 후 생성된 유기물을 실리카겔 칼럼으로 정제 및 재결정하여 생성물을 26.14 g (75 %) 얻었다.

[423]

[424] **Sub 1b-2** 의 합성

[425]

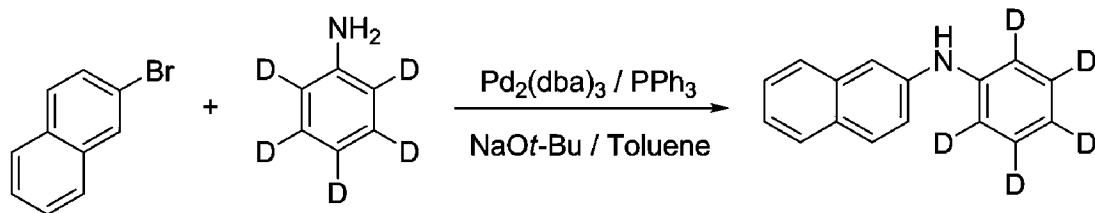


[426] Aniline-d₅ (19.63 g, 200 mmol), 1-bromonaphthalene (49.70 g, 240 mmol), Pd₂(dba)₃ (5.5 g, 6 mmol), PPh₃ (5.25 g, 20 mmol), NaOt-Bu (57.7 g, 600mmol), toluene (1930 mL) 을 상기 Sub-1b-1의 실험방법과 동일하게 하여 생성물을 32.3 g (72 %) 얻었다.

[427]

[428] **Sub 1b-3** 의 합성

[429]

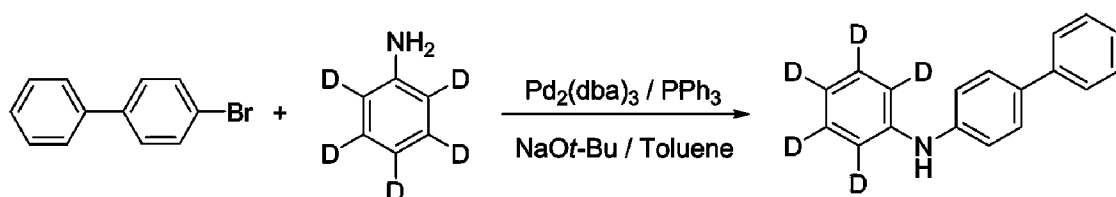


[430] Aniline-d5 (19.63 g, 200 mmol), 2-bromonaphthalene (49.70 g, 240 mmol), Pd₂(dba)₃ (5.5 g, 6 mmol), PPh₃ (5.25 g, 20 mmol), NaOt-Bu (57.7 g, 600mmol), toluene (1930 mL) 을 상기 Sub-1b-1의 실험방법과 동일하게 하여 생성물을 32.3 g (72 %) 얻었다.

[431]

[432] **Sub 1b-4** 의 합성

[433]

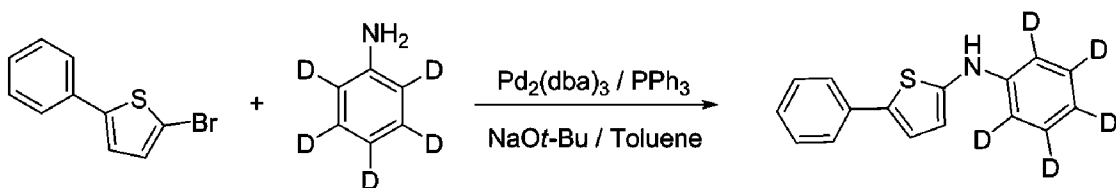


[434] Aniline-d5 (19.63 g, 200 mmol), 4-bromobiphenyl (55.94 g, 240 mmol), Pd₂(dba)₃ (5.5 g, 6 mmol), PPh₃ (5.25 g, 20 mmol), NaOt-Bu (57.7 g, 600mmol), toluene (1930 mL) 을 상기 Sub-1b-1의 실험방법과 동일하게 하여 생성물을 36.55 g (73 %) 얻었다.

[435]

[436] **Sub 1b-5** 의 합성

[437]

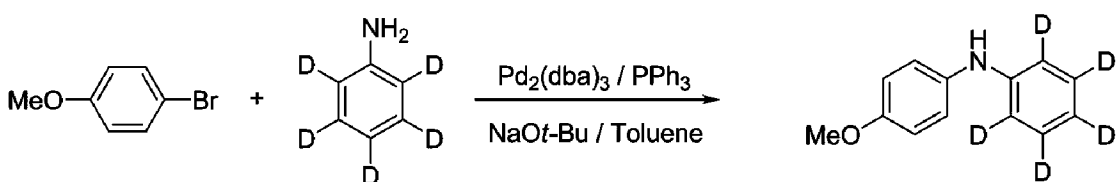


[438] Aniline-d5 (19.63 g, 200 mmol), 2-bromo-5-phenylthiophene (57.39 g, 240 mmol), Pd₂(dba)₃ (5.5 g, 6 mmol), PPh₃ (5.25 g, 20 mmol), NaOt-Bu (57.7 g, 600mmol), toluene (1930 mL) 을 상기 Sub-1b-1의 실험방법과 동일하게 하여 생성물을 35.89 g (70 %) 얻었다.

[439]

[440] **Sub 1b-6** 의 합성

[441]



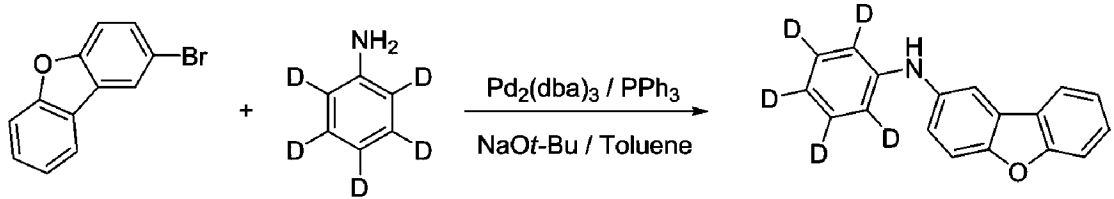
[442] Aniline-d5 (19.63 g, 200 mmol), 1-bromo-4-methoxybenzene (44.89 g, 240 mmol), Pd₂(dba)₃ (5.5 g, 6 mmol), PPh₃ (5.25 g, 20 mmol), NaOt-Bu (57.7 g, 600mmol),

toluene (1930 mL) 을 상기 Sub-1b-1의 실험방법과 동일하게 하여 생성물을 29.42 g (72 %) 얻었다.

[443]

[444] **Sub 1b-7** 의 합성

[445]

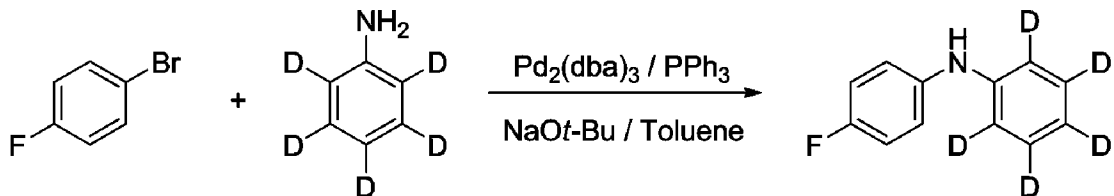


[446] Aniline-d₅ (19.63 g, 200 mmol), 2-bromodibenzo[b,d]furan (59.30 g, 240 mmol), Pd₂(dba)₃ (5.5 g, 6 mmol), PPh₃ (5.25 g, 20 mmol), NaOt-Bu (57.7 g, 600mmol), toluene (1930 mL) 을 상기 Sub-1b-1의 실험방법과 동일하게 하여 생성물을 35.95 g (68 %) 얻었다.

[447]

[448] **Sub 1b-8** 의 합성

[449]

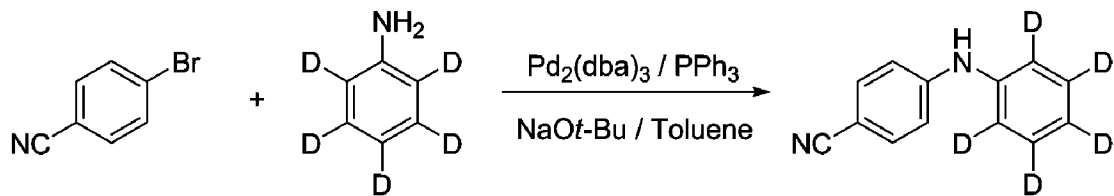


[450] Aniline-d₅ (19.63 g, 200 mmol), 1-bromo-4-fluorobenzene (42 g, 240 mmol), Pd₂(dba)₃ (5.5 g, 6 mmol), PPh₃ (5.25 g, 20 mmol), NaOt-Bu (57.7 g, 600mmol), toluene (1930 mL) 을 상기 Sub-1b-1의 실험방법과 동일하게 하여 생성물을 23.84 g (62 %) 얻었다.

[451]

[452] **Sub 1b-9** 의 합성

[453]



[454] Aniline-d₅ (19.63 g, 200 mmol), 4-bromobenzonitrile (43.68 g, 240 mmol), Pd₂(dba)₃ (5.5 g, 6 mmol), PPh₃ (5.25 g, 20 mmol), NaOt-Bu (57.7 g, 600mmol), toluene (1930 mL) 을 상기 Sub-1b-1의 실험방법과 동일하게 하여 생성물을 26.30 g (66 %) 얻었다.

[455] 표 4

[Table 4]

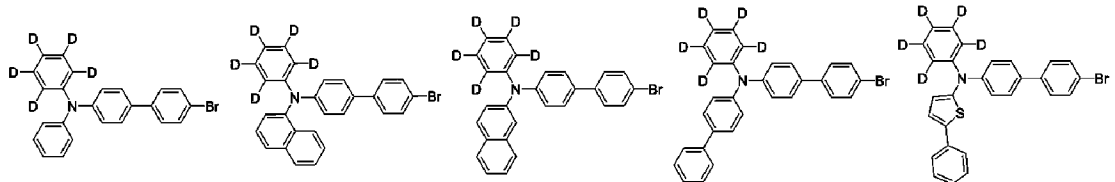
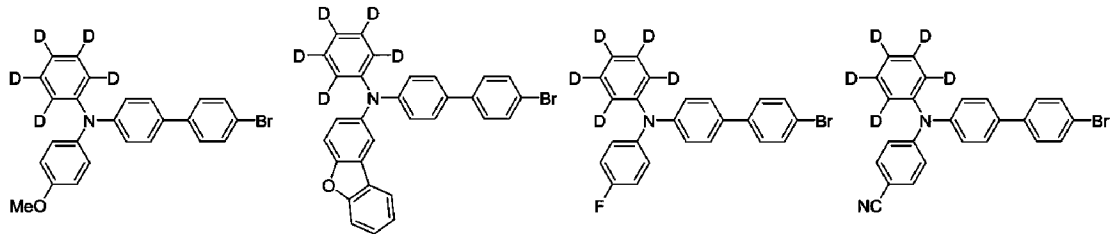
화합물	FD-MS	화합물	FD-MS
Sub 1b-1	m/z=174.12 (C ₁₂ H ₆ D ₅ N=174.25)	Sub 1b-2	m/z=224.14 (C ₁₆ H ₈ D ₅ N=224.31)
Sub 1b-3	m/z=224.14 (C ₁₆ H ₈ D ₅ N=224.31)	Sub 1b-4	m/z=250.15 (C ₁₈ H ₁₀ D ₅ N=250.35)
Sub 1b-5	m/z=256.11 (C ₁₆ H ₈ D ₅ NS=256.38)	Sub 1b-6	m/z=204.13 (C ₁₃ H ₈ D ₅ NO=204.28)
Sub 1b-7	m/z=199.12 (C ₁₈ H ₈ D ₅ NO=264.33)	Sub 1b-8	m/z=192.11 (C ₁₂ H ₅ D ₅ FN=192.24)
Sub 1b-9	m/z=264.13 (C ₁₃ H ₅ D ₅ N ₂ =: 199.26)		

[456]

[457]

[458]

2) Sub 2b 합성법 예시:

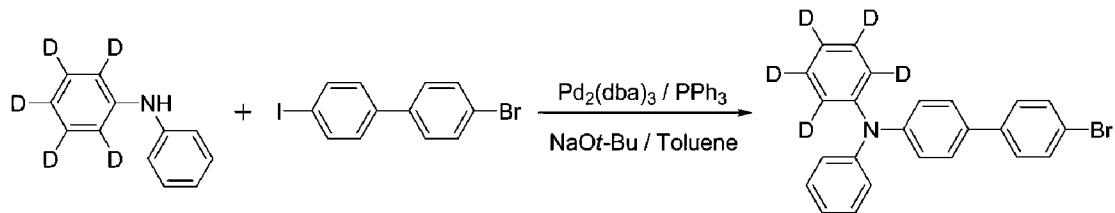
**Sub 2b-1****Sub 2b-2****Sub 2b-3****Sub 2b-4****Sub 2b-5****Sub 2b-6****Sub 2b-7****Sub 2b-8****Sub 2b-9**

[459]

[460]

[461]

Sub 2b-1 의 합성



[462]

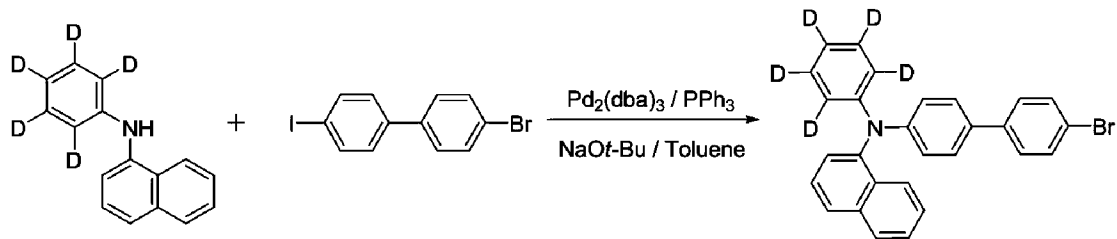
phenylaniline-d5 (34.85 g, 200 mmol), 4-bromo-4'-iodobiphenyl (86.16 g, 240 mmol), Pd₂(dba)₃ (5.5 g, 6 mmol), PPh₃ (5.25 g, 20 mmol), NaOt-Bu (57.7 g, 600mmol), toluene (1930 mL) 을 상기 Sub-1b-1의 실험방법과 동일하게 하여 생성물을 55.13 g (68 %) 얻었다.

[463]

[464]

[465]

Sub 2b-2 의 합성

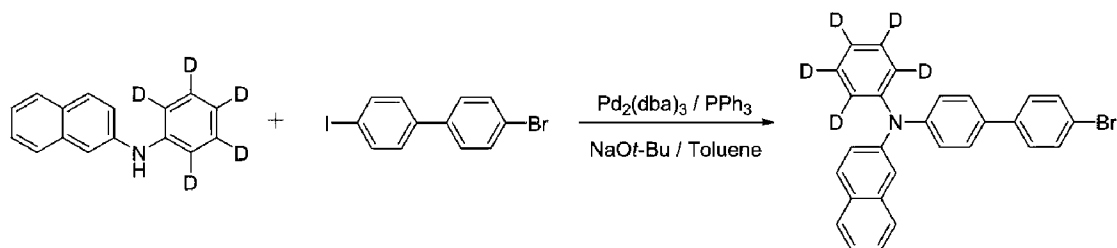


[466] N-phenyl-d5-naphthalen-1-amine (44.86g, 200 mmol), 4-bromo-4'-iodobiphenyl (86.16 g, 240 mmol), Pd₂(dba)₃ (5.5 g, 6 mmol), PPh₃ (5.25 g, 20 mmol), NaOt-Bu (57.7 g, 600mmol), toluene (1930 mL) 을 상기 Sub-1b-1의 실험방법과 동일하게 하여 생성물을 62.85 g (69 %) 얻었다.

[467]

[468] **Sub 2b-3** 의 합성

[469]

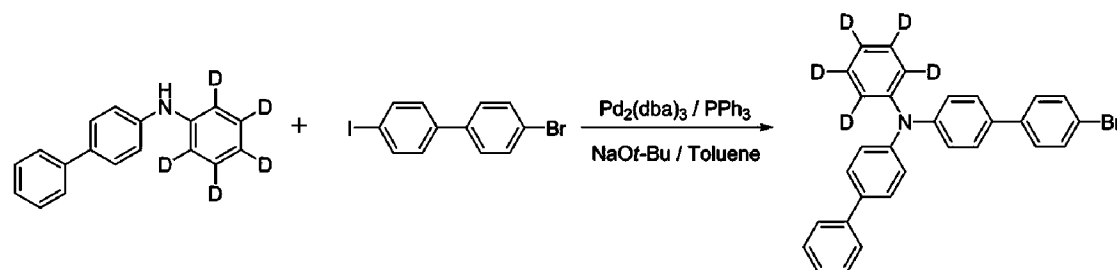


[470] N-phenyl-d5-naphthalen-2-amine (44.86g, 200 mmol), 4-bromo-4'-iodobiphenyl (86.16 g, 240 mmol), Pd₂(dba)₃ (5.5 g, 6 mmol), PPh₃ (5.25 g, 20 mmol), NaOt-Bu (57.7 g, 600mmol), toluene (1930 mL) 을 상기 Sub-1b-1의 실험방법과 동일하게 하여 생성물을 61.93 g (68 %) 얻었다.

[471]

[472] **Sub 2b-4** 의 합성

[473]

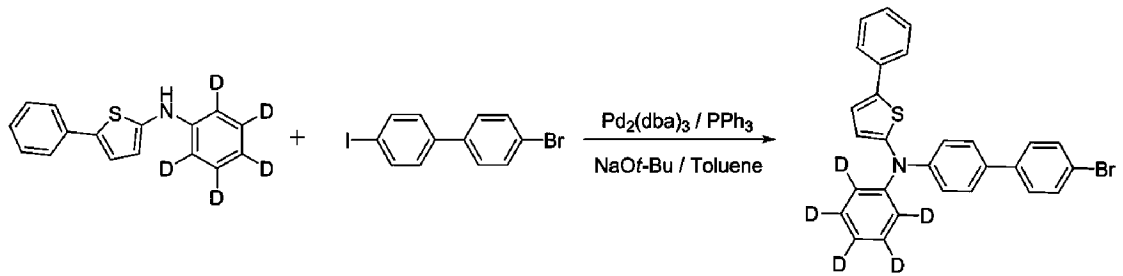


[474] N-phenyl-d5-biphenyl-4-amine (50.07 g, 200 mmol), 4-bromo-4'-iodobiphenyl (86.16 g, 240 mmol), Pd₂(dba)₃ (5.5 g, 6 mmol), PPh₃ (5.25 g, 20 mmol), NaOt-Bu (57.7 g, 600mmol), toluene (1930 mL) 을 상기 Sub-1b-1의 실험방법과 동일하게 하여 생성물을 65.48 g (68 %) 얻었다.

[475]

[476] **Sub 2b-5** 의 합성

[477]

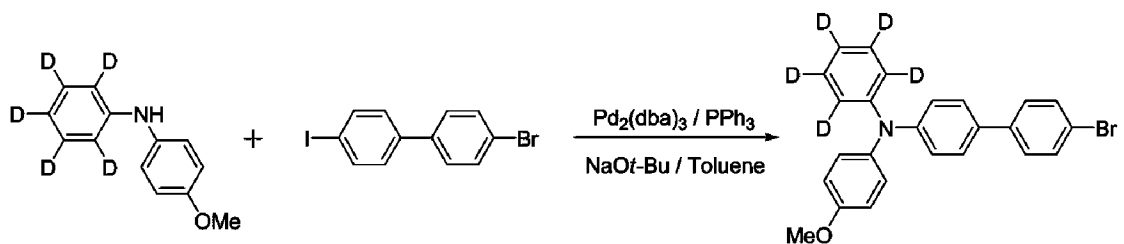


[478] N-phenyl-d5-phenylthiophen-2-amine (51.28g, 200 mmol), 4-bromo-4'-iodobiphenyl (86.16 g, 240 mmol), Pd₂(dba)₃ (5.5 g, 6 mmol), PPh₃ (5.25 g, 20 mmol), NaOt-Bu (57.7 g, 600mmol), toluene (1930 mL) 을 상기 Sub-1b-1의 실험방법과 동일하게 하여 생성물을 63.37 g (65 %) 얻었다.

[479]

[480] **Sub 2b-6** 의 합성

[481]

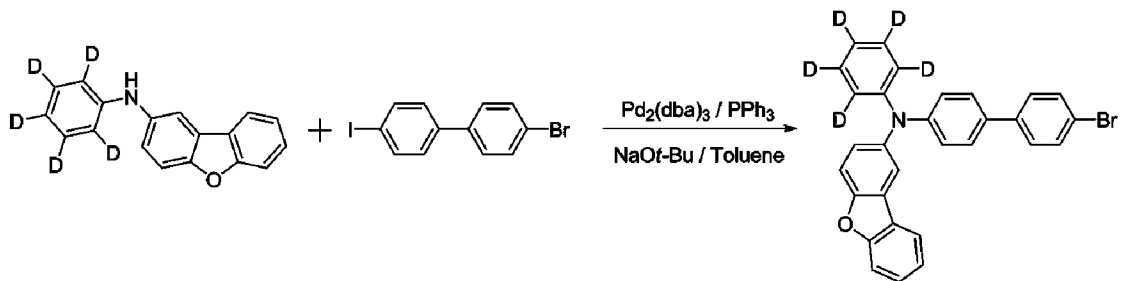


[482] N-(4-methoxyphenyl)-aniline-2,3,4,5,6-d5 (40.86g, 200 mmol), 4-bromo-4'-iodobiphenyl (86.16 g, 240 mmol), Pd₂(dba)₃ (5.5 g, 6 mmol), PPh₃ (5.25 g, 20 mmol), NaOt-Bu (57.7 g, 600mmol), toluene (1930 mL) 을 상기 Sub-1b-1의 실험방법과 동일하게 하여 생성물을 59.21 g (68 %) 얻었다.

[483]

[484] **Sub 2b-7** 의 합성

[485]

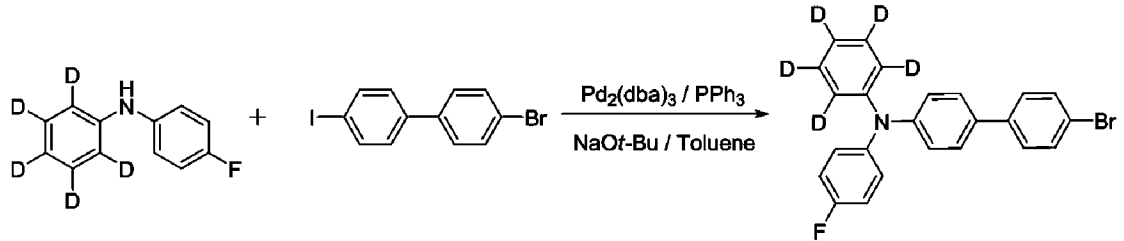


[486] N-phenyl-d5-dibenzo[b,d]furan-2-amine (52.87 g, 200 mmol), 4-bromo-4'-iodobiphenyl (86.16 g, 240 mmol), Pd₂(dba)₃ (5.5 g, 6 mmol), PPh₃ (5.25 g, 20 mmol), NaOt-Bu (57.7 g, 600mmol), toluene (1930 mL) 을 상기 Sub-1b-1의 실험방법과 동일하게 하여 생성물을 64.40 g (65 %) 얻었다.

[487]

[488] **Sub 2b-8** 의 합성

[489]

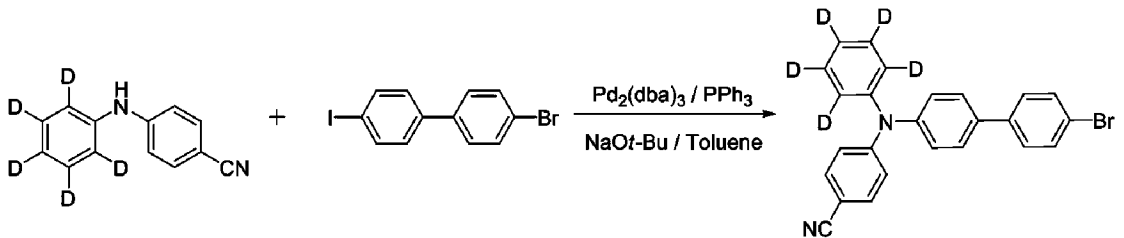


[490] N-phenyl-d5-4-fluorophenyl-1-amine (38.45 g, 200 mmol), 4-bromo-4'-iodobiphenyl (86.16 g, 240 mmol), Pd₂(dba)₃ (5.5 g, 6 mmol), PPh₃ (5.25 g, 20 mmol), NaOt-Bu (57.7 g, 600mmol), toluene (1930 mL) 을 상기 Sub-1b-1의 실험방법과 동일하게 하여 생성물을 56.73 g (67 %) 얻었다.

[491]

[492] **Sub 2b-9** 의 합성

[493]



[494] 4-(phenyl-d5-amino)benzonitrile (39.85 g, 200 mmol), 4-bromo-4'-iodobiphenyl (86.16 g, 240 mmol), Pd₂(dba)₃ (5.5 g, 6 mmol), PPh₃ (5.25 g, 20 mmol), NaOt-Bu (57.7 g, 600mmol), toluene (1930 mL) 을 상기 Sub-1b-1의 실험방법과 동일하게 하여 생성물을 59.39 g (69 %) 얻었다.

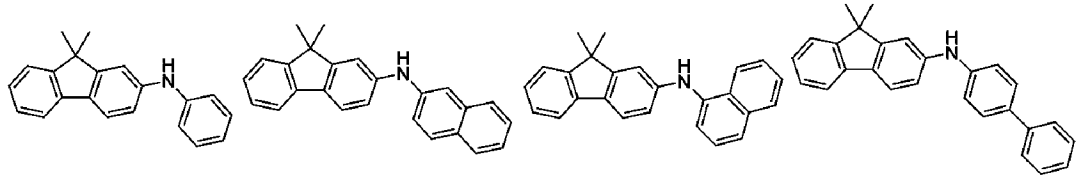
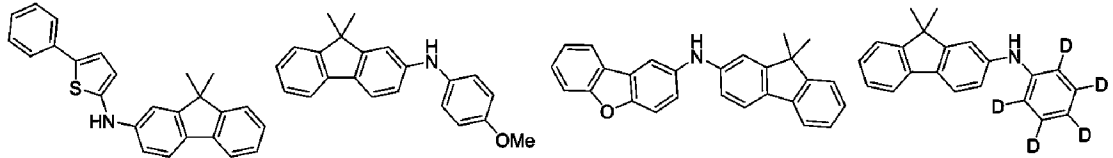
[495] 표 5

[Table 5]

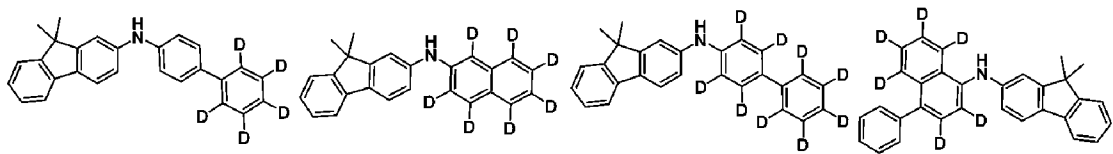
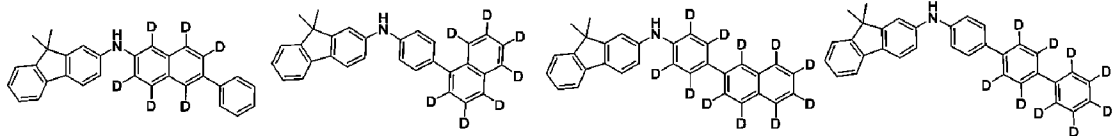
화합물	FD-MS	화합물	FD-MS
Sub 2b-1	m/z=404.09 (C ₂₄ H ₁₃ D ₅ BrN=405.34)	Sub 2b-2	m/z=454.11 (C ₂₈ H ₁₅ D ₅ BrN=455.40)
Sub 2b-3	m/z=454.11 (C ₂₈ H ₁₅ D ₅ BrN=455.40)	Sub 2b-4	m/z=480.12 (C ₃₀ H ₁₇ D ₅ BrN=481.44)
Sub 2b-5	m/z=486.08 (C ₂₈ H ₁₅ D ₅ BrNS=487.46)	Sub 2b-6	m/z=434.10 (C ₂₅ H ₁₅ D ₅ BrNO=435.37)
Sub 2b-7	m/z=494.10 (C ₃₀ H ₁₅ D ₅ BrNO=495.42)	Sub 2b-8	m/z=422.08 (C ₂₄ H ₁₂ D ₅ BrFN=423.33)
Sub 2b-9	m/z=429.09 (C ₂₅ H ₁₂ D ₅ BrN ₂ =430.35)		

[496] **3) Sub 3b 합성법 예시:**

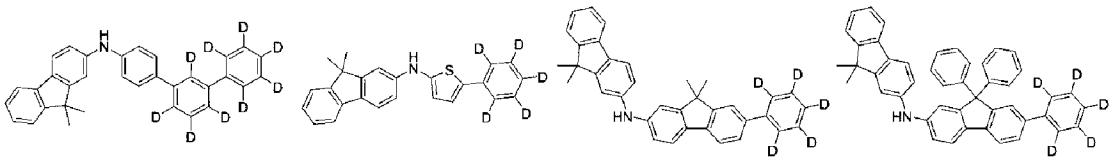
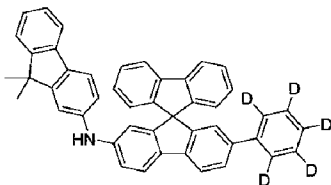
[497]

**Sub 3b-1****Sub 3b-2****Sub 3b-3****Sub 3b-4****Sub 3b-5****Sub 3b-6****Sub 3b-7****Sub 3b-8**

[498]

**Sub 3b-9****Sub 3b-10****Sub 3b-11****Sub 3b-12****Sub 3b-13****Sub 3b-14****Sub 3b-15****Sub 3b-16**

[499]

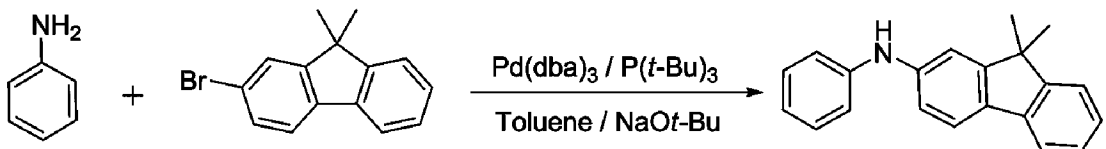
**Sub 3b-17****Sub 3b-18****Sub 3b-19****Sub 3b-20****Sub 3b-21**

[500]

[501]

Sub 3b-1의 합성

[502]

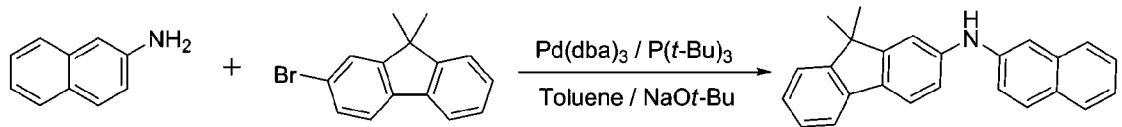


[503] aniline (18.63g, 200 mmol), 2-bromo-9,9-dimethyl-9H-fluorene (65.56g, 240 mmol), Pd₂(dba)₃ (5.5 g, 6 mmol), PPh₃ (5.25 g, 20 mmol), NaO*t*-Bu (57.7 g, 600mmol), toluene (1930 mL) 을 상기 Sub-1b-1의 실험방법과 동일하게 하여 생성물을 38.81 g (68 %)얻었다.

[504]

[505] **Sub 3b-2의 합성**

[506]

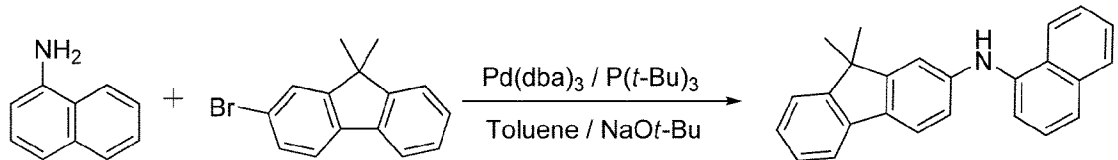


[507] naphthalene-2-anime (28.64g, 200 mmol), 2-bromo-9,9-dimethyl-9H-fluorene (65.56g, 240 mmol), Pd₂(dba)₃ (5.5 g, 6 mmol), PPh₃ (5.25 g, 20 mmol), NaO*t*-Bu (57.7 g, 600mmol), toluene (1930 mL) 을 상기 Sub-1b-1의 실험방법과 동일하게 하여 생성물을 45.62 g (68 %)얻었다.

[508]

[509] **Sub 3b-3의 합성**

[510]

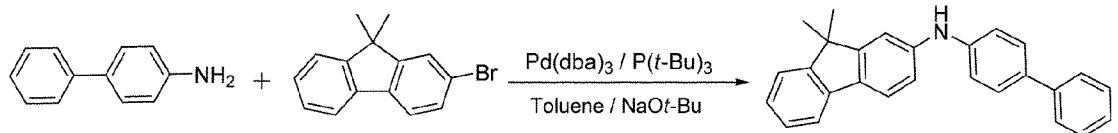


[511] naphthalene-1-anime (28.64g, 200 mmol), 2-bromo-9,9-dimethyl-9H-fluorene (65.56g, 240 mmol), Pd₂(dba)₃ (5.5 g, 6 mmol), PPh₃ (5.25 g, 20 mmol), NaO*t*-Bu (57.7 g, 600mmol), toluene (1930 mL) 을 상기 Sub-1b-1의 실험방법과 동일하게 하여 생성물을 44.95 g (67 %)얻었다.

[512]

[513] **Sub 3b-4의 합성**

[514]

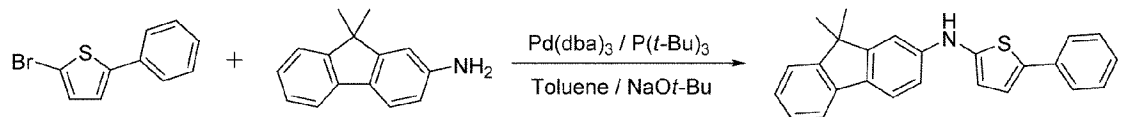


[515] biphenyl-4-amine (33.84g, 200 mmol), 2-bromo-9,9-dimethyl-9H-fluorene (65.56g, 240 mmol), Pd₂(dba)₃ (5.5 g, 6 mmol), PPh₃ (5.25 g, 20 mmol), NaO*t*-Bu (57.7 g, 600mmol), toluene (1930 mL) 을 상기 Sub-1b-1의 실험방법과 동일하게 하여 생성물을 49.88 g (69 %)얻었다.

[516]

[517] **Sub 3b-5의 합성**

[518]

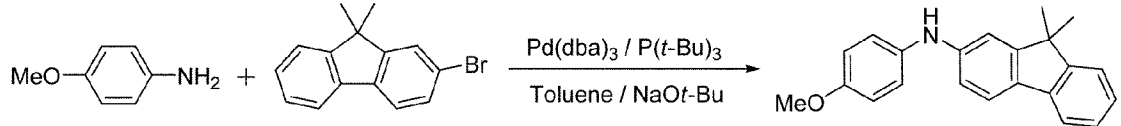


[519] 9,9-dimethyl-9H-fluoren-2-amine (41.86 g, 200 mmol), 2-bromo-5-phenylthiophene (57.39 g, 240 mmol), Pd₂(dba)₃ (5.5 g, 6 mmol), PPh₃ (5.25 g, 20 mmol), NaOt-Bu (57.7 g, 600mmol), toluene (1930 mL) 을 상기 Sub-1b-1의 실험방법과 동일하게 하여 생성물을 47.78 g (65 %) 얻었다.

[520]

[521] **Sub 3b-6의 합성**

[522]

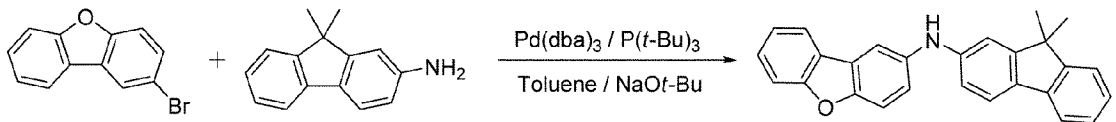


[523] 4-methoxyaniline (24.63g, 200 mmol), 2-bromo-9,9-dimethyl-9H-fluorene (65.56g, 240 mmol), Pd₂(dba)₃ (5.5 g, 6 mmol), PPh₃ (5.25 g, 20 mmol), NaOt-Bu (57.7 g, 600mmol), toluene (1930 mL) 을 상기 Sub-1b-1의 실험방법과 동일하게 하여 생성물을 43.53 g (69 %) 얻었다.

[524]

[525] **Sub 3b-7의 합성**

[526]

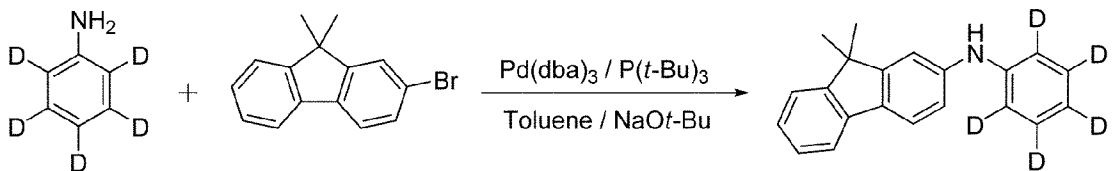


[527] 9,9-dimethyl-9H-fluoren-2-amine (41.86 g, 200 mmol), 2-bromodibenzo[b,d]furan (59.3 g, 240 mmol), Pd₂(dba)₃ (5.5 g, 6 mmol), PPh₃ (5.25 g, 20 mmol), NaOt-Bu (57.7 g, 600mmol), toluene (1930 mL) 을 상기 Sub-1b-1의 실험방법과 동일하게 하여 생성물을 47.31 g (63 %) 얻었다.

[528]

[529] **Sub 3b-8의 합성**

[530]

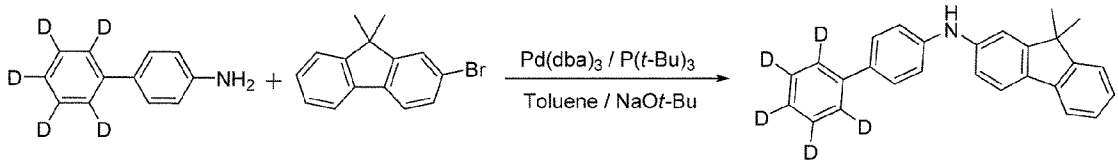


[531] d5-aniline (32.65g, 200 mmol), 2-bromo-9,9-dimethyl-9H-fluorene (65.56g, 240 mmol), Pd₂(dba)₃ (5.5 g, 6 mmol), PPh₃ (5.25 g, 20 mmol), NaOt-Bu (57.7 g, 600mmol), toluene (1930 mL) 을 상기 Sub-1b-1의 실험방법과 동일하게 하여 생성물을 38.91 g (67 %) 얻었다.

[532]

[533] **Sub 3b-9의 합성**

[534]

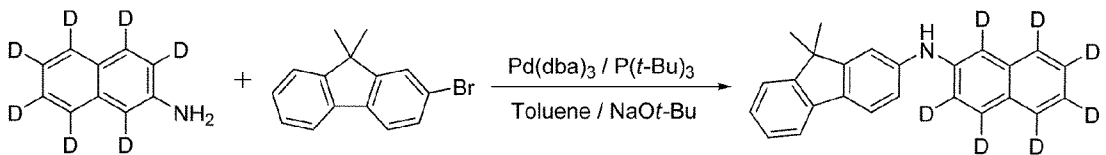


- [535] 4-phenyl-d5-phenyl-1-amine (34.85 g, 200 mmol),
2-bromo-9,9-dimethyl-9H-fluorene (65.56g, 240 mmol), Pd₂(dba)₃ (5.5 g, 6 mmol),
PPh₃ (5.25 g, 20 mmol), NaOt-Bu (57.7 g, 600mmol), toluene (1930 mL) 을 상기
Sub-1b-1의 실험방법과 동일하게 하여 생성물을 50.58 g (69 %) 얻었다.

[536]

[537] **Sub 3b-10의 합성**

[538]

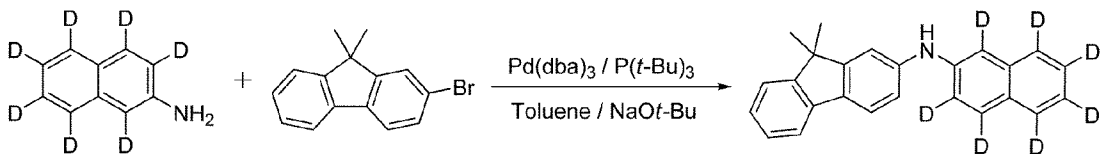


- [539] 2-bromo-9,9-dimethyl-9H-fluorene (65.56g, 240 mmol), 2-Aminonaphthalene-d7
(30.05g, 200 mmol), Pd₂(dba)₃ (5.5 g, 6 mmol), PPh₃ (5.25 g, 20 mmol), NaOt-Bu
(57.7 g, 600mmol), toluene (1930 mL) 을 상기 Sub-1b-1의 실험방법과 동일하게
하여 생성물을 45.89 g (67 %) 얻었다.

[540]

[541] **Sub 3b-11의 합성**

[542]

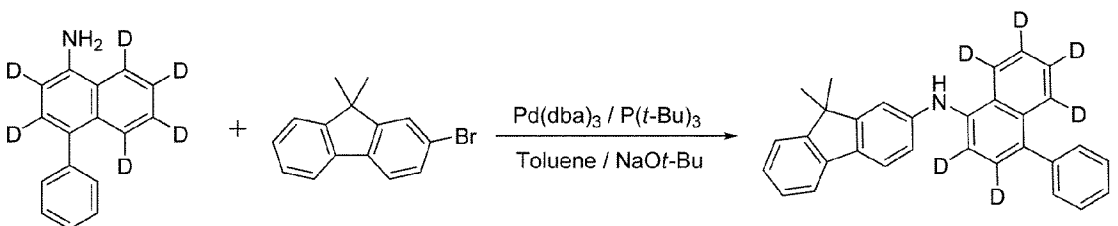


- [543] 2-bromo-9,9-dimethyl-9H-fluorene (65.56g, 240 mmol), biphenyl-d9-4-amine
(35.66g, 200 mmol), Pd₂(dba)₃ (5.5 g, 6 mmol), PPh₃ (5.25 g, 20 mmol), NaOt-Bu
(57.7 g, 600mmol), toluene (1930 mL) 을 상기 Sub-1b-1의 실험방법과 동일하게
하여 생성물을 48.91 g (66 %) 얻었다.

[544]

[545] **Sub 3b-12의 합성**

[546]



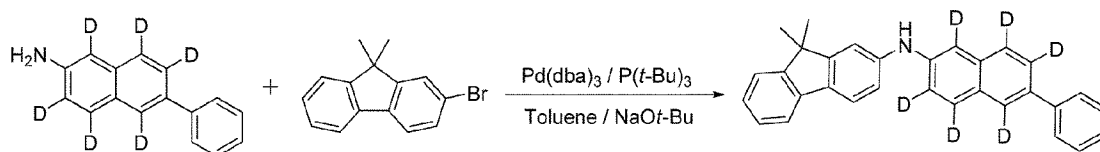
- [547] 1-amino-4-phenyl-naphthalene-d6 (45.06g, 200 mmol),
2-bromo-9,9-dimethyl-9H-fluorene (65.56g, 240 mmol), Pd₂(dba)₃ (5.5 g, 6 mmol),
PPh₃ (5.25 g, 20 mmol), NaOt-Bu (57.7 g, 600mmol), toluene (1930 mL) 을 상기

Sub-1b-1의 실험방법과 동일하게 하여 생성물을 53.45 g (64 %) 얻었다.

[548]

[549] **Sub 3b-13의 합성**

[550]



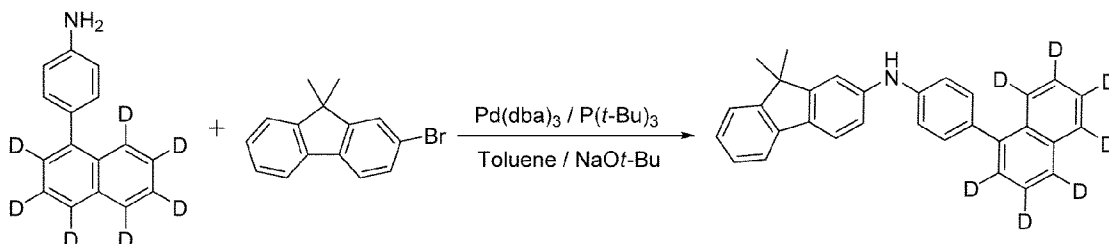
[551]

2-amino-6-phenyl-naphthalene-d6 (45.06g, 200 mmol),
2-bromo-9,9-dimethyl-9H-fluorene (65.56g, 240 mmol), Pd₂(dba)₃ (5.5 g, 6 mmol),
PPh₃ (5.25 g, 20 mmol), NaOt-Bu (57.7 g, 600mmol), toluene (1930 mL) 을 상기
Sub-1b-1의 실험방법과 동일하게 하여 생성물을 54.28 g (65 %) 얻었다.

[552]

[553] **Sub 3b-14의 합성**

[554]



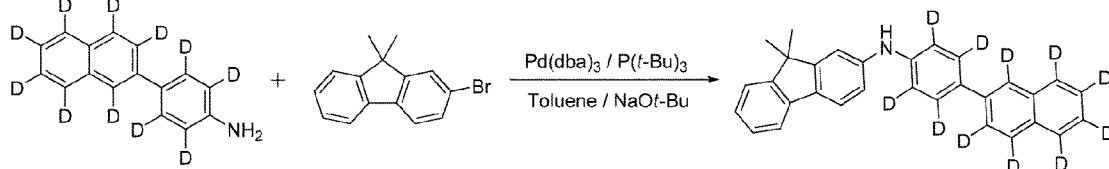
[555]

4-(naphthalen-1-yl)-d7-aniline (45.26 g, 200 mmol),
2-bromo-9,9-dimethyl-9H-fluorene (65.56g, 240 mmol), Pd₂(dba)₃ (5.5 g, 6 mmol),
PPh₃ (5.25 g, 20 mmol), NaOt-Bu (57.7 g, 600mmol), toluene (1930 mL) 을 상기
Sub-1b-1의 실험방법과 동일하게 하여 생성물을 51.90 g (62 %) 얻었다.

[556]

[557] **Sub 3b-15의 합성**

[558]



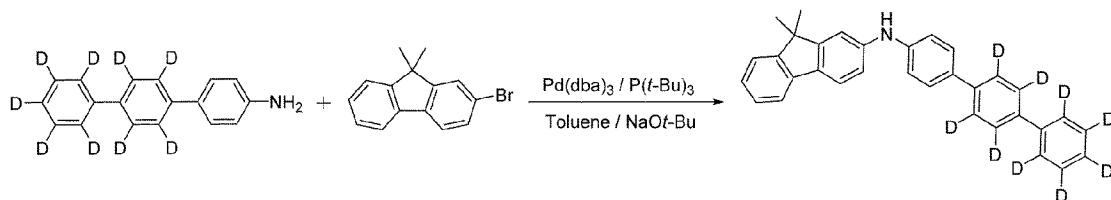
[559]

2-bromo-9,9-dimethyl-9H-fluorene (65.56g, 240 mmol),
4-(naphthalen-2-yl)-d11-aniline (46.07 g, 200 mmol), Pd₂(dba)₃ (5.5 g, 6 mmol), PPh₃
(5.25 g, 20 mmol), NaOt-Bu (57.7 g, 600mmol), toluene (1930 mL) 을 상기
Sub-1b-1의 실험방법과 동일하게 하여 생성물을 53.25 g (63 %) 얻었다.

[560]

[561] **Sub 3b-16의 합성**

[562]

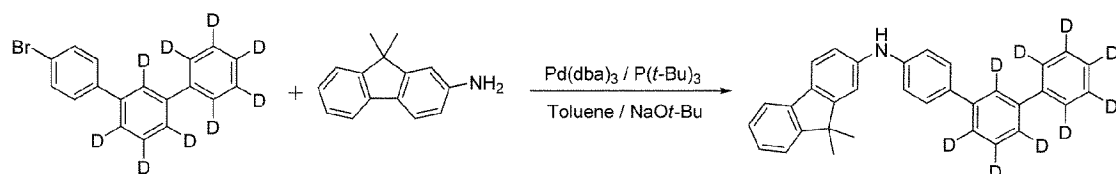


- [563] 4-(biphenyl-4-yl-d9)-aniline (50.87 g, 200 mmol),
2-bromo-9,9-dimethyl-9H-fluorene (65.56g, 240 mmol), Pd₂(dba)₃ (5.5 g, 6 mmol),
PPh₃ (5.25 g, 20 mmol), NaOt-Bu (57.7 g, 600mmol), toluene (1930 mL) 을 상기
Sub-1b-1의 실험방법과 동일하게 하여 생성물을 56.28 g (63 %) 얻었다.

[564]

[565] **Sub 3b-17의 합성**

[566]

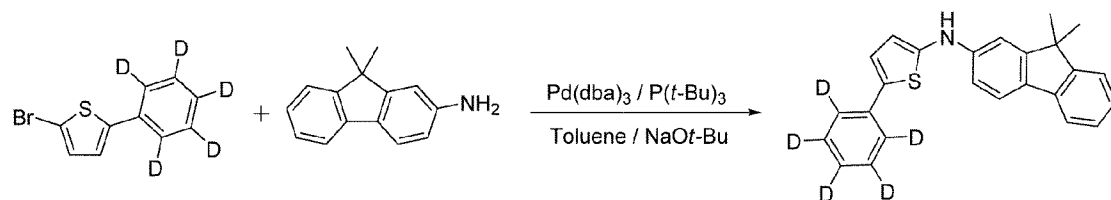


- [567] 9,9-dimethyl-9H-fluoren-2-amine (41.86 g, 200 mmol),
4'-bromo-3-phenyl-d5-biphenyl-d4 (76.38 g, 240 mmol), Pd₂(dba)₃ (5.5 g, 6 mmol),
PPh₃ (5.25 g, 20 mmol), NaOt-Bu (57.7 g, 600mmol), toluene (1930 mL) 을 상기
Sub-1b-1의 실험방법과 동일하게 하여 생성물을 54.49 g (61 %) 얻었다.

[568]

[569] **Sub 3b-18의 합성**

[570]

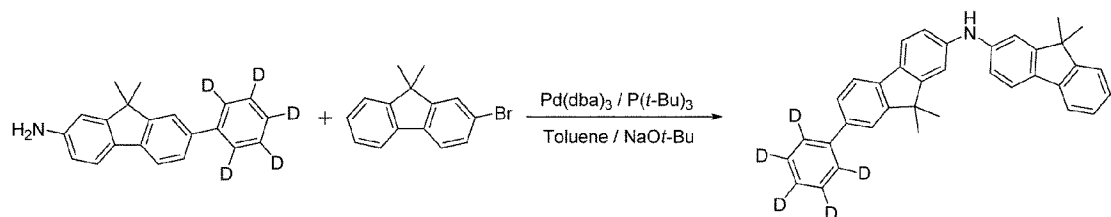


- [571] 9,9-dimethyl-9H-fluoren-2-amine (41.86 g, 200 mmol),
2-bromo-5-phenyl-d5-thiophene (57.39 g, 240 mmol), Pd₂(dba)₃ (5.5 g, 6 mmol), PPh₃
(5.25 g, 20 mmol), NaOt-Bu (57.7 g, 600mmol), toluene (1930 mL) 을 상기
Sub-1b-1의 실험방법과 동일하게 하여 생성물을 47.69 g (64 %) 얻었다.

[572]

[573] **Sub 3b-19의 합성**

[574]

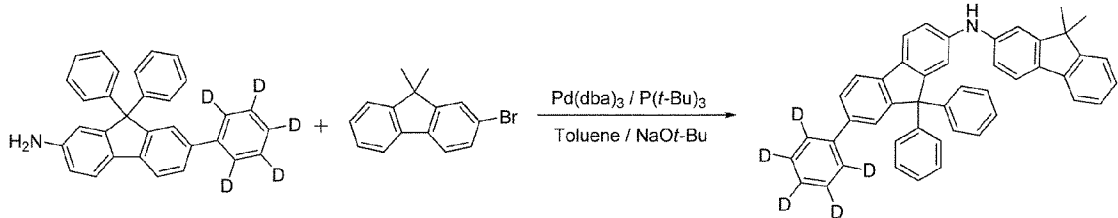


[575] 9,9-dimethyl-7-phenyl-d5-9H-fluoren-2-amine (58.08g, 200 mmol), 2-bromo-9,9-dimethyl-9H-fluorene (65.56g, 240 mmol), Pd₂(dba)₃ (5.5 g, 6 mmol), PPh₃ (5.25 g, 20 mmol), NaO*t*-Bu (57.7 g, 600mmol), toluene (1930 mL) 을 상기 Sub-1b-1의 실험방법과 동일하게 하여 생성물을 64.68 g (67 %) 얻었다.

[576]

[577] **Sub 3b-20의 합성**

[578]

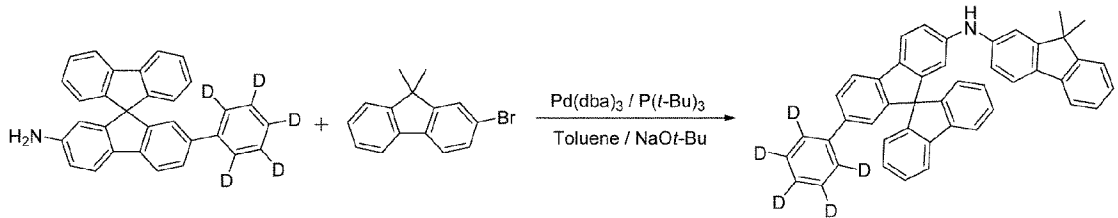


[579] 2-bromo-9,9-dimethyl-9H-fluorene (65.56g, 240 mmol), 7-(phenyl-d5)-9,9-diphenyl-9H-fluoren-2-amine (82.91g, 200 mmol), Pd₂(dba)₃ (5.5 g, 6 mmol), PPh₃ (5.25 g, 20 mmol), NaO*t*-Bu (57.7 g, 600mmol), toluene (1930 mL) 을 상기 Sub-1b-1의 실험방법과 동일하게 하여 생성물을 78.88 g (65 %) 얻었다.

[580]

[581] **Sub 3b-21의 합성**

[582]



[583] 2-bromo-9,9-dimethyl-9H-fluorene (65.56g, 240 mmol), 7-(phenyl-d5)-9,9'-spirobi[fluoren]-2-amine (82.51g, 200 mmol), Pd₂(dba)₃ (5.5 g, 6 mmol), PPh₃ (5.25 g, 20 mmol), NaO*t*-Bu (57.7 g, 600mmol), toluene (1930 mL) 을 상기 Sub-1b-1의 실험방법과 동일하게 하여 생성물을 72.57 g (60 %) 얻었다.

[584]

[585] 표 6

[Table 6]

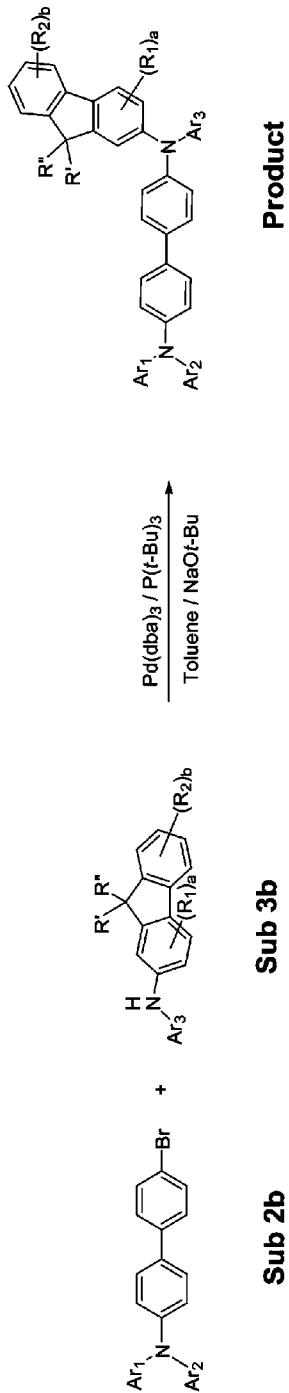
화합물	FD-MS	화합물	FD-MS
Sub 3b-1	m/z=285.15 (C ₂₁ H ₁₉ N=285.38)	Sub 3b-2	m/z=335.17 (C ₂₅ H ₂₁ N=335.44)
Sub 3b-3	m/z=335.17 (C ₂₅ H ₂₁ N=335.44)	Sub 3b-4	m/z=361.18 (C ₂₇ H ₂₃ N=361.48)
Sub 3b-5	m/z=367.14 (C ₂₅ H ₂₁ NS=367.51)	Sub 3b-6	m/z=315.16 (C ₂₂ H ₂₁ NO=315.41)
Sub 3b-7	m/z=375.16 (C ₂₇ H ₂₁ NO=375.46)	Sub 3b-8	m/z=290.18 (C ₂₁ H ₁₄ D ₅ N=290.41)
Sub 3b-9	m/z=366.21 (C ₂₇ H ₁₈ D ₅ N=366.51)	Sub 3b-10	m/z=342.21 (C ₂₅ H ₁₄ D ₇ N=342.48)
Sub 3b-11	m/z=370.24 (C ₂₇ H ₁₄ D ₉ N=370.53)	Sub 3b-12	m/z=417.24 (C ₃₁ H ₁₉ D ₆ N=417.57)
Sub 3b-13	m/z=417.24 (C ₃₁ H ₁₉ D ₆ N=417.57)	Sub 3b-14	m/z=418.24 (C ₃₁ H ₁₈ D ₇ N=418.58)
Sub 3b-15	m/z=422.27 (C ₃₁ H ₁₄ D ₁₁ N=422.60)	Sub 3b-16	m/z=446.27 (C ₃₃ H ₁₈ D ₉ N=446.63)
Sub 3b-17	m/z=446.27 (C ₃₃ H ₁₈ D ₉ N=446.63)	Sub 3b-18	m/z=372.17 (C ₂₅ H ₁₆ D ₅ NS=372.54)
Sub 3b-19	m/z=482.28 (C ₃₆ H ₂₆ D ₅ N=482.67)	Sub 3b-20	m/z=606.31 (C ₄₆ H ₃₀ D ₅ N=606.81)
Sub 3b-21	m/z=604.29 (C ₄₆ H ₂₈ D ₅ N=604.79)		

[586]

[587]

최종 생성물(Final Product) 합성법 예시

[588]



[589] 등근바닥플라스크에 Sub2b의 화합물 (1.2당량), Sub3b의 화합물 (1당량), Pd₂(dba)₃ (0.06~0.1 mmol), PPh₃ (0.2당량), NaOt-Bu (6당량), toluene (10.5 mL / 1 mmol)을 넣은 후에 100 °C에서 반응을 진행한다. 반응이 완료되면 에테르와 물로 추출한 후 유기층을 MgSO₄로 건조하고 농축 한 후 생성된 유기물을 실리카겔 칼럼으로 정제 및 재결정하여 생성물을 얻었다.

[590]

[591] 표 7

[Table 7]

화합물	FD-MS	화합물	FD-MS
P2-1	m/z=609.32 (C ₄₈ H ₃₁ D ₅ N ₂ =609.81)	P2-2	m/z=659.33 (C ₄₉ H ₃₃ D ₅ N ₂ =659.33)
P2-3	m/z=659.33 (C ₄₉ H ₃₃ D ₅ N ₂ =659.87)	P2-4	m/z=685.35 (C ₅₁ H ₃₅ D ₅ N ₂ =685.91)
P2-5	m/z=691.31 (C ₄₉ H ₃₃ D ₅ N ₂ S=691.94)	P2-6	m/z=639.33 (C ₄₆ H ₃₃ D ₅ N ₂ O=639.84)
P2-7	m/z=699.33 (C ₅₁ H ₃₃ D ₅ N ₂ O=699.89)	P2-8	m/z=659.33 (C ₄₉ H ₃₃ D ₅ N ₂ =659.87)
P2-9	m/z=659.33 (C ₄₉ H ₃₃ D ₅ N ₂ =659.87)	P2-10	m/z=685.35 (C ₅₁ H ₃₅ D ₅ N ₂ =685.91)
P2-11	m/z=691.31 (C ₄₉ H ₃₃ D ₅ N ₂ S=691.94)	P2-12	m/z=639.33 (C ₄₆ H ₃₃ D ₅ N ₂ O=639.84)
P2-13	m/z=699.33 (C ₅₁ H ₃₃ D ₅ N ₂ O=699.89)	P2-14	m/z=661.35 (C ₄₉ H ₃₁ D ₇ N ₂ =661.88)
P2-15	m/z=661.35 (C ₄₉ H ₃₁ D ₇ N ₂ =661.88)	P2-16	m/z=689.38 (C ₅₁ H ₃₁ D ₉ N ₂ =689.93)
P2-17	m/z=736.37 (C ₅₅ H ₃₆ D ₆ N ₂ =736.97)	P2-18	m/z=736.37 (C ₅₅ H ₃₆ D ₆ N ₂ =736.97)
P2-19	m/z=737.38 (C ₅₅ H ₃₅ D ₇ N ₂ =737.98)	P2-20	m/z=741.40 (C ₅₅ H ₃₁ D ₁₁ N ₂ =742.00)
P2-21	m/z=765.41 (C ₅₇ H ₃₅ D ₉ N ₂ =766.03)	P2-22	m/z=765.41 (C ₅₇ H ₃₅ D ₉ N ₂ =766.03)
P2-23	m/z=691.31 (C ₄₉ H ₃₃ D ₅ N ₂ S=691.94)	P2-24	m/z=773.38 (C ₅₉ H ₃₉ D ₅ N ₂ =774.01)
P2-25	m/z=925.44 (C ₇₀ H ₄₇ D ₅ N ₂ =926.21)	P2-26	m/z=923.43 (C ₇₀ H ₄₅ D ₅ N ₂ =924.19)
P2-27	m/z=609.32 (C ₄₈ H ₃₁ D ₅ N ₂ =609.81)	P2-28	m/z=685.35 (C ₅₁ H ₃₅ D ₅ N ₂ =685.91)
P2-29	m/z=661.35 (C ₄₉ H ₃₁ D ₇ N ₂ =661.88)	P2-30	m/z=689.38 (C ₅₁ H ₃₁ D ₉ N ₂ =689.93)
P2-31	m/z=736.37 (C ₅₅ H ₃₆ D ₆ N ₂ =736.97)	P2-32	m/z=736.37 (C ₅₅ H ₃₆ D ₆ N ₂ =736.97)
P2-33	m/z=737.38 (C ₅₅ H ₃₅ D ₇ N ₂ =737.98)	P2-34	m/z=741.40 (C ₅₅ H ₃₁ D ₁₁ N ₂ =742.00)
P2-35	m/z=765.41 (C ₅₇ H ₃₅ D ₉ N ₂ =766.03)	P2-36	m/z=765.41 (C ₅₇ H ₃₅ D ₉ N ₂ =766.03)
P2-37	m/z=695.34 (C ₄₉ H ₃₇ D ₅ N ₂ S=695.97)	P2-38	m/z=801.41 (C ₆₀ H ₄₃ D ₅ N ₂ =802.07)
P2-39	m/z=925.44 (C ₇₀ H ₄₇ D ₅ N ₂ =926.21)	P2-40	m/z=923.43 (C ₇₀ H ₄₅ D ₅ N ₂ =924.19)
P2-41	m/z=733.35 (C ₅₅ H ₃₅ D ₅ N ₂ =733.95)	P2-42	m/z=783.37 (C ₅₉ H ₃₇ D ₅ N ₂ =784.01)
P2-43	m/z=783.37 (C ₅₉ H ₃₇ D ₅ N ₂ =784.01)	P2-44	m/z=809.38 (C ₆₁ H ₃₉ D ₅ N ₂ =810.05)
P2-45	m/z=815.34 (C ₅₉ H ₃₇ D ₅ N ₂ S=816.07)	P2-46	m/z=763.36 (C ₅₆ H ₃₇ D ₅ N ₂ O=763.98)
P2-47	m/z=823.36 (C ₆₁ H ₃₇ D ₅ N ₂ O=824.03)	P2-48	m/z=783.37 (C ₅₉ H ₃₇ D ₅ N ₂ =784.01)
P2-49	m/z=783.37 (C ₅₉ H ₃₇ D ₅ N ₂ =784.01)	P2-50	m/z=809.38 (C ₆₁ H ₃₉ D ₅ N ₂ =810.05)
P2-51	m/z=815.34 (C ₅₉ H ₃₇ D ₅ N ₂ S=816.07)	P2-52	m/z=763.36 (C ₅₆ H ₃₇ D ₅ N ₂ O=763.98)
P2-53	m/z=823.36 (C ₆₁ H ₃₇ D ₅ N ₂ O=824.03)	P2-54	m/z=785.38 (C ₅₉ H ₃₅ D ₇ N ₂ =786.02)
P2-55	m/z=785.38 (C ₅₉ H ₃₅ D ₇ N ₂ =786.02)	P2-56	m/z=813.41 (C ₆₁ H ₃₅ D ₉ N ₂ =814.07)
P2-57	m/z=860.40 (C ₆₅ H ₄₀ D ₆ N ₂ =861.11)	P2-58	m/z=860.40 (C ₆₅ H ₄₀ D ₆ N ₂ =861.11)
P2-59	m/z=861.41 (C ₆₅ H ₃₉ D ₇ N ₂ =862.12)	P2-60	m/z=865.44 (C ₆₅ H ₃₅ D ₁₁ N ₂ =866.14)
P2-61	m/z=889.44 (C ₆₇ H ₃₉ D ₉ N ₂ =890.17)	P2-62	m/z=889.44 (C ₆₇ H ₃₉ D ₉ N ₂ =890.17)
P2-63	m/z=815.34 (C ₅₉ H ₃₇ D ₅ N ₂ S=816.07)	P2-64	m/z=897.41 (C ₆₈ H ₄₃ D ₅ N ₂ =898.15)
P2-65	m/z=1049.48 (C ₈₀ H ₅₁ D ₅ N ₂ =1050.34)	P2-66	m/z=1047.46 (C ₈₀ H ₄₉ D ₅ N ₂ =1048.33)
P2-67	m/z=733.35 (C ₅₅ H ₃₅ D ₅ N ₂ =733.95)	P2-68	m/z=809.38 (C ₆₁ H ₃₉ D ₅ N ₂ =810.05)
P2-69	m/z=785.38 (C ₅₉ H ₃₅ D ₇ N ₂ =786.02)	P2-70	m/z=813.41 (C ₆₁ H ₃₅ D ₉ N ₂ =814.07)
P2-71	m/z=860.40 (C ₆₅ H ₄₀ D ₆ N ₂ =861.11)	P2-72	m/z=860.40 (C ₆₅ H ₄₀ D ₆ N ₂ =861.11)
P2-73	m/z=861.41 (C ₆₅ H ₃₉ D ₇ N ₂ =862.12)	P2-74	m/z=865.44 (C ₆₅ H ₃₅ D ₁₁ N ₂ =866.14)
P2-75	m/z=889.44 (C ₆₇ H ₃₉ D ₉ N ₂ =890.17)	P2-76	m/z=889.44 (C ₆₇ H ₃₉ D ₉ N ₂ =890.17)
P2-77	m/z=819.37 (C ₅₉ H ₄₁ D ₅ N ₂ S=820.11)	P2-78	m/z=925.44 (C ₇₀ H ₄₇ D ₅ N ₂ =926.21)
P2-79	m/z=1049.48 (C ₈₀ H ₅₁ D ₅ N ₂ =1050.34)	P2-80	m/z=1047.46 (C ₈₀ H ₄₉ D ₅ N ₂ =1048.33)
P2-81	m/z=731.33 (C ₅₅ H ₃₃ D ₅ N ₂ =731.93)	P2-82	m/z=781.35 (C ₅₉ H ₃₅ D ₅ N ₂ =781.99)

P2-83	m/z=781.35 (C ₅₉ H ₃₅ D ₅ N ₂ =781.99)	P2-84	m/z=807.37 (C ₆₁ H ₃₇ D ₅ N ₂ =808.03)
P2-85	m/z=813.32 (C ₅₉ H ₃₅ D ₅ N ₂ S=814.06)	P2-86	m/z=761.35 (C ₅₆ H ₃₅ D ₅ N ₂ O=761.96)
P2-87	m/z=821.35 (C ₆₁ H ₃₅ D ₅ N ₂ O=822.01)	P2-88	m/z=781.35 (C ₅₉ H ₃₅ D ₅ N ₂ =781.99)
P2-89	m/z=781.35 (C ₅₉ H ₃₅ D ₅ N ₂ =781.99)	P2-90	m/z=807.37 (C ₆₁ H ₃₇ D ₅ N ₂ =808.03)
P2-91	m/z=813.32 (C ₅₉ H ₃₅ D ₅ N ₂ S=814.06)	P2-92	m/z=761.35 (C ₅₆ H ₃₅ D ₅ N ₂ O=761.96)
P2-93	m/z=821.35 (C ₆₁ H ₃₅ D ₅ N ₂ O=822.01)	P2-94	m/z=783.36 (C ₅₉ H ₃₃ D ₇ N ₂ =784.01)
P2-95	m/z=783.36 (C ₅₉ H ₃₃ D ₇ N ₂ =784.01)	P2-96	m/z=811.39 (C ₆₁ H ₃₃ D ₉ N ₂ =812.06)
P2-97	m/z=858.39 (C ₆₅ H ₃₈ D ₆ N ₂ =859.10)	P2-98	m/z=858.39 (C ₆₅ H ₃₈ D ₆ N ₂ =859.10)
P2-99	m/z=859.39 (C ₆₅ H ₃₇ D ₇ N ₂ =860.10)	P2-100	m/z=863.42 (C ₆₅ H ₃₃ D ₁₁ N ₂ =864.13)
P2-101	m/z=887.42 (C ₆₇ H ₃₇ D ₉ N ₂ =888.15)	P2-102	m/z=887.42 (C ₆₇ H ₃₇ D ₉ N ₂ =888.15)
P2-103	m/z=813.32 (C ₅₉ H ₃₅ D ₅ N ₂ S=814.06)	P2-104	m/z=895.40 (C ₆₈ H ₄₁ D ₅ N ₂ =896.14)
P2-105	m/z=1047.46 (C ₈₀ H ₄₉ D ₅ N ₂ =1048.33)	P2-106	m/z=1045.44 (C ₈₀ H ₄₇ D ₅ N ₂ =1046.31)
P2-107	m/z=731.33 (C ₅₅ H ₃₃ D ₅ N ₂ =731.93)	P2-108	m/z=807.37 (C ₆₁ H ₃₇ D ₅ N ₂ =808.03)
P2-109	m/z=783.36 (C ₅₉ H ₃₃ D ₇ N ₂ =784.01)	P2-110	m/z=811.39 (C ₆₁ H ₃₃ D ₉ N ₂ =812.06)
P2-111	m/z=858.39 (C ₆₅ H ₃₃ D ₆ N ₂ =859.10)	P2-112	m/z=858.39 (C ₆₅ H ₃₈ D ₆ N ₂ =859.10)
P2-113	m/z=859.39 (C ₆₅ H ₃₇ D ₇ N ₂ =860.10)	P2-114	m/z=863.42 (C ₆₅ H ₃₃ D ₁₁ N ₂ =864.13)
P2-115	m/z=887.42 (C ₆₇ H ₃₇ D ₉ N ₂ =888.15)	P2-116	m/z=887.42 (C ₆₇ H ₃₇ D ₉ N ₂ =888.15)
P2-117	m/z=817.35 (C ₅₉ H ₃₉ D ₅ N ₂ S=818.09)	P2-118	m/z=923.43 (C ₇₀ H ₄₅ D ₅ N ₂ =924.19)
P2-119	m/z=1047.46 (C ₈₀ H ₄₉ D ₅ N ₂ =1048.33)	P2-120	m/z=1045.44 (C ₈₀ H ₄₇ D ₅ N ₂ =1046.31)

[593]

[594] 한편, 화학식 1 또는 화학식 2로 표시되는 화합물들의 각 치환기들은 광범위한 관계로, 대표적인 화합물들의 합성예를 예시적으로 설명하였으나, 합성예로 예시적으로 설명하지 않은 화학식 1 또는 화학식 2로 표시되는 화합물들도 본 명세서의 일부를 구성할 수 있다.

[595] 또한, 상기와 같은 구조의 코어 구조에 다양한 치환기를 도입함으로써 도입된 치환기의 고유 특성을 갖는 화합물을 합성할 수 있다. 예컨대, 유기발광소자를 비롯한 유기전기소자의 제조시 사용되는 정공주입층 물질, 정공수송층 물질, 발광층 물질, 및 전자 수송층 물질에 사용되는 치환기를 상기 구조에 도입함으로써 각 유기물층에서 요구하는 조건들을 충족시키는 물질을 제조할 수 있다.

[596] 본 발명에 따른 화합물은 치환기의 종류 및 성질에 따라 유기전기발광소자에서 다양한 용도로 사용될 수 있다.

[597] 본 발명의 화합물은 코어와 치환체에 의해 조절이 자유롭기 때문에 인광 또는 형광 발광층의 호스트 이외의 다양한 층으로 작용할 수 있다.

[598] 본 발명의 유기전기소자는 전술한 화합물들을 이용하여 한층 이상의 유기물층을 형성하는 것을 제외하고는, 통상의 유기전기소자의 제조방법 및 재료에 의하여 제조될 수 있다.

[599] 본 발명의 화합물들을 유기전기발광소자의 다른 유기물층들, 예를 들어 발광 보조층, 전자주입층, 전자수송층, 및 정공주입층에 사용되더라도 동일한 효과를 얻을 수 있는 것은 자명하다.

- [600] 한편 본 발명의 화합물은 용액 공정(soluble process)에 사용될 수 있다. 다시 말해 상기 화합물을 용액 공정(soluble process)에 의해 후술할 유기전기소자의 유기물층을 형성할 수 있다. 즉 상기 화합물을 유기물층으로 사용할 때 유기물층은 다양한 고분자 소재를 사용하여 증착법이 아닌 용액 공정 또는 솔벤트 프로세스(solvent process), 예컨대 스핀 코팅, 딥 코팅, 닥터 블레이딩, 스크린 프린팅, 잉크젯 프린팅 또는 열 전사법 등의 방법에 의하여 더 적은 수의 층으로 제조될 수 있다.
- [601] 본 발명의 화합물들이 사용될 수 있는 유기전기소자는 예를 들어, 유기전기발광소자(OLED), 유기태양전지, 유기감광체(OPC) 드럼, 유기트랜지스트(유기 TFT) 등이 있다.
- [602] 본 발명의 화합물들이 적용될 수 있는 유기전기소자 중 일례로 유기전기발광소자(OLED)에 대하여 설명하나, 본 발명은 이에 제한되지 않고 다양한 유기전기소자에 위에서 설명한 화합물들이 적용될 수 있다.
- [603] 본 발명의 다른 실시예는 제1 전극, 제2 전극 및 이들 전극 사이에 배치된 유기물층을 포함하는 유기전기소자에 있어서, 상기 유기물층 중 1층 이상이 본 발명의 화합물들을 포함하는 유기전기발광소자를 제공한다.
- [604] 도 1 내지 도 6은 본 발명의 화합물을 적용할 수 있는 유기전기발광소자의 예를 도시한 것이다.
- [605] 본 발명의 다른 실시예에 따른 유기전기발광소자는, 정공주입층, 정공수송층, 발광층, 전자수송층 및 전자주입층을 포함하는 유기물층 중 1층 이상을 본 발명의 화합물을 포함하도록 형성하는 것을 제외하고는, 당 기술 분야에 통상의 제조 방법 및 재료를 이용하여 당 기술 분야에 알려져 있는 구조로 제조될 수 있다.
- [606] 본 발명에 다른 실시예에 따른 유기전기발광소자의 구조는 도 1 내지 6에 예시되어 있으나, 이들 구조에만 한정된 것은 아니다. 이때, 도면번호 101은 기판, 102는 양극, 103은 정공주입층(HIL), 104는 정공수송층(HTL), 105는 발광층(EML), 106은 전자주입층(EIL), 107은 전자수송층(ETL), 108은 음극을 나타낸다.
- [607] 미도시하였지만, 이러한 유기전기발광소자는 정공의 이동을 저지하는 정공저지층(HBL), 전자의 이동을 저지하는 전자저지층(EBL), 발광을 돕거나 보조하는 발광보조층 및 보호층이 더 위치할 수도 있다. 보호층의 경우 최상위층에서 유기물층을 보호하거나 음극을 보호하도록 형성될 수 있다.
- [608] 이때, 본 발명의 화합물은 정공주입층, 정공수송층, 발광층 및 전자수송층을 포함하는 유기물층 중 하나 이상에 포함될 수 있다.
- [609] 구체적으로, 본 발명의 화합물은 정공주입층, 정공수송층, 발광층, 전자수송층, 전자주입층, 정공저지층, 전자저지층, 발광보조층 및 보호층 중 하나 이상을 대신하여 사용되거나 이들과 함께 층을 형성하여 사용될 수도 있다. 물론 유기물층 중 한층에만 사용되는 것이 아니라 두층 이상에 사용될 수 있다.

- [610] 특히, 본 발명의 화합물에 따라서 정공주입 재료, 정공수송 재료, 전자주입 재료, 전자수송 재료, 발광 재료 및 패시베이션(케핑) 재료로 사용될 수 있고, 특히 단독으로 발광물질 및 호스트/도판트에서 호스트 또는 도판트로 사용될 수 있으며, 정공 주입, 정공수송층으로 사용될 수 있다.
- [611] 예컨대, 본 발명의 다른 실시예에 따른 유기전기발광소자는 스퍼터링(sputtering)이나 전자빔 증발(e-beam evaporation)과 같은 PVD(physical vapor deposition) 방법을 이용하여, 기판 상에 금속 또는 전도성을 가지는 금속 산화물 또는 이들의 합금을 증착시켜 양극을 형성하고, 그 위에 정공주입층, 정공수송층, 발광층, 전자수송층 및 전자주입층을 포함하는 유기물층을 형성한 후, 그 위에 음극으로 사용할 수 있는 물질을 증착시킴으로써 제조될 수 있다.
- [612] 이와 같은 방법 외에도, 기판 상에 음극 물질부터 유기물층, 양극 물질을 차례로 증착시켜 유기전기소자를 만들 수도 있다. 상기 유기물층은 정공주입층, 정공수송층, 발광층, 전자수송층 및 전자주입층 등을 포함하는 다층 구조일 수도 있으나, 이에 한정되지 않고 단층 구조일 수 있다.
- [613] 또한, 상기 유기물층은 다양한 고분자 소재를 사용하여 증착법이 아닌 용액 공정 또는 솔벤트 프로세스(solvent process), 예컨대 스핀 코팅, 딥 코팅, 닥터 블레이딩, 스크린 프린팅, 잉크젯 프린팅 또는 열 전사법 등의 방법에 의하여 더 적은 수의 층으로 제조할 수 있다.
- [614] 본 발명의 다른 실시예에 따른 유기전기발광소자는 위에서 설명한 화합물을 스핀 코팅(spin coating)이나 잉크젯(ink jet) 공정과 같은 용액 공정(soluble process)에 사용될 수도 있다.
- [615] 기판은 유기전기발광소자의 지지체이며, 실리콘 웨이퍼, 석영 또는 유리판, 금속판, 플라스틱 필름이나 시트 등이 사용될 수 있다.
- [616] 기판 위에는 양극이 위치된다. 이러한 양극은 그 위에 위치되는 정공주입층으로 정공을 주입한다. 양극 물질로는 통상 유기물층으로 정공주입이 원활할 수 있도록 일함수가 큰 물질일 수 있다. 본 발명에서 사용될 수 있는 양극 물질의 구체적인 예로는 바나듐, 크롬, 구리, 아연, 금과 같은 금속 또는 이들의 합금; 아연산화물, 인듐산화물, 인듐주석 산화물(ITO), 인듐아연산화물(IZO)과 같은 금속 산화물; ZnO:Al 또는 SnO₂:Sb와 같은 금속과 산화물의 조합; 폴리(3-메틸티오펜), 폴리[3,4-(에틸렌-1,2-디옥시)티오펜](PEDT), 폴리피롤 및 폴리아닐린과 같은 전도성 고분자 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.
- [617] 양극 위에는 정공주입층이 위치된다. 이러한 정공주입층의 물질로 요구되는 조건은 양극으로부터의 정공주입 효율이 높으며, 주입된 정공을 효율적으로 수송할 수 있어야 한다. 이를 위해서는 이온화 포텐셜이 작고 가시광선에 대한 투명성이 높으며, 정공에 대한 안정성이 우수해야 한다.
- [618] 정공주입 물질로는 낮은 전압에서 양극으로부터 정공을 잘 주입받을 수 있는 물질로서, 정공주입 물질의 HOMO(highest occupied molecular orbital)가 양극

물질의 일함수와 주변 유기물층의 HOMO 사이일 수 있다. 정공주입 물질의 구체적인 예로는 금속 포피린(porphyrine), 올리고티오펜, 아릴아민 계열의 유기물, 헥사니트릴 헥사아자트리페닐렌, 퀴나크리돈(quinacridone) 계열의 유기물, 페릴렌(perylene) 계열의 유기물, 안트라퀴논 및 폴리아닐린과 폴리티오펜 계열의 전도성 고분자 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.

- [619] 상기 정공주입층 위에는 정공수송층이 위치된다. 이러한 정공수송층은 정공주입층으로부터 정공을 전달받아 그 위에 위치되는 유기발광층으로 수송하는 역할을 하며, 높은 정공 이동도와 정공에 대한 안정성 및 전자를 막아주는 역할을 한다. 이러한 일반적 요구 이외에 차체 표시용으로 응용할 경우 소자에 대한 내열성이 요구되며, 유리 전이 온도(Tg)가 70 °C 이상의 값을 갖는 재료일 수 있다.
- [620] 이와 같은 조건을 만족하는 물질들로는 NPD(혹은 NPB라 함), 스피로-아릴아민계화합물, 페릴렌-아릴아민계화합물, 아자시클로헥타트리엔화합물, 비스(디페닐비닐페닐)안트라센, 실리콘게르마늄옥사이드화합물, 실리콘계아릴아민화합물 등이 될 수 있다.
- [621] 정공수송층 위에는 유기발광층이 위치된다. 이러한 유기발광층은 양극과 음극으로부터 각각 주입된 정공과 전자가 재결합하여 발광을 하는 층이며, 양자효율이 높은 물질로 이루어져 있다. 발광 물질로는 정공수송층과 전자수송층으로부터 정공과 전자를 각각 수송받아 결합시킴으로써 가시광선 영역의 빛을 낼 수 있는 물질로서, 형광이나 인광에 대한 양자효율이 좋은 물질일 수 있다.
- [622] 이와 같은 조건을 만족하는 물질 또는 화합물로는 녹색의 경우 Alq3가, 청색의 경우 Balq(8-hydroxyquinoline beryllium salt), DPVBi(4,4'-bis(2,2-diphenylethenyl)-1,1'-biphenyl) 계열, 스피로(Spiro) 물질, 스피로-DPVBi(Spiro-4,4'-bis(2,2-diphenylethenyl)-1,1'-biphenyl), LiPBO(2-(2-benzoxazolyl)-phenolithium salt), 비스(디페닐비닐페닐비닐)벤젠, 알루미늄-퀴놀린 금속착체, 이미다졸, 티아졸 및 옥사졸의 금속착체 등이 있으며, 청색 발광 효율을 높이기 위해 페릴렌, 및 BczVBi(3,3'[(1,1'-biphenyl)-4,4'-diyldi-2,1-ethenediyl]bis(9-ethyl)-9H-carbazole; DSA(distrylamine)류를 소량 도핑하여 사용할 수 있다. 적색의 경우는 녹색 발광 물질에 DCJTB([2-(1,1-dimethylethyl)-6-[2-(2,3,6,7-tetrahydro-1,1,7,7-tetramethyl-1H,5H-benzo(ij)quinolizin-9-yl)ethenyl]-4H-pyran-4-ylidene]-propanedinitrile)와 같은 물질을 소량 도핑하여 사용할 수 있다.
- [623] 잉크젯프린팅, 롤코팅, 스펀코팅 등의 공정을 사용하여 발광층을 형성할 경우에, 폴리페닐렌비닐렌(PPV) 계열의 고분자나 폴리 플루오렌(poly fluorene) 등의 고분자를 유기발광층에 사용할 수 있다.
- [624] 유기발광층 위에는 전자수송층이 위치된다. 이러한 전자수송층은 그 위에

위치되는 음극으로부터 전자주입 효율이 높고 주입된 전자를 효율적으로 수송할 수 있는 물질이 필요하다. 이를 위해서는 전자 친화력과 전자 이동속도가 크고 전자에 대한 안정성이 우수한 물질로 이루어져야 한다.

- [625] 이와 같은 조건을 충족시키는 전자수송 물질로는 구체적인 예로 8-히드록시퀴놀린의 Al 착물; Alq3를 포함한 착물; 유기 라디칼 화합물; 히드록시플라본-금속 착물 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.
- [626] 전자수송층 위에는 전자주입층이 적층된다. 전자주입층은 Balq, Alq3, Be(bq)2, Zn(BTZ)2, Zn(phq)2, PBD, spiro-PBD, TPBI, Tf-6P 등과 같은 금속착제화합물, imidazole ring 을 갖는 aromatic 화합물이나 boron 화합물 등을 포함하는 저분자 물질을 이용하여 제작할 수 있다. 이때, 전자주입층은 100Å ~ 300Å의 두께 범위에서 형성될 수 있다.
- [627] 전자주입층 위에는 음극이 위치된다. 이러한 음극은 전자를 주입하는 역할을 한다. 음극으로 사용하는 재료는 양극에 사용된 재료를 이용하는 것이 가능하며, 효율적인 전자주입을 위해서는 일 함수가 낮은 금속일 수 있다. 특히 주석, 마그네슘, 인듐, 칼슘, 나트륨, 리튬, 알루미늄, 은 등의 적당한 금속, 또는 그들의 적절한 합금이 사용될 수 있다. 또한 100 μm 이하 두께의 리튬플루오라이드와 알루미늄, 산화리튬과 알루미늄, 스트론튬산화물과 알루미늄 등의 2 층 구조의 전극도 사용될 수 있다.
- [628] 전술하였듯이, 본 발명의 화합물에 따라서 적색, 녹색, 청색, 흰색 등의 모든 칼라의 형광과 인광소자에 적합한 정공주입 재료, 정공수송 재료, 발광 재료, 전자수송 재료 및 전자주입 재료로 사용할 수 있으며, 다양한 색의 호스트 또는 도펀트 물질로 사용될 수 있다.
- [629] 본 발명에 따른 유기전기발광소자는 사용되는 재료에 따라 전면 발광형, 후면 발광형 또는 양면 발광형일 수 있다.
- [630] 한편 본 발명은, 위에서 설명한 유기전기소자를 포함하는 디스플레이장치와, 이 디스플레이장치를 구동하는 제어부를 포함하는 단말을 포함한다. 이 단말은 현재 또는 장래의 유무선 통신단말을 의미한다. 이상에서 전술한 본 발명에 따른 단말은 휴대폰 등의 이동 통신 단말기일 수 있으며, PDA, 전자사전, PMP, 리모콘, 네비게이션, 게임기, 각종 TV, 각종 컴퓨터 등 모든 단말을 포함한다.

[631]

[632] 유기전기소자의 제조 평가

- [633] 합성을 통해 얻은 본 발명의 여러 화합물을 각각 발광층의 발광 호스트 물질이나 정공 수송층으로 사용하여 통상적인 방법에 따라 유기전기발광소자를 제작하였다. 먼저, 유기 기판에 형성된 ITO층(양극)위에 우선 정공 주입층으로서 2-TNATA 막을 진공증착하여 10nm 두께로 형성하였다. 이어서 본 발명의 화합물(화학식1, 화학식2의 화합물)을 20nm 두께로 진공 증착하여 정공 수송층을 형성하였다. 이후, BD-052X(Idemitsu사)를 발광 도펀트로 사용하고 호스트 물질은 9, 10-다이-(나프탈렌-2-안트라센)=ANDI을 사용하였으며, 도핑

농도는 4%로 고정하여 비교 실험을 진행 하였다. 이어서 전자주입층으로 트리스(8-퀴놀리놀)알루미늄을 40 nm의 두께로 성막하였다. 이후, 할로겐화 알킬리 금속인 LiF를 0.2 nm의 두께로 증착하고, 이어서 Al을 150 nm의 두께로 증착하여 이 Al/LiF를 음극으로 사용하여 유기전기발광소자를 제조하였다.

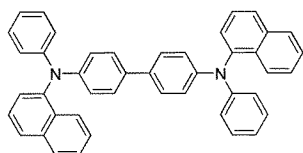
[634]

[635] 비교예

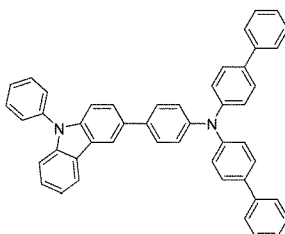
[636] 상기와 같은 방법으로 유기전기소자를 제작하되, 정공수송층 물질로 하기 화합물을 사용하였다.

[637]

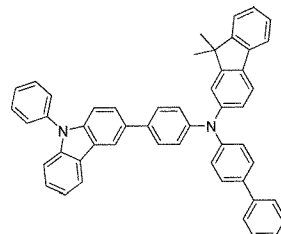
비교예 1 : NPB



비교예 2



비교예 3



[638]

[639] 한편, 상기와 같은 방법에 의해 제조된 본 발명의 유기전기발광소자 및 비교예의 유기전기발광소자에 순바이어스 직류전압을 가하여 포토리서치(photosearch)사의 PR-650으로 전기발광(EL) 특성을 측정하였다. 300cd/m² 기준 휘도에서 맥사이언스사에서 제조된 수명 측정 장비를 통해 T90 수명을 측정하였는데, 그 결과는 하기 표와 같다.

[640] [표 8]

[641] 화학식 1의 화합물

[642]

	화합물	Voltage	Current Density	Brightness (cd/m ²)	Efficiency	Lifetime T(90)	CIE (x, y)
비교예(1)	비교예 (1)	6.6	7.5	300.0	4.0	57.4	(0.15, 0.15)
비교예(2)	비교예 (2)	5.8	5.7	300.0	5.3	93.7	(0.15, 0.15)
비교예(3)	비교예 (3)	5.6	6.0	300.0	5.0	85.9	(0.15, 0.14)
실시예(1)	화합물(P-1)	5.4	7.5	300.0	4.0	88.9	(0.15, 0.14)
실시예(2)	화합물(P-2)	5.1	7.5	300.0	4.0	85.1	(0.15, 0.14)
실시예(3)	화합물(P-3)	5.6	5.7	300.0	5.3	90.6	(0.14, 0.14)
실시예(4)	화합물(P-4)	5.3	6.6	300.0	4.5	95.0	(0.15, 0.14)
실시예(5)	화합물(P-5)	5.6	6.0	300.0	5.0	87.7	(0.14, 0.14)
실시예(6)	화합물(P-6)	5.3	6.1	300.0	4.9	86.6	(0.15, 0.15)
실시예(7)	화합물(P-7)	5.5	5.8	300.0	5.2	99.6	(0.15, 0.13)
실시예(8)	화합물(P-8)	5.5	7.6	300.0	3.9	89.8	(0.15, 0.14)
실시예(9)	화합물(P-9)	5.4	6.8	300.0	4.4	90.4	(0.15, 0.16)
실시예(10)	화합물(P-10)	5.6	6.5	300.0	4.6	96.9	(0.15, 0.14)
실시예(11)	화합물(P-11)	5.6	7.5	300.0	4.0	99.5	(0.14, 0.14)
실시예(12)	화합물(P-12)	5.2	6.6	300.0	4.5	93.5	(0.14, 0.14)
실시예(13)	화합물(P-13)	5.8	6.5	300.0	4.6	88.9	(0.15, 0.13)
실시예(14)	화합물(P-14)	5.6	6.6	300.0	4.6	95.1	(0.15, 0.15)
실시예(15)	화합물(P-15)	5.2	6.5	300.0	4.6	96.0	(0.15, 0.16)
실시예(16)	화합물(P-16)	5.9	6.8	300.0	4.4	86.7	(0.15, 0.14)
실시예(17)	화합물(P-17)	5.2	6.4	300.0	4.7	98.5	(0.15, 0.14)
실시예(18)	화합물(P-18)	5.6	6.0	300.0	5.0	85.9	(0.15, 0.15)
실시예(19)	화합물(P-19)	5.3	6.1	300.0	4.9	98.4	(0.15, 0.14)
실시예(20)	화합물(P-20)	5.5	7.1	300.0	4.2	98.9	(0.15, 0.14)
실시예(21)	화합물(P-21)	5.7	6.8	300.0	4.4	96.1	(0.14, 0.14)
실시예(22)	화합물(P-22)	5.0	6.2	300.0	4.8	87.1	(0.15, 0.14)
실시예(23)	화합물(P-23)	5.2	5.8	300.0	5.2	93.3	(0.15, 0.13)
실시예(24)	화합물(P-24)	5.1	7.0	300.0	4.3	93.1	(0.15, 0.14)
실시예(25)	화합물(P-25)	5.8	5.7	300.0	5.3	93.7	(0.15, 0.14)
실시예(26)	화합물(P-26)	5.1	6.3	300.0	4.8	86.1	(0.15, 0.14)
실시예(27)	화합물(P-27)	5.6	6.4	300.0	4.7	89.4	(0.15, 0.13)
실시예(28)	화합물(P-28)	5.0	7.6	300.0	4.0	95.6	(0.15, 0.13)
실시예(29)	화합물(P-29)	5.9	6.1	300.0	4.9	85.7	(0.15, 0.14)

[643]

실시예(30)	화합물(P-30)	5.3	7.0	300.0	4.3	85.0	(0.15, 0.15)
실시예(31)	화합물(P-31)	5.6	7.4	300.0	4.1	85.5	(0.15, 0.15)
실시예(32)	화합물(P-32)	5.7	5.8	300.0	5.2	92.3	(0.15, 0.14)
실시예(33)	화합물(P-33)	5.8	6.8	300.0	4.4	96.9	(0.15, 0.14)
실시예(34)	화합물(P-34)	5.3	5.8	300.0	5.2	87.9	(0.15, 0.16)
실시예(35)	화합물(P-35)	5.4	7.1	300.0	4.3	85.1	(0.14, 0.14)
실시예(36)	화합물(P-36)	5.7	6.1	300.0	5.0	85.5	(0.15, 0.13)
실시예(37)	화합물(P-37)	5.2	7.1	300.0	4.2	97.5	(0.15, 0.14)
실시예(38)	화합물(P-38)	5.7	6.3	300.0	4.7	89.4	(0.15, 0.14)
실시예(39)	화합물(P-39)	5.3	6.7	300.0	4.5	93.3	(0.15, 0.13)
실시예(40)	화합물(P-40)	5.1	7.3	300.0	4.1	96.3	(0.15, 0.14)
실시예(41)	화합물(P-41)	5.9	6.4	300.0	4.7	89.5	(0.15, 0.15)
실시예(42)	화합물(P-42)	5.8	6.7	300.0	4.5	91.6	(0.15, 0.13)
실시예(43)	화합물(P-43)	5.5	7.3	300.0	4.1	92.6	(0.15, 0.14)
실시예(44)	화합물(P-44)	5.1	5.7	300.0	5.2	90.6	(0.15, 0.13)
실시예(45)	화합물(P-45)	5.0	5.7	300.0	5.3	98.6	(0.15, 0.14)
실시예(46)	화합물(P-46)	5.3	5.5	300.0	5.5	85.1	(0.15, 0.14)
실시예(47)	화합물(P-47)	4.9	5.9	300.0	5.1	86.1	(0.15, 0.14)
실시예(48)	화합물(P-48)	5.2	5.7	300.0	5.3	89.3	(0.15, 0.14)
실시예(49)	화합물(P-49)	5.8	6.1	300.0	4.9	96.3	(0.14, 0.14)
실시예(50)	화합물(P-50)	5.3	7.7	300.0	3.9	92.8	(0.14, 0.14)
실시예(51)	화합물(P-51)	5.4	6.1	300.0	5.0	88.3	(0.15, 0.14)
실시예(52)	화합물(P-52)	5.2	7.5	300.0	4.0	97.7	(0.15, 0.13)
실시예(53)	화합물(P-53)	5.3	6.0	300.0	5.0	99.6	(0.15, 0.15)
실시예(54)	화합물(P-54)	5.4	6.3	300.0	4.8	93.6	(0.15, 0.13)
실시예(55)	화합물(P-55)	5.1	7.0	300.0	4.3	89.0	(0.15, 0.14)
실시예(56)	화합물(P-56)	5.3	7.4	300.0	4.0	96.6	(0.15, 0.14)
실시예(57)	화합물(P-57)	5.0	7.1	300.0	4.2	97.0	(0.14, 0.14)
실시예(58)	화합물(P-58)	5.2	6.1	300.0	4.9	89.0	(0.15, 0.13)
실시예(59)	화합물(P-59)	5.5	7.2	300.0	4.1	92.4	(0.15, 0.14)
실시예(60)	화합물(P-60)	5.3	6.8	300.0	4.4	85.2	(0.15, 0.14)
실시예(61)	화합물(P-61)	5.1	5.8	300.0	5.2	89.7	(0.14, 0.14)
실시예(62)	화합물(P-62)	5.2	6.4	300.0	4.7	97.9	(0.15, 0.16)
실시예(63)	화합물(P-63)	5.2	6.0	300.0	5.0	94.6	(0.15, 0.13)
실시예(64)	화합물(P-64)	5.1	5.9	300.0	5.1	90.1	(0.15, 0.14)
실시예(65)	화합물(P-65)	5.4	7.0	300.0	4.3	95.2	(0.15, 0.14)
실시예(66)	화합물(P-66)	5.7	6.2	300.0	4.9	86.5	(0.15, 0.14)
실시예(67)	화합물(P-67)	5.5	6.4	300.0	4.7	96.0	(0.15, 0.16)
실시예(68)	화합물(P-68)	5.7	6.1	300.0	4.9	93.8	(0.14, 0.14)
실시예(69)	화합물(P-69)	5.3	6.6	300.0	4.6	94.2	(0.15, 0.14)
실시예(70)	화합물(P-70)	4.6	5.3	300.0	5.6	102.2	(0.14, 0.14)
실시예(71)	화합물(P-71)	5.0	5.7	300.0	5.3	108.8	(0.15, 0.15)
실시예(72)	화합물(P-72)	4.9	5.2	300.0	5.7	105.9	(0.15, 0.13)
실시예(73)	화합물(P-73)	5.2	6.3	300.0	4.8	92.1	(0.15, 0.14)
실시예(74)	화합물(P-74)	5.8	7.5	300.0	4.0	88.9	(0.15, 0.13)

[644]

실시예(75)	화합물(P-75)	5.0	7.2	300.0	4.1	85.6	(0.15, 0.14)
실시예(76)	화합물(P-76)	5.2	7.4	300.0	4.0	86.4	(0.14, 0.14)
실시예(77)	화합물(P-77)	5.5	7.2	300.0	4.2	93.9	(0.14, 0.14)
실시예(78)	화합물(P-78)	5.2	6.7	300.0	4.5	94.2	(0.15, 0.15)
실시예(79)	화합물(P-79)	4.9	6.3	300.0	4.8	94.2	(0.15, 0.14)
실시예(80)	화합물(P-80)	5.2	7.2	300.0	4.2	98.0	(0.15, 0.14)
실시예(81)	화합물(P-81)	5.2	7.3	300.0	4.1	90.9	(0.14, 0.14)
실시예(82)	화합물(P-82)	5.3	6.3	300.0	4.7	96.1	(0.15, 0.13)
실시예(83)	화합물(P-83)	5.2	6.8	300.0	4.4	93.4	(0.15, 0.14)
실시예(84)	화합물(P-84)	5.8	5.8	300.0	5.2	95.8	(0.15, 0.14)
실시예(85)	화합물(P-85)	5.5	7.5	300.0	4.0	90.5	(0.15, 0.13)
실시예(86)	화합물(P-86)	5.5	6.4	300.0	4.7	85.3	(0.14, 0.14)
실시예(87)	화합물(P-87)	5.1	6.7	300.0	4.5	91.8	(0.15, 0.14)
실시예(88)	화합물(P-88)	5.5	6.9	300.0	4.4	96.5	(0.15, 0.14)
실시예(89)	화합물(P-89)	5.1	6.7	300.0	4.4	88.5	(0.14, 0.14)
실시예(90)	화합물(P-90)	5.5	6.7	300.0	4.5	90.8	(0.15, 0.13)
실시예(91)	화합물(P-91)	5.0	5.9	300.0	5.1	92.0	(0.15, 0.16)
실시예(92)	화합물(P-92)	5.8	7.4	300.0	4.1	95.5	(0.15, 0.14)
실시예(93)	화합물(P-93)	5.5	6.4	300.0	4.7	85.1	(0.15, 0.13)
실시예(94)	화합물(P-94)	5.1	6.2	300.0	4.8	91.2	(0.14, 0.14)
실시예(95)	화합물(P-95)	5.0	5.6	300.0	5.3	93.0	(0.15, 0.14)
실시예(96)	화합물(P-96)	5.0	6.7	300.0	4.5	89.3	(0.15, 0.13)
실시예(97)	화합물(P-97)	5.5	5.7	300.0	5.3	93.5	(0.14, 0.14)
실시예(98)	화합물(P-98)	5.6	7.6	300.0	3.9	93.6	(0.14, 0.14)
실시예(99)	화합물(P-99)	5.6	5.9	300.0	5.1	91.0	(0.15, 0.13)
실시예(100)	화합물(P-100)	5.7	7.1	300.0	4.2	99.2	(0.15, 0.14)
실시예(101)	화합물(P-101)	5.1	6.1	300.0	4.9	98.6	(0.14, 0.14)
실시예(102)	화합물(P-102)	5.4	6.8	300.0	4.4	87.7	(0.15, 0.13)
실시예(103)	화합물(P-103)	5.4	5.9	300.0	5.1	88.3	(0.14, 0.14)
실시예(104)	화합물(P-104)	5.3	6.1	300.0	4.9	86.6	(0.15, 0.14)
실시예(105)	화합물(P-105)	5.0	7.1	300.0	4.2	92.3	(0.14, 0.14)
실시예(106)	화합물(P-106)	5.5	7.5	300.0	4.0	88.9	(0.15, 0.14)
실시예(107)	화합물(P-107)	5.7	7.6	300.0	3.9	95.8	(0.15, 0.16)
실시예(108)	화합물(P-108)	5.3	7.4	300.0	4.1	90.8	(0.14, 0.14)
실시예(109)	화합물(P-109)	5.1	6.8	300.0	4.4	92.2	(0.14, 0.14)
실시예(110)	화합물(P-110)	5.3	7.2	300.0	4.2	89.8	(0.15, 0.14)
실시예(111)	화합물(P-111)	5.5	7.3	300.0	4.1	96.7	(0.15, 0.14)
실시예(112)	화합물(P-112)	5.3	7.5	300.0	4.0	96.4	(0.14, 0.14)
실시예(113)	화합물(P-113)	5.6	6.3	300.0	4.8	93.6	(0.15, 0.14)
실시예(114)	화합물(P-114)	5.2	5.9	300.0	5.1	95.1	(0.14, 0.14)
실시예(115)	화합물(P-115)	5.4	7.5	300.0	4.0	95.1	(0.15, 0.13)
실시예(116)	화합물(P-116)	5.1	5.9	300.0	5.1	87.6	(0.14, 0.14)
실시예(117)	화합물(P-117)	5.0	5.9	300.0	5.1	90.6	(0.15, 0.14)
실시예(118)	화합물(P-118)	5.1	5.5	300.0	5.5	85.8	(0.14, 0.14)
실시예(119)	화합물(P-119)	5.0	6.5	300.0	4.6	91.4	(0.15, 0.13)

실시예(120)	화합물(P-120)	5.2	5.7	300.0	5.3	92.6	(0.15, 0.14)
실시예(121)	화합물(P-121)	5.2	6.1	300.0	4.9	97.7	(0.15, 0.16)
실시예(122)	화합물(P-122)	5.1	6.9	300.0	4.4	89.9	(0.15, 0.13)
실시예(123)	화합물(P-123)	5.1	6.1	300.0	4.9	94.5	(0.15, 0.16)
실시예(124)	화합물(P-124)	5.6	6.5	300.0	4.6	88.9	(0.15, 0.14)
실시예(125)	화합물(P-125)	5.8	7.7	300.0	3.9	95.0	(0.15, 0.13)
실시예(126)	화합물(P-126)	5.2	6.9	300.0	4.4	95.2	(0.14, 0.14)
실시예(127)	화합물(P-127)	5.8	6.2	300.0	4.8	97.2	(0.15, 0.14)
실시예(128)	화합물(P-128)	5.7	7.4	300.0	4.1	91.6	(0.15, 0.16)
실시예(129)	화합물(P-129)	5.2	6.1	300.0	4.9	99.3	(0.15, 0.13)
실시예(130)	화합물(P-130)	5.6	7.7	300.0	3.9	91.8	(0.15, 0.14)
실시예(131)	화합물(P-131)	5.8	7.5	300.0	4.0	88.0	(0.15, 0.16)
실시예(132)	화합물(P-132)	5.0	6.8	300.0	4.4	93.6	(0.15, 0.14)

[646]

[647]

[648]

[649]

[표 9]
화학식 2의 화합물

실시예(133)	화합물(P2-1)	5.9	9.3	300.0	3.2	72.4	(0.15, 0.14)
실시예(134)	화합물(P2-2)	6.2	8.6	300.0	3.5	99.8	(0.15, 0.14)
실시예(135)	화합물(P2-3)	5.5	9.7	300.0	3.1	95.9	(0.14, 0.14)
실시예(136)	화합물(P2-4)	5.9	9.0	300.0	3.4	90.4	(0.15, 0.14)
실시예(137)	화합물(P2-5)	5.9	7.7	300.0	3.9	94.9	(0.14, 0.14)
실시예(138)	화합물(P2-6)	5.6	9.9	300.0	3.0	98.7	(0.15, 0.15)
실시예(139)	화합물(P2-7)	5.9	6.8	300.0	4.4	82.7	(0.15, 0.13)
실시예(140)	화합물(P2-8)	5.8	7.1	300.0	4.2	93.4	(0.15, 0.14)
실시예(141)	화합물(P2-9)	5.1	8.5	300.0	3.5	87.0	(0.15, 0.16)
실시예(142)	화합물(P2-10)	5.6	7.9	300.0	3.8	79.6	(0.15, 0.14)
실시예(143)	화합물(P2-11)	5.9	6.7	300.0	4.5	80.3	(0.14, 0.14)
실시예(144)	화합물(P2-12)	5.9	9.3	300.0	3.2	96.1	(0.14, 0.14)
실시예(145)	화합물(P2-13)	5.1	7.0	300.0	4.3	74.6	(0.15, 0.13)
실시예(146)	화합물(P2-14)	5.2	9.2	300.0	3.3	91.7	(0.15, 0.15)
실시예(147)	화합물(P2-15)	6.4	7.2	300.0	4.2	97.3	(0.15, 0.16)
실시예(148)	화합물(P2-16)	5.2	7.0	300.0	4.3	79.6	(0.15, 0.14)
실시예(149)	화합물(P2-17)	5.4	8.3	300.0	3.6	90.7	(0.15, 0.14)
실시예(150)	화합물(P2-18)	6.1	6.5	300.0	4.6	75.0	(0.15, 0.15)
실시예(151)	화합물(P2-19)	6.1	6.9	300.0	4.4	94.2	(0.15, 0.14)
실시예(152)	화합물(P2-20)	5.1	6.6	300.0	4.5	74.5	(0.15, 0.14)
실시예(153)	화합물(P2-21)	5.5	8.1	300.0	3.7	74.5	(0.14, 0.14)
실시예(154)	화합물(P2-22)	5.6	8.8	300.0	3.4	71.0	(0.15, 0.14)
실시예(155)	화합물(P2-23)	6.2	7.7	300.0	3.9	98.1	(0.15, 0.13)
실시예(156)	화합물(P2-24)	5.8	8.0	300.0	3.8	89.3	(0.15, 0.14)
실시예(157)	화합물(P2-25)	5.1	7.1	300.0	4.2	80.1	(0.15, 0.14)
실시예(158)	화합물(P2-26)	5.5	6.9	300.0	4.4	78.1	(0.15, 0.14)
실시예(159)	화합물(P2-27)	6.2	9.8	300.0	3.1	83.2	(0.15, 0.13)
실시예(160)	화합물(P2-28)	5.1	5.8	300.0	5.1	95.5	(0.15, 0.13)
실시예(161)	화합물(P2-29)	5.9	8.9	300.0	3.4	70.7	(0.15, 0.14)
실시예(162)	화합물(P2-30)	6.3	7.8	300.0	3.8	89.7	(0.15, 0.15)

[650]

실시예(163)	화합물(P2-31)	6.3	7.8	300.0	3.9	93.6	(0.15, 0.15)
실시예(164)	화합물(P2-32)	6.0	6.7	300.0	4.5	77.9	(0.15, 0.14)
실시예(165)	화합물(P2-33)	5.8	6.9	300.0	4.3	83.1	(0.15, 0.14)
실시예(166)	화합물(P2-34)	5.7	8.1	300.0	3.7	97.5	(0.15, 0.16)
실시예(167)	화합물(P2-35)	5.7	9.7	300.0	3.1	74.0	(0.14, 0.14)
실시예(168)	화합물(P2-36)	6.4	8.5	300.0	3.5	73.8	(0.15, 0.13)
실시예(169)	화합물(P2-37)	6.5	6.7	300.0	4.5	78.7	(0.15, 0.14)
실시예(170)	화합물(P2-38)	6.3	6.5	300.0	4.6	76.2	(0.15, 0.14)
실시예(171)	화합물(P2-39)	5.7	9.1	300.0	3.3	86.6	(0.15, 0.13)
실시예(172)	화합물(P2-40)	5.1	9.0	300.0	3.3	97.2	(0.15, 0.14)
실시예(173)	화합물(P2-41)	5.3	8.0	300.0	3.7	87.1	(0.15, 0.15)
실시예(174)	화합물(P2-42)	6.2	8.2	300.0	3.7	84.5	(0.15, 0.13)
실시예(175)	화합물(P2-43)	6.3	7.3	300.0	4.1	98.8	(0.15, 0.14)
실시예(176)	화합물(P2-44)	5.3	7.9	300.0	3.8	71.4	(0.15, 0.13)
실시예(177)	화합물(P2-45)	6.1	6.9	300.0	4.3	94.2	(0.15, 0.14)
실시예(178)	화합물(P2-46)	6.2	7.5	300.0	4.0	73.5	(0.15, 0.14)
실시예(179)	화합물(P2-47)	6.3	6.4	300.0	4.7	78.9	(0.15, 0.14)
실시예(180)	화합물(P2-48)	5.8	7.0	300.0	4.3	83.9	(0.15, 0.14)
실시예(181)	화합물(P2-49)	5.2	6.4	300.0	4.7	85.9	(0.14, 0.14)
실시예(182)	화합물(P2-50)	6.5	8.0	300.0	3.8	71.0	(0.14, 0.14)
실시예(183)	화합물(P2-51)	6.1	6.7	300.0	4.5	85.4	(0.15, 0.14)
실시예(184)	화합물(P2-52)	5.2	6.7	300.0	4.4	77.2	(0.15, 0.13)
실시예(185)	화합물(P2-53)	6.4	9.2	300.0	3.3	74.1	(0.15, 0.15)
실시예(186)	화합물(P2-54)	5.6	8.3	300.0	3.6	85.3	(0.15, 0.13)
실시예(187)	화합물(P2-55)	5.7	6.5	300.0	4.6	94.9	(0.15, 0.14)
실시예(188)	화합물(P2-56)	5.6	7.1	300.0	4.2	98.0	(0.15, 0.14)
실시예(189)	화합물(P2-57)	5.7	7.7	300.0	3.9	97.0	(0.14, 0.14)
실시예(190)	화합물(P2-58)	5.5	9.3	300.0	3.2	96.4	(0.15, 0.13)
실시예(191)	화합물(P2-59)	6.3	8.4	300.0	3.6	91.1	(0.15, 0.14)
실시예(192)	화합물(P2-60)	6.2	6.6	300.0	4.6	71.7	(0.15, 0.14)
실시예(193)	화합물(P2-61)	5.3	8.6	300.0	3.5	74.3	(0.14, 0.14)
실시예(194)	화합물(P2-62)	5.5	9.2	300.0	3.3	94.1	(0.15, 0.16)
실시예(195)	화합물(P2-63)	5.7	9.4	300.0	3.2	97.6	(0.15, 0.13)
실시예(196)	화합물(P2-64)	5.5	7.1	300.0	4.2	71.9	(0.15, 0.14)
실시예(197)	화합물(P2-65)	5.8	6.5	300.0	4.6	95.2	(0.15, 0.14)
실시예(198)	화합물(P2-66)	5.3	7.4	300.0	4.1	94.6	(0.15, 0.14)
실시예(199)	화합물(P2-67)	5.2	6.5	300.0	4.6	80.9	(0.15, 0.16)
실시예(200)	화합물(P2-68)	4.8	5.4	300.0	5.5	99.3	(0.14, 0.14)
실시예(201)	화합물(P2-69)	6.0	8.7	300.0	3.5	82.0	(0.15, 0.14)
실시예(202)	화합물(P2-70)	5.8	8.2	300.0	3.7	84.7	(0.14, 0.14)
실시예(203)	화합물(P2-71)	5.4	7.4	300.0	4.1	75.0	(0.15, 0.15)
실시예(204)	화합물(P2-72)	6.5	7.4	300.0	4.1	71.1	(0.15, 0.13)
실시예(205)	화합물(P2-73)	5.4	8.2	300.0	3.6	82.8	(0.15, 0.14)
실시예(206)	화합물(P2-74)	5.3	9.0	300.0	3.3	78.4	(0.15, 0.13)
실시예(207)	화합물(P2-75)	5.5	8.5	300.0	3.5	83.5	(0.15, 0.14)

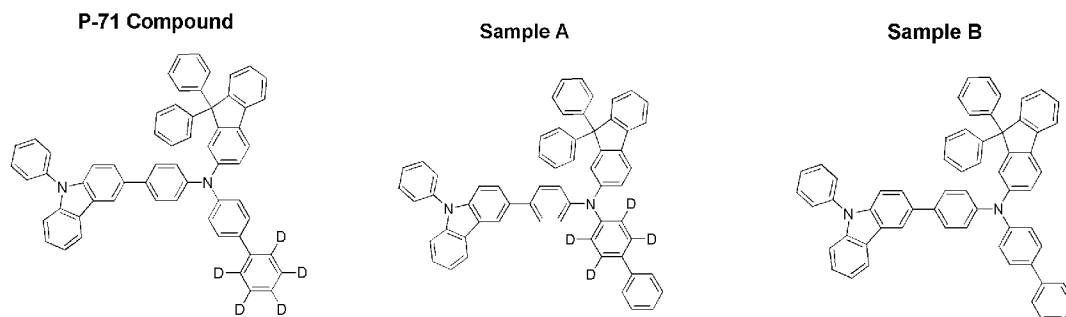
실시예(208)	화합물(P2-76)	5.3	6.9	300.0	4.3	76.6	(0.14, 0.14)
실시예(209)	화합물(P2-77)	5.2	6.7	300.0	4.5	91.9	(0.14, 0.14)
실시예(210)	화합물(P2-78)	5.7	7.4	300.0	4.1	95.4	(0.15, 0.15)
실시예(211)	화합물(P2-79)	5.7	6.5	300.0	4.6	70.5	(0.15, 0.14)
실시예(212)	화합물(P2-80)	5.9	7.8	300.0	3.9	72.0	(0.15, 0.14)
실시예(213)	화합물(P2-81)	6.2	8.0	300.0	3.8	91.9	(0.14, 0.14)
실시예(214)	화합물(P2-82)	6.5	7.0	300.0	4.3	82.7	(0.15, 0.13)
실시예(215)	화합물(P2-83)	5.5	7.7	300.0	3.9	99.6	(0.15, 0.14)
실시예(216)	화합물(P2-84)	5.3	6.6	300.0	4.6	84.1	(0.15, 0.14)
실시예(217)	화합물(P2-85)	6.4	7.8	300.0	3.9	97.6	(0.15, 0.13)
실시예(218)	화합물(P2-86)	5.6	6.6	300.0	4.5	76.0	(0.14, 0.14)
실시예(219)	화합물(P2-87)	5.9	9.7	300.0	3.1	82.1	(0.15, 0.14)
실시예(220)	화합물(P2-88)	6.2	8.4	300.0	3.6	70.8	(0.15, 0.14)
실시예(221)	화합물(P2-89)	5.9	8.9	300.0	3.4	74.8	(0.14, 0.14)
실시예(222)	화합물(P2-90)	6.4	9.3	300.0	3.2	94.4	(0.15, 0.13)
실시예(223)	화합물(P2-91)	6.4	9.6	300.0	3.1	71.1	(0.15, 0.16)
실시예(224)	화합물(P2-92)	5.4	9.0	300.0	3.3	87.3	(0.15, 0.14)
실시예(225)	화합물(P2-93)	6.4	6.5	300.0	4.6	85.7	(0.15, 0.13)
실시예(226)	화합물(P2-94)	5.2	7.7	300.0	3.9	83.7	(0.14, 0.14)
실시예(227)	화합물(P2-95)	6.4	8.0	300.0	3.7	86.5	(0.15, 0.14)
실시예(228)	화합물(P2-96)	6.5	8.0	300.0	3.7	71.0	(0.15, 0.13)
실시예(229)	화합물(P2-97)	5.3	7.1	300.0	4.2	99.7	(0.14, 0.14)
실시예(230)	화합물(P2-98)	6.2	7.8	300.0	3.8	71.3	(0.14, 0.14)
실시예(231)	화합물(P2-99)	5.6	8.2	300.0	3.7	91.1	(0.15, 0.13)
실시예(232)	화합물(P2-100)	6.2	8.3	300.0	3.6	86.4	(0.15, 0.14)
실시예(233)	화합물(P2-101)	6.3	9.5	300.0	3.1	91.3	(0.14, 0.14)
실시예(234)	화합물(P2-102)	5.4	6.6	300.0	4.6	80.3	(0.15, 0.13)
실시예(235)	화합물(P2-103)	6.1	8.8	300.0	3.4	72.2	(0.14, 0.14)
실시예(236)	화합물(P2-104)	5.8	7.4	300.0	4.1	94.3	(0.15, 0.14)
실시예(237)	화합물(P2-105)	6.3	6.9	300.0	4.3	89.9	(0.14, 0.14)
실시예(238)	화합물(P2-106)	6.3	8.1	300.0	3.7	75.0	(0.15, 0.14)
실시예(239)	화합물(P2-107)	5.3	8.2	300.0	3.6	79.4	(0.15, 0.16)
실시예(240)	화합물(P2-108)	5.0	5.5	300.0	5.4	94.0	(0.14, 0.14)
실시예(241)	화합물(P2-109)	6.4	6.6	300.0	4.6	72.6	(0.14, 0.14)
실시예(242)	화합물(P2-110)	5.5	8.0	300.0	3.8	77.2	(0.15, 0.14)
실시예(243)	화합물(P2-111)	5.7	7.9	300.0	3.8	91.2	(0.15, 0.14)
실시예(244)	화합물(P2-112)	6.1	8.6	300.0	3.5	97.8	(0.14, 0.14)
실시예(245)	화합물(P2-113)	6.3	9.2	300.0	3.3	87.0	(0.15, 0.14)
실시예(246)	화합물(P2-114)	5.1	9.5	300.0	3.1	97.1	(0.14, 0.14)
실시예(247)	화합물(P2-115)	5.5	8.5	300.0	3.5	85.0	(0.15, 0.13)
실시예(248)	화합물(P2-116)	5.8	7.9	300.0	3.8	85.9	(0.14, 0.14)
실시예(249)	화합물(P2-117)	6.3	8.6	300.0	3.5	93.9	(0.15, 0.14)
실시예(250)	화합물(P2-118)	6.3	6.8	300.0	4.4	82.5	(0.14, 0.14)
실시예(251)	화합물(P2-119)	5.2	9.5	300.0	3.1	90.8	(0.15, 0.13)
실시예(252)	화합물(P2-120)	5.2	9.5	300.0	3.2	81.5	(0.15, 0.14)

[652] 상기 표 8 및 표 9의 비교예와 실시예의 결과를 비교하면, 비교예 1, 2, 3에 비해 중수소로 치환된 실시예 화합물들의 구동전압이 떨어지는 특성을 나타내며, 구동전압 하강뿐만 아니라 발광효율 및 수명에서도 높은 결과를 나타내고 있다.

[653] 또한, 중수소 치환효과를 알아보기 위하여 하기 3가지 화합물로 실험한 결과 도 7 내지 도 9의 결과를 얻었다.

[654] 한편, 중수소가 도입된 경우와 도입되지 않은 경우 등의 소자 특성을 비교하기 위하여 하기 화합물로 실험한 결과 도 7 내지 도 9와 같은 결과를 얻었다. 도 7 내지 도 9는 각각 중수소가 도입된 본 발명의 화합물과 중수소가 도입되지 않은 화합물의 휘도, 전류밀도 및 효율을 비교한 그래프이다.

[655]



[656] 도 7 내지 도 9를 참조하면, 아릴기에 중수소 도입시 말단의 아릴기에 도입한 경우(P-71 화합물) 휘도, 전류밀도 및 효율이 가장 우수함을 알 수 있다. 이로써, 중수소를 도입하지 않은 화합물(샘플 B)보다 중수소를 도입한 화합물(P-71, 샘플 A)의 소자 특성이 우수하고, 중수소를 도입시 말단의 아릴기에 도입한 경우 소자 특성이 가장 우수함을 알 수 있다.

[657] 한편, 비교적 높은 열안정성 및 낮은 구동전압과 높은 수명을 나타내고 있는 실시예 (70), 실시예 (71), 실시예 (72)를 이용하여 [표 9]의 물질과 50 : 50으로 혼합한 정공 수송층을 사용, 상기와 동일하게 소자를 만들어 하기와 같은 소자평가 결과를 얻었다.

[658] 표 10

[Table 10]

	화합물	구동전압	전류(mA/cm ²)	휘도(cd/m ²)	효율(cd/A)	T(90)
비교예(1)	비교예(1)	6.6	7.5	300	4	57.4
비교예(2)	화합물(P-70)	4.6	5.3	300	5.6	102.2
비교예(3)	화합물(P-71)	5	5.7	300	5.3	108.8
비교예(4)	화합물(P-72)	4.9	5.2	300	5.7	105.9
실시예(253)	화합물(P-70+P2-1)	4.4	4.8	300.0	6.2	104.7
실시예(254)	화합물(P-70+P2-2)	4.5	5.1	300.0	5.9	131.3
실시예(255)	화합물(P-70+P2-3)	4.6	5.4	300.0	5.6	109.0
실시예(256)	화합물(P-70+P2-4)	4.5	5.1	300.0	5.8	124.3
실시예(257)	화합물(P-70+P2-5)	4.7	4.9	300.0	6.1	118.5
실시예(258)	화합물(P-70+P2-6)	4.5	5.4	300.0	5.5	122.0
실시예(259)	화합물(P-70+P2-7)	4.5	4.9	300.0	6.1	143.7
실시예(260)	화합물(P-70+P2-8)	4.6	5.3	300.0	5.7	101.4
실시예(261)	화합물(P-70+P2-9)	4.4	5.0	300.0	6.0	133.7
실시예(262)	화합물(P-70+P2-10)	4.5	5.3	300.0	5.7	112.0
실시예(263)	화합물(P-70+P2-11)	4.6	4.9	300.0	6.1	136.6
실시예(264)	화합물(P-70+P2-12)	4.5	5.3	300.0	5.7	115.6
실시예(265)	화합물(P-70+P2-13)	4.4	5.1	300.0	5.9	126.7
실시예(266)	화합물(P-70+P2-14)	4.6	5.0	300.0	6.0	128.3
실시예(267)	화합물(P-70+P2-15)	4.5	5.4	300.0	5.5	112.8
실시예(268)	화합물(P-70+P2-16)	4.6	5.2	300.0	5.7	111.1
실시예(269)	화합물(P-70+P2-17)	4.7	5.1	300.0	5.9	100.2
실시예(270)	화합물(P-70+P2-18)	4.6	5.0	300.0	6.0	131.2
실시예(271)	화합물(P-70+P2-19)	4.6	5.1	300.0	5.9	118.3
실시예(272)	화합물(P-70+P2-20)	4.5	4.8	300.0	6.2	155.5
실시예(273)	화합물(P-70+P2-21)	4.7	4.8	300.0	6.3	149.7
실시예(274)	화합물(P-70+P2-22)	4.5	4.8	300.0	6.2	138.2
실시예(275)	화합물(P-70+P2-23)	4.6	5.3	300.0	5.6	121.7
실시예(276)	화합물(P-70+P2-24)	4.6	4.9	300.0	6.1	141.2
실시예(277)	화합물(P-70+P2-25)	4.5	5.4	300.0	5.6	143.6
실시예(278)	화합물(P-70+P2-26)	4.6	5.0	300.0	6.0	156.8
실시예(279)	화합물(P-70+P2-27)	4.7	4.9	300.0	6.1	142.2
실시예(280)	화합물(P-70+P2-28)	4.6	4.9	300.0	6.1	145.0
실시예(281)	화합물(P-70+P2-29)	4.6	5.0	300.0	6.0	132.6
실시예(282)	화합물(P-70+P2-30)	4.7	5.1	300.0	5.8	121.7
실시예(283)	화합물(P-70+P2-31)	4.5	5.3	300.0	5.6	102.5
실시예(284)	화합물(P-70+P2-32)	4.4	5.0	300.0	6.0	143.2
실시예(285)	화합물(P-70+P2-33)	4.6	5.3	300.0	5.7	122.9

[659]

실시예(286)	화합물(P-70+P2-34)	4.5	5.0	300.0	6.1	139.7
실시예(287)	화합물(P-70+P2-35)	4.6	4.8	300.0	6.2	109.0
실시예(288)	화합물(P-70+P2-36)	4.5	5.2	300.0	5.8	133.9
실시예(289)	화합물(P-70+P2-37)	4.6	5.1	300.0	5.9	158.7
실시예(290)	화합물(P-70+P2-38)	4.6	5.1	300.0	5.9	101.3
실시예(291)	화합물(P-70+P2-39)	4.6	4.8	300.0	6.3	123.0
실시예(292)	화합물(P-70+P2-40)	4.6	4.8	300.0	6.2	145.7
실시예(293)	화합물(P-70+P2-41)	4.5	5.2	300.0	5.8	151.9
실시예(294)	화합물(P-70+P2-42)	4.7	5.2	300.0	5.8	124.5
실시예(295)	화합물(P-70+P2-43)	4.7	4.8	300.0	6.2	134.3
실시예(296)	화합물(P-70+P2-44)	4.6	5.4	300.0	5.5	102.9
실시예(297)	화합물(P-70+P2-45)	4.4	5.3	300.0	5.7	102.7
실시예(298)	화합물(P-70+P2-46)	4.5	5.0	300.0	6.0	152.0
실시예(299)	화합물(P-70+P2-47)	4.4	4.9	300.0	6.2	143.3
실시예(300)	화합물(P-70+P2-48)	4.7	4.9	300.0	6.1	147.8
실시예(301)	화합물(P-70+P2-49)	4.6	5.2	300.0	5.8	113.6
실시예(302)	화합물(P-70+P2-50)	4.5	5.0	300.0	5.9	109.0
실시예(303)	화합물(P-70+P2-51)	4.5	5.4	300.0	5.5	149.1
실시예(304)	화합물(P-70+P2-52)	4.5	5.4	300.0	5.5	114.6
실시예(305)	화합물(P-70+P2-53)	4.4	5.3	300.0	5.7	157.9
실시예(306)	화합물(P-70+P2-54)	4.5	5.4	300.0	5.6	159.8
실시예(307)	화합물(P-70+P2-55)	4.4	5.2	300.0	5.8	143.2
실시예(308)	화합물(P-70+P2-56)	4.6	5.2	300.0	5.8	146.3
실시예(309)	화합물(P-70+P2-57)	4.7	5.2	300.0	5.7	112.6
실시예(310)	화합물(P-70+P2-58)	4.4	5.0	300.0	6.1	135.6
실시예(311)	화합물(P-70+P2-59)	4.5	5.2	300.0	5.8	117.5
실시예(312)	화합물(P-70+P2-60)	4.6	4.9	300.0	6.1	135.9
실시예(313)	화합물(P-70+P2-61)	4.6	4.9	300.0	6.1	156.2
실시예(314)	화합물(P-70+P2-62)	4.6	5.0	300.0	6.0	153.2
실시예(315)	화합물(P-70+P2-63)	4.5	4.8	300.0	6.2	153.3
실시예(316)	화합물(P-70+P2-64)	4.4	4.9	300.0	6.1	116.0
실시예(317)	화합물(P-70+P2-65)	4.5	5.1	300.0	5.9	109.0
실시예(318)	화합물(P-70+P2-66)	4.4	5.1	300.0	5.9	125.5
실시예(319)	화합물(P-70+P2-67)	4.6	5.3	300.0	5.6	117.6
실시예(320)	화합물(P-70+P2-68)	4.5	4.8	300.0	6.2	155.0
실시예(321)	화합물(P-70+P2-69)	4.6	5.1	300.0	5.9	145.8
실시예(322)	화합물(P-70+P2-70)	4.6	5.1	300.0	5.9	107.4
실시예(323)	화합물(P-70+P2-71)	4.4	5.3	300.0	5.6	159.8

[660]

실시예(324)	화합물(P-70+P2-72)	4.5	5.1	300.0	5.9	115.4
실시예(325)	화합물(P-70+P2-73)	4.6	4.8	300.0	6.3	118.0
실시예(326)	화합물(P-70+P2-74)	4.6	4.8	300.0	6.3	104.3
실시예(327)	화합물(P-70+P2-75)	4.6	5.4	300.0	5.5	144.3
실시예(328)	화합물(P-70+P2-76)	4.4	5.4	300.0	5.5	108.5
실시예(329)	화합물(P-70+P2-77)	4.7	5.0	300.0	6.0	157.3
실시예(330)	화합물(P-70+P2-78)	4.6	5.3	300.0	5.6	143.9
실시예(331)	화합물(P-70+P2-79)	4.6	4.8	300.0	6.3	112.9
실시예(332)	화합물(P-70+P2-80)	4.7	5.4	300.0	5.6	127.8
실시예(333)	화합물(P-70+P2-81)	4.5	4.8	300.0	6.3	129.9
실시예(334)	화합물(P-70+P2-82)	4.5	5.1	300.0	5.9	107.2
실시예(335)	화합물(P-70+P2-83)	4.4	5.4	300.0	5.6	113.8
실시예(336)	화합물(P-70+P2-84)	4.5	4.8	300.0	6.2	137.8
실시예(337)	화합물(P-70+P2-85)	4.5	5.3	300.0	5.7	124.6
실시예(338)	화합물(P-70+P2-86)	4.5	4.9	300.0	6.1	119.4
실시예(339)	화합물(P-70+P2-87)	4.5	4.8	300.0	6.3	132.5
실시예(340)	화합물(P-70+P2-88)	4.6	5.2	300.0	5.7	128.5
실시예(341)	화합물(P-70+P2-89)	4.4	5.0	300.0	6.0	112.6
실시예(342)	화합물(P-70+P2-90)	4.4	5.3	300.0	5.7	124.8
실시예(343)	화합물(P-70+P2-91)	4.4	5.1	300.0	5.8	129.9
실시예(344)	화합물(P-70+P2-92)	4.5	5.3	300.0	5.6	114.9
실시예(345)	화합물(P-70+P2-93)	4.4	5.4	300.0	5.6	155.7
실시예(346)	화합물(P-70+P2-94)	4.5	5.3	300.0	5.6	110.3
실시예(347)	화합물(P-70+P2-95)	4.5	5.3	300.0	5.6	128.5
실시예(348)	화합물(P-70+P2-96)	4.4	5.2	300.0	5.8	152.6
실시예(349)	화합물(P-70+P2-97)	4.6	5.1	300.0	5.9	140.5
실시예(350)	화합물(P-70+P2-98)	4.5	5.4	300.0	5.5	136.6
실시예(351)	화합물(P-70+P2-99)	4.6	5.0	300.0	6.1	131.8
실시예(352)	화합물(P-70+P2-100)	4.6	5.4	300.0	5.6	146.8
실시예(353)	화합물(P-70+P2-101)	4.5	5.0	300.0	5.9	106.7
실시예(354)	화합물(P-70+P2-102)	4.7	5.1	300.0	5.9	158.7
실시예(355)	화합물(P-70+P2-103)	4.6	5.0	300.0	6.0	123.4
실시예(356)	화합물(P-70+P2-104)	4.5	5.0	300.0	6.0	117.1
실시예(357)	화합물(P-70+P2-105)	4.4	5.4	300.0	5.5	135.0
실시예(358)	화합물(P-70+P2-106)	4.4	5.1	300.0	5.9	110.6
실시예(359)	화합물(P-70+P2-107)	4.4	4.8	300.0	6.2	137.3
실시예(360)	화합물(P-70+P2-108)	4.5	5.0	300.0	6.1	140.2
실시예(361)	화합물(P-70+P2-109)	4.5	5.1	300.0	5.8	137.8

실시예(362)	화합물(P-70+P2-110)	4.6	5.0	300.0	6.0	113.6
실시예(363)	화합물(P-70+P2-111)	4.4	5.4	300.0	5.6	146.4
실시예(364)	화합물(P-70+P2-112)	4.6	5.1	300.0	5.9	122.9
실시예(365)	화합물(P-70+P2-113)	4.5	4.9	300.0	6.1	118.2
실시예(366)	화합물(P-70+P2-114)	4.6	5.3	300.0	5.7	144.3
실시예(367)	화합물(P-70+P2-115)	4.5	5.1	300.0	5.9	159.9
실시예(368)	화합물(P-70+P2-116)	4.4	5.4	300.0	5.6	126.6
실시예(369)	화합물(P-70+P2-117)	4.5	5.0	300.0	6.0	121.2
실시예(370)	화합물(P-70+P2-118)	4.6	5.1	300.0	5.9	123.9
실시예(371)	화합물(P-70+P2-119)	4.5	5.1	300.0	5.8	147.6
실시예(372)	화합물(P-70+P2-120)	4.5	4.9	300.0	6.1	142.8
실시예(373)	화합물(P-71+P2-1)	4.5	4.9	300.0	6.1	134.4
실시예(374)	화합물(P-71+P2-2)	4.4	5.3	300.0	5.7	144.6
실시예(375)	화합물(P-71+P2-3)	4.4	4.9	300.0	6.1	132.8
실시예(376)	화합물(P-71+P2-4)	4.4	4.9	300.0	6.1	158.2
실시예(377)	화합물(P-71+P2-5)	4.3	5.3	300.0	5.6	111.0
실시예(378)	화합물(P-71+P2-6)	4.2	5.2	300.0	5.8	143.6
실시예(379)	화합물(P-71+P2-7)	4.3	5.3	300.0	5.7	149.7
실시예(380)	화합물(P-71+P2-8)	4.4	4.9	300.0	6.1	161.9
실시예(381)	화합물(P-71+P2-9)	4.2	5.3	300.0	5.6	128.4
실시예(382)	화합물(P-71+P2-10)	4.5	4.8	300.0	6.3	168.7
실시예(383)	화합물(P-71+P2-11)	4.5	4.9	300.0	6.1	114.3
실시예(384)	화합물(P-71+P2-12)	4.3	5.0	300.0	6.0	153.1
실시예(385)	화합물(P-71+P2-13)	4.3	5.4	300.0	5.5	118.6
실시예(386)	화합물(P-71+P2-14)	4.5	5.3	300.0	5.7	159.3
실시예(387)	화합물(P-71+P2-15)	4.3	4.8	300.0	6.3	168.1
실시예(388)	화합물(P-71+P2-16)	4.3	4.9	300.0	6.1	149.9
실시예(389)	화합물(P-71+P2-17)	4.4	4.8	300.0	6.3	160.5
실시예(390)	화합물(P-71+P2-18)	4.2	5.1	300.0	5.8	121.5
실시예(391)	화합물(P-71+P2-19)	4.3	5.1	300.0	5.9	130.8
실시예(392)	화합물(P-71+P2-20)	4.4	5.2	300.0	5.8	151.6
실시예(393)	화합물(P-71+P2-21)	4.3	5.2	300.0	5.8	155.5
실시예(394)	화합물(P-71+P2-22)	4.4	4.8	300.0	6.2	168.5
실시예(395)	화합물(P-71+P2-23)	4.3	5.3	300.0	5.6	141.6
실시예(396)	화합물(P-71+P2-24)	4.4	5.4	300.0	5.5	165.4
실시예(397)	화합물(P-71+P2-25)	4.2	5.4	300.0	5.6	141.4
실시예(398)	화합물(P-71+P2-26)	4.3	4.8	300.0	6.3	113.4
실시예(399)	화합물(P-71+P2-27)	4.4	5.3	300.0	5.7	177.6

실시예(400)	화합물(P-71+P2-28)	4.3	5.4	300.0	5.6	167.0
실시예(401)	화합물(P-71+P2-29)	4.2	5.0	300.0	6.0	150.5
실시예(402)	화합물(P-71+P2-30)	4.5	5.1	300.0	5.9	148.7
실시예(403)	화합물(P-71+P2-31)	4.3	5.4	300.0	5.6	118.0
실시예(404)	화합물(P-71+P2-32)	4.2	5.1	300.0	5.9	167.6
실시예(405)	화합물(P-71+P2-33)	4.2	5.0	300.0	6.0	120.2
실시예(406)	화합물(P-71+P2-34)	4.4	5.1	300.0	5.9	140.6
실시예(407)	화합물(P-71+P2-35)	4.5	5.1	300.0	5.8	176.9
실시예(408)	화합물(P-71+P2-36)	4.5	4.8	300.0	6.2	111.3
실시예(409)	화합물(P-71+P2-37)	4.4	5.2	300.0	5.8	113.6
실시예(410)	화합물(P-71+P2-38)	4.3	5.2	300.0	5.8	171.0
실시예(411)	화합물(P-71+P2-39)	4.2	5.3	300.0	5.6	177.0
실시예(412)	화합물(P-71+P2-40)	4.3	5.1	300.0	5.9	120.1
실시예(413)	화합물(P-71+P2-41)	4.4	5.2	300.0	5.8	173.3
실시예(414)	화합물(P-71+P2-42)	4.5	5.1	300.0	5.8	145.5
실시예(415)	화합물(P-71+P2-43)	4.3	4.8	300.0	6.3	148.4
실시예(416)	화합물(P-71+P2-44)	4.4	5.2	300.0	5.8	159.7
실시예(417)	화합물(P-71+P2-45)	4.4	4.9	300.0	6.1	177.5
실시예(418)	화합물(P-71+P2-46)	4.4	5.2	300.0	5.8	149.1
실시예(419)	화합물(P-71+P2-47)	4.4	5.2	300.0	5.7	179.3
실시예(420)	화합물(P-71+P2-48)	4.3	5.3	300.0	5.6	133.5
실시예(421)	화합물(P-71+P2-49)	4.2	4.9	300.0	6.1	164.8
실시예(422)	화합물(P-71+P2-50)	4.3	5.2	300.0	5.8	126.3
실시예(423)	화합물(P-71+P2-51)	4.3	5.4	300.0	5.6	169.7
실시예(424)	화합물(P-71+P2-52)	4.4	4.9	300.0	6.2	146.6
실시예(425)	화합물(P-71+P2-53)	4.5	5.1	300.0	5.8	165.6
실시예(426)	화합물(P-71+P2-54)	4.4	4.8	300.0	6.2	110.9
실시예(427)	화합물(P-71+P2-55)	4.5	5.1	300.0	5.9	162.3
실시예(428)	화합물(P-71+P2-56)	4.4	5.3	300.0	5.7	162.8
실시예(429)	화합물(P-71+P2-57)	4.3	5.0	300.0	6.0	130.8
실시예(430)	화합물(P-71+P2-58)	4.3	4.8	300.0	6.2	130.9
실시예(431)	화합물(P-71+P2-59)	4.3	4.9	300.0	6.1	127.4
실시예(432)	화합물(P-71+P2-60)	4.2	5.1	300.0	5.9	125.5
실시예(433)	화합물(P-71+P2-61)	4.3	5.2	300.0	5.7	173.9
실시예(434)	화합물(P-71+P2-62)	4.5	4.8	300.0	6.2	155.0
실시예(435)	화합물(P-71+P2-63)	4.5	5.3	300.0	5.7	144.4
실시예(436)	화합물(P-71+P2-64)	4.3	4.9	300.0	6.1	149.8
실시예(437)	화합물(P-71+P2-65)	4.4	5.2	300.0	5.8	126.3

실시예(438)	화합물(P-71+P2-66)	4.3	5.1	300.0	5.8	158.6
실시예(439)	화합물(P-71+P2-67)	4.4	5.2	300.0	5.8	155.6
실시예(440)	화합물(P-71+P2-68)	4.2	5.3	300.0	5.7	172.8
실시예(441)	화합물(P-71+P2-69)	4.4	4.9	300.0	6.2	153.8
실시예(442)	화합물(P-71+P2-70)	4.5	5.2	300.0	5.8	126.5
실시예(443)	화합물(P-71+P2-71)	4.2	5.3	300.0	5.7	126.6
실시예(444)	화합물(P-71+P2-72)	4.4	5.4	300.0	5.6	134.2
실시예(445)	화합물(P-71+P2-73)	4.2	4.9	300.0	6.1	110.5
실시예(446)	화합물(P-71+P2-74)	4.5	5.3	300.0	5.6	119.5
실시예(447)	화합물(P-71+P2-75)	4.4	5.0	300.0	5.9	131.9
실시예(448)	화합물(P-71+P2-76)	4.4	5.4	300.0	5.5	162.9
실시예(449)	화합물(P-71+P2-77)	4.5	4.8	300.0	6.3	130.1
실시예(450)	화합물(P-71+P2-78)	4.4	5.1	300.0	5.8	115.8
실시예(451)	화합물(P-71+P2-79)	4.3	5.0	300.0	6.0	166.6
실시예(452)	화합물(P-71+P2-80)	4.2	4.8	300.0	6.3	117.4
실시예(453)	화합물(P-71+P2-81)	4.3	5.3	300.0	5.6	146.7
실시예(454)	화합물(P-71+P2-82)	4.2	5.2	300.0	5.8	149.0
실시예(455)	화합물(P-71+P2-83)	4.4	5.2	300.0	5.8	151.6
실시예(456)	화합물(P-71+P2-84)	4.3	5.1	300.0	5.8	155.1
실시예(457)	화합물(P-71+P2-85)	4.2	5.0	300.0	6.0	130.2
실시예(458)	화합물(P-71+P2-86)	4.5	5.4	300.0	5.5	132.0
실시예(459)	화합물(P-71+P2-87)	4.5	5.3	300.0	5.6	152.0
실시예(460)	화합물(P-71+P2-88)	4.3	5.2	300.0	5.8	142.4
실시예(461)	화합물(P-71+P2-89)	4.3	4.8	300.0	6.3	127.1
실시예(462)	화합물(P-71+P2-90)	4.4	5.1	300.0	5.9	164.4
실시예(463)	화합물(P-71+P2-91)	4.4	5.0	300.0	6.1	177.7
실시예(464)	화합물(P-71+P2-92)	4.3	5.3	300.0	5.6	130.4
실시예(465)	화합물(P-71+P2-93)	4.3	5.2	300.0	5.7	151.5
실시예(466)	화합물(P-71+P2-94)	4.3	4.9	300.0	6.1	139.6
실시예(467)	화합물(P-71+P2-95)	4.3	5.0	300.0	6.1	167.7
실시예(468)	화합물(P-71+P2-96)	4.4	5.2	300.0	5.8	124.1
실시예(469)	화합물(P-71+P2-97)	4.5	5.2	300.0	5.8	112.8
실시예(470)	화합물(P-71+P2-98)	4.4	4.9	300.0	6.2	164.0
실시예(471)	화합물(P-71+P2-99)	4.4	4.8	300.0	6.2	125.0
실시예(472)	화합물(P-71+P2-100)	4.2	5.2	300.0	5.7	158.4
실시예(473)	화합물(P-71+P2-101)	4.3	5.1	300.0	5.9	148.9
실시예(474)	화합물(P-71+P2-102)	4.4	4.8	300.0	6.2	147.4
실시예(475)	화합물(P-71+P2-103)	4.3	5.1	300.0	5.9	116.8

실시예(476)	화합물(P-71+P2-104)	4.3	5.1	300.0	5.9	140.2
실시예(477)	화합물(P-71+P2-105)	4.3	5.1	300.0	5.9	113.4
실시예(478)	화합물(P-71+P2-106)	4.4	4.8	300.0	6.2	175.2
실시예(479)	화합물(P-71+P2-107)	4.4	5.2	300.0	5.8	178.7
실시예(480)	화합물(P-71+P2-108)	4.2	5.2	300.0	5.7	149.3
실시예(481)	화합물(P-71+P2-109)	4.4	4.9	300.0	6.1	127.4
실시예(482)	화합물(P-71+P2-110)	4.5	5.2	300.0	5.8	148.8
실시예(483)	화합물(P-71+P2-111)	4.4	5.5	300.0	5.5	126.7
실시예(484)	화합물(P-71+P2-112)	4.2	4.9	300.0	6.1	124.9
실시예(485)	화합물(P-71+P2-113)	4.4	5.0	300.0	6.0	165.3
실시예(486)	화합물(P-71+P2-114)	4.3	5.3	300.0	5.6	129.7
실시예(487)	화합물(P-71+P2-115)	4.3	5.3	300.0	5.7	123.6
실시예(488)	화합물(P-71+P2-116)	4.4	5.4	300.0	5.6	118.4
실시예(489)	화합물(P-71+P2-117)	4.2	4.8	300.0	6.2	113.9
실시예(490)	화합물(P-71+P2-118)	4.5	4.9	300.0	6.1	118.8
실시예(491)	화합물(P-71+P2-119)	4.3	5.1	300.0	5.9	162.7
실시예(492)	화합물(P-71+P2-120)	4.4	4.8	300.0	6.2	116.0
실시예(493)	화합물(P-72+P2-1)	4.5	5.5	300.0	5.5	122.9
실시예(494)	화합물(P-72+P2-2)	4.5	5.0	300.0	6.0	134.3
실시예(495)	화합물(P-72+P2-3)	4.6	4.9	300.0	6.1	114.4
실시예(496)	화합물(P-72+P2-4)	4.7	5.0	300.0	5.9	121.9
실시예(497)	화합물(P-72+P2-5)	4.5	5.2	300.0	5.7	139.0
실시예(498)	화합물(P-72+P2-6)	4.7	5.4	300.0	5.6	115.9
실시예(499)	화합물(P-72+P2-7)	4.8	5.4	300.0	5.5	147.5
실시예(500)	화합물(P-72+P2-8)	4.8	5.4	300.0	5.6	97.4
실시예(501)	화합물(P-72+P2-9)	4.7	4.8	300.0	6.3	139.0
실시예(502)	화합물(P-72+P2-10)	4.5	5.4	300.0	5.6	144.3
실시예(503)	화합물(P-72+P2-11)	4.7	5.3	300.0	5.7	132.5
실시예(504)	화합물(P-72+P2-12)	4.5	4.8	300.0	6.3	107.9
실시예(505)	화합물(P-72+P2-13)	4.7	5.1	300.0	5.9	137.6
실시예(506)	화합물(P-72+P2-14)	4.4	5.4	300.0	5.5	142.5
실시예(507)	화합물(P-72+P2-15)	4.5	5.4	300.0	5.6	140.7
실시예(508)	화합물(P-72+P2-16)	4.6	5.4	300.0	5.5	126.2
실시예(509)	화합물(P-72+P2-17)	4.7	5.3	300.0	5.6	136.8
실시예(510)	화합물(P-72+P2-18)	4.6	5.3	300.0	5.6	145.1
실시예(511)	화합물(P-72+P2-19)	4.5	4.8	300.0	6.2	98.5
실시예(512)	화합물(P-72+P2-20)	4.6	5.1	300.0	5.9	116.4
실시예(513)	화합물(P-72+P2-21)	4.4	5.0	300.0	5.9	98.8

실시예(514)	화합물(P-72+P2-22)	4.6	5.1	300.0	5.9	142.3
실시예(515)	화합물(P-72+P2-23)	4.5	5.2	300.0	5.8	106.1
실시예(516)	화합물(P-72+P2-24)	4.6	5.1	300.0	5.9	118.3
실시예(517)	화합물(P-72+P2-25)	4.7	5.0	300.0	6.0	128.8
실시예(518)	화합물(P-72+P2-26)	4.5	5.2	300.0	5.7	113.0
실시예(519)	화합물(P-72+P2-27)	4.6	5.3	300.0	5.6	110.9
실시예(520)	화합물(P-72+P2-28)	4.7	5.4	300.0	5.6	140.0
실시예(521)	화합물(P-72+P2-29)	4.5	5.3	300.0	5.7	129.1
실시예(522)	화합물(P-72+P2-30)	4.4	5.1	300.0	5.9	148.3
실시예(523)	화합물(P-72+P2-31)	4.5	5.4	300.0	5.5	120.7
실시예(524)	화합물(P-72+P2-32)	4.6	5.2	300.0	5.7	144.4
실시예(525)	화합물(P-72+P2-33)	4.7	5.3	300.0	5.6	105.0
실시예(526)	화합물(P-72+P2-34)	4.7	5.3	300.0	5.7	119.0
실시예(527)	화합물(P-72+P2-35)	4.5	4.8	300.0	6.3	100.9
실시예(528)	화합물(P-72+P2-36)	4.6	5.1	300.0	5.9	126.6
실시예(529)	화합물(P-72+P2-37)	4.8	5.0	300.0	6.0	131.2
실시예(530)	화합물(P-72+P2-38)	4.6	5.0	300.0	6.1	145.6
실시예(531)	화합물(P-72+P2-39)	4.4	5.3	300.0	5.7	128.2
실시예(532)	화합물(P-72+P2-40)	4.7	5.4	300.0	5.5	130.5
실시예(533)	화합물(P-72+P2-41)	4.7	4.8	300.0	6.2	116.8
실시예(534)	화합물(P-72+P2-42)	4.6	4.9	300.0	6.1	114.5
실시예(535)	화합물(P-72+P2-43)	4.5	4.8	300.0	6.3	129.3
실시예(536)	화합물(P-72+P2-44)	4.6	5.1	300.0	5.9	135.6
실시예(537)	화합물(P-72+P2-45)	4.8	5.1	300.0	5.9	138.2
실시예(538)	화합물(P-72+P2-46)	4.7	5.4	300.0	5.5	108.0
실시예(539)	화합물(P-72+P2-47)	4.6	5.4	300.0	5.5	149.3
실시예(540)	화합물(P-72+P2-48)	4.5	4.9	300.0	6.1	103.3
실시예(541)	화합물(P-72+P2-49)	4.8	4.8	300.0	6.3	137.0
실시예(542)	화합물(P-72+P2-50)	4.6	5.0	300.0	6.0	139.4
실시예(543)	화합물(P-72+P2-51)	4.7	4.9	300.0	6.1	142.1
실시예(544)	화합물(P-72+P2-52)	4.5	5.1	300.0	5.9	125.6
실시예(545)	화합물(P-72+P2-53)	4.8	5.2	300.0	5.7	120.5
실시예(546)	화합물(P-72+P2-54)	4.8	5.4	300.0	5.6	136.3
실시예(547)	화합물(P-72+P2-55)	4.6	4.8	300.0	6.2	145.1
실시예(548)	화합물(P-72+P2-56)	4.6	5.1	300.0	5.9	108.3
실시예(549)	화합물(P-72+P2-57)	4.5	4.9	300.0	6.1	101.3
실시예(550)	화합물(P-72+P2-58)	4.5	5.2	300.0	5.7	126.4
실시예(551)	화합물(P-72+P2-59)	4.5	5.1	300.0	5.9	115.5

실시예(552)	화합물(P-72+P2-60)	4.4	4.8	300.0	6.2	103.9
실시예(553)	화합물(P-72+P2-61)	4.6	4.8	300.0	6.3	109.7
실시예(554)	화합물(P-72+P2-62)	4.7	5.3	300.0	5.6	126.7
실시예(555)	화합물(P-72+P2-63)	4.7	5.4	300.0	5.5	137.2
실시예(556)	화합물(P-72+P2-64)	4.6	4.9	300.0	6.1	141.3
실시예(557)	화합물(P-72+P2-65)	4.6	5.2	300.0	5.8	111.5
실시예(558)	화합물(P-72+P2-66)	4.7	5.3	300.0	5.7	123.5
실시예(559)	화합물(P-72+P2-67)	4.7	4.8	300.0	6.2	115.3
실시예(560)	화합물(P-72+P2-68)	4.6	4.8	300.0	6.2	146.0
실시예(561)	화합물(P-72+P2-69)	4.6	5.0	300.0	6.0	118.6
실시예(562)	화합물(P-72+P2-70)	4.5	4.8	300.0	6.2	113.9
실시예(563)	화합물(P-72+P2-71)	4.4	5.0	300.0	5.9	131.6
실시예(564)	화합물(P-72+P2-72)	4.7	5.2	300.0	5.8	104.5
실시예(565)	화합물(P-72+P2-73)	4.7	5.0	300.0	6.0	146.4
실시예(566)	화합물(P-72+P2-74)	4.6	5.1	300.0	5.9	134.8
실시예(567)	화합물(P-72+P2-75)	4.4	5.0	300.0	6.0	136.4
실시예(568)	화합물(P-72+P2-76)	4.6	5.3	300.0	5.6	123.0
실시예(569)	화합물(P-72+P2-77)	4.6	4.8	300.0	6.2	144.5
실시예(570)	화합물(P-72+P2-78)	4.6	5.1	300.0	5.8	109.8
실시예(571)	화합물(P-72+P2-79)	4.4	5.2	300.0	5.8	103.0
실시예(572)	화합물(P-72+P2-80)	4.7	4.8	300.0	6.3	117.3
실시예(573)	화합물(P-72+P2-81)	4.5	5.4	300.0	5.5	139.7
실시예(574)	화합물(P-72+P2-82)	4.8	4.8	300.0	6.2	109.6
실시예(575)	화합물(P-72+P2-83)	4.7	4.8	300.0	6.2	138.1
실시예(576)	화합물(P-72+P2-84)	4.5	4.8	300.0	6.2	146.1
실시예(577)	화합물(P-72+P2-85)	4.4	5.0	300.0	6.0	140.3
실시예(578)	화합물(P-72+P2-86)	4.6	4.8	300.0	6.2	99.0
실시예(579)	화합물(P-72+P2-87)	4.7	5.1	300.0	5.8	132.8
실시예(580)	화합물(P-72+P2-88)	4.5	4.8	300.0	6.3	118.3
실시예(581)	화합물(P-72+P2-89)	4.4	5.0	300.0	6.0	144.3
실시예(582)	화합물(P-72+P2-90)	4.6	5.1	300.0	5.9	106.8
실시예(583)	화합물(P-72+P2-91)	4.8	4.8	300.0	6.3	121.6
실시예(584)	화합물(P-72+P2-92)	4.7	5.3	300.0	5.7	103.5
실시예(585)	화합물(P-72+P2-93)	4.6	5.2	300.0	5.8	145.8
실시예(586)	화합물(P-72+P2-94)	4.5	5.2	300.0	5.8	131.9
실시예(587)	화합물(P-72+P2-95)	4.7	5.4	300.0	5.6	100.9
실시예(588)	화합물(P-72+P2-96)	4.5	4.8	300.0	6.3	105.8
실시예(589)	화합물(P-72+P2-97)	4.5	5.2	300.0	5.8	148.2

실시예(590)	화합물(P-72+P2-98)	4.8	5.3	300.0	5.6	105.7
실시예(591)	화합물(P-72+P2-99)	4.4	5.1	300.0	5.9	140.6
실시예(592)	화합물(P-72+P2-100)	4.7	4.9	300.0	6.1	136.6
실시예(593)	화합물(P-72+P2-101)	4.6	5.0	300.0	6.0	116.6
실시예(594)	화합물(P-72+P2-102)	4.8	5.4	300.0	5.6	130.2
실시예(595)	화합물(P-72+P2-103)	4.4	5.2	300.0	5.8	141.4
실시예(596)	화합물(P-72+P2-104)	4.5	5.2	300.0	5.8	129.4
실시예(597)	화합물(P-72+P2-105)	4.7	5.3	300.0	5.6	144.9
실시예(598)	화합물(P-72+P2-106)	4.5	5.0	300.0	5.9	140.2
실시예(599)	화합물(P-72+P2-107)	4.7	5.1	300.0	5.9	111.6
실시예(600)	화합물(P-72+P2-108)	4.4	5.1	300.0	5.9	139.0
실시예(601)	화합물(P-72+P2-109)	4.8	5.3	300.0	5.7	134.7
실시예(602)	화합물(P-72+P2-110)	4.4	5.1	300.0	5.9	117.7
실시예(603)	화합물(P-72+P2-111)	4.4	4.8	300.0	6.2	126.5
실시예(604)	화합물(P-72+P2-112)	4.4	4.9	300.0	6.2	134.2
실시예(605)	화합물(P-72+P2-113)	4.7	5.4	300.0	5.5	107.4
실시예(606)	화합물(P-72+P2-114)	4.8	4.9	300.0	6.2	132.9
실시예(607)	화합물(P-72+P2-115)	4.4	4.9	300.0	6.1	146.9
실시예(608)	화합물(P-72+P2-116)	4.5	4.8	300.0	6.3	101.5
실시예(609)	화합물(P-72+P2-117)	4.5	5.4	300.0	5.6	133.9
실시예(610)	화합물(P-72+P2-118)	4.7	4.8	300.0	6.2	114.5
실시예(611)	화합물(P-72+P2-119)	4.7	5.1	300.0	5.9	99.7
실시예(612)	화합물(P-72+P2-120)	4.4	5.2	300.0	5.7	110.7

- [668] 상기 [표 8]에서 비교예 화합물 (1) 인 NPB와 가장 좋은 결과를 나타내었던 실시예 70, 실시예 71, 실시예 72를 [표 10]에서 비교예로 정하고 P-70, P-71, P-72와 [표 9]의 다른 화합물들을 50:50으로 혼합한 혼합물을 정공 수송층으로 사용하여 비교 소자평가를 측정한 결과 단일화합물을 정공 수송층으로 사용했을 때보다 낮은 구동전압과 높은 효율, 수명이 월등하게 좋아지는 것을 확인할 수 있었다.
- [669] 이는 중수소 치환된 화합물을 혼합하였을 경우 단일 화합물을 사용했을 때보다 좋은 모폴로지(morphology)를 나타내며, 이는 계면간에 밀접한 계면 접촉성을 가지고, 이로 인해 층 간의 에너지 전이(energy transfer)가 증가되어 높은 구동전압을 낮추게 된다.
- [670] 따라서 구동전압이 낮아지면서 높은 효율과 장수명을 가지게 되는 것으로 판단되며, 최근 OLED소자에서 문제시되는 높은 구동전압으로 인한 단수명의 문제점을 해결할 것으로 본다.
- [671] 본 발명의 화합물들을 유기전기발광소자의 다른 유기물층들, 예를 들어 발광 보조층, 전자주입층, 전자수송층, 및 정공 주입층에 사용되더라도 동일한 효과를

얻을 수 있는 것은 자명하다.

- [672] 이상의 설명은 본 발명을 예시적으로 설명한 것에 불과한 것으로, 본 발명이 속하는 기술분야에서 통상의 지식을 가지는 자라면 본 발명의 본질적인 특성에서 벗어나지 않는 범위에서 다양한 변형이 가능할 것이다. 따라서, 본 명세서에 개시된 실시예들은 본 발명을 한정하기 위한 것이 아니라 설명하기 위한 것이고, 이러한 실시예에 의하여 본 발명의 사상과 범위가 한정되는 것은 아니다. 본 발명의 보호범위는 상기의 청구범위에 의하여 해석되어야 하며, 그와 동등한 범위 내에 있는 모든 기술은 본 발명의 권리범위에 포함하는 것으로 해석되어야 할 것이다.

[673]

[674] **CROSS-REFERENCE TO RELATED APPLICATION**

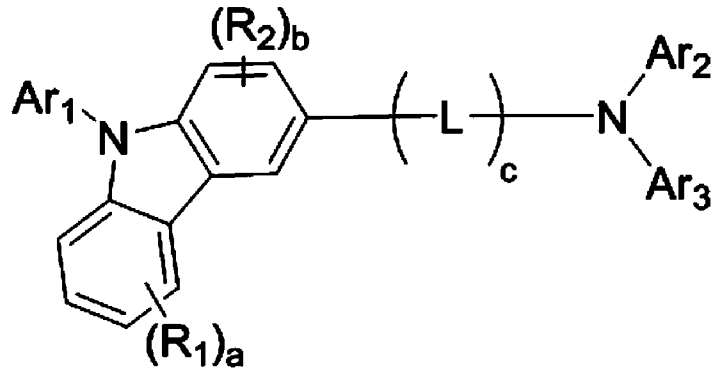
- [675] 본 특허출원은 2011년 06월 22일 한국에 출원한 특허출원번호 제 10-2011-0060643 호 및 2011년 07월 13일 한국에 출원한 특허출원번호 제 10-2011-0069298 호에 대해 미국 특허법 119(a)조 (35 U.S.C § 119(a))에 따라 우선권을 주장하며, 그 모든 내용은 참고문헌으로 본 특허출원에 병합된다. 아울러, 본 특허출원은 미국 이외에 국가에 대해서도 위와 동일한 이유로 우선권을 주장하면 그 모든 내용은 참고문헌으로 본 특허출원에 병합된다.

청구범위

[청구항 1]

제 1전극, 제 2전극 및 하기 화학식 1로 표시되는 화합물이 단독 또는 혼합물로 함유된 1층 이상의 유기물층을 포함하는 유기전기소자.

<화학식 1>



상기 화학식 1에서,

(1) Ar₁ 내지 Ar₃은 각각 독립적으로 동일하거나 상이하며, 수소, 중수소, 할로젠, 아미노기, 니트릴기, 니트로기, C₁~C₂₀의 알킬기, C₁~C₂₀의 알콕시기, C₁~C₂₀의 알킬아민기, C₁~C₂₀의 알킬티오펜기, C₆~C₂₀의 아릴티오펜기, C₂~C₂₀의 알케닐기, C₂~C₂₀의 알키닐기, C₃~C₂₀의 시클로알킬기, C₆~C₆₀의 아릴기, 중수소로 치환된 C₆~C₂₀의 아릴기, C₈~C₂₀의 아릴알케닐기, C₆~C₂₀의 아릴아민기, 실란기, 붕소기, 게르마늄기 및 C₃~C₂₀의 헤테로고리기로 이루어진 군으로부터 선택되는 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환된 C₆~C₆₀의 아릴기;

수소, 중수소, 할로젠기, C₁~C₂₀의 알킬기, C₂~C₂₀의 알케닐기, C₁~C₂₀의 알콕시기, C₆~C₂₀의 아릴아민기, C₆~C₆₀의 아릴기, 중수소로 치환된 C₆~C₂₀의 아릴기, C₇~C₂₀의 아릴알킬기, C₈~C₂₀의 아릴알케닐기, C₃~C₂₀의 헤테로고리기, 니트릴기 및 아세틸렌기로 이루어진 군에서 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환되고 O, N 및 S 중 적어도 하나를 포함하는 C₂~C₆₀의 헤테로고리기;

수소, 중수소, 할로젠기, 아미노기, 니트릴기, 니트로기, C₁~C₂₀의 알킬기, C₂~C₂₀의 알케닐기, C₁~C₂₀의 알콕시기, C₃~C₃₀의 시클로알킬기, C₂~C₃₀의 헤테로시클로알킬기, C₆~C₆₀의 아릴기, 중수소로 치환된 C₆~C₂₀의 아릴기 및 C₂~C₂₀의 헤테로고리기로 구성된 군에서 선택된 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환된 C₁~C₃₀의 알콕시기;

수소, 중수소, 할로젠기, 아미노기, 니트릴기, 니트로기, C₁~C₂₀의

알킬기, $C_2\sim C_{20}$ 의 알케닐기, $C_1\sim C_{20}$ 의 알콕시기, $C_3\sim C_{30}$ 의 시클로알킬기, $C_2\sim C_{30}$ 의 헤테로시클로알킬기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴기, 중수소로 치환된 $C_6\sim C_{20}$ 의 아릴기 및 $C_2\sim C_{20}$ 의 헤테로고리기로 구성된 군으로부터 선택된 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{30}$ 아릴옥시기;

할로젠기, 아미노기, 니트릴기, 니트로기, $C_1\sim C_{20}$ 의 알킬기, $C_2\sim C_{20}$ 의 알케닐기, $C_1\sim C_{20}$ 의 알콕시기, $C_3\sim C_{30}$ 의 시클로알킬기, $C_2\sim C_{30}$ 의 헤테로시클로알킬기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴기 및 $C_2\sim C_{20}$ 의 헤테로고리기로 구성된 군에서 선택된 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴아민기; 및

$C_1\sim C_{20}$ 의 알킬기, $C_2\sim C_{20}$ 의 알케닐기, $C_1\sim C_{20}$ 의 알콕시기, $C_6\sim C_{20}$ 의 아릴기, 중수소로 치환된 $C_6\sim C_{20}$ 의 아릴기, $C_7\sim C_{20}$ 의 아릴알킬기, $C_8\sim C_{20}$ 의 아릴알케닐기, $C_3\sim C_{20}$ 의 헤테로고리기, 니트릴기 및 아세틸렌기로 이루어진 군에서 선택된 치환기로 치환 또는 비치환된 $C_1\sim C_{50}$ 의 알킬기;로 이루어진 군에서 선택되며,

여기서 $Ar_1\sim Ar_3$ 중 적어도 하나는 중수소를 1개 이상 포함하고,

(2) R_1 및 R_2 는 각각 독립적으로 동일하거나 상이하며, 수소; 중수소; 할로젠; 니트로기; 니트릴기; 아미노기; 수소, 중수소, 할로젠, 아미노기, 니트릴기, 니트로기, $C_1\sim C_{20}$ 의 알킬기, $C_1\sim C_{20}$ 의 알콕시기, $C_1\sim C_{20}$ 의 알킬아민기, $C_1\sim C_{20}$ 의 알킬티오펜기, $C_6\sim C_{20}$ 의 아릴티오펜기, $C_2\sim C_{20}$ 의 알케닐기, $C_2\sim C_{20}$ 의 알키닐기, $C_3\sim C_{20}$ 의 시클로알킬기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴기, 중수소로 치환된 $C_6\sim C_{20}$ 의 아릴기, $C_8\sim C_{20}$ 의 아릴알케닐기, $C_6\sim C_{20}$ 의 아릴아민기, 실란기, 붕소기, 게르마늄기 및 $C_3\sim C_{20}$ 의 헤테로고리기로 이루어진 군으로부터 선택되는 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴기;

수소, 중수소, 할로젠기, $C_1\sim C_{20}$ 의 알킬기, $C_2\sim C_{20}$ 의 알케닐기, $C_1\sim C_{20}$ 의 알콕시기, $C_6\sim C_{20}$ 의 아릴아민기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴기, 중수소로 치환된 $C_6\sim C_{20}$ 의 아릴기, $C_7\sim C_{20}$ 의 아릴알킬기, $C_8\sim C_{20}$ 의 아릴알케닐기, $C_3\sim C_{20}$ 의 헤테로고리기, 니트릴기 및 아세틸렌기로 이루어진 군에서 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환 되고 O, N 및 S 중 적어도 하나를 포함하는 $C_2\sim C_{60}$ 의 헤테로고리기;

수소, 중수소, 할로젠기, 아미노기, 니트릴기, 니트로기, $C_1\sim C_{20}$ 의 알킬기, $C_2\sim C_{20}$ 의 알케닐기, $C_1\sim C_{20}$ 의 알콕시기, $C_3\sim C_{30}$ 의 시클로알킬기, $C_2\sim C_{30}$ 의 헤테로시클로알킬기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴기, 중수소로 치환된 $C_6\sim C_{20}$ 의 아릴기 및 $C_2\sim C_{20}$ 의 헤테로고리기로 구성된 군으로부터 선택된 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환된 $C_1\sim C_{30}$ 의 알콕시기;

수소, 중수소, 할로젠기, 아미노기, 니트릴기, 니트로기, C₁~C₂₀의 알킬기, C₂~C₂₀의 알케닐기, C₁~C₂₀의 알콕시기, C₃~C₃₀의 시클로알킬기, C₂~C₃₀의 헤테로시클로알킬기, C₆~C₆₀의 아릴기, 중수소로 치환된 C₆~C₂₀의 아릴기 및 C₂~C₂₀의 헤테로고리기로 구성된 군으로부터 선택된 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환된 C₆~C₃₀의 아릴옥시기; 및

C₁~C₂₀의 알킬기, C₂~C₂₀의 알케닐기, C₁~C₂₀의 알콕시기, C₆~C₂₀의 아릴기, 중수소로 치환된 C₆~C₂₀의 아릴기, C₇~C₂₀의 아릴알킬기, C₈~C₂₀의 아릴알케닐기, C₃~C₂₀의 헤테로고리기, 니트릴기 및 아세틸렌기로 이루어진 군에서 선택된 치환기로 치환 또는 비치환된 C₁~C₅₀의 알킬기;로 이루어진 군에서 선택되며, 여기서, R₁ 및 R₂는 인접한 기와 서로 결합하여 지환족, 방향족 또는 헤테로고리를 형성할 수 있고,

(3) L은 니트로기, 니트릴기, 할로젠기, 알킬기, 알콕시기, 아미노기, 아릴아민기 및 헤테로고리기로 이루어진 군에서 선택되는 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환된 C₆~C₆₀의 아릴렌기; 또는 니트로, 니트릴, 할로젠, 알킬기, 알콕시기, 아미노기 및 아릴기로 이루어진 군에서 선택되는 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환된 C₂~C₆₀의 헤테로고리기이며,
 (4) a는 0~4의 정수, b는 0~3의 정수, c는 0~2의 정수이다.

[청구항 2]

제 1항에 있어서,

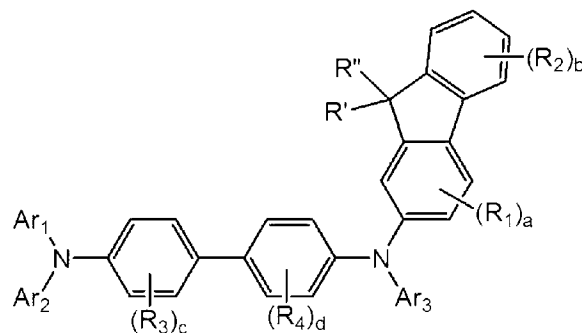
상기 혼합물은 상기 화학식 1로 표시되는 화합물 중 서로 다른 2종 이상의 화합물이 혼합된 것을 특징으로 하는 유기전기소자.

[청구항 3]

제 1항에 있어서,

상기 혼합물은 하기 화학식 2로 표시되는 화합물이 포함된 것을 특징으로 하는 유기전기소자.

<화학식 2>



상기 화학식 2에서,

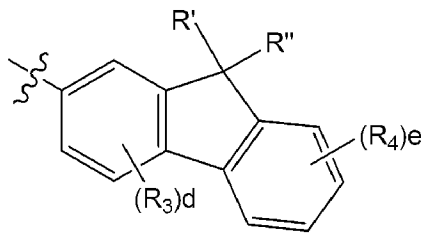
(1) Ar₁ 내지 Ar₃은 상기 화학식 1의 Ar₁ 내지 Ar₃의 치환기 정의와 동일하며,

(2) R_1 내지 R_4 는 상기 화학식 1의 R_1 또는 R_2 의 치환기 정의와 동일하며, 여기서, R_1 내지 R_4 는 인접한 기와 서로 결합하여 지환족, 방향족 또는 헤테로고리를 형성할 수 있으며,
 (3) R' 및 R'' 는 각각 독립적으로 동일하거나 상이하며, 수소, 중수소, 할로젠, 아미노기, 니트릴기, 니트로기, C_1 ~ C_{20} 의 알킬기, C_1 ~ C_{20} 의 알콕시기, C_1 ~ C_{20} 의 알킬아민기, C_1 ~ C_{20} 의 알킬티오펜기, C_6 ~ C_{20} 의 아릴티오펜기, C_2 ~ C_{20} 의 알케닐기, C_2 ~ C_{20} 의 알키닐기, C_3 ~ C_{20} 의 시클로알킬기, C_6 ~ C_{60} 의 아릴기, 중수소로 치환된 C_2 ~ C_{20} 의 아릴기, C_8 ~ C_{20} 의 아릴알케닐기, C_6 ~ C_{20} 의 아릴아민기, 실란기, 붕소기, 게르마늄기, C_3 ~ C_{20} 의 헤테로고리기로 이루어진 군으로부터 선택되는 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환된 C_6 ~ C_{60} 의 아릴기; 또는 C_1 ~ C_{20} 의 알킬기, C_2 ~ C_{20} 의 알케닐기, C_1 ~ C_{20} 의 알콕시기, C_6 ~ C_{20} 의 아릴기, 중수소로 치환된 C_2 ~ C_{20} 의 아릴기, C_7 ~ C_{20} 의 아릴알킬기, C_8 ~ C_{20} 의 아릴알케닐기, C_3 ~ C_{20} 의 헤테로고리기로 이루어진 군에서 선택된 치환기로 치환 또는 비치환된 C_1 ~ C_{50} 의 알킬기이며, 여기서, R' 및 R'' 는 서로 결합하여 지환족, 방향족, 헤테로고리, 또는 스피로화합물을 형성할 수 있으며,

(4) a 는 1 내지 3의 정수이고, b , c 및 d 는 각각 1 내지 4의 정수이다. 제 1항에 있어서,

[청구항 4]

상기 Ar_3 는 중수소를 하나 이상 포함하며,
 상기 Ar_2 는 다음 화학식으로 표시되는 것을 특징으로 하는 유기전기소자.



상기 화학식에서,

(1) R_3 및 R_4 는 각각 독립적으로 동일하거나 상이하며, 할로젠; 니트로기; 니트릴기; 아미노기;

수소, 중수소, 할로젠, 아미노기, 니트릴기, 니트로기, C_1 ~ C_{20} 의 알킬기, C_1 ~ C_{20} 의 알콕시기, C_1 ~ C_{20} 의 알킬아민기, C_1 ~ C_{20} 의 알킬티오펜기, C_6 ~ C_{20} 의 아릴티오펜기, C_2 ~ C_{20} 의 알케닐기, C_2 ~ C_{20} 의 알키닐기, C_3 ~ C_{20} 의 시클로알킬기, C_6 ~ C_{60} 의 아릴기, 중수소로 치환된 C_6 ~ C_{20} 의 아릴기, C_8 ~ C_{20} 의 아릴알케닐기, C_6 ~ C_{20} 의 아릴아민기, 실란기, 붕소기, 게르마늄기 및 C_3 ~ C_{20} 의 헤테로고리기로 이루어진 군으로부터 선택되는 1개 이상의

치환기로 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴기;

수소, 중수소, 할로젠기, $C_1\sim C_{20}$ 의 알킬기, $C_2\sim C_{20}$ 의 알케닐기, $C_1\sim C_{20}$ 의 알콕시기, $C_6\sim C_{20}$ 의 아릴아민기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴기, 중수소로 치환된 $C_6\sim C_{20}$ 의 아릴기, $C_8\sim C_{20}$ 의 아릴알킬기, $C_8\sim C_{20}$ 의 아릴알케닐기, $C_3\sim C_{20}$ 의 헤테로고리기, 니트릴기 및 아세틸렌기로 이루어진 군에서 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환 되고 O, N 및 S 중 적어도 하나를 포함하는 $C_2\sim C_{60}$ 의 헤테로고리기;

수소, 중수소, 할로젠기, 아미노기, 니트릴기, 니트로기, $C_1\sim C_{20}$ 의 알킬기, $C_2\sim C_{20}$ 의 알케닐기, $C_1\sim C_{20}$ 의 알콕시기, $C_3\sim C_{30}$ 의 시클로알킬기, $C_2\sim C_{30}$ 의 헤테로시클로알킬기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴기, 중수소로 치환된 $C_6\sim C_{20}$ 의 아릴기 및 $C_2\sim C_{20}$ 의 헤테로고리기로 구성된 군으로부터 선택된 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환된 $C_1\sim C_{30}$ 의 알콕시기;

수소, 중수소, 할로젠기, 아미노기, 니트릴기, 니트로기, $C_1\sim C_{20}$ 의 알킬기, $C_2\sim C_{20}$ 의 알케닐기, $C_1\sim C_{20}$ 의 알콕시기, $C_3\sim C_{30}$ 의 시클로알킬기, $C_2\sim C_{30}$ 의 헤테로시클로알킬기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴기, 중수소로 치환된 $C_6\sim C_{20}$ 의 아릴기 및 $C_2\sim C_{20}$ 의 헤테로고리기로 구성된 군으로부터 선택된 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{30}$ 의 아릴옥시기; 및

$C_1\sim C_{20}$ 의 알킬기, $C_2\sim C_{20}$ 의 알케닐기, $C_1\sim C_{20}$ 의 알콕시기, $C_6\sim C_{20}$ 의 아릴기, 중수소로 치환된 $C_6\sim C_{20}$ 의 아릴기, $C_7\sim C_{20}$ 의 아릴알킬기, $C_8\sim C_{20}$ 의 아릴알케닐기, $C_3\sim C_{20}$ 의 헤테로고리기, 니트릴기 및 아세틸렌기로 이루어진 군에서 선택된 치환기로 치환 또는 비치환된 $C_1\sim C_{50}$ 의 알킬기;로 이루어진 군에서 선택되며, 여기서, R_3 및 R_4 는 인접한 기와 서로 결합하여 치환족, 방향족 또는 헤테로고리를 형성할 수 있으며,

(2) R' 및 R'' 는 각각 독립적으로 동일하거나 상이하며, 수소, 중수소, 할로젠, 아미노기, 니트릴기, 니트로기, $C_1\sim C_{20}$ 의 알킬기, $C_1\sim C_{20}$ 의 알콕시기, $C_1\sim C_{20}$ 의 알킬아민기, $C_1\sim C_{20}$ 의 알킬티오펜기, $C_6\sim C_{20}$ 의 아릴티오펜기, $C_2\sim C_{20}$ 의 알케닐기, $C_2\sim C_{20}$ 의 알키닐기, $C_3\sim C_{20}$ 의 시클로알킬기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴기, 중수소로 치환된 $C_6\sim C_{20}$ 의 아릴기, $C_8\sim C_{20}$ 의 아릴알케닐기, $C_6\sim C_{20}$ 의 아릴아민기, 실란기, 붕소기, 게르마늄기 및 $C_3\sim C_{20}$ 의 헤테로고리기로 이루어진 군으로부터 선택되는 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴기; 또는 $C_1\sim C_{20}$ 의 알킬기, $C_2\sim C_{20}$ 의 알케닐기, $C_1\sim C_{20}$ 의 알콕시기, $C_6\sim C_{20}$ 의 아릴기, 중수소로 치환된 $C_6\sim C_{20}$ 의 아릴기, $C_7\sim C_{20}$ 의 아릴알킬기, $C_8\sim C_{20}$ 의 아릴알케닐기, $C_3\sim C_{20}$ 의 헤테로고리기, 니트릴기 및 아세틸렌기로 이루어진 군에서 선택된

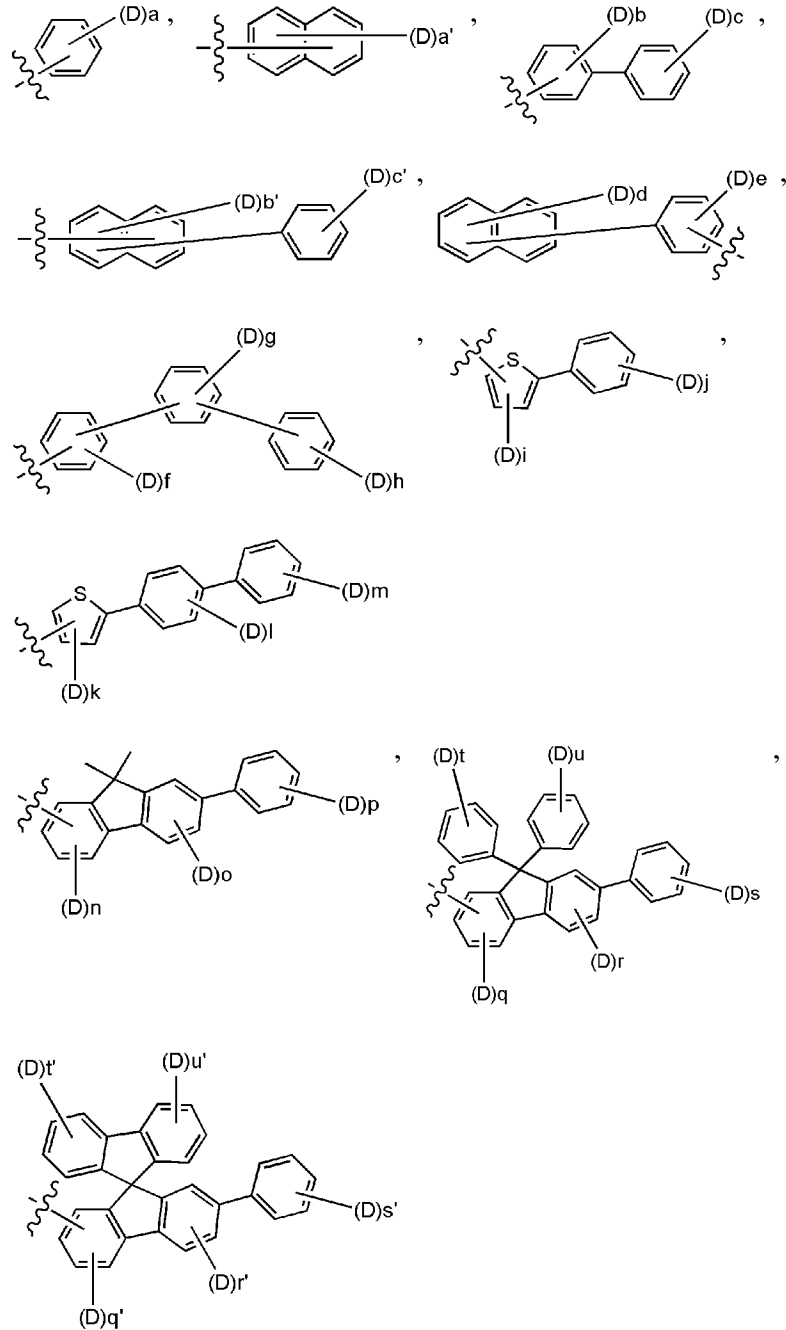
치환기로 치환 또는 비치환된 $C_1\sim C_{50}$ 의 알킬기이며, 여기서, R', R''는 서로 결합하여 지환족, 방향족, 헤테로고리, 또는 스피로화합물을 형성할 수 있으며,

(3) e는 1~4의 정수, d는 1~3의 정수이다.

[청구항 5]

제 1항 또는 제 2항에 있어서,

상기 Ar_1 , Ar_2 , 및 Ar_3 중 적어도 하나는 다음으로 구성된 군으로부터 선택되는 것을 특징으로 하는 유기전기소자.



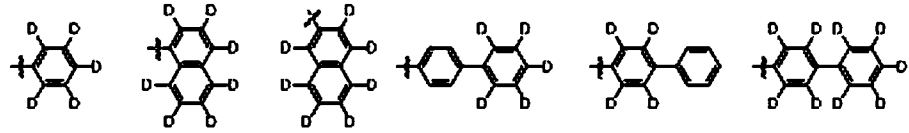
여기서, D는 중수소이며, k 및 i는 0~2의 정수이고, n, o, q, r, q' 및 r'은 0~3의 정수이며, b, e, f, g, l, t' 및 u'은 0~4의 정수이고, a, c, c', h,

j, m, p, s, t, u 및 s'은 0~5의 정수이며, b'은 0~6의 정수이며, a' 및 d는 0~7의 정수이다.

[청구항 6]

제 1항 또는 제 2항에 있어서,

상기 Ar₁, Ar₂, 및 Ar₃ 중 적어도 하나는 다음으로 구성된 군으로부터 선택되는 것을 특징으로 하는 유기전기소자.



D-1

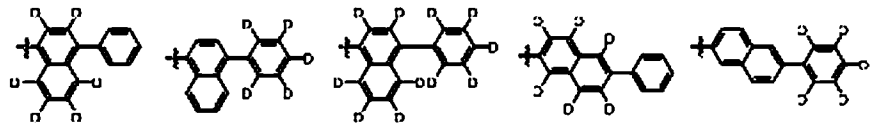
D-2

D-3

D-4

D-5

D-6



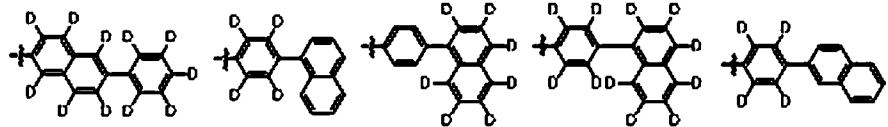
D-7

D-8

D-9

D-10

D-11



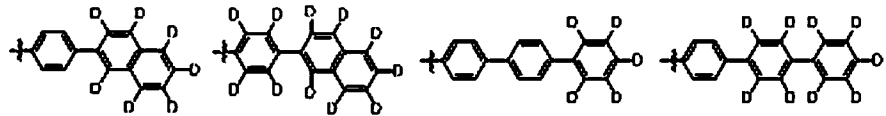
D-12

D-13

D-14

D-15

D-16

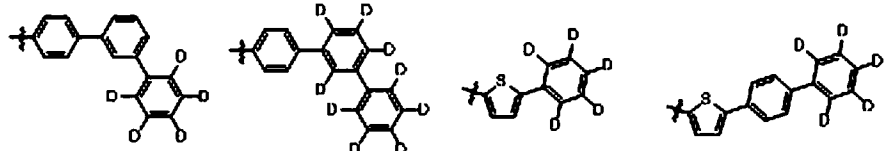


D-17

D-18

D-19

D-20

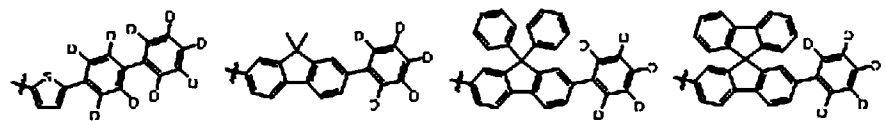


D-21

D-22

D-23

D-24



D-25

D-26

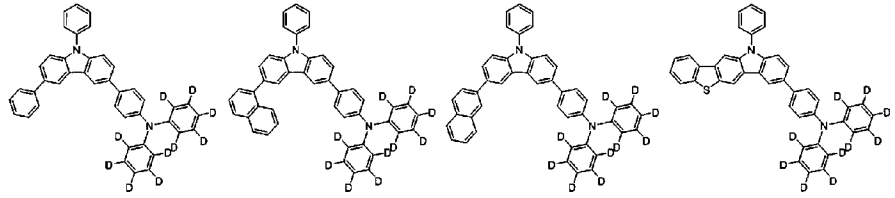
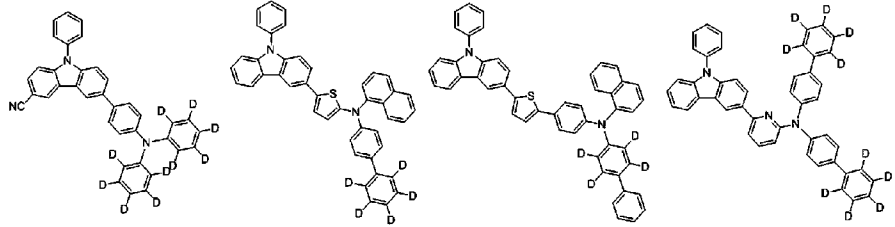
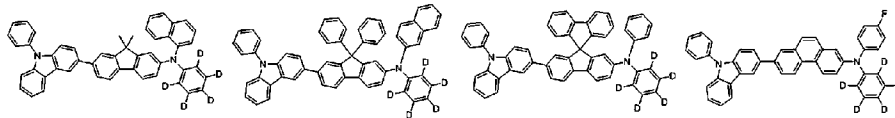
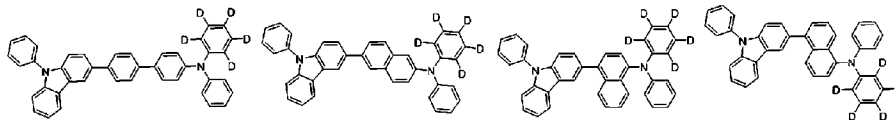
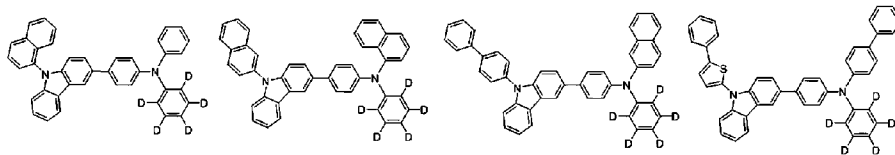
D-27

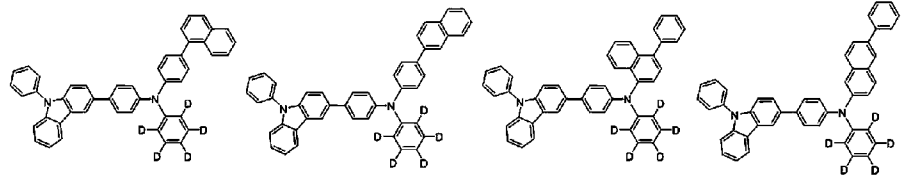
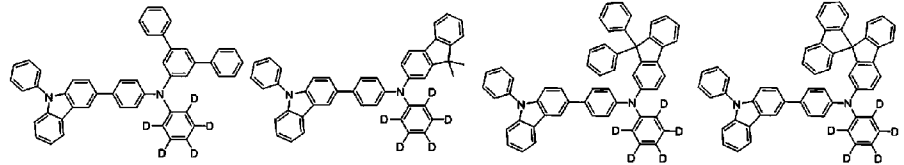
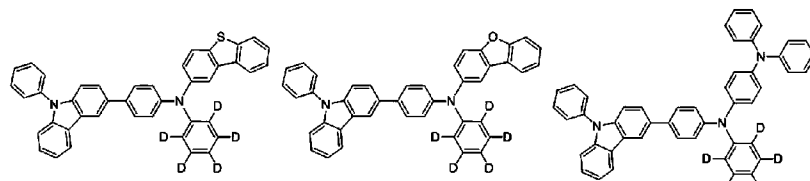
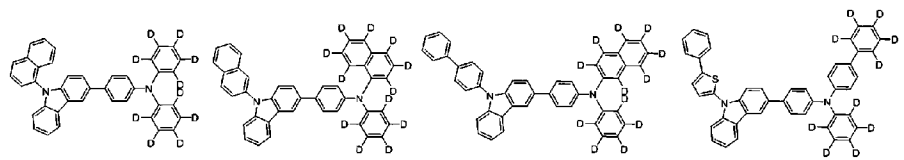
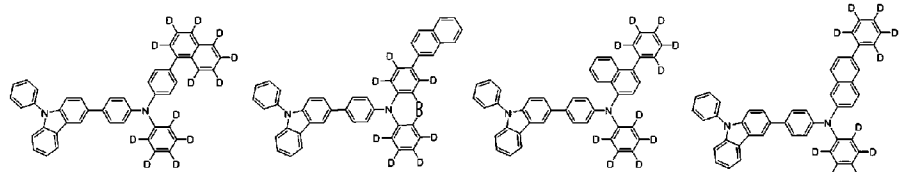
D-28

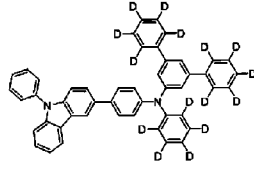
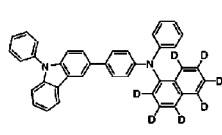
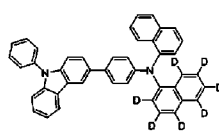
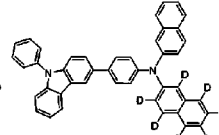
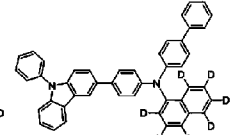
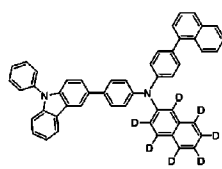
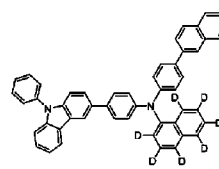
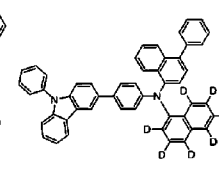
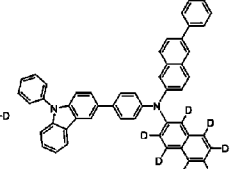
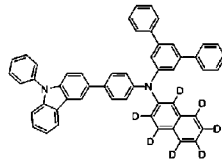
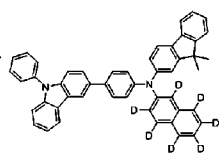
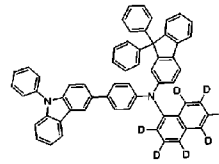
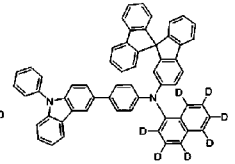
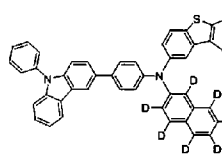
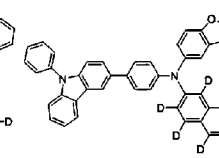
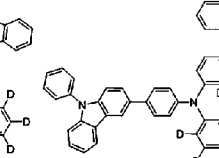
[청구항 7]

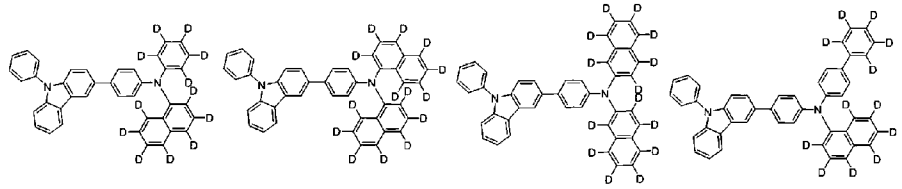
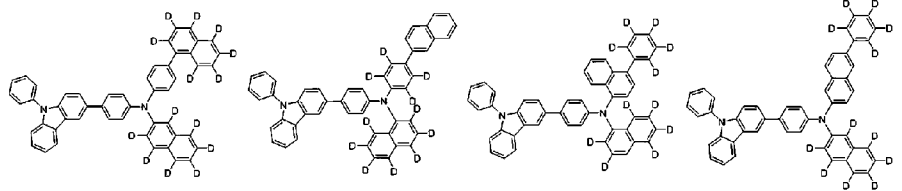
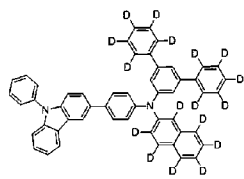
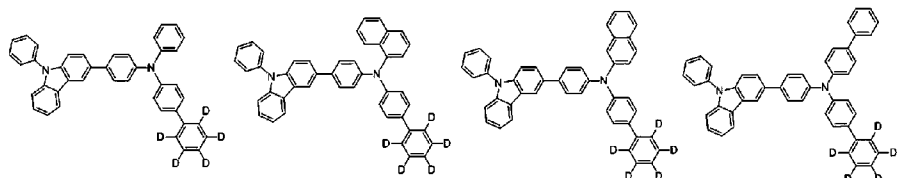
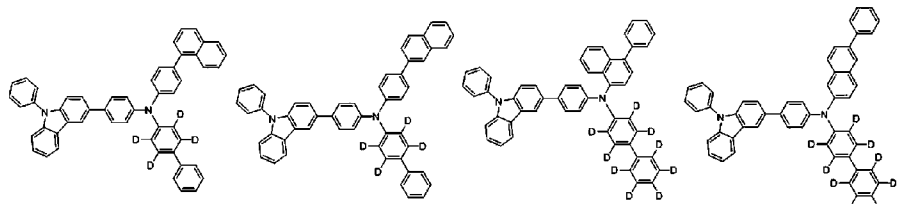
제 1항에 있어서,

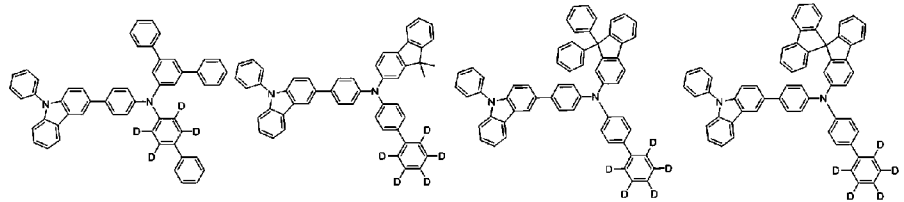
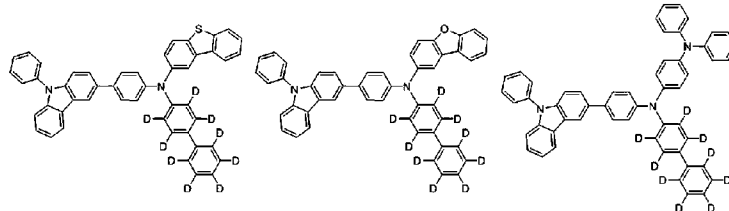
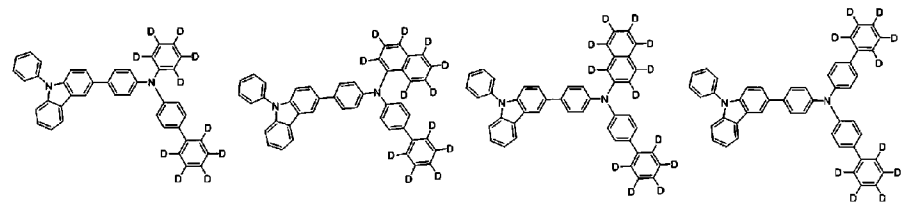
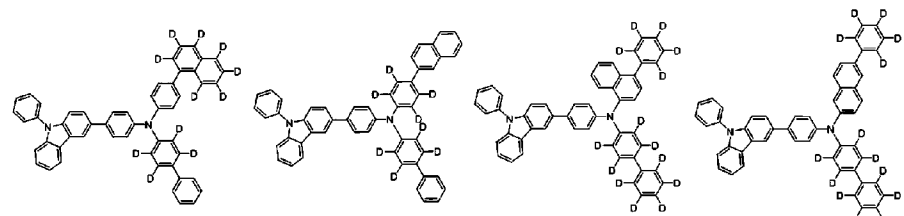
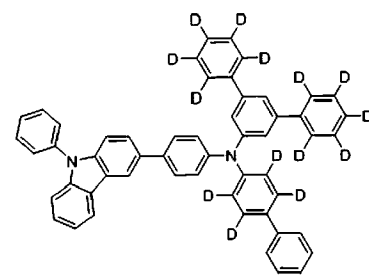
상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 다음으로 구성된 군으로부터 선택되는 것을 특징으로 하는 유기전기소자.

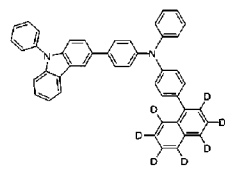
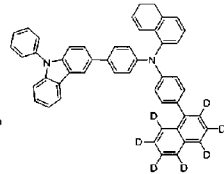
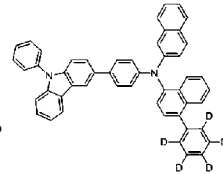
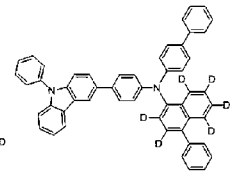
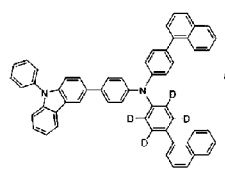
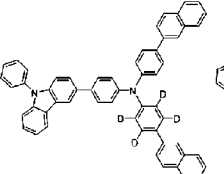
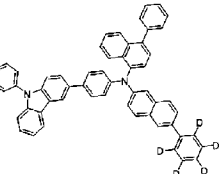
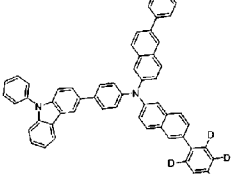
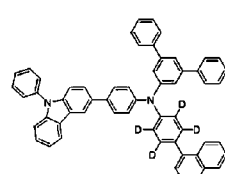
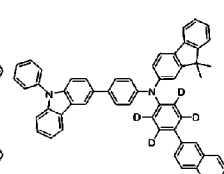
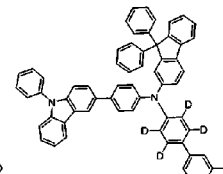
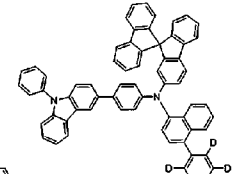
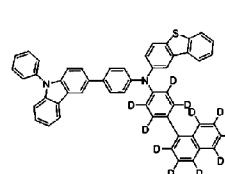
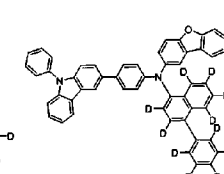
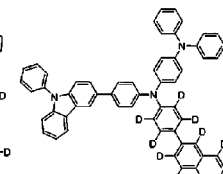
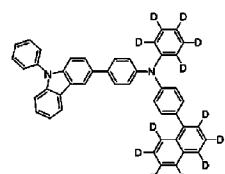
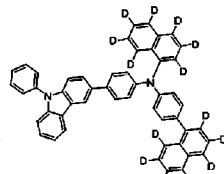
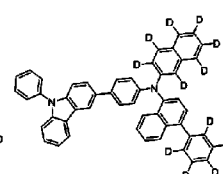
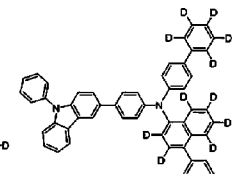
**P-1****P-2****P-3****P-4****P-5****P-6****P-7****P-8****P-9****P-10****P-11****P-12****P-13****P-14****P-15****P-16****P-17****P-18****P-19****P-20**

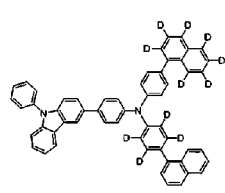
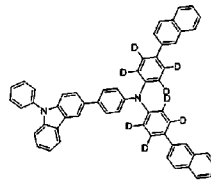
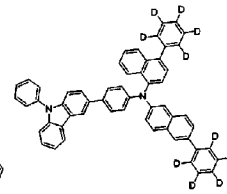
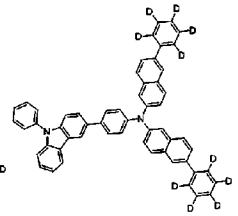
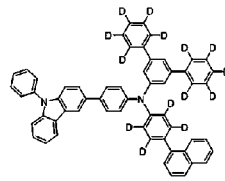
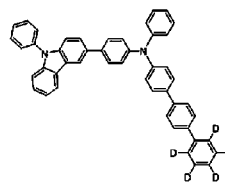
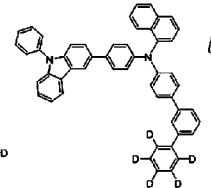
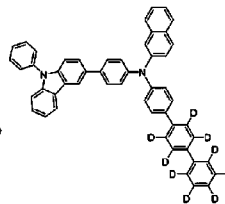
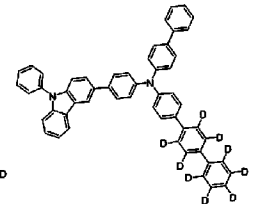
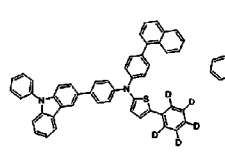
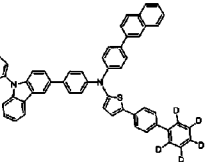
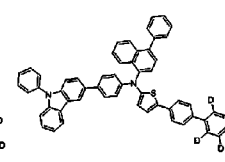
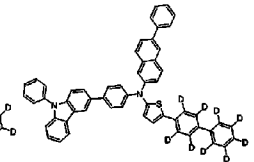
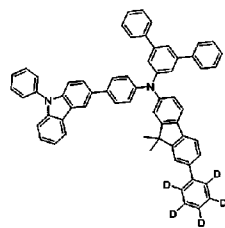
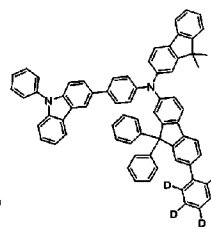
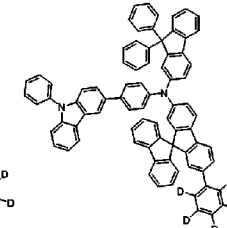
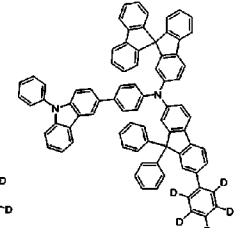
**P-17****P-18****P-19****P-20****P-21****P-22****P-23****P-24****P-25****P-26****P-27****P-28****P-29****P-30****P-31****P-32****P-33****P-34****P-35**

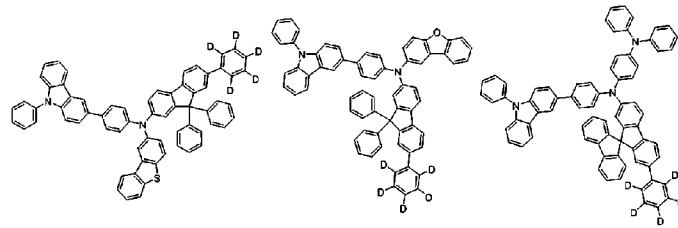
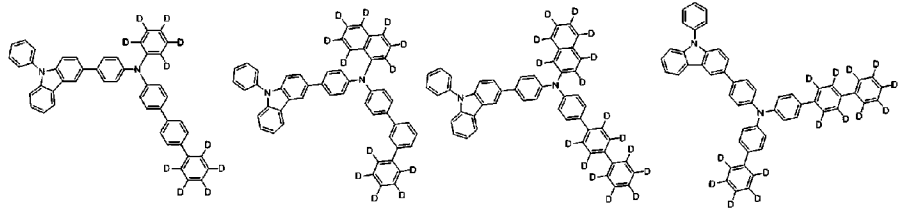
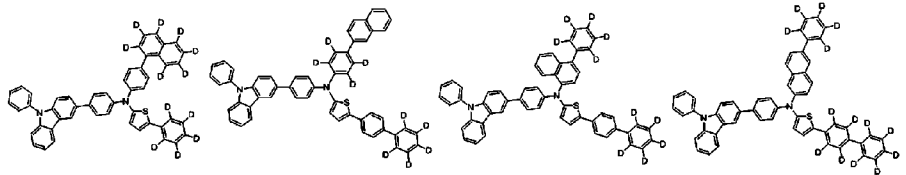
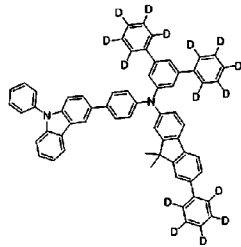
**P-36****P-37****P-38****P-39****P-40****P-41****P-42****P-43****P-44****P-45****P-46****P-47****P-48****P-49****P-50****P-51**

**P-52****P-53****P-54****P-55****P-56****P-57****P-58****P-59****P-60****P-61****P-62****P-63****P-64****P-65****P-66****P-67****P-68**

**P-69****P-70****P-71****P-72****P-73****P-74****P-75****P-76****P-77****P-78****P-79****P-80****P-81****P-82****P-83****P-84**

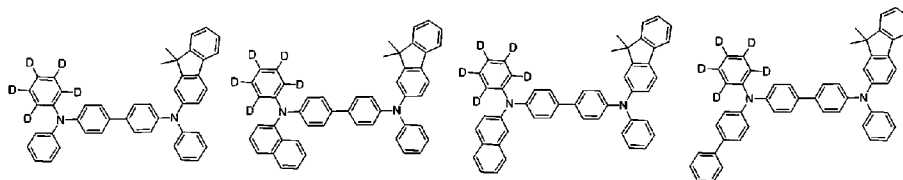
**P-85****P-86****P-87****P-88****P-89****P-90****P-91****P-92****P-93****P-94****P-95****P-96****P-97****P-98****P-99****P-100****P-101****P-102****P-103**

**P-104****P-105****P-106****P-107****P-108****P-109****P-110****P-111****P-112****P-113****P-114****P-115****P-116****P-117****P-118****P-119****P-120**

**P-121****P-122****P-123****P-124****P-125****P-126****P-127****P-128****P-129****P-130****P-131****P-132**

[청구항 8]

제 3항에 있어서,
상기 화학식 2로 표시되는 화합물은 다음으로 구성된 군으로부터
선택되는 것을 특징으로 하는 유기전기소자.

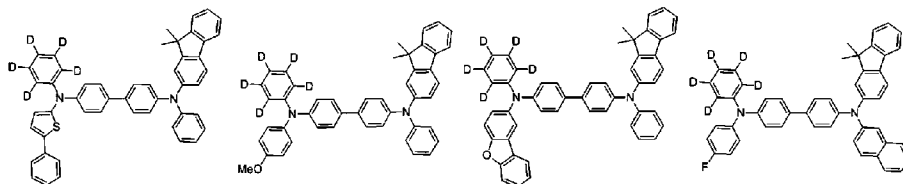


P2-1

P2-2

P2-3

P2-4

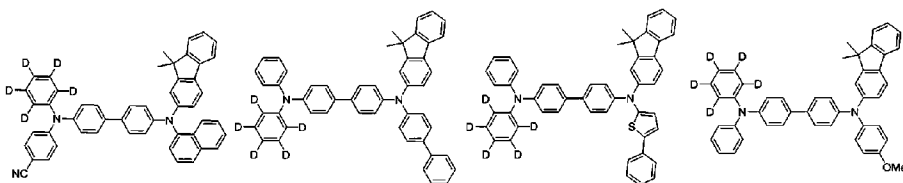


P2-5

P2-6

P2-7

P2-8

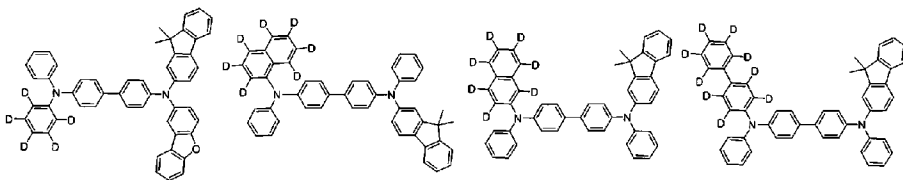


P2-9

P2-10

P2-11

P2-12

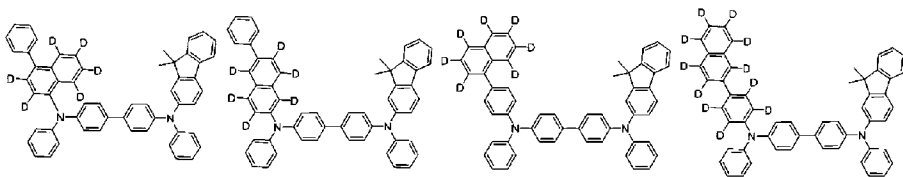


P2-13

P2-14

P2-15

P2-16

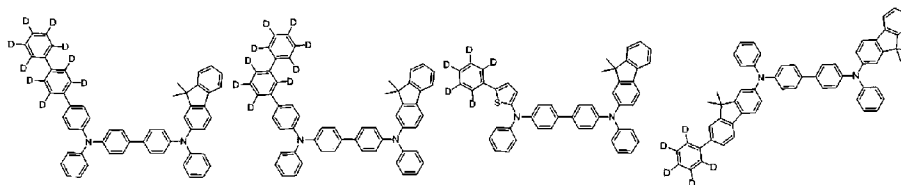
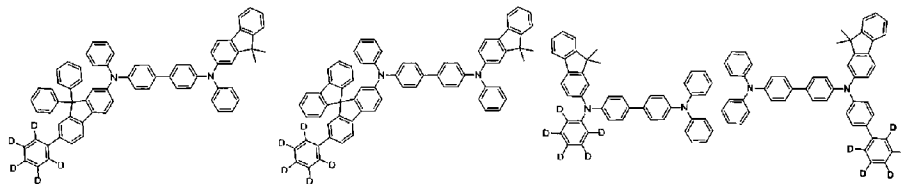
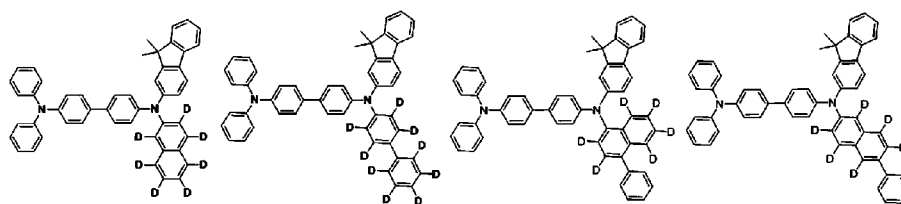
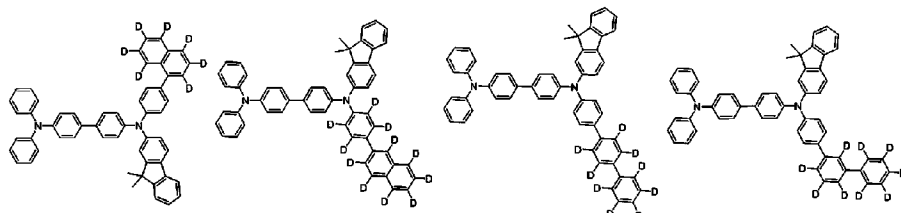
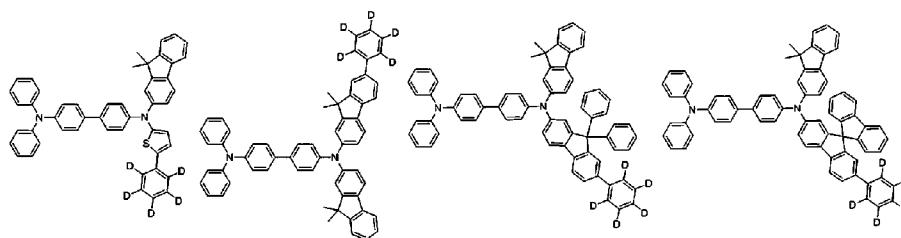
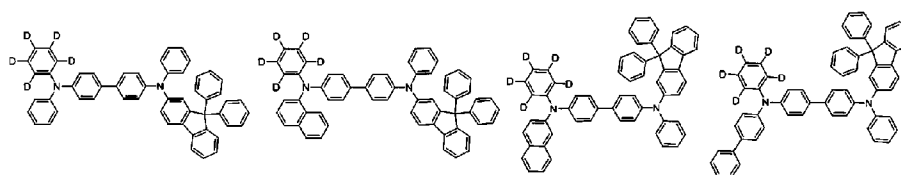


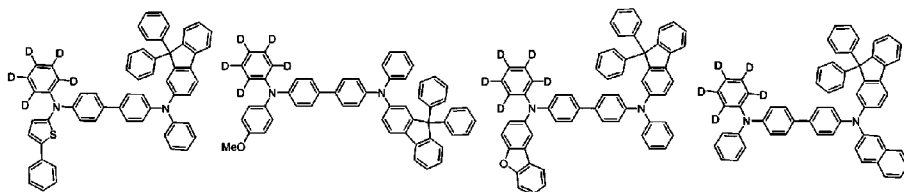
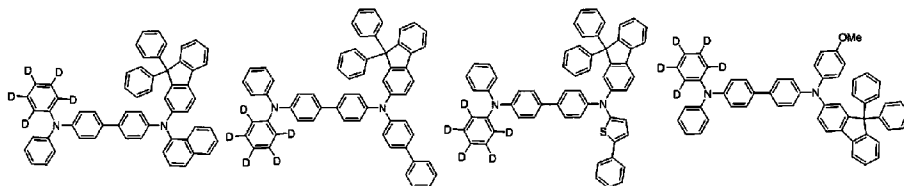
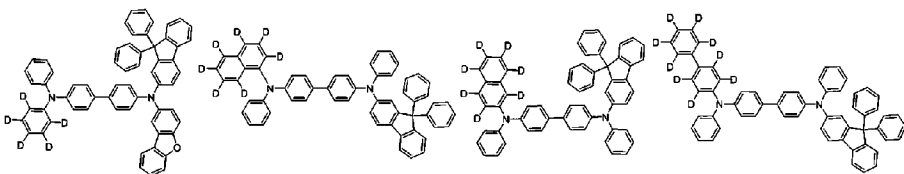
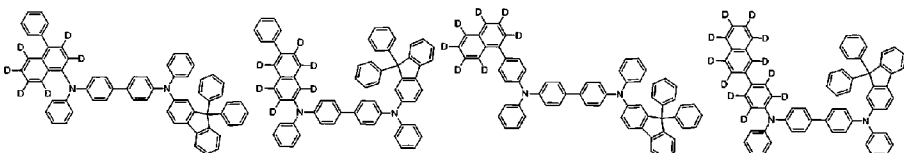
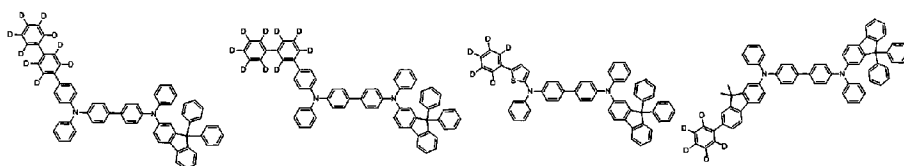
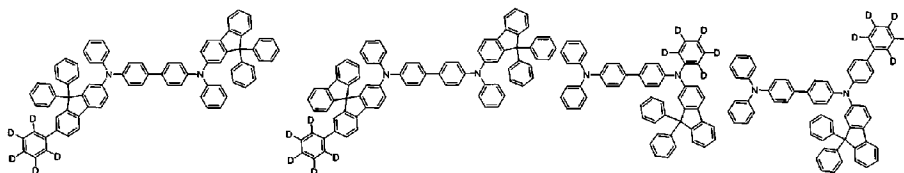
P2-17

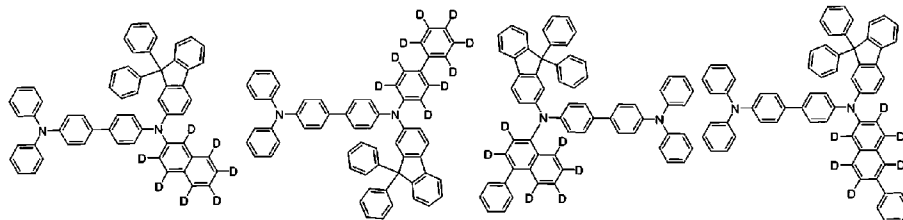
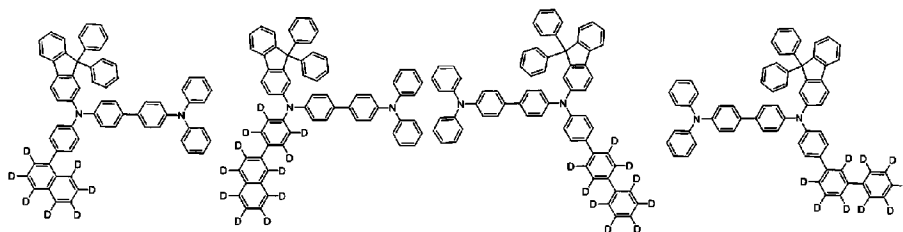
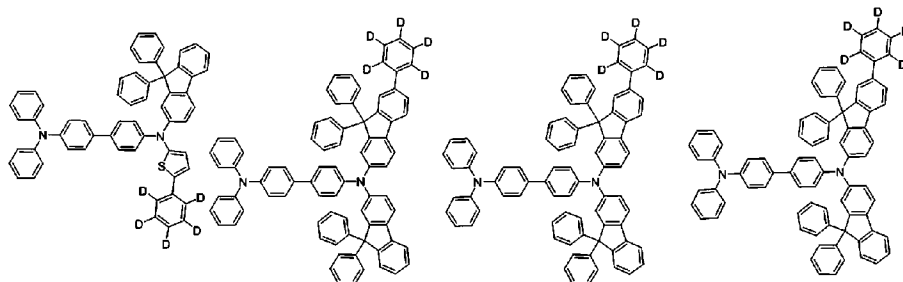
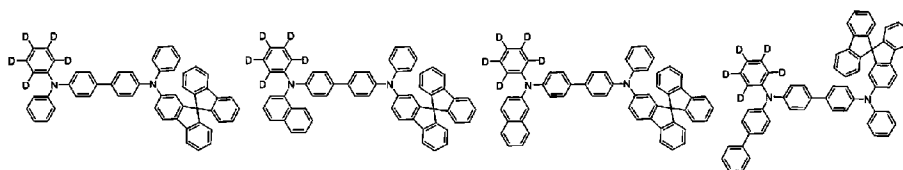
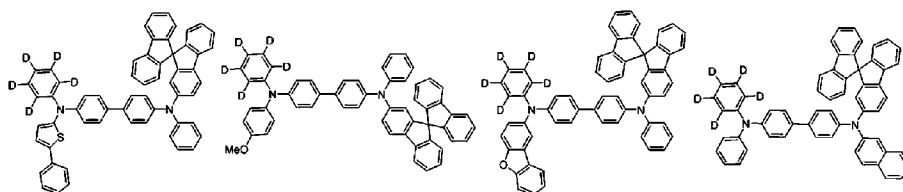
P2-18

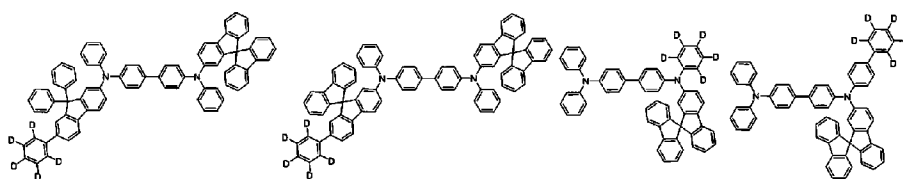
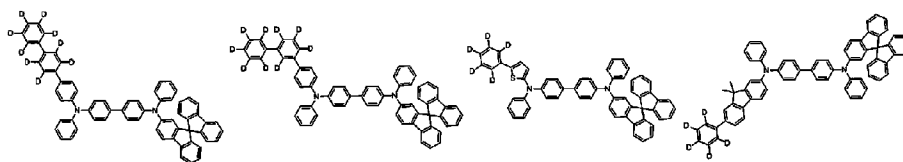
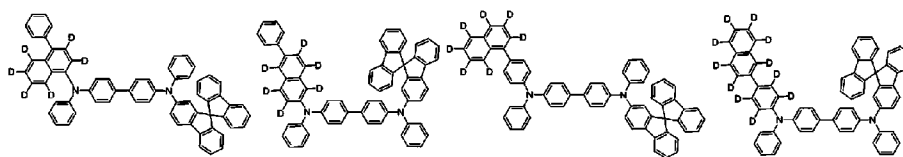
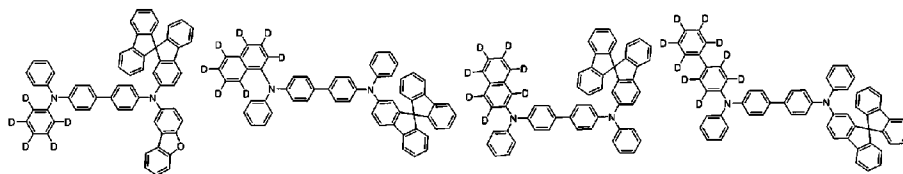
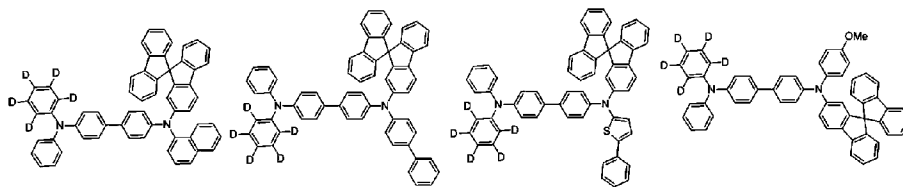
P2-19

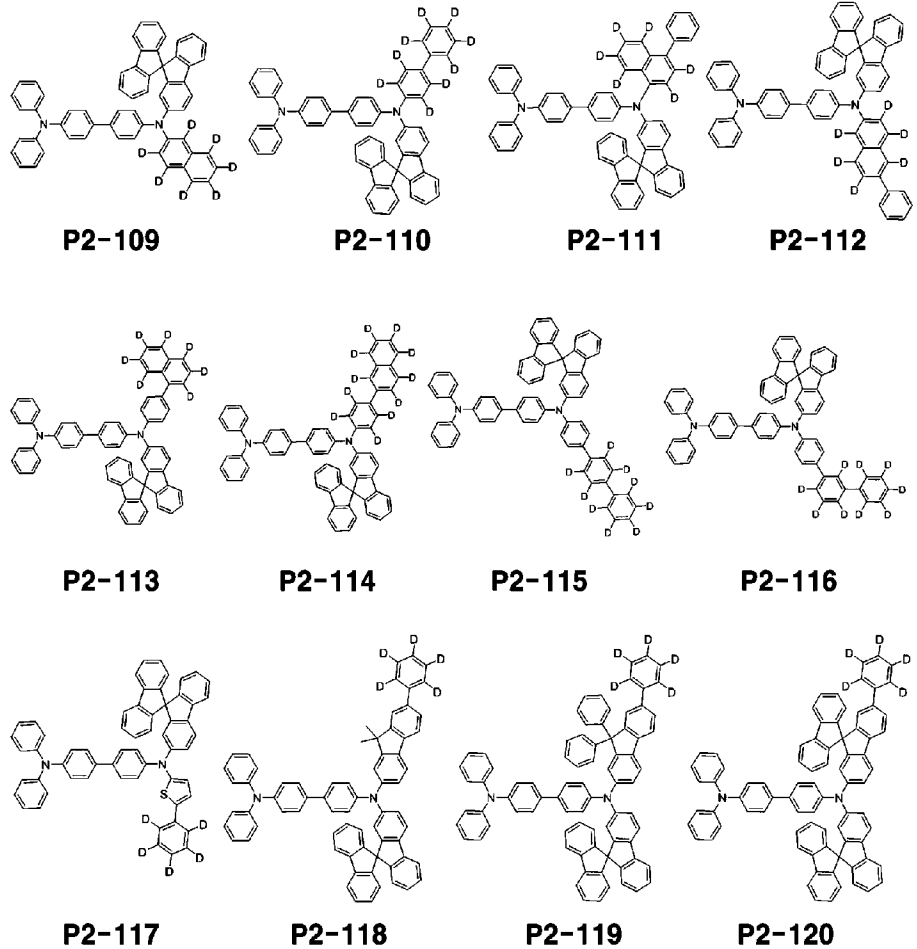
P2-20

**P2-21****P2-22****P2-23****P2-24****P2-25****P2-26****P2-27****P2-28****P2-29****P2-30****P2-31****P2-32****P2-33****P2-34****P2-35****P2-36****P2-37****P2-38****P2-39****P2-40****P2-41****P2-42****P2-43****P2-44**

**P2-45****P2-46****P2-47****P2-48****P2-49****P2-50****P2-51****P2-52****P2-53****P2-54****P2-55****P2-56****P2-57****P2-58****P2-59****P2-60****P2-61****P2-62****P2-63****P2-64****P2-65****P2-66****P2-67****P2-68**

**P2-69****P2-70****P2-71****P2-72****P2-73****P2-74****P2-75****P2-76****P2-77****P2-78****P2-79****P2-80****P2-81****P2-82****P2-83****P2-84****P2-85****P2-86****P2-87****P2-88**





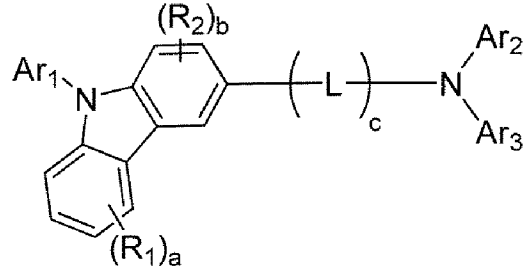
- [청구항 9] 제 1항 내지 제 3항 중 어느 한 항에 있어서,
상기 화합물 또는 혼합물을 용액공정(soluble process)에 의해 상기 유기물층으로 형성하는 것을 특징으로 하는 유기전기소자.
- [청구항 10] 제 1항 내지 제 3항 중 어느 한 항에 있어서,
제 1전극, 상기 유기물층 및 제 2전극이 순차적으로 적층된 유기전기발광소자인 것을 특징으로 하는 유기전기소자.
- [청구항 11] 제 1항 내지 제 3항 중 어느 한 항에 있어서,
상기 유기물층은 발광층, 정공 주입층 및 정공 수송층 중 적어도 일층인 것을 특징으로 하는 유기전기소자.
- [청구항 12] 제 2항 또는 제 3항에 있어서,
상기 혼합물은 어느 하나의 화합물이 혼합물 전체 중량의 90중량% 이하의 범위로 혼합된 것을 특징으로 하는 유기전기소자.
- [청구항 13] 제 1항 내지 제 3항 중 어느 한 항의 유기전기소자를 포함하는 디스플레이장치; 및
상기 디스플레이장치를 구동하는 제어부;를 포함하는 전자장치.
- [청구항 14] 제 12항에 있어서,

상기 유기전기소자는 유기전기발광소자(OLED), 유기태양전지, 유기감광체(OPC), 유기트랜지스터(유기 TFT), 단색 또는 백색 조명용 소자 중 하나인 것을 특징으로 하는 전자장치.

[청구항 15]

하기 화학식 3으로 표시되는 화합물.

<화학식 3>



상기 화학식 3에서,

(1) Ar₁ 내지 Ar₃은 각각 독립적으로 동일하거나 상이하며, 수소, 중수소, 할로젠, 아미노기, 니트릴기, 니트로기, C₁~C₂₀의 알킬기, C₁~C₂₀의 알콕시기, C₁~C₂₀의 알킬아민기, C₁~C₂₀의 알킬티오펜기, C₆~C₂₀의 아릴티오펜기, C₂~C₂₀의 알케닐기, C₂~C₂₀의 알키닐기, C₃~C₂₀의 시클로알킬기, C₆~C₆₀의 아릴기, 중수소로 치환된 C₆~C₂₀의 아릴기, C₈~C₂₀의 아릴알케닐기, C₆~C₂₀의 아릴아민기, 실란기, 붕소기, 게르마늄기 및 C₃~C₂₀의 헤테로고리기로 이루어진 군으로부터 선택되는 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환된 C₆~C₆₀의 아릴기;

수소, 중수소, 할로젠기, C₁~C₂₀의 알킬기, C₂~C₂₀의 알케닐기, C₁~C₂₀의 알콕시기, C₆~C₂₀의 아릴아민기, C₆~C₆₀의 아릴기, 중수소로 치환된 C₆~C₂₀의 아릴기, C₇~C₂₀의 아릴알킬기, C₈~C₂₀의 아릴알케닐기, C₃~C₂₀의 헤테로고리기, 니트릴기 및 아세틸렌기로 이루어진 군에서 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환되고 O, N 및 S 중 적어도 하나를 포함하는 C₂~C₆₀의 헤테로고리기;

수소, 중수소, 할로젠기, 아미노기, 니트릴기, 니트로기, C₁~C₂₀의 알킬기, C₂~C₂₀의 알케닐기, C₁~C₂₀의 알콕시기, C₃~C₃₀의 시클로알킬기, C₂~C₃₀의 헤테로시클로알킬기, C₆~C₆₀의 아릴기, 중수소로 치환된 C₆~C₂₀의 아릴기 및 C₂~C₂₀의 헤테로고리기로 구성된 군에서 선택된 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환된 C₁~C₃₀의 알콕시기;

수소, 중수소, 할로젠기, 아미노기, 니트릴기, 니트로기, C₁~C₂₀의 알킬기, C₂~C₂₀의 알케닐기, C₁~C₂₀의 알콕시기, C₃~C₃₀의 시클로알킬기, C₂~C₃₀의 헤테로시클로알킬기, C₆~C₆₀의 아릴기, 중수소로 치환된 C₆~C₂₀의 아릴기 및 C₂~C₂₀의 헤테로고리기로

구성된 군으로부터 선택된 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환된 C₆~C₃₀아릴옥시기;
 할로젠기, 아미노기, 니트릴기, 니트로기, C₁~C₂₀의 알킬기, C₂~C₂₀의 알케닐기, C₁~C₂₀의 알콕시기, C₃~C₃₀의 시클로알킬기, C₂~C₃₀의 헤테로시클로알킬기, C₆~C₆₀의 아릴기 및 C₂~C₂₀의 헤테로고리기로 구성된 군에서 선택된 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환된 C₆~C₆₀의 아릴아민기; 및
 C₁~C₂₀의 알킬기, C₂~C₂₀의 알케닐기, C₁~C₂₀의 알콕시기, C₆~C₂₀의 아릴기, 중수소로 치환된 C₆~C₂₀의 아릴기, C₇~C₂₀의 아릴알킬기, C₈~C₂₀의 아릴알케닐기, C₃~C₂₀의 헤테로고리기, 니트릴기 및 아세틸렌기로 이루어진 군에서 선택된 치환기로 치환 또는 비치환된 C₁~C₅₀의 알킬기;로 이루어진 군에서 선택되며,
 여기서 Ar₁~Ar₃ 중 적어도 하나는 중수소를 1개 이상 포함하고,
 (2) R₁ 및 R₂는 각각 독립적으로 동일하거나 상이하며, 수소; 중수소; 할로젠; 니트로기; 니트릴기; 아미노기; 수소, 중수소, 할로젠, 아미노기, 니트릴기, 니트로기, C₁~C₂₀의 알킬기, C₁~C₂₀의 알콕시기, C₁~C₂₀의 알킬아민기, C₁~C₂₀의 알킬티오펜기, C₆~C₂₀의 아릴티오펜기, C₂~C₂₀의 알케닐기, C₂~C₂₀의 알키닐기, C₃~C₂₀의 시클로알킬기, C₆~C₆₀의 아릴기, 중수소로 치환된 C₆~C₂₀의 아릴기, C₈~C₂₀의 아릴알케닐기, C₆~C₂₀의 아릴아민기, 실란기, 붕소기, 게르마늄기 및 C₃~C₂₀의 헤테로고리기로 이루어진 군으로부터 선택되는 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환된 C₆~C₆₀의 아릴기;
 수소, 중수소, 할로젠기, C₁~C₂₀의 알킬기, C₂~C₂₀의 알케닐기, C₁~C₂₀의 알콕시기, C₆~C₂₀의 아릴아민기, C₆~C₆₀의 아릴기, 중수소로 치환된 C₆~C₂₀의 아릴기, C₇~C₂₀의 아릴알킬기, C₈~C₂₀의 아릴알케닐기, C₃~C₂₀의 헤테로고리기, 니트릴기 및 아세틸렌기로 이루어진 군에서 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환 되고 O, N 및 S 중 적어도 하나를 포함하는 C₂~C₆₀의 헤테로고리기;
 수소, 중수소, 할로젠기, 아미노기, 니트릴기, 니트로기, C₁~C₂₀의 알킬기, C₂~C₂₀의 알케닐기, C₁~C₂₀의 알콕시기, C₃~C₃₀의 시클로알킬기, C₂~C₃₀의 헤테로시클로알킬기, C₆~C₆₀의 아릴기, 중수소로 치환된 C₆~C₂₀의 아릴기 및 C₂~C₂₀의 헤테로고리기로 구성된 군으로부터 선택된 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환된 C₁~C₃₀의 알콕시기;
 수소, 중수소, 할로젠기, 아미노기, 니트릴기, 니트로기, C₁~C₂₀의 알킬기, C₂~C₂₀의 알케닐기, C₁~C₂₀의 알콕시기, C₃~C₃₀의 시클로알킬기, C₂~C₃₀의 헤테로시클로알킬기, C₆~C₆₀의 아릴기,

중수소로 치환된 C₆~C₂₀의 아릴기 및 C₂~C₂₀의 헤테로고리기로 구성된 군으로부터 선택된 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환된 C₆~C₃₀의 아릴옥시기; 및

C₁~C₂₀의 알킬기, C₂~C₂₀의 알케닐기, C₁~C₂₀의 알콕시기, C₆~C₂₀의 아릴기, 중수소로 치환된 C₆~C₂₀의 아릴기, C₇~C₂₀의 아릴알킬기, C₈~C₂₀의 아릴알케닐기, C₃~C₂₀의 헤테로고리기, 니트릴기 및 아세틸렌기로 이루어진 군에서 선택된 치환기로 치환 또는 비치환된 C₁~C₅₀의 알킬기;로 이루어진 군에서 선택되며, 여기서, R₁ 및 R₂는 인접한 기와 서로 결합하여 지환족, 방향족 또는 헤테로고리를 형성할 수 있고,

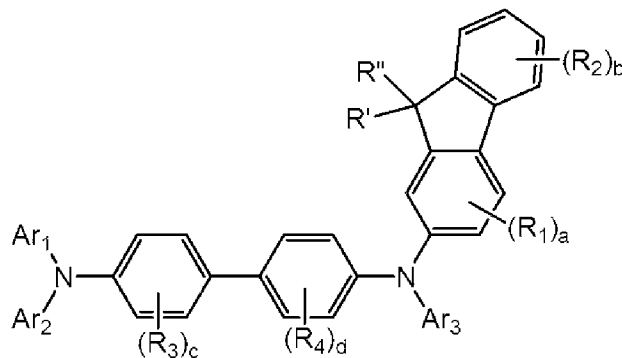
(3) L은 니트로기, 니트릴기, 할로젠기, 알킬기, 알콕시기, 아미노기, 아릴아민기 및 헤테로고리기로 이루어진 군에서 선택되는 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환된 C₆~C₆₀의 아릴렌기; 또는 니트로, 니트릴, 할로젠, 알킬기, 알콕시기, 아미노기 및 아릴기로 이루어진 군에서 선택되는 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환된 C₂~C₆₀의 헤테로고리기이며,

(4) a는 0~4의 정수, b는 0~3의 정수, c는 0~2의 정수이다.

[청구항 16]

제 15항의 상기 화학식 3으로 표시되는 화합물과 하기 화학식 4로 표시되는 화합물이 혼합된 유기전기소자용 조성물.

<화학식 4>



상기 화학식 4에서,

(1) Ar₁ 내지 Ar₃은 상기 화학식 1의 Ar₁ 내지 Ar₃의 치환기 정의와 동일하며,

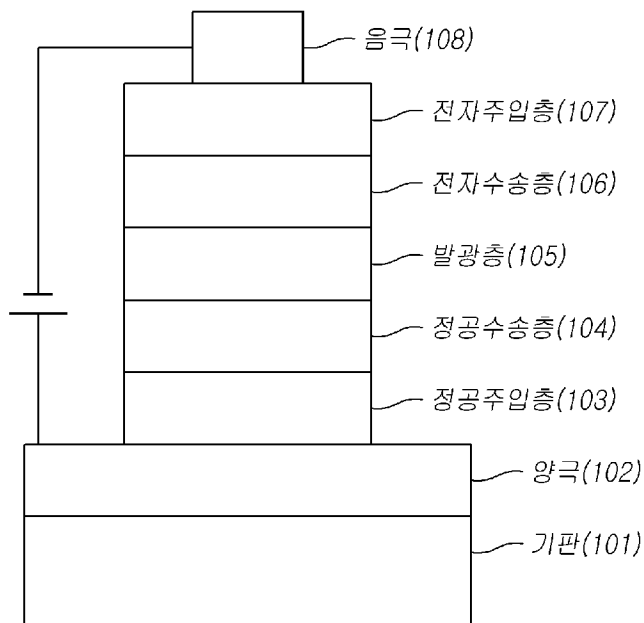
(2) R₁ 내지 R₄는 상기 화학식 1의 R₁ 또는 R₂의 치환기 정의와 동일하며, 여기서, R₁ 내지 R₄는 인접한 기와 서로 결합하여 지환족, 방향족 또는 헤테로고리를 형성할 수 있으며,

(3) R' 및 R''는 각각 독립적으로 동일하거나 상이하며, 수소, 중수소, 할로젠, 아미노기, 니트릴기, 니트로기, C₁~C₂₀의 알킬기, C₁~C₂₀의 알콕시기, C₁~C₂₀의 알킬아민기, C₁~C₂₀의 알킬티오펜기, C

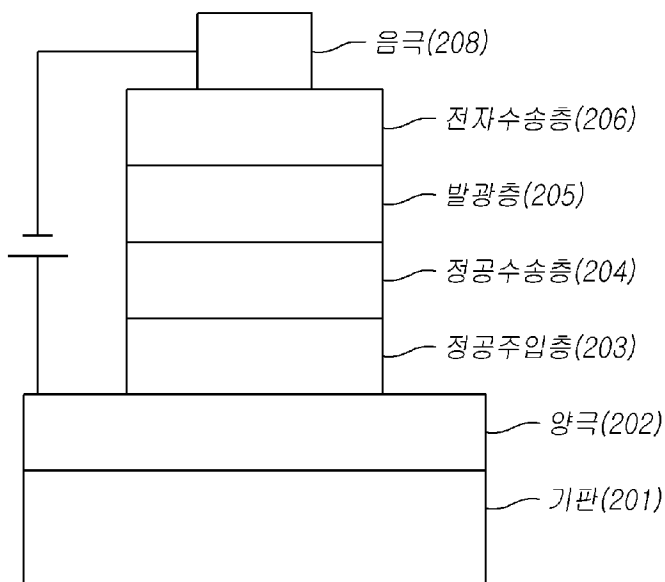
C_6 ~ C_{20} 의 아릴티오펜기, C_2 ~ C_{20} 의 알케닐기, C_2 ~ C_{20} 의 알키닐기, C_3 ~ C_{20} 의 시클로알킬기, C_6 ~ C_{60} 의 아릴기, 중수소로 치환된 C_2 ~ C_{20} 의 아릴기, C_8 ~ C_{20} 의 아릴알케닐기, C_6 ~ C_{20} 의 아릴아민기, 실란기, 붕소기, 게르마늄기, C_3 ~ C_{20} 의 헤테로고리기로 이루어진 군으로부터 선택되는 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환된 C_6 ~ C_{60} 의 아릴기; 또는 C_1 ~ C_{20} 의 알킬기, C_2 ~ C_{20} 의 알케닐기, C_1 ~ C_{20} 의 알콕시기, C_6 ~ C_{20} 의 아릴기, 중수소로 치환된 C_2 ~ C_{20} 의 아릴기, C_7 ~ C_{20} 의 아릴알킬기, C_8 ~ C_{20} 의 아릴알케닐기, C_3 ~ C_{20} 의 헤테로고리기, 니트릴기 및 아세틸렌기로 이루어진 군에서 선택된 치환기로 치환 또는 비치환된 C_1 ~ C_{50} 의 알킬기이며, 여기서, R' 및 R"는 서로 결합하여 지환족, 방향족, 헤테로고리, 또는 스피로화합물을 형성할 수 있으며,

(4) a는 1 내지 3의 정수이고, b, c 및 d는 각각 1 내지 4의 정수이다.

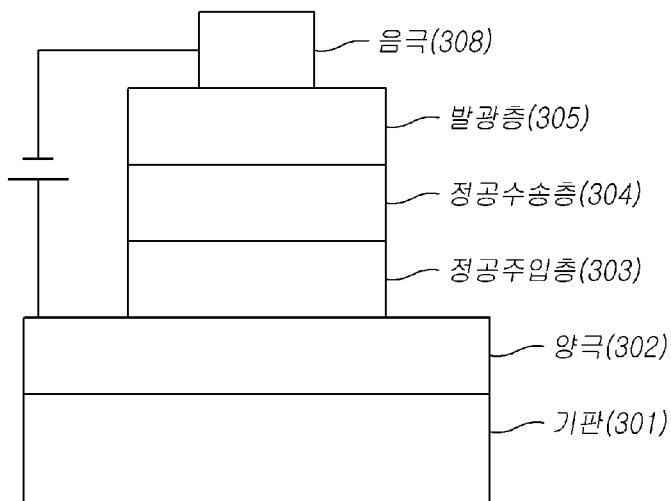
[Fig. 1]



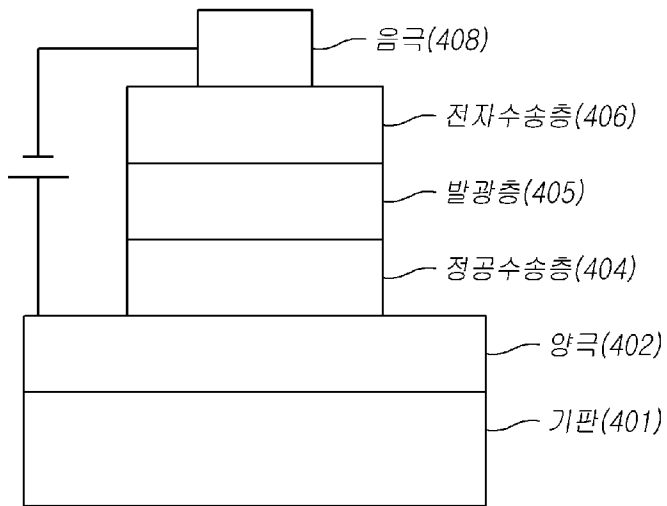
[Fig. 2]



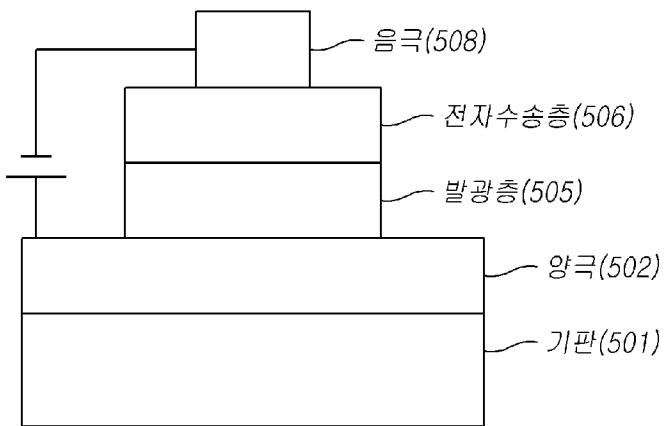
[Fig. 3]



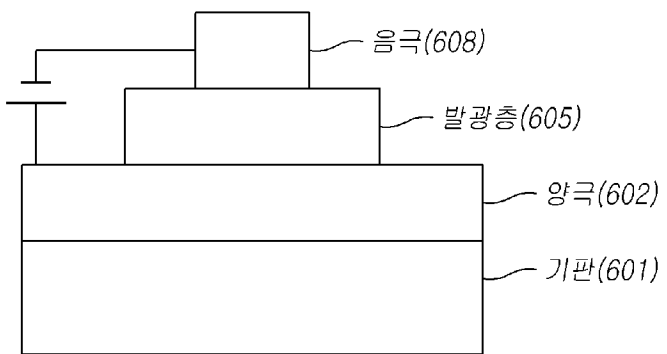
[Fig. 4]



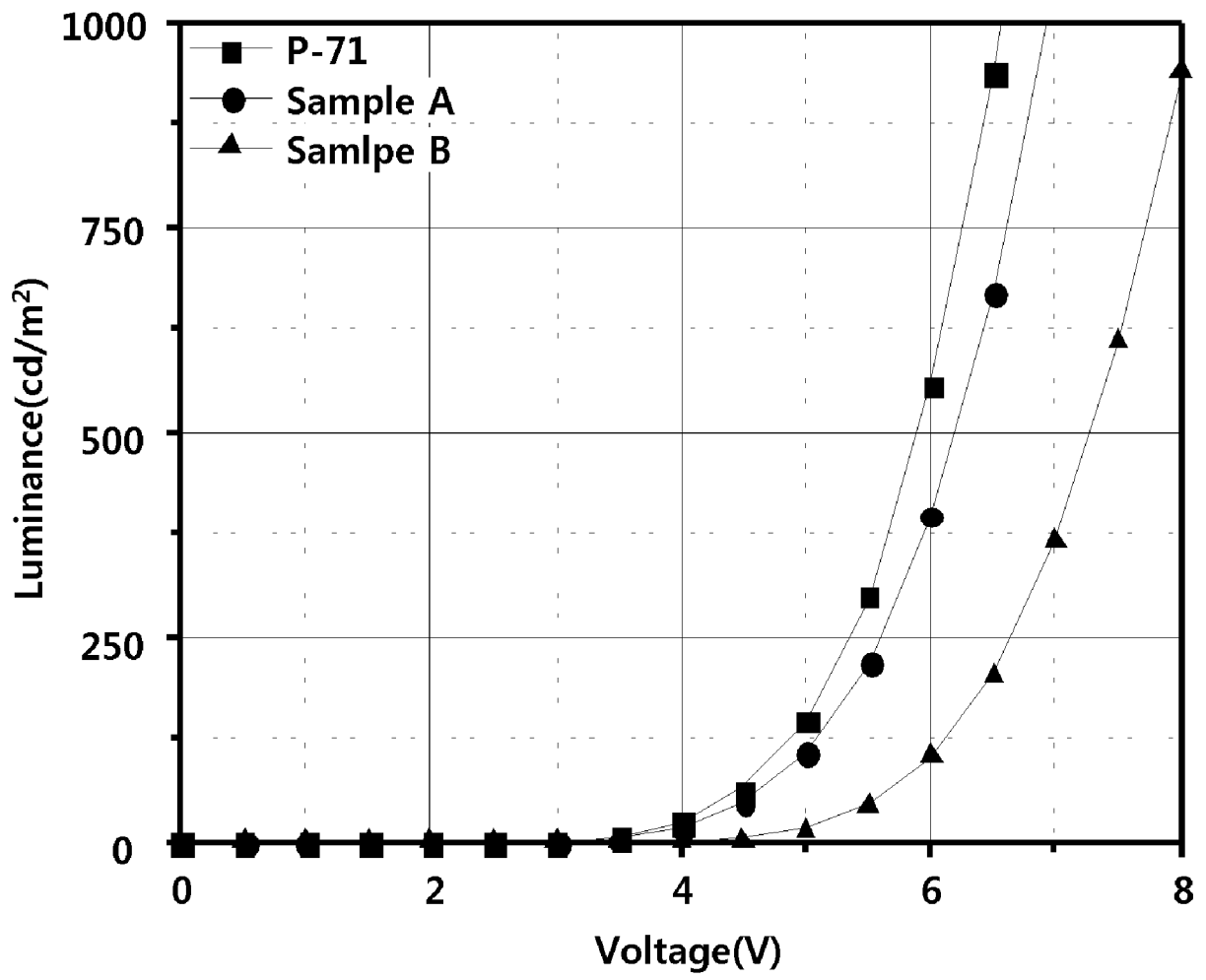
[Fig. 5]



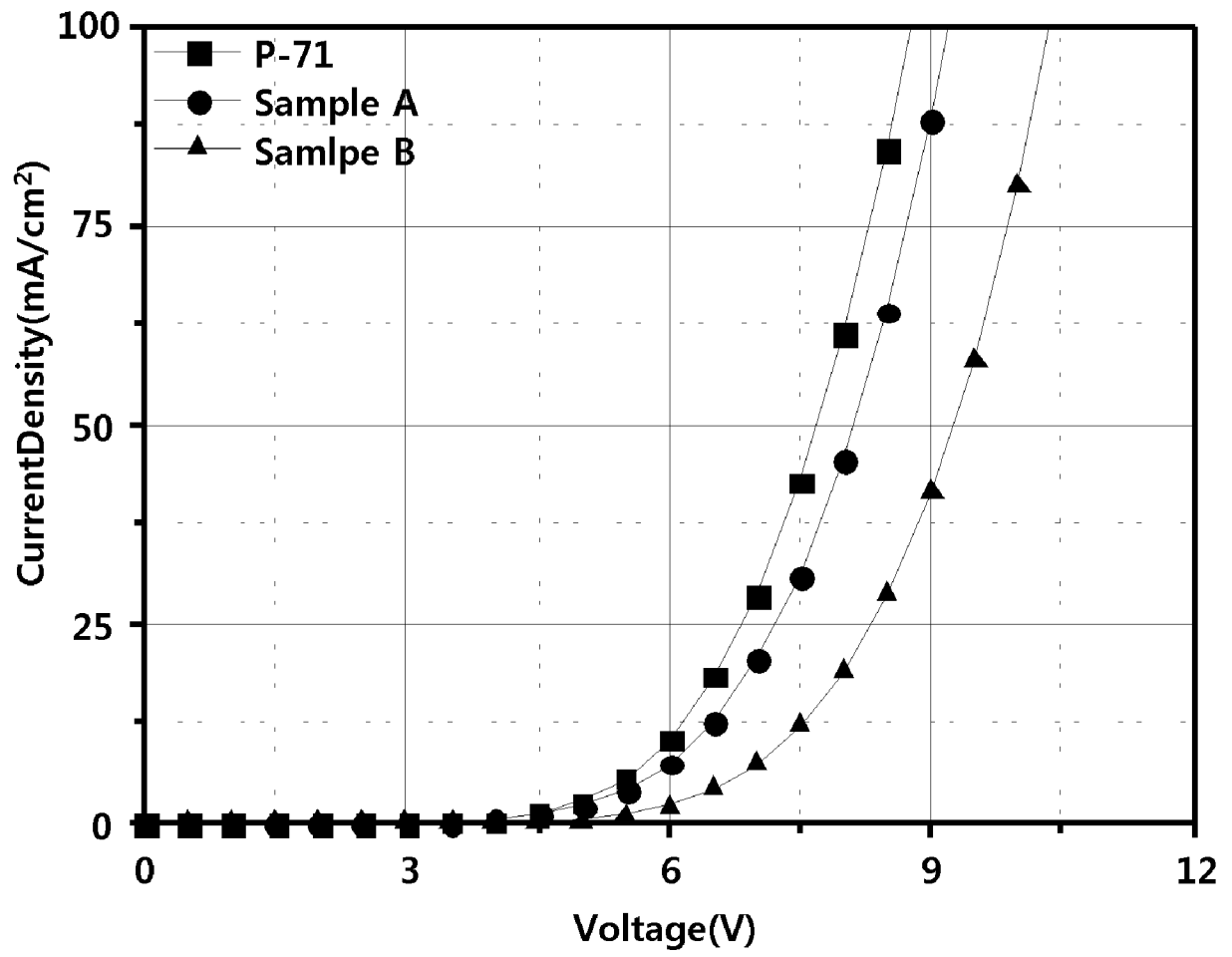
[Fig. 6]



[Fig. 7]



[Fig. 8]



[Fig. 9]

