



**(19) 대한민국특허청(KR)**  
**(12) 등록특허공보(B1)**

(45) 공고일자 2019년01월11일  
 (11) 등록번호 10-1937259  
 (24) 등록일자 2019년01월04일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)  
*CO9K 11/06* (2006.01) *H01L 51/50* (2006.01)  
 (21) 출원번호 10-2011-0117161  
 (22) 출원일자 2011년11월10일  
 심사청구일자 2016년11월09일  
 (65) 공개번호 10-2013-0051807  
 (43) 공개일자 2013년05월21일  
 (56) 선행기술조사문헌  
 KR1020060111048 A\*  
 KR1020100118258 A\*  
 JP2006306870 A\*  
 \*는 심사관에 의하여 인용된 문헌

(73) 특허권자  
**삼성디스플레이 주식회사**  
 경기도 용인시 기흥구 삼성로 1 (농서동)  
 (72) 발명자  
**한상현**  
 경기도 용인시 기흥구 삼성2로 95 (농서동)  
**황석환**  
 경기도 용인시 기흥구 삼성2로 95 (농서동)  
 (뒷면에 계속)  
 (74) 대리인  
**리엔목특허법인**

전체 청구항 수 : 총 11 항

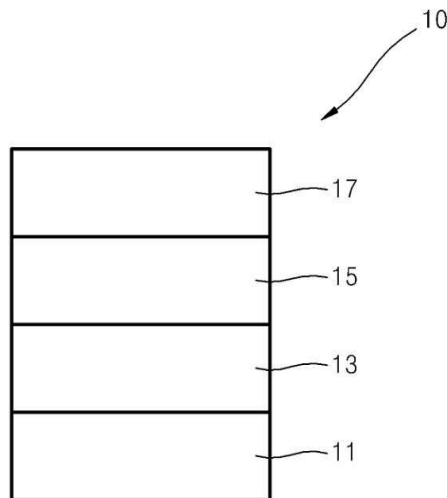
심사관 : 송이화

(54) 발명의 명칭 **스티릴계 화합물, 스티릴계 화합물-함유 조성물 및 이를 포함한 유기 발광 소자**

**(57) 요약**

스티릴계 화합물, 스티릴계 화합물-함유 조성물 및 이를 포함한 유기 발광 소자가 개시된다.

**대표도** - 도1



(72) 발명자

**김영국**

경기도 용인시 기흥구 삼성2로 95 (농서동)

**정혜진**

경기도 용인시 기흥구 삼성2로 95 (농서동)

**임진오**

경기도 용인시 기흥구 삼성2로 95 (농서동)

**김수연**

경기도 용인시 기흥구 삼성2로 95 (농서동)

**신대엽**

경기도 용인시 기흥구 삼성2로 95 (농서동)

**이중혁**

경기도 용인시 기흥구 삼성2로 95 (농서동)

**명세서**

**청구범위**

청구항 1

삭제

청구항 2

삭제

청구항 3

삭제

청구항 4

삭제

청구항 5

삭제

청구항 6

삭제

청구항 7

삭제

청구항 8

삭제

청구항 9

삭제

청구항 10

삭제

청구항 11

삭제

청구항 12

삭제

청구항 13

삭제

청구항 14

삭제

청구항 15

삭제

청구항 16

삭제

청구항 17

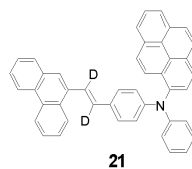
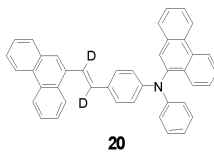
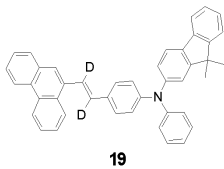
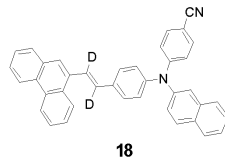
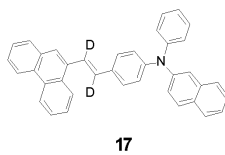
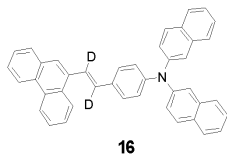
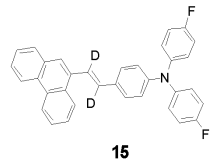
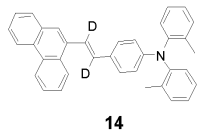
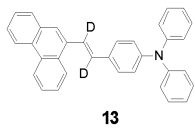
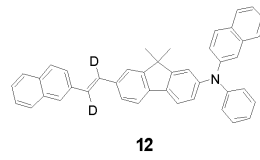
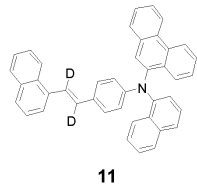
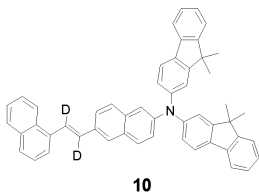
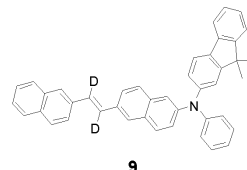
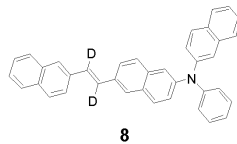
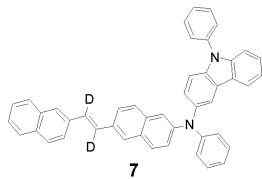
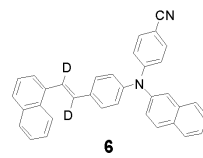
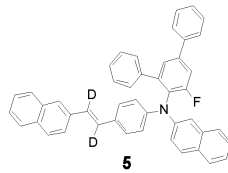
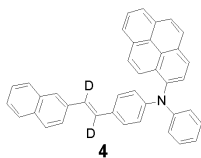
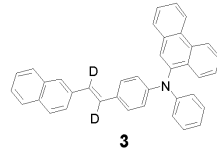
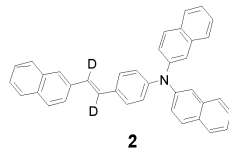
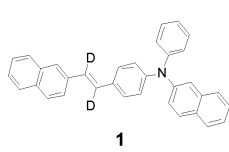
삭제

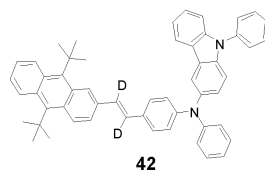
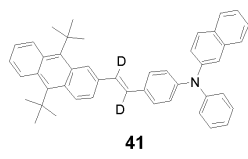
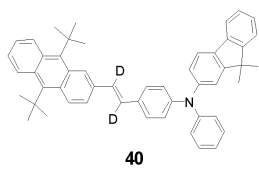
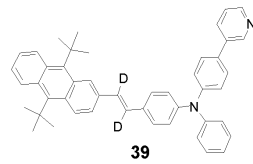
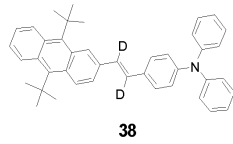
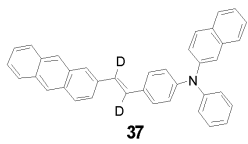
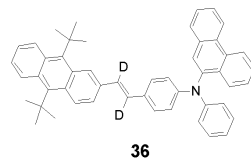
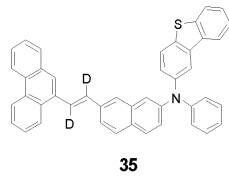
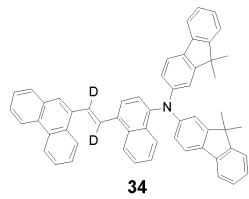
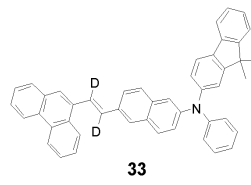
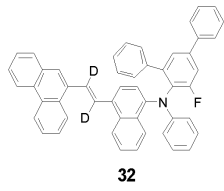
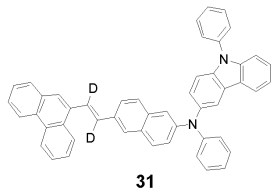
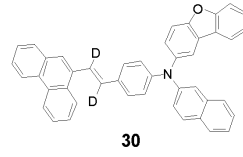
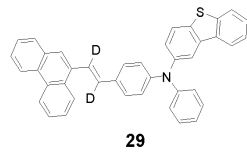
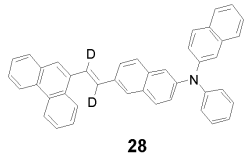
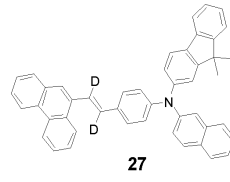
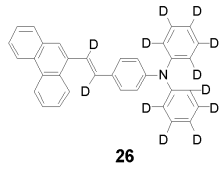
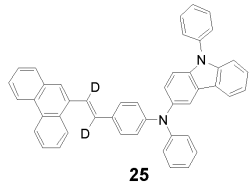
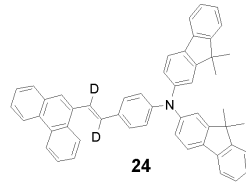
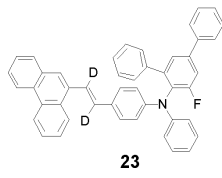
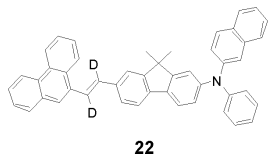
청구항 18

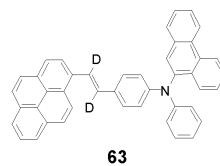
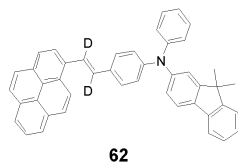
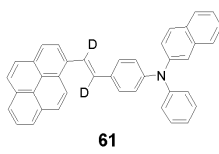
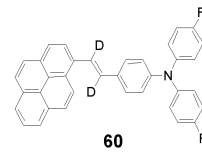
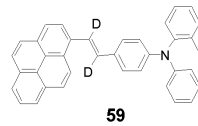
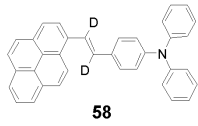
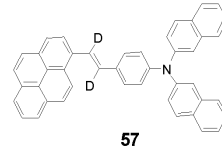
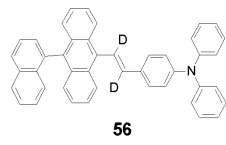
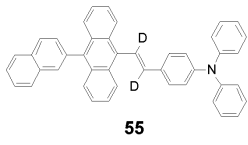
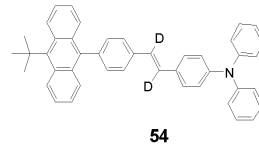
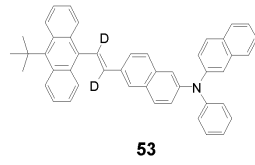
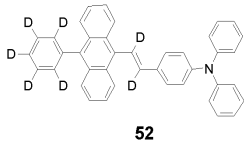
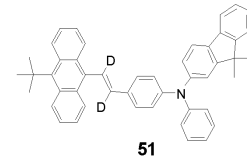
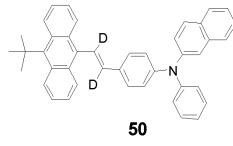
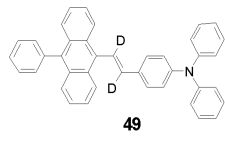
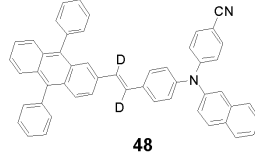
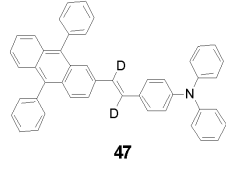
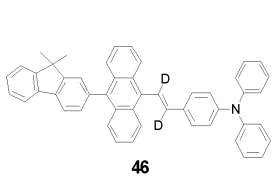
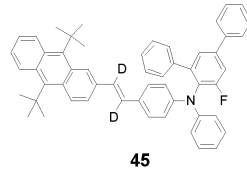
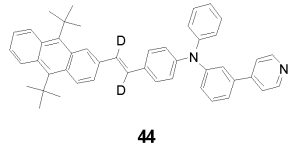
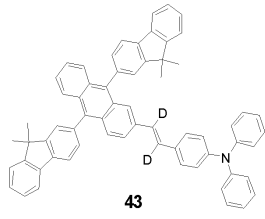
삭제

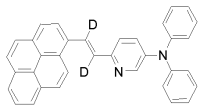
청구항 19

하기 화합물 1 내지 95 및 101 내지 182 중 하나인, 스티릴계 화합물:

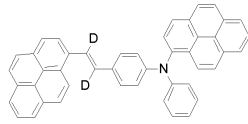




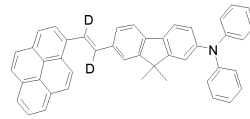




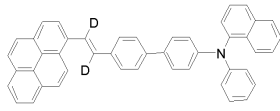
64



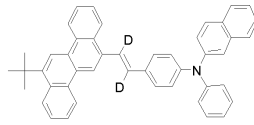
65



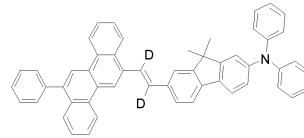
66



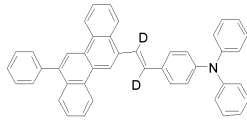
67



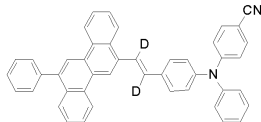
68



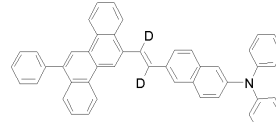
69



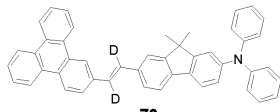
70



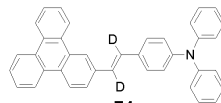
71



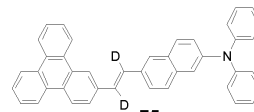
72



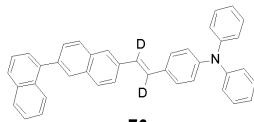
73



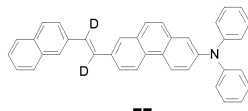
74



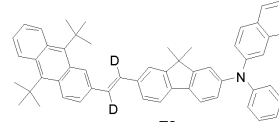
75



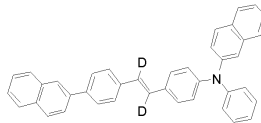
76



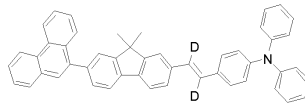
77



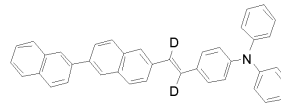
78



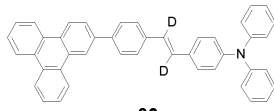
79



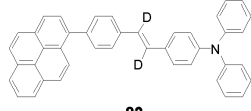
80



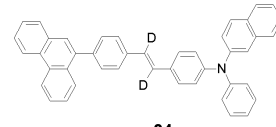
81



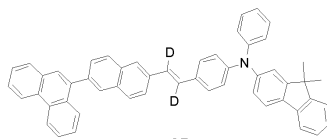
82



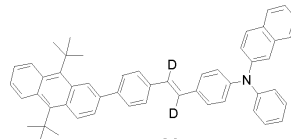
83



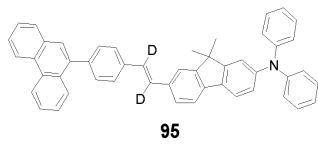
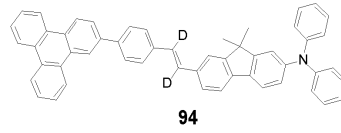
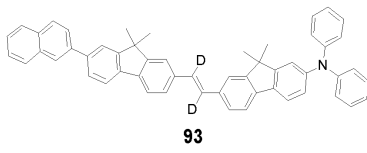
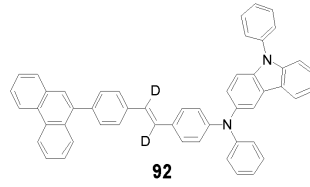
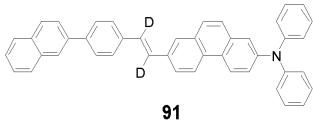
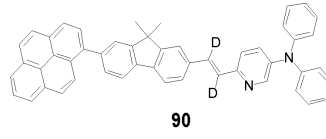
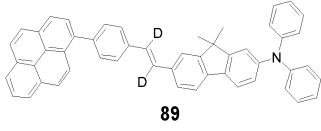
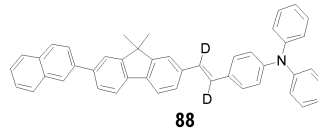
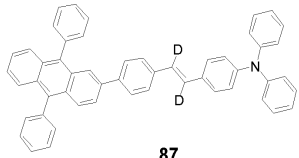
84

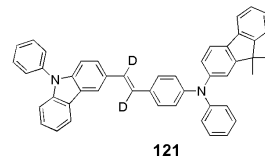
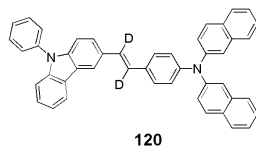
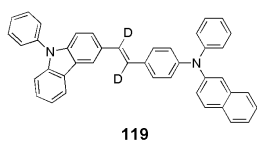
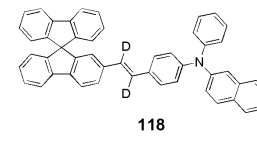
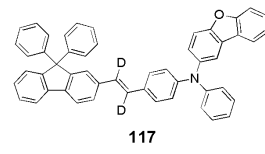
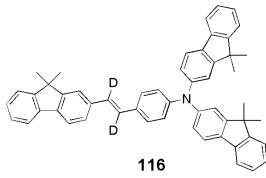
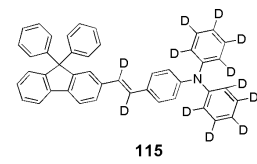
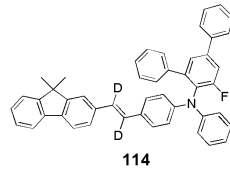
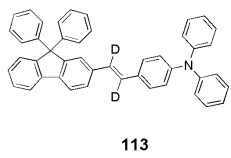
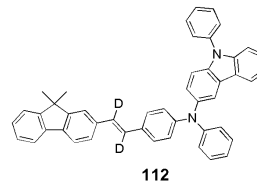
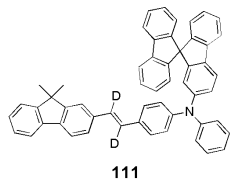
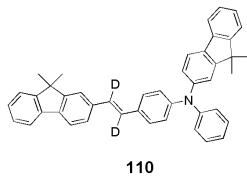
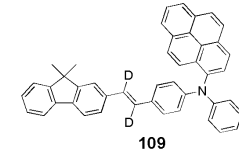
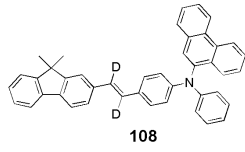
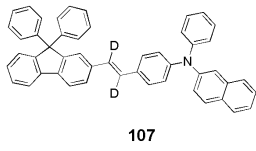
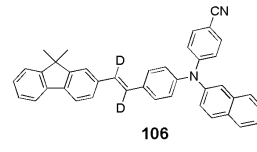
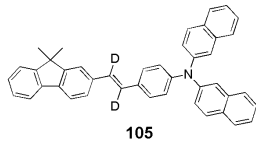
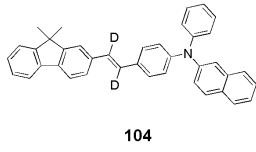
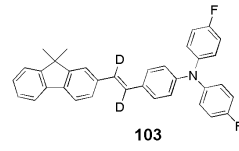
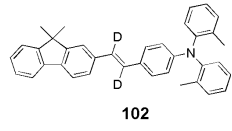
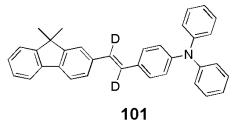


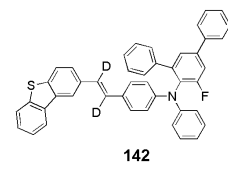
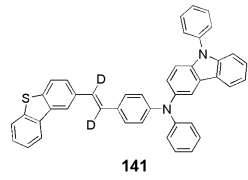
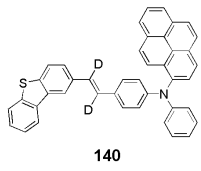
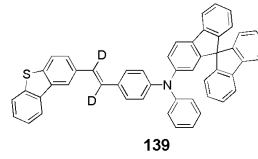
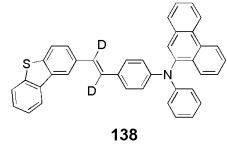
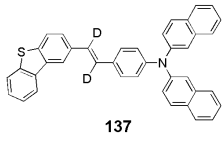
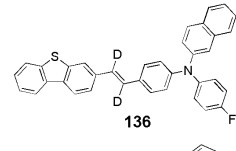
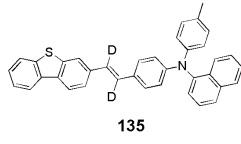
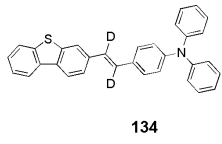
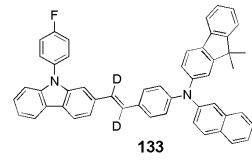
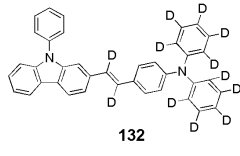
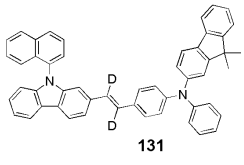
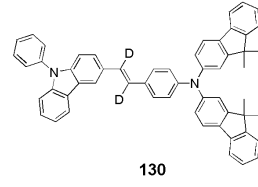
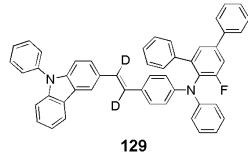
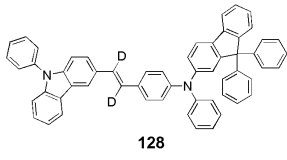
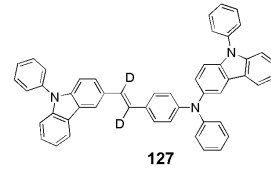
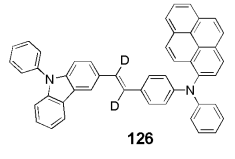
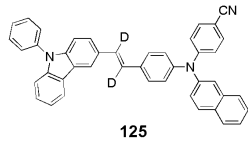
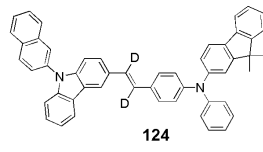
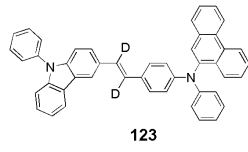
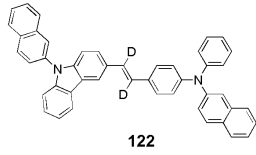
85

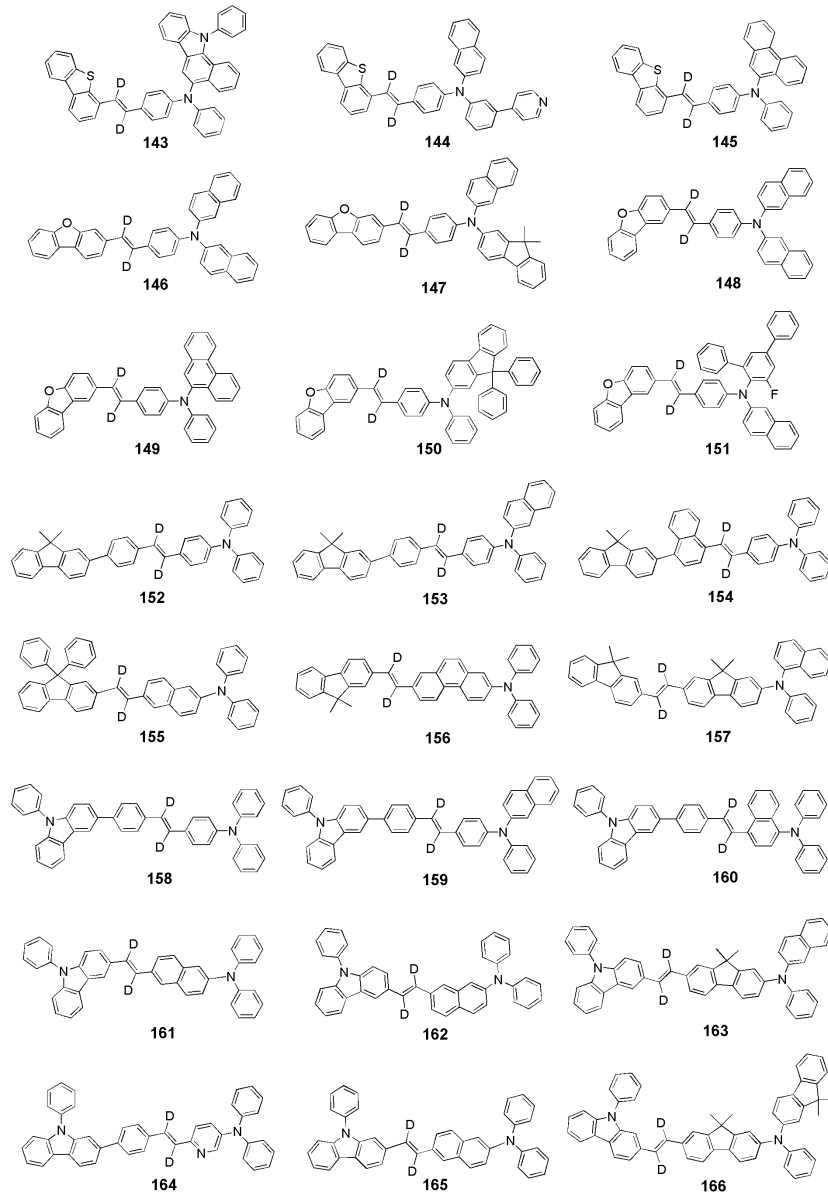


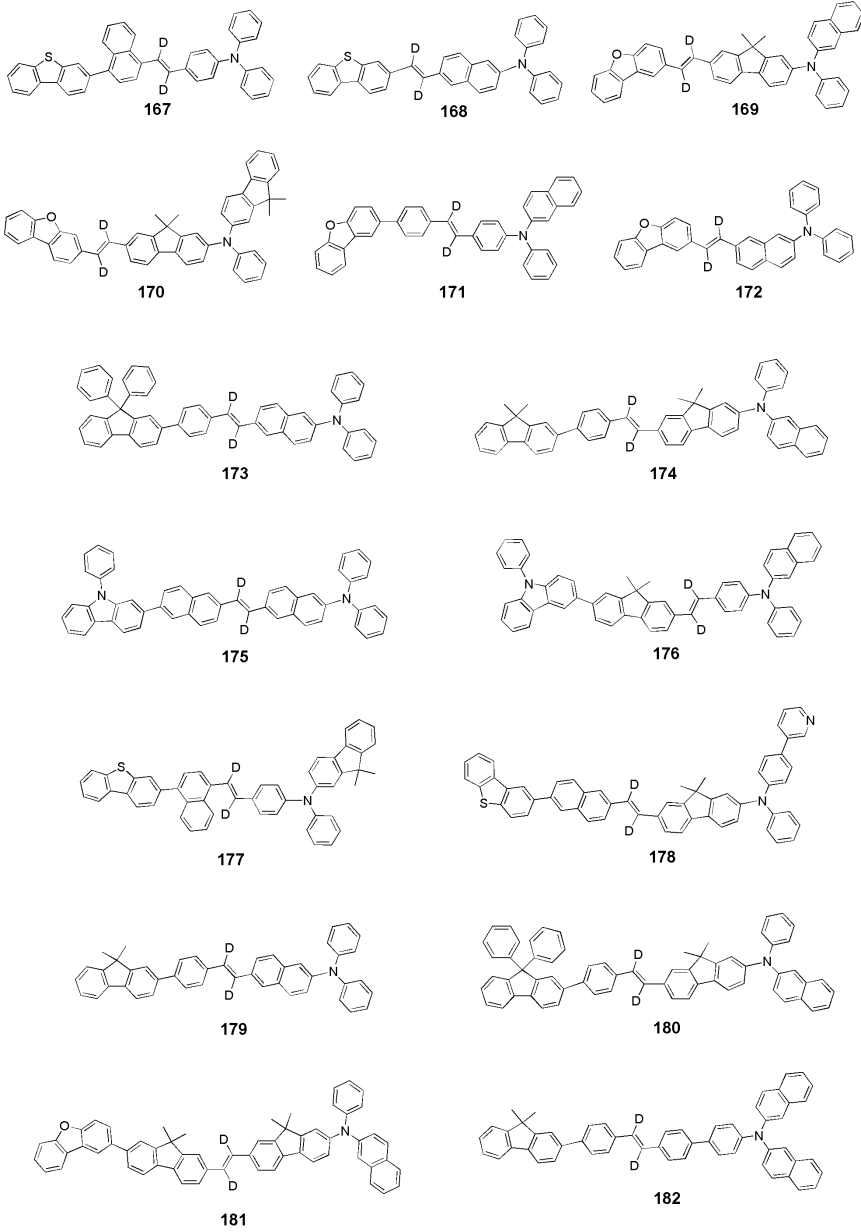
86











**청구항 20**

삭제

**청구항 21**

삭제

**청구항 22**

삭제

**청구항 23**

제1전극; 상기 제1전극에 대향된 제2전극; 및 상기 제1전극과 상기 제2전극 사이에 개재된 유기층;을 포함하고, 상기 유기층이 제19항의 스티릴계 화합물을 1종 이상 포함한, 유기 발광 소자.

**청구항 24**

제23항에 있어서,

상기 유기층이, 정공 주입층, 정공 수송층, 정공 주입 기능 및 정공 수송 기능을 동시에 갖는 기능층, 버퍼층,

전자 저지층, 발광층, 정공 저지층, 전자 수송층, 전자 주입층 및 전자 주입 및 전자 수송 기능을 동시에 갖는 기능층 중 적어도 하나를 포함한, 유기 발광 소자.

**청구항 25**

제24항에 있어서,

상기 유기층이 발광층을 포함하고, 상기 발광층에 상기 스티릴계 화합물이 포함되어 있는, 유기 발광 소자.

**청구항 26**

제25항에 있어서,

상기 발광층에 포함된 상기 스티릴계 화합물이 형광 도펀트의 역할을 하는, 유기 발광 소자.

**청구항 27**

제25항에 있어서,

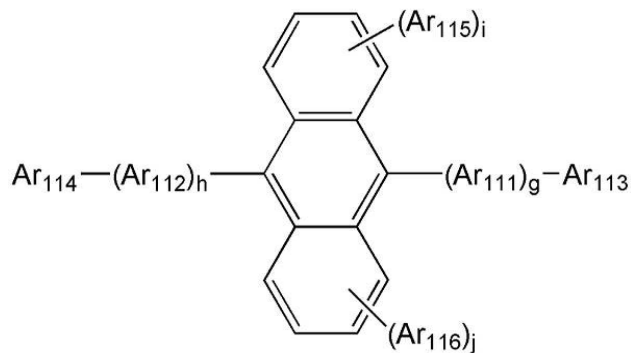
상기 발광층이 청색광을 방출하는, 유기 발광 소자.

**청구항 28**

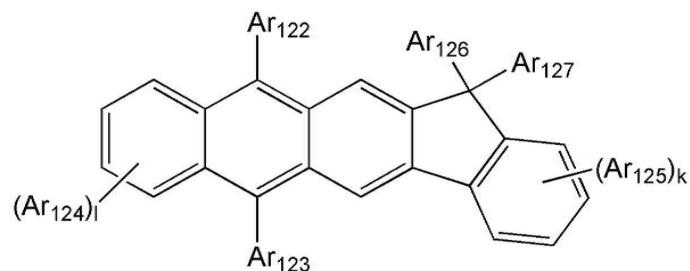
제26항에 있어서,

상기 발광층이 호스트로서 하기 화학식 400으로 표시되는 안트라센계 화합물 및 하기 화학식 401로 표시되는 안트라센계 화합물 중 하나 이상을 더 포함하는, 유기 발광 소자:

<화학식 400>



<화학식 401>



상기 화학식 400 및 401 중,

$Ar_{111}$  및  $Ar_{112}$ 는 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된  $C_5-C_{60}$ 아릴렌기이고;

$Ar_{113}$  내지  $Ar_{116}$  및  $Ar_{122}$  내지  $Ar_{125}$ 는 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된  $C_1-C_{10}$ 알킬기 또는 치환 또는 비치환된  $C_5-C_{60}$ 아릴기이고;

$Ar_{126}$  및  $Ar_{127}$ 은 서로 독립적으로,  $C_1-C_{10}$ 알킬기이고;

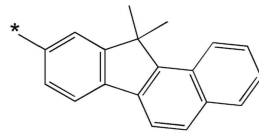
g, h, i, j, k 및 l은 서로 독립적으로 0 내지 4의 정수이다.

**청구항 29**

제28항에 있어서,

상기 Ar<sub>111</sub> 및 Ar<sub>112</sub>은 서로 독립적으로, 페닐렌기, 나프틸렌기, 페난트레닐렌기 또는 파이레닐렌기; 또는 페닐기, 나프틸기 및 안트릴기 중 하나 이상으로 치환된 페닐렌기, 나프틸렌기, 페난트레닐렌기, 플루오레닐기, 또는 파이레닐렌기이고;

Ar<sub>113</sub> 내지 Ar<sub>116</sub> 및 Ar<sub>122</sub> 내지 Ar<sub>125</sub>는 서로 독립적으로, 페닐기, 나프틸기 및 안트릴기 중 하나 이상으로 치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>알킬기; 페닐기; 나프틸기; 안트릴기; 파이레닐기; 페난트레닐기; 플루오레닐기; 중수소, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진, 히드라존, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염, 인산이나 이의 염, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알킬기, C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알케닐기, C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알키닐기, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알콕시기, 페닐기, 나프틸기, 안트릴기, 파이레닐기, 페난트레닐기 및 플루오레닐기 중 하나 이상으로 치환된 페닐기, 나프틸기, 안트릴기,



파이레닐기, 페난트레닐기 및 플루오레닐기; 및 중 하나이고;

Ar<sub>126</sub> 및 Ar<sub>127</sub>은 서로 독립적으로, 메틸기, 에틸기 또는 프로필기이고;

g, h, i, j, k 및 l은 서로 독립적으로 0, 1 또는 2이다.

**청구항 30**

제24항에 있어서,

상기 유기층이, 정공 주입층, 정공 수송층 및 정공 주입 기능 및 정공 수송 기능을 동시에 갖는 기능층 중 하나 이상을 포함하고, 상기 정공 주입층, 정공 수송층 및 정공 주입 기능 및 정공 수송 기능을 동시에 갖는 기능층 중 하나 이상이 전하 생성 물질을 포함한, 유기 발광 소자.

**청구항 31**

제30항에 있어서,

상기 전하 생성 물질이 p-도펀트이고, 상기 p-도펀트가 퀴는 유도체, 금속 산화물 및 시아노기-함유 화합물 중 하나인, 유기 발광 소자.

**청구항 32**

제24항에 있어서,

상기 유기층이, 전자 수송층을 포함하고, 상기 전자 수송층이 전자 수송성 유기 화합물 및 금속 착체를 포함한, 유기 발광 소자.

**발명의 설명**

**기술 분야**

[0001] 유기 발광 소자용 화합물 및 유기 발광 소자에 관한 것이다.

**배경 기술**

[0002] 유기 발광 소자(organic light emitting diode)는 자발광형 소자로서 시야각이 넓고 콘트라스트가 우수할 뿐만 아니라, 응답시간이 빠르며, 휘도, 구동전압 및 응답속도 특성이 우수하고 다색화가 가능하다는 장점을 가지고 있다.

[0003] 일반적인 유기 발광 소자는 기관 상부에 애노드가 형성되어 있고, 이 애노드 상부에 정공수송층, 발광층, 전자

수송층 및 캐소드가 순차적으로 형성되어 있는 구조를 가질 수 있다. 여기에서 정공수송층, 발광층 및 전자수송층은 유기화합물로 이루어진 유기 박막들이다.

[0004] 상술한 바와 같은 구조를 갖는 유기 발광 소자의 구동 원리는 다음과 같다.

[0005] 상기 애노드 및 캐소드간에 전압을 인가하면, 애노드로부터 주입된 정공은 정공수송층을 경유하여 발광층으로 이동하고, 캐소드로부터 주입된 전자는 전자수송층을 경유하여 발광층으로 이동한다. 상기 정공 및 전자와 같은 캐리어들은 발광층 영역에서 재결합하여 엑시톤(exiton)을 생성한다. 이 엑시톤이 여기 상태에서 기저상태로 변하면서 광이 생성된다.

**발명의 내용**

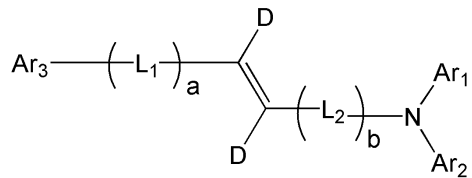
**해결하려는 과제**

[0006] 신규 구조를 갖는 스티릴계 화합물, 상기 스티릴계 화합물을 포함한 조성물 및 상기 스티릴계 화합물 또는 상기 조성물을 포함한 유기 발광 소자를 제공한다.

**과제의 해결 수단**

[0007] 일 측면에 따르면, 하기 화학식 1로 표시되는 스티릴계 화합물이 제공된다:

[0008] <화학식 1>



[0009]

상기 화학식 1 중,

[0010]

[0011] Ar<sub>3</sub>는 2 이상의 고리가 서로 융합되어 있는 치환 또는 비치환된 C<sub>8</sub>-C<sub>20</sub>아릴기 또는 2 이상의 고리가 서로 융합되어 있는 치환 또는 비치환된 C<sub>2</sub>-C<sub>20</sub>헤테로아릴기이고;

[0012]

[0013] Ar<sub>1</sub> 및 Ar<sub>2</sub>는 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C<sub>5</sub>-C<sub>60</sub>아릴기 또는 치환 또는 비치환된 C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>헤테로아릴기이고;

[0014]

[0015] L<sub>1</sub> 및 L<sub>2</sub>는 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C<sub>5</sub>-C<sub>60</sub>아릴렌기 또는 치환 또는 비치환된 C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>헤테로아릴렌기이고;

[0016]

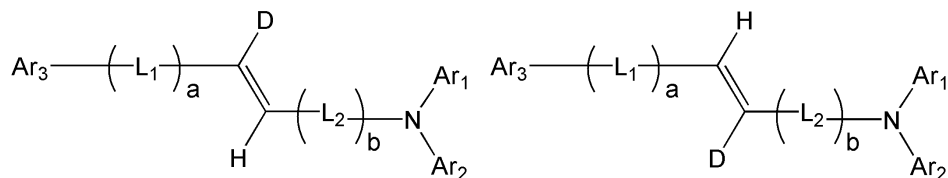
a 및 b는 서로 독립적으로 0 내지 5의 정수이다.

[0017]

다른 측면에 따르면, 상기 화학식 1로 표시되는 스티릴계 화합물을 포함하고, 하기 화학식 1-1H-1로 표시되는 스티릴계 화합물, 하기 화학식 1-1H-2로 표시되는 스티릴계 화합물 및 하기 화학식 1-2H로 표시되는 스티릴계 화합물 중 하나 이상을 포함한, 스티릴계 화합물-함유 조성물이 제공된다:

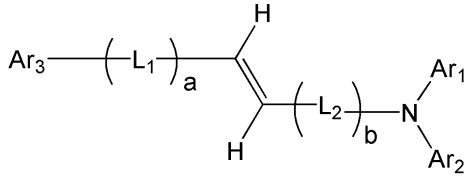
[0018] <화학식 1-1H-1>

<화학식 1-1H-2>



[0019]

[0018] <화학식 1-2H>



[0019]

[0020] 화학식 1-1H-1, 1-1H-2 및 1-2H의 치환기에 대한 설명은 화학식 1의 치환기에 대한 설명을 참조한다.

[0021] 또 다른 측면에 따르면, 제1전극; 상기 제1전극에 대향된 제2전극; 및 상기 제1전극과 상기 제2전극 사이에 개재된 유기층;을 포함하고, 상기 유기층이 상기 스티릴계 화합물을 1종 이상 포함하거나, 상기 스티릴계 화합물-함유 조성물을 1종 이상 포함한, 유기 발광 소자가 제공된다.

**발명의 효과**

[0022] 상기 스티릴계 화합물은 우수한 내열성을 가지므로, 상기 스티릴계 화합물 또는 상기 스티릴계 화합물-함유 조성물을 포함한 유기 발광 소자는 저구동 전압, 고휘도, 고효율 및 장수명을 가질 수 있다.

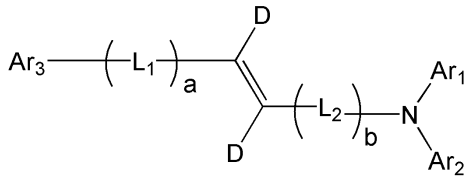
**도면의 간단한 설명**

[0023] 도 1은 일 구현예를 따르는 유기 발광 소자의 구조를 개략적으로 나타낸 도면이다.

**발명을 실시하기 위한 구체적인 내용**

[0024] 상기 스티릴계 화합물은 하기 화학식 1로 표시된다:

[0025] <화학식 1>



[0026]

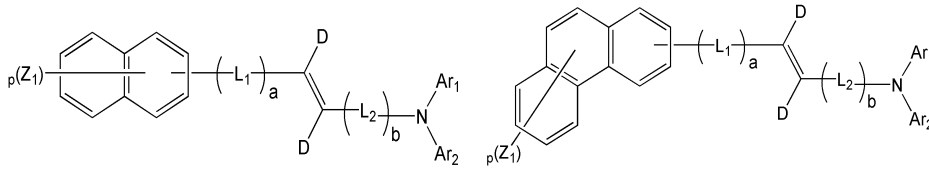
[0027] 상기 화학식 1 중, Ar<sub>3</sub>는, 2 이상의 고리가 서로 융합되어 있는 치환 또는 비치환된 C<sub>8</sub>-C<sub>20</sub>아릴기 또는 2 이상의 고리가 서로 융합되어 있는 치환 또는 비치환된 C<sub>2</sub>-C<sub>20</sub>헤테로아릴기일 수 있다.

[0028] 예를 들어, 상기 화학식 1 중, Ar<sub>3</sub>는 치환 또는 비치환된 나프틸기, 치환 또는 비치환된 페난트레닐기, 치환 또는 비치환된 안트릴기, 치환 또는 비치환된 파이레닐기, 치환 또는 비치환된 크라이세닐기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐기, 치환 또는 비치환된 카바졸일기, 치환 또는 비치환된 디벤조푸라닐기 또는 치환 또는 비치환된 디벤조티오펜일기일 수 있다. 여기서, 치환된 나프틸기, 페난트레닐기, 안트릴기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 플루오레닐기, 카바졸일기, 디벤조푸라닐기 및 디벤조티오펜일기 중 하나 이상의 치환기는, 중수소; 할로겐 원자; 히드록실기; 시아노기; 니트로기; 아미노기; 아미디노기; 히드라진; 히드라존; 카르복실기나 이의 염; 술폰산기나 이의 염; 인산이나 이의 염; C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>알킬기; C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>알콕시기; 페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트릴기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 이미다졸일기, 이미다졸리닐기, 이미다조피리디닐기, 이미다조피리미디닐기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 및 인돌일기; 및 중수소 할로겐 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진, 히드라존, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염, 인산이나 이의 염, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>알킬기 및 C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>알콕시기 중 하나 이상으로 치환된 페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트릴기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 이미다졸일기, 이미다졸리닐기, 이미다조피리디닐기, 이미다조피리미디닐기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 및 인돌일기; 중에서 선택될 수 있다.

[0029] 화학식 1 중 Ar<sub>3</sub>에 따라, 상기 화학식 1의 화합물은 하기 화학식 1A 내지 1I 중 하나로 표시될 수 있다:

[0030] <화학식 1A>

<화학식 1B>

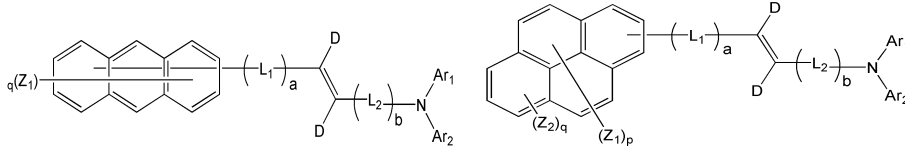


[0031]

[0032]

<화학식 1C>

<화학식 1D>

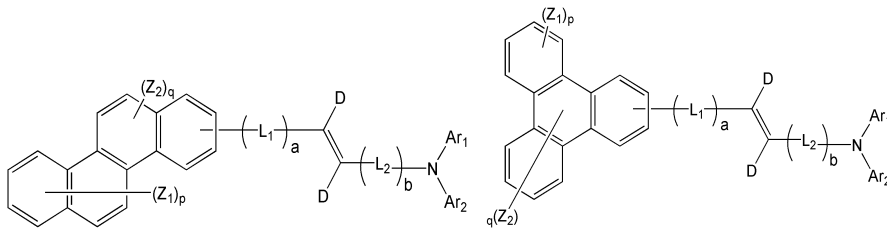


[0033]

[0034]

<화학식 1E>

<화학식 1F>

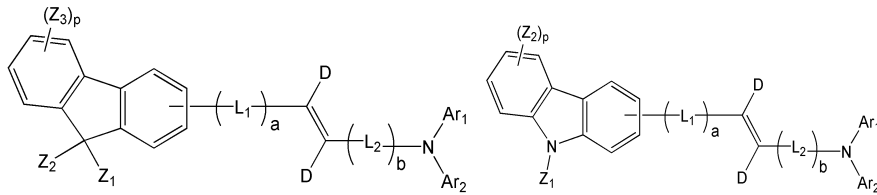


[0035]

[0036]

<화학식 1G>

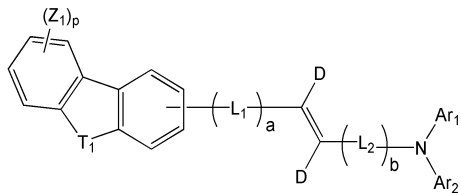
<화학식 1H>



[0037]

[0038]

<화학식 1I>



[0039]

[0040]

상기 화학식 1A 내지 1I 중, Z<sub>1</sub> 내지 Z<sub>3</sub>는 서로 독립적으로, 수소; 중수소; 할로젠 원자; 히드록실기; 시아노기; 니트로기; 아미노기; 아미디노기; 히드라진; 히드라존; 카르복실기나 이의 염; 술폰산기나 이의 염; 인산이나 이의 염; C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>알킬기; C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>알콕시기; 페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트릴기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 이미다졸일기, 이미다졸리닐기, 이미다조피리디닐기, 이미다조피리미디닐기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 및 인돌일기; 및 중수소 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진, 히드라존, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염, 인산이나 이의 염, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>알킬기 및 C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>알콕시기 중 하나 이상으로 치환된 페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트릴기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 이미다졸일기, 이미다졸리닐기, 이미다조피리디닐기, 이미다조피리미디닐기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 및 인돌일기; 중에서 선택될 수 있다. 여기서, Z<sub>1</sub> 내지 Z<sub>3</sub> 중 서로 이웃한 2 이상의 치환기는 선택적으로(optionally), 서로 융합하거나 단일 결합을 통해 연결될 수 있다.

[0041]

예를 들어, 상기 Z<sub>1</sub> 내지 Z<sub>3</sub>는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진, 히드라존, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염, 인산이나 이의 염, 페

틸기, 에틸기, 프로필기, 부틸기, 펜틸기, 헥실기, 헵틸기, 옥틸기, 페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 중수소화 페닐기 또는 디메틸플루오레닐기일 수 있다. 여기서, 화학식 1G의 Z<sub>1</sub> 및 Z<sub>2</sub>가 모두 페닐기일 경우, 이들은 단일 결합을 통해 연결될 수 있다.

[0042]

상기 화학식 1A 내지 1I 중, T<sub>1</sub>은 0 또는 S일 수 있다.

[0043]

상기 화학식 1A 내지 1I 중, p는 1 내지 7의 정수이고, q는 1 내지 4의 정수일 수 있다. 상기 p가 2 이상일 경우, 2 이상의 Z<sub>1</sub>는 서로 동일하거나 상이할 수 있고, 2 이상의 Z<sub>3</sub>는 서로 동일하거나 상이할 수 있다. 상기 q가 2 이상일 경우, 2 이상의 Z<sub>2</sub>는 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

[0044]

상기 화학식 1 중 Ar<sub>1</sub> 및 Ar<sub>2</sub>는, 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C<sub>5</sub>-C<sub>60</sub>아릴기 또는 치환 또는 비치환된 C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>헤테로아릴기일 수 있다. 여기서, 치환된 C<sub>5</sub>-C<sub>60</sub>아릴기 및 치환된 C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>헤테로아릴기의 하나 이상의 치환기는, 중수소; 할로겐 원자; 히드록실기; 시아노기; 니트로기; 아미노기; 아미디노기; 히드라진; 히드라존; 카르복실기나 이의 염; 술폰산기나 이의 염; 인산이나 이의 염; C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>알킬기; C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>알콕시기; 페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트릴기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 이미다졸일기, 이미다졸리닐기, 이미다조피리디닐기, 이미다조피리미디닐기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 및 인돌일기; 및 중수소 할로겐 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진, 히드라존, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염, 인산이나 이의 염, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>알킬기 및 C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>알콕시기 중 하나 이상으로 치환된 페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트릴기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 이미다졸일기, 이미다졸리닐기, 이미다조피리디닐기, 이미다조피리미디닐기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 및 인돌일기; 중에서 선택될 수 있다.

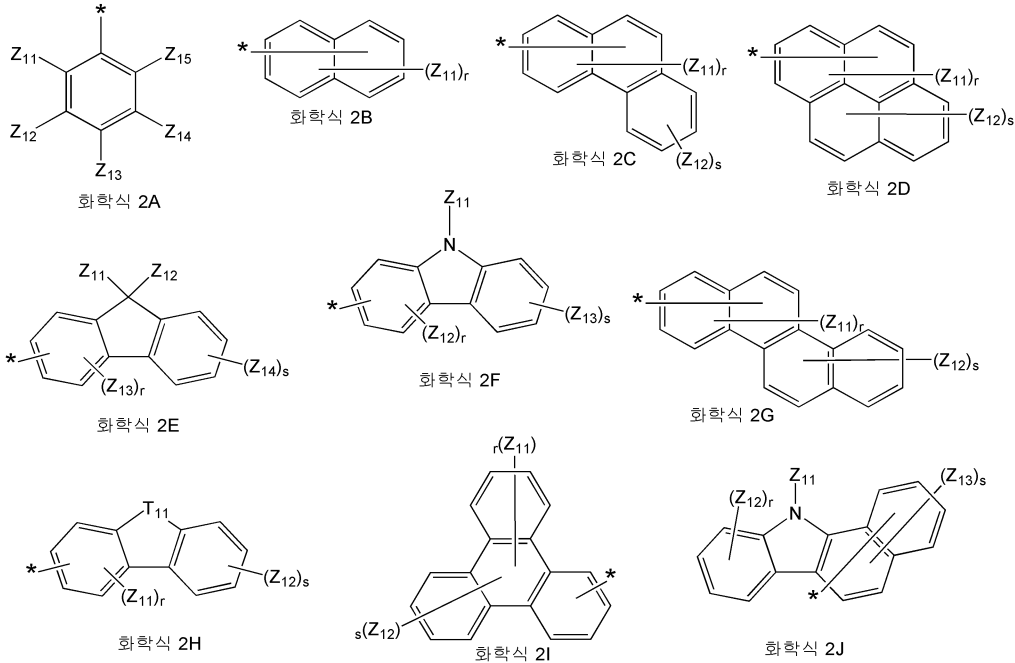
[0045]

예를 들어, 상기 화학식 1 중 상기 Ar<sub>1</sub> 및 Ar<sub>2</sub>는, 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 페닐기(phenyl), 치환 또는 비치환된 펜타레닐기(pentalenyl), 치환 또는 비치환된 인데닐기(indenyl), 치환 또는 비치환된 나프틸기(naphtyl), 치환 또는 비치환된 아줄레닐기(azulenyl), 치환 또는 비치환된 헵타레닐기(heptalenyl), 치환 또는 비치환된 인다세닐기(indacenyl), 치환 또는 비치환된 아세나프틸기(acenaphtyl), 치환 또는 비치환된 플루오레닐기(fluorenyl), 치환 또는 비치환된 스파이로-플루오레닐기, 치환 또는 비치환된 페날레닐기(phenalenyl), 치환 또는 비치환된 페난트레닐기(phenanthrenyl), 치환 또는 비치환된 안트릴기(anthryl), 치환 또는 비치환된 플루오란테닐기(fluoranthenyl), 치환 또는 비치환된 트리페닐레닐기(triphenylenyl), 치환 또는 비치환된 파이레닐기(pyrenyl), 치환 또는 비치환된 크라이세닐기(chrysenyl), 치환 또는 비치환된 나프타세닐기(naphthacenyl), 치환 또는 비치환된 피세닐기(picenyl), 치환 또는 비치환된 페릴레닐기(perylene), 치환 또는 비치환된 펜타페닐기(pentaphenyl), 치환 또는 비치환된 헥사세닐기(hexacenyl), 치환 또는 비치환된 피롤일기(pyrroly), 치환 또는 비치환된 이미다졸일기(imidazolyl), 치환 또는 비치환된 피라졸일기(pyrazolyl), 치환 또는 비치환된 피리디닐기(pyridinyl), 치환 또는 비치환된 피라지닐기(pyrazinyl), 치환 또는 비치환된 피리미디닐기(pyrimidinyl), 치환 또는 비치환된 피리다지닐기(pyridazinyl), 치환 또는 비치환된 이소인돌일기(isoindolyl), 치환 또는 비치환된 인돌일기(indolyl), 치환 또는 비치환된 인다졸일기(indazolyl), 치환 또는 비치환된 푸리닐기(purinyl), 치환 또는 비치환된 퀴놀리닐기(quinolinyl), 치환 또는 비치환된 벤조퀴놀리닐기(benzoquinolinyl), 치환 또는 비치환된 프탈라지닐기(phthalazinyl), 치환 또는 비치환된 나프티리디닐기(naphthyridinyl), 치환 또는 비치환된 퀴녹살리닐기(quinoxaliny), 치환 또는 비치환된 퀴나졸리닐기(quinazoliny), 치환 또는 비치환된 시놀리닐기(cinnolinyl), 치환 또는 비치환된 카바졸일기(carbazolyl), 치환 또는 비치환된 페난트리디닐기(phenanthridinyl), 치환 또는 비치환된 아크리디닐기(acridinyl), 치환 또는 비치환된 페난트롤리닐기(phenanthrolinyl), 치환 또는 비치환된 페나지닐기(phenazinyl), 치환 또는 비치환된 벤조옥사졸일기(benzooxazolyl), 치환 또는 비치환된 벤조이미다졸일기(benzoimidazolyl), 치환 또는 비치환된 푸라닐기(furanyl), 치환 또는 비치환된 벤조푸라닐기(benzofuranyl), 치환 또는 비치환된 티오펜일기(thiophenyl), 치환 또는 비치환된 벤조티오펜일기(benzothiophenyl), 치환 또는 비치환된 티아졸일기(thiazolyl), 치환 또는 비치환된 이소티아졸일기(isothiazolyl), 치환 또는 비치환된 벤조티아졸일기(benzothiazolyl), 치환 또는 비치환된 이소옥사졸일기(isoxazolyl), 치환 또는 비치환된 옥사졸일기(oxazolyl), 치환 또는 비치환된 트리아졸일기, 치환 또는 비치환된 테트라졸일기, 치환 또는 비치환된 옥사디아졸일기(oxadiazolyl), 치환 또는 비치환된 트리아지닐기(triazinyl), 치환 또는 비치환된 벤조옥사졸일기(benzooxazolyl), 치환 또는 비치환된 디벤조푸라닐기(dibenzopuranyl), 치환 또는 비치환된 디벤조티오펜일기

(dibenzothiophenyl) 또는 벤조카바졸일기일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0046] 예를 들어, 상기 화학식 1 중 Ar<sub>1</sub> 및 Ar<sub>2</sub>는 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 페닐기, 치환 또는 비치환된 나프틸기, 치환 또는 비치환된 페난트레닐기, 치환 또는 비치환된 파이레닐기, 치환 또는 비치환된 카바졸일기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐기, 치환 또는 비치환된 디벤조푸라닐기, 치환 또는 비치환된 디벤조티오펜일기 또는 치환 또는 비치환된 벤조카바졸일기일 수 있다.

[0047] 상기 Ar<sub>1</sub> 및 Ar<sub>2</sub>는 서로 독립적으로, 하기 화학식 2A 내지 2J 중 하나로 표시될 수 있다:



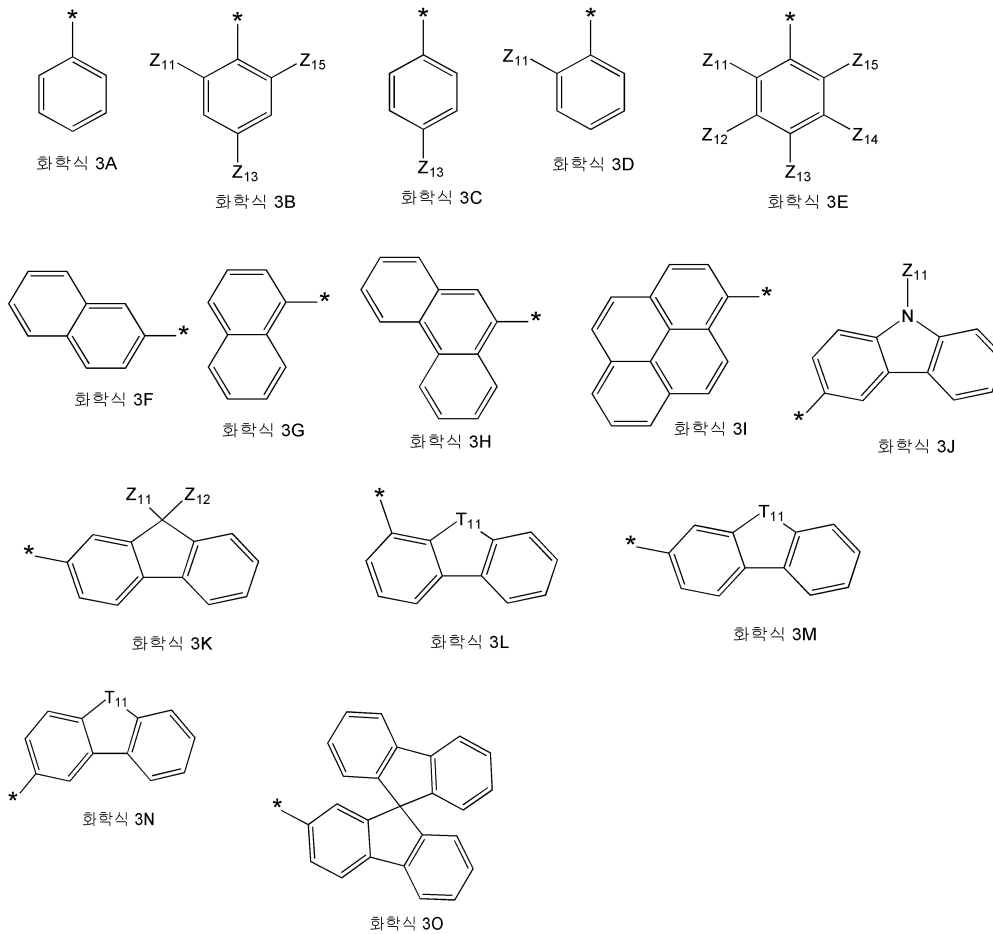
[0048]

[0049] 상기 화학식 2A 내지 2J 중, Z<sub>11</sub> 내지 Z<sub>15</sub>는 서로 독립적으로, 수소; 중수소; 할로젠 원자; 히드록실기; 시아노기; 니트로기; 아미노기; 아미디노기; 히드라진; 히드라존; 카르복실기나 이의 염; 술폰산기나 이의 염; 인산이나 이의 염; C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>알킬기; C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>알콕시기; 페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트릴기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 이미다졸일기, 이미다졸리닐기, 이미다조피리디닐기, 이미다조피리미디닐기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 및 인돌일기; 및 중수소 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진, 히드라존, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염, 인산이나 이의 염, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>알킬기 및 C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>알콕시기 중 하나 이상으로 치환된 페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트릴기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 이미다졸일기, 이미다졸리닐기, 이미다조피리디닐기, 이미다조피리미디닐기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 및 인돌일기; 중 선택될 수 있다. 여기서, 상기 Z<sub>11</sub> 내지 Z<sub>15</sub> 중 이웃하는 2 이상의 치환기는 선택적으로(optionally), 서로 융합되거나 단일 결합을 통해 연결될 수 있다.

[0050] 상기 화학식 2A 내지 2J 중 T<sub>11</sub>은 0 또는 S일 수 있다.

[0051] 상기 화학식 2A 내지 2J 중, r는 1 내지 7의 정수이고, s는 1 내지 5의 정수일 수 있다. 상기 r이 2 이상일 경우, 2 이상의 Z<sub>11</sub>는 서로 동일하거나 상이할 수 있고, 2 이상의 Z<sub>13</sub>는 서로 동일하거나 상이할 수 있다. 상기 s가 2 이상일 경우, 2 이상의 Z<sub>12</sub>는 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

[0052] 예를 들어, 상기 Ar<sub>1</sub> 및 Ar<sub>2</sub>는, 서로 독립적으로, 하기 화학식 3A 내지 3O 중 하나로 표시될 수 있다:



[0053]

[0054]

[0055] 상기 화학식 3A 내지 3O 중, Z<sub>11</sub> 내지 Z<sub>15</sub>는 상술한 바를 참조한다(단, 화학식 3A 내지 3O 중 Z<sub>11</sub> 내지 Z<sub>15</sub>는 수소는 아님). 예를 들어, 상기 화학식 3A 내지 3O 중 Z<sub>11</sub> 내지 Z<sub>15</sub>는 서로 독립적으로, 중수소, 할로겐 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진, 히드라존, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염, 인산이나 이의 염, 메틸기, 에틸기, 프로필기, 부틸기, 펜틸기, 헥실기, 헵틸기, 옥틸기, 페닐기, 나프틸기 또는 플루오레닐기일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다. 상기 화학식 3A 내지 3O 중 T<sub>11</sub>은 O 또는 S일 수 있다.

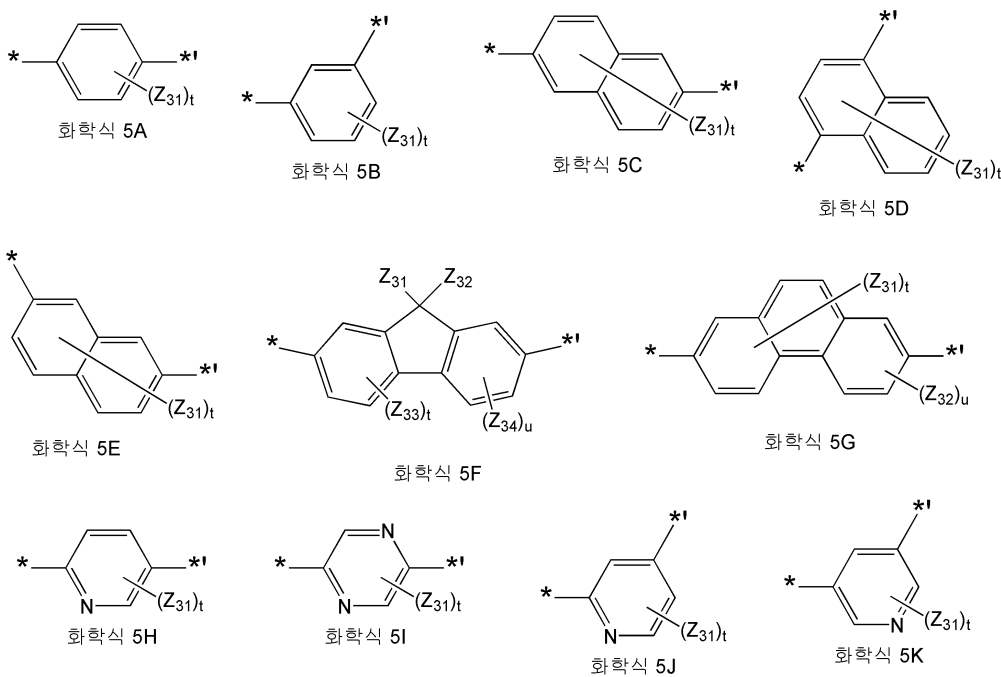
[0056] 상기 화학식 1 중, L<sub>1</sub> 및 L<sub>2</sub>는 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C<sub>5</sub>-C<sub>60</sub>아릴렌기 또는 치환 또는 비치환된 C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>헤테로아릴렌기일 수 있다. 상기 치환된 C<sub>5</sub>-C<sub>60</sub>아릴렌기 및 치환된 C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>헤테로아릴렌기 중 하나 이상의 치환기는, 중수소; 할로겐 원자; 히드록실기; 시아노기; 니트로기; 아미노기; 아미디노기; 히드라진; 히드라존; 카르복실기나 이의 염; 술폰산기나 이의 염; 인산이나 이의 염; C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>알킬기; C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>알콕시기; 페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트릴기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 이미다졸일기, 이미다졸리닐기, 이미다조피리디닐기, 이미다조피리미디닐기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 및 인돌일기; 및 중수소 할로겐 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진, 히드라존, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염, 인산이나 이의 염, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>알킬기 및 C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>알콕시기 중 하나 이상으로 치환된 페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트릴기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 이미다졸일기, 이미다졸리닐기, 이미다조피리디닐기, 이미다조피리미디닐기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 및 인돌일기; 중에서 선택될 수 있다.

[0057] 예를 들어, L<sub>1</sub> 및 L<sub>2</sub>는, 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 페닐렌기, 치환 또는 비치환된 펜타레닐렌기, 치환 또는 비치환된 인데닐렌기, 치환 또는 비치환된 나프틸렌기, 치환 또는 비치환된 아줄레닐렌기, 치환 또는 비치환된 헵탈레닐렌기, 치환 또는 비치환된 인다세닐렌기, 치환 또는 비치환된 아세나프틸렌기, 치환 또는 비

치환된 플루오레닐렌기, 치환 또는 비치환된 페나레닐렌기, 치환 또는 비치환된 페난트레닐렌기, 치환 또는 비치환된 안트릴렌기, 치환 또는 비치환된 플루오란테닐렌기, 치환 또는 비치환된 트리페닐레닐렌기, 치환 또는 비치환된 파이레닐렌기, 치환 또는 비치환된 크라이세닐레닐렌기, 치환 또는 비치환된 나프타세닐렌기, 치환 또는 비치환된 피세닐렌기, 치환 또는 비치환된 페릴레닐렌기, 치환 또는 비치환된 펜타세닐렌기, 치환 또는 비치환된 헥사세닐렌기, 치환 또는 비치환된 피콜일렌기, 치환 또는 비치환된 피라졸일렌기, 치환 또는 비치환된 이미다졸일렌기, 치환 또는 비치환된 이미다졸리닐렌기, 치환 또는 비치환된 이미다조피리디닐렌기, 치환 또는 비치환된 이미다조피리미디닐렌기, 치환 또는 비치환된 피리디닐렌기, 치환 또는 비치환된 피라지닐렌기, 치환 또는 비치환된 피리미디닐렌기, 치환 또는 비치환된 인돌일렌기, 치환 또는 비치환된 푸리닐렌기, 치환 또는 비치환된 퀴놀리닐렌기, 치환 또는 비치환된 프탈라지닐렌기, 치환 또는 비치환된 인돌리지닐렌기, 치환 또는 비치환된 나프티리디닐렌기, 치환 또는 비치환된 쿠나졸리닐렌기, 치환 또는 비치환된 시놀리닐렌기, 치환 또는 비치환된 인다졸일렌기, 치환 또는 비치환된 카바졸일렌기, 치환 또는 비치환된 페나지닐렌기, 치환 또는 비치환된 페난트리디닐렌기, 치환 또는 비치환된 파이라닐렌기, 치환 또는 비치환된 크로메닐렌기, 치환 또는 비치환된 푸라닐기, 치환 또는 비치환된 벤조푸라닐렌기, 치환 또는 비치환된 티오펜일렌기, 치환 또는 비치환된 벤조티오펜일렌기, 치환 또는 비치환된 이소티아졸일렌기, 치환 또는 비치환된 벤조이미다졸일렌기, 치환 또는 비치환된 이속사졸일렌기, 치환 또는 비치환된 디벤조티오펜일렌기, 치환 또는 비치환된 디벤조푸라닐렌기, 치환 또는 비치환된 트리아지닐렌기, 또는 치환 또는 비치환된 옥사디아졸일렌기일 수 있다.

[0058] 예를 들어, 상기 화학식 1 중,  $L_1$  및  $L_2$ 는 서로 독립적으로, 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 페닐렌기, 치환 또는 비치환된 나프틸렌기, 치환 또는 비치환된 플루오닐렌기, 치환 또는 비치환된 페난트레닐렌기 또는 치환 또는 비치환된 피리디닐렌기일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0059] 상기 화학식 1 중 상기  $L_1$  및  $L_2$ 는 서로 독립적으로, 화학식 5A 내지 5K 중 하나로 표시될 수 있다:



[0060]

[0061] 상기 화학식 5A 내지 5K 중,  $Z_{31}$  내지  $Z_{34}$ 는 서로 독립적으로, 수소; 중수소; 할로젠 원자; 히드록실기; 시아노기; 니트로기; 아미노기; 아미디노기; 히드라진; 히드라존; 카르복실기나 이의 염; 술폰산기나 이의 염; 인산이나 이의 염;  $C_1$ - $C_{10}$ 알킬기;  $C_1$ - $C_{10}$ 알콕시기; 페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트릴기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 이미다졸일기, 이미다졸리닐기, 이미다조피리디닐기, 이미다조피리미디닐기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 및 인돌일기; 및 중수소 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진, 히드라존, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염, 인산이나 이의 염,  $C_1$ - $C_{10}$ 알킬기 및  $C_1$ - $C_{10}$ 알콕시기 중 하나 이상으로 치환된 페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트릴기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 이미다졸일기, 이미다졸리닐기, 이미다조피리디닐기, 이미다조피리미디닐기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 및 인돌일기; 중 선택될 수 있다.

다. 여기서, 상기 Z<sub>31</sub> 내지 Z<sub>34</sub> 중 이웃하는 2 이상의 치환기는 선택적으로(optionally), 서로 융합되거나 단일 결합을 통해 연결될 수 있다.

[0062] 예를 들어, 상기 Z<sub>31</sub> 내지 Z<sub>34</sub>는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 할로겐 원자, 히드록실기, 시아노기, 메틸기, 에틸기, 프로필기, 부틸기, 펜틸기, 헥실기 또는 헵틸기일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

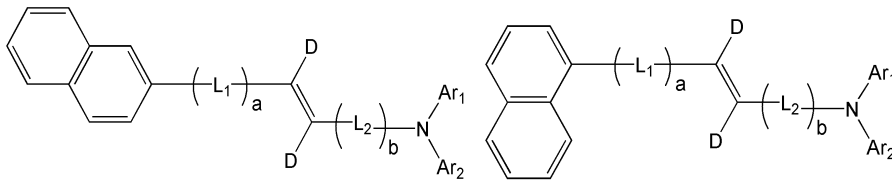
[0063] 상기 화학식 5A 내지 5K 중 t는 1 내지 6의 정수일 수 있고, u는 1 내지 3의 정수일 수 있다. 상기 t가 2 이상일 경우, 2 이상의 Z<sub>31</sub>는 서로 동일하거나 상이할 수 있다. 상기 u가 2 이상일 경우, 2 이상의 Z<sub>32</sub>는 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

[0064] 상기 화학식 1 중, a 및 b는 서로 독립적으로 0 내지 5의 정수일 수 있다.

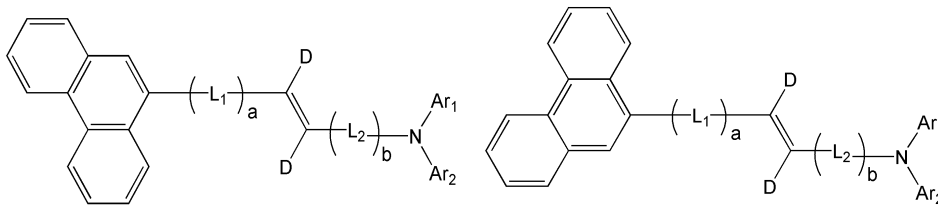
[0065] 예를 들어, 상기 화학식 1 중, a는 0 또는 1이고, b는 1 또는 2일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0066] 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 1의 스티릴계 화합물은 하기 화학식 1A-1 내지 1I-3 중 하나로 표시될 수 있다:

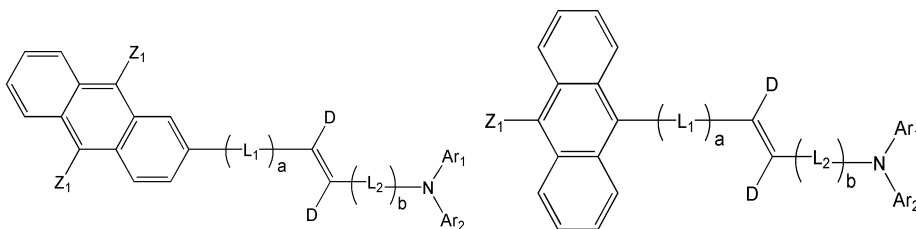
[0067] <화학식 1A-1> <화학식 1A-2>



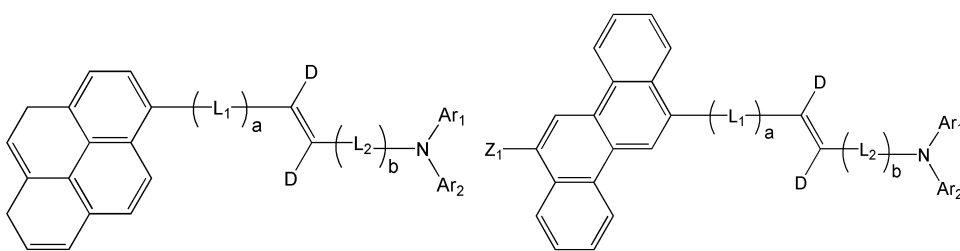
[0068] <화학식 1B-1> <화학식 1B-2>



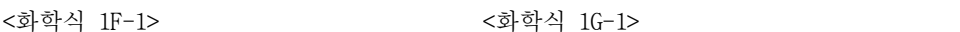
[0070] <화학식 1C-1> <화학식 1C-2>

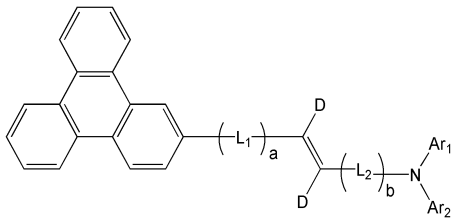


[0072] <화학식 1D-1> <화학식 1E-1>



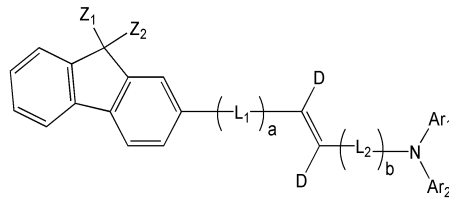
[0074] <화학식 1F-1> <화학식 1G-1>



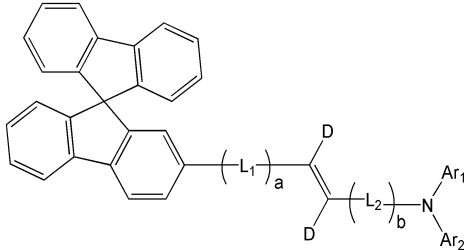


[0076]

[0077] <화학식 1G-2>

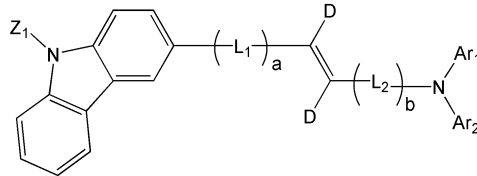


<화학식 1H-1>

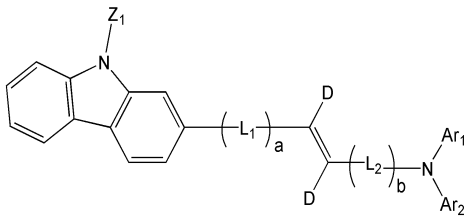


[0078]

[0079] <화학식 1H-2>

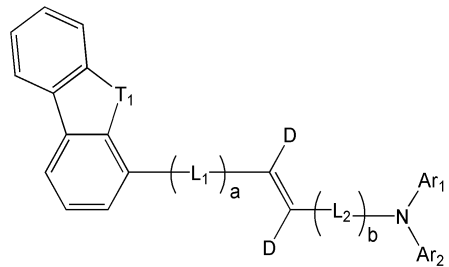


<화학식 1I-1>

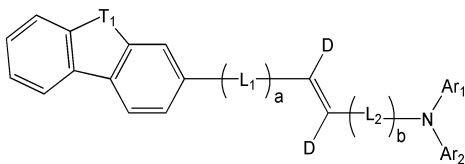


[0080]

[0081] <화학식 1I-2>



<화학식 1I-3>



[0082]

[0083] 상기 화학식 1A-1 내지 1I-3 중 Z<sub>1</sub>, Z<sub>2</sub>, T<sub>1</sub>, Ar<sub>1</sub>, Ar<sub>2</sub>, L<sub>1</sub>, L<sub>2</sub>, a 및 b에 대한 상세한 설명은 상술한 바를 참조한다.

[0084] 예를 들어, 상기 화학식 1A-1 내지 1I-3 중, Z<sub>1</sub> 및 Z<sub>2</sub>는 서로 독립적으로, 중수소; 할로겐 원자; 히드록실기; 시아노기; 니트로기; 아미노기; 아미디노기; 히드라진; 히드라존; 카르복실기나 이의 염; 술폰산기나 이의 염; 인산이나 이의 염; C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>알킬기; C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>알콕시기; 페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트릴기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 이미다졸일기, 이미다졸리닐기, 이미다조피리디닐기, 이미다조피리미디닐기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 및 인돌일기; 및 중수소 할로겐 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진, 히드라존, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염, 인산이나 이의 염, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>알킬기 및 C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>알콕시기 중 하나 이상으로 치환된 페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트릴기, 트리페닐레닐기, 파이레닐기, 크라이세닐기, 이미다졸일기, 이미다졸리닐기, 이미다조피리디닐기, 이미다조피리미디닐기, 피리디닐기, 피라지닐기, 피리미디닐기, 및 인돌일기; 중 선택되고; T<sub>1</sub>은 O 또는 S이고; Ar<sub>1</sub> 및 Ar<sub>2</sub>는 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 페닐기, 치환 또는 비치환된 나프틸기, 치환 또는 비치환된 페난트레닐기, 치환 또는 비치환된 파이레닐기, 치환 또는 비치환된 카바졸일기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐기, 치환 또는 비치환된 디벤조푸라닐기, 치환 또는 비치환된 디벤조티오펜기 또는 치환 또는 비치환된 벤조카바졸일기이고; L<sub>1</sub> 및 L<sub>2</sub>는 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 페닐렌기, 치환 또는 비치환된 나프틸렌기, 치환 또는 비치환된 플루오닐렌기, 치환 또는 비치환된 페난트레닐렌기 또는 치환

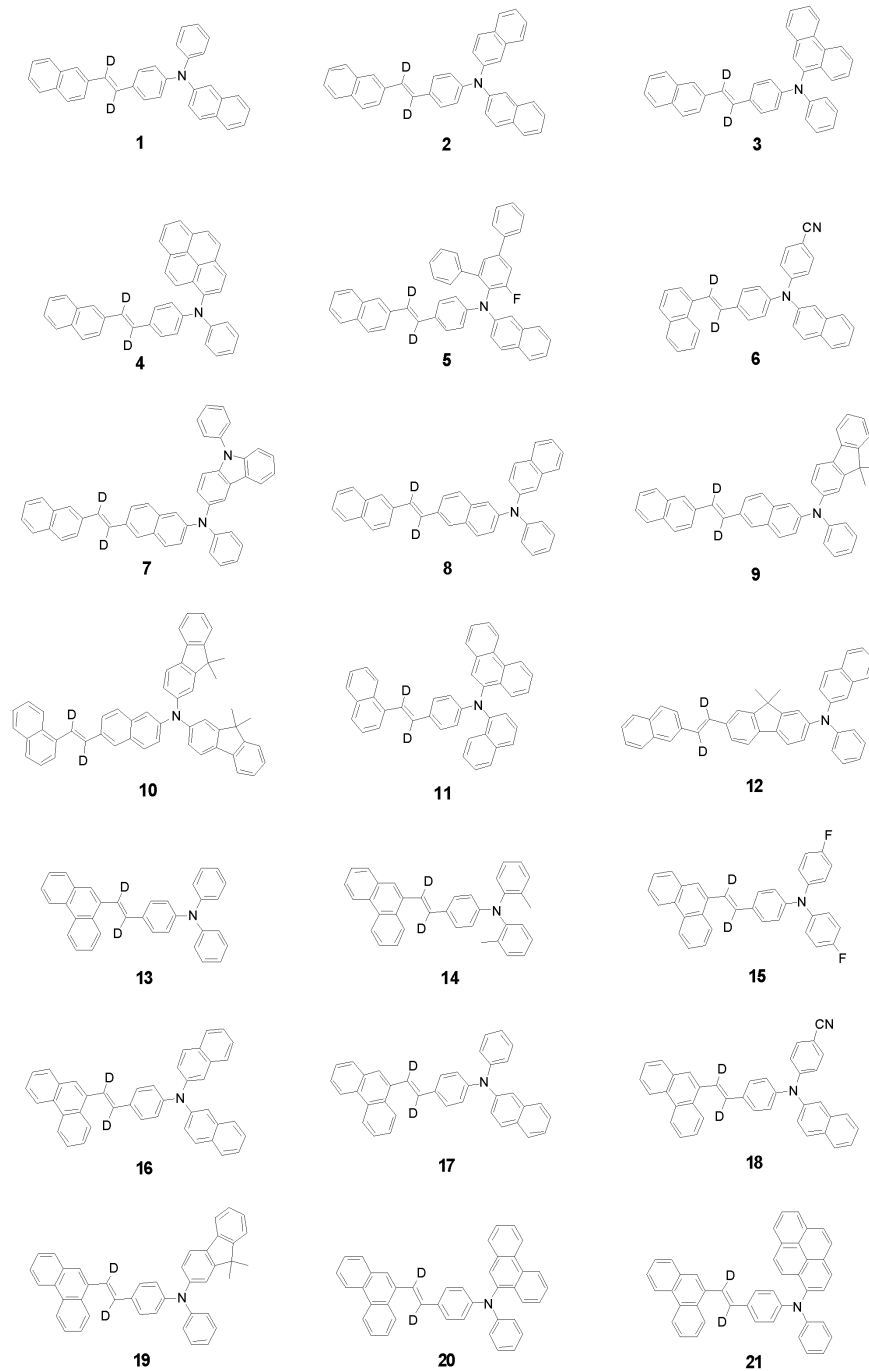
또는 비치환된 피리디닐렌기이고; a는 0 또는 1이고; b는 1 또는 2일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0085]

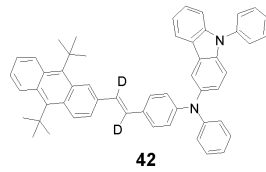
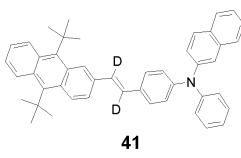
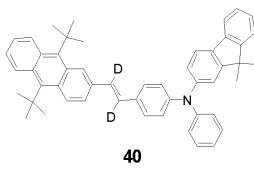
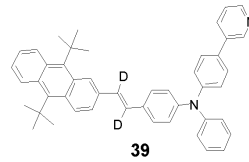
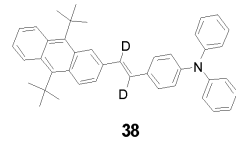
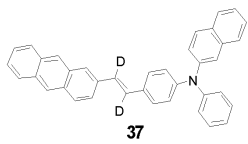
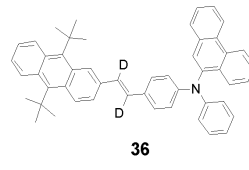
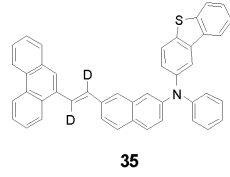
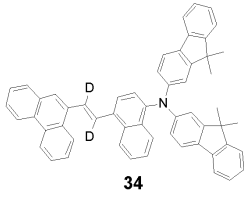
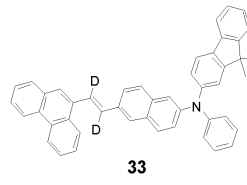
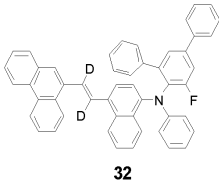
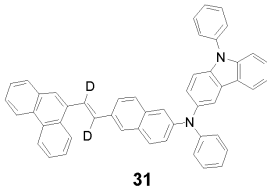
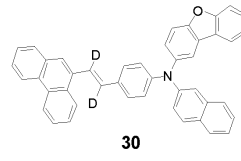
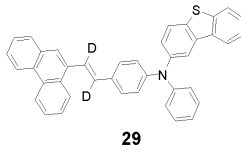
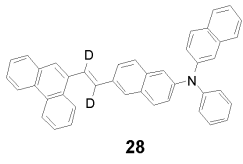
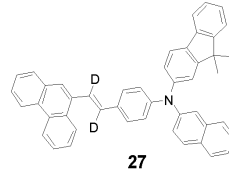
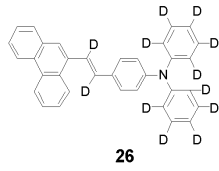
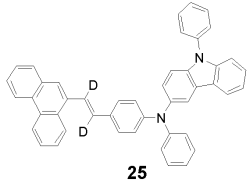
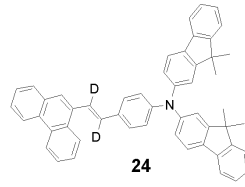
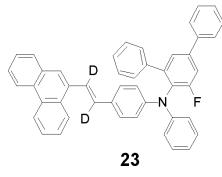
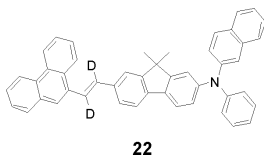
예를 들어, 상기 상기 화학식 1A-1 내지 1I-3 중, Z<sub>1</sub> 및 Z<sub>2</sub>는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진, 히드라존, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염, 인산이나 이의 염, 메틸기, 에틸기, 프로필기, 부틸기, 펜틸기, 헥실기, 헵틸기, 옥틸기, 페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 중수소화 페닐기 또는 디메틸플루오레닐기이고; T<sub>1</sub>은 0 또는 S이고; Ar<sub>1</sub> 및 Ar<sub>2</sub>는 서로 독립적으로 상기 화학식 2A 내지 2J 중 하나로 표시되고; L<sub>1</sub> 및 L<sub>2</sub>는 서로 독립적으로 상기 화학식 5A 내지 5K 중 하나로 표시되고; a는 0 또는 1이고; b는 1 또는 2일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0086]

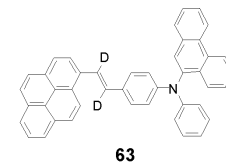
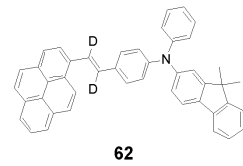
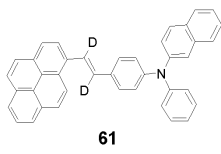
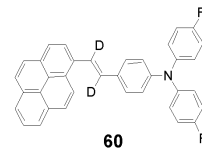
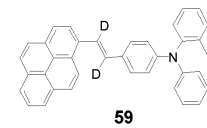
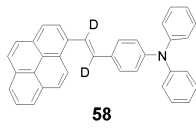
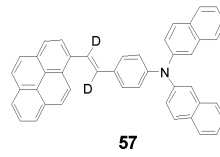
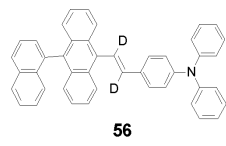
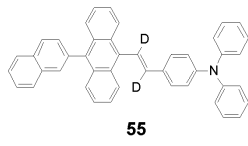
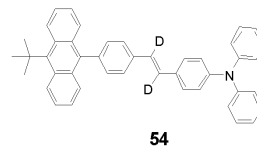
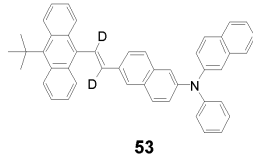
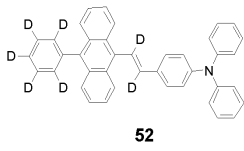
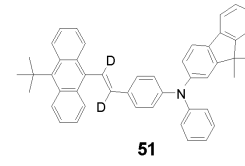
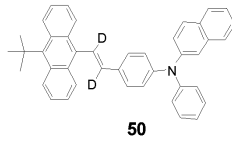
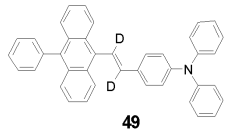
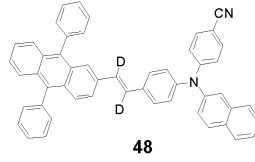
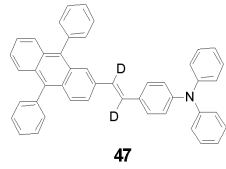
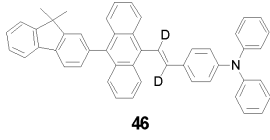
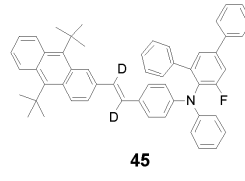
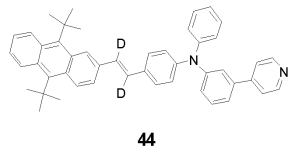
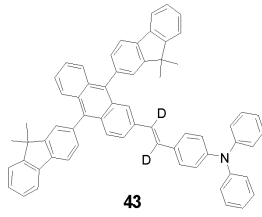
상기 화학식 1로 표시되는 스티릴계 화합물은, 예를 들어, 하기 화합물 1 내지 95 및 101 내지 182 중 어느 하나일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:



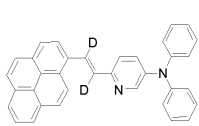
[0087]



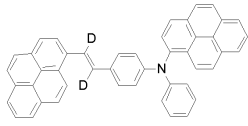
[0088]



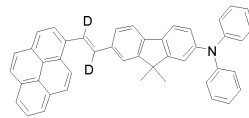
[0089]



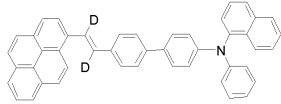
64



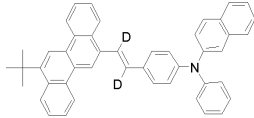
65



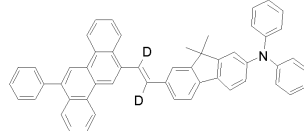
66



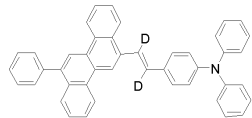
67



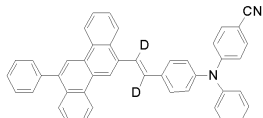
68



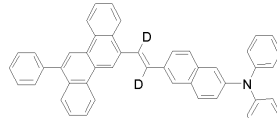
69



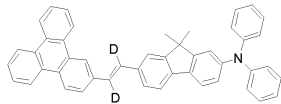
70



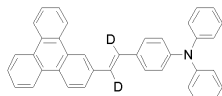
71



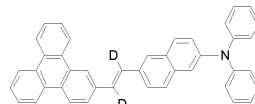
72



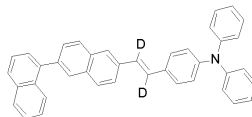
73



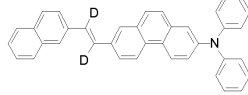
74



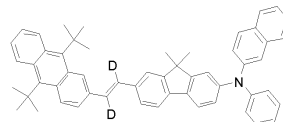
75



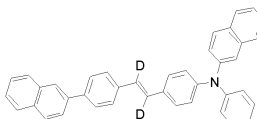
76



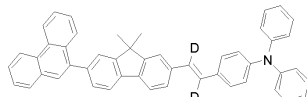
77



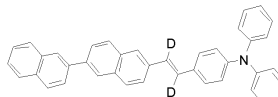
78



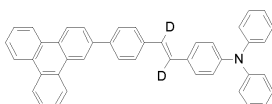
79



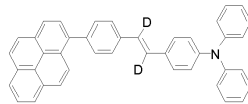
80



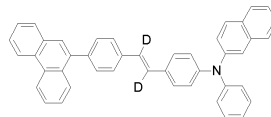
81



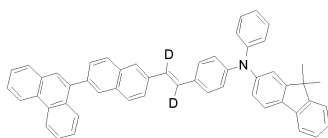
82



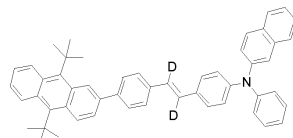
83



84

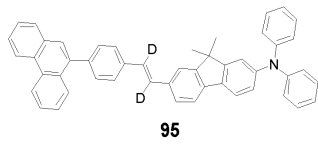
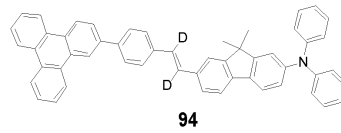
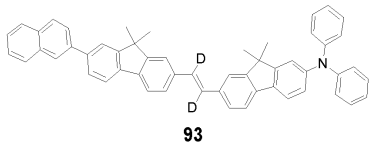
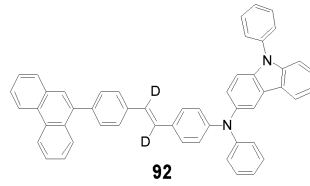
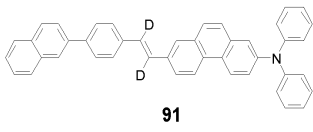
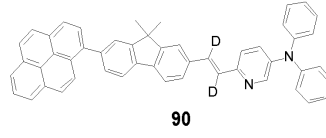
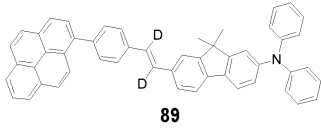
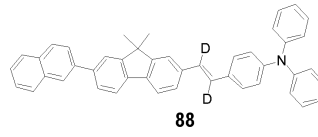
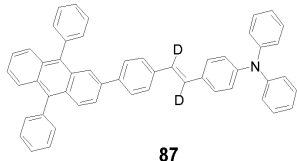


85

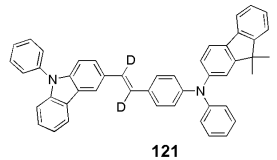
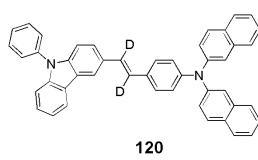
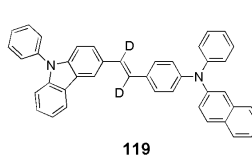
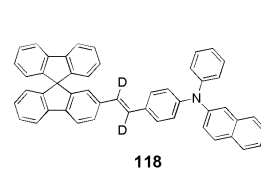
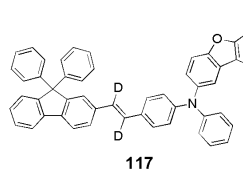
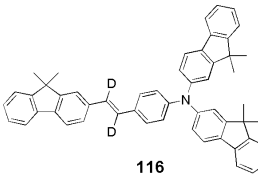
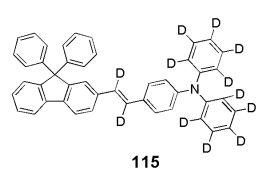
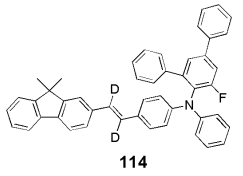
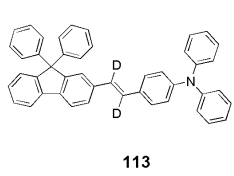
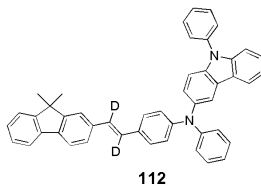
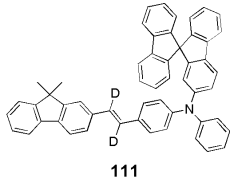
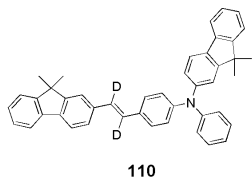
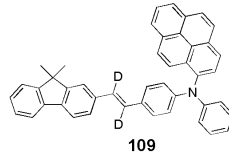
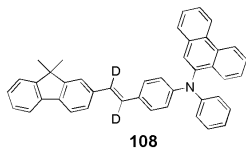
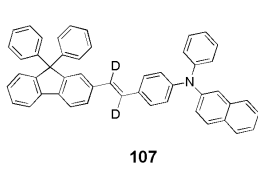
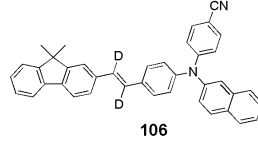
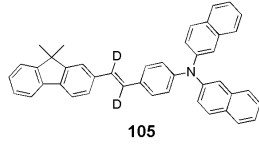
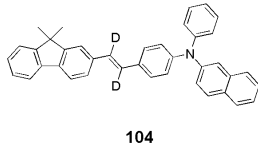
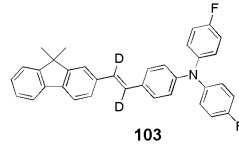
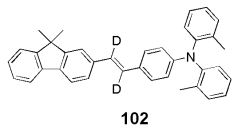
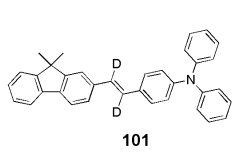


86

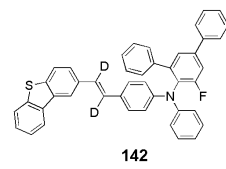
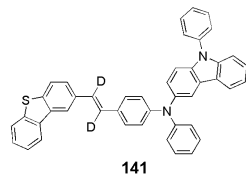
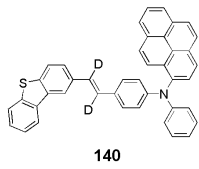
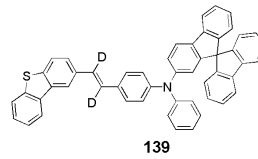
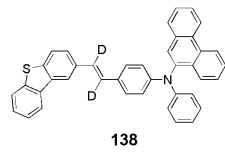
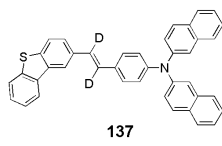
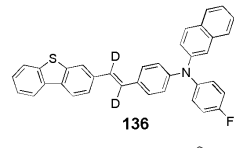
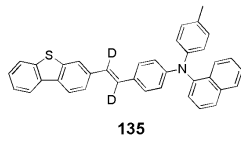
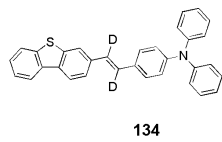
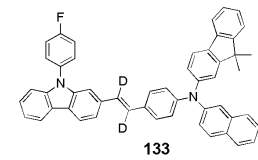
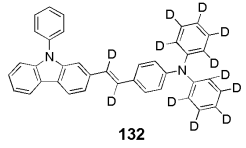
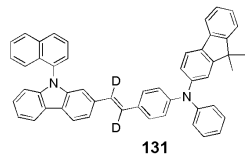
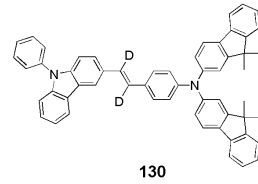
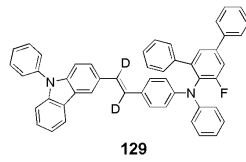
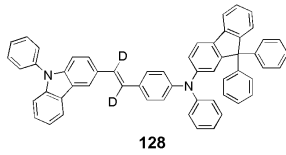
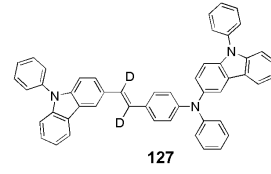
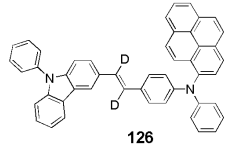
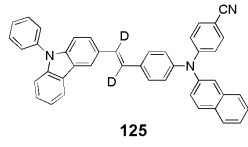
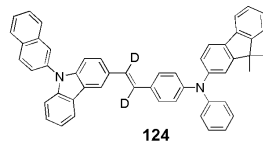
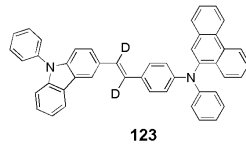
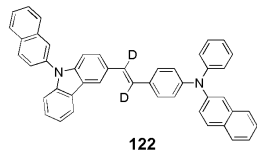
[0090]



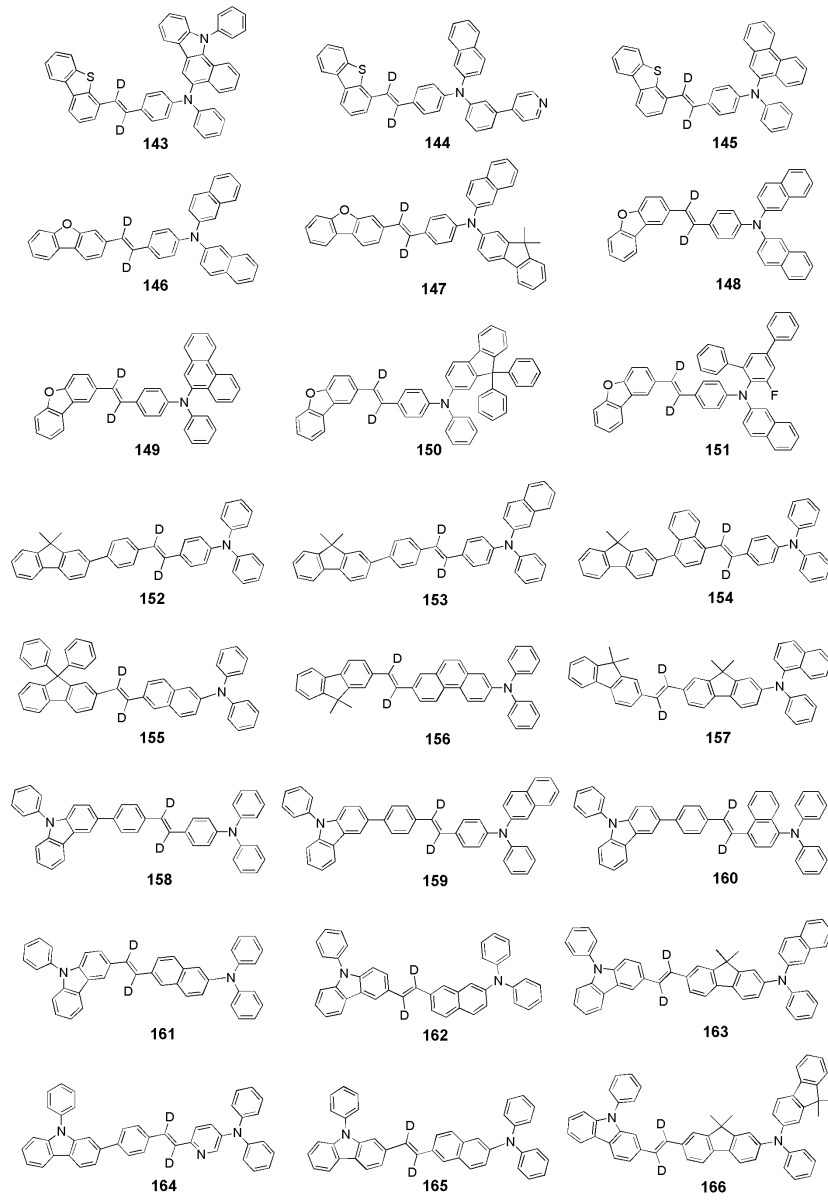
[0091]



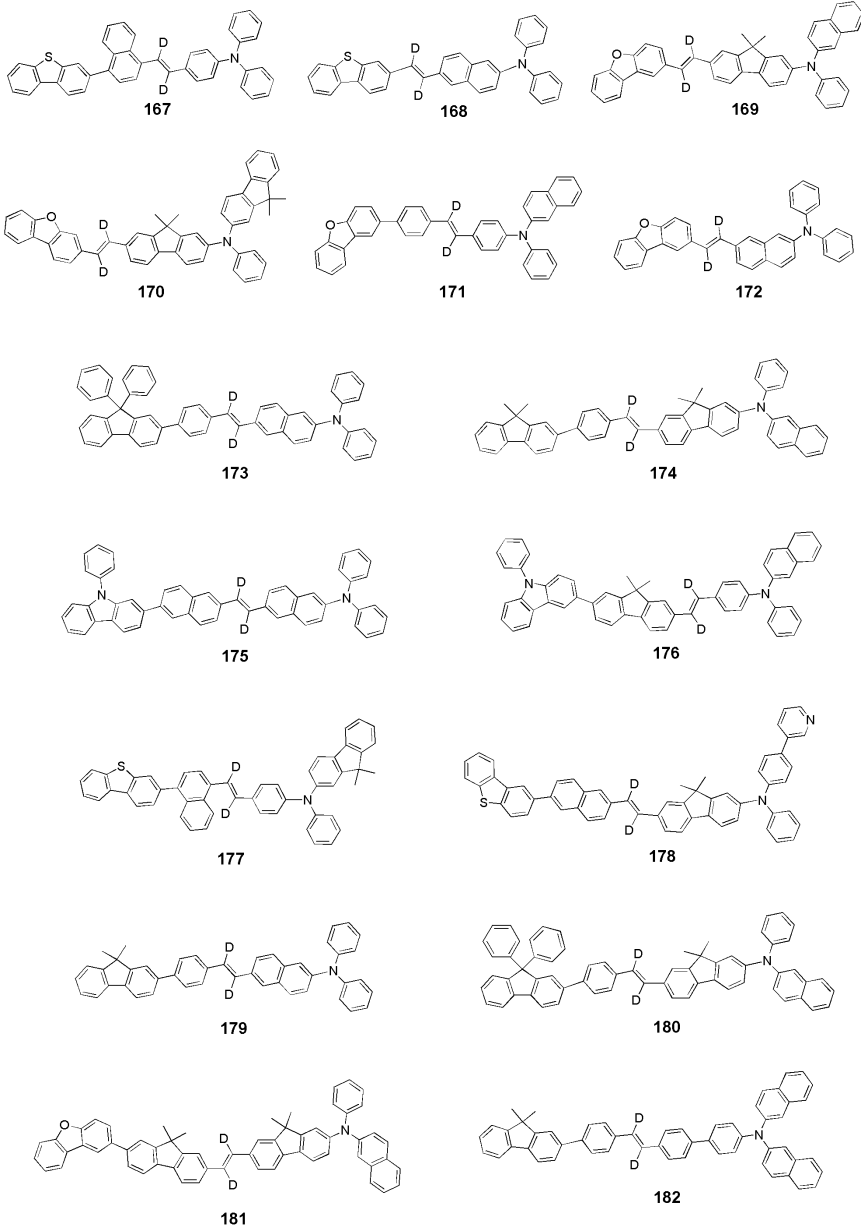
[0092]



[0093]



[0094]



[0095]

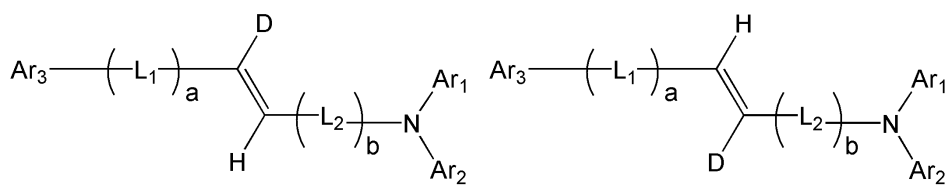
[0096]

한편, 상기 화학식 1로 표시되는 스티릴계 화합물의 합성시, 스티릴기의 중수소화가 100% 이루어지지 않아, 스티릴기의 2개의 탄소 중 하나는 중수소로 치환되지 않은 화합물 및/또는 스티릴기의 2개의 탄소 모두가 중수소로 치환되지 않은 화합물이 함께 합성될 수 있다. 따라서, 상기 화학식 1로 표시되는 스티릴계 화합물을 포함 하되, 하기 화학식 1-1H-1로 표시되는 스티릴계 화합물, 화학식 1-1H-2로 표시되는 스티릴계 화합물 및 화학식 1-2H로 표시되는 스티릴계 화합물 중 하나 이상도 포함한 스티릴계 화합물-함유 조성물이 제공될 수 있다:

[0097]

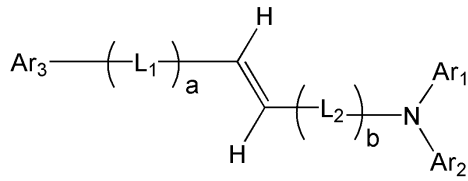
<화학식 1-1H-1>

<화학식 1-1H-2>



[0098]

[0099] <화학식 1-2H>



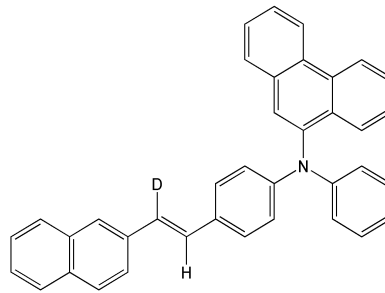
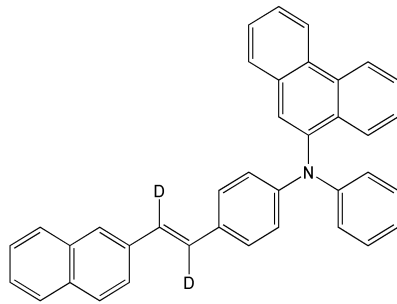
[0100]

[0101] 상기 화학식 1-1H-1, 1-1H-2 및 1-2H 중 치환기에 대한 상세한 설명은 상술한 바를 참조한다.

[0102] 예를 들어, 상기 화합물 3을 합성할 경우, 반응 조건에 따라, i) 순수한 화합물 3을 얻을 수도 있고 ii) 화합물 3을 포함하되, 하기 화합물 3-1H-1, 화합물 3-1H-2 및 화합물 3-2H 중 하나 이상을 더 포함한 조성물을 얻을 수 있다:

[0103] <화합물 3>

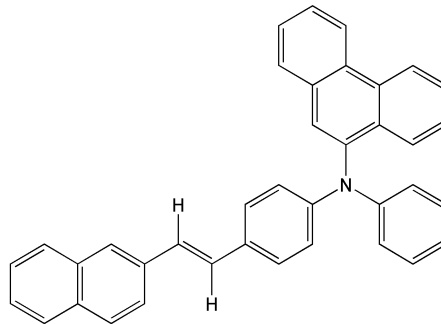
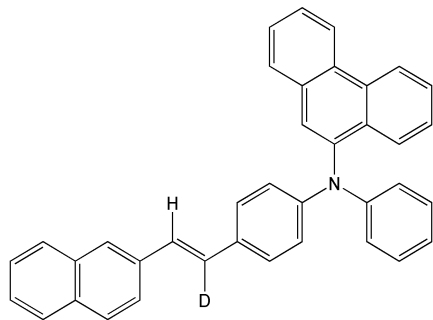
<화합물 3-1H-1>



[0104]

[0105] <화합물 3-1H-2>

<화합물 3-2H>



[0106]

[0107] 상기 조성물의 중수소 치환율 하기 수학적 1로 표시될 수 있으며, 상기 중수소 치환율은 70% 이상일 수 있다:

[0108] <수학적 1>

[0109] 
$$\text{중수소 치환율(\%)} = N_D / N_{D+H} \times 100$$

[0110] 상기 수학적 1 중,  $N_D$ 는 상기 화학식 1, 화학식 1-1H-1 및 화학식 1-1H-2 중 스티릴기의 탄소와 결합한 중수소의 개수이고;  $N_{D+H}$ 는 상기 화학식 1, 화학식 1-1H-1, 화학식 1-1H-2 및 화학식 1-2H 중 스티릴기의 탄소와 결합한 중수소 및 수소의 개수의 총합이다.

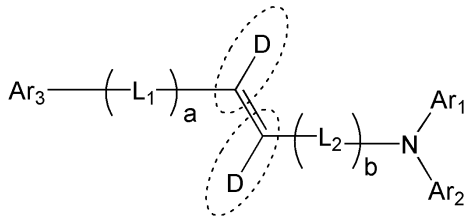
[0111] 상기 조성물의 중수소 치환율이 70% 이상일 경우, 상기 조성물을 포함한 유기층을 채용한 유기 발광 소자는 후술하는 바와 같은 상기 화학식 1의 스티릴계 화합물의 효과에 의한 저구동 전압, 고효율, 고휘도, 장수명 등의 효과를 가질 수 있다.

[0112] 예를 들어, 상기 조성물의 중수소 치환율은, 75% 이상, 80% 이상, 85% 이상, 90% 이상 또는 95% 이상일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0113] 예를 들어, 상기 조성물의 중수소 치환율은 96% 이상, 97% 이상, 98% 이상 또는 99% 이상일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0114] 탄소-탄소 이중 결합을 포함한 스티릴기(즉, -CH=CH-)는, 유기 발광 소자 보관 및/또는 구동시 유기 발광 소자의 유기층들 계면, 유기층 내부 및/또는 유기층과 전극 사이에서 발생할 수 있는 줄(joule)열 또는 전계에 대하여 취약하고, 화합물의 승화정제나 진공 증착시 제공되는 열에 취약할 수 있다. 따라서, 열 및/또는 전계에 노출된 스티릴기 중 이중 결합에 연결된 탄소-수소간 단일 결합이 약화되어 라디칼 형태로 끊어질 수 있다. 그러나, 탄소-수소간의 단일 결합에 비해 탄소-중수소 간 단일 결합은 크기는 7배 정도로 강하므로, 탄소-중수소 간 단일 결합을 포함한 스티릴기는 보다 안정한 구조를 형성 할 수 있다. 상기 화학식 1로 표시되는 스티릴계 화합물의 스티릴기 중 탄소는 중수소와 단일 결합으로 결합되어 있어서(하기 화학식 1'의 점선으로 된 타원 참조), 상술한 바와 같은 열 및/또는 전계에 노출되더라도, 동적 동위원소 효과(kinetic isotope effect)에 의하여 탄소-중수소 간 단일 결합이 더욱 효과적으로 유지될 수 있다.:

[0115] <화학식 1'>



[0116] 따라서, 상기 화학식 1로 표시되는 스티릴계 화합물은 유기 발광 소자의 보관 및/또는 구동시 수반되는 열 및/또는 전계에 노출되더라도, 상기 화학식 1 중 스티릴기(즉, -DC=CD-)의 라디칼화가 중수소를 포함하지 않은 스티릴기(즉, -CH=CH-)의 라디칼화보다 현저히 지연되므로, 화학식 1로 표시되는 스티릴계 화합물의 구조가 유지될 수 있다. 따라서, 상기 화학식 1로 표시되는 스티릴계 화합물을 채용한 유기 발광 소자는 고구동 전압, 고효율, 고휘도 및 장수명의 효과를 가질 수 있다.

[0118] 상기 화학식 1을 갖는 스티릴계 화합물 및 스티릴계 화합물을 포함한 조성물은 공지의 유기 합성 방법을 이용하여 합성될 수 있다. 상기 스티릴계 화합물의 합성 방법은 후술하는 실시예를 참조하여 당업자에게 용이하게 인식될 수 있다. 상술한 바와 같은 스티릴계 화합물을 포함한 조성물은 상기 화학식 1-1H-1로 표시되는 화합물, 화학식 1-1H-2로 표시되는 화합물 및 화학식 1-2H로 표시되는 화합물 중 적어도 하나를 추가한 것이 아니라, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물의 합성시 스티릴기의 중수소화가 불완전하게 이루어진 결과 수득되는 것일 수 있다.

[0119] 상기 화학식 1의 스티릴계 화합물 또는 상기 스티릴계 화합물 함유 조성물은 유기 발광 소자의 한 쌍의 전극 사이에 사용될 수 있다. 예를 들어, 상기 스티릴계 화합물 또는 스티릴계 화합물-함유 조성물은 발광층 및/또는 애노드와 발광층 사이(예를 들면, 정공 주입층, 정공 수송층 또는 정공 주입 및 정공 수송 기능을 동시에 하는 기능층)에 사용될 수 있다.

[0120] 따라서, 제1전극, 상기 제1전극에 대향된 제2전극 및 상기 제1전극과 상기 제2전극 사이에 개재된 유기층을 포함하되, 상기 유기층은 상술한 바와 같은 화학식 1로 표시된 스티릴계 화합물을 1종 이상 포함하거나, 상기 스티릴계 화합물-함유 조성물을 포함한, 유기 발광 소자가 제공된다.

[0121] 본 명세서 중 "(유기층이) 스티릴계 화합물을 1종 이상 포함한다"란, "(유기층이) 상기 화학식 1의 범주에 속하는 1종의 스티릴계 화합물 또는 상기 화학식 1의 범주에 속하는 서로 다른 2종 이상의 스티릴계 화합물을 포함할 수 있다"로 해석될 수 있다.

[0122] 예를 들어, 상기 유기층은 상기 스티릴계 화합물로서, 상기 화합물 3만을 포함할 수 있다. 이 때, 상기 화합물 3은 상기 유기 발광 소자의 발광층에 존재할 수 있다. 또는, 상기 유기층은 상기 스티릴계 화합물로서, 상기 화합물 3과 화합물 19를 포함할 수 있다. 이 때, 상기 화합물 3과 화합물 19는 동일한 층에 존재(예를 들면, 상기 화합물 3과 화합물 19는 발광층에 존재할 수 있음)하거나, 서로 다른 층에 존재(예를 들면, 상기 화합물 3은 발광층에 존재하고 상기 화합물 19는 정공 수송층에 존재할 수 있음)할 수 있다.

[0123] 본 명세서 중 "(유기층이) 상기 조성물을 1종 이상 포함한다"란, "(유기층이) 상기 조성물의 범주에 속하는 1종의 조성물 또는 상기 조성물의 범주에 속하는 서로 다른 2종 이상의 조성물을 포함할 수 있다"로 해석될 수 있다.

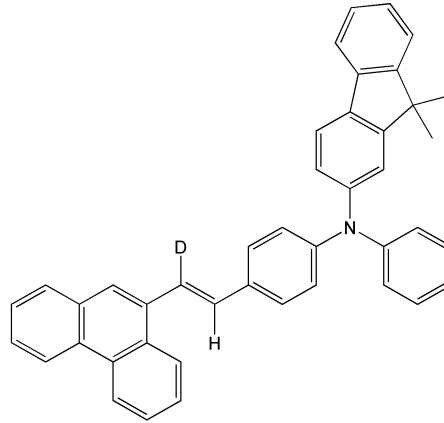
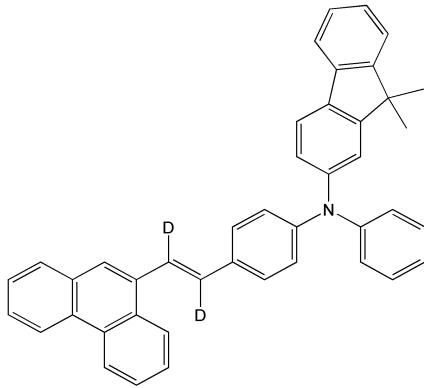
[0124] 예를 들어, 상기 유기층은 상기 조성물로서, 상기 화합물 3을 포함하고 상기 화합물 3-1H-1, 화합물 3-1H-2 및

화합물 3-2H 중 적어도 하나를 더 포함한 조성물만을 포함할 수 있다. 이 때, 상기 조성물은 상기 유기 발광 소자의 발광층에 존재할 수 있다.

[0125] 또는, 상기 유기층은 상기 조성물로서, 상기 화합물 3을 포함하고 상기 화합물 3-1H-1, 화합물 3-1H-2 및 화합물 3-2H 중 적어도 하나를 더 포함한 제1조성물과 상기 화합물 19을 포함하고 상기 화합물 19-1H-1, 화합물 19-1H-2 및 화합물 19-2H 중 적어도 하나를 더 포함한 제2조성물을 포함할 수 있다. 이 때, 상기 제1조성물과 상기 제2조성물은 동일한 층에 존재(예를 들면, 상기 제1조성물과 상기 제2조성물은 모두 발광층에 존재할 수 있음)하거나, 또는 서로 다른 층에 존재(예를 들면, 상기 제1조성물은 발광층에 존재하고, 상기 제2조성물은 정공 수송층에 존재할 수 있음)할 수 있다.

[0126] <화합물 19>

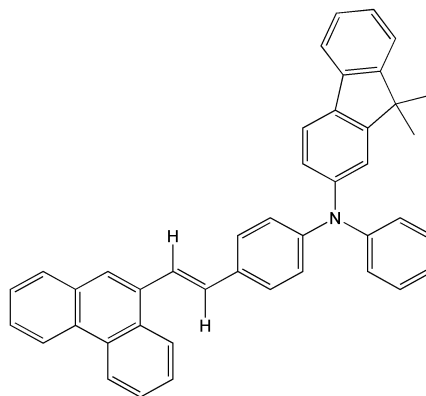
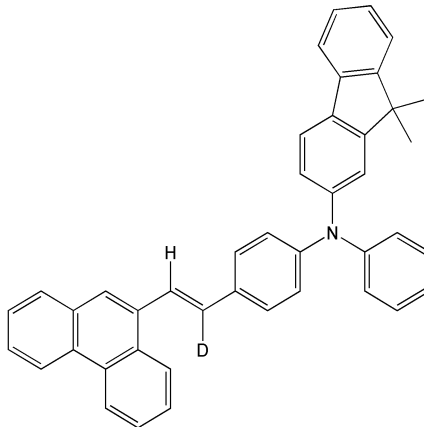
<화합물 19-1H-1>



[0127]

[0128] <화합물 19-1H-2>

<화합물 19-2H>



[0129]

[0130] 상기 유기층은 정공 주입층, 정공 수송층, 정공 주입 기능 및 정공 수송 기능을 동시에 갖는 기능층(이하, "H-기능층(H-functional layer)"이라 함), 버퍼층, 전자 저지층, 발광층, 정공 저지층, 전자 수송층, 전자 주입층 및 전자 수송 기능 및 전자 주입 기능을 동시에 갖는 기능층(이하, "E-기능층(E-functional layer)"이라 함) 중 적어도 하나를 포함할 수 있다.

[0131] 본 명세서 중 "유기층"은 유기 발광 소자 중 제1전극과 제2전극 사이에 개재된 단일 및/또는 복수의 층을 가리키는 용어이다.

[0132] 상기 유기층은 발광층을 포함하고, 상기 발광층에 상기 스티릴계 화합물 또는 상기 스티릴계 화합물-함유 조성물이 포함되어 있을 수 있다.

[0133] 상기 발광층에 포함된 스티릴계 화합물은 형광 도펀트의 역할을 할 수 있다. 예를 들면, 상기 스티릴계 화합물은 청색광을 방출하는 청색 형광 도펀트의 역할을 할 수 있다.

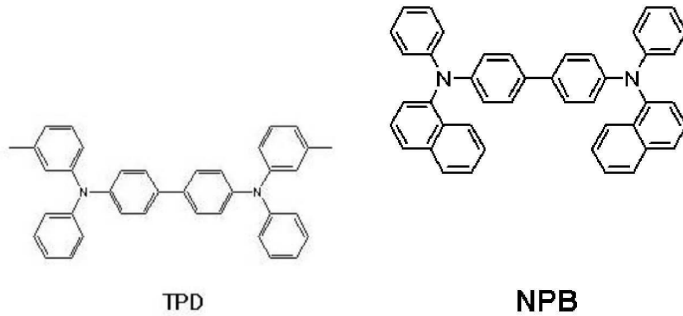
[0134] 도 1은 본 발명의 일 구현예를 따르는 유기 발광 소자(10)의 단면도를 개략적으로 도시한 것이다. 이하, 도 1을 참조하여 본 발명의 일 구현예를 따르는 유기 발광 소자의 구조 및 제조 방법을 설명하면 다음과 같다.



의 정공 주입 특성을 얻을 수 있다.

[0146] 다음으로 상기 정공 주입층 상부에 진공증착법, 스핀코팅법, 캐스트법, LB법 등과 같은 다양한 방법을 이용하여 정공 수송층(HTL)을 형성할 수 있다. 진공 증착법 및 스핀 텅법에 의하여 정공 수송층을 형성하는 경우, 그 증착 조건 및 코팅조건은 사용하는 화합물에 따라 다르지만, 일반적으로 정공 주입층의 형성과 거의 동일한 조건 범위 중에서 선택될 수 있다.

[0147] 정공 수송 물질로는 상기 스티릴계 화합물, 상기 스티릴계-함유 조성물 및 공지된 정공 수송 물질 중 적어도 하나를 사용할 수 있다. 공지된 정공 수송 재료로는, 예를 들어, N-페닐카바졸, 폴리비닐카바졸 등의 카바졸 유도체, N,N'-비스(3-메틸페닐)-N,N'-디페닐-[1,1'-비페닐]-4,4'-디아민(TPD), TCTA(4,4',4"-트리스(N-카바졸일)트리페닐아민(4,4',4"-tris(N-carbazolyl)triphenylamine)), NPB(N,N'-디(1-나프틸)-N,N'-디페닐벤지딘(N,N'-di(1-naphthyl)-N,N'-diphenylbenzidine)) 등을 들 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.



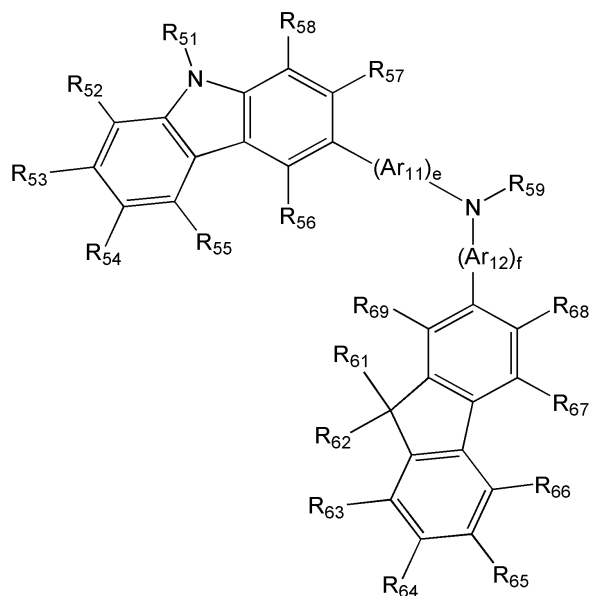
[0148]

[0149] 상기 정공 수송층의 두께는 약 50Å 내지 약 2000Å, 예를 들면 약 100Å 내지 약 1500Å일 수 있다. 상기 정공 수송층의 두께가 전술한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 실질적인 구동 전압 상승없이 만족스러운 정도의 정공 수송 특성을 얻을 수 있다.

[0150] 상기 H-기능성(정공 수송 기능을 동시에 갖는 기능층)에는 상술한 바와 같은 정공 주입층 물질 및 정공 수송층 물질 중에서 1 이상의 물질이 포함될 수 있으며, 상기 H-기능층의 두께는 약 500Å 내지 약 10000Å, 예를 들면, 약 100Å 내지 약 1000Å일 수 있다. 상기 H-기능층의 두께가 전술한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 실질적인 구동 전압의 상승없이 만족스러운 정도의 정공 주입 및 수송 특성을 얻을 수 있다.

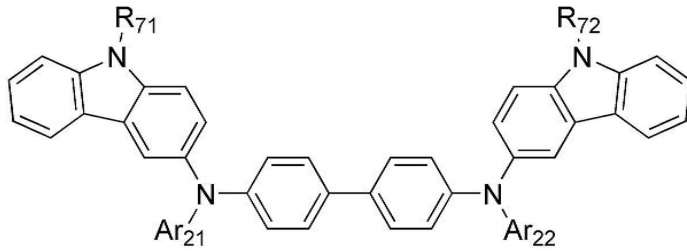
[0151] 한편, 상기 정공 주입층, 정공 수송층 및 H-기능층 중 적어도 한 층은 하기 화학식 300으로 표시되는 화합물 및 하기 화학식 350으로 표시되는 화합물 중 하나 이상을 포함할 수 있다:

[0152] <화학식 300>



[0153]

[0154] <화학식 350>



[0155]

[0156] 상기 화학식 300 및 350 중, Ar<sub>11</sub>, Ar<sub>12</sub>, Ar<sub>21</sub> 및 Ar<sub>22</sub>는 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C<sub>5</sub>-C<sub>60</sub>아릴렌기이다. 상기 Ar<sub>11</sub>, Ar<sub>12</sub>, Ar<sub>21</sub> 및 Ar<sub>22</sub>에 대한 설명은 상기 L<sub>1</sub>에 대한 상세한 설명을 참조한다.

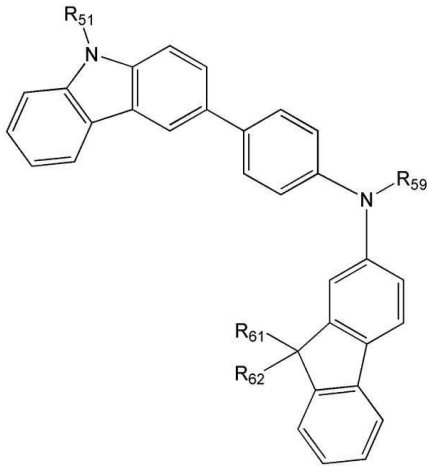
[0157] 상기 화학식 300 중, 상기 e 및 f는 서로 독립적으로 0 내지 5의 정수, 또는 0, 1 또는 2일 수 있다. 예를 들어, 상기 e는 1이고, f는 0일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0158] 상기 화학식 300 및 350 중, R<sub>51</sub> 내지 R<sub>58</sub>, R<sub>61</sub> 내지 R<sub>69</sub> 및 R<sub>71</sub> 및 R<sub>72</sub>는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진, 히드라존, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염, 인산이나 이의 염, 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알킬기, 치환 또는 비치환된 C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알케닐기, 치환 또는 비치환된 C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알키닐기, 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알콕시기, 치환 또는 비치환된 C<sub>3</sub>-C<sub>60</sub>시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C<sub>5</sub>-C<sub>60</sub>아릴기, 치환 또는 비치환된 C<sub>5</sub>-C<sub>60</sub>아릴옥시기, 또는 치환 또는 비치환된 C<sub>5</sub>-C<sub>60</sub>아릴싸이오기일 수 있다. 예를 들어, 상기 R<sub>51</sub> 내지 R<sub>58</sub>, R<sub>61</sub> 내지 R<sub>69</sub> 및 R<sub>71</sub> 및 R<sub>72</sub>은 서로 독립적으로, 수소; 중수소; 할로젠 원자; 히드록실기; 시아노기; 니트로기; 아미노기; 아미디노기; 히드라진; 히드라존; 카르복실기나 이의 염; 술폰산기나 이의 염; 인산이나 이의 염; C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>알킬기(예를 들면, 메틸기, 에틸기, 프로필기, 부틸기, 펜틸기, 헥실기 등); C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>알콕시기(예를 들면, 메톡시기, 에톡시기, 프로톡시기, 부톡시기, 펜톡시기 등); 중수소, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진, 히드라존, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염 및 인산이나 이의 염 중 하나 이상으로 치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>알킬기 및 C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>알콕시기; 페닐기; 나프틸기; 안트릴기; 플루오레닐기; 파이레닐기; 중수소, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진, 히드라존, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염, 인산이나 이의 염, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>알킬기 및 C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>알콕시기 중 하나 이상으로 치환된 페닐기, 나프틸기, 안트릴기, 플루오레닐기 및 파이레닐기; 중 하나일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0159] 상기 화학식 300 중, R<sub>59</sub>는, 페닐기; 나프틸기; 안트릴기; 바이페닐기; 피리딜기; 및 중수소, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진, 히드라존, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염, 인산이나 이의 염, 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알킬기, 및 치환 또는 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>20</sub>알콕시기 중 하나 이상으로 치환된 페닐기, 나프틸기, 안트릴기, 바이페닐기 및 피리딜기; 중 하나일 수 있다.

[0160] 일 구현예에 따르면, 상기 화학식 300으로 표시되는 화합물은 하기 화학식 300A로 표시될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:

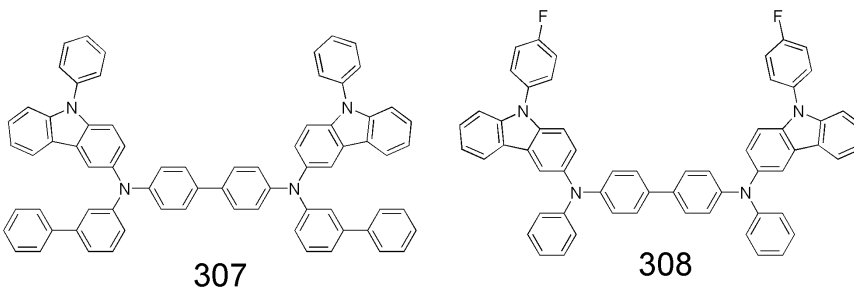
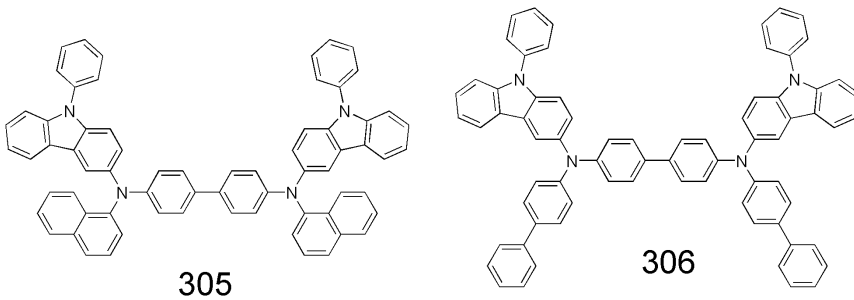
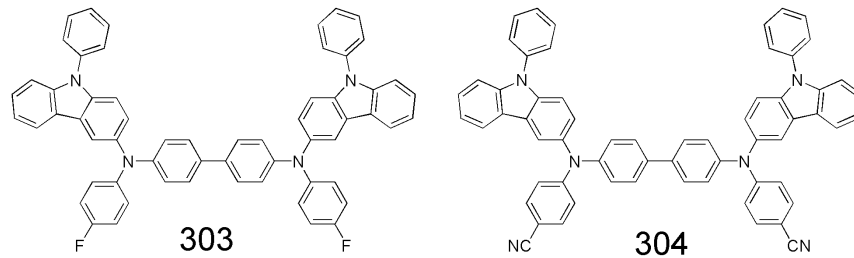
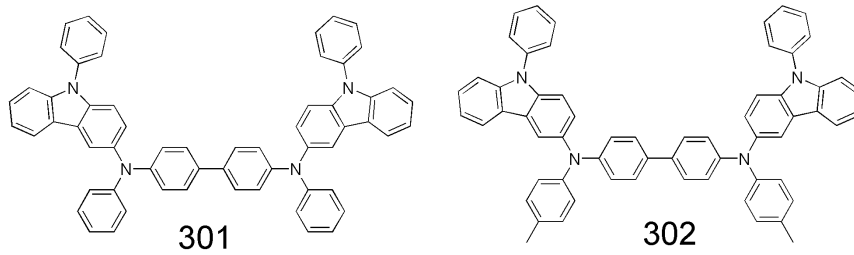
[0161] <화학식 300A>



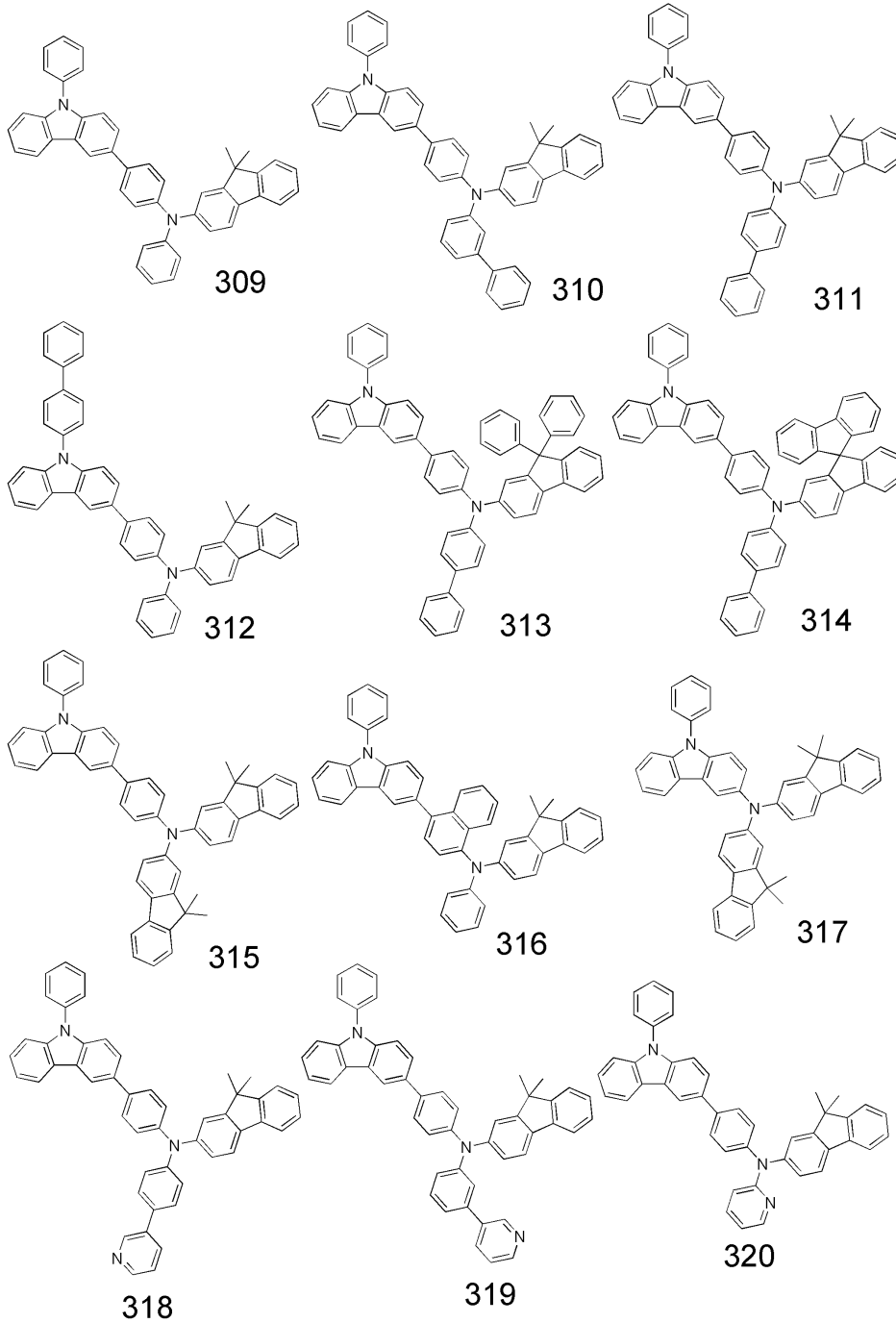
[0162]

[0163] 상기 화학식 300A 중, R<sub>51</sub>, R<sub>60</sub>, R<sub>61</sub> 및 R<sub>59</sub>에 대한 상세한 설명은 상술한 바를 참조한다.

[0164] 예를 들어, 상기 정공 주입층, 정공 수송층 및 H-기능층 중 적어도 한 층은 하기 화합물 301 내지 320 중 하나 이상을 포함할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:



[0165]



[0166]

[0167]

상기 정공 주입층, 정공 수송층 및 H-기능층 중 적어도 하나는, 상술한 바와 같은 공지된 정공 주입 물질, 공지된 정공 수송 물질 및/또는 정공 주입 기능 및 정공 수송 기능을 동시에 갖는 물질 외에, 막의 도전성 등을 향상시키기 위하여 전하-생성 물질을 더 포함할 수 있다.

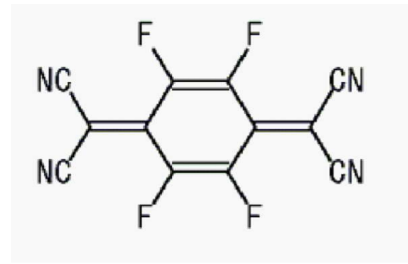
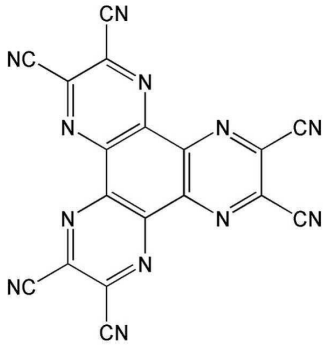
[0168]

상기 전하-생성 물질은 예를 들면, p-도펀트일 수 있다. 상기 p-도펀트는 퀴논 유도체, 금속 산화물 및 시아노기-함유 화합물 중 하나일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다. 예를 들어, 상기 p-도펀트의 비제한적인 예로는, 테트라시아노퀴논다이메테인(TCNQ) 및 2,3,5,6-테트라플루오로-테트라시아노-1,4-벤조퀴논다이메테인(F4-CTNQ) 등과 같은 퀴논 유도체; 텅스텐 산화물 및 몰리브덴 산화물 등과 같은 금속 산화물; 및 하기 화합물 200 등과 같은 시아노기-함유 화합물 등을 들 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0169]

<화합물 200>

<F4-CTNQ>



[0170]

[0171]

상기 정공 주입층, 상기 정공 수송층 또는 상기 H-기능층이 상기 전하-생성 물질을 더 포함할 경우, 상기 전하-생성 물질은 정공 주입층, 상기 정공 수송층 또는 상기 H-기능층 중에 균일하게(homogeneous) 분산되거나, 또는 불균일하게 분포될 수 있는 등, 다양한 변형이 가능하다.

[0172]

상기 정공 주입층, 정공 수송층 및 H-기능층 중 적어도 하나와 상기 발광층 사이에는 버퍼층이 개재될 수 있다. 상기 버퍼층은 발광층에서 방출되는 광의 파장에 따른 광학적 공진 거리를 보상하여 효율을 증가시키는 역할을 수 있다. 상기 버퍼층은 공지된 정공 주입 재료, 정공 수송 재료를 포함할 수 있다. 또는, 상기 버퍼층은 버퍼층 하부에 형성된 상기 정공 주입층, 정공 수송층 및 H-기능층에 포함된 물질 중 하나와 동일한 물질을 포함할 수 있다.

[0173]

이어서, 정공 수송층, H-기능층 또는 버퍼층 상부에 진공 증착법, 스펀 코팅법, 캐스트법, LB법 등과 같은 방법을 이용하여 발광층(EML)을 형성할 수 있다. 진공증착법 및 스펀코팅법에 의해 발광층을 형성하는 경우, 그 증착조건은 사용하는 화합물에 따라 다르지만, 일반적으로 정공주입층의 형성과 거의 동일한 조건범위 중에서 선택될 수 있다.

[0174]

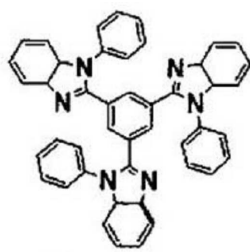
상기 발광층은 상기 스티릴계 화합물을 1종 이상 포함하거나, 상기 스티릴계 화합물-함유 조성물을 1종 이상 포함할 수 있다.

[0175]

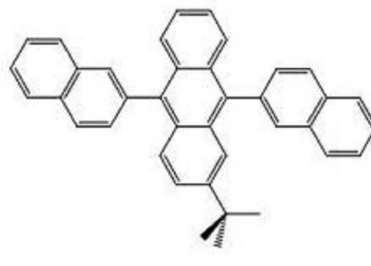
상기 발광층은 상기 스티릴계 화합물 또는 스티릴계 화합물-함유 조성물 외에, 호스트를 더 포함할 수 있다.

[0176]

상기 호스트로서, Alq<sub>3</sub>, CBP(4,4'-N,N'-디카바졸-비페닐), PVK(폴리(n-비닐카바졸)), 9,10-디(나프탈렌-2-일)안트라센(ADN), TCTA, TPBI(1,3,5-트리스(N-페닐벤즈이미다졸-2-일)벤젠(1,3,5-tris(N-phenylbenzimidazole-2-yl)benzene)), TBADN(3-tert-부틸-9,10-디(나프탈렌-2-일)안트라센), E3, DSA(디스티릴아릴렌), dmCBP(하기 화학식 참조), 하기 화합물 501 내지 509 등을 사용할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

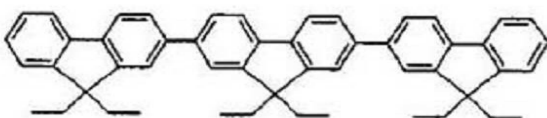


TPBI



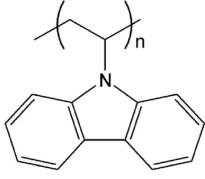
TBADN

[0177]



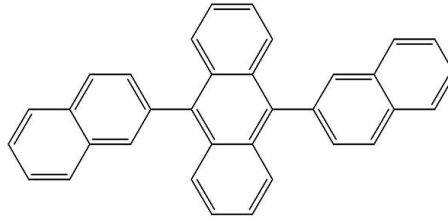
E3

[0178]



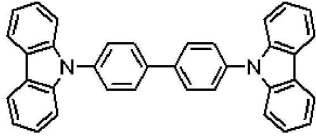
[0179]

PVK



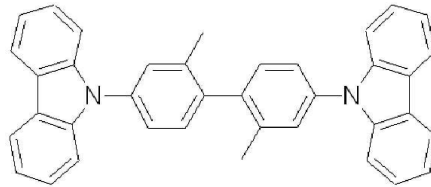
[0180]

ADN

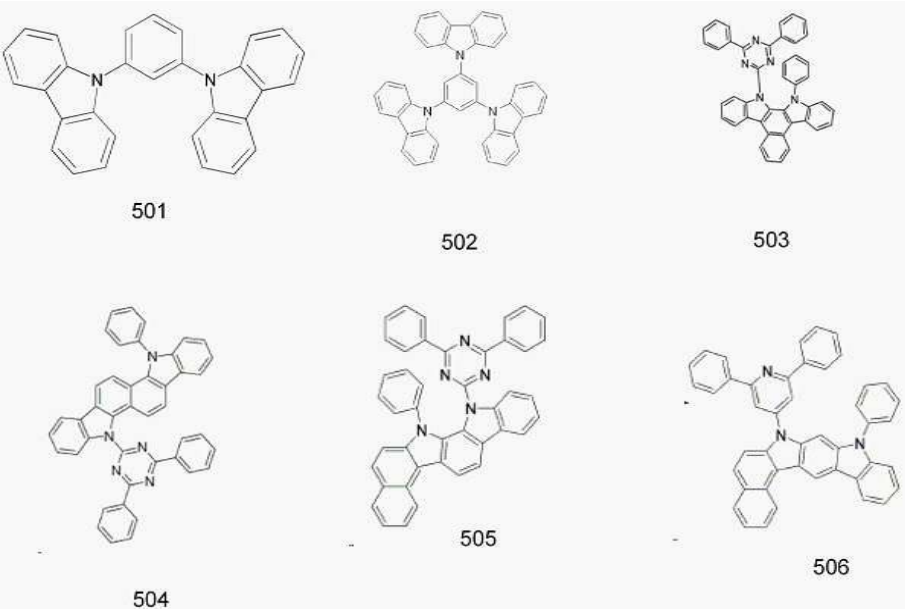


[0181]

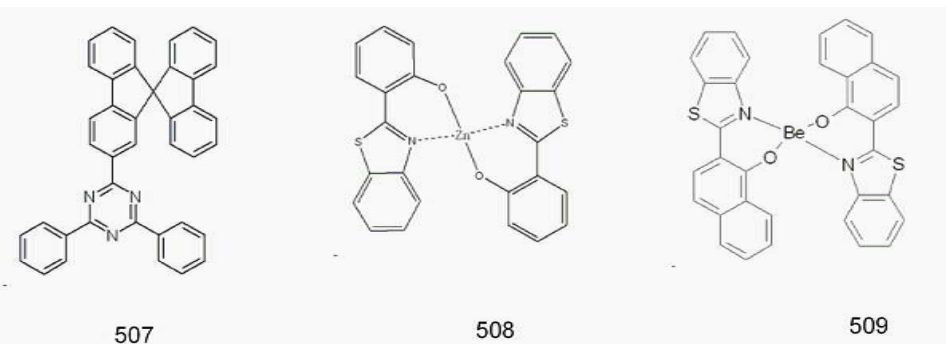
CBP



dmCBP



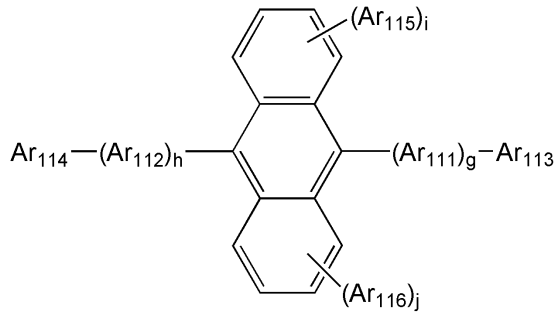
[0182]



[0183]

[0184] 또는, 상기 호스트로서, 하기 화학식 400으로 표시되는 안트라센계 화합물을 사용할 수 있다:

[0185] <화학식 400>



[0186]

[0187]

상기 화학식 400 중,  $Ar_{111}$  및  $Ar_{112}$ 는 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된  $C_5-C_{60}$ 아릴렌기이고; 상기  $Ar_{113}$  내지  $Ar_{116}$ 은 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된  $C_1-C_{10}$ 알킬기 또는 치환 또는 비치환된  $C_5-C_{60}$ 아릴기이고; g, h, i 및 j는 서로 독립적으로 0 내지 4의 정수일 수 있다.

[0188]

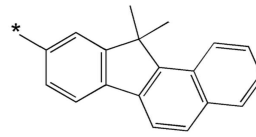
예를 들어, 상기 화학식 60 중,  $Ar_{111}$  및  $Ar_{112}$ 는 페닐렌기, 나프틸렌기, 페난트레닐렌기 또는 파이레닐렌기; 또는 페닐기, 나프틸기 및 안트릴기 중 하나 이상으로 치환된 페닐렌기, 나프틸렌기, 페난트레닐렌기, 플루오레닐기, 또는 파이레닐렌기일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0189]

상기 화학식 60 중 g, h, i 및 j는 서로 독립적으로, 0, 1 또는 2일 수 있다.

[0190]

상기 화학식 400 중,  $Ar_{113}$  내지  $Ar_{116}$ 은 서로 독립적으로, 페닐기, 나프틸기 및 안트릴기 중 하나 이상으로 치환된  $C_1-C_{10}$ 알킬기; 페닐기; 나프틸기; 안트릴기; 파이레닐기; 페난트레닐기; 플루오레닐기; 중수소, 할로겐 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진, 히드라존, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염, 인산이나 이의 염,  $C_1-C_{60}$ 알킬기,  $C_2-C_{60}$ 알케닐기,  $C_2-C_{60}$ 알키닐기,  $C_1-C_{60}$ 알콕시기, 페닐기, 나프틸기, 안트릴기, 파이레닐기, 페난트레닐기 및 플루오레닐기 중 하나 이상으로 치환된 페닐기, 나프틸기,

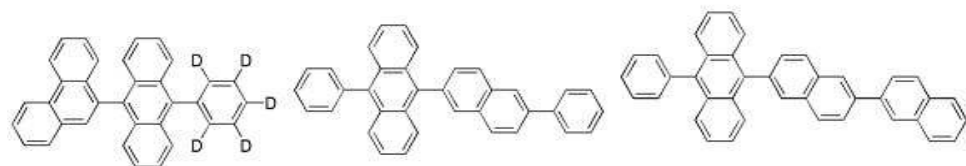
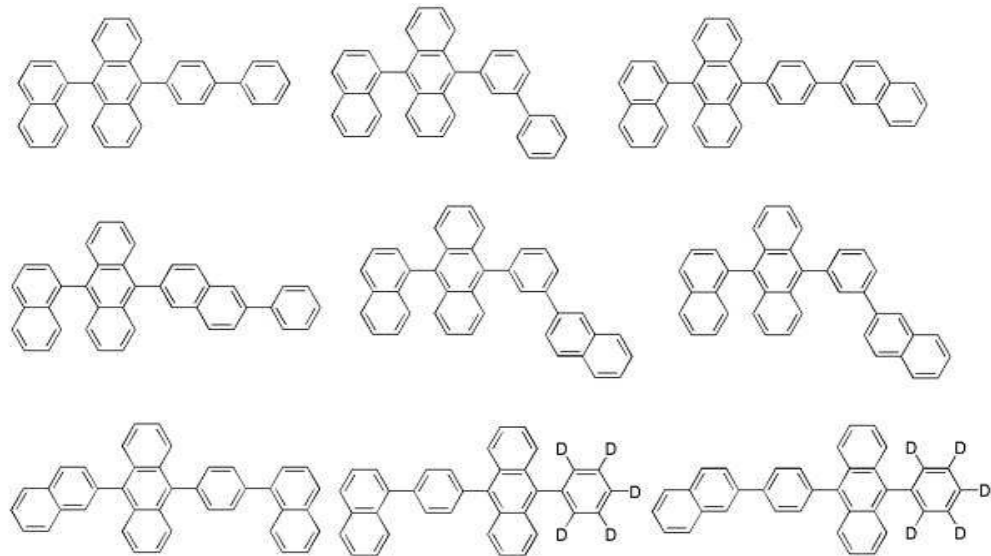
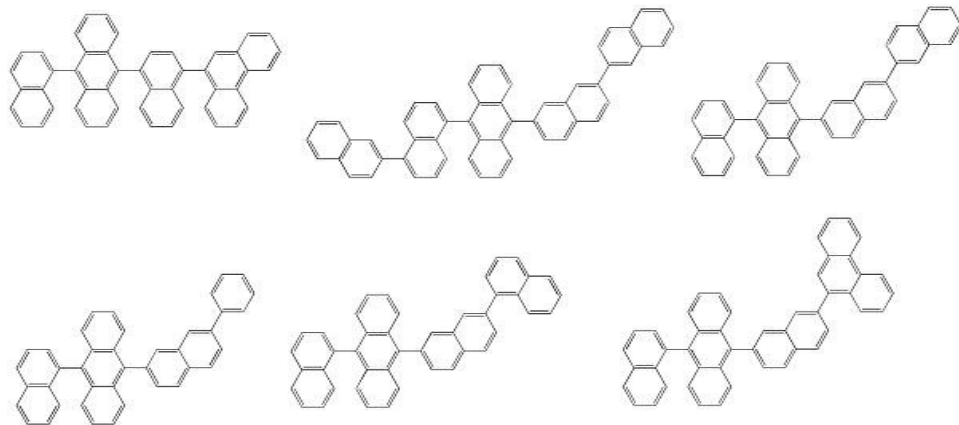
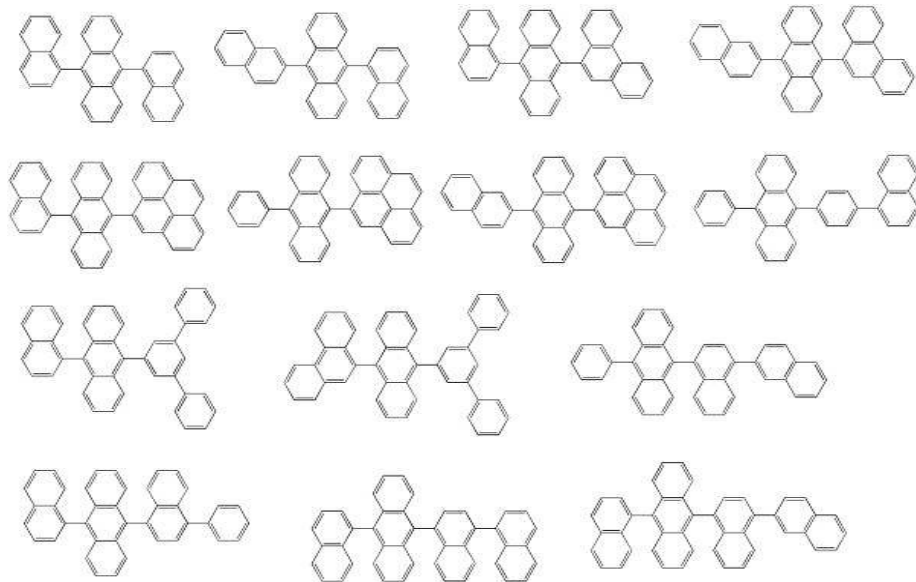


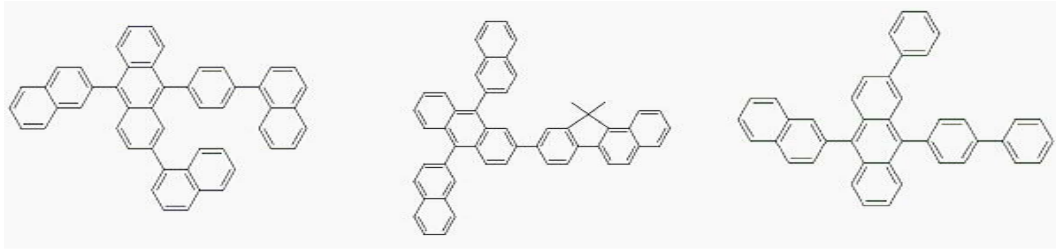
안트릴기, 파이레닐기, 페난트레닐기 및 플루오레닐기; 및 한정되는 것은 아니다.

중 하나일 수 있으나, 이에

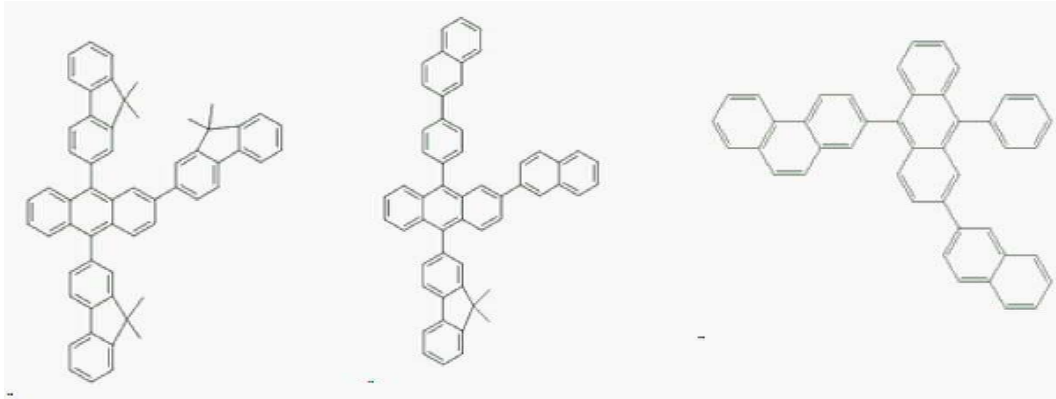
[0191]

예를 들어, 상기 화학식 400으로 표시된 안트라센계 화합물은 하기 화합물들 중 하나일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:





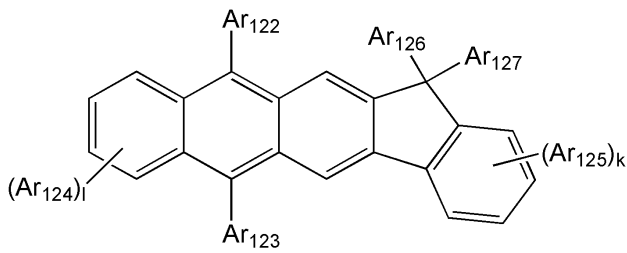
[0195]



[0196]

[0197] 또는, 상기 호스트로서, 하기 화학식 401으로 표시되는 안트라센계 화합물을 사용할 수 있다:

[0198] <화학식 401>



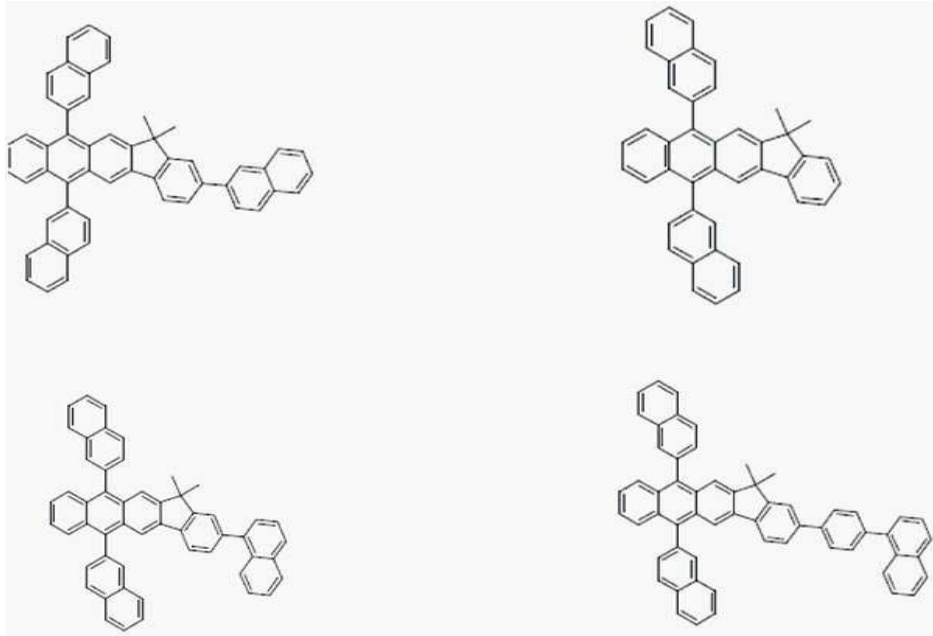
[0199]

[0200] 상기 화학식 401 중 Ar<sub>122</sub> 내지 Ar<sub>125</sub>에 대한 상세한 설명은 상기 화학식 400의 Ar<sub>113</sub>에 대한 설명을 참조한다.

[0201] 상기 화학식 401 중 Ar<sub>126</sub> 및 Ar<sub>127</sub>은 서로 독립적으로, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>알킬기(예를 들면, 메틸기, 에틸기 또는 프로필기)일 수 있다.

[0202] 상기 화학식 401 중 k 및 l은 서로 독립적으로 0 내지 4의 정수일 수 있다. 예를 들어, 상기 k 및 l은 0, 1 또는 2일 수 있다.

[0203] 예를 들어, 상기 화학식 401로 표시된 안트라센계 화합물은 하기 화합물들 중 하나일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:



[0204]

[0205]

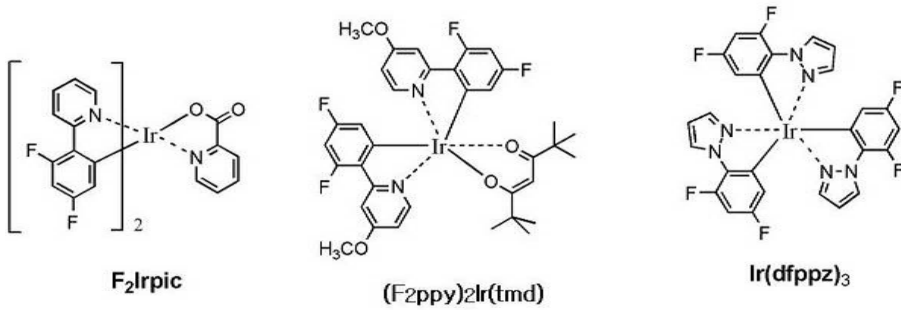
상기 유기 발광 소자가 풀 컬러 유기 발광 소자일 경우, 발광층은 적색 발광층, 녹색 발광층 및 청색 발광층으로 패턴링될 수 있다. 이 때, 청색 발광층에 상술한 바와 같은 스티릴계 화합물 또는 스티릴계 화합물-함유 조성물이 청색 형광 도펀트로서 포함될 수 있다.

[0206]

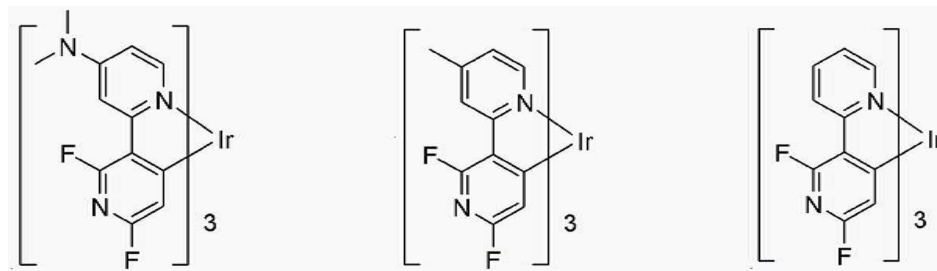
한편, 상기 적색 발광층, 녹색 발광층 및 청색 발광층 중 적어도 하나는 하나는 하기 도펀트를 포함할 수 있다 (ppy = 페닐피리딘)

[0207]

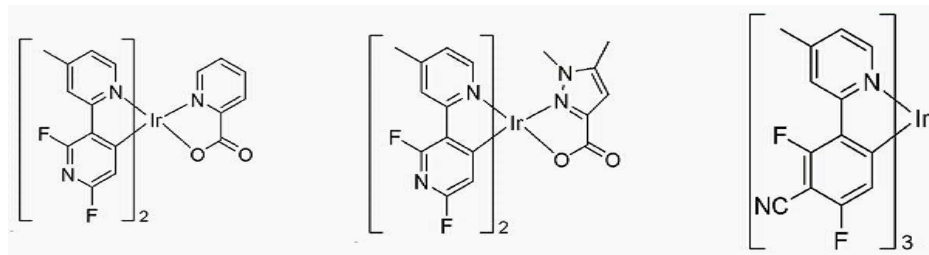
예를 들어, 청색 도펀트로서는 하기 화합물들 사용할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.



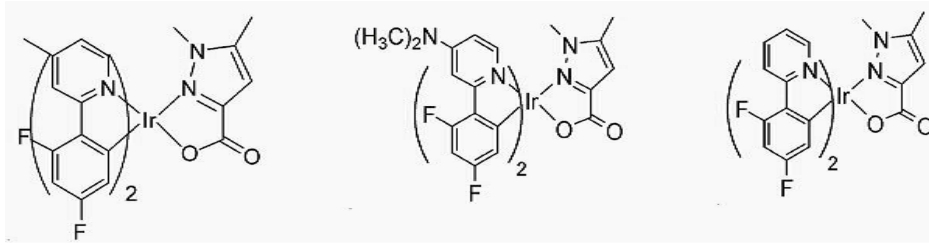
[0208]



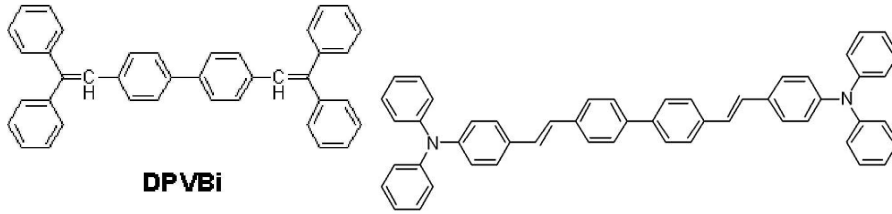
[0209]



[0210]



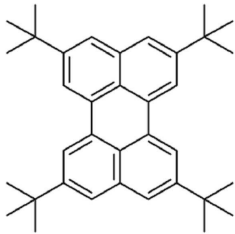
[0211]



[0212]

[0213]

DPAVBi



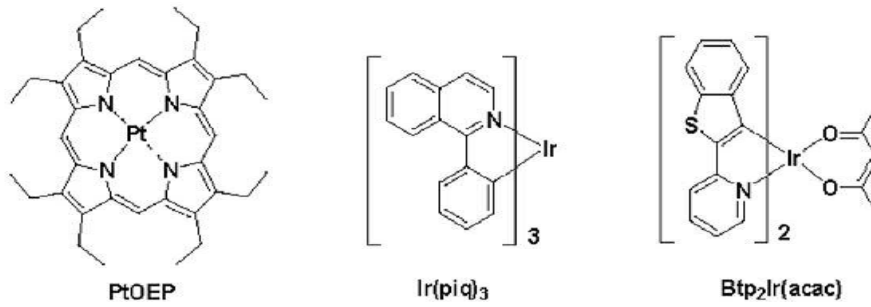
[0214]

[0215]

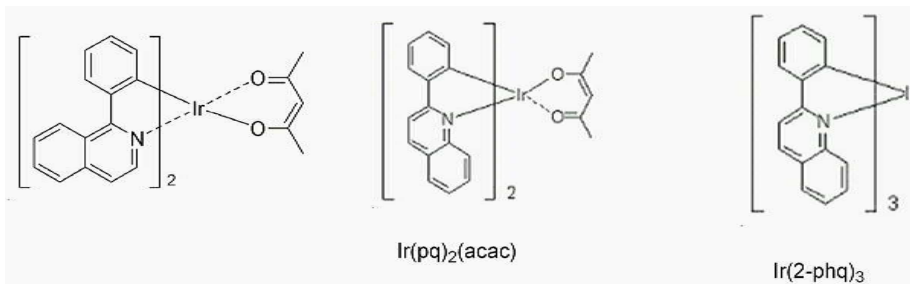
TBPe

[0216]

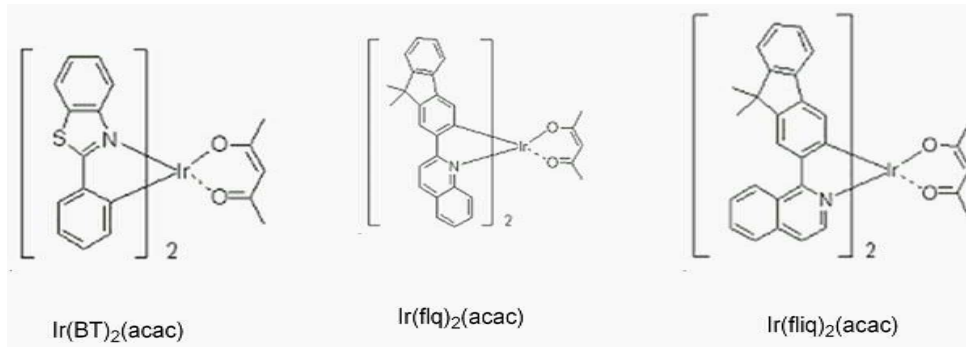
예를 들어, 적색 도펀트로서는 하기 화합물들 사용할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다. 또는, 상기 적색 도펀트로서, 후술한 DCM 또는 DCJTb를 사용할 수도 있다.



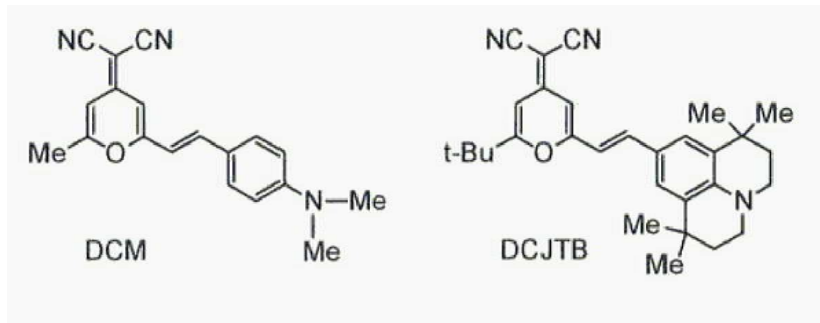
[0217]



[0218]



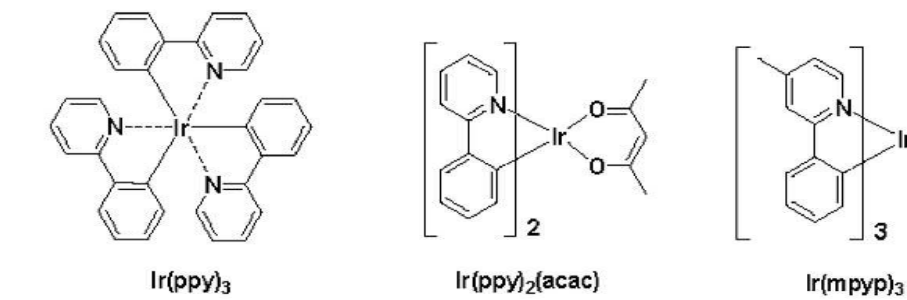
[0219]



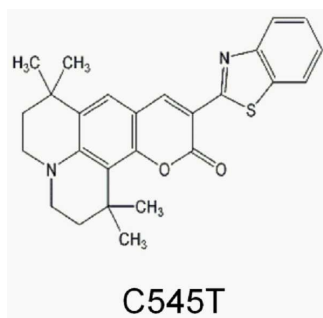
[0220]

[0221]

예를 들어, 녹색 도펀트로서는 하기 화합물들 사용할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다. 또는 녹색 도펀트로서, 하기 C545T를 사용할 수 있다.



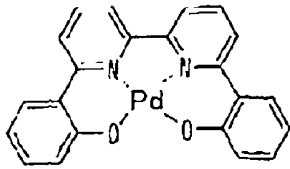
[0222]



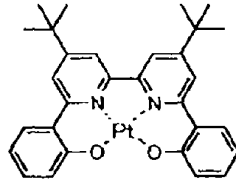
[0223]

[0224]

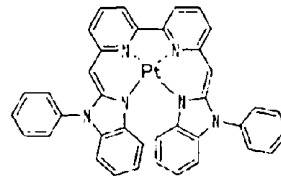
한편, 상기 발광층에 포함될 수 있는 도펀트는 후술하는 바와 같은 Pt-착체일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:



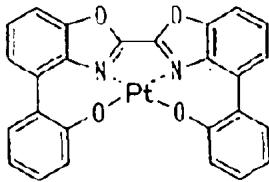
D1



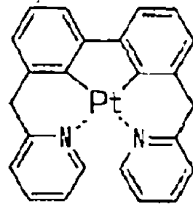
D2



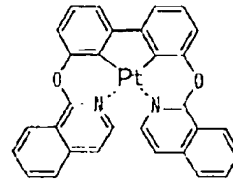
D3



D4

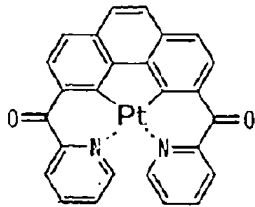


D5

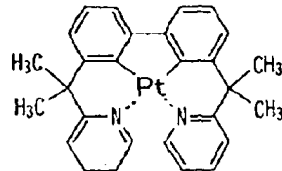


D6

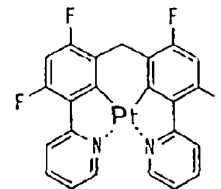
[0225]



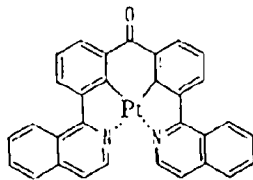
D7



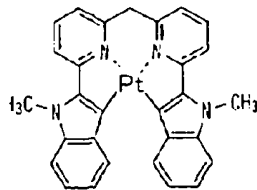
D8



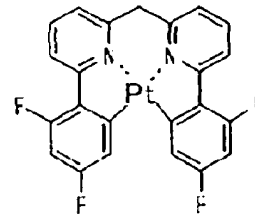
D9



D10

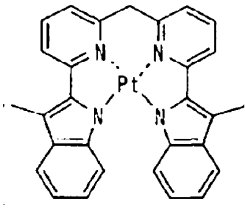


D11

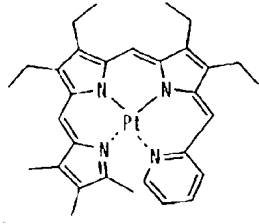


D12

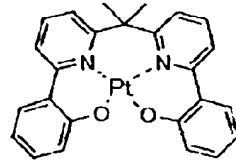
[0226]



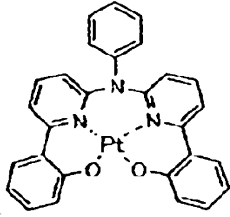
D13



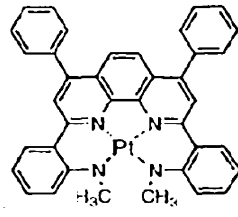
D14



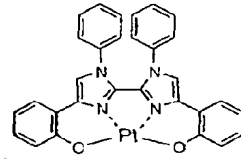
D15



D16

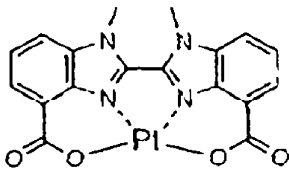


D17

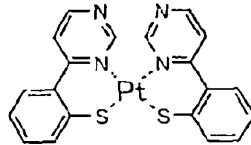


D18

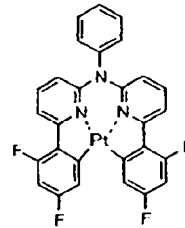
[0227]



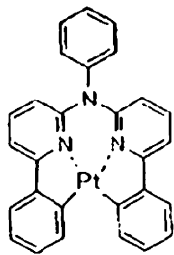
D19



D20

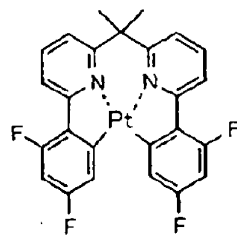


D21

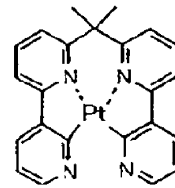


D22

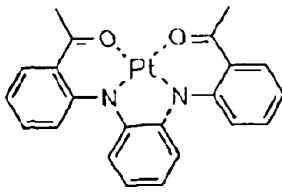
[0228]



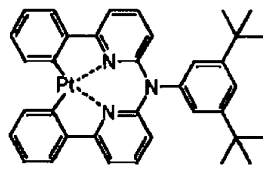
D23



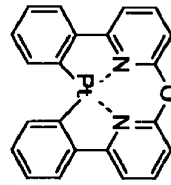
D24



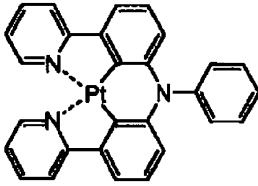
D25



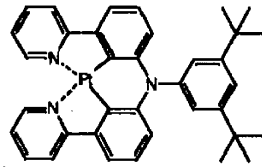
D26



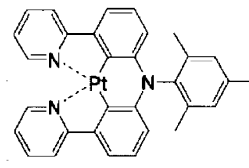
D27



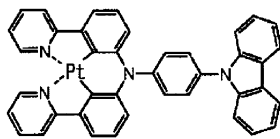
D28



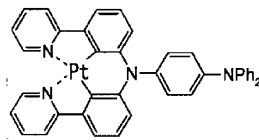
D29



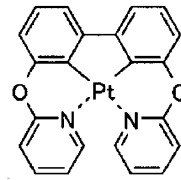
D30



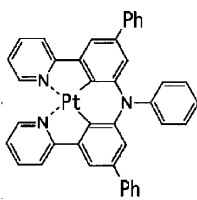
D31



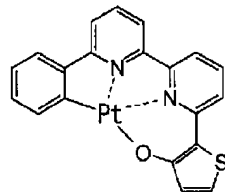
D32



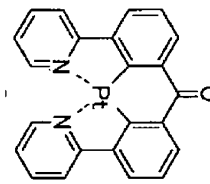
D33



D34



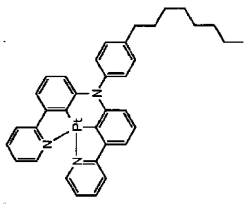
D35



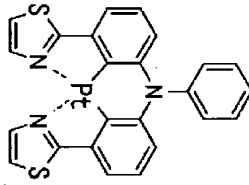
D36

[0229]

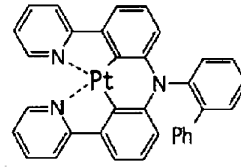
[0230]



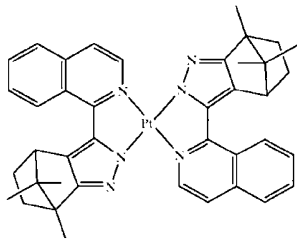
D37



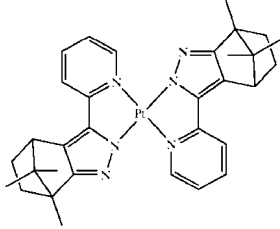
D38



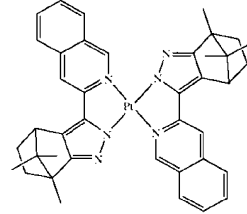
D39



D40

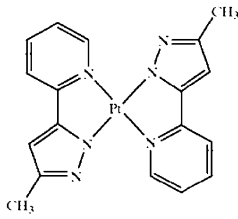


D41

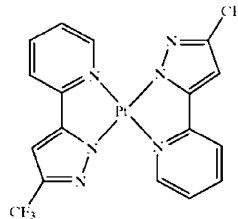


D42

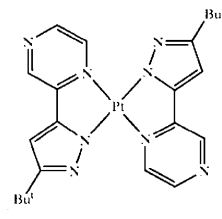
[0231]



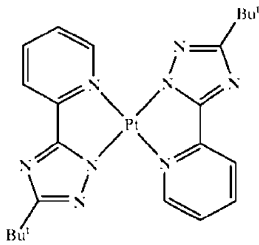
D43



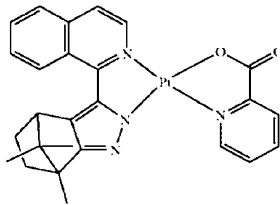
D44



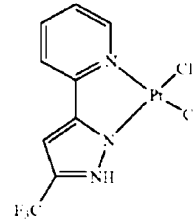
D45



D46

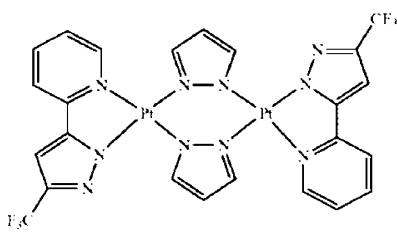


D47

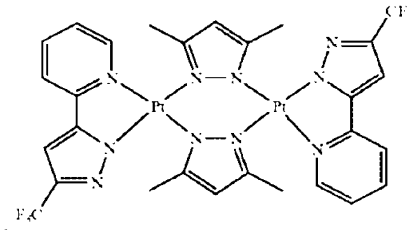


D48

[0232]



D49

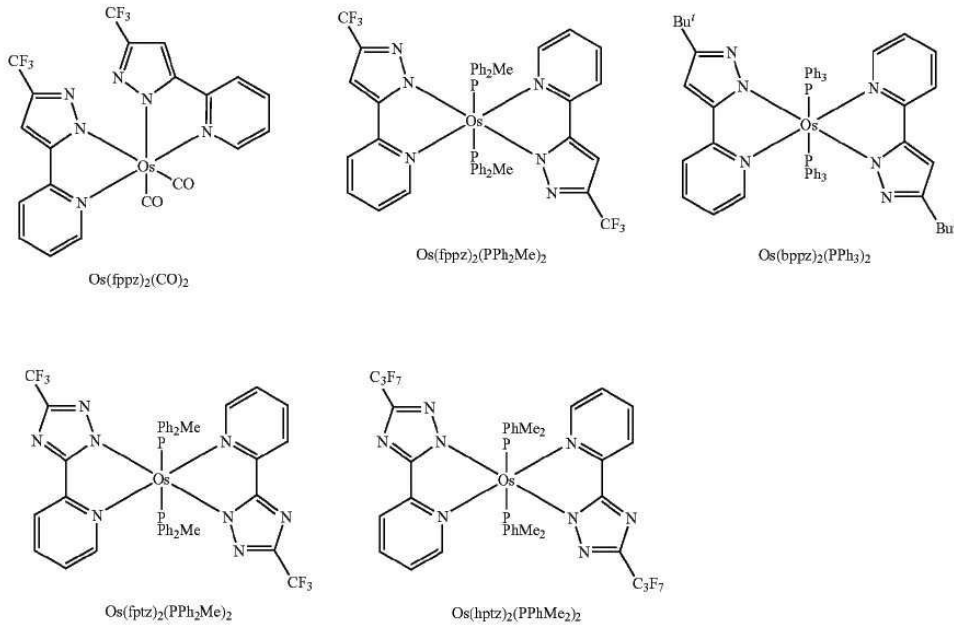


D50

[0233]

[0234]

또한, 상기 발광층에 포함될 수 있는 도펀트는 후술하는 바와 같은 Os-착체일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:

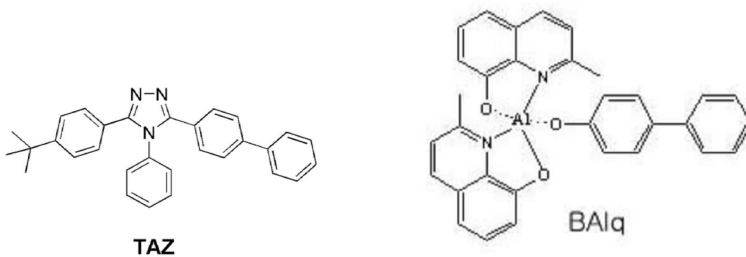


[0235]

[0236] 상기 발광층이 호스트 및 도펀트를 포함할 경우, 도펀트의 함량은 통상적으로 호스트 약 100 중량부를 기준으로 하여 약 0.01 내지 약 15 중량부의 범위에서 선택될 수 있으며, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0237] 상기 발광층의 두께는 약 100Å 내지 약 1000Å, 예를 들면 약 200Å 내지 약 600Å일 수 있다. 상기 발광층의 두께가 전술한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 실질적인 구동 전압 상승없이 우수한 발광 특성을 나타낼 수 있다.

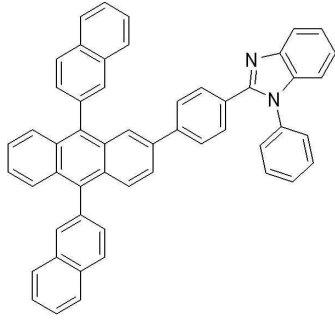
[0238] 다음으로 발광층 상부에 전자 수송층(ETL)을 진공증착법, 또는 스핀코팅법, 캐스트법 등의 다양한 방법을 이용하여 형성한다. 진공증착법 및 스핀코팅법에 의해 전자 수송층을 형성하는 경우, 그 조건은 사용하는 화합물에 따라 다르지만, 일반적으로 정공주입층의 형성과 거의 동일한 조건범위 중에서 선택될 수 있다. 상기 전자 수송층 재료로는 전자주입전극(Cathode)로부터 주입된 전자를 안정하게 수송하는 기능을 하는 것으로서 공지의 전자 수송 물질을 이용할 수 있다. 공지의 전자 수송 물질의 예로는, 퀴놀린 유도체, 특히 트리스(8-퀴놀리노레이트)알루미늄(Alq3), TAZ, Balq, 베릴륨 비스(벤조퀴놀리-10-노에이트)(beryllium bis(benzoquinolin-10-olate: Bebq2), ADN, 화합물 201, 화합물 202 등과 같은 재료를 사용할 수도 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.



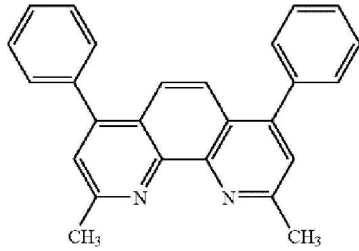
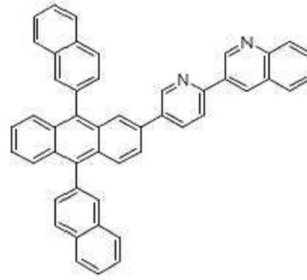
[0239]

[0240] <화합물 201>

<화합물 202>



[0241]



[0242]

[0243]

BCP

[0244]

상기 전자 수송층의 두께는 약 100Å 내지 약 1000Å, 예를 들면 약 150Å 내지 약 500Å일 수 있다. 상기 전자 수송층의 두께가 전술한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 실질적인 구동 전압 상승없이 만족스러운 정도의 전자 수송 특성을 얻을 수 있다.

[0245]

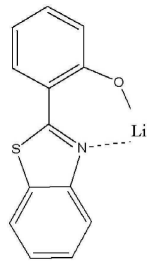
또는, 상기 전자 수송층은 공지의 전자 수송성 유기 화합물 외에, 금속-함유 물질을 더 포함할 수 있다.

[0246]

상기 금속-함유 화합물은 상기 금속-함유 물질은 Li 착체를 포함할 수 있다. 상기 Li 착체의 비제한적인 예로는, 리튬 퀴놀레이트(LiQ) 또는 하기 화합물 203 등을 들 수 있다:

[0247]

<화합물 203>



[0248]

[0249]

또한 전자 수송층 상부에 음극으로부터 전자의 주입을 용이하게 하는 기능을 가지는 물질인 전자 주입층(EIL)이 적층될 수 있으며 이는 특별히 재료를 제한하지 않는다.

[0250]

상기 전자 주입층 형성 재료로는 LiF, NaCl, CsF, Li<sub>2</sub>O, BaO 등과 같은 전자주입층 형성 재료로서 공지된 임의의 물질을 이용할 수 있다. 상기 전자주입층의 증착조건은 사용하는 화합물에 따라 다르지만, 일반적으로 정공 주입층의 형성과 거의 동일한 조건범위 중에서 선택될 수 있다.

[0251]

상기 전자 주입층의 두께는 약 1Å 내지 약 100Å, 약 3Å 내지 약 90Å일 수 있다. 상기 전자 주입층의 두께가 전술한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 실질적인 구동 전압 상승없이 만족스러운 정도의 전자 주입 특성을 얻을 수 있다.

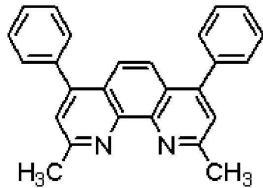
[0252]

이와 같은 유기층(15) 상부로는 제2전극(17)이 구비되어 있다. 상기 제2전극은 전자 주입 전극인 캐소드(Cathode)일 수 있는데, 이 때, 상기 제2전극 형성용 금속으로는 낮은 일함수를 가지는 금속, 합금, 전기전도성 화합물 및 이들의 혼합물을 사용할 수 있다. 구체적인 예로서는 리튬(Li), 마그네슘(Mg), 알루미늄(Al), 알루미늄-리튬(Al-Li), 칼슘(Ca), 마그네슘-인듐(Mg-In), 마그네슘-은(Mg-Ag)등을 박막으로 형성하여 투과형 전극을 얻을 수 있다. 한편, 전면 발광 소자를 얻기 위하여 ITO, IZO를 이용한 투과형 전극을 형성할 수 있는 등, 다

양한 변형이 가능하다.

[0253] 이상, 상기 유기 발광 소자를 도 1을 참조하여 설명하였으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0254] 또한, 발광층에 인광 도펀트를 사용할 경우에는 삼중항 여기자 또는 정공이 전자 수송층으로 확산되는 현상을 방지하기 위하여, 상기 정공 수송층과 발광층 사이 또는 H-기능층과 발광층 사이에 진공증착법, 스펀코팅법, 캐스트법, LB법 등과 같은 방법을 이용하여 정공 저지층(HBL)을 형성할 수 있다. 진공증착법 및 스펀코팅법에 의해 정공 저지층을 형성하는 경우, 그 조건은 사용하는 화합물에 따라 다르지만, 일반적으로 정공 주입층의 형성과 거의 동일한 조건범위 중에서 될 수 있다. 공지의 정공 저지 재료도 사용할 수 있는데, 이의 예로는, 옥사디아졸 유도체나 트리아졸 유도체, 페난트롤린 유도체 등을 들 수 있다. 예를 들면, 하기와 같은 BCP를 정공 저지층 재료로 사용할 수 있다.



**BCP**

[0255]

[0256] 상기 정공 저지층의 두께는 약 20Å 내지 약 1000Å, 예를 들면 약 30Å 내지 약 300Å일 수 있다. 상기 정공 저지층의 두께가 적절한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 실질적인 구동 전압 상승없이 우수한 정공 저지 특성을 얻을 수 있다.

[0257] 이하에서, 합성에 및 실시예를 들어, 본 발명의 일 구현예를 따르는 유기 발광 소자에 대하여 보다 구체적으로 설명하나, 본 발명이 하기의 합성에 및 실시예로 한정되는 것은 아니다.

[0258] 본 명세서 중, 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알킬기(또는 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알킬기)의 구체적인 예로는 메틸, 에틸, 프로필, 이소부틸, sec-부틸, 펜틸, iso-아밀, 헥실 등과 같은 탄소수 1 내지 60의 선형 또는 분지형 알킬기를 들 수 있고, 치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알킬기는 상기 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알킬기 중 하나 이상의 수소 원자가 중수소, 할로젠 원자, 히드록시기, 니트로기, 시아노기, 아미노기, 아미도노기, 히드라진, 히드라존, 카르복실기나 그의 염, 술폰산기나 그의 염, 인산이나 그의 염, 또는 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알킬기, C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알케닐기, C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알키닐기, C<sub>6</sub>-C<sub>60</sub>아릴기, C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>헤테로아릴기, -N(Q<sub>11</sub>)(Q<sub>12</sub>), 및 -Si(Q<sub>13</sub>)(Q<sub>14</sub>)(Q<sub>15</sub>)(여기서, Q<sub>11</sub> 내지 Q<sub>15</sub>는 서로 독립적으로 수소, C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알킬기, C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알케닐기, C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알키닐기, C<sub>5</sub>-C<sub>60</sub>아릴기, 및 C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>헤테로아릴기로 이루어진 군으로부터 선택됨)로 치환된 것이다.

[0259] 본 명세서 중 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알콕시기(또는 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알콕시기)는 -OA(단, A는 상술한 바와 같은 비치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알킬기임)의 화학식을 가지며, 이의 구체적인 예로서, 메톡시, 에톡시, 이소프로필옥시, 등이 있고, 이들 알콕시기 중 적어도 하나 이상의 수소원자는 상술한 치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알킬기의 경우와 마찬가지로 치환 가능하다.

[0260] 본 명세서 중 비치환된 C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알케닐기(또는 C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알케닐기)는 상기 비치환된 C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알킬기의 중간이나 맨 끝단에 하나 이상의 탄소 이중결합을 함유하고 있는 것을 의미한다. 예로서는 에테닐, 프로페닐, 부테닐 등이 있다. 이들 비치환된 C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알케닐기 중 적어도 하나 이상의 수소원자는 상술한 치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알킬기의 경우와 마찬가지로 치환 가능하다.

[0261] 본 명세서 중 비치환된 C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알키닐기(또는 C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알키닐기)는 상기 정의된 바와 같은 C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>알킬기의 중간이나 맨 끝단에 하나 이상의 탄소 삼중결합을 함유하고 있는 것을 의미한다. 예로서는 에티닐(ethynyl), 프로피닐(propynyl), 등이 있다. 이들 알키닐기 중 적어도 하나 이상의 수소원자는 상술한 치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알킬기의 경우와 마찬가지로 치환 가능하다.

[0262] 본 명세서 중 비치환된 C<sub>5</sub>-C<sub>60</sub>아릴기는 하나 이상의 방향족 고리를 포함하는 탄소 원자수 5 내지 60개의 카보사이클릭 방향족 시스템을 갖는 1가(monovalent) 그룹을 의미하며, 비치환된 C<sub>5</sub>-C<sub>60</sub>아릴렌기는 하나 이상의 방향족

고리를 포함하는 탄소 원자수 5 내지 60개의 카보사이클릭 방향족 시스템을 갖는 2가(divalent) 그룹을 의미한다. 상기 아릴기 및 아릴렌기가 2 이상의 고리를 포함할 경우, 2 이상의 고리들은 서로 융합될 수 있다. 상기 아릴기 및 아릴렌기 중 하나 이상의 수소 원자는 상술한 치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알킬기의 경우와 마찬가지로 치환가능하다.

[0263] 상기 치환 또는 비치환된 C<sub>5</sub>-C<sub>60</sub>아릴기의 예로는 페닐기, C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>알킬페닐기(예를 들면, 에틸페닐기), C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>알킬비페닐기(예를 들면, 에틸비페닐기), 할로페닐기(예를 들면, o-, m- 및 p-플루오로페닐기, 디클로로페닐기), 디시아노페닐기, 트리플루오로메톡시페닐기, o-, m-, 및 p-토릴기, o-, m- 및 p-쿠메닐기, 메시틸기, 페녹시페닐기, (α, α-디메틸벤젠)페닐기, (N,N'-디메틸)아미노페닐기, (N,N'-디페닐)아미노페닐기, 펜타레닐기, 인데닐기, 나프틸기, 할로나프틸기(예를 들면, 플루오로나프틸기), C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>알킬나프틸기(예를 들면, 메틸나프틸기), C<sub>1</sub>-C<sub>10</sub>알콕시나프틸기(예를 들면, 메톡시나프틸기), 안트라세닐기, 아즈레닐기, 헵타레닐기, 아세나프틸레닐기, 페나레닐기, 플루오레닐기, 안트라퀴놀일기, 메틸안트릴기, 페난트릴기, 트리페닐레닐기, 피레닐기, 크리세닐기, 에틸-크리세닐기, 피세닐기, 페릴레닐기, 클로로페릴레닐기, 펜타페닐기, 펜타세닐기, 테트라페릴레닐기, 헥사페닐기, 헥사세닐기, 루비세닐기, 코로네닐기, 트리나프틸레닐기, 헵타페닐기, 헵타세닐기, 피란트레닐기, 오바레닐기 등을 들 수 있으며, 치환된 C<sub>5</sub>-C<sub>60</sub>아릴기의 예는 상술한 바와 같은 비치환된 C<sub>5</sub>-C<sub>60</sub>아릴기의 예와 상기 치환된 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알킬기의 치환기를 참조하여 용이하게 인식할 수 있다. 상기 치환 또는 비치환된 C<sub>5</sub>-C<sub>60</sub>아릴렌기의 예는 상기 치환 또는 비치환된 C<sub>5</sub>-C<sub>60</sub>아릴기의 예를 참조하여 용이하게 인식될 수 있다.

[0264] 본 명세서 중 비치환된 C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>헤테로아릴기는 N, O, P 또는 S 중에서 선택된 1 개 이상의 헤테로원자를 포함하고 나머지 고리원자가 C인 하나 이상의 방향족 고리로 이루어진 시스템을 갖는 1가 그룹을 의미하고, 비치환된 C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>헤테로아릴렌기는 N, O, P 또는 S 중에서 선택된 1 개 이상의 헤테로원자를 포함하고 나머지 고리원자가 C인 하나 이상의 방향족 고리로 이루어진 시스템을 갖는 2가 그룹을 의미한다. 여기서, 상기 헤테로아릴기 및 헤테로아릴렌기가 2 이상의 고리를 포함할 경우, 2 이상의 고리는 서로 융합될 수 있다. 상기 헤테로아릴기 및 헤테로아릴렌기 중 하나 이상의 수소원자는 상술한 C<sub>1</sub>-C<sub>60</sub>알킬기의 경우와 마찬가지로 치환가능하다.

[0265] 상기 비치환된 C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>헤테로아릴기의 예에는, 피라졸일기, 이미다졸일기, 옥사졸일기, 티아졸일기, 트리아졸일기, 테트라졸일기, 옥사디아졸일기, 피리디닐기, 피리다지닐기, 피리미디닐기, 트리아지닐기, 카바졸일기, 인돌일기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 벤조이미다졸일기, 이미다조피리디닐기, 이미다조피리미디닐기 등을 들 수 있다. 상기 비치환된 C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>헤테로아릴렌기의 예는 상기 치환 또는 비치환된 C<sub>2</sub>-C<sub>60</sub>아릴렌기의 예를 참조하여 용이하게 인식될 수 있다.

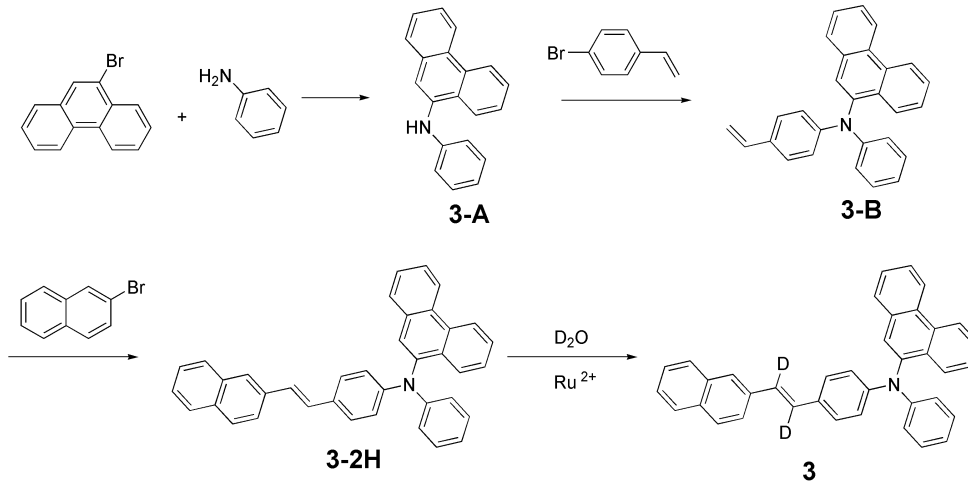
[0266] 상기 치환 또는 비치환된 C<sub>5</sub>-C<sub>60</sub>아릴옥시기는 -OA<sub>2</sub>(여기서, A<sub>2</sub>는 상기 치환 또는 비치환된 C<sub>5</sub>-C<sub>60</sub>아릴기임)를 가리키고, 상기 치환 또는 비치환된 C<sub>5</sub>-C<sub>60</sub>아릴싸이오기는 -SA<sub>3</sub>(여기서, A<sub>3</sub>는 상기 치환 또는 비치환된 C<sub>5</sub>-C<sub>60</sub>아릴기임)를 가리킨다.

[0267] [실시예]

[0268] **합성예 1 : 화합물 3의 합성**

[0269] 하기 반응식 1에 따라 화합물 3을 합성하였다:

[0270] <반응식 1>



[0271]

[0272] 중간체 3-A의 합성

[0273] 9-브로모페난트렌 5.14 g (20.0 mmol), 아닐린 2.8 g (30.0 mmol), 트리스(디벤질리덴아세톤)디팔라듐(0)(Tris(dibenzylideneacetone)dipalladium(0) : Pd<sub>2</sub>(dba)<sub>3</sub>) 0.366 g (0.4 mmol), 트리-tert-부틸포스핀(Tri-tert-butylphosphine: P(t-Bu)<sub>3</sub>) 0.081 g (0.4 mmol) 및 KOtBu 2.88 g (30.0 mmol)을 톨루엔 60 mL 에 녹인 후 85 °C 에서 4시간 동안 교반하였다. 상기 반응 용액을 상온으로 식힌 후, 물 50 ml 와 디에틸에테르 50 ml 로 3회 추출하였다. 수득한 유기층을 마그네슘설페이트로 건조하고 용매를 증발하여 얻어진 잔류물을 실리카겔판 크로마토그래피로 분리 정제하여 중간체 3-A 4.63 g (수율 86 %)을 수득하였다. 생성된 화합물은 MS/FAB로 확인하였다.

[0274] C<sub>20</sub>H<sub>15</sub>N : 계산값 269.12, 측정값 270.13

[0275] 중간체 3-B의 합성

[0276] 중간체 3-A 2.69 g (10.0 mmol), 2-브로모-4-비닐벤젠 2.75 g (15.0 mmol), Pd<sub>2</sub>(dba)<sub>3</sub> 0.183 g (0.2 mmol), P(t-Bu)<sub>3</sub> 0.041 g (0.2 mmol) 및 KOtBu 1.44 g (15.0 mmol)을 톨루엔 30 mL 에 녹인 후 85 °C 에서 4시간 동안 교반하였다. 상기 반응 용액을 상온으로 식힌 후, 물 30 ml 와 디에틸에테르 30 ml 로 3회 추출하였다. 수득한 유기층을 마그네슘설페이트로 건조하고 용매를 증발하여 얻어진 잔류물을 실리카겔판 크로마토그래피로 분리 정제하여 중간체 3-B 2.30 g (수율 62%)을 수득하였다. 생성된 화합물은 MS/FAB로 확인하였다.

[0277] C<sub>28</sub>H<sub>21</sub>N : 계산값 371.17, 측정값 372.16

[0278] 화합물 3-2H의 합성

[0279] 중간체 3-B 1.86 g (5.0 mmol), 2-브로모나프탈렌 1.04 g (5.0 mmol), 팔라듐(II)아세테이트(Palladium(II) acetate: Pd(OAc)<sub>2</sub>)0.056g (0.25mmol), P(*p*-tolyl)<sub>3</sub> 0.76g (0.25mmol), Et<sub>3</sub>N 1.019 (10.0 mmol)을 DMAc (디메틸 아세트아미드) 30ml 에 녹인 후 100 °C 에서 4시간 동안 교반하였다. 상기 반응 용액을 상온으로 식힌 후, 물 30ml 와 디에틸에테르 30ml 로 3회 추출하였다. 수득한 유기층을 마그네슘설페이트로 건조하고 용매를 증발하여 얻어진 잔류물을 실리카겔판 크로마토그래피로 분리 정제하여 화합물 3-2H 1.82 g (수율 73 %)을 얻었다. 생성된 화합물은 MS/FAB 와 <sup>1</sup>H NMR 로 확인하였다.

[0280] C<sub>38</sub>H<sub>27</sub>N : 계산값 497.21, 측정값 498.22

[0281] <sup>1</sup>H NMR (CDCl<sub>3</sub>, 400 MHz) δ (ppm) 8.59 (d, 1H), 8.20-8.17 (m, 1H), 8.00-7.92 (m, 3H), 7.85-7.82 (m, 3H), 7.71-7.67 (m, 2H), 7.60-7.39 (m, 7H), 7.22-7.12 (m, 2H), 7.08-7.02 (m, 3H), 6.97-6.91 (m, 3H), 6.85-6.83 (m, 2H)

[0282] 화합물 3의 합성

[0283] 화합물 3-2H 1.49 g (3.0 mmol), [(Ph<sub>3</sub>P)<sub>3</sub>Ru(CO)(Cl)H 카보닐클로로하이드리도트리스 (트리페닐포스핀) 루테늄 (II) 0.086 g (0.09 mmol), D<sub>2</sub>O 0.54 mL (30.0 mmol)을 1,4-디옥산 30 ml 에 녹인 후 80 °C 에서 12 시간 동안 교반하였다. 상기 반응 용액을 상온으로 식힌 후, 용매를 제거한 뒤 물 30 ml 와 디클로로메탄 30 ml 로 3회 추출하였다. 수득한 유기층을 마그네슘설페이트로 건조하고 용매를 증발하여 얻어진 잔류물을 실리카겔관 크로마토그래피로 분리 정제하여 화합물 3 1.33 g (수율 89 %)을 얻었다. 생성된 화합물은 MS/FAB 와 <sup>1</sup>H NMR 로 확인하였다.

[0284] C<sub>38</sub>H<sub>25</sub>D<sub>2</sub>N : 계산값 499.23, 측정값 450.25

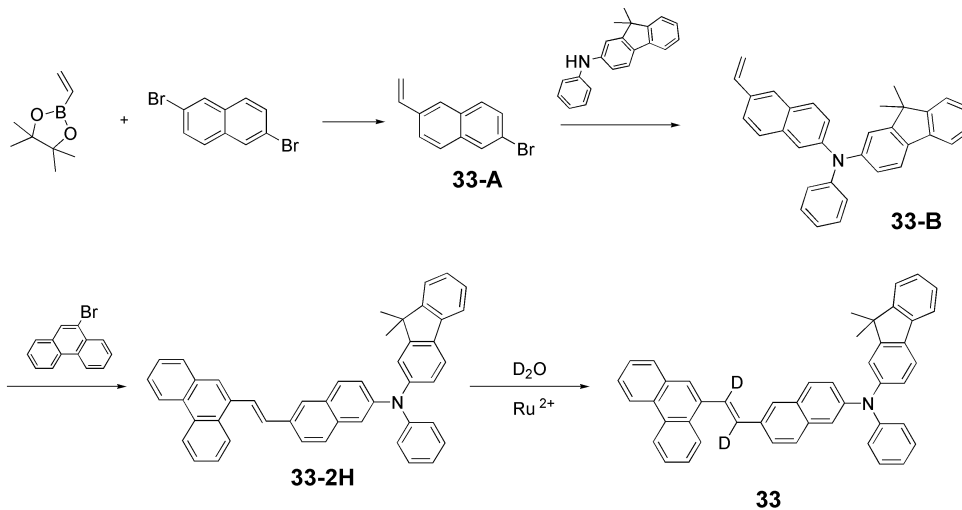
[0285] <sup>1</sup>H NMR (CDCl<sub>3</sub>, 400 MHz) δ (ppm) 8.59 (d, 1H), 8.20-8.17 (m, 1H), 7.95-7.93 (m, 1H), 7.85-7.83 (m, 4H), 7.71-7.63 (m, 3H), 7.59-7.50 (m, 3H), 7.47-7.39 (m, 4H), 7.12-7.06 (m, 3H), 6.98-6.93 (m, 3H), 6.83-6.80 (m, 2H), 중수소 치환율 : 92.5 %

[0286]

[0287] **합성예 2 : 화합물 33의 합성**

[0288] 하기 반응식 2에 따라 화합물 33을 합성하였다:

[0289] <반응식 2>



[0290]

[0291] 중간체 33-A

[0292] 비닐보론산 피나콜에스테르 3.14 mL (20.0 mmol), 2,6-디브로모나프탈렌 8.58 g (30.0 mmol), Pd(PPh<sub>3</sub>)<sub>4</sub> 1.15 g (1.0 mmol), 그리고 K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> 8.29 g (60.0 mmol)을 THF/H<sub>2</sub>O (부피비 2/1) 혼합용액 60 mL 에 녹인 후 75 °C 에서 5 시간 동안 교반하였다. 상기 반응 용액을 상온으로 식힌 후, 물 30 ml 와 디에틸에테르 50 ml 로 3번 추출하였다. 모아진 유기층을 마그네슘설페이트로 건조하고 용매를 증발하여 얻어진 잔류물을 실리카겔관 크로마토그래피로 분리 정제하여 중간체 33-A 2.98 g (수율 64 %)을 얻었다. 생성된 화합물은 MS/FAB로 확인하였다.

[0293] C<sub>12</sub>H<sub>9</sub>Br : 계산값 231.99, 측정값 233.01

[0294] 중간체 33-B의 합성

[0295] 중간체 3-A 대신 9,9'-디메틸플루로렌-2-닐-페닐아민을 사용하고 1-브로모-4-비닐벤젠 대신 중간체 33-A를 사용하였다는 점을 제외하고는 상기 합성예 1의 중간체 3-B의 합성 방법과 동일한 방법을 이용하여 중간체 33-B 2.84 g (수율 65 %)을 얻었다. 생성된 화합물은 MS/FAB로 확인하였다.

[0296] C<sub>33</sub>H<sub>27</sub>N : 계산값 437.21, 측정값 438.24

[0297] 화합물 33-2H의 합성

[0298] 중간체 3-B 대신 중간체 33-B를 사용하고 2-브로모나프탈렌 대신 9-브로모페난트렌을 이용하였다는 점을 제외하

고는 상기 합성에 1의 화합물 3-2H의 합성 방법과 동일한 방법을 이용하여 화합물 33-2H 2.27 g (수율 74 %)을 얻었다. 생성된 화합물은 MS/FAB 와 <sup>1</sup>H NMR 로 확인하였다.

- [0299] C<sub>47</sub>H<sub>35</sub>N : 계산값 613.28, 측정값 614.29
- [0300] <sup>1</sup>H NMR (CDCl<sub>3</sub>, 400 MHz) δ (ppm) 8.66 (d, 1H), 8.46 (d, 1H), 8.15-8.06 (m, 3H), 7.92 (s, 1H), 7.83-7.58 (m, 9H), 7.47 (dt, 1H), 7.36-7.27 (m, 3H), 7.14-7.02 (m, 5H), 6.95-6.92 (m, 2H), 6.87 (s, 1H), 6.82-6.80 (m, 2H), 1.67 (s, 6H)

[0301] 화합물 33의 합성

[0302] 화합물 3-2H 대신 화합물 33-2H를 사용하였다는 점을 제외하고는 상기 합성에 1의 화합물 3의 합성 방법과 동일한 방법을 이용하여 화합물 33 (수율 85 %)를 얻었다. 생성된 화합물은 MS/FAB 와 <sup>1</sup>H NMR 로 확인하였다.

- [0303] C<sub>47</sub>H<sub>33</sub>D<sub>2</sub>N : 계산값 615.29, 측정값 616.30
- [0304] <sup>1</sup>H NMR (CDCl<sub>3</sub>, 400 MHz) δ (ppm) 8.66 (d, 1H), 8.46 (d, 1H), 8.11 (d, 1H), 7.93-7.91 (m, 2H), 7.83-7.62 (m, 8H), 7.58 (d, 1H), 7.48 (dt, 1H), 7.36-7.30 (m, 2H), 7.14-7.05 (m, 4H), 6.98 (dt, 1H), 6.93-6.90 (m, 2H), 6.87 (s, 1H), 6.81-6.79 (m, 2H), 1.67 (s, 6H), 중수소 치환율 : 84 %

[0305] 합성예 3: 화합물 1의 합성

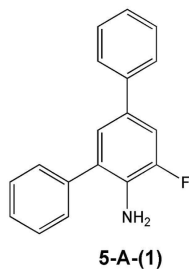
[0306] 중간체 3-A 대신 N-페닐나프탈렌-2-아민(N-phenylnaphthalen-2-amine)을 사용하였다는 점을 제외하고는, 합성예 1과 동일한 방법을 이용하여 화합물 1을 합성하였다. 생성된 화합물은 MS/FAB 와 <sup>1</sup>H NMR 로 확인하였다.

- [0307] C<sub>34</sub>H<sub>23</sub>D<sub>2</sub>N : 계산값 449.21, 측정값 450.22
- [0308] <sup>1</sup>H NMR (CDCl<sub>3</sub>, 400 MHz) δ (ppm) 7.86-7.82 (m, 4H), 7.79-7.76 (m, 1H), 7.68-7.64 (m, 2H), 7.57-7.38 (m, 9H), 7.13-7.06 (m, 3H), 6.99-6.96 (m, 2H), 6.86-6.83 (m, 1H), 6.45-6.42 (m, 2H), 중수소 치환율 : 91.8 %

[0309] 합성예 4: 화합물 5의 합성

[0310] 중간체 3-A 합성시 9-브로모페난트렌 대신 2-브로모나프탈렌을 사용하고 아닐린 대신 하기 중간체 5-A-(1)을 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 합성예 1과 동일한 방법을 이용하여 화합물 5를 합성하였다. 생성된 화합물은 MS/FAB 와 <sup>1</sup>H NMR 로 확인하였다.

- [0311] C<sub>46</sub>H<sub>30</sub>D<sub>2</sub>FN : 계산값 619.26, 측정값 620.24
- [0312] <sup>1</sup>H NMR (CDCl<sub>3</sub>, 400 MHz) δ (ppm) 7.87-7.83 (m, 4H), 7.78-7.76 (m, 1H), 7.74-7.69 (m, 2H), 7.67-7.60 (m, 5H), 7.56-7.38 (m, 14H), 7.14-7.09 (m, 2H), 6.93-6.89 (m, 2H)



[0313]

- [0314] **합성예 5: 화합물 6의 합성**
- [0315] 중간체 3-A 합성시 9-브로모페난트렌 대신 4-브로모벤조니트릴을 사용하고 아닐린 대신 나프탈렌-2-아민을 사용하고, 화합물 3-2H 합성시 2-브로모나프탈렌 대신 1-브로모나프탈렌을 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 합성예 1과 동일한 방법을 이용하여 화합물 6을 합성하였다. 생성된 화합물은 MS/FAB 와  $^1\text{H}$  NMR 로 확인하였다.
- [0316]  $\text{C}_{35}\text{H}_{22}\text{D}_2\text{N}_2$  : 계산값 474.21, 측정값 445.22
- [0317]  $^1\text{H}$  NMR ( $\text{CDCl}_3$ , 400 MHz)  $\delta$  (ppm) 7.81-7.76 (m, 4H), 7.71-7.64 (m, 2H), 7.59-7.53 (m, 4H), 7.48-7.44 (m, 2H), 7.42-7.31 (m, 4H), 7.13-7.09 (m, 1H), 7.02-6.99 (m, 1H), 6.94-6.88 (m, 4H), 중수소 치환율 : 93.4 %
- [0318] **합성예 6: 화합물 9의 합성**
- [0319] 화합물 33-2H 합성시 9-브로모페난트렌 대신 2-브로모나프탈렌을 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 합성예 2와 동일한 방법을 이용하여 화합물 9를 합성하였다. 생성된 화합물은 MS/FAB 와  $^1\text{H}$  NMR 로 확인하였다.
- [0320]  $\text{C}_{43}\text{H}_{31}\text{D}_2\text{N}$  : 계산값 565.27, 측정값 566.29
- [0321]  $^1\text{H}$  NMR ( $\text{CDCl}_3$ , 400 MHz)  $\delta$  (ppm) 7.90-7.82 (m, 5H), 7.78-7.62 (m, 6H), 7.58-7.43 (m, 3H), 7.35-7.30 (m, 2H), 7.13-7.06 (m, 4H), 6.90-6.83 (m, 2H), 6.65-6.63 (m, 1H), 6.42-6.40 (m, 2H), 1.68 (s, 6H) 중수소 치환율 : 86.4 %
- [0322] **합성예 7: 화합물 12의 합성**
- [0323] 중간체 33-A 합성시 2,6-디브로모나프탈렌 대신 2,7-디브로모-9,9-디메틸-9H-플루오렌(2,7-dibromo-9,9-dimethyl-9H-fluorene)을 사용하고, 중간체 33-B 합성시 9,9-디메틸-N-페닐-9H-플루오렌-2-아민(9,9-dimethyl-N-phenyl-9H-fluoren-2-amine) 대신 N-페닐나프탈렌-2-아민(N-phenylnaphthalen-2-amine)을 사용하고, 화합물 33-2H 합성시 9-브로모페난트렌 대신 2-브로모나프탈렌을 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 합성예 2와 동일한 방법을 이용하여 화합물 12를 합성하였다. 생성된 화합물은 MS/FAB 와  $^1\text{H}$  NMR 로 확인하였다.
- [0324]  $\text{C}_{43}\text{H}_{31}\text{D}_2\text{N}$  : 계산값 565.27, 측정값 566.28
- [0325]  $^1\text{H}$  NMR ( $\text{CDCl}_3$ , 400 MHz)  $\delta$  (ppm) 7.89-7.83 (m, 4H), 7.78-7.64 (m, 6H), 7.58-7.51 (m, 4H), 7.46-7.33 (m, 3H), 7.20-7.15 (m, 3H), 6.91-6.83 (m, 2H), 6.73-6.71 (m, 1H), 6.42-6.40 (m, 2H), 1.67 (s, 6H) 중수소 치환율 : 84.4 %
- [0326] **합성예 8: 화합물 18의 합성**
- [0327] 중간체 3-A 합성시 9-브로모페난트렌 대신 4-브로모벤조니트릴을 사용하고 아닐린 대신 나프탈렌-2-아민을 사용하고, 화합물 3-2H 합성시 2-브로모나프탈렌 대신 9-브로모페난트렌을 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 합성예 1과 동일한 방법을 이용하여 화합물 18을 합성하였다. 생성된 화합물은 MS/FAB 와  $^1\text{H}$  NMR 로 확인하였다.
- [0328]  $\text{C}_{39}\text{H}_{24}\text{D}_2\text{N}_2$  : 계산값 524.22, 측정값 525.24
- [0329]  $^1\text{H}$  NMR ( $\text{CDCl}_3$ , 400 MHz)  $\delta$  (ppm) 8.67-8.64 (m, 1H), 8.46-8.44 (m, 1H), 8.10-8.08 (m, 1H), 7.85-7.76 (m, 3H), 7.69-7.63 (m, 4H), 7.57-7.36 (m, 8H), 7.18-6.98 (m, 6H), 중수소 치환율 : 91.3 %
- [0330] **합성예 9: 화합물 19의 합성**

[0331] 중간체 3-A 대신 9,9-디메틸-N-페닐-9H-플루오렌-2-아민(9,9-dimethyl-N-phenyl-9H-fluoren-2-amine)을 사용하고, 화합물 3-2H 합성시 2-브로모나프탈렌 대신 9-브로모페난트렌을 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 합성에 1과 동일한 방법을 이용하여 화합물 19를 합성하였다. 생성된 화합물은 MS/FAB 와  $^1\text{H}$  NMR 로 확인하였다.

[0332]  $\text{C}_{43}\text{H}_{31}\text{D}_2\text{N}$  : 계산값 565.27, 측정값 566.26

[0333]  $^1\text{H}$  NMR ( $\text{CDCl}_3$ , 400 MHz)  $\delta$  (ppm) 8.67-8.64 (m, 1H), 8.46-8.44 (m, 1H), 8.10-8.08 (m, 1H), 7.85-7.81 (m, 2H), 7.78-7.76 (m, 1H), 7.69-7.64 (m, 2H), 7.56-7.46 (m, 4H), 7.36-7.30 (m, 1H), 7.14-7.04 (m, 5H), 6.96-6.83 (m, 4H), 6.59-6.58 (m, 1H), 6.43-6.40 (m, 2H), 1.67 (s, 6H), 중수소 치환율 : 85.8 %

[0334] **합성예 10: 화합물 25의 합성**

[0335] 중간체 3-A 합성시 9-브로모페난트렌 대신 3-요오도-9-페닐-9H-카바졸(3-Iodo-9-phenyl-9H-carbazole)을 사용하고, 화합물 3-2H 합성시 2-브로모나프탈렌 대신 9-브로모페난트렌을 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 합성에 1과 동일한 방법을 이용하여 화합물 25를 합성하였다. 생성된 화합물은 MS/FAB 와  $^1\text{H}$  NMR 로 확인하였다.

[0336]  $\text{C}_{46}\text{H}_{30}\text{D}_2\text{N}_2$  : 계산값 614.27, 측정값 615.28

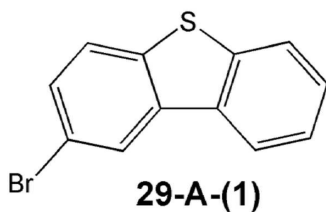
[0337]  $^1\text{H}$  NMR ( $\text{CDCl}_3$ , 400 MHz)  $\delta$  (ppm) 8.67-8.64 (m, 1H), 8.46-8.44 (m, 1H), 8.22-8.19 (m, 1H), 8.11-8.09 (m, 1H), 7.85-7.81 (m, 2H), 7.69-7.64 (m, 2H), 7.52-7.22 (m, 13H), 7.18-7.14 (m, 2H), 7.06-7.04 (m, 1H), 6.97-6.94 (m, 3H), 6.86-6.83 (m, 1H), 6.52-6.50 (m, 2H), 중수소 치환율 : 89.4 %

[0338] **합성예 11: 화합물 29의 합성**

[0339] 중간체 3-A 합성시 9-브로모페난트렌 대신 하기 중간체 A-29-(1)을 사용하고, 화합물 3-2H 합성시 2-브로모나프탈렌 대신 9-브로모페난트렌을 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 합성에 1과 동일한 방법을 이용하여 화합물 29를 합성하였다. 생성된 화합물은 MS/FAB 와  $^1\text{H}$  NMR 로 확인하였다.

[0340]  $\text{C}_{40}\text{H}_{25}\text{D}_2\text{NS}$  : 계산값 555.20, 측정값 556.23

[0341]  $^1\text{H}$  NMR ( $\text{CDCl}_3$ , 400 MHz)  $\delta$  (ppm) 8.67-8.64 (m, 1H), 8.46-8.44 (m, 1H), 8.12-8.04 (m, 2H), 7.85-7.81 (m, 3H), 7.72-7.58 (m, 5H), 7.50-7.42 (m, 4H), 7.18-7.14 (m, 2H), 7.06-7.04 (m, 1H), 6.97-6.94 (m, 3H), 6.86-6.83 (m, 1H), 6.51-6.49 (m, 2H), 중수소 치환율 : 86.9 %



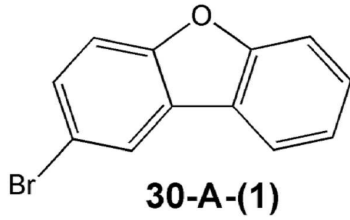
[0342]

[0343] **합성예 12: 화합물 30의 합성**

[0344] 중간체 3-A 합성시 9-브로모페난트렌 대신 하기 중간체 30-A-(1)을 사용하고 아닐린 대신 나프탈렌-2-아민을 사용하고, 화합물 3-2H 합성시 2-브로모나프탈렌 대신 9-브로모페난트렌을 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 합성에 1과 동일한 방법을 이용하여 화합물 30을 합성하였다. 생성된 화합물은 MS/FAB 와  $^1\text{H}$  NMR 로 확인하였다.

[0345]  $\text{C}_{44}\text{H}_{27}\text{D}_2\text{NO}$  : 계산값 589.24, 측정값 590.27

[0346]  $^1\text{H}$  NMR ( $\text{CDCl}_3$ , 400 MHz)  $\delta$  (ppm) 8.67-8.64 (m, 1H), 8.46-8.44 (m, 1H), 8.12-8.09 (m, 1H), 7.85-7.36 (m, 19H), 7.28-7.08 (m, 5H)



[0347]

[0348] **합성예 13: 화합물 34의 합성**

[0349] 중간체 33-A 합성시 2,6-디브로모나프탈렌 대신 1,4-디브로모나프탈렌을 사용하고, 중간체 33-B 합성시 9,9-디메틸-N-페닐-9H-플루오렌-2-아민(9,9-dimethyl-N-phenyl-9H-fluoren-2-amine) 대신 비스(9,9-디메틸-9H-플루오렌-2-일)아민(bis(9,9-dimethyl-9H-fluoren-2-yl)amine)을 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 합성예 2와 동일한 방법을 이용하여 화합물 34를 합성하였다. 생성된 화합물은 MS/FAB 와  $^1\text{H}$  NMR 로 확인하였다.

[0350]  $\text{C}_{56}\text{H}_{41}\text{D}_2\text{N}$  : 계산값 731.35, 측정값 732.36

[0351]  $^1\text{H}$  NMR ( $\text{CDCl}_3$ , 400 MHz)  $\delta$  (ppm) 8.66 (d, 1H), 8.46 (d, 1H), 8.11 (d, 1H), 7.93-7.76 (m, 5H), 7.69-7.63 (m, 3H), 7.55-7.46 (m, 4H), 7.36-7.24 (m, 3H), 7.14-7.08 (m, 5H), 6.98-6.92 (m, 2H), 6.86-6.84 (m, 2H), 6.61-6.59 (m, 2H), 1.67 (s, 12H), 중수소 치환율 : 82 %

[0352] **합성예 14: 화합물 36의 합성**

[0353] 화합물 3-2H 합성시 2-브로모나프탈렌 대신 9,10-디-tert-부틸-2-브로모안트라센(9,10-di-tert-butyl-2-bromoanthracene)을 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 합성예 1과 동일한 방법을 이용하여 화합물 36을 합성하였다. 생성된 화합물은 MS/FAB 와  $^1\text{H}$  NMR 로 확인하였다.

[0354]  $\text{C}_{50}\text{H}_{43}\text{D}_2\text{N}$  : 계산값 661.37, 측정값 662.35

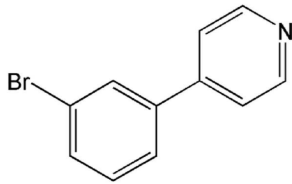
[0355]  $^1\text{H}$  NMR ( $\text{CDCl}_3$ , 400 MHz)  $\delta$  (ppm) 8.58 (d, 1H), 8.43 (d, 1H), 8.20-8.07 (d, 4H), 7.95-7.93 (m, 1H), 7.71-7.68 (m, 2H), 7.61-7.56 (m, 3H), 7.48-7.39 (m, 5H), 7.07-7.03 (m, 3H), 6.97-6.91 (m, 3H), 6.52-6.49 (m, 2H), 1.72 (s, 9H), 1.71 (s, 9H), 중수소 치환율 : 84.6 %

[0356] **합성예 15: 화합물 44의 합성**

[0357] 중간체 3-A 합성시 9-브로모페난트렌 대신 하기 중간체 44-A-(1)을 사용하고, 화합물 3-2H 합성시 2-브로모나프탈렌 대신 9,10-디-tert-부틸-2-브로모안트라센(9,10-di-tert-butyl-2-bromoanthracene)을 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 합성예 1과 동일한 방법을 이용하여 화합물 44를 합성하였다. 생성된 화합물은 MS/FAB 와  $^1\text{H}$  NMR 로 확인하였다.

[0358]  $\text{C}_{47}\text{H}_{42}\text{D}_2\text{N}_2$  : 계산값 638.36, 측정값 639.37

[0359]  $^1\text{H}$  NMR ( $\text{CDCl}_3$ , 400 MHz)  $\delta$  (ppm) 8.68 (d, 1H), 8.43 (d, 1H), 8.20-8.07 (d, 4H), 7.60 (dd, 1H), 7.50-7.41 (m, 7H), 7.17 (t, 1H), 7.10-7.04 (m, 3H), 6.99-6.96 (m, 2H), 6.86-6.83 (m, 1H), 6.54-6.48 (m, 3H), 1.72 (s, 9H), 1.71 (s, 9H), 중수소 치환율 : 82.6 %



**44-A-(1)**

[0360]

[0361]

**합성예 16: 화합물 45의 합성**

[0362]

중간체 3-A 합성시 9-브로모페난트렌 대신 브로모벤젠을 사용하고 아닐린 대신 상기 중간체 5-A-(1)을 사용하고, 화합물 3-2H 합성시 2-브로모나프탈렌 대신 9,10-디-tert-부틸-2-브로모안트라센(9,10-di-tert-butyl-2-bromoanthracene)을 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 합성예 1과 동일한 방법을 이용하여 화합물 45를 합성하였다. 생성된 화합물은 MS/FAB 와 <sup>1</sup>H NMR 로 확인하였다.

[0363]

C<sub>54</sub>H<sub>46</sub>D<sub>2</sub>FN : 계산값 731.38, 측정값 732.37

[0364]

<sup>1</sup>H NMR (CDCl<sub>3</sub>, 400 MHz) δ(ppm) 8.43 (t, 1H), 8.19 (d, 1H), 8.14-8.06 (d, 2H), 7.72-7.39 (m, 16H), 7.14-7.04 (m, 3H), 6.97-6.90 (m, 3H), 6.64-6.62 (m, 2H), 1.71 (s, 9H), 1.70 (s, 9H)

[0365]

**합성예 17: 화합물 47의 합성**

[0366]

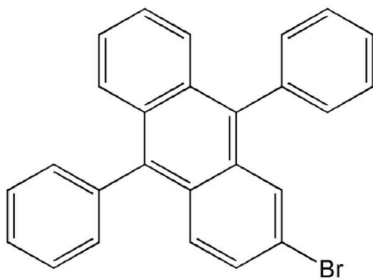
중간체 3-A 대신 디페닐아민을 사용하고, 화합물 3-2H 합성시 2-브로모나프탈렌 대신 하기 중간체 47-2H-(1)을 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 합성예 1과 동일한 방법을 이용하여 화합물 47을 합성하였다. 생성된 화합물은 MS/FAB 와 <sup>1</sup>H NMR 로 확인하였다.

[0367]

C<sub>46</sub>H<sub>31</sub>D<sub>2</sub>N : 계산값 601.27, 측정값 602.24

[0368]

<sup>1</sup>H NMR (CDCl<sub>3</sub>, 400 MHz) δ(ppm) 8.22 (d, 1H), 8.01 (d, 1H), 7.82-7.65 (m, 6H), 7.57 -7.28 (m, 11H), 7.08-7.04 (m, 4H), 6.99-6.93 (m, 4H), 6.56-6.53 (m, 4H)



**47-2H-(1)**

[0369]

[0370]

**합성예 18: 화합물 52의 합성**

[0371]

중간체 3-A 대신 디페닐아민을 사용하고, 화합물 3-2H 합성시 2-브로모나프탈렌 대신 하기 중간체 52-2H-(1)을 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 합성예 1과 동일한 방법을 이용하여 화합물 52를 합성하였다. 생성된 화합물은 MS/FAB 와 <sup>1</sup>H NMR 로 확인하였다.

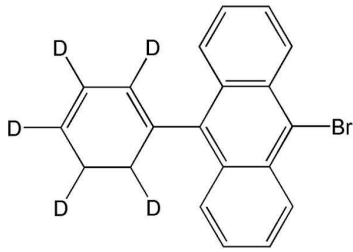
[0372]

C<sub>40</sub>H<sub>22</sub>D<sub>7</sub>N : 계산값 530.27, 측정값 531.24

[0373]

<sup>1</sup>H NMR (CDCl<sub>3</sub>, 400 MHz) δ(ppm) 8.03 (dd, 2H), 7.93 (dd, 2H), 7.46-7.44 (m, 2H), 7.35-7.31 (m, 2H), 7.08-7.03 (m, 4H), 6.95-6.91 (m, 2H), 6.89-6.86 (m, 2H), 6.76-6.73 (m, 2H), 6.56-6.53 (m, 4H), 중수소

치환율 : 90.7 %



**52-2H-(1)**

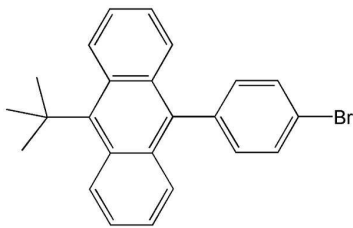
[0374]

[0375] **합성예 19: 화합물 54의 합성**

[0376] 중간체 3-A 대신 디페닐아민을 사용하고, 화합물 3-2H 합성시 2-브로모나프탈렌 대신 하기 중간체 54-2H-(1)을 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 합성예 1과 동일한 방법을 이용하여 화합물 54를 합성하였다. 생성된 화합물은 MS/FAB 와 <sup>1</sup>H NMR 로 확인하였다.

[0377] C<sub>44</sub>H<sub>35</sub>D<sub>2</sub>N : 계산값 581.30, 측정값 582.31

[0378] <sup>1</sup>H NMR (CDCl<sub>3</sub>, 400 MHz) δ(ppm) 8.18 (dd, 2H), 7.96 (dd, 2H), 7.70-7.63 (m, 4H), 7.52-7.49 (m, 2H), 7.44-7.40 (m, 2H), 7.06-7.02 (m, 6H), 6.89-6.83 (m, 4H), 6.56-6.52 (m, 4H), 1.68 (s, 9H), 중수소 치환율 : 83.2 %



**54-2H-(1)**

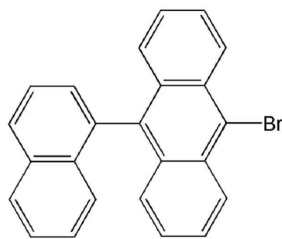
[0379]

[0380] **합성예 20: 화합물 56의 합성**

[0381] 중간체 3-A 대신 디페닐아민을 사용하고, 화합물 3-2H 합성시 2-브로모나프탈렌 대신 하기 중간체 56-2H-(1)을 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 합성예 1과 동일한 방법을 이용하여 화합물 56을 합성하였다. 생성된 화합물은 MS/FAB 와 <sup>1</sup>H NMR 로 확인하였다.

[0382] C<sub>44</sub>H<sub>29</sub>D<sub>2</sub>N : 계산값 575.25, 측정값 576.27

[0383] <sup>1</sup>H NMR (CDCl<sub>3</sub>, 400 MHz) δ(ppm) 8.02 (dd, 2H), 7.83 (d, 1H), 7.75-7.64 (m, 5H), 7.46-7.26 (m, 6H), 7.08-6.94 (m, 7H), 6.89-6.86 (m, 2H), 6.76-6.73 (m, 2H), 6.56-6.52 (m, 4H), 중수소 치환율 : 94.6 %



**56-2H-(1)**

[0384]

[0385]

**합성예 21: 화합물 60의 합성**

[0386]

중간체 3-A 대신 비스(4-플루오로페닐)아민(bis(4-fluorophenyl)amine)을 사용하고, 화합물 3-2H 합성시 2-브로모나프탈렌 대신 1-브로모파이렌을 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 합성예 1과 동일한 방법을 이용하여 화합물 60을 합성하였다. 생성된 화합물은 MS/FAB 와 <sup>1</sup>H NMR 로 확인하였다.

[0387]

C<sub>36</sub>H<sub>21</sub>D<sub>2</sub>F<sub>2</sub>N : 계산값 509.19, 측정값 510.21

[0388]

<sup>1</sup>H NMR (CDCl<sub>3</sub>, 400 MHz) δ (ppm) 8.37 (d, 1H), 8.17 (d, 2H), 8.11-8.10 (m, 2H), 8.04-7.95 (m, 3H), 7.86 (d, 1H), 7.45-7.41 (m, 2H), 7.22-7.03 (m, 6H), 6.86-6.80 (m, 4H), 중수소 치환율 : 90.1 %

[0389]

**합성예 22: 화합물 61의 합성**

[0390]

중간체 3-A 대신 N-페닐나프탈렌-2-아민(N-phenylnaphthalen-2-amine)을 사용하고, 화합물 3-2H 합성시 2-브로모나프탈렌 대신 1-브로모파이렌을 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 합성예 1과 동일한 방법을 이용하여 화합물 61을 합성하였다. 생성된 화합물은 MS/FAB 와 <sup>1</sup>H NMR 로 확인하였다.

[0391]

C<sub>40</sub>H<sub>25</sub>D<sub>2</sub>N : 계산값 523.22, 측정값 524.21

[0392]

<sup>1</sup>H NMR (CDCl<sub>3</sub>, 400 MHz) δ (ppm) 8.37 (d, 1H), 8.17 (d, 2H), 8.04-7.95 (m, 3H), 7.86 (d, 1H), 7.79-7.77 (m, 1H), 7.65 (d, 1H), 7.58-7.38 (m, 6H), 7.13-7.04 (m, 3H), 6.86-6.83 (m, 1H), 6.54-6.52 (m, 2H)

[0393]

**합성예 23: 화합물 64의 합성**

[0394]

중간체 33-A 합성시 2,6-디브로모나프탈렌 대신 5-브로모-2-플루오로피리딘(5-bromo-2-fluoropyridine)을 사용하고, 중간체 33-B 합성시 9,9-디메틸-N-페닐-9H-플루오렌-2-아민(9,9-dimethyl-N-phenyl-9H-fluorene-2-amine) 대신 디페닐아민을 사용하고, 화합물 33-2H 합성시 9-브로모페난트렌 대신 1-브로모파이렌을 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 합성예 2와 동일한 방법을 이용하여 화합물 64를 합성하였다. 생성된 화합물은 MS/FAB 와 <sup>1</sup>H NMR 로 확인하였다.

[0395]

C<sub>35</sub>H<sub>25</sub>D<sub>2</sub>N<sub>2</sub> : 계산값 474.20, 측정값 475.21

[0396]

<sup>1</sup>H NMR (CDCl<sub>3</sub>, 400 MHz) δ (ppm) 8.45 (d, 1H), 8.29 (d, 1H), 8.17 (d, 2H), 8.10-7.88 (m, 6H), 7.35-7.33 (m, 1H), 7.18-7.08 (m, 5H), 7.06-7.03 (m, 2H), 6.73-6.71 (m, 4H), 중수소 치환율 : 91.5 %

[0397]

**합성예 24: 화합물 69의 합성**

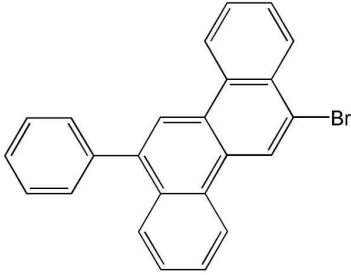
[0398]

중간체 33-A 합성시 2,6-디브로모나프탈렌 대신 2,7-디브로모-9,9-디메틸-9H-플루오렌(2,7-dibromo-9,9-dimethyl-9H-fluorene)을 사용하고, 중간체 33-B 합성시 9,9-디메틸-N-페닐-9H-플루오렌-2-아민(9,9-dimethyl-N-phenyl-9H-fluorene-2-amine) 대신 디페닐아민을 사용하고, 화합물 33-2H 합성시 9-브로모페난트렌 대신 하기

중간체 69-2H-(1)을 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 합성에 2와 동일한 방법을 이용하여 화합물 69를 합성하였다. 생성된 화합물은 MS/FAB 와  $^1\text{H}$  NMR 로 확인하였다.

[0399]  $\text{C}_{53}\text{H}_{37}\text{D}_2\text{N}$  : 계산값 691.32, 측정값 692.29

[0400]  $^1\text{H}$  NMR ( $\text{CDCl}_3$ , 400 MHz)  $\delta$  (ppm) 8.99 (s, 1H), 8.69 (s, 1H), 8.33-8.31 (m, 2H), 8.13-8.05 (m, 4H), 7.75-7.61 (m, 6H), 7.50-7.35 (m, 4H), 7.18-7.03 (m, 5H), 6.85-6.83 (m, 3H), 6.77-6.75 (m, 1H), 6.55-6.52 (m, 4H), 1.68 (s, 6H)



**69-2H-(1)**

[0401]

[0402] **합성예 25: 화합물 71의 합성**

[0403] 중간체 3-A 합성시 9-브로모페난트렌 대신 4-브로모벤조니트릴을 사용하고, 화합물 3-2H 합성시 2-브로모나프탈렌 대신 중간체 69-2H-(1)을 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 합성에 1과 동일한 방법을 이용하여 화합물 71을 합성하였다. 생성된 화합물은 MS/FAB 와  $^1\text{H}$  NMR 로 확인하였다.

[0404]  $\text{C}_{45}\text{H}_{28}\text{D}_2\text{N}_2$  : 계산값 600.25, 측정값 601.24

[0405]  $^1\text{H}$  NMR ( $\text{CDCl}_3$ , 400 MHz)  $\delta$  (ppm) 8.80 (s, 1H), 8.69 (s, 1H), 8.33-8.31 (m, 2H), 8.13-8.05 (m, 3H), 7.71-7.63 (m, 3H), 7.50-7.35 (m, 7H), 7.18-7.03 (m, 4H), 6.92-6.73 (m, 5H), 6.52-6.50 (m, 2H), 중수소 치환율 : 90.6 %

[0406] **합성예 26: 화합물 74의 합성**

[0407] 중간체 3-A 대신 디페닐아민을 사용하고, 화합물 3-2H 합성시 2-브로모나프탈렌 대신 2-브로모트리페닐렌(2-bromotriphenylene)을 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 합성에 1과 동일한 방법을 이용하여 화합물 74를 합성하였다. 생성된 화합물은 MS/FAB 와  $^1\text{H}$  NMR 로 확인하였다.

[0408]  $\text{C}_{38}\text{H}_{25}\text{D}_2\text{N}$  : 계산값 499.22, 측정값 450.21

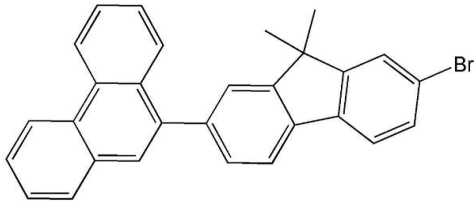
[0409]  $^1\text{H}$  NMR ( $\text{CDCl}_3$ , 400 MHz)  $\delta$  (ppm) 8.86-8.81 (m, 5H), 8.50-8.49 (m, 1H), 7.70-7.60 (m, 5H), 7.47-7.44 (m, 2H), 7.08-7.04 (m, 4H), 6.89-6.83 (m, 4H), 6.56-6.52 (m, 4H), 중수소 치환율 : 91 %

[0410] **합성예 27: 화합물 80의 합성**

[0411] 중간체 3-A 대신 디페닐아민을 사용하고, 화합물 3-2H 합성시 2-브로모나프탈렌 대신 중간체 80-2H-(1)을 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 합성에 1과 동일한 방법을 이용하여 화합물 80을 합성하였다. 생성된 화합물은 MS/FAB 와  $^1\text{H}$  NMR 로 확인하였다.

[0412]  $\text{C}_{49}\text{H}_{35}\text{D}_2\text{N}$  : 계산값 641.30, 측정값 642.31

[0413]  $^1\text{H}$  NMR ( $\text{CDCl}_3$ , 400 MHz)  $\delta$  (ppm) 8.64 (d, 1H), 8.42 (d, 1H), 7.89-7.86 (m, 2H), 7.79-7.77 (m, 1H), 7.68-7.63 (m, 6H), 7.54-7.34 (m, 5H), 7.15-7.03 (m, 5H), 6.89-6.83 (m, 4H), 6.56-6.54 (m, 4H), 1.69 (s, 6H)



**80-2H-(1)**

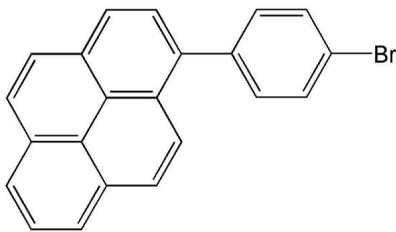
[0414]

[0415] **합성예 28: 화합물 83의 합성**

[0416] 중간체 3-A 대신 디페닐아민을 사용하고, 화합물 3-2H 합성시 2-브로모나프탈렌 대신 하기 중간체 83-2H-(1)을 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 합성예 1과 동일한 방법을 이용하여 화합물 83을 합성하였다. 생성된 화합물은 MS/FAB 와  $^1\text{H}$  NMR 로 확인하였다.

[0417]  $\text{C}_{42}\text{H}_{27}\text{D}_2\text{N}$  : 계산값 549.24, 측정값 550.21

[0418]  $^1\text{H}$  NMR ( $\text{CDCl}_3$ , 400 MHz)  $\delta$  (ppm) 8.16-7.98 (m, 7H), 7.85 (d, 1H), 7.73-7.70 (m, 2H), 7.63-7.54 (m, 3H), 7.44-7.40 (m, 2H), 7.08-7.04 (m, 4H), 6.99-6.93 (m, 4H), 6.56-6.54 (m, 4H), 중수소 치환율 : 90.8 %



**83-2H-(1)**

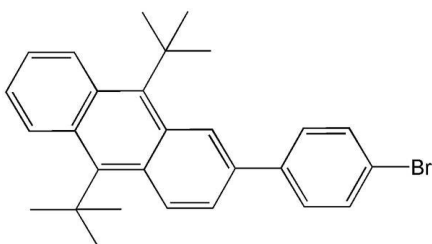
[0419]

[0420] **합성예 29: 화합물 86의 합성**

[0421] 중간체 3-A 대신 N-페닐나프탈렌-2-아민(N-phenylnaphthalen-2-amine)을 사용하고, 화합물 3-2H 합성시 2-브로모나프탈렌 대신 하기 중간체 86-2H-(1)을 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 합성예 1과 동일한 방법을 이용하여 화합물 86을 합성하였다. 생성된 화합물은 MS/FAB 와  $^1\text{H}$  NMR 로 확인하였다.

[0422]  $\text{C}_{52}\text{H}_{45}\text{D}_2\text{N}$  : 계산값 687.38, 측정값 688.37

[0423]  $^1\text{H}$  NMR ( $\text{CDCl}_3$ , 400 MHz)  $\delta$  (ppm) 8.22-8.21 (m, 1H), 8.13-8.07 (m, 2H), 7.78-7.73 (m, 3H), 7.66-7.39 (m, 13H), 7.13-7.05 (m, 3H), 6.99-6.95 (m, 2H), 6.86-6.83 (m, 1H), 6.64-6.62 (m, 2H), 1.74 (s, 9H), 1.71 (s, 9H)



**86-2H-(1)**

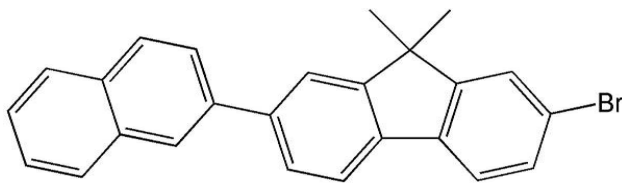
[0424]

[0425] **합성예 30: 화합물 88의 합성**

[0426] 중간체 3-A 대신 디페닐아민을 사용하고, 화합물 3-2H 합성시 2-브로모나프탈렌 대신 중간체 하기 88-2H-(1)을 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 합성에 1과 동일한 방법을 이용하여 화합물 88을 합성하였다. 생성된 화합물은 MS/FAB 와 <sup>1</sup>H NMR 로 확인하였다.

[0427] C<sub>45</sub>H<sub>33</sub>D<sub>2</sub>N : 계산값 591.28, 측정값 592.31

[0428] <sup>1</sup>H NMR (CDCl<sub>3</sub>, 400 MHz) δ (ppm) 8.06-8.04 (m, 1H), 7.93-7.86 (m, 3H), 7.79-7.75 (m, 2H), 7.65-7.43 (m, 8H), 7.36-7.34 (m, 1H), 7.08-7.03 (m, 4H), 6.99-6.93 (m, 4H), 6.66-6.64 (m, 4H), 1.69 (s, 6H), 중수소 치환율 : 82 %



**88-2H-(1)**

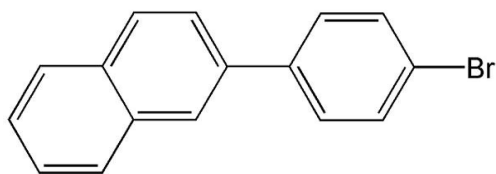
[0429]

[0430] **합성예 31: 화합물 91의 합성**

[0431] 중간체 33-A 합성시 2,6-디브로모나프탈렌 대신 2,7-디브로모페난트렌을 사용하고, 화합물 33-B 합성시 9,9-디메틸-N-페닐-9H-플루오렌-2-아민(9,9-dimethyl-N-phenyl-9H-fluoren-2-amine) 대신 디페닐아민을 사용하고, 중간체 33-2H 합성시 9-브로모페난트렌 대신 중간체 하기 91-2H-(1)을 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 합성에 2와 동일한 방법을 이용하여 화합물 91을 합성하였다. 생성된 화합물은 MS/FAB 와 <sup>1</sup>H NMR 로 확인하였다.

[0432] C<sub>44</sub>H<sub>29</sub>D<sub>2</sub>N : 계산값 575.25, 측정값 576.24

[0433] <sup>1</sup>H NMR (CDCl<sub>3</sub>, 400 MHz) δ (ppm) 8.48-8.44 (m, 2H), 8.15-8.14 (m, 1H), 7.97-7.96 (m, 1H), 7.91-7.81 (m, 5H), 7.75-7.49 (m, 9H), 7.08-7.03 (m, 4H), 6.99-6.97 (m, 1H), 6.86-6.83 (m, 2H), 6.68-6.66 (m, 4H), 중수소 치환율 : 92.5 %



**91-2H-(1)**

[0434]

[0435] **합성예 32: 화합물 93의 합성**

[0436] 중간체 33-A 합성시 2,6-디브로모나프탈렌 대신 2,7-디브로모-9,9-디메틸-9H-플루오렌(2,7-dibromo-9,9-dimethyl-9H-fluorene)을 사용하고, 중간체 33-B 합성시 9,9-디메틸-N-페닐-9H-플루오렌-2-아민(9,9-dimethyl-N-phenyl-9H-fluoren-2-amine) 대신 디페닐아민을 사용하고, 화합물 33-2H 합성시 9-브로모페난트렌 대신 상기 중간체 88-2H-(1)을 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 합성에 2와 동일한 방법을 이용하여 화합물 93을 합성하였다. 생성된 화합물은 MS/FAB 와 <sup>1</sup>H NMR 로 확인하였다.

[0437] C<sub>54</sub>H<sub>41</sub>D<sub>2</sub>N : 계산값 707.35, 측정값 708.36

- [0438]  $^1\text{H}$  NMR ( $\text{CDCl}_3$ , 400 MHz)  $\delta$  (ppm) 8.05-8.04 (m, 1H), 7.96-7.93 (m, 3H), 7.79-7.73 (m, 3H), 7.68-7.49 (m, 8H), 7.36-7.33 (m, 2H), 7.08-7.03 (m, 4H), 6.97-6.93 (m, 3H), 6.86-6.83 (m, 1H), 6.45-6.43 (m, 4H), 1.69 (s, 6H), 1.67 (s, 6H)
- [0439] **합성예 33: 화합물 101의 합성**
- [0440] 중간체 3-A 대신 디페닐아민을 사용하고, 화합물 3-2H 합성시 2-브로모나프탈렌 대신 2-브로모-9,9-디메틸-9H-플루오렌(2-bromo-9,9-dimethyl-9H-fluorene)을 사용하였다는 제외하고는, 상기 합성예 1과 동일한 방법을 이용하여 화합물 101을 합성하였다. 생성된 화합물은 MS/FAB 와  $^1\text{H}$  NMR 로 확인하였다.
- [0441]  $\text{C}_{35}\text{H}_{27}\text{D}_2\text{N}$  : 계산값 465.24, 측정값 466.25
- [0442]  $^1\text{H}$  NMR ( $\text{CDCl}_3$ , 400 MHz)  $\delta$  (ppm) 7.85 (dd, 1H), 7.74 (dd, 1H), 7.46-7.44 (m, 2H), 7.38-7.33 (m, 2H), 7.28-7.27 (m, 1H), 7.20-7.04 (m, 6H), 6.99-6.93 (m, 4H), 6.66-6.63 (m, 4H), 1.67 (s, 6H), 중수소 치환율 : 85.6 %
- [0443] **합성예 34: 화합물 106의 합성**
- [0444] 중간체 3-A 합성시 9-브로모페난트렌 대신 4-브로모벤조니트릴을 사용하고 아닐린 대신 나프탈렌-2-아민을 사용하고, 화합물 3-2H 합성시 2-브로모나프탈렌 대신 2-브로모-9,9-디메틸-9H-플루오렌(2-bromo-9,9-dimethyl-9H-fluorene)을 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 합성예 1과 동일한 방법을 이용하여 화합물 106을 합성하였다. 생성된 화합물은 MS/FAB 와  $^1\text{H}$  NMR 로 확인하였다.
- [0445]  $\text{C}_{40}\text{H}_{28}\text{D}_2\text{N}_2$  : 계산값 540.25, 측정값 541.26
- [0446]  $^1\text{H}$  NMR ( $\text{CDCl}_3$ , 400 MHz)  $\delta$  (ppm) 7.87-7.83 (m, 1H), 7.78-7.76 (m, 1H), 7.72 (d, 1H), 7.65 (d, 1H), 7.58-7.53 (m, 3H), 7.48-7.45 (m, 2H), 7.41-7.27 (m, 6H), 7.20-7.18 (m, 1H), 7.13-7.09 (m, 1H), 7.02-6.99 (m, 1H), 6.93-6.88 (m, 4H), 1.68 (s, 6H), 중수소 치환율 : 87.4 %
- [0447] **합성예 35: 화합물 110의 합성**
- [0448] 중간체 3-A 대신 9,9-디메틸-N-페닐-9H-플루오렌-2-아민(9,9-dimethyl-N-phenyl-9H-fluoren-2-amine)을 사용하고, 화합물 3-2H 합성시 2-브로모나프탈렌 대신 2-브로모-9,9-디메틸-9H-플루오렌(2-bromo-9,9-dimethyl-9H-fluorene)을 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 합성예 1과 동일한 방법을 이용하여 화합물 110을 합성하였다. 생성된 화합물은 MS/FAB 와  $^1\text{H}$  NMR 로 확인하였다.
- [0449]  $\text{C}_{44}\text{H}_{35}\text{D}_2\text{N}$  : 계산값 581.30, 측정값 582.31
- [0450]  $^1\text{H}$  NMR ( $\text{CDCl}_3$ , 400 MHz)  $\delta$  (ppm) 7.86-7.84 (m, 1H), 7.78-7.76 (m, 1H), 7.72 (d, 1H), 7.72 (d, 1H), 7.55 (d, 1H), 7.48-7.45 (m, 2H), 7.36-7.31 (m, 3H), 7.28-7.27 (m, 1H), 7.14-7.04 (m, 5H), 6.93-6.83 (m, 4H), 6.69-6.67 (m, 1H), 6.53-6.51 (m, 2H), 1.68 (s, 6H), 1.65 (s, 6H), 중수소 치환율 : 82.1 %
- [0451] **합성예 36: 화합물 112의 합성**
- [0452] 중간체 3-A 합성시 9-브로모페난트렌 대신 3-요오도-9-페닐-9H-카바졸(3-Iodo-9-phenyl-9H-carbazole)을 사용하고, 화합물 3-2H 합성시 2-브로모나프탈렌 대신 2-브로모-9,9-디메틸-9H-플루오렌(2-bromo-9,9-dimethyl-9H-fluorene)을 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 합성예 1과 동일한 방법을 이용하여 화합물 112을 합성하였다. 생성된 화합물은 MS/FAB 와  $^1\text{H}$  NMR 로 확인하였다.

[0453]  $C_{47}H_{34}D_2N_2$  : 계산값 630.30, 측정값 631.32

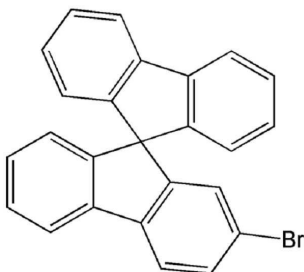
[0454]  $^1H$  NMR ( $CDCl_3$ , 400 MHz)  $\delta$  (ppm) 8.22-8.20 (m, 1H), 7.86-7.84 (m, 1H), 7.73-7.71 (m, 1H), 7.54-7.04 (m, 19H), 6.87-6.82 (m, 3H), 6.76-6.73 (m, 1H), 6.61-6.59 (m, 2H), 1.68 (s, 6H)

[0455] **합성예 37: 화합물 118의 합성**

[0456] 중간체 3-A 대신 N-페닐나프탈렌-2-아민(N-phenylnaphthalen-2-amine)을 사용하고, 화합물 3-2H 합성시 2-브로모나프탈렌 대신 하기 중간체 118-2H-(1)을 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 합성예 1과 동일한 방법을 이용하여 화합물 118을 합성하였다. 생성된 화합물은 MS/FAB 와  $^1H$  NMR 로 확인하였다.

[0457]  $C_{49}H_{31}D_2N$  : 계산값 637.27, 측정값 638.24

[0458]  $^1H$  NMR ( $CDCl_3$ , 400 MHz)  $\delta$  (ppm) 8.11-8.10 (m, 1H), 7.96 (d, 1H), 7.92-7.90 (m, 1H), 7.78-7.76 (m, 1H), 7.73-7.71 (m, 1H), 7.65 (d, 1H), 7.58-7.34 (m, 10H), 7.24-7.04 (m, 6H), 6.93-6.86 (m, 6H), 6.80-6.78 (m, 1H), 6.54-6.52 (m, 2H)



**118-2H-(1)**

[0459]

[0460] **합성예 38: 화합물 121의 합성**

[0461] 중간체 3-A 대신 9,9-디메틸-N-페닐-9H-플루오렌-2-아민(9,9-dimethyl-N-phenyl-9H-fluoren-2-amine)을 사용하고, 화합물 3-2H 합성시 2-브로모나프탈렌 대신 3-요오도-9-페닐-9H-카바졸(3-Iodo-9-phenyl-9H-carbazole)을 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 합성예 1과 동일한 방법을 이용하여 화합물 121을 합성하였다. 생성된 화합물은 MS/FAB 와  $^1H$  NMR 로 확인하였다.

[0462]  $C_{47}H_{34}D_2N_2$  : 계산값 449.21, 측정값 450.22

[0463]  $^1H$  NMR ( $CDCl_3$ , 400 MHz)  $\delta$  (ppm) 8.28-8.24 (m, 1H), 8.02-8.00 (m, 1H), 7.77 (dd, 1H), 7.55 (d, 1H), 7.51-7.26 (m, 13H), 7.14-7.05 (m, 4H), 6.93-6.83 (m, 4H), 6.79-6.77 (m, 1H), 6.63-6.61 (m, 2H), 1.68 (s, 6H)

[0464] **합성예 39: 화합물 125의 합성**

[0465] 중간체 3-A 합성시 9-브로모페난트렌 대신 4-브로모벤조니트릴을 사용하고 아닐린 대신 나프탈렌-2-아민을 사용하고, 화합물 3-2H 합성시 2-브로모나프탈렌 대신 3-요오도-9-페닐-9H-카바졸(3-Iodo-9-phenyl-9H-carbazole)을 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 합성예 1과 동일한 방법을 이용하여 화합물 125를 합성하였다. 생성된 화합물은 MS/FAB 와  $^1H$  NMR 로 확인하였다.

[0466]  $C_{43}H_{27}D_2N_3$  : 계산값 589.24, 측정값 590.24

[0467]  $^1H$  NMR ( $CDCl_3$ , 400 MHz)  $\delta$  (ppm) 8.26-8.24 (m, 1H), 8.02-8.00 (m, 1H), 7.78-7.76 (m, 1H), 7.65 (d, 1H),

7.57-7.52 (m, 3H), 7.50-7.25 (m, 15H), 7.12-7.10 (m, 1H), 6.93-6.88 (m, 4H), 중수소 치환율 : 88.1 %

[0468] **합성예 40: 화합물 127의 합성**

[0469] 중간체 3-A 합성시 9-브로모페난트렌 대신 3-요오도-9-페닐-9H-카바졸(3-Iodo-9-phenyl-9H-carbazole)을 사용하고, 화합물 3-2H 합성시 2-브로모나프탈렌 대신 3-요오도-9-페닐-9H-카바졸(3-Iodo-9-phenyl-9H-carbazole)을 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 합성예 1과 동일한 방법을 이용하여 화합물 127을 합성하였다. 생성된 화합물은 MS/FAB 와 <sup>1</sup>H NMR 로 확인하였다.

[0470] C<sub>50</sub>H<sub>33</sub>D<sub>2</sub>N<sub>3</sub> : 계산값 679.29, 측정값 680.28

[0471] <sup>1</sup>H NMR (CDCl<sub>3</sub>, 400 MHz) δ (ppm) 8.26-8.20 (m, 2H), 8.02-8.01 (m, 1H), 7.54-7.23 (m, 22H), 7.08-7.04 (m, 2H), 6.97-6.91 (m, 3H), 6.86-6.83 (m, 1H), 6.61-6.59 (m, 2H), 중수소 치환율 : 90.5 %

[0472] **합성예 41: 화합물 128의 합성**

[0473] 중간체 3-A 대신 N,9,9-트리페닐-9H-플루오렌-2-아민(N,9,9-triphenyl-9H-fluoren-2-amine)을 사용하고, 화합물 3-2H 합성시 2-브로모나프탈렌 대신 3-요오도-9-페닐-9H-카바졸(3-Iodo-9-phenyl-9H-carbazole)을 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 합성예 1과 동일한 방법을 이용하여 화합물 128을 합성하였다. 생성된 화합물은 MS/FAB 와 <sup>1</sup>H NMR 로 확인하였다.

[0474] C<sub>57</sub>H<sub>35</sub>D<sub>2</sub>N<sub>2</sub> : 계산값 754.33, 측정값 755.34

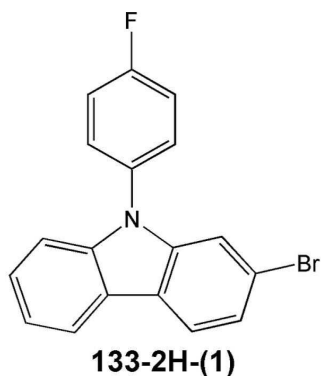
[0475] <sup>1</sup>H NMR (CDCl<sub>3</sub>, 400 MHz) δ (ppm) 8.26-8.24 (m, 1H), 8.02-8.00 (m, 1H), 7.85 (dd, 1H), 7.57 (d, 1H), 7.51-7.26 (m, 13H), 7.19-7.04 (m, 13H), 6.91-6.89 (m, 1H), 6.83-6.73 (m, 4H), 6.68-6.67 (m, 1H), 6.53-6.51 (m, 2H)

[0476] **합성예 42: 화합물 133의 합성**

[0477] 중간체 3-A 대신 9,9-디메틸-N-(나프탈렌-3-일)-9H-플루오렌-2-아민(9,9-dimethyl-N-(naphthalen-3-yl)-9H-fluoren-2-amine)을 사용하고, 화합물 3-2H 합성시 2-브로모나프탈렌 대신 하기 중간체 133-2H-(1)을 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 합성예 1과 동일한 방법을 이용하여 화합물 133을 합성하였다. 생성된 화합물은 MS/FAB 와 <sup>1</sup>H NMR 로 확인하였다.

[0478] C<sub>51</sub>H<sub>35</sub>D<sub>2</sub>FN<sub>2</sub> : 계산값 698.30, 측정값 699.31

[0479] <sup>1</sup>H NMR (CDCl<sub>3</sub>, 400 MHz) δ (ppm) 8.14-8.12 (m, 1H), 7.93-7.91 (m, 1H), 7.79-7.76 (m, 2H), 7.69 (d, 1H), 7.58-7.54 (m, 4H), 7.49-7.23 (m, 11H), 7.16-7.05 (m, 5H), 6.99-6.91 (m, 3H), 6.79-6.78 (m, 1H), 1.67 (s, 6H)



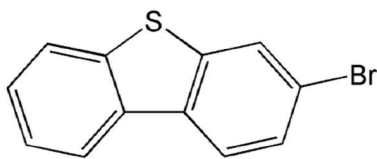
[0480]

[0481] **합성예 43: 화합물 136의 합성**

[0482] 중간체 3-A 합성시 9-브로모페난트렌 대신 1-브로모-4-플루오로벤젠을 사용하고 아닐린 대신 나프탈렌-2-아민을 사용하고, 화합물 3-2H 합성시 2-브로모나프탈렌 대신 하기 중간체 136-2H-(1)을 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 합성예 1과 동일한 방법을 이용하여 화합물 136을 합성하였다. 생성된 화합물은 MS/FAB 와 <sup>1</sup>H NMR 로 확인하였다.

[0483] C<sub>36</sub>H<sub>22</sub>D<sub>2</sub>FNS : 계산값 523.17, 측정값 524.27

[0484] <sup>1</sup>H NMR (CDCl<sub>3</sub>, 400 MHz) δ (ppm) 8.29 (d, 1H), 8.10-8.04 (m, 2H), 7.80-7.76 (m, 2H), 7.65 (d, 1H), 7.58-7.54 (m, 4H), 7.48-7.35 (m, 5H), 7.25-7.20 (m, 3H), 7.04-7.01 (m, 2H), 6.84-6.81 (m, 2H), 중수소 치환율 : 91.3%



**136-2H-(1)**

[0485]

[0486] **합성예 44: 화합물 138의 합성**

[0487] 화합물 3-2H 합성시 2-브로모나프탈렌 대신 상기 중간체 29-A-(1)을 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 합성예 1과 동일한 방법을 이용하여 화합물 138을 합성하였다. 생성된 화합물은 MS/FAB 와 <sup>1</sup>H NMR 로 확인하였다.

[0488] C<sub>40</sub>H<sub>25</sub>D<sub>2</sub>NS : 계산값 555.19, 측정값 556.17

[0489] <sup>1</sup>H NMR (CDCl<sub>3</sub>, 400 MHz) δ (ppm) 8.58 (d, 1H), 8.27-8.26 (m, 1H), 8.21-8.11 (m, 2H), 7.95-7.92 (m, 1H), 7.86 (d, 1H), 7.79 (d, 1H), 7.72-7.54 (m, 6H), 7.46-7.39 (m, 4H), 7.07-7.03 (m, 3H), 6.97-6.91 (m, 3H), 6.52-6.49 (m, 2H), 중수소 치환율 : 90%

[0490] **합성예 45: 화합물 139의 합성**

[0491] 중간체 3-A 합성시 9-브로모페난트렌 대신 상기 중간체 118-2H-(1)을 사용하고 아닐린 대신 나프탈렌-2-아민을 사용하고, 화합물 3-2H 합성시 2-브로모나프탈렌 대신 상기 중간체 29-A-(1)을 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 합성예 1과 동일한 방법을 이용하여 화합물 139를 합성하였다. 생성된 화합물은 MS/FAB 와 <sup>1</sup>H NMR 로 확인하였다.

[0492] C<sub>51</sub>H<sub>31</sub>D<sub>2</sub>NS : 계산값 693.24, 측정값 694.21

[0493] <sup>1</sup>H NMR (CDCl<sub>3</sub>, 400 MHz) δ (ppm) 8.27-8.26 (m, 1H), 8.12 (d, 1H), 7.93-7.85 (m, 4H), 7.79 (d, 1H), 7.64-7.41 (m, 9H), 7.21-7.15 (m, 3H), 7.09-7.04 (m, 2H), 6.93-6.73 (m, 7H), 6.67-6.66 (m, 1H), 6.53-6.51 (m, 2H)

[0494] **합성예 46: 화합물 142의 합성**

[0495] 중간체 3-A 합성시 9-브로모페난트렌 대신 브로모벤젠을 사용하고 아닐린 대신 상기 중간체 5-A-(1)을 사용하고, 화합물 3-2H 합성시 2-브로모나프탈렌 대신 상기 중간체 29-A-(1)을 사용하였다는 점을 제외하고는,

상기 합성에 1과 동일한 방법을 이용하여 화합물 142를 합성하였다. 생성된 화합물은 MS/FAB 와 <sup>1</sup>H NMR 로 확인하였다.

[0496] C<sub>44</sub>H<sub>28</sub>D<sub>2</sub>FNS : 계산값 625.22, 측정값 626.23

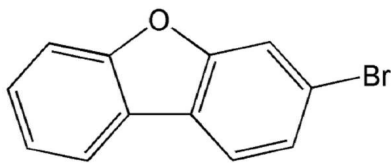
[0497] <sup>1</sup>H NMR (CDCl<sub>3</sub>, 400 MHz) δ (ppm) 8.27-8.26 (m, 1H), 8.12 (d, 1H), 7.86 (d, 1H), 7.79 (d, 1H), 7.72-7.70 (m, 2H), 7.66-7.40 (m, 14H), 7.13-7.03 (m, 3H), 6.98-6.90 (m, 3H), 6.54-6.52 (m, 2H), 중수소 치환율 : 92.8%

[0498] **합성예 47: 화합물 147의 합성**

[0499] 중간체 3-A 대신 9,9-디메틸-N-(나프탈렌-3-일)-9H-플루오렌-2-아민(9,9-dimethyl-N-(naphthalen-3-yl)-9H-fluoren-2-amine)을 사용하고, 화합물 3-2H 합성시 2-브로모나프탈렌 대신 하기 중간체 147-2H-(1)을 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 합성에 1과 동일한 방법을 이용하여 화합물 147을 합성하였다. 생성된 화합물은 MS/FAB 와 <sup>1</sup>H NMR 로 확인하였다.

[0500] C<sub>45</sub>H<sub>31</sub>D<sub>2</sub>NO : 계산값 605.26, 측정값 606.24

[0501] <sup>1</sup>H NMR (CDCl<sub>3</sub>, 400 MHz) δ (ppm) 7.96-7.94 (m, 1H), 7.78-7.68 (m, 5H), 7.57-7.30 (m, 12H), 7.16-7.10 (m, 4H), 6.99-6.97 (m, 2H), 6.93-6.91 (m, 1H), 6.69-6.68 (m, 1H). 1.67 (s, 6H), 중수소 치환율 : 93%



**147-2H-(1)**

[0502]

[0503] **합성예 48: 화합물 150의 합성**

[0504] 중간체 3-A 대신 N,9,9-트리페닐-9H-플루오렌-2-아민(N,9,9-triphenyl-9H-fluoren-2-amine)을 사용하고, 화합물 3-2H 합성시 2-브로모나프탈렌 대신 상기 중간체 30-A-(1)을 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 합성에 1과 동일한 방법을 이용하여 화합물 150을 합성하였다. 생성된 화합물은 MS/FAB 와 <sup>1</sup>H NMR 로 확인하였다.

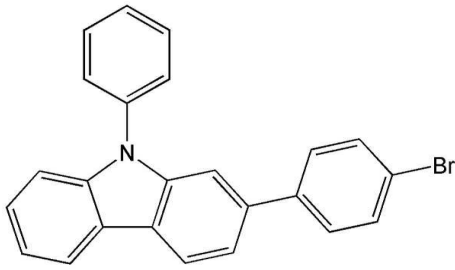
[0505] C<sub>51</sub>H<sub>33</sub>D<sub>2</sub>NO : 계산값 679.28, 측정값 680.29

[0506] <sup>1</sup>H NMR (CDCl<sub>3</sub>, 400 MHz) δ (ppm) 7.99-7.97 (m, 1H), 7.93-7.92 (m, 1H), 7.86-7.84 (m, 1H), 7.72 (d, 1H), 7.58-7.35 (m, 8H), 7.19-7.04 (m, 13H), 6.90 (dd, 1H), 6.83-6.73 (m, 4H), 6.67-6.66 (m, 1H), 6.53-6.51 (m, 2H)

[0507] **합성예 49: 화합물 157의 합성**

[0508] 중간체 33-A 합성시 2,6-디브로모나프탈렌 대신 2,7-디브로모-9,9-디메틸-9H-플루오렌(2,7-dibromo-9,9-dimethyl-9H-fluorene)을 사용하고, 중간체 33-B 합성시 9,9-디메틸-N-페닐-9H-플루오렌-2-아민(9,9-dimethyl-N-phenyl-9H-fluoren-2-amine) 대신 N-페닐나프탈렌-1-아민(N-phenylnaphthalen-1-amine)을 사용하고, 화합물 33-2H 합성시 9-브로모페난트렌 대신 2-브로모-9,9-디메틸-9H-플루오렌(2-bromo-9,9-dimethyl-9H-fluorene)을 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 합성에 2와 동일한 방법을 이용하여 화합물 157을 합성하였다. 생성된 화합물은 MS/FAB 와 <sup>1</sup>H NMR 로 확인하였다.

- [0509]  $C_{48}H_{37}D_2N$  : 계산값 631.32, 측정값 632.33
- [0510]  $^1H$  NMR ( $CDCl_3$ , 400 MHz)  $\delta$  (ppm) 8.13-8.10 (m, 1H), 7.87-7.84 (m, 2H), 7.73-7.64 (m, 5H), 7.49-7.43 (m, 3H), 7.36-7.02 (m, 8H), 6.93 (d, 1H), 6.85-6.78 (m, 2H), 6.55-6.54 (m, 1H), 6.46-6.44 (m, 2H), 1.69 (s, 6H), 1.67 (s, 6H)
- [0511] **합성예 50: 화합물 161의 합성**
- [0512] 중간체 33-B 합성시 9,9-디메틸-N-페닐-9H-플루오렌-2-아민(9,9-dimethyl-N-phenyl-9H-fluoren-2-amine) 대신 디페닐아민을 사용하고, 화합물 33-2H 합성시 9-브로모페난트렌 대신 3-요오도-9-페닐-9H-카바졸(3-Iodo-9-phenyl-9H-carbazole)을 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 합성예 2와 동일한 방법을 이용하여 화합물 161을 합성하였다. 생성된 화합물은 MS/FAB 와  $^1H$  NMR 로 확인하였다.
- [0513]  $C_{42}H_{28}D_2N_2$  : 계산값 564.25, 측정값 565.24
- [0514]  $^1H$  NMR ( $CDCl_3$ , 400 MHz)  $\delta$  (ppm) 8.26-8.24 (m, 1H), 8.01-8.00 (m, 1H), 7.88-7.87 (m, 1H), 7.76-7.67 (m, 3H), 7.63-7.62 (m, 1H), 7.52-7.26 (m, 10H), 7.09-7.04 (m, 4H), 6.97-6.95 (m, 1H), 6.86-6.83 (m, 2H), 6.58-6.56 (m, 4H), 중수소 치환율 : 90%
- [0515] **합성예 51: 화합물 163의 합성**
- [0516] 중간체 33-A 합성시 2,6-디브로모나프탈렌 대신 2,7-디브로모-9,9-디메틸-9H-플루오렌(2,7-dibromo-9,9-dimethyl-9H-fluorene)을 사용하고, 중간체 33-B 합성시 9,9-디메틸-N-페닐-9H-플루오렌-2-아민(9,9-dimethyl-N-phenyl-9H-fluoren-2-amine) 대신 N-페닐나프탈렌-2-아민(N-phenylnaphthalen-2-amine)을 사용하고, 화합물 33-2H 합성시 9-브로모페난트렌 대신 3-요오도-9-페닐-9H-카바졸(3-Iodo-9-phenyl-9H-carbazole)을 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 합성예 2와 동일한 방법을 이용하여 화합물 163을 합성하였다. 생성된 화합물은 MS/FAB 와  $^1H$  NMR 로 확인하였다.
- [0517]  $C_{51}H_{36}D_2N_2$  : 계산값 680.31, 측정값 681.34
- [0518]  $^1H$  NMR ( $CDCl_3$ , 400 MHz)  $\delta$  (ppm) 8.26-8.24 (m, 1H), 8.01-8.00 (m, 1H), 7.78-7.64 (m, 5H), 7.58-7.26 (m, 15H), 7.10-7.05 (m, 3H), 6.91-6.83 (m, 2H), 6.74-6.73 (m, 1H), 6.52-6.50 (m, 2H), 1.68 (s, 6H)
- [0519] **합성예 52: 화합물 164의 합성**
- [0520] 중간체 33-A 합성시 2,6-디브로모나프탈렌 대신 5-브로모-2-요오도피리딘(5-bromo-2-iodopyridine)을 사용하고, 중간체 33-B 합성시 9,9-디메틸-N-페닐-9H-플루오렌-2-아민(9,9-dimethyl-N-phenyl-9H-fluoren-2-amine) 대신 디페닐아민을 사용하고, 화합물 33-2H 합성시 9-브로모페난트렌 대신 하기 중간체 164-2H-(1)을 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 합성예 2와 동일한 방법을 이용하여 화합물 164를 합성하였다. 생성된 화합물은 MS/FAB 와  $^1H$  NMR 로 확인하였다.
- [0521]  $C_{49}H_{29}D_2N_3$  : 계산값 591.26, 측정값 592.27
- [0522]  $^1H$  NMR ( $CDCl_3$ , 400 MHz)  $\delta$  (ppm) 8.14-8.12 (m, 1H), 8.08-8.07 (m, 1H), 7.92-7.89 (m, 2H), 7.82-7.80 (m, 2H), 7.70-7.67 (m, 2H), 7.54-7.48 (m, 4H), 7.39-7.26 (m, 4H), 7.21-7.19 (m, 2H), 7.14-7.08 (m, 5H), 6.96-6.93 (m, 2H), 6.73-6.71 (m, 4H), 중수소 치환율 : 93.5%



**164-2H-(1)**

[0523]

[0524]

**합성예 53: 화합물 167의 합성**

[0525]

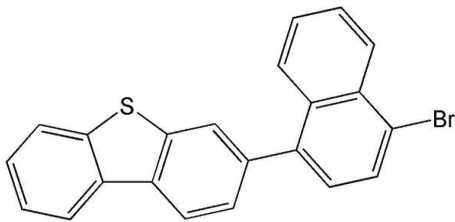
중간체 3-A 대신 디페닐아민을 사용하고, 화합물 3-2H 합성시 2-브로모나프탈렌 대신 하기 중간체 167-2H-(1)을 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 합성예 1과 동일한 방법을 이용하여 화합물 167을 합성하였다. 생성된 화합물은 MS/FAB 와 <sup>1</sup>H NMR 로 확인하였다.

[0526]

C<sub>42</sub>H<sub>27</sub>D<sub>2</sub>NS : 계산값 581.21, 측정값 582.24

[0527]

<sup>1</sup>H NMR (CDCl<sub>3</sub>, 400 MHz) δ (ppm) 8.36 (d, 1H), 8.16-8.06 (m, 2H), 7.98-7.97 (m, 1H), 7.89-7.78 (m, 3H), 7.63-7.58 (m, 2H), 7.46-7.35 (m, 4H), 7.12-6.94 (m, 6H), 6.85-6.73 (m, 4H), 6.66-6.63 (m, 4H)



**167-2H-(1)**

[0528]

[0529]

**합성예 54: 화합물 169의 합성**

[0530]

중간체 33-A 합성시 2,6-디브로모나프탈렌 대신 2,7-디브로모-9,9-디메틸-9H-플루오렌(2,7-dibromo-9,9-dimethyl-9H-fluorene)을 사용하고, 중간체 33-B 합성시 9,9-디메틸-N-페닐-9H-플루오렌-2-아민(9,9-dimethyl-N-phenyl-9H-fluoren-2-amine) 대신 N-페닐나프탈렌-2-아민(N-phenylnaphthalen-2-amine)을 사용하고, 화합물 33-2H 합성시 9-브로모페난트렌 대신 상기 중간체 30-A-(1)을 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 합성예 2와 동일한 방법을 이용하여 화합물 169를 합성하였다. 생성된 화합물은 MS/FAB 와 <sup>1</sup>H NMR 로 확인하였다.

[0531]

C<sub>45</sub>H<sub>31</sub>D<sub>2</sub>NO : 계산값 605.26, 측정값 606.27

[0532]

<sup>1</sup>H NMR (CDCl<sub>3</sub>, 400 MHz) δ (ppm) 7.99-7.97 (m, 1H), 7.93-7.92 (m, 1H), 7.78-7.64 (m, 6H), 7.58-7.51 (m, 6H), 7.42-7.34 (m, 3H), 7.10-7.06 (m, 3H), 6.91-6.87 (m, 2H), 6.74-6.73 (m, 1H), 6.52-6.50 (m, 2H), 1.68 (s, 6H)

[0533]

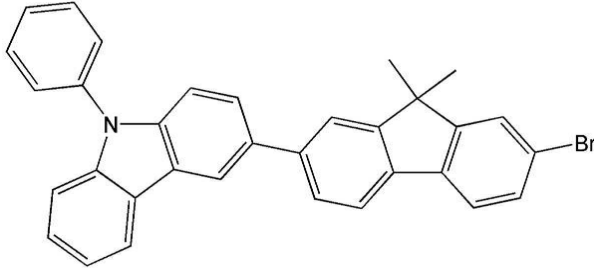
**합성예 55: 화합물 176의 합성**

[0534]

중간체 3-A 대신 N-페닐나프탈렌-2-아민(N-phenylnaphthalen-2-amine)을 사용하고, 화합물 3-2H 합성시 2-브로모나프탈렌 대신 하기 중간체 176-2H-(1)을 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 합성예 1과 동일한 방법을 이용하여 화합물 176을 합성하였다. 생성된 화합물은 MS/FAB 와 <sup>1</sup>H NMR 로 확인하였다.

[0535]  $C_{57}H_{40}D_2N_2$  : 계산값 756.34, 측정값 757.34

[0536]  $^1H$  NMR ( $CDCl_3$ , 400 MHz)  $\delta$  (ppm) 8.24-8.22 (m, 1H), 8.00-7.99 (m, 1H), 7.90-7.85 (m, 2H), 7.80-7.76 (m, 2H), 7.66-7.64 (m, 3H), 7.59-7.04 (m, 20H), 6.99-6.96 (m, 2H), 6.86-6.83 (m, 1H), 6.54-6.52 (m, 2H), 1.67 (s, 6H)



**176-2H-(1)**

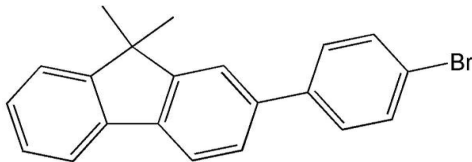
[0537]

[0538] **합성예 56: 화합물 179의 합성**

[0539] 중간체 33-B 합성시 9,9-디메틸-N-페닐-9H-플루오렌-2-아민(9,9-dimethyl-N-phenyl-9H-fluoren-2-amine) 대신 디페닐아민을 사용하고, 화합물 33-2H 합성시 9-브로모페난트렌 대신 하기 중간체 179-2H-(1)을 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 합성예 2와 동일한 방법을 이용하여 화합물 179를 합성하였다. 생성된 화합물은 MS/FAB 와  $^1H$  NMR 로 확인하였다.

[0540]  $C_{45}H_{33}D_2N$  : 계산값 591.28, 측정값 592.29

[0541]  $^1H$  NMR ( $CDCl_3$ , 400 MHz)  $\delta$  (ppm) 7.83-7.79 (m, 2H), 7.75-7.67 (m, 6H), 7.63-7.62 (m, 1H), 7.57-7.55 (m, 1H), 7.50-7.46 (m, 2H), 7.35-7.31 (m, 1H), 7.28-7.27 (m, 1H), 7.15-7.04 (m, 6H), 6.96 (dd, 1H), 6.86-6.83 (m, 2H), 6.68-6.66 (m, 4H), 1.64 (s, 6H), 중수소 치환율 : 82%



**179-2H-(1)**

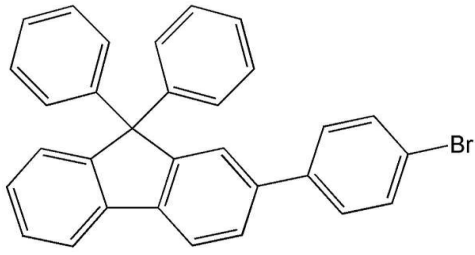
[0542]

[0543] **합성예 57: 화합물 180의 합성**

[0544] 중간체 33-A 합성시 2,6-디브로모나프탈렌 대신 2,7-디브로모-9,9-디메틸-9H-플루오렌(2,7-dibromo-9,9-dimethyl-9H-fluorene)을 사용하고, 중간체 33-B 합성시 9,9-디메틸-N-페닐-9H-플루오렌-2-아민(9,9-dimethyl-N-phenyl-9H-fluoren-2-amine) 대신 N-페닐나프탈렌-2-아민(N-phenylnaphthalen-2-amine)을 사용하고, 화합물 33-2H 합성시 9-브로모페난트렌 대신 하기 중간체 180-2H-(1)을 사용하였다는 점을 제외하고는, 상기 합성예 2와 동일한 방법을 이용하여 화합물 180을 합성하였다. 생성된 화합물은 MS/FAB 와  $^1H$  NMR 로 확인하였다.

[0545]  $C_{64}H_{45}D_2N$  : 계산값 831.38, 측정값 832.40

[0546]  $^1H$  NMR ( $CDCl_3$ , 400 MHz)  $\delta$  (ppm) 7.90-7.88 (m, 1H), 7.85-7.64 (m, 8H), 7.58-7.33 (m, 10H), 7.22-7.05 (m, 14H), 6.94-6.92 (m, 1H), 6.81-6.73 (m, 2H), 6.73-6.72 (m, 1H), 6.53-6.50 (m, 2H), 1.67 (s, 6H)



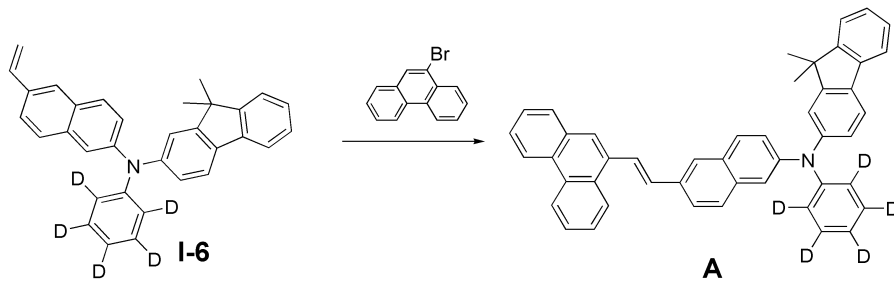
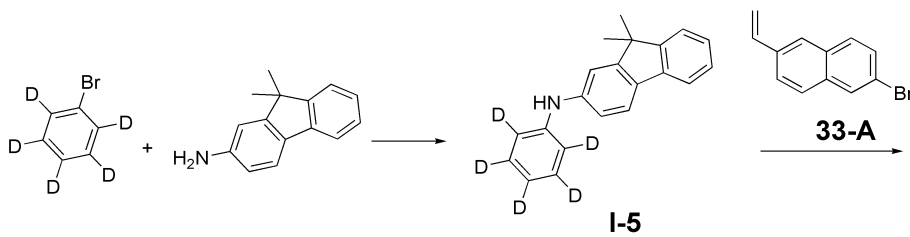
**180-2H-(1)**

[0547]

[0548] **비교 합성에 A**

[0549] 하기 반응식 A에 따라 화합물 A를 합성하였다:

[0550] <반응식 A>



[0551]

[0552] **중간체 I-5의 합성**

[0553] 중간체 3-A 합성시 9-브로모페난트렌 대신 브로모벤젠-d<sub>5</sub>을 사용하고 아닐린 대신 9,9-디메틸-9H-플루오렌-2-아민(9,9-dimethyl-9H-fluoren-2-amine)을 사용하였다는 점을 제외하고는 합성에 1의 중간체 3-A의 합성 방법과 동일한 방법을 이용하여 중간체 I-5를 합성하였다.

[0554] **중간체 I-6의 합성**

[0555] 9,9-디메틸-N-페닐-9H-플루오렌-2-아민 대신 중간체 I-5를 사용하였다는 점을 제외하고는 상기 합성에 2의 중간체 33-B의 합성 방법과 동일한 방법을 이용하여 중간체 I-6을 합성하였다.

[0556] **화합물 A의 합성**

[0557] 중간체 33-B 대신 중간체 I-6을 사용하였다는 점을 제외하고는 상기 합성에 2의 화합물 33-2H의 합성 방법과 동일한 방법을 이용하여 화합물 A를 합성하였다. 생성된 화합물은 MS/FAB 와 <sup>1</sup>H NMR 로 확인하였다.

[0558] C<sub>47</sub>H<sub>30</sub>D<sub>5</sub>N : 계산값 618.31, 측정값 619.32

[0559] <sup>1</sup>H NMR (CDCl<sub>3</sub>, 400 MHz) δ (ppm) 8.66 (d, 1H), 8.46 (d, 1H), 8.15-8.06 (m, 3H), 7.92 (s, 1H), 7.83-7.56 (m, 9H), 7.48 (dt, 1H), 7.36-7.27 (m, 3H), 7.14-7.08 (m, 2H), 7.02 (dt, 1H), 6.97-6.95 (m, 1H), 6.89 (s, 1H), 1.66 (s, 6H)

[0560] **실시예 1**

[0561] 애노드로서 코닝 15Ω/cm<sup>2</sup> (1200Å) ITO 유리 기판을 50mm x 50mm x 0.7mm 크기로 잘라서 이소프로필 알코올과 순수를 이용하여 각 5분 동안 초음파 세정한 후, 30분 동안 자외선을 조사하고 오존에 노출시켜 세정하고 진공 증착장치에 이 유리기판을 설치하였다.

[0562] 상기 ITO층 상부에 2-TNATA를 증착하여 600Å 두께의 정공 주입층을 형성한 후, 상기 정공 주입층 상부에 4,4'-비스[N-(1-나프틸)-N-페닐아미노]비페닐(NPB)를 증착하여 300Å 두께의 정공 수송층을 형성하였다.

[0563] 이어서, 상기 정공 수송층 상부에 9,10-디-나프탈렌-2-일-안트라센(AND) 및 화합물 3을 중량비 98:2로 공증착하여 300Å 두께의 발광층을 형성하였다.

[0564] 이 후, 상기 발광층 상부에 Alq<sub>3</sub>를 증착하여 300Å 두께의 전자 수송층을 형성하고, 상기 전자 수송층 상부에 LiF를 증착하여 10Å 두께의 전자 주입층을 형성하고, 상기 전자 주입층 상부에 Al을 증착하여 3000Å 두께의 제2전극(캐소드)을 형성함으로써 유기 발광 소자를 제조하였다.

[0565] **실시예 2**

[0566] 발광층 형성시 상기 화합물 3 대신 화합물 19를 이용하였다는 점을 제외하고는, 실시예 1과 동일한 방법을 이용하여 유기 발광 소자를 제작하였다.

[0567] **실시예 3**

[0568] 발광층 형성시 상기 화합물 3 대신 화합물 33을 이용하였다는 점을 제외하고는, 실시예 1과 동일한 방법을 이용하여 유기 발광 소자를 제작하였다.

[0569] **실시예 4**

[0570] 발광층 형성시 상기 화합물 3 대신 화합물 45를 이용하였다는 점을 제외하고는, 실시예 1과 동일한 방법을 이용하여 유기 발광 소자를 제작하였다.

[0571] **실시예 5**

[0572] 발광층 형성시 상기 화합물 3 대신 화합물 47을 이용하였다는 점을 제외하고는, 실시예 1과 동일한 방법을 이용하여 유기 발광 소자를 제작하였다.

[0573] **실시예 6**

[0574] 발광층 형성시 상기 화합물 3 대신 화합물 54를 이용하였다는 점을 제외하고는, 실시예 1과 동일한 방법을 이용하여 유기 발광 소자를 제작하였다.

[0575] **실시예 7**

[0576] 발광층 형성시 상기 화합물 3 대신 화합물 69를 이용하였다는 점을 제외하고는, 실시예 1과 동일한 방법을 이용하여 유기 발광 소자를 제작하였다.

[0577] **실시예 8**

[0578] 발광층 형성시 상기 화합물 3 대신 화합물 74를 이용하였다는 점을 제외하고는, 실시예 1과 동일한 방법을 이용하여 유기 발광 소자를 제작하였다.

- [0579] **실시예 9**
- [0580] 발광층 형성시 상기 화합물 3 대신 화합물 80을 이용하였다는 점을 제외하고는, 실시예 1과 동일한 방법을 이용하여 유기 발광 소자를 제작하였다.
- [0581] **실시예 10**
- [0582] 발광층 형성시 상기 화합물 3 대신 화합물 92를 이용하였다는 점을 제외하고는, 실시예 1과 동일한 방법을 이용하여 유기 발광 소자를 제작하였다.
- [0583] **실시예 11**
- [0584] 발광층 형성시 상기 화합물 3 대신 화합물 106을 이용하였다는 점을 제외하고는, 실시예 1과 동일한 방법을 이용하여 유기 발광 소자를 제작하였다.
- [0585] **실시예 12**
- [0586] 발광층 형성시 상기 화합물 3 대신 화합물 118을 이용하였다는 점을 제외하고는, 실시예 1과 동일한 방법을 이용하여 유기 발광 소자를 제작하였다.
- [0587] **실시예 13**
- [0588] 발광층 형성시 상기 화합물 3 대신 화합물 128을 이용하였다는 점을 제외하고는, 실시예 1과 동일한 방법을 이용하여 유기 발광 소자를 제작하였다.
- [0589] **실시예 14**
- [0590] 발광층 형성시 상기 화합물 3 대신 화합물 136을 이용하였다는 점을 제외하고는, 실시예 1과 동일한 방법을 이용하여 유기 발광 소자를 제작하였다.
- [0591] **실시예 15**
- [0592] 발광층 형성시 상기 화합물 3 대신 화합물 161을 이용하였다는 점을 제외하고는, 실시예 1과 동일한 방법을 이용하여 유기 발광 소자를 제작하였다.
- [0593] **실시예 16**
- [0594] 발광층 형성시 상기 화합물 3 대신 화합물 169를 이용하였다는 점을 제외하고는, 실시예 1과 동일한 방법을 이용하여 유기 발광 소자를 제작하였다.
- [0595] **실시예 17**
- [0596] 발광층 형성시 상기 화합물 3 대신 화합물 180을 이용하였다는 점을 제외하고는, 실시예 1과 동일한 방법을 이용하여 유기 발광 소자를 제작하였다.
- [0597] **실시예 18**

[0598] 정공수송층 형성시 NPB 대신 화합물 3을 사용하고, 발광층 형성시 상기 화합물 3 대신 화합물 DPAVBi를 이용하였다는 점을 제외하고는, 실시예 1과 동일한 방법을 이용하여 유기 발광 소자를 제작하였다.

[0599] **실시예 19**

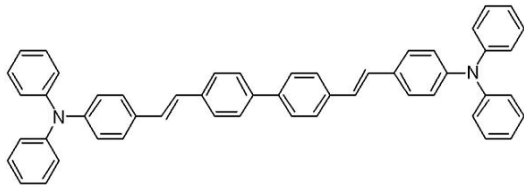
[0600] 정공수송층 형성시 NPB 대신 화합물 136을 사용하고, 발광층 형성시 상기 화합물 3 대신 화합물 DPAVBi를 이용하였다는 점을 제외하고는, 실시예 1과 동일한 방법을 이용하여 유기 발광 소자를 제작하였다.

[0601] **실시예 20**

[0602] 정공수송층 형성시 NPB 대신 화합물 161을 사용하고, 발광층 형성시 상기 화합물 3 대신 화합물 DPAVBi를 이용하였다는 점을 제외하고는, 실시예 1과 동일한 방법을 이용하여 유기 발광 소자를 제작하였다.

[0603] **비교예 1**

[0604] 발광층 형성시 상기 화합물 3 대신 1,4-비스-2,2-디페닐비닐)비페닐(DPAVBi)를 이용하였다는 점을 제외하고는, 실시예 1과 동일한 방법을 이용하여 유기 발광 소자를 제작하였다.



DPAVBi

[0607] **비교예 2**

[0608] 발광층 형성시 상기 화합물 3 대신 화합물 A를 이용하였다는 점을 제외하고는, 실시예 1과 동일한 방법을 이용하여 유기 발광 소자를 제작하였다.

[0609] **평가예 1**

[0610] 실시예 1 내지 20과 비교예 1 내지 2의 유기 발광 소자의 구동 전압, 전류 밀도, 휘도, 발광색, 효율 및 반감 수명(@100mA/cm<sup>2</sup>)을 PR650 Spectroscan Source Measurement Unit.(PhotoResearch사 제품임)을 이용하여 평가하였다. 그 결과는 하기 표 1과 같다.

**표 1**

	정공 수송층	발광층의 도판트	구동 전압 (V)	전류 밀도 (mA/cm <sup>2</sup> )	휘도 (cd/m <sup>2</sup> )	효율 (cd/A)	발광색	반감 수명 (hr)	
[0611]	실시예 1	NPB	화합물 3	6.39	50	3,075	6.15	청색	259
	실시예 2	NPB	화합물 19	6.41	50	3,045	6.09	청색	263
	실시예 3	NPB	화합물 33	6.42	50	3,085	6.17	청색	269
	실시예 4	NPB	화합물 45	6.36	50	3,205	6.41	청색	287
	실시예 5	NPB	화합물 47	6.38	50	3,260	6.52	청색	322
	실시예 6	NPB	화합물 54	6.39	50	3,120	6.24	청색	271
	실시예 7	NPB	화합물 69	6.37	50	3,055	6.11	청색	254
	실시예 8	NPB	화합물 74	6.36	50	2,985	5.97	청색	322
	실시예 9	NPB	화합물 80	6.40	50	3,235	6.47	청색	307
	실시예 10	NPB	화합물 92	6.38	50	3,035	6.07	청색	297

실시예 11	NPB	화합물 106	6.37	50	3,105	6.21	청색	264
실시예 12	NPB	화합물 118	6.41	50	3,290	6.58	청색	326
실시예 13	NPB	화합물 128	6.28	50	3,160	6.32	청색	302
실시예 14	NPB	화합물 136	6.31	50	3,165	6.33	청색	273
실시예 15	NPB	화합물 161	6.29	50	3,140	6.28	청색	267
실시예 16	NPB	화합물 169	6.28	50	3,305	6.61	청색	279
실시예 17	NPB	화합물 180	6.39	50	3,330	6.66	청색	286
실시예 18	화합물 3	DPVABi	5.72	50	2,680	5.36	청색	209
실시예 19	화합물 136	DPVABi	5.53	50	2,710	5.42	청색	219
실시예 20	화합물 161	DPVABi	5.54	50	2,880	5.76	청색	226
비교예 1	NPB	DPVABi	7.35	50	2,065	4.13	청색	145
비교예 2	NPB	화합물 A	6.43	50	3,050	6.10	청색	152

[0612] 표 1로부터, 실시예 1 내지 20의 유기 발광 소자는 비교예 1 및 2의 유기 발광 소자에 비하여 우수한 구동 전압, 휘도, 효율, 색순도 및 수명 특성을 가짐을 확인할 수 있다.

[0613] 구체적으로, 발광층 도펀트로서 화합물 33을 채용한 실시예 3의 유기 발광 소자의 수명은 발광층 도펀트로서 화합물 A를 채용한 비교예 2의 유기 발광 소자의 수명에 비하여 현저히 향상된 것을 확인할 수 있는데, 상기 화합물 A는 스티릴기가 아닌 질소와 결합된 페닐기에 중수소가 치환되어 있다는 점에서 화합물 33과 상이한 화합물이다. 이로부터, 중수소가 스티릴기의 탄소에 치환됨으로써, 유기 발광 소자의 수명 특성이 향상될 수 있음을 확인할 수 있다.

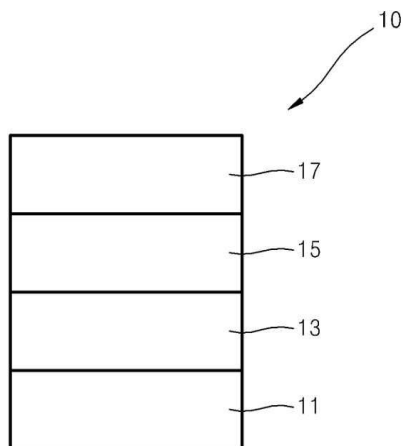
[0614] 한편, 화합물 3, 136 및 161을 각각 정공 수송층 재료로 채용한 실시예 18 내지 20의 유기 발광 소자는, 장수명을 유지하면서도, 비교예 1의 유기 발광 소자의 구동 전압보다 낮은 구동 전압을 나타냄을 확인할 수 있다.

**부호의 설명**

- [0615] 10: 유기 발광 소자
- 11: 기판
- 13: 제1전극
- 15: 유기층
- 17: 제2전극

**도면**

**도면1**



专利名称(译)	苯乙烯基化合物，含有苯乙烯基化合物的组合物和含有它们的有机发光器件		
公开(公告)号	<a href="#">KR101937259B1</a>	公开(公告)日	2019-01-11
申请号	KR1020110117161	申请日	2011-11-10
[标]申请(专利权)人(译)	三星显示有限公司		
申请(专利权)人(译)	三星显示器有限公司		
当前申请(专利权)人(译)	三星显示器有限公司		
[标]发明人	한상현 황석환 김영국 정혜진 임진오 김수연 신대엽 이종혁		
发明人	한상현 황석환 김영국 정혜진 임진오 김수연 신대엽 이종혁		
IPC分类号	C09K11/06 H01L51/50		
CPC分类号	H05B33/14 C07B59/00 C07B2200/05 C07C211/54 C07C211/56 C07C211/58 C07C211/60 C07C211/61 C07C255/58 C07C2603/18 C07C2603/24 C07C2603/26 C07C2603/42 C07C2603/48 C07C2603/50 C07C2603/94 C07D209/86 C07D209/88 C07D213/38 C07D213/74 C07D307/91 C07D333/76 C07D401/10 C07D409/12 C09K11/06 C09K2211/1011 C09K2211/1014 C09K2211/1029 C09K2211/1088 C09K2211/1092 H01L51/0058 H01L51/0059 H01L51/0061 H01L51/0074		
审查员(译)	周二集群		
其他公开文献	KR1020130051807A		
外部链接	<a href="#">Espacenet</a>		

摘要(译)

由式1表示的基于苯乙烯基的化合物，包含该基于苯乙烯基的化合物的组合物以及包括该基于苯乙烯基的化合物的有机发光二极管(OLED)：基于苯乙烯基的化合物可以表现出高的耐热性，因此OLED包括低电压，高亮度，高效率 and 长寿命。

