



(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 공개특허공보(A)

(11) 공개번호 10-2011-0043270
(43) 공개일자 2011년04월27일

(51) Int. Cl.

C09K 11/06 (2006.01) H01L 51/54 (2006.01)

(21) 출원번호 10-2009-0100311

(22) 출원일자 2009년10월21일

심사청구일자 2009년10월21일

(71) 출원인

(주)씨에스엘솔라

경기도 성남시 중원구 상대원동 66-1 이노트리아
파트형공장7층

(72) 발명자

김복영

경기도 용인시 수지구 상현동 상현마을 831번지
쌍용2차 218-601

안중복

서울특별시 도봉구 창2동 809번지 금용아파트
101-1301

(뒷면에 계속)

(74) 대리인

리엔목특허법인

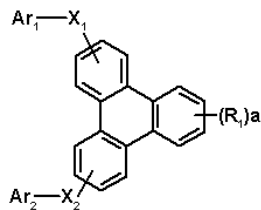
전체 청구항 수 : 총 11 항

(54) 유기발광화합물 및 이를 구비한 유기발광소자

(57) 요약

하기 화학식 1로 표시되는 화합물 및 이를 구비한 유기발광소자가 제시된다.

<화학식 1>



상기 화학식 1에서,

X_1 및 X_2 가 서로 독립적으로, 공유결합 또는 $-C(=O)-$ 이며,

Ar_1 및 Ar_2 가 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C_6-C_{20} 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C_2-C_{20} 헤테로아릴기이며,

a 는 1 내지 4의 정수이며,

R_1 은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 페닐기, 또는 디페닐기이며,

단, 상기 X_1 및 X_2 중에서 하나 이상이 $-C(=O)-$ 이며, 상기 $-C(=O)-$ 에 연결된 Ar_1 또는 Ar_2 는 수소가 아니다.

대표도 - 도1b

제2전극
전자주입층
전자수송층
발광층
정공수송층
정공주입층
제1전극

(72) 발명자

진성민

경기도 광주시 회덕동 295-3번지 벽산블루밍아파트
104-804

이재성

경기도 수원시 장안구 조원동 한일아파트 126-303

안도환

서울특별시 종로구 창신2동 639-20번지 창림아파트
501호

강지승

서울특별시 강서구 화곡7동 352-20

박노길

경기도 용인시 기흥구 동백동 호수마을 휴먼시아아
파트 1506-1102

한근희

경기도 광명시 광명4동 한진아파트 109-1305

시상만

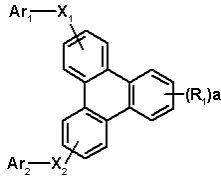
경기도 성남시 분당구 야탑1동 주공아파트
104-2005

특허청구의 범위

청구항 1

하기 화학식 1로 표시되는 유기발광화합물:

<화학식 1>



상기 화학식 1에서,

X_1 및 X_2 가 서로 독립적으로, 공유결합 또는 $-C(=O)-$ 이며,

Ar_1 및 Ar_2 가 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C_6-C_{20} 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C_2-C_{20} 헤테로아릴기이며,

a 는 1 내지 4의 정수이며,

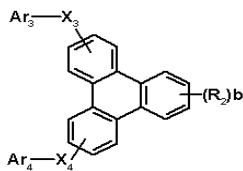
R_1 은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 페닐기, 또는 디페닐기이며,

단, 상기 X_1 및 X_2 중에서 하나 이상이 $-C(=O)-$ 이며, 상기 $-C(=O)-$ 에 연결된 Ar_1 또는 Ar_2 는 수소가 아니다.

청구항 2

하기 화학식 2로 표시되는 유기발광화합물:

<화학식 2>



상기 화학식 2에서,

X_3 및 X_4 가 서로 독립적으로, 공유결합, 또는 페닐렌기이며,

Ar_3 및 Ar_4 가 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C_2-C_{50} 헤테로아릴기, 또는 $-Si(Z_1)(Z_2)(Z_3)$ 이고, 상기 Z_1 , Z_2 및 Z_3 가 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C_6-C_{50} 아릴기이며,

b 는 1 내지 4의 정수이며,

R_2 는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 페닐기, 또는 디페닐기이며,

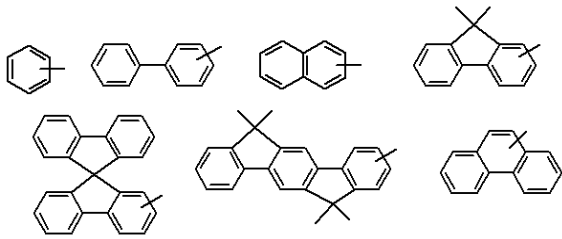
단, 상기 Ar_3 및 Ar_4 가 동시에 수소가 아니며, 상기 C_2-C_{50} 헤테로아릴기가 벤조-융합된(benzo-fuzed) 티오펜이 아니며, 산소원자를 포함하지 않는다.

청구항 3

제 1 항 또는 제 2 항에 있어서, 상기 아릴기 및 헤테로아릴기의 치환기가, C_1-C_{50} 알킬기; 비치환 또는 C_1-C_{50} 알킬기로 치환된 C_6-C_{50} 아릴기; 및 비치환 또는 C_1-C_{50} 알킬기로 치환된 C_2-C_{50} 헤테로아릴기;로 표시되는 그룹으로 이루어진 군으로부터 선택된 하나 이상인 것을 특징으로 하는 유기발광화합물.

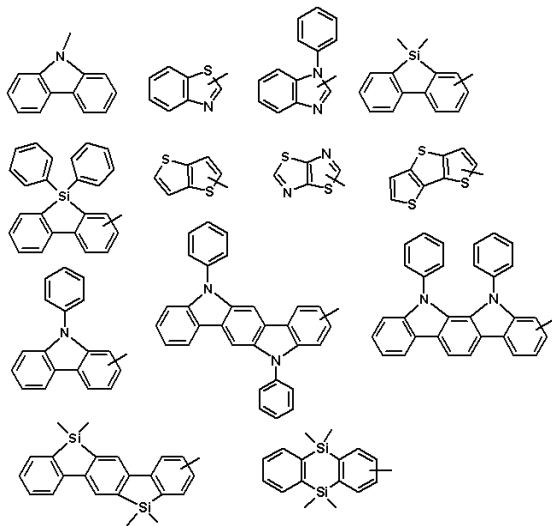
청구항 4

제 1 항에 있어서, 상기 Ar₁ 및 Ar₂가 서로 독립적으로 하기 치환기 중에서 선택되는 것을 특징으로 하는 유기발광화합물:



청구항 5

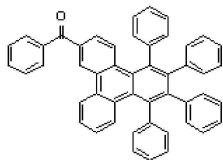
제 2 항에 있어서, 상기 Ar₃ 및 Ar₄가 서로 독립적으로 하기 치환기 중에서 선택되는 것을 특징으로 하는 유기발광화합물:



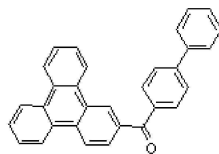
청구항 6

제 1 항에 있어서, 상기 화합물이 하기 화학식 3 내지 17로 표시되는 것을 특징으로 하는 유기발광화합물:

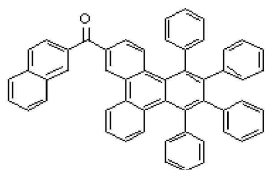
<화학식 3>



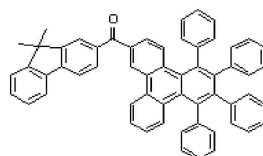
<화학식 4>



<화학식 5>

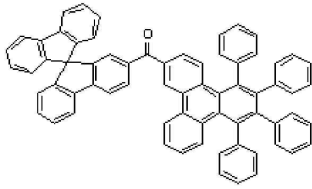


<화학식 6>

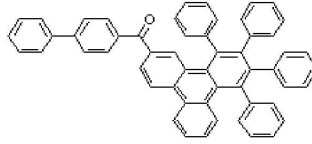


<화학식 7>

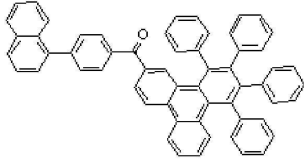
<화학식 8>



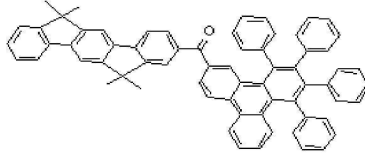
<화학식 9>



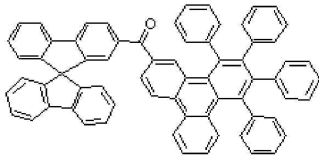
<화학식 10>



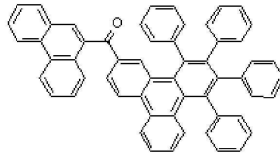
<화학식 11>



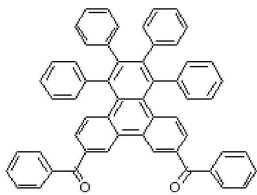
<화학식 12>



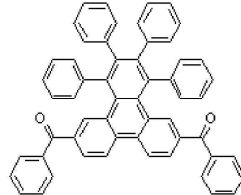
<화학식 13>



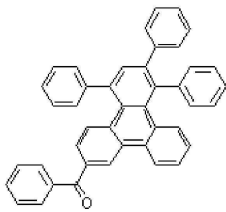
<화학식 14>



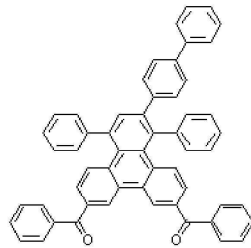
<화학식 15>



<화학식 16>



<화학식 17>

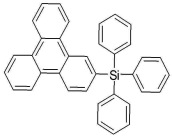


청구항 7

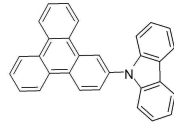
제 2 항에 있어서, 상기 화합물이 하기 화학식 18 내지 74로 표시되는 것을 특징으로 하는 유기발광화합물:

<화학식 18>

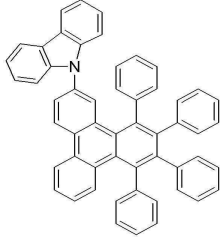
<화학식 19>



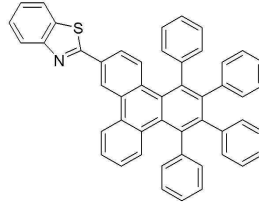
<화학식 20>



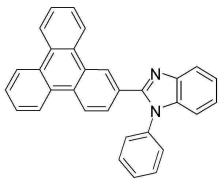
<화학식 21>



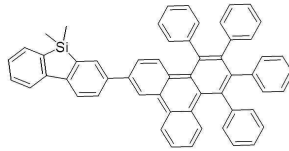
<화학식 22>



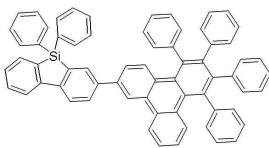
<화학식 23>



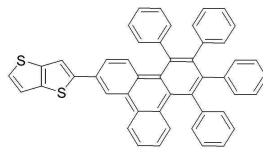
<화학식 24>



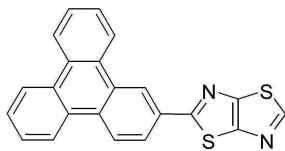
<화학식 25>



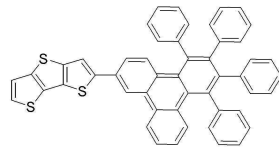
<화학식 26>



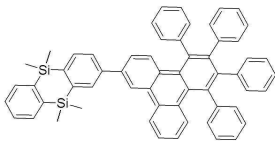
<화학식 27>



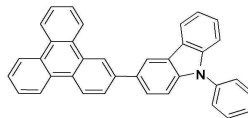
<화학식 28>



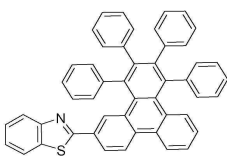
<화학식 29>



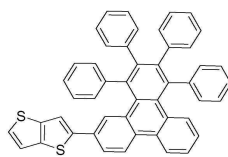
<화학식 30>



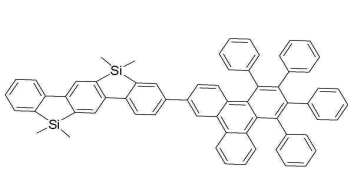
<화학식 31>



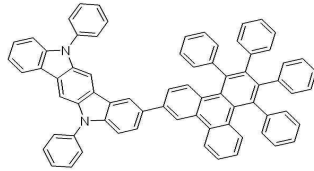
<화학식 32>



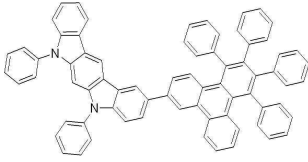
<화학식 33>



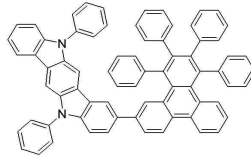
<화학식 34>



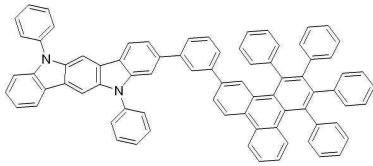
<화학식 35>



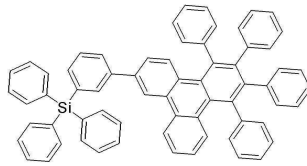
<화학식 36>



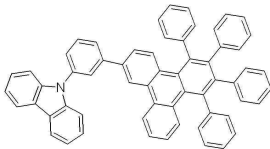
<화학식 37>



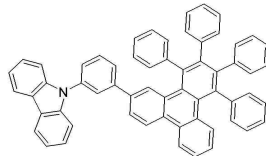
<화학식 38>



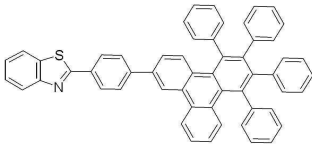
<화학식 39>



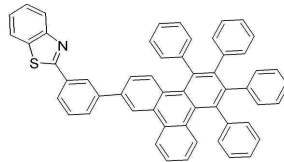
<화학식 40>



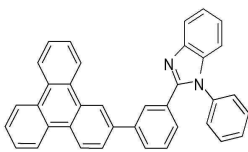
<화학식 41>



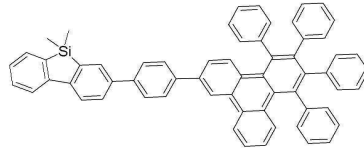
<화학식 42>



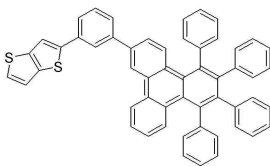
<화학식 43>



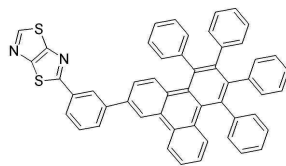
<화학식 44>



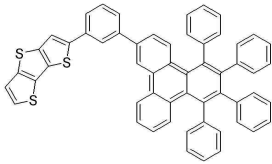
<화학식 45>



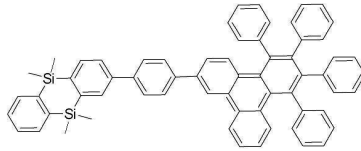
<화학식 46>



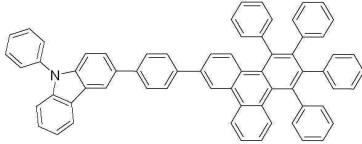
<화학식 47>



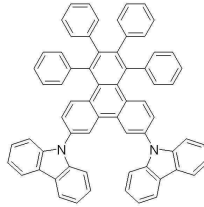
<화학식 48>



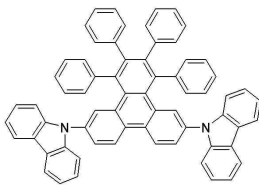
<화학식 49>



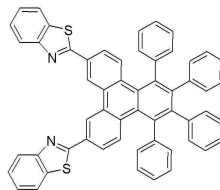
<화학식 50>



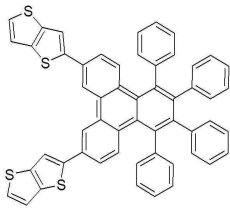
<화학식 51>



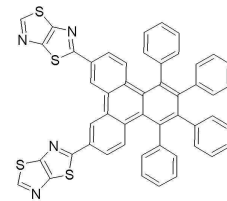
<화학식 52>



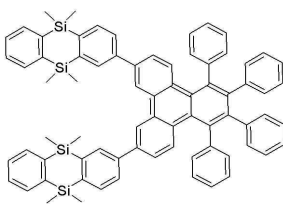
<화학식 53>



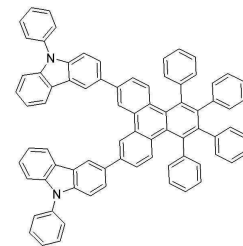
<화학식 54>



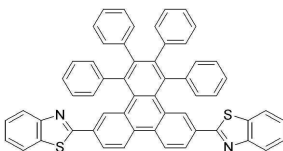
<화학식 55>



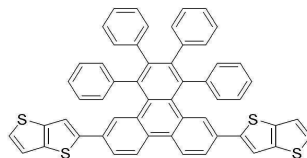
<화학식 56>



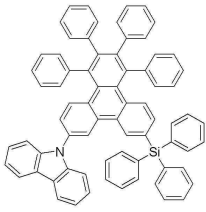
<화학식 57>



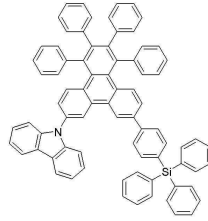
<화학식 58>



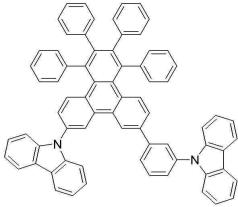
<화학식 59>



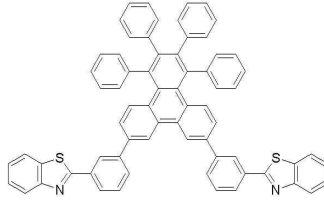
<화학식 60>



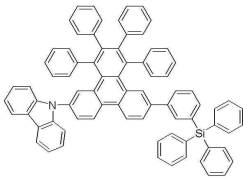
<화학식 61>



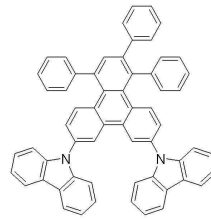
<화학식 62>



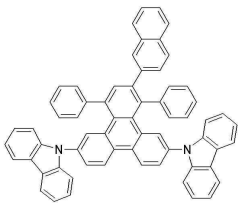
<화학식 63>



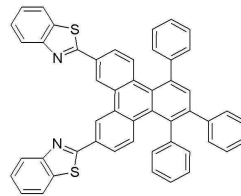
<화학식 64>



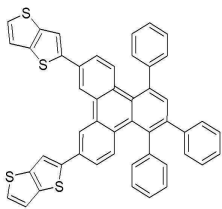
<화학식 65>



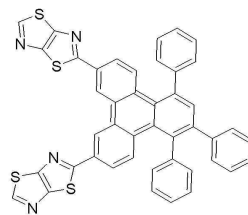
<화학식 66>



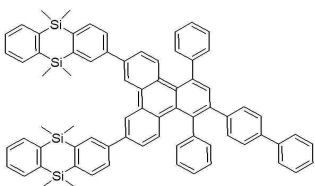
<화학식 67>



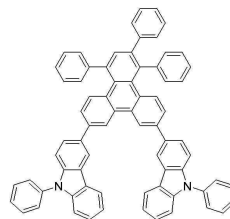
<화학식 68>



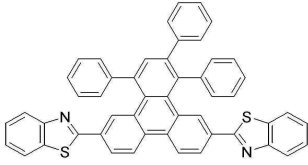
<화학식 69>



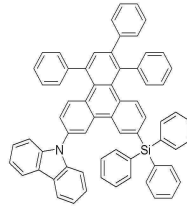
<화학식 70>



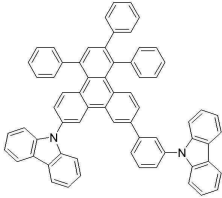
<화학식 71>



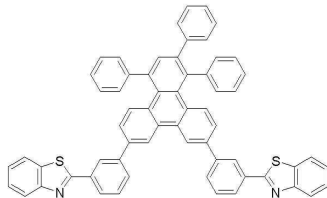
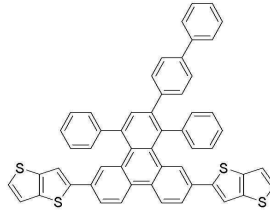
<화학식 72>



<화학식 73>



<화학식 74>



청구항 8

제1전극; 제2전극; 및 상기 제1전극과 상기 제2전극 사이에 적어도 한 층의 유기막을 포함하는 유기발광소자로서, 상기 유기막이 제 1 항 내지 제 7 항 중 어느 한 항의 화합물을 포함하는 것을 특징으로 하는 유기발광소자.

청구항 9

제 8 항에 있어서, 상기 유기막이 발광층, 정공주입층 또는 정공수송층인 것을 특징으로 하는 유기발광소자.

청구항 10

제 8 항에 있어서, 상기 제1전극과 제2전극 사이에 정공주입층, 정공수송층, 전자저지층, 정공저지층, 전자수송층 및 전자주입층으로 이루어진 군으로부터 선택된 하나 이상의 층을 더 포함하는 것을 특징으로 하는 유기발광소자.

청구항 11

제 10 항에 있어서, 상기 소자가 제1전극/정공주입층/발광층/전자수송층/전자주입층/제2전극, 제1전극/정공주입층/정공수송층/발광층/전자수송층/전자주입층/제2전극 또는 제1전극/정공주입층/정공수송층/발광층/정공저지층/전자수송층/전자주입층/제2전극의 구조를 갖는 것을 특징으로 하는 유기발광소자.

명세서

발명의 상세한 설명

기술분야

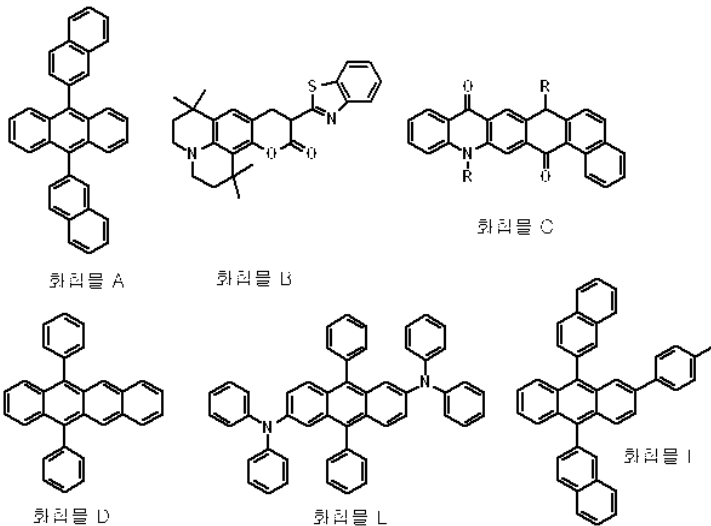
[0001] 유기발광화합물 및 이를 구비한 유기발광소자에 관한 것으로서, 보다 상세하게는 유기발광소자 적용시, 우수한 발광 효율 및 발광 휘도를 구현할 수 있는 유기발광화합물과 상기 화합물을 포함한 유기막을 채용한 유기발광소자에 관한 것이다.

배경 기술

[0002] 발광 소자(light emitting device)는 자발광형 소자로 시야각이 넓으며 콘트라스트가 우수할 뿐만 아니라 응답 시간이 빠르다는 장점을 가진다. 상기 발광 소자는 발광층(emitting layer)에 무기 화합물을 사용하는 무기 발광 소자와 유기 화합물을 사용하는 유기발광소자(Organic Light Emitting Device : OLED)로 구분된다. 유기 발광소자는 무기 발광 소자에 비하여 높은 휘도, 낮은 구동전압, 짧은 응답속도 등의 물성이 우수하고 다색화가 가능하다는 점에서 많은 연구의 대상이 된다.

[0003] 상기 유기발광소자는 일반적으로 애노드/유기 발광층/캐소드의 적층구조를 가지며, 애노드/정공주입층/정공수송층/발광층/전자수송층/전자주입층/캐소드 또는 애노드/정공주입층/정공수송층/발광층/정공저지층/전자수송층/전자주입층/캐소드 등과 같은 다양한 구조를 가질 수 있다.

[0004] 발광 효율이 높고 작동 수명이 긴 유기발광소자가 구현되기 위해서 고성능의 유기발광화합물이 중요시된다. 현재 사용되는 청색 및 녹색 발광 화합물은 하기의 β-ADN(화합물 A), C545T(화합물 B), 퀴나크리논 유도체(화합물 C), DPT(화합물 D) 등이다. 일본공개특허 제2001-131541호에 비스(2,6-디아릴아미노)-9,10-디페닐안트라센(화합물 E) 유도체가 개시되며, 국제공개특허(WO) 제2005-100506에는 2-아릴-9-(2-나프틸)-10-아릴-안트라센(화합물 F) 유도체가 개시된다.



[0005] 그러나, 상기 유기발광화합물들은 발광 효율, 발광 휘도 등이 추가적으로 개선되어야 한다.

[0006]

발명의 내용

해결 하고자하는 과제

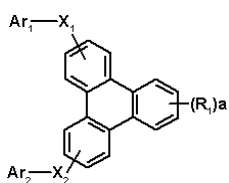
[0007] 첫번째 기술적 과제는 새로운 유기발광화합물을 제공하는 것이다.

[0008] 두 번째 기술적 과제는 발광 효율 및 발광 휘도가 향상된 유기발광소자를 제공하는 것이다.

과제 해결수단

[0009] 한 측면에 따라 하기 화학식 1로 표시되는 유기발광 화합물이 제공된다.

[0010] <화학식 1>

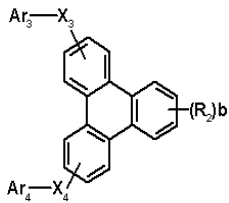


[0011]

[0012] 상기 화학식 1에서,

- [0013] X_1 및 X_2 가 서로 독립적으로, 공유결합 또는 $-C(=O)-$ 이며,
- [0014] Ar_1 및 Ar_2 가 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C_6-C_{20} 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C_2-C_{20} 헤테로아릴기이며,
- [0015] a 는 1 내지 4의 정수이며,
- [0016] R_1 은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 페닐기, 또는 디페닐기이며,
- [0017] 단, 상기 X_1 및 X_2 중에서 하나 이상이 $-C(=O)-$ 이며, 상기 $-C(=O)-$ 에 연결된 Ar_1 또는 Ar_2 는 수소가 아니다.
- [0018] 다른 한 측면에 따라 하기 화학식 2로 표시되는 유기발광 화합물이 제공된다.

[0019] <화학식 2>



- [0020] 상기 화학식 2에서,
- [0021] X_3 및 X_4 가 서로 독립적으로, 공유결합, 또는 페닐렌기이며,
- [0022] Ar_3 및 Ar_4 가 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C_2-C_{50} 헤테로아릴기, 또는 $-Si(Z_1)(Z_2)(Z_3)$ 이고, 상기 Z_1 , Z_2 및 Z_3 가 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C_6-C_{50} 아릴기이며,
- [0023] b 는 1 내지 4의 정수이며,
- [0024] R_2 는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 페닐기, 또는 디페닐기이며,
- [0025] 단, 상기 Ar_3 및 Ar_4 가 동시에 수소가 아니며, 상기 C_2-C_{50} 헤테로아릴기가 벤조-융합된(benzo-fused) 티오펜이 아니며, 산소원자를 포함하지 않는다.
- [0026] 또 다른 한 측면에 따라, 제1전극; 제2전극; 및 상기 제1전극과 상기 제2전극 사이에 적어도 한 층의 유기막을 포함하는 유기발광소자로서, 상기 유기막이 전술한 바와 같은 유기발광화합물을 포함하는 유기발광소자를 제공한다.

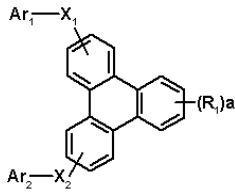
효과

- [0028] 한 측면에 따른 새로운 유기발광화합물을 구비한 유기발광소자는 발광효율 및 발광휘도가 향상된다.

발명의 실시를 위한 구체적인 내용

- [0029] 이하에서 예시적인 하나 이상의 구현예에 따른 유기발광화합물 및 이를 구비한 유기발광소자에 대하여 더욱 상세히 설명한다.
- [0030] 본 명세서에서 유기발광화합물은 유기발광소자에 사용되는 화합물이라는 의미로서 반드시 발광이 가능한 화합물로 그 범위가 한정되지 않으며, 그 적용 범위도 유기 발광층에 한정되지 않고, 전하 주입층 및 전하 수송층 등 유기발광소자를 구성하는 어느 층에나 모두 사용될 수 있다.
- [0031] 일 구현예에 따른 유기발광화합물은, 하기 화학식 1로 표시된다:

[0032] <화학식 1>

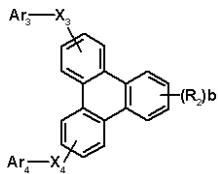


[0033]

[0034] 상기 화학식 1에서, X₁ 및 X₂가 서로 독립적으로, 공유결합 또는 -C(=O)-이며, Ar₁ 및 Ar₂가 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C₆-C₂₀아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C₂-C₂₀헤테로아릴기이며, a는 1 내지 4의 정수이며, R₁ 은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 페닐기, 또는 디페닐기이며, 단, 상기 X₁ 및 X₂중에서 하나 이상이 -C(=O)-이며, 상기 -C(=O)-에 연결된 Ar₁ 또는 Ar₂ 는 수소가 아니다.

[0035] 다른 일구현예에 따른 유기발광화합물은, 하기 화학식 2로 표시된다:

[0036] <화학식 2>



[0037]

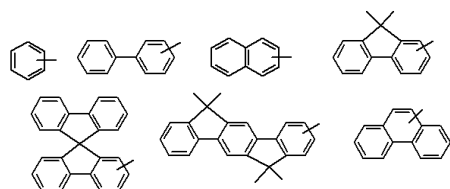
[0038] 상기 화학식 2에서, X₃ 및 X₄가 서로 독립적으로, 공유결합, 또는 페닐렌기이며, Ar₃ 및 Ar₄가 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C₂-C₅₀헤테로아릴기, 또는 -Si(Z₁)(Z₂)(Z₃)이고, 상기 Z₁, Z₂ 및 Z₃가 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C₆-C₅₀아릴기이며, b는 1 내지 4의 정수이며, R₂ 는 서로 독립적으로, 수소, 페닐기, 또는 디페닐기이며, 단, 상기 Ar₃ 및 Ar₄가 동시에 수소가 아니며, 상기 C₂-C₅₀헤테로아릴기가 벤조-융합된 (benzo-fused) 티오펜이 아니며, 산소원자를 포함하지 않는다.

[0039] 상기 화학식 1 및/또는 2로 표시되는 화합물은 유기발광소자 중 제1전극과 제2전극 사이에 개재된 유기막을 이루는 물질로 적합하다. 상기 화학식 1의 화합물은 유기발광소자의 유기막, 특히 발광층, 정공주입층 또는 정공수송층에 사용되기 적합하며 호스트 재료뿐만 아니라 도판트 재료로서도 사용될 수 있다.

[0040] 상기 아릴기는 방향족 고리 시스템을 갖는 1가 그룹으로서, 2 이상의 고리 시스템을 포함할 수 있으며, 상기 2 이상의 고리 시스템은 서로 결합 또는 융합된 형태로 존재할 수 있다. 상기 헤테로아릴기는 상기 아릴기 중 하나 이상의 탄소가 N, O, S 및 P로 이루어진 군으로부터 선택된 하나 이상으로 치환된 그룹을 가리킨다.

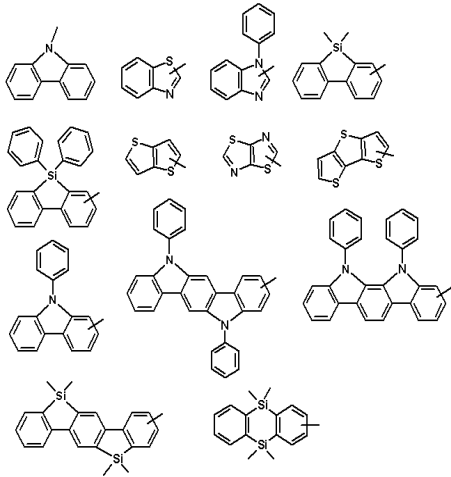
[0041] 상기 아릴기 및 헤테로아릴기가 치환될 경우 이들의 치환기는 C₁-C₅₀알킬기; 비치환 또는 C₁-C₅₀알킬기로 치환된 C₆-C₅₀아릴기; 비치환 또는 C₁-C₅₀알킬기로 치환된 C₂-C₅₀헤테로아릴기;로 표시되는 그룹으로 이루어진 군으로부터 선택된 하나 이상일 수 있다.

[0042] 보다 구체적으로, 상기 Ar₁ 및 Ar₂는 서로 독립적으로 하기 치환기 중에서 선택될 수 있다:



[0043]

[0044] 또한, 상기 Ar₃ 및 Ar₄는 서로 독립적으로 하기 치환기 중에서 선택될 수 있다:



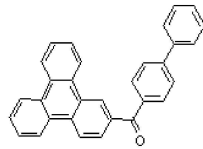
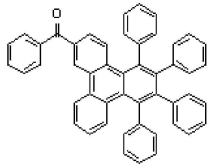
[0045]

[0046] 보다 상세하게 다른 일 구현예에 따르면, 상기 유기발광화합물은 하기 화학식 3 내지 17의 구조를 가질 수 있으나 이에 한정되는 것은 아니다:

[0047]

<화학식 3>

<화학식 4>

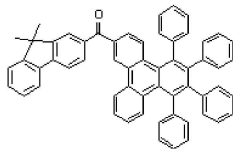
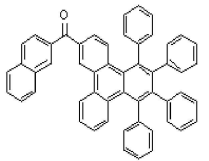


[0048]

[0049]

<화학식 5>

<화학식 6>

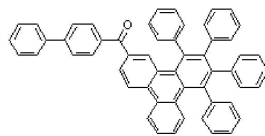
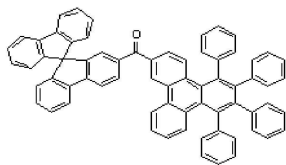


[0050]

[0051]

<화학식 7>

<화학식 8>

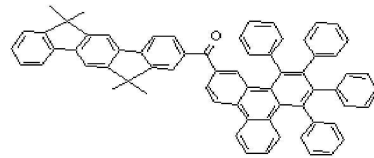
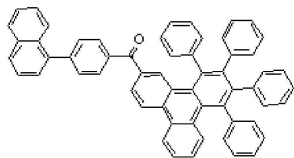


[0052]

[0053]

<화학식 9>

<화학식 10>

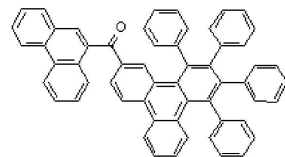
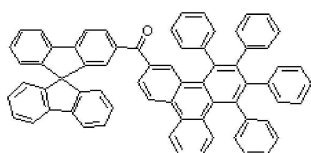


[0054]

[0055]

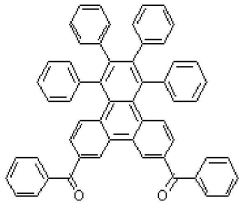
<화학식 11>

<화학식 12>



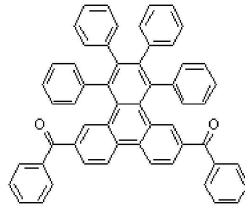
[0056]

[0057] <화학식 13>

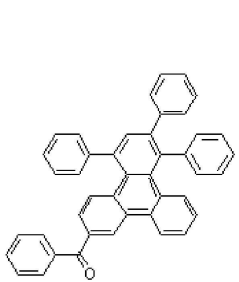


[0058]

<화학식 14>

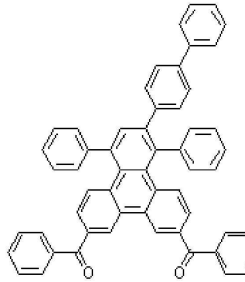


[0059] <화학식 15>

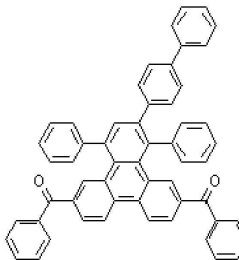


[0060]

<화학식 16>



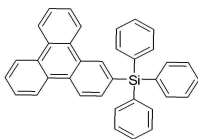
[0061] <화학식 17>



[0062]

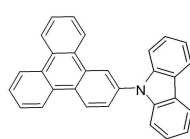
[0063] 또 다른 일 구현예에 따르면, 상기 유기발광화합물은 하기 화학식 18 내지 74의 구조를 가질 수 있으나 이에 한정되는 것은 아니다:

[0064] <화학식 18>

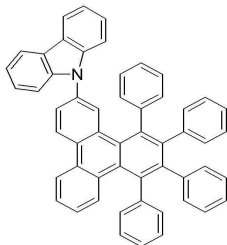


[0065]

<화학식 19>

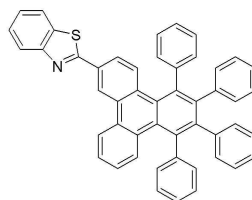


[0066] <화학식 20>



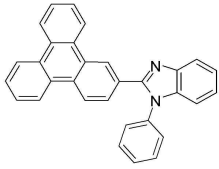
[0067]

<화학식 21>



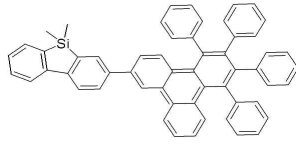
[0068] <화학식 22>

<화학식 23>

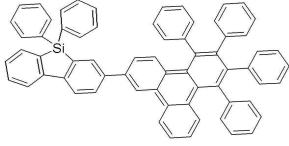


[0069]

[0070] <화학식 24>

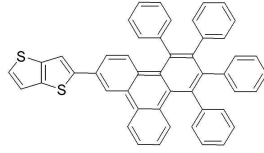


<화학식 25>

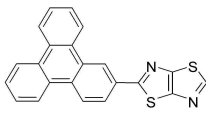


[0071]

[0072] <화학식 26>

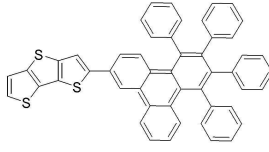


<화학식 27>

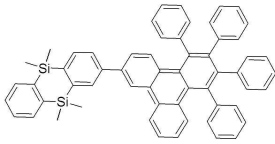


[0073]

[0074] <화학식 28>

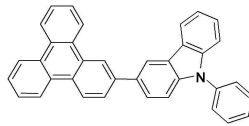


<화학식 29>

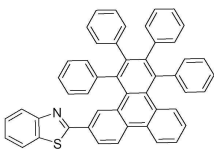


[0075]

[0076] <화학식 30>

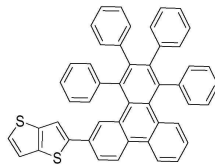


<화학식 31>

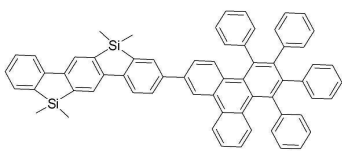


[0077]

[0078] <화학식 32>

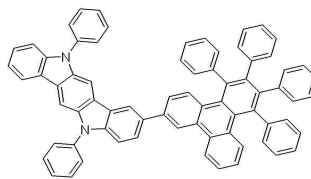


<화학식 33>

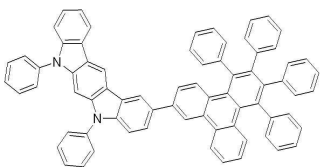


[0079]

[0080] <화학식 34>

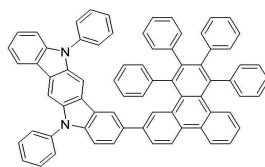


<화학식 35>

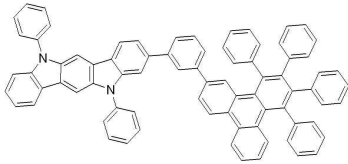


[0081]

[0082] <화학식 36>



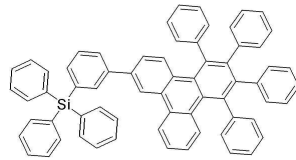
<화학식 37>



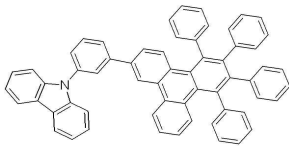
[0083]

[0084]

<화학식 38>



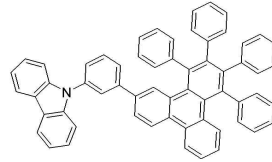
<화학식 39>



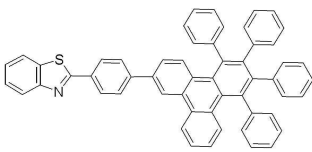
[0085]

[0086]

<화학식 40>



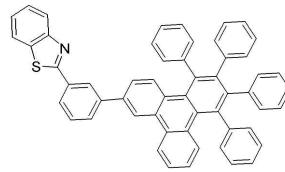
<화학식 41>



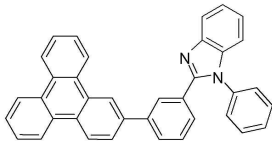
[0087]

[0088]

<화학식 42>



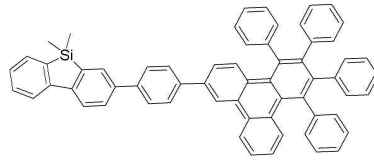
<화학식 43>



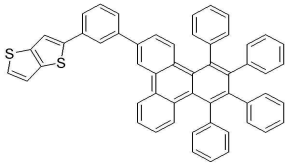
[0089]

[0090]

<화학식 44>



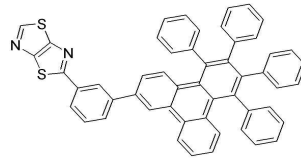
<화학식 45>



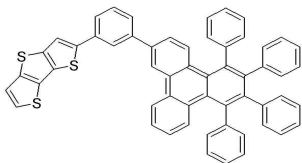
[0091]

[0092]

<화학식 46>



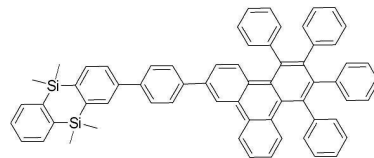
<화학식 47>



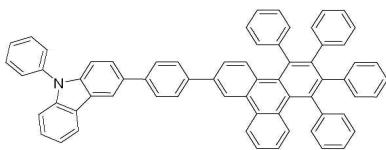
[0093]

[0094]

<화학식 48>



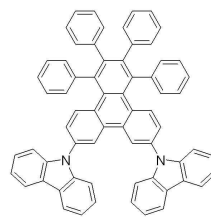
<화학식 49>



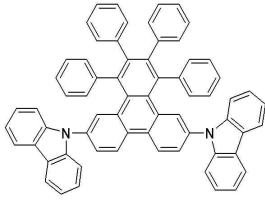
[0095]

[0096]

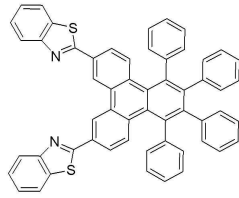
<화학식 50>



<화학식 51>



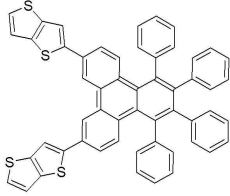
[0097]



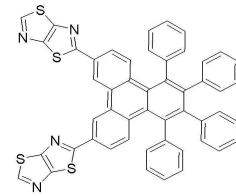
[0098]

<화학식 52>

<화학식 53>



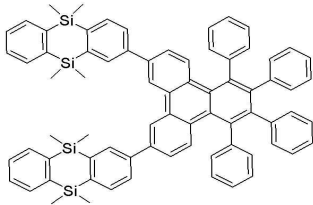
[0099]



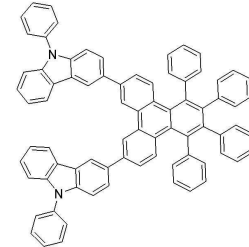
[0100]

<화학식 54>

<화학식 55>



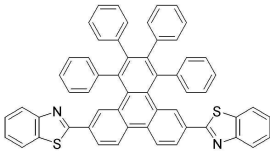
[0101]



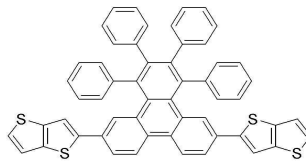
[0102]

<화학식 56>

<화학식 57>



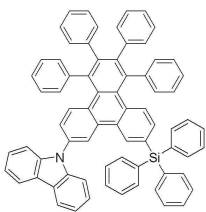
[0103]



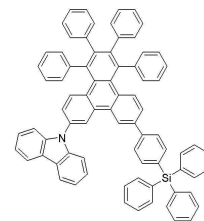
[0104]

<화학식 58>

<화학식 59>



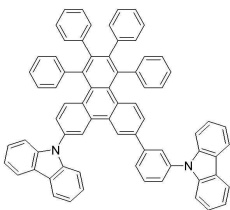
[0105]



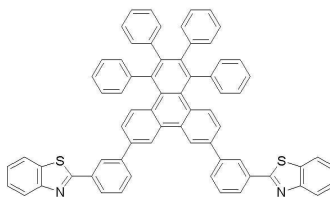
[0106]

<화학식 60>

<화학식 61>



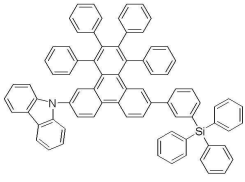
[0107]



[0108]

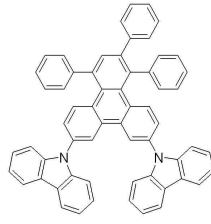
<화학식 62>

<화학식 63>

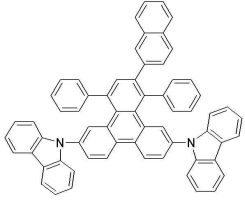


[0109]

[0110] <화학식 64>

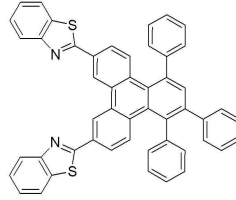


<화학식 65>

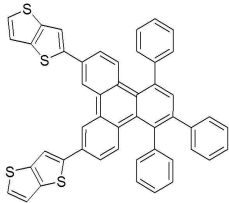


[0111]

[0112] <화학식 66>

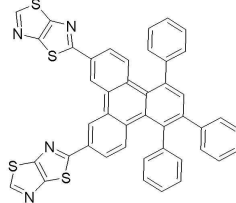


<화학식 67>

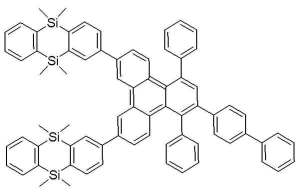


[0113]

[0114] <화학식 68>

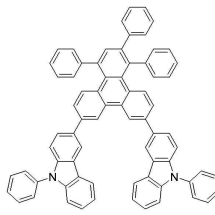


<화학식 69>

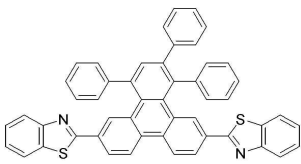


[0115]

[0116] <화학식 70>

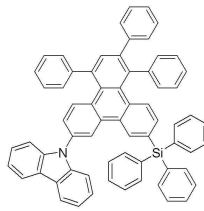


<화학식 71>

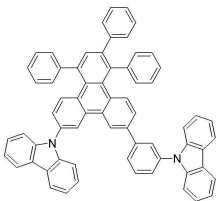


[0117]

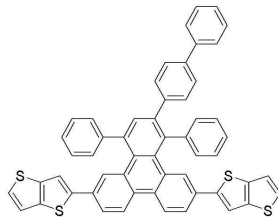
[0118] <화학식 72>



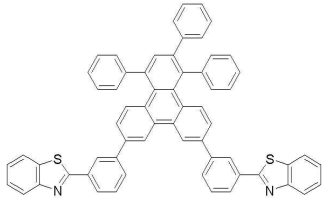
<화학식 73>



[0119]



[0120] <화학식 74>

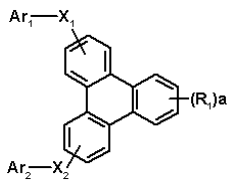


[0121]

[0122] 상기 화학식 1 및/또는 2로 표시되는 유기발광화합물은 통상의 합성 방법을 이용하여 합성될 수 있으며, 상기 화합물의 보다 상세한 합성 경로는 하기 합성예의 반응식을 참조한다.

[0123] 또 다른 일 구현예에 따른 유기발광소자는, 제1전극; 제2전극; 및 상기 제 1전극과 상기 제2전극 사이에 개재된 유기막을 포함하며, 상기 유기막이 하기 화학식 1 및/또는 2로 표시되는 화합물을 하나 이상 포함한다.

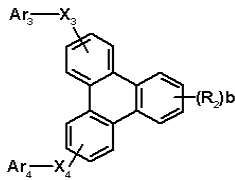
[0124] <화학식 1>



[0125]

[0126] 상기 화학식 1에서, X₁ 및 X₂가 서로 독립적으로, 공유결합 또는 -C(=O)-이며, Ar₁ 및 Ar₂가 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C₆-C₂₀아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C₂-C₂₀헤테로아릴기이며, a는 1 내지 4의 정수이며, R₁ 은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 페닐기, 또는 디페닐기이며, 단, 상기 X₁ 및 X₂중에서 하나 이상이 -C(=O)-이며, 상기 -C(=O)-에 연결된 Ar₁ 또는 Ar₂ 는 수소가 아니다.

[0127] <화학식 2>



[0128]

[0129] 상기 화학식 2에서, X₃ 및 X₄가 서로 독립적으로, 공유결합, 또는 페닐렌기이며, Ar₃ 및 Ar₄가 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C₂-C₅₀헤테로아릴기, 또는 -Si(Z₁)(Z₂)(Z₃)이고, 상기 Z₁, Z₂ 및 Z₃가 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C₆-C₅₀아릴기이며, b는 1 내지 4의 정수이며, R₂ 는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 페닐기, 또는 디페닐기이며, 단, 상기 Ar₃ 및 Ar₄가 동시에 수소가 아니며, 상기 C₂-C₅₀헤테로아릴기가 벤조-융합된(benzo-fuzed) 티오펜이 아니며, 산소원자를 포함하지 않는다.

[0130] 상기 화학식 1 또는 2의 화합물은 유기발광소자의 유기막, 특히 발광층, 정공주입층 또는 정공수송층에 사용되기 적합하다.

[0131] 또 다른 일 구현예에 따른 유기발광소자의 구조는 매우 다양하다. 상기 제1전극과 제2전극 사이에 정공주입층, 정공수송층, 정공저지층, 전자저지층, 전자수송층 및 전자주입층으로 이루어진 균으로부터 선택된 하나 이상의 층을 더 포함할 수 있다.

[0132] 보다 구체적으로, 상기 유기발광소자의 구현예는 도 1a, 1b 및 1c를 참조한다. 도 1a의 유기발광소자는 제1전극/정공주입층/발광층/전자수송층/전자주입층/제2전극으로 이루어진 구조를 갖고, 도 1b의 유기발광소자는 제1전극/정공주입층/정공수송층/발광층/전자수송층/전자주입층/제2전극으로 이루어진 구조를 갖는다. 또한, 도 1c의 유기발광소자는 제1전극/정공주입층/정공수송층/발광층/정공저지층/전자수송층/전자주입층/제2전극의 구조를 갖는다. 이 때, 상기 발광층, 정공주입층 및 정공수송층 중 하나 이상은 상기 화학식 1 및/또는 2로 표시되는

화합물을 포함할 수 있다.

[0133] 상기 유기발광소자의 발광층은 적색, 녹색, 청색 또는 백색을 포함하는 인광 또는 형광 도펀트를 포함할 수 있다. 이 중, 상기 인광 도펀트는 Ir, Pt, Os, Ti, Zr, Hf, Eu, Tb 및 Tm으로 이루어진 군으로부터 선택된 하나 이상의 원소를 포함하는 유기금속화합물일 수 있다. 또한, 상기 화학식 1 및/또는 2로 표시되는 화합물은 발광층에서 형광 도펀트로 사용될 수 있다.

[0134] 또 다른 일구현예에 따른 유기발광소자의 제조방법을 도 1c에 도시된 유기발광소자를 참조하여, 살펴보기로 한다.

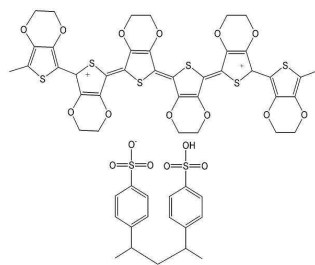
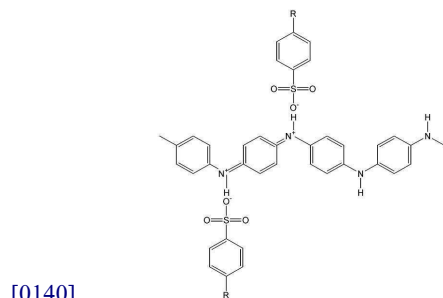
[0135] 먼저, 기판 상부에 높은 일함수를 갖는 제1전극용 물질을 증착법 또는 스퍼터링법 등에 의해 배치하여 제1전극을 형성한다. 상기 제1전극은 애노드(Anode)일 수 있다. 여기에서 기판으로는 통상적인 유기발광소자에서 사용되는 기판을 사용하는데 기계적 강도, 열적 안정성, 투명성, 표면 평활성, 취급용이성 및 방수성이 우수한 유리 기판 또는 투명 플라스틱 기판이 바람직하다. 제1전극용 물질로는 투명하고 전도성이 우수한 산화인듐주석(ITO), 산화인듐아연(IZO), 산화주석(SnO2), 산화아연(ZnO) 등을 사용할 수 있다.

[0136] 다음으로, 상기 제1전극 상부에 진공증착법, 스펀코팅법, 캐스트법, LB법 등과 같은 다양한 방법을 이용하여 정공주입층(HIL)을 형성할 수 있다.

[0137] 진공증착법에 의하여 정공주입층을 형성하는 경우, 그 증착 조건은 정공주입층의 재료로서 사용하는 화합물, 목적으로 하는 정공주입층의 구조 및 열적 특성 등에 따라 다르지만, 일반적으로 증착온도 100 내지 500°C, 진공도 10⁻⁸ 내지 10⁻³ torr, 증착속도 0.01 내지 100Å/sec, 막 두께는 통상 100Å 내지 10μm 범위에서 적절히 선택하는 것이 바람직하다.

[0138] 스펀코팅법에 의하여 정공주입층을 형성하는 경우, 그 코팅 조건은 정공주입층의 재료로서 사용하는 화합물, 목적으로 하는 정공주입층의 구조 및 열적 특성에 따라 상이하지만, 약 2000rpm 내지 5000rpm의 코팅 속도, 코팅 후 용매 제거를 위한 열처리 온도는 약 80°C 내지 200°C의 온도 범위에서 적절히 선택하는 것이 바람직하다.

[0139] 상기 정공주입층 물질은 전술한 바와 같이 화학식 1 및/또는 2로 표시되는 화합물일 수 있다. 또는, 예를 들어, 미국특허 제4,356,429호에 개시된 구리프탈로시아닌 등의 프탈로시아닌 화합물 또는 Advanced Material, 6, p.677(1994)에 기재되어 있는 스타버스트형 아민 유도체류인 TCTA, m-MTDATA, m-MTDAPB, 2-TNATA(4,4',4"-tris(N-(2-naphtyl)-N-phenylamino)triphenylamine:4,4',4"-트리스(N-(나프틸)-N-페닐아미노)트리페닐아민), 용해성이 있는 전도성 고분자인 Pani/DBSA (Polyaniline/Dodecylbenzenesulfonic acid:폴리아닐린/도데실벤젠술포산) 또는 PEDOT/PSS (Poly(3,4-ethylenedioxythiophene)/Poly(4-styrenesulfonate):폴리(3,4-에틸렌디옥시티오펜)/폴리(4-스티렌술포네이트)), PANI/CSA (Polyaniline/Camphor sulfonic acid:폴리아닐린/캄퍼술포산) 또는 PANI/PSS (Polyaniline)/Poly(4-styrenesulfonate):폴리아닐린/폴리(4-스티렌술포네이트)) 등과 같은 공지된 정공주입 물질을 사용할 수 있다.



[0141] PANI/DBSA

PEDOT/PSS

[0142] 상기 정공주입층의 두께는 약 100Å 내지 10000Å, 바람직하게는 100Å 내지 1000Å일 수 있다. 상기 정공주입층의 두께가 100Å 미만인 경우, 정공주입 특성이 저하될 수 있으며, 상기 정공주입층의 두께가 10000Å를 초과하는 경우, 구동전압이 상승할 수 있기 때문이다.

[0143] 다음으로, 상기 정공주입층 상부에 진공증착법, 스펀코팅법, 캐스트법, LB법 등과 같은 다양한 방법을 이용하여 정공수송층(HTL)을 형성할 수 있다. 진공증착법 및 스펀코팅법에 의하여 정공수송층을 형성하는 경우, 그 증착조

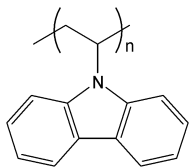
건 및 코팅조건은 사용하는 화합물에 따라 다르지만, 일반적으로 정공주입층의 형성과 거의 동일한 조건범위 중에서 선택된다.

[0144] 상기 정공수송층 물질은 전술한 바와 같이 화학식 1 및/또는 2의 화합물을 포함할 수 있다. 다르게는, 예를 들어, N-페닐카르바졸, 폴리비닐카르바졸 등의 카르바졸 유도체, N,N'-비스(3-메틸페닐)-N,N'-디페닐-[1,1'-비페닐]-4,4'-디아민(TPD), N,N'-디(나프탈렌-1-일)-N,N'-디페닐 벤지딘(α -NPD) 등의 방향족 축합환을 가지는 통상적인 아민 유도체 등과 같은 공지된 정공수송 물질을 사용할 수 있다.

[0145] 상기 정공수송층의 두께는 약 50Å 내지 1000Å, 바람직하게는 100Å 내지 600Å일 수 있다. 상기 정공수송층의 두께가 50Å 미만인 경우, 정공수송 특성이 저하될 수 있으며, 상기 정공수송층의 두께가 1000Å를 초과하는 경우, 구동전압이 상승할 수 있기 때문이다.

[0146] 다음으로 상기 정공수송층 상부에 진공증착법, 스핀코팅법, 캐스트법, LB법 등과 같은 방법을 이용하여 발광층(EML)을 형성할 수 있다. 진공증착법 및 스핀코팅법에 의해 발광층을 형성하는 경우, 그 증착조건은 사용하는 화합물에 따라 다르지만, 일반적으로 정공주입층의 형성과 거의 동일한 조건범위 중에서 선택된다.

[0147] 상기 발광층은 전술한 바와 같이 상기 화학식 1 및/또는 2로 표시되는 화합물을 포함할 수 있다. 이 때, 화학식 1 또는 2의 화합물에 적합한 공지의 호스트 재료와 함께 사용될 수 있거나, 공지의 도펀트 재료와 함께 사용될 수 있다. 상기 화학식 1 또는 2의 화합물을 단독으로 사용하는 것도 가능하다. 호스트 재료의 경우, 예를 들면, Alq3(tris(8-hydroxy-quinolate)aluminium) 또는 CBP(4,4'-N,N'-디카바졸-비페닐), 또는 PVK(폴리(n-비닐 카바졸)) 등을 사용할 수 있다.



[0148]

[0149] PVK

[0150] 도펀트 재료의 경우, 형광 도펀트로서는 이데미츠사(Idemitsu사)에서 구입 가능한 IDE102, IDE105 및 하야시바라사에서 구입 가능한 C545T 등을 사용할 수 있으며, 인광 도펀트로서는 적색 인광 도펀트 PtOEP, UDC사의 RD 61, 녹색 인광 도펀트 Ir(PPy)3(PPy=2-phenylpyridine), 청색 인광 도펀트인 F2Irpic, UDC사의 적색 인광 도펀트 RD 61 등을 사용할 수 있다. MQD(N-methylquinacridone), 쿠마린(Coumarine)유도체 등도 사용할 수 있다. 도핑 농도는 특별히 제한 되지 않으나 통상적으로 호스트100 중량부를 기준으로 하여 상기 도펀트의 함량은 0.01 ~ 15 중량부이다.

[0151] 상기 발광층의 두께는 약 100Å 내지 1000Å, 바람직하게는 200Å 내지 600Å일 수 있다. 상기 발광층의 두께가 100Å 미만인 경우, 발광 특성이 저하될 수 있으며, 상기 발광층의 두께가 1000Å를 초과하는 경우, 구동전압이 상승할 수 있기 때문이다.

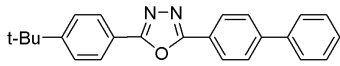
[0152] 발광층에 발광 화합물이 인광 도펀트와 함께 사용할 경우에는 삼중항 여기자 또는 정공이 전자수송층으로 확산되는 현상을 방지하기 위하여, 상기 발광층 상부에 진공증착법, 스핀코팅법, 캐스트법, LB법 등과 같은 방법을 이용하여 정공저지층(HBL)을 형성할 수 있다. 진공증착법 및 스핀코팅법에 의해 정공저지층을 형성하는 경우, 그 조건은 사용하는 화합물에 따라 다르지만, 일반적으로 정공주입층의 형성과 거의 동일한 조건범위 중에서 선택된다. 사용가능한 공지의 정공저지재료, 예를 들면 옥사디아졸 유도체나 트리아졸 유도체, 페난트롤린 유도체, BCP 등을 들 수 있다.

[0153] 상기 정공저지층의 두께는 약 50Å 내지 1000Å, 바람직하게는 100Å 내지 300Å일 수 있다. 상기 정공저지층의 두께가 50Å 미만인 경우, 정공저지 특성이 저하될 수 있으며, 상기 정공저지층의 두께가 1000Å를 초과하는 경우, 구동전압이 상승할 수 있기 때문이다.

[0154] 상기 정공저지층이 생략될 경우 도 1a에 도시된 구조를 가지는 유기발광소자가 얻어진다.

[0155] 다음으로 전자수송층(ETL)을 진공증착법, 또는 스핀코팅법, 캐스트법 등의 다양한 방법을 이용하여 형성한다. 진공증착법 및 스핀코팅법에 의해 전자수송층을 형성하는 경우, 그 조건은 사용하는 화합물에 따라 다르지만, 일반적으로 정공주입층의 형성과 거의 동일한 조건범위 중에서 선택된다. 상기 전자수송층 재료는 전자주입전

극(Cathode)로부터 주입된 전자를 안정하게 수송하는 기능을 하는 것으로서 퀴놀린 유도체, 특히 트리스(8-퀴놀리노레이트)알루미늄(Alq3), TAZ, Balq 등과 같은 공지의 재료를 사용할 수도 있다.



[0156]

[0157]

PBD

[0158]

상기 전자수송층의 두께는 약 100Å 내지 1000Å, 바람직하게는 200Å 내지 500Å일 수 있다. 상기 전자수송층의 두께가 100Å 미만인 경우, 전자수송 특성이 저하될 수 있으며, 상기 전자수송층의 두께가 1000Å를 초과하는 경우, 구동전압이 상승할 수 있기 때문이다.

[0159]

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

[0160]

전자 주입층으로서는 LiF, NaCl, CsF, Li2O, BaO 등과 같은 전자주입층 형성 재료로서 공지된 임의의 물질을 이용할 수 있다. 상기 전자주입층의 증착조건은 사용하는 화합물에 따라 다르지만, 일반적으로 정공주입층의 형성과 거의 동일한 조건범위 중에서 선택된다.

[0161]

상기 전자주입층의 두께는 약 1Å 내지 100Å, 바람직하게는 5Å 내지 50Å일 수 있다. 상기 전자주입층의 두께가 1Å 미만인 경우, 전자주입 특성이 저하될 수 있으며, 상기 전자주입층의 두께가 100Å를 초과하는 경우, 구동전압이 상승할 수 있기 때문이다.

[0162]

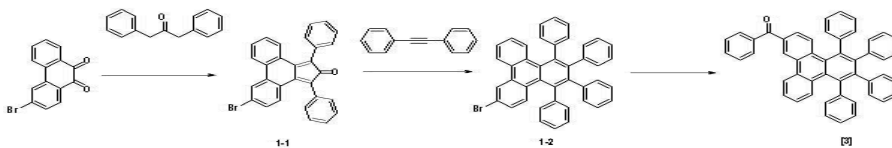
마지막으로 전자주입층 상부에 진공증착법이나 스퍼터링법 등의 방법을 이용하여 제2전극을 형성할 수 있다. 상기 제2전극은 캐소드(Cathode)로 사용될 수 있다. 상기 제2전극 형성용 금속으로는 낮은 일함수를 가지는 금속, 합금, 전기전도성 화합물 및 이들의 혼합물을 사용할 수 있다. 구체적인 예로서는 리튬(Li), 마그네슘(Mg), 알루미늄(Al), 알루미늄-리튬(Al-Li), 칼슘(Ca), 마그네슘-인듐(Mg-In), 마그네슘-은(Mg-Ag)등을 들 수 있다. 또한 전면 발광소자를 얻기 위하여 ITO, IZO를 사용한 투과형 캐소드를 사용할 수도 있다.

[0163]

이하에서, 본 발명의 합성에 및 실시예를 구체적으로 예시하지만, 본 발명이 하기의 합성에 및 실시예로 한정되는 것은 아니다.

[0164]

[합성 예 1] 화합물 [3]의 합성



[0165]

[0166]

중간체 화합물 [1-1]의 합성단계

[0167]

2L 둥근바닥플라스크에 3-브로모펜안트렌퀴논 100g (0.348mol), 1,3-디페닐아세톤 80.5g (0.383mol)을 톨루엔 50mL 와 에탄올 500mL로 교반시킨다. 수산화나트륨 9.76g (0.174mol)을 40℃에서 첨가하고 80℃로 10분간 가운한다. 얼음물에 반응용기를 담그어 냉각시킨다. 생성된 검은색 고체를 여과한다. 에탄올로 세척하여 중간체 화합물 [1-1] 97g (60%)을 수득하였다.

[0168]

중간체 화합물 [1-2]의 합성단계

[0169]

2L 둥근바닥플라스크에 중간체화합물 [1-1] 95g (0.206mol) 과 디페닐아세틸렌 36.7g (0.206mol)을 디페닐에테르 500mL 로 현탁교반한다. 3시간 동안 환류교반시킨다. 상온으로 냉각하고 에탄올 2L를 부어 고체화 시킨다. 생성된 고체를 디클로로메탄 과 메탄올로 재결정화하여 미색 고체의 중간체 화합물 [1-2] 51g (40%) 을 수득하였다.

[0170]

화합물 [3]의 합성단계

[0171]

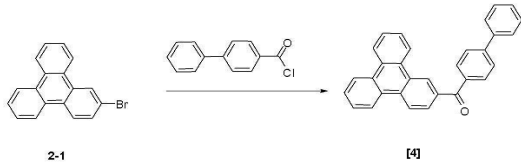
100mL 둥근 바닥플라스크에 중간체 화합물[1-2] 5.0g (8.18mmol)을 무수 테트라히드로퓨란 20mL로 녹이고 -78℃에서 노르말 부틸리튬(2.5M) 3.27mL (8.18mmol)를 적가시킨다. 동온도에서 벤조일클로라이드 1.14mL (9.82mmol)를 적가하여 5시간동안 상온으로 온도를 서서히 올린다. 상온에서 포화 암모늄 수용액을 가하고 층

분리하여 유기층을 모은다. 유기층을 무수황산 마그네슘으로 건조 후 여과한다. 여과액을 감압 증류하여 얻은 고체를 디클로로메탄 과 메탄올로 재결정화하여 노란색 고체의 목적 화합물 [1] 3.8g (73%) 을 수득하였다.

[0172] $^1\text{H NMR}$ (300 MHz, CDCl_3) : δ 7.10~7.35(m, 23H), 7.50~7.70(m, 4H), 8.01~8.20(m, 4H), 8.50(m, 2H)

[0173] MS/FAB : 636(M^+)

[0174] [합성 예 2] 화합물 [4]의 합성



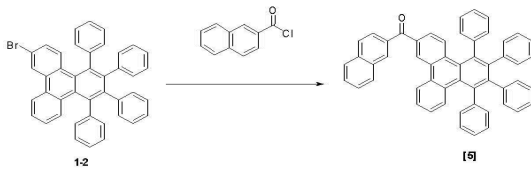
[0175]

[0176] 합성예 1과 동일한 방법으로, 화합물[2-1] 2.51g (8.18mmol), 노르말 부틸리튬(2.5M) 3.27mL (8.18mmol), 및 4-페닐벤조일 클로라이드 1.95g (9.82mmol)을 사용하여 노란색 고체의 목적 화합물 [4] 2.30g (69%) 을 수득하였다.

[0177] $^1\text{H NMR}$ (300 MHz, CDCl_3) : δ 7.35~7.80(m, 13H), 8.09(m, 2H), 8.15(m, 2H), 8.70~8.90(m, 3H)

[0178] MS/FAB : 408(M^+)

[0179] [합성 예 3] 화합물 [5]의 합성



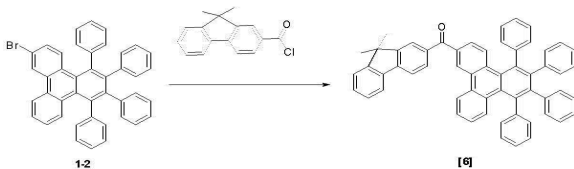
[0180]

[0181] 합성예 1과 동일한 방법으로, 중간체 화합물[1-2] 5.0g (8.18mmol), 노르말 부틸리튬(2.5M) 3.27mL (8.18mmol), 및 2-나프토일 클로라이드 1.87g (9.82mmol)을 사용하여 노란색 고체의 목적 화합물 [5] 3.7g (65%) 을 수득하였다.

[0182] $^1\text{H NMR}$ (300 MHz, CDCl_3) : δ 7.15~7.35(m, 22H), 7.55~7.77(m, 6H), 8.05~8.19(m, 4H), 8.49(m, 2H)

[0183] MS/FAB : 686(M^+)

[0184] [합성 예 4] 화합물 [6]의 합성



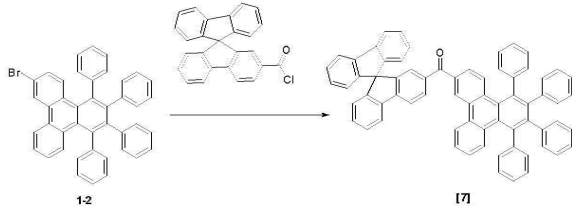
[0185]

[0186] 합성예 1과 동일한 방법으로, 중간체 화합물[1-2] 5.0g (8.18mmol), 노르말 부틸리튬(2.5M) 3.27mL (8.18mmol), 및 9,9-디메틸-9H-플로렌-2-카보닐 클로라이드 2.52g (9.82mmol)을 사용하여 노란색 고체의 목적 화합물 [6] 4.7g (76%) 을 수득하였다.

[0187] $^1\text{H NMR}$ (300 MHz, CDCl_3) : δ 1.61(s, 6H), 7.20~7.45(m, 23H), 7.75~8.21(m, 9H), 8.55(m, 2H)

[0188] MS/FAB : 752(M^+)

[0189] [합성 예 5] 화합물 [7]의 합성



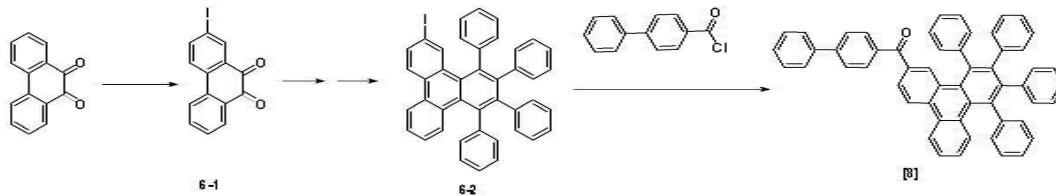
[0190]

[0191] 합성예 1과 동일한 방법으로, 중간체 화합물[1-2] 5.0g (8.18mmol), 노르말 부틸리튬(2.5M) 3.27mL (8.18mmol), 스파이로플로렌-2-카보닐클로라이드 3.72g (9.82mmol)을 사용하여 노란색 고체의 목적 화합물 [7] 4.9g (68%) 을 수득하였다.

[0192] $^1\text{H NMR}$ (300 MHz, CDCl_3) : δ 7.15~7.35(m, 15H), 7.45~7.80(m, 18H), 8.10(m, 2H), 8.40(m, 3H)

[0193] MS/FAB : 874(M^+)

[0194] [합성 예 6] 화합물 [8]의 합성



[0195]

[0196] 중간체 화합물[6-1]의 합성단계

[0197] 2L 둥근바닥플라스크에 펜안트렌 퀴논 100g (0.480mol)을 트리플로로메탄 술폰산 500mL로 현탁교반시킨다. 5°C에서 N-요오도 숙시니미드 108g(0.408mol)을 여러 번 나누어 첨가시킨다. 상온에서 6시간동안 교반한다. 반응액을 얼음물 5L 에 천천히 부어 고체화시킨다. 생성된 오렌지색 고체를 감압여과한다. 고체를 에탄올 4L로 세척하고 진공건조하여 중간체 화합물[6-1] 130g (81%)을 수득하였다.

[0198] 중간체 화합물[6-2]의 합성단계

[0199] 합성예 1과 동일한 방법으로 중간체 화합물[6-1], 1,3-디페닐아세톤, 수산화나트륨, 디페닐아세틸렌을 사용하여 미색 고체의 중간체 화합물 [6-2] 55g (21%) 을 수득하였다.

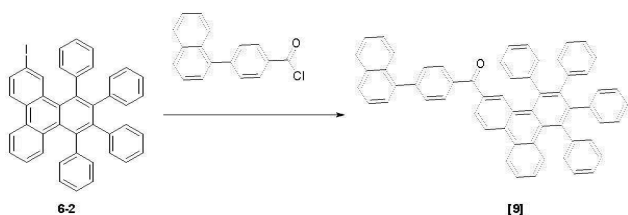
[0200] 화합물[8]의 합성단계

[0201] 합성예 1과 동일한 방법으로, 중간체 화합물[6-2] 5.0g (7.59mmol), 노르말 부틸리튬(2.5M) 3.03mL (7.59mmol), 및 4-페닐벤조일 클로라이드 1.97g (9.11mmol)을 사용하여 노란색 고체의 목적 화합물 [8] 3.9g (72%) 을 수득하였다.

[0202] $^1\text{H NMR}$ (300 MHz, CDCl_3) : δ 7.11~7.55(m, 27H), 7.71~7.80(m, 6H), 8.44(m, 3H)

[0203] MS/FAB : 712(M^+)

[0204] [합성 예 7] 화합물 [9]의 합성



[0205]

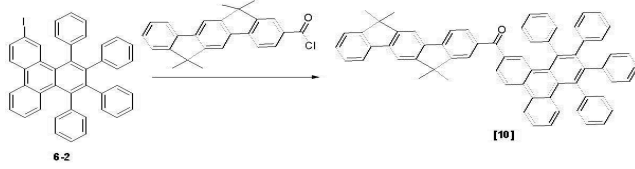
[0206] 합성예 1과 동일한 방법으로, 중간체 화합물[6-2] 5.0g (7.59mmol), 노르말 부틸리튬(2.5M) 3.03mL (7.59mmol), 및 4-(나프탈렌-1-일)벤조일 클로라이드 2.43g (9.11mmol)을 사용하여 노란색 고체의 목적 화합물

[9] 4.1g (70%) 을 수득하였다.

[0207] ^1H NMR (300 MHz, CDCl_3) : δ 7.15~7.35(m, 15H), 7.45~7.80(m, 18H), 8.10(m, 2H), 8.48(m, 3H)

[0208] MS/FAB : 762(M^+)

[0209] [합성 예 8] 화합물 [10]의 합성



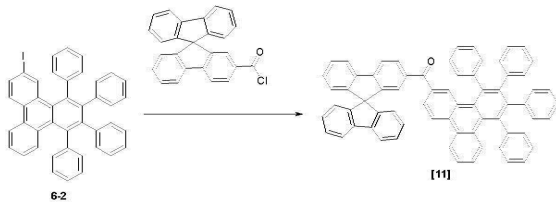
[0210]

[0211] 합성예 1과 동일한 방법으로, 중간체 화합물[6-2] 5.0g (7.59mmol), 노르말 부틸리튬(2.5M) 3.03mL (7.59mmol), 및 2-인테노플로렌 카보닐 클로라이드 3.40g (9.11mmol)을 사용하여 노란색 고체의 목적 화합물 [10] 4.5g (68%) 을 수득하였다.

[0212] ^1H NMR (300 MHz, CDCl_3) : δ 1.63(s, 12H), 7.18~7.45(m, 22H), 7.60(d, 1H), 7.65(s, 1H), 7.70~8.05(m, 8H), 8.10(d, 1H), 8.49(m, 3H)

[0213] MS/FAB : 868(M^+)

[0214] [합성 예 9] 화합물 [11]의 합성



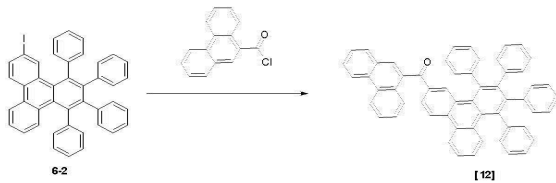
[0215]

[0216] 합성예 1과 동일한 방법으로, 중간체 화합물[6-2] 5.0g (7.59mmol), 노르말 부틸리튬(2.5M) 3.03mL (7.59mmol), 및 스파이로플로렌-2-카보닐 클로라이드 3.45g (9.11mmol)을 사용하여 노란색 고체의 목적 화합물 [11] 4.7g (71%) 을 수득하였다.

[0217] ^1H NMR (300 MHz, CDCl_3) : δ 7.15~7.45(m, 29H), 7.65~8.05(m, 9H), 8.15(d, 1H), 8.58(m, 3H)

[0218] MS/FAB : 874(M^+)

[0219] [합성 예 10] 화합물 [12]의 합성



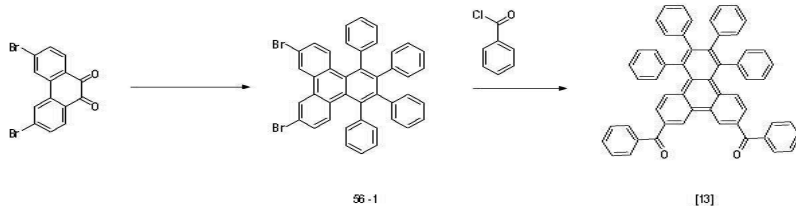
[0220]

[0221] 합성예 1과 동일한 방법으로, 중간체 화합물[6-2] 5.0g (7.59mmol), 노르말 부틸리튬(2.5M) 3.03mL (7.59mmol), 및 페난트렌-9-카보닐 클로라이드 2.19g (9.11mmol)을 사용하여 노란색 고체의 목적 화합물 [12] 3.7g (66%) 을 수득하였다.

[0222] ^1H NMR (300 MHz, CDCl_3) : δ 7.20~7.45(m, n20H), 8.80~8.30(m, 10H), 8.49~8.56(m, 5H)

[0223] MS/FAB : 736(M^+)

[0224] [합성 예 11] 화합물 [13]의 합성



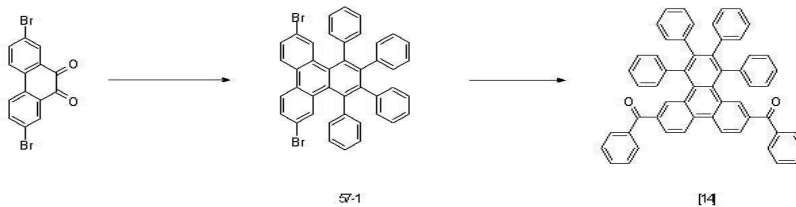
[0225]

[0226] 합성예 1과 동일한 방법으로 3,6-다이브로모펜안트라센-9,10-다이온을 사용하여 얻은 중간체 화합물 [56-1] 5.0g (7.24mmol), 노르말 부틸리튬(2.5M) 5.79mL (14.48mmol), 벤조일 클로라이드 2.24g (15.93mmol)을 사용하여 노란색 고체의 목적 화합물 [13] 3.2g (59%) 을 수득하였다.

[0227] $^1\text{H NMR}$ (300 MHz, CDCl_3) : δ 7.01~7.24(m, 26H), 7.38(d, 4H), 7.92(d, 2H), 8.16(s, 2H), 8.63(d, 2H)

[0228] MS/FAB : 741(M^+)

[0229] [합성 예 12] 화합물 [14]의 합성



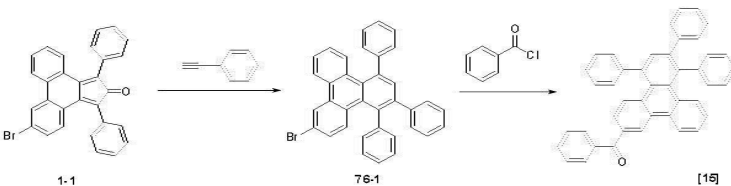
[0230]

[0231] 합성예 1과 동일한 방법으로, 2,7-다이브로모펜안트라센-9,10-다이온을 사용하여 얻은 중간체 화합물 [57-1] 5.0g (7.24mmol), 노르말 부틸리튬(2.5M) 5.79mL (14.48mmol), 벤조일 클로라이드 2.24g (15.93mmol)을 사용하여 노란색 고체의 목적 화합물 [14] 3.0g (56%) 을 수득하였다.

[0232] $^1\text{H NMR}$ (300 MHz, CDCl_3) : δ 7.01~7.24(m, 26H), 7.38(d, 4H), 7.82~7.86(m, 4H), 8.67(s, 2H)

[0233] MS/FAB : 741(M^+)

[0234] [합성 예 13] 화합물 [15]의 합성



[0235]

[0236] 중간체 화합물 [76-1]의 제조단계

[0237] 2L 둥근바닥플라스크에 중간체화합물 [1-1] 50g (0.108mol)과 페닐아세틸렌 11.06g (0.108mol)을 디페닐에테르 300mL 로 현탁 교반한다. 3시간 동안 환류교반 한 다음 상온으로 냉각하고 에탄올 1L를 부어 고체화 시킨다. 생성된 고체를 디클로로메탄과 메탄올을 사용하여 재결정 한 다음 컬럼 크로마토그래피를 통해 미색 고체의 중간체 화합물 [76-1] 12.7g (22%) 을 수득하였다.

[0238] 화합물 [15]의 제조단계

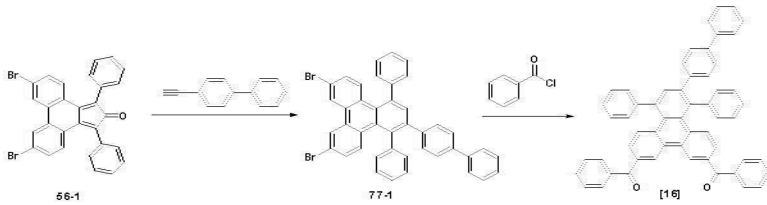
[0239] 합성예 1과 동일한 방법으로 중간체 화합물[76-1] 5.0g (9.33mmol), 노르말 부틸리튬(2.5M) 3.92ml (9.80mmol), 및 4-페닐벤조일 클로라이드 1.37g (9.80mmol)을 사용하여 노란색 고체의 목적 화합물 [15] 3.6g (70%) 을 수득하였다.

[0240] $^1\text{H NMR}$ (300 MHz, CDCl_3) : δ 7.01~7.24(m, 14H), 7.38~7.48(m, 8H), 7.72(d, 1H), 7.91~7.92(m, 2H),

8.16(s, 1H), 8.53(d, 1H), 8.63(d, 1H)

[0241] MS/FAB : 560(M⁺)

[0242] [합성 예 14] 화합물 [16]의 합성



[0243]

[0244] 중간체 화합물 [77-1]의 제조단계

[0245] 합성예 1 과 동일한 방법으로 중간체 화합물[56-1] 20g (37.02mmol), 4-에티닐바이페닐을 사용하여 미색 고체의 중간체 화합물 [77-1] 10.2g (40%) 을 수득하였다.

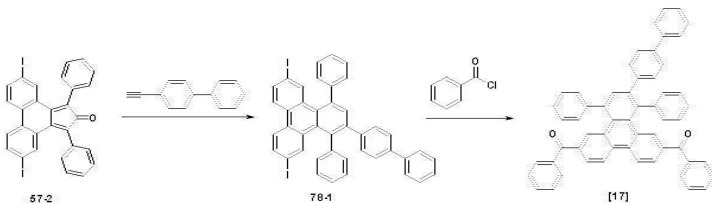
[0246] 화합물 [16]의 제조단계

[0247] 합성예 1과 동일한 방법으로 중간체 화합물[77-1] 5.0g (7.24mmol), 노르말 부틸리튬(2.5M), 4-페닐벤조일 클로라이드를 사용하여 노란색 고체의 목적 화합물 [16] 3.4g (65%) 을 수득하였다.

[0248] ¹H NMR (300 MHz, CDC13) : δ 7.05~7.07(m, 4H), 7.21~7.44(m, 19H), 7.58~7.60(m, 6H), 7.91~7.92(m, 3H), 8.16(s, 2H), 8.63(d, 2H)

[0249] MS/FAB : 740(M⁺)

[0250] [합성 예 15] 화합물 [17]의 합성



[0251]

[0252] 중간체 화합물 [78-1]의 제조단계

[0253] 합성예 1 과 동일한 방법으로 중간체 화합물[57-2] 20g (31.53mmol), 4-에티닐바이페닐을 사용하여 미색 고체의 중간체 화합물 [78-1] 9.6g (39%) 을 수득하였다.

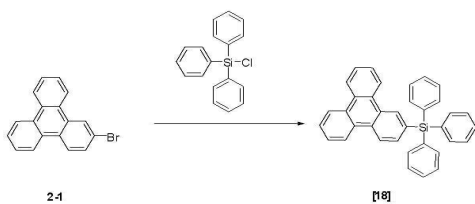
[0254] 화합물 [17]의 제조단계

[0255] 합성예 1과 동일한 방법으로 중간체 화합물[78-1] 5.0g (6.37mmol), 노르말 부틸리튬(2.5M), 4-페닐벤조일 클로라이드를 사용하여 노란색 고체의 목적 화합물 [17] 3.0g (64%) 을 수득하였다.

[0256] ¹H NMR (300 MHz, CDC13) : δ 7.05~7.07(m, 4H), 7.21~7.44(m, 19H), 7.58~7.60(m, 6H), 7.81~7.92(m, 5H), 8.73(s, 2H)

[0257] MS/FAB : 740(M⁺)

[0258] [합성 예 16] 화합물 [18]의 합성



[0259]

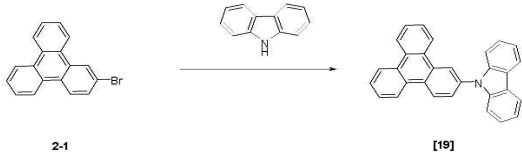
[0260] 합성예 1과 동일한 방법으로, 화합물[2-1] 2.51g (8.18mmol), 노르말 부틸리튬(2.5M) 3.27mL (8.18mmol), 및 트리페닐실릴 클로라이드2.89g (9.82mmol)을 사용하여 미색 고체의 목적 화합물 [18] 3.0g (75%) 을

수득하였다.

[0261] $^1\text{H NMR}$ (300 MHz, CDCl_3) : δ 7.30~7.55(m, 15H), 7.70~7.85(m, 4H), 8.08~8.15(m, 4H), 8.70~8.81(m, 3H)

[0262] MS/FAB : 486(M⁺)

[0263] [합성 예 17] 화합물 [19]의 합성



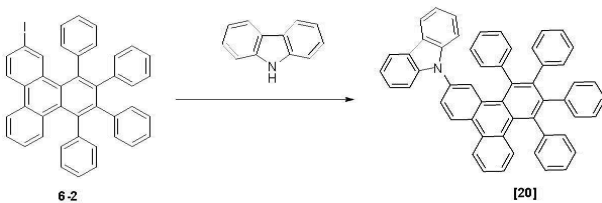
[0264]

[0265] 100mL 둥근바닥플라스크에 중간체 화합물[2-1] 2.51g (8.18mmol), 카바졸 1.37g (8.18mmol), 터트-부톡시드 나트륨 1.18g (12.27mmol)를 투입하고 자일렌 50mL로 교반한다. 질소 분위기에서 팔라듐(II)아세테이트18mg (0.082mmol), 트리-터트-부틸포스핀(50%) 0.08mL (0.164mmol) 을 첨가하여 10시간 동안 환류 교반한다. 상온으로 냉각하여 메탄올을 투입한다. 고체를 여과하고 디클로로메탄과 메탄올로 재결정화하여 미색 고체의 목적 화합물 [19] 2.9g (90%) 을 수득하였다.

[0266] $^1\text{H NMR}$ (300 MHz, CDCl_3) : δ 7.20~7.35(m, 3H), 7.45~7.65(m, 2H), 7.85~8.05(m, 10H), 8.50~8.75(m, 4H)

[0267] MS/FAB: 393(M⁺)

[0268] [합성 예 18] 화합물 [20]의 합성



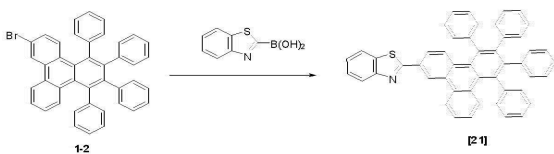
[0269]

[0270] 합성예 17 와 동일한 방법으로, 중간체 화합물[6-2] 5.0g (7.59mmol)을 사용하여 미색 고체의 목적 화합물 [20] 3.0g (57%) 을 수득하였다.

[0271] $^1\text{H NMR}$ (300 MHz, CDCl_3) : δ 7.03~7.55(m, 28H), 7.80~7.91(m, 3H), 8.10(m, 2H), 8.55(m, 2H)

[0272] MS/FAB : 697(M⁺)

[0273] [합성 예 19] 화합물 [21]의 합성



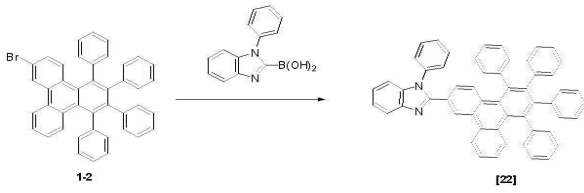
[0274]

[0275] 둥근바닥플라스크에 중간체화합물 [1-2] 5.0g (8.18mmol), 벤조[d]티아졸-2-일-2-보론산1.90g (10.63mmol), 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐 189mg (0.164mmol), 2몰-탄산나트륨수용액, 및 톨루엔 50mL를 10시간 동안 환류 교반한다. 반응종료 후 상온에서 생성된 고체를 감압 여과하고 디클로로메탄과 메탄올로 재결정하여 목적 화합물 [21] 2.6g (48%)을 수득하였다.

[0276] $^1\text{H NMR}$ (300 MHz, CDCl_3) : δ 7.18~7.49(m, 22H), 7.79~8.15(m, 7H), 8.66(m, 2H)

[0277] MS/FAB : 665(M⁺)

[0278] [합성 예 20] 화합물 [22]의 합성



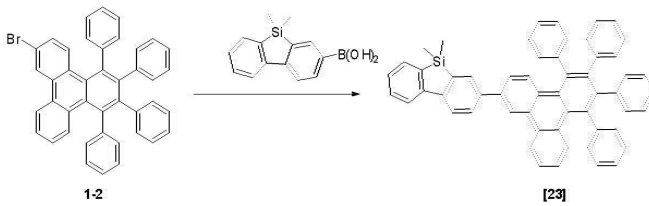
[0279]

[0280] 합성예 19와 동일한 방법으로, 화합물 [2-1] 2.51g (8.18mmol), 1-페닐-1H-벤조[d]이미다졸-2일-2-보론산을 사용하여 목적화합물 [22] 3.0g (87%)을 수득하였다.

[0281] $^1\text{H NMR}$ (300 MHz, CDCl_3) : δ 7.20~7.60(m, 8H), 7.80~7.89(m, 4H), 8.01~8.09(m, 4H), 8.50~8.80(m, 4H)

[0282] MS/FAB : 420(M⁺)

[0283] [합성 예 21] 화합물 [23]의 합성



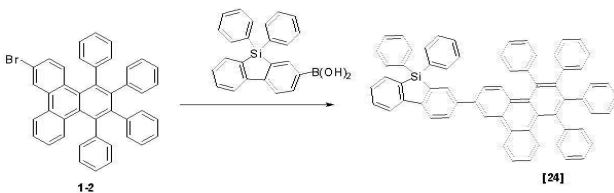
[0284]

[0285] 합성예 19와 동일한 방법으로 중간체 화합물 [1-2] 5.0g (8.18mmol), 9,9-디메틸-9H-실라플로렌-2-보론산을 사용하여 목적화합물 [23] 2.3g (38%)을 수득하였다.

[0286] $^1\text{H NMR}$ (300 MHz, CDCl_3) : δ 0.60(s, 6H), 7.14~7.30(m, 22H), 7.50~7.64(m, 4H), 7.80(m, 3H), 8.01~8.10(m, 3H), 8.78(m, 2H)

[0287] MS/FAB : 740(M⁺)

[0288] [합성 예 22] 화합물 [24]의 합성



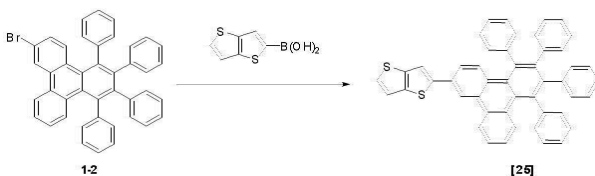
[0289]

[0290] 합성예 19와 동일한 방법으로 중간체 화합물 [1-2] 5.0g (8.18mmol), 9,9-디페닐-9H-실라플로렌-2-보론산을 사용하여 목적화합물 [24] 4.1g (58%)을 수득하였다.

[0291] $^1\text{H NMR}$ (300 MHz, CDCl_3) : δ 7.14~7.46(m, 36H), 7.78~8.10(m, 6H), 8.59(m, 2H)

[0292] MS/FAB : 864(M⁺)

[0293] [합성 예 23] 화합물 [25]의 합성



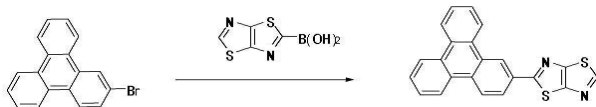
[0294]

[0295] 합성예 19와 동일한 방법으로 중간체 화합물 [1-2] 5.0g (8.18mmol), 티에노[3,2-b]티오펜-2일-2-보론산을 사용하여 목적화합물 [25] 2.7g (49%)을 수득하였다.

[0296] $^1\text{H NMR}$ (300 MHz, CDCl_3) : δ 7.01~7.45(m, 23H), 7.75~8.11(m, 5H), 8.59(m, 2H)

[0297] MS/FAB : 670(M⁺)

[0298] [합성 예 24] 화합물 [26]의 합성



2-1

[26]

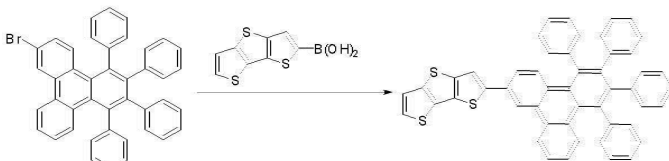
[0299]

[0300] 합성예 19와 동일한 방법으로 화합물 [2-1] 2.51g (8.18mmol), 티아졸로[5,4-d]티오펜-2일-2-보론산 사용하여 목적화합물 [26] 2.5g (83%)을 수득하였다.

[0301] $^1\text{H NMR}$ (300 MHz, CDCl_3) : δ 7.70~8.09(m, 8H), 8.80~8.95(m, 4H)

[0302] MS/FAB : 368(M⁺)

[0303] [합성 예 25] 화합물 [27]의 합성



1-2

[27]

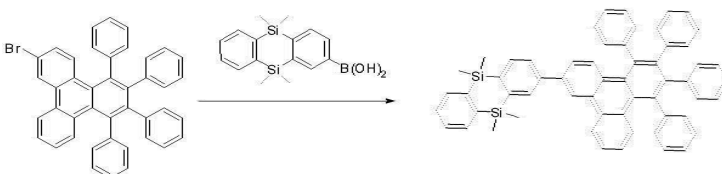
[0304]

[0305] 합성예 19와 동일한 방법으로 중간체 화합물 [1-2] 5.0g (8.18mmol), 디티에노[2,3]티오펜-2-보론산 사용하여 목적화합물 [27] 3.6g (60%)을 수득하였다.

[0306] $^1\text{H NMR}$ (300 MHz, CDCl_3) : δ 7.02~7.55(m, 23H), 7.78~8.10(m, 5H), 8.70(m, 2H)

[0307] MS/FAB : 726(M⁺)

[0308] [합성 예 26] 화합물 [28]의 합성



1-2

[28]

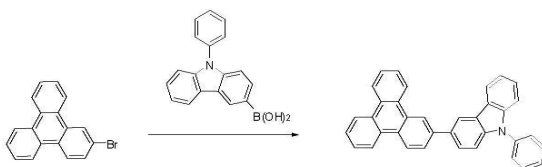
[0309]

[0310] 합성예 19와 동일한 방법으로 중간체 화합물 [1-2] 5.0g (8.18mmol), 5,10-디히드로-5,5,10,10-테트라메틸실란 트렌-2-일-2-보론산을 사용하여 목적화합물 [28] 3.8g (58%)을 수득하였다.

[0311] $^1\text{H NMR}$ (300 MHz, CDCl_3) : δ 0.51(s, 12H), 7.19~7.49(m, 22H), 7.59~8.09(m, 9H), 8.78(m, 2H)

[0312] MS/FAB : 798(M⁺)

[0313] [합성 예 27] 화합물 [29]의 합성



2-1

[29]

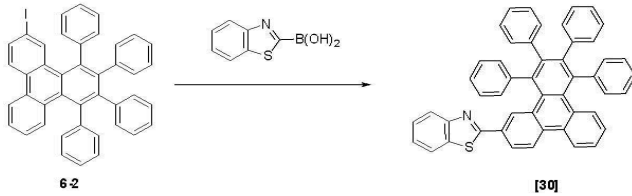
[0314]

[0315] 합성예 19와 동일한 방법으로 화합물 [2-1] 2.51g (8.18mmol), 9-페닐-9H-카바졸-3-일-3-보론산을 사용하여 목적화합물 [29] 2.80g (73%)을 수득하였다.

[0316] $^1\text{H NMR}$ (300 MHz, CDCl_3) : δ 7.20~7.65(m, 8H), 7.75~7.85(m, 5H), 8.01~8.12(m, 7H), 8.78~8.90(m, 3H)

[0317] MS/FAB : 469(M⁺)

[0318] [합성 예 28] 화합물 [30]의 합성



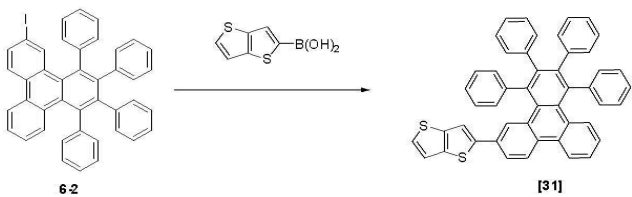
[0319]

[0320] 합성예 19와 동일한 방법으로 중간체 화합물 [6-2] 5.0g (7.59mmol), 벤조[d]티아졸 -2-일-2-보론산을 사용하여 목적화합물 [30] 4.0g (79%)을 수득하였다.

[0321] $^1\text{H NMR}$ (300 MHz, CDCl_3) : δ 7.19~7.60(m, 22H), 7.79(m, 2H), 8.09~8.15(m, 5H), 8.50~8.59(m, 2H)

[0322] MS/FAB : 665(M⁺)

[0323] [합성 예 29] 화합물 [31]의 합성



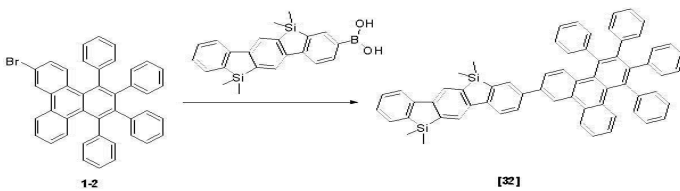
[0324]

[0325] 합성예 19와 동일한 방법으로 중간체 화합물 [6-2] 5.0g (7.59mmol), 티에노[3,2-b]티오펜-2-일-2-보론산을 사용하여 목적화합물 [31] 3.8g (75%)을 수득하였다.

[0326] $^1\text{H NMR}$ (300 MHz, CDCl_3) : δ 7.01~7.50(m, 23H), 7.79~8.19(m, 5H), 8.64(m, 2H)

[0327] MS/FAB : 670(M⁺)

[0328] [합성 예 30] 화합물 [32]의 합성



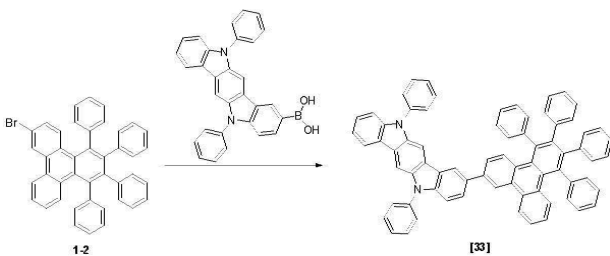
[0329]

[0330] 합성예 19와 동일한 방법으로, 중간체 화합물[1-2] 5.0g (8.18mmol), 9,9,9-테트라메틸인데놀실란플로렌보론산을 사용하여 목적 화합물 [32] 4.3g (61%) 을 수득하였다.

[0331] $^1\text{H NMR}$ (300 MHz, CDCl_3) : δ 0.65(s, 12H), 7.01~7.24(m, 24H), 7.38~7.51(m, 7H), 7.65~7.73(m, 2H), 7.81(s, 1H), 8.42~8.44(m, 2H)

[0332] MS/FAB : 872(M⁺)

[0333] [합성 예 31] 화합물 [33]의 합성



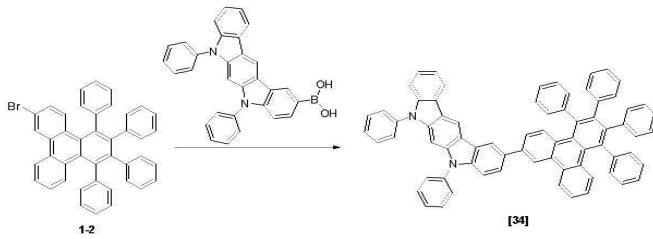
[0334]

[0335] 합성예 19와 동일한 방법으로, 중간체 화합물[1-2] 5.0g (8.18mmol), 5,11-디페닐-5,11-디하이드로인도로 [3,2,b]카바졸-2-닐보론산을 사용하여 목적 화합물 [33] 4.4g (62%) 을 수득하였다.

[0336] $^1\text{H NMR}$ (300 MHz, CDCl_3) : δ 7.02~7.21(m, 35H), 7.37~7.63(m, 8H), 7.82(s, 1H), 8.41~8.44(m, 2H)

[0337] MS/FAB : 939(M⁺)

[0338] [합성 예 32] 화합물 [34]의 합성



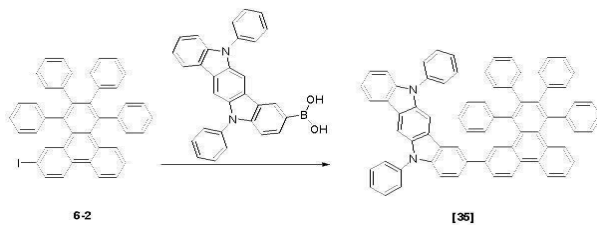
[0339]

[0340] 합성예 19와 동일한 방법으로, 중간체 화합물[1-2] 5.0g (8.18mmol), 5,11-디페닐-5,11-디하이드로인도로 [3,2,b]카바졸-2-닐보론산을 사용하여 목적 화합물 [34] 4.8g (62%) 을 수득하였다.

[0341] $^1\text{H NMR}$ (300 MHz, CDCl_3) : δ 7.00~7.25(m, 35H), 7.36~7.61(m, 8H), 7.82(s, 1H), 8.41~8.44(m, 2H)

[0342] MS/FAB : 939(M⁺)

[0343] [합성 예 33] 화합물 [35]의 합성



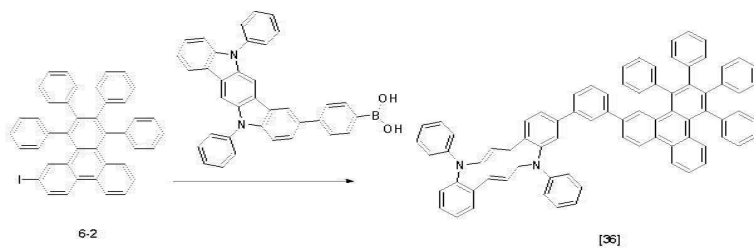
[0344]

[0345] 합성예 19와 동일한 방법으로, 중간체 화합물[6-2] 5.0g (7.59mmol), 5,11-디페닐-5,11-디하이드로인도로 [3,2,b]카바졸-2-닐보론산을 사용하여 목적 화합물 [35] 4.1g (55%) 을 수득하였다.

[0346] $^1\text{H NMR}$ (300 MHz, CDCl_3) : δ 7.01~7.24(m, 35H), 7.41~7.86(m, 9H), 8.41~8.42(d, 1H), 8.61(s, 1H)

[0347] MS/FAB : 938(M⁺)

[0348] [합성 예 34] 화합물 [36]의 합성



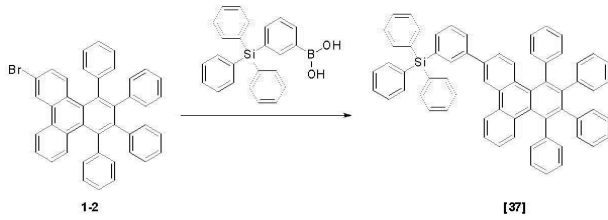
[0349]

[0350] 합성예 19와 동일한 방법으로, 중간체 화합물[6-2] 5.0g (7.59mmol), 4-(5,11-디페닐-5,11-디하이드로인도로 [3,2,b]카바졸-2-닐)페닐보론산을 사용하여 목적 화합물 [36] 4.4g (55%) 을 수득하였다.

[0351] $^1\text{H NMR}$ (300 MHz, CDCl_3) : δ 7.01~7.23(m, 39H), 7.41~7.43(m, 2H), 7.57~7.89(m, 6H), 7.95~7.98(d, 1H), 8.41~8.42(d, 1H), 8.61(s, 1H)

[0352] MS/FAB : 1015(M⁺)

[0353] [합성 예 35] 화합물 [37]의 합성



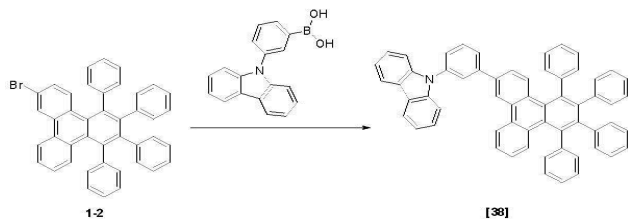
[0354]

[0355] 합성예 19와 동일한 방법으로, 중간체 화합물[1-2] 5.0g (8.18mmol), 3-(트리페닐실릴)페닐보론산을 사용하여 목적 화합물 [37] 3.9g (55%) 을 수득하였다.

[0356] $^1\text{H NMR}$ (300 MHz, CDCl_3) : δ 7.01~7.24(m, 38H), 7.41~7.61(m, 3H), 7.63~7.71(m, 3H), 8.41~8.44(m, 2H)

[0357] MS/FAB : 866(M⁺)

[0358] [합성 예 36] 화합물 [38]의 합성



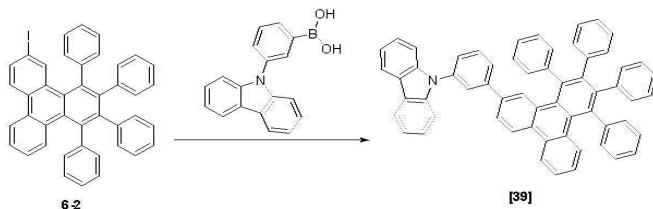
[0359]

[0360] 합성예 19와 동일한 방법으로, 중간체 화합물[1-2] 5.0g (8.18mmol), 3-(9H-카바졸-9-닐)페닐보론산을 사용하여 목적 화합물 [38] 3.7g (58%) 을 수득하였다.

[0361] $^1\text{H NMR}$ (300 MHz, CDCl_3) : δ 7.01~7.23(m, 28H), 7.41~7.63(m, 3H), 7.64~7.69(m, 4H), 7.81~7.92(m, 2H), 8.41~8.43(m, 2H)

[0362] MS/FAB : 776(M⁺)

[0363] [합성 예 37] 화합물 [39]의 합성



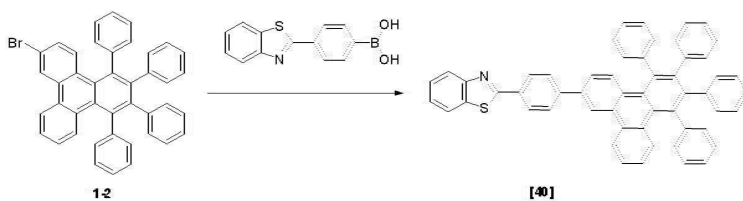
[0364]

[0365] 합성예 19와 동일한 방법으로, 중간체 화합물[6-2] 5.0g (7.59mmol), 3-(9H-카바졸-9-닐)페닐보론산을 사용하여 목적 화합물 [39] 3.6g (62%) 을 수득하였다.

[0366] $^1\text{H NMR}$ (300 MHz, CDCl_3) : δ 7.01~7.23(m, 28H), 7.42~7.63(m, 3H), 7.65~7.69(m, 4H), 7.81~7.92(m, 2H), 8.41~8.42(d, 1H), 9.61(s, 1H)

[0367] MS/FAB : 773(M⁺)

[0368] [합성 예 38] 화합물 [40]의 합성



[0369]

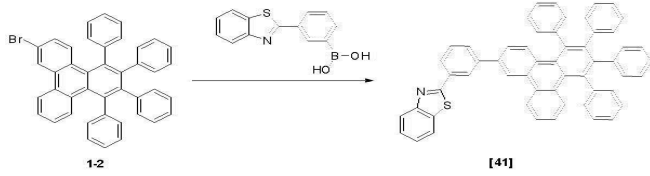
[0370] 합성예 19와 동일한 방법으로, 중간체 화합물[1-2] 5.0g (8.18mmol), 4-(벤조[d]티아졸-2-닐)페닐보론산을 사용

하여 목적 화합물 [40] 3.6g (59%) 을 수득하였다.

[0371] $^1\text{H NMR}$ (300 MHz, CDCl_3) : δ 7.01~7.24(m, 24H), 7.42~7.61(m, 4H), 7.73~7.81(m, 4H), 7.83(s, 1H), 8.41~8.43(m, 2H)

[0372] MS/FAB : 741(M⁺)

[0373] [합성 예 39] 화합물 [41]의 합성



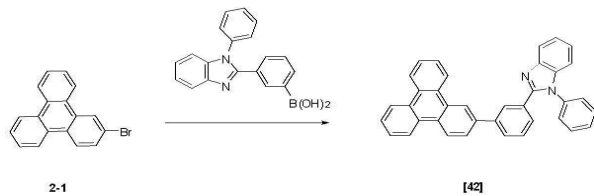
[0374]

[0375] 합성예 19와 동일한 방법으로, 중간체 화합물[1-2] 5.0g (8.18mmol), 3-(벤조[d]티아졸-2-닐)페닐보론산을 사용하여 목적 화합물 [41] 3.8g (63%) 을 수득하였다.

[0376] $^1\text{H NMR}$ (300 MHz, CDCl_3) : δ 7.01~7.22(m, 24H), 7.36(s, 1H), 7.44~7.81(m, 7H), 7.83(s, 1H), 8.41~8.43(m, 2H)

[0377] MS/FAB : 741(M⁺)

[0378] [합성 예 40] 화합물 [42]의 합성



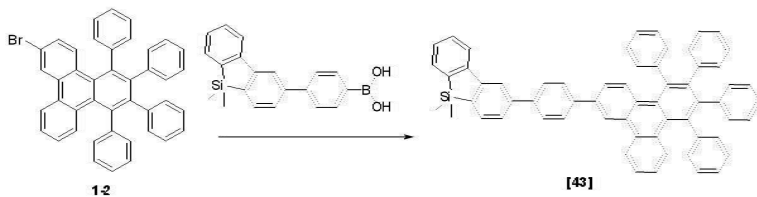
[0379]

[0380] 합성예 19와 동일한 방법으로, 화합물[2-1] 2.51g (8.18mmol), 3-(1-페닐-1H-벤조[d]이미다졸-2-닐)페닐보론산을 사용하여 목적 화합물 [42] 3.10g (76%) 을 수득하였다.

[0381] $^1\text{H NMR}$ (300 MHz, CDCl_3) : δ 7.18(m, 2H), 7.45~7.70(m, 5H), 7.81~7.89(m, 4H), 8.01~8.15(m, 5H), 8.50~8.80(m, 4H)

[0382] MS/FAB : 496(M⁺)

[0383] [합성 예 41] 화합물 [43]의 합성



[0384]

[0385] 합성예 19와 동일한 방법으로, 중간체 화합물[1-2] 5.0g (8.18mmol), 4-(5,5-디메틸-5H-디벤조[b,d]실롤-2-닐)페닐보론산을 사용하여 목적 화합물 [43] 3.8g (57%) 을 수득하였다.

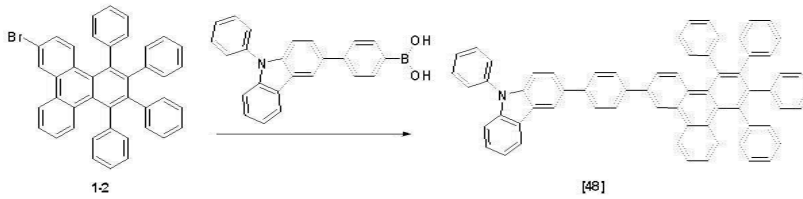
[0386] $^1\text{H NMR}$ (300 MHz, CDCl_3) : δ 0.66(s, 6H), 7.00~7.22(m, 28H), 7.34~7.61(m, 5H), 7.74~7.79(m, 3H), 8.41~8.42(m, 2H)

[0387] MS/FAB : 816(M⁺)

8.40~8.41(m, 2H)

[0407] MS/FAB : 874(M⁺)

[0408] [합성 예 46] 화합물 [48]의 합성



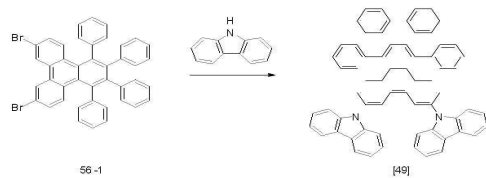
[0409]

[0410] 합성예 19와 동일한 방법으로, 중간체 화합물[1-2] 5.0g (8.18mmol), 4-(9-페닐-9H-카바졸-3일)페닐보론산을 사용하여 목적 화합물 [48] 4.2g (60%) 을 수득하였다.

[0411] ¹H NMR (300 MHz, CDC13) : δ 7.01~7.22(m, 32H), 7.46~7.79(m, 8H), 7.83(s, 1H), 8.41~8.43(m, 2H)

[0412] MS/FAB : 851(M⁺)

[0413] [합성 예 47] 화합물 [49]의 합성



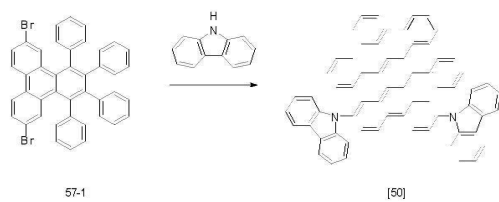
[0414]

[0415] 합성예 17 과 동일한 방법으로 중간체 화합물[56-1] 5.0g (7.59mmol), 9H-카바졸을 사용하여 미색 고체의 목적 화합물 [49] 3.8g (61%) 을 수득하였다.

[0416] ¹H NMR (300 MHz, CDC13) : δ 7.03~7.32(m, 28H), 7.43(d, 2H), 7.70~7.74(m, 4H), 8.00~8.02(m, 4H), 8.25(d, 2H), 8.50(d, 2H)

[0417] MS/FAB : 863(M⁺)

[0418] [합성 예 48] 화합물 [50]의 합성



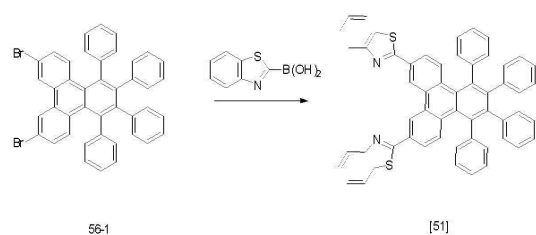
[0419]

[0420] 합성예 17 과 동일한 방법으로 중간체 화합물[57-1] 5.0g (7.59mmol), 9H-카바졸을 사용하여 미색 고체의 목적 화합물 [50] 3.4g (55%) 을 수득하였다

[0421] ¹H NMR (300 MHz, CDC13) : δ 7.05~7.32(m, 28H), 7.43(d, 2H), 7.70~7.74(m, 4H), 8.00~8.02(m, 4H), 8.25(d, 2H), 8.50(d, 2H)

[0422] MS/FAB : 863(M⁺)

[0423] [합성 예 49] 화합물 [51]의 합성



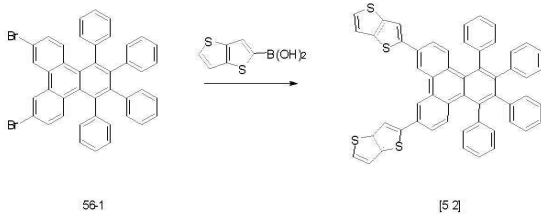
[0424]

[0425] 합성예 19와 동일한 방법으로 중간체 화합물 [56-1] 5.0g (7.24mmol), 벤조[d]티아졸-2-보론산을 사용하여 목적 화합물 [51] 3.0g (52%)을 수득하였다.

[0426] ¹H NMR (300 MHz, CDC13) : δ 7.01~7.13(m, 24H), 7.61~7.78(m, 6H), 7.94(s, 2H), 8.59(d, 2H)

[0427] MS/FAB : 799(M⁺)

[0428] [합성 예 50] 화합물 [52]의 합성



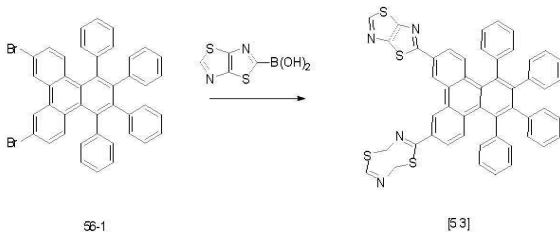
[0429]

[0430] 합성예 19와 동일한 방법으로 중간체 화합물 [56-1] 5.0g (7.24mmol), 티에노[3,2-b]티오펜-2일-2-보론산을 사용하여 목적화합물 [52] 2.6g (45%)을 수득하였다.

[0431] ¹H NMR (300 MHz, CDC13) : δ 6.96~7.00(m, 4H), 7.10(d, 2H), 7.31~7.42(m, 20H), 8.00(d, 2H), 8.24(s, 2H), 8.69(d, 2H)

[0432] MS/FAB : 809(M⁺)

[0433] [합성 예 51] 화합물 [53]의 합성



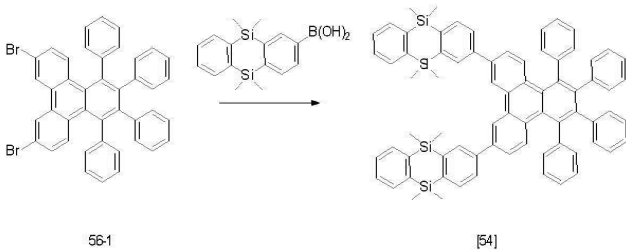
[0434]

[0435] 합성예 19와 동일한 방법으로 중간체 화합물 [56-1] 5.0g (7.24mmol), 티아졸로[5,4-d]티오펜-2일-2-보론산을 사용하여 목적화합물 [53] 2.9g (50%)을 수득하였다.

[0436] ¹H NMR (300 MHz, CDC13) : δ 7.01~7.12(m, 20H), 7.70(d, 2H), 7.94(s, 2H), 8.59(d, 2H), 8.61(s, 2H)

[0437] MS/FAB : 813(M⁺)

[0438] [합성 예 52] 화합물 [54]의 합성



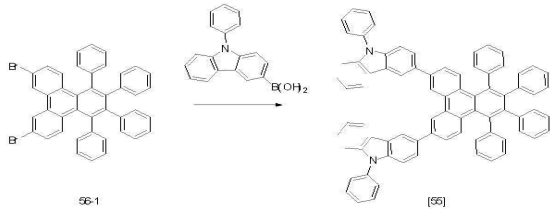
[0439]

[0440] 합성예 19와 동일한 방법으로 중간체 화합물 [56-1] 5.0g (7.24mmol), 5,10-디히드로-5,5,10,10-테트라메틸실란트렌-2-일-2-보론산을 사용하여 목적화합물 [54] 4.24g (55%)을 수득하였다.

[0441] ¹H NMR (300 MHz, CDC13) : δ 1.06(s, 24H), 7.01~7.22(m, 30H), 7.46(s, 2H), 7.59~7.70(m, 4H), 7.94(s, 2H), 8.59(d, 2H)

[0442] MS/FAB : 1066(M⁺)

[0443] [합성 예 53] 화합물 [55]의 합성



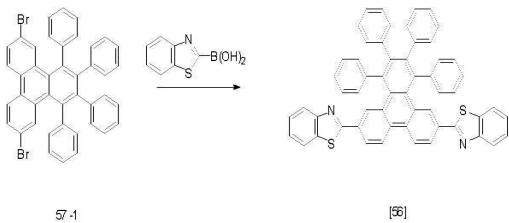
[0444]

[0445] 합성예 19와 동일한 방법으로 중간체 화합물 [56-1] 5.0g (7.24mmol), 9-페닐-9H-카바졸-3-일-3-보론산을 사용하여 목적화합물 [55] 4.49g (61%)을 수득하였다.

[0446] $^1\text{H NMR}$ (300 MHz, CDCl_3) : δ 7.09~7.49(m, 36H), 7.57~7.98(m, 9H), 8.14(s, 2H), 8.35(d, 1H), 8.69(d, 2H)

[0447] MS/FAB : 1015(M⁺)

[0448] [합성 예 54] 화합물 [56]의 합성



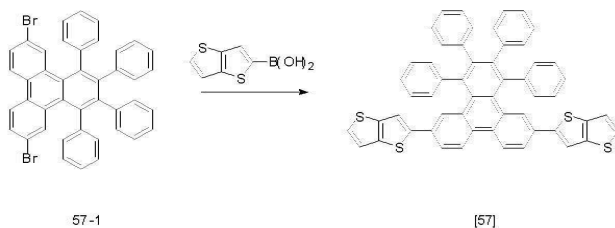
[0449]

[0450] 합성예 19와 동일한 방법으로 중간체 화합물 [57-1] 5.0g (7.24mmol), 벤조[d]티아졸 -2-일-2-보론산을 사용하여 목적화합물 [56] 4.2g (72%)을 수득하였다.

[0451] $^1\text{H NMR}$ (300 MHz, CDCl_3) : δ 7.01~7.13(m, 24H), 7.61~7.64(m, 4H), 7.78~7.80(m, 4H), 8.65(s, 2H)

[0452] MS/FAB : 799(M⁺)

[0453] [합성 예 55] 화합물 [57]의 합성



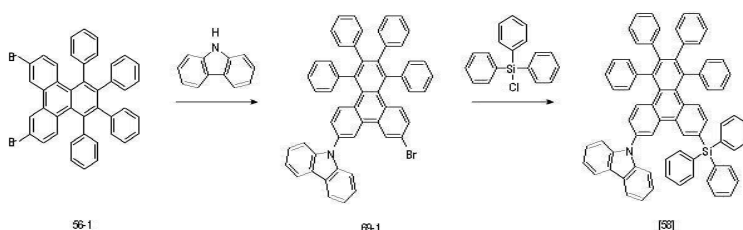
[0454]

[0455] 합성예 19와 동일한 방법으로 중간체 화합물 [57-1] 5.0g (7.24mmol), 티에노[3,2-b]티오펜-2-일-2-보론산을 사용하여 목적화합물 [57] 4.4g (72%)을 수득하였다.

[0456] $^1\text{H NMR}$ (300 MHz, CDCl_3) : δ 6.96~7.00(m, 4H), 7.10(d, 2H), 7.31~7.42(m, 20H), 7.94(d, 2H), 8.08(d, 2H), 8.65(s, 2H)

[0457] MS/FAB : 809(M⁺)

[0458] [합성 예 56] 화합물 [58]의 합성



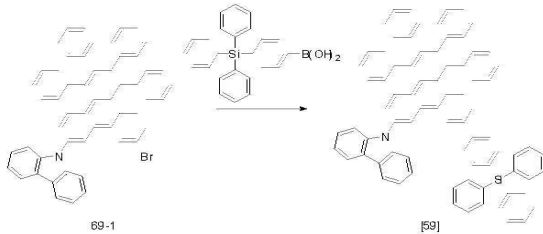
[0459]

[0460] 합성에 17과 동일한 방법으로 9H-카바졸을 사용하여 얻은 중간체 화합물 [69-1] 5.0g(6.44 mmol)과 트리페닐실릴 클로라이드를 사용하여 합성에 1과 동일한 방법으로 미색 고체의 목적화합물 [58] 3.8g(62%) 을 수득하였다.

[0461] ¹H NMR (300 MHz, CDC13) : δ 7.05~7.43(m, 40H), 7.70~7.74(m, 2H), 7.90~7.96(m, 3H), 8.20(s, 1H), 8.35(d, 1H), 8.55~8.63(m, 2H)

[0462] MS/FAB : 956(M⁺)

[0463] [합성 예 57] 화합물 [59]의 합성



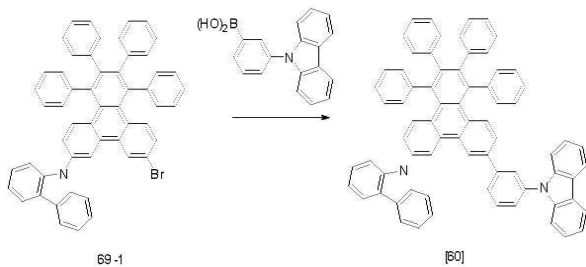
[0464]

[0465] 합성에 19와 동일한 방법으로 중간체 화합물 [69-1] 5.0g (6.44mmol), 4-(트리페닐실릴)페닐보론산을 사용하여 목적화합물 [59] 4.8g (72%)을 수득하였다.

[0466] ¹H NMR (300 MHz, CDC13) : δ 7.09~7.43(m, 42H), 7.70~7.74(m, 4H), 7.90~7.92(m, 3H), 8.14(s, 1H), 8.35(d, 1H), 8.59~8.60(m, 2H)

[0467] MS/FAB : 1032(M⁺)

[0468] [합성 예 58] 화합물 [60]의 합성



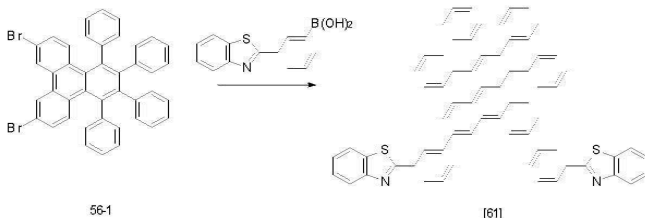
[0469]

[0470] 합성에 19와 동일한 방법으로 중간체 화합물 [69-1] 5.0g (6.44mmol), 3-(9H-카바졸-9-일)페닐보론산을 사용하여 목적화합물 [60] 4.6g (76%)을 수득하였다.

[0471] ¹H NMR (300 MHz, CDC13) : δ 7.05~7.43(m, 33H), 7.70~7.74(m, 3H), 7.90~7.92(m, 5H), 8.14(s, 1H), 8.21~8.35(m, 2H), 8.50~8.59(m, 2H)

[0472] MS/FAB : 939(M⁺)

[0473] [합성 예 59] 화합물 [61]의 합성



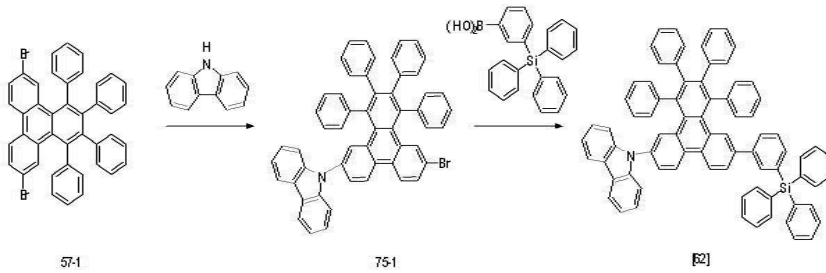
[0474]

[0475] 합성에 19와 동일한 방법으로 중간체 화합물 [69-1] 5.0g (6.44mmol), 3-(벤조[d]티아졸 -2-일)페닐보론산을 사용하여 목적화합물 [61] 4.5g (74%)을 수득하였다.

[0476] ¹H NMR (300 MHz, CDC13) : δ 7.01~7.30(m, 30H), 7.59~7.78(m, 8H), 7.94(s, 2H), 8.59(d, 2H)

[0477] MS/FAB : 951(M⁺)

[0478] [합성 예 60] 화합물 [62]의 합성



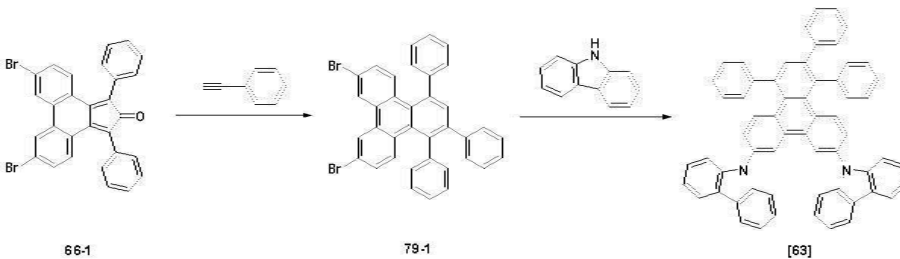
[0479]

[0480] 합성예 17과 동일한 방법으로 9H-카바졸을 사용하여 얻은 중간체 화합물 [75-1] 5.0g(6.44 mmol)과 3-(트리페닐실릴)페닐보론산을 사용하여 합성예 19와 동일한 방법으로 미색 고체의 목적화합물 [62] 4.5g(68%) 을 수득하였다.

[0481] ¹H NMR (300 MHz, CDC13) : δ 7.05~7.35(m, 43H), 7.26~7.98(m, 7H), 8.35(d, 1H), 8.50(s, 1H), 8.65(s, 1H)

[0482] MS/FAB : 1032(M⁺)

[0483] [합성 예 61] 화합물 [63]의 합성



[0484]

[0485] 중간체 화합물 [79-1]의 제조단계

[0486] 합성예 1 과 동일한 방법으로 중간체 화합물[66-1] 100g (0.185mol), 페닐아세틸렌을 사용하여 미색 고체의 중간체 화합물 [79-1] 45.4g (40%) 을 수득하였다.

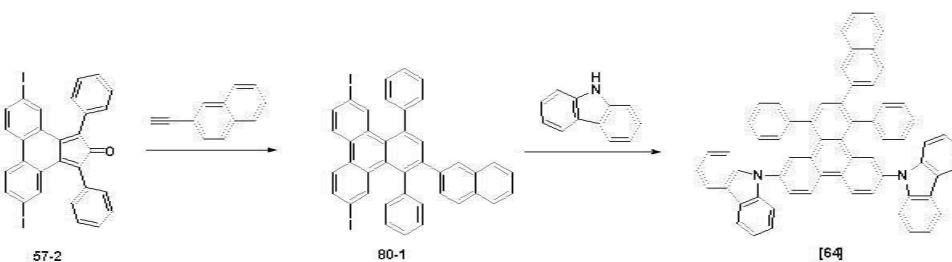
[0487] 화합물 [63]의 제조단계

[0488] 합성예 17과 동일한 방법으로 중간체 화합물[79-1] 5.0g (8.13mmol), 카바졸을 사용하여 노란색 고체의 목적 화합물 [63] 3.3g (53%) 을 수득하였다.

[0489] ¹H NMR (300 MHz, CDC13) : δ 7.05~7.32(m, 19H), 7.43(d, 2H), 7.59~7.61(m, 4H), 7.70~7.74(m, 4H), 7.90~7.92(m, 4H), 8.10(s, 1H), 8.35(d, 2H), 8.70(d, 2H)

[0490] MS/FAB : 786(M⁺)

[0491] [합성 예 62] 화합물 [64]의 합성



[0492]

[0493] 중간체 화합물 [80-1]의 제조단계

[0494] 합성예 1 과 동일한 방법으로 중간체 화합물[57-2] 15g (23.64mmol), 2-에티닐나프탈렌을 사용하여 미색 고체의 중간체 화합물 [80-1] 6.8g (38%) 을 수득하였다.

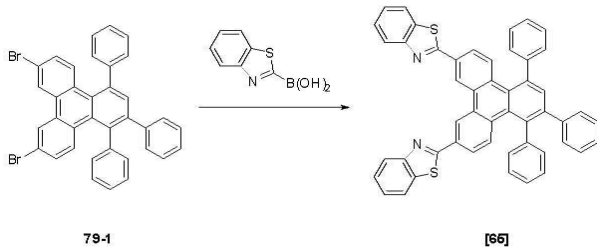
[0495] 중간체 화합물 [64]의 제조단계

[0496] 합성예 17과 동일한 방법으로 중간체 화합물[80-1] 5.0g (6.59mmol), 카바졸을 사용하여 노란색 고체의 목적 화합물 [64] 2.8g (51%) 을 수득하였다.

[0497] ¹H NMR (300 MHz, CDC13) : δ 7.05~7.43(m, 21H), 7.53~7.60(m, 5H), 7.72~7.80(m, 5H), 7.90~7.92(m, 4H), 8.10(s, 1H), 8.35(d, 2H), 8.70(s, 2H)

[0498] MS/FAB : 837(M⁺)

[0499] [합성 예 63] 화합물 [65]의 합성



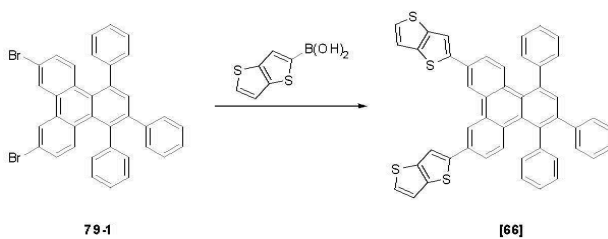
[0500]

[0501] 합성예 19와 동일한 방법으로 중간체 화합물 [79-1] 5.0g (8.13mmol), 벤조[d]티아졸-2-일-2-보론산을 노란색 고체의 사용하여 목적화합물 [65] 2.8g (49%)을 수득하였다.

[0502] ¹H NMR (300 MHz, CDC13) : δ 7.01~7.13(m, 15H), 7.39~7.41(m, 4H), 7.61~7.78(m, 6H), 7.92~7.94(m, 3H), 8.59(d, 2H)

[0503] MS/FAB : 722(M⁺)

[0504] [합성 예 64] 화합물 [66]의 합성



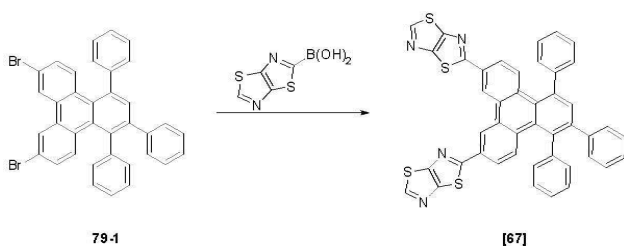
[0505]

[0506] 합성예 19와 동일한 방법으로 중간체 화합물 [79-1] 5.0g (8.13mmol), 티에노[3,2-b]티오펜-2일-2-보론산을 사용하여 노란색 고체의 목적화합물 [66] 2.8g (47%)을 수득 하였다.

[0507] ¹H NMR (300 MHz, CDC13) : δ 6.96~7.00(m, 4H), 7.20~7.21(m, 2H), 7.41~7.52(m, 11H), 7.79~7.81(m, 4H), 8.10~8.11(m, 2H), 8.32~8.34(m, 3H), 8.59(d, 2H)

[0508] MS/FAB : 733(M⁺)

[0509] [합성 예 65] 화합물 [67]의 합성



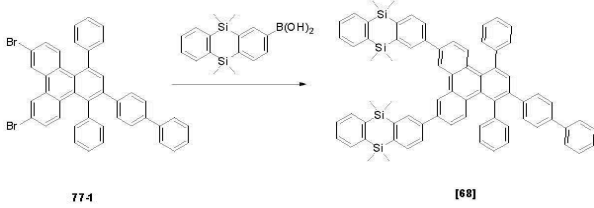
[0510]

[0511] 합성예 19와 동일한 방법으로 중간체 화합물 [79-1] 5.0g (8.13mmol), 티아졸로[5,4-d]티오펜-2일-2-보론산을 사용하여 노란색 고체의 목적화합물 [67] 2.6g (45%)을 수득 하였다.

[0512] ¹H NMR (300 MHz, CDC13) : δ 7.01~7.12(m, 11H), 7.39~7.41(m, 4H), 7.70~7.71(m, 2H), 7.92~7.94(m, 3H), 8.59(d, 2H), 8.71(s, 2H)

[0513] MS/FAB : 736(M⁺)

[0514] [합성 예 66] 화합물 [68]의 합성



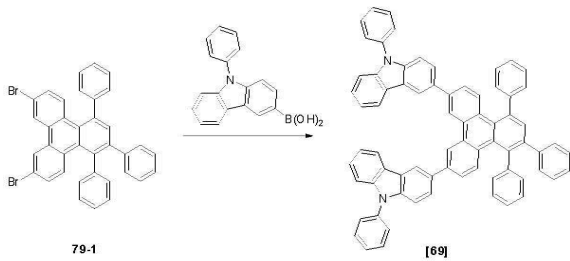
[0515]

[0516] 합성예 19와 동일한 방법으로 중간체 화합물 [77-1] 5.0g (8.13mmol), 5,10-디히드로-5,5,10,10-테트라메틸실란트렌-2-일-2-보론산을 사용하여 노란색 고체의 목적화합물 [68] 4.5g (52%)을 수득하였다.

[0517] ¹H NMR (300 MHz, CDCl₃) : δ 1.60(s, 24H), 7.05~7.07(m, 4H), 7.21~7.42(m, 23H), 7.59~7.60(m, 2H), 7.66(s, 2H), 7.79~7.80(m, 2H), 7.90~7.91(m, 2H), 8.12~8.14(m, 3H), 8.73~8.74(m, 2H)

[0518] MS/FAB : 1065(M⁺)

[0519] [합성 예 67] 화합물 [69]의 합성



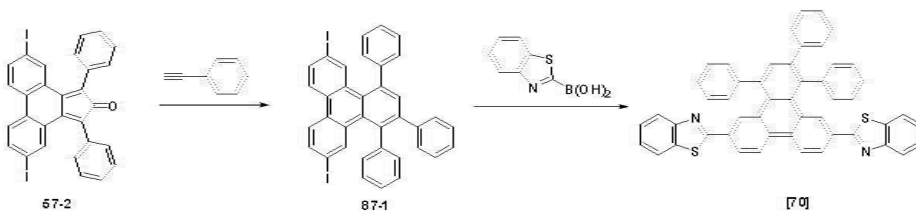
[0520]

[0521] 합성예 19와 동일한 방법으로 중간체 화합물 [79-1] 5.0g (8.13mmol), 9-페닐-9H-카바졸-3-일-3-보론산을 사용하여 노란색 고체의 목적화합물 [69] 4.0g (53%)을 수득하였다.

[0522] ¹H NMR (300 MHz, CDCl₃) : δ 7.01~7.23(m, 27H), 7.37~7.39(m, 6H), 7.47~7.60(m, 3H), 7.70~7.78(m, 4H), 7.92~7.94(m, 3H), 8.15(d, 1H), 8.58~8.59(m, 2H)

[0523] MS/FAB : 939(M⁺)

[0524] [합성 예 68] 화합물 [70]의 합성



[0525]

[0526] 중간체 화합물 [87-1]의 제조단계

[0527] 합성예 1 과 동일한 방법으로 중간체 화합물[57-2] 15g (23.64mmol), 페닐아세틸렌을 사용하여 미색 고체의 중간체 화합물 [87-1] 6.8g (41%) 을 수득하였다.

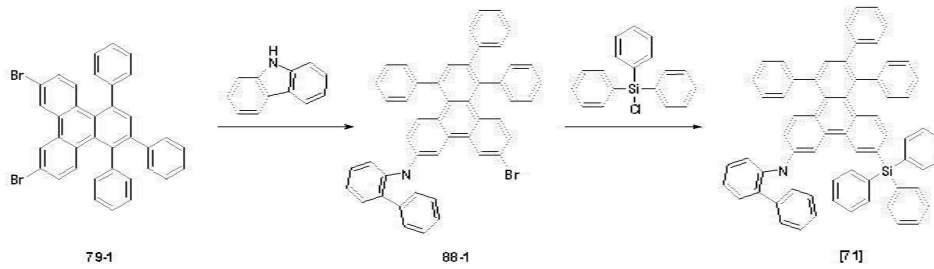
[0528] 화합물 [70]의 제조단계

[0529] 합성예 19와 동일한 방법으로 중간체 화합물 [87-1] 5.0g (7.05mmol), 벤조[d]티아졸-2-일-2-보론산을 사용하여 노란색 고체의 목적화합물 [70] 2.4g (48%)을 수득하였다.

[0530] ¹H NMR (300 MHz, CDCl₃) : δ 7.01~7.13(m, 15H), 7.39~7.41(m, 4H), 7.61~7.64(m, 4H), 7.76~7.78(m, 4H), 8.12(s, 1H), 8.75(s, 2H)

[0531] MS/FAB : 722(M⁺)

[0532] [합성 예 69] 화합물 [71]의 합성



[0533]

[0534] 중간체 화합물 [88-1]의 제조단계

[0535] 합성예 17 과 동일한 방법으로 중간체 화합물[79-1] 30g (48.83mmol), 카바졸을 사용하여 노란색 고체의 중간체 화합물 [88-1] 7.1g (21%) 을 수득하였다.

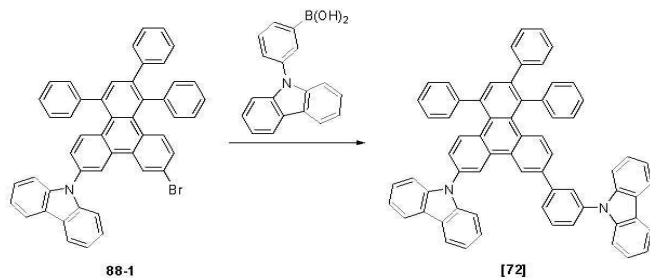
[0536] 중간체 화합물 [71]의 제조단계

[0537] 합성예 1 과 동일한 방법으로 중간체 화합물[88-1] 5g (7.13mmol), 클로로트리페닐실란을 사용하여 노란색 고체의 목적화합물 [71] 2.4g (39%) 을 수득하였다.

[0538] $^1\text{H NMR}$ (300 MHz, CDCl_3) : δ 7.05~7.43(m, 31H), 7.59~7.74(m, 6H), 7.90~7.96(m, 3H), 8.12(s, 1H), 8.20(s, 1H), 8.35(d, 1H), 8.50(d, 1H), 8.73(d, 1H)

[0539] MS/FAB : 880(M⁺)

[0540] [합성 예 70] 화합물 [72]의 합성



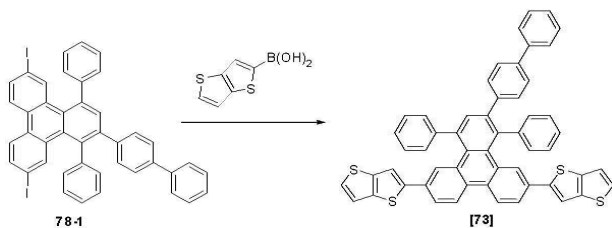
[0541]

[0542] 합성예 19와 동일한 방법으로 중간체 화합물 [88-1] 5.0g (7.13mmol), 3-(9H-카바졸-9-일)페닐보론산을 사용하여 노란색 고체의 목적화합물 [72] 3.1g (51%)을 수득하였다.

[0543] $^1\text{H NMR}$ (300 MHz, CDCl_3) : δ 7.09~7.43(m, 24H), 7.59~7.74(m, 7H), 7.89~7.92(m, 5H), 8.12~8.14(m, 2H), 8.34~8.35(m, 2H), 8.70~8.79(m, 2H)

[0544] MS/FAB : 863(M⁺)

[0545] [합성 예 71] 화합물 [73]의 합성



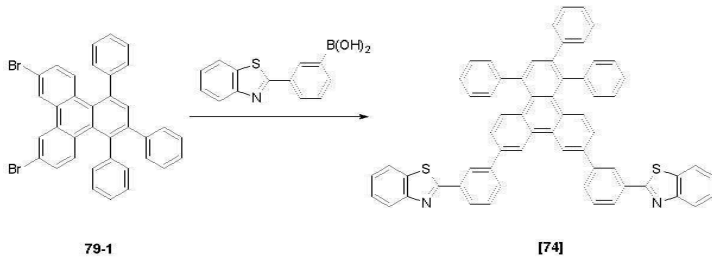
[0546]

[0547] 합성예 19 과 동일한 방법으로 중간체 화합물 [78-1] 5.0g (6.37mmol), 티에노[3,2-b]티오펜-2일-2-보론산을 사용하여 노란색 고체의 목적화합물 [73] 2.3g (45%)을 수득하였다.

[0548] $^1\text{H NMR}$ (300 MHz, CDCl_3) : δ 6.96~7.00(m, 4H), 7.20~7.25(m, 6H), 7.41~7.52(m, 13H), 7.79~7.80(m, 2H), 8.04~8.05(m, 2H), 8.18~8.19(m, 2H), 8.32(s, 1H), 8.70~8.71(m, 2H)

[0549] MS/FAB : 809(M+)

[0550] [합성 예 72] 화합물 [74]의 합성



[0551]

[0552] 합성예 19 과 동일한 방법으로 중간체 화합물 [78-1] 5.0g (8.13mmol), 3-(벤조[d] 티아졸-2일)페닐보론산을 사용하여 노란색 고체의 목적화합물 [74] 3.7g (53%)을 수득하였다.

[0553] ¹H NMR (300 MHz, CDCl₃) : δ 7.01~7.13(m, 19H), 7.30~7.31(m, 2H), 7.39~7.41(m, 4H), 7.59~7.61(m, 2H), 7.78~7.79(m, 2H), 7.92~7.94(m, 3H), 8.59~8.59(m, 2H)

[0554] MS/FAB : 875(M+)

[0555] 비교예 1

[0556] 하기 화학식 a로 표시되는 화합물 a를 발광층 호스트 물질로 사용하고, 하기화학식 b로 표시되는 화합물 b를 도판트 물질로 사용하고, 화학식 c로 표시되는 2-TNATA(4,4',4"-tris(N-naphthalen-2-yl)-N-phenylamino)-triphenylamine)을 정공주입층 물질로 사용하고, 화학식 d로 표시되는 α-NPD(N,N'-di(naphthalene-1-yl)-N,N'-diphenylbenzidine)을 정공수송층 물질로 사용하여, 다음과 같은 구조를 갖는 유기발광소자를 제작하였다: ITO/2-TNATA(80nm)/ α-NPD(30nm)/화합물a+화합물b(30nm)/Alq3(30nm)/LiF(0.5nm) /Al(60nm).

[0557] 애노드는 코닝(Corning)사의 15Ω/cm² (1000Å) ITO 유리 기판을 50mm x 50mm x 0.7mm크기로 잘라서 아세톤 이소프로필 알콜과 순수물 속에서 각 15분 동안 초음파 세정한 후, 30분 동안 UV 오존 세정하여 사용하였다. 상기 기판 상부에 2-TANATA를 진공 증착하여 80nm 두께의 정공주입층을 형성하였다. 상기 정공주입층 상부에, α-NPD를 진공 증착하여 30nm 두께의 정공수송층을 형성하였다. 상기 정공수송층 상부에 화학식 a로 표시되는 호스트 화합물 a에 화학식 b로 표시되는 화합물 b를 8.0% 도핑하여 25nm두께의 발광층을 형성하였다. 이후, 상기 발광층 상부에 Alq3 화합물을 30nm의 두께로 진공증착하여 전자수송층을 형성하였다. 상기 전자수송층 상부에 LiF 0.5nm(전자주입층)과 Al 600nm(캐소드)를 순차적으로 진공증착하여, 도 1b에 도시된 바와 같은 유기발광소자를 제조하였다. 이를 비교샘플 1이라고 한다.

[0558] 본 실시예 및 이하의 실시예들에서는 디오브이사에서 제작한 EL 증착기를 사용하여 소자를 제작하였다.

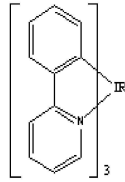
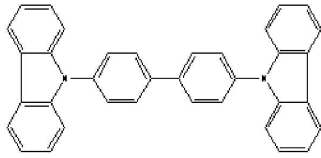
[0559] 비교예 2

[0560] 하기 화학식 e로 표시되는 화합물 e를 발광층 호스트 물질로 사용하고, 하기화학식 b로 표시되는 화합물 b를 도판트 물질로 사용하고, 화학식 c로 표시되는 2-TNATA(4,4',4"-tris(N-naphthalen-2-yl)-N-phenylamino)-triphenylamine)을 정공주입층 물질로 사용하고, 화학식 d로 표시되는 α-NPD(N,N'-di(naphthalene-1-yl)-N,N'-diphenylbenzidine)을 정공수송층 물질로 사용하여, 다음과 같은 구조를 갖는 유기발광소자를 제작하였다: ITO/2-TNATA(80nm)/ α-NPD(30nm)/화합물e+화합물b(30nm)/Alq3(30nm)/LiF(0.5nm) /Al(60nm).

[0561] 애노드는 코닝(Corning)사의 15Ω/cm² (1000Å) ITO 유리 기판을 50mm x 50mm x 0.7mm크기로 잘라서 아세톤 이소프로필 알콜과 순수물 속에서 각 15분 동안 초음파 세정한 후, 30분 동안 UV 오존 세정하여 사용하였다. 상기 기판 상부에 2-TANATA를 진공 증착하여 80nm 두께의 정공주입층을 형성하였다. 상기 정공주입층 상부에, α-NPD를 진공 증착하여 30nm 두께의 정공수송층을 형성하였다. 상기 정공수송층 상부에 화학식 e로 표시되는 호스트 화합물 e에 화학식 b로 표시되는 화합물 b를 8.0% 도핑하여 25nm두께의 발광층을 형성하였다. 이후, 상기 발광층 상부에 Alq3 화합물을 30nm의 두께로 진공증착하여 전자수송층을 형성하였다. 상기 전자수송층 상부에 LiF 0.5nm(전자주입층)과 Al 600nm(캐소드)를 순차적으로 진공증착하여, 도 1b에 도시된 바와 같은 유기발광소자를 제조하였다. 이를 비교샘플 2이라고 한다.

[0562] <화학식 a>

<화학식 b>

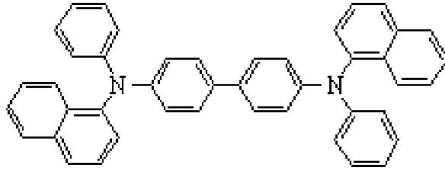
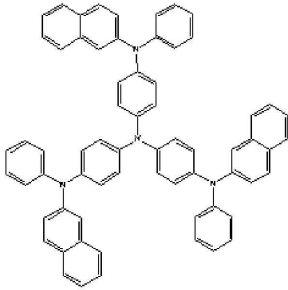


[0563]

[0564]

<화학식 c>

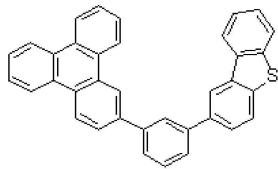
<화학식 d>



[0565]

[0566]

<화학식 e>



[0567]

[0568]

실시예 1~72

[0569]

상기 비교예 1 중, 발광층 화합물로서 화합물 a 대신 상기 합성예에 개시된 화합물 3 ~ 74을 호스트 화합물로 각각 이용한 것을 제외하고는 상기 비교예 1과 동일한 방법으로 ITO/DNTPD(80nm)/ α -NPD(30nm)/[호스트 화합물 3 ~ 74중 하나 및 도판트 화합물 b(8.0%)](25nm)/Alq3(30nm)/LiF(0.5nm)/Al(60nm)의 구조를 갖는 유기발광소자를 제조하였다. 이를 각각 샘플 1 내지 72라고 한다.

[0570]

평가예 1 : 비교샘플 1, 2 및 샘플 1~72의 발광 특성 평가

[0571]

비교샘플 1, 2 및 샘플 1~72에 대하여, Keithley SMU 235, PR650를 이용하여 구동전압, 발광 휘도, 발광 효율, 발광피크를 각각 평가하여, 그 결과를 하기 표 1에 나타내었다. 상기 샘플들은 516~524nm 범위에서 녹색 발광 피크값을 보여주었다.

[0572]

<표 1>

[0573]

시편 No.	호스트 화합물 No.	도판트 화합물 No.	구동 전압 [V]	휘도 [cd/m^2]	효율 [cd/A]	발광 피크 [nm]
비교 시편 1	a	b	6.8	2325	23.2	516
비교 시편 2	e	b	6.6	2637	26.3	516
1	3	b	6.1	3159	31.5	520
2	4	b	6.3	3071	30.7	520
3	5	b	5.9	2943	29.4	520
4	6	b	6.0	2974	29.7	520
5	7	b	6.4	3051	30.5	516
6	8	b	6.4	3218	32.1	516
7	9	b	5.8	3052	30.5	516

8	10	b	5.9	3184	31.8	520
9	11	b	6.3	3352	33.5	520
10	12	b	6.1	3370	33.7	524
11	13	b	6.1	3104	31.0	524
12	14	b	6.3	3048	30.4	524
13	15	b	5.9	2954	29.5	516
14	16	b	5.9	2850	28.5	516
15	17	b	5.7	2943	29.4	516
16	18	b	7.0	3180	31.8	524
17	19	b	6.5	3162	31.6	520
18	20	b	6.4	3274	32.7	520
19	21	b	6.4	2943	29.4	520
20	22	b	6.6	2945	29.4	520
21	23	b	6.1	3149	31.4	516
22	24	b	6.0	3180	31.8	516
23	25	b	6.1	3219	32.1	516
24	26	b	6.0	3092	30.9	520
25	27	b	6.2	3245	32.4	520
26	28	b	6.1	3251	32.5	520
27	29	b	6.2	3215	32.1	520
28	30	b	6.2	3084	30.8	516
29	31	b	5.8	3082	30.8	516
30	32	b	5.9	2914	29.1	524
31	33	b	5.7	2973	29.7	524
32	34	b	5.7	2864	28.6	524
33	35	b	6.2	2840	28.4	516
34	36	b	6.5	3081	30.8	516
35	37	b	6.1	3243	32.4	516
36	38	b	6.1	2894	28.9	516
37	39	b	6.2	2950	29.5	516
38	40	b	6.5	3054	30.5	516
39	41	b	6.0	3152	31.5	524
40	42	b	6.0	3256	32.5	516
41	43	b	5.7	3094	30.9	516
42	44	b	5.9	3320	33.2	524
43	45	b	6.2	3145	31.4	520
44	46	b	6.1	2947	29.4	520
45	47	b	6.2	2981	29.8	520
46	48	b	6.2	2681	26.8	520
47	49	b	5.5	3254	32.5	520
48	50	b	5.9	3279	32.7	520
49	51	b	5.8	3194	31.9	524
50	52	b	6.5	3370	33.7	524
51	53	b	6.4	3321	33.2	516
52	54	b	6.5	3438	34.3	520
53	55	b	6.2	3049	30.4	520
54	56	b	6.3	3085	30.8	520
55	57	b	6.3	2976	29.7	516
56	58	b	6.4	2931	29.3	516
57	59	b	6.1	3040	30.4	520
58	60	b	6.1	3186	31.8	520
59	61	b	5.8	3167	31.6	520
60	62	b	5.8	3043	30.4	524
61	63	b	5.9	3275	32.7	524
62	64	b	5.9	3048	30.4	524
63	65	b	5.7	2941	29.4	520
64	66	b	6.1	2904	29.0	516

65	67	b	6.2	3046	30.4	516
66	68	b	6.1	3185	31.8	516
67	69	b	6.2	3174	31.7	516
68	70	b	5.9	2950	29.5	520
69	71	b	5.8	2948	29.4	520
70	72	b	5.9	3384	33.8	524
71	73	b	6.0	3047	30.4	524
72	74	b	6.0	3283	32.8	520

[0574] 상기 표 1에 보여지는 바와 같이 샘플 1 내지 72는 비교샘플 1, 2에 비하여 향상된 발광 특성을 나타내었다.

[0575] 비교예 3

[0576] 상기 화학식 a로 표시되는 화합물 a를 발광층 호스트 물질로 사용하고, 하기화학식 f로 표시되는 화합물 f를 도판트 물질로 사용하고, 화학식 c로 표시되는 2-TNATA(4,4',4"-tris(N-naphthalen-2-yl)-N-phenylamino)-triphenylamine)을 정공주입층 물질로 사용하고, 화학식 d로 표시되는 α-NPD(N,N'-di(naphthalene-1-yl)-N,N'-diphenylbenzidine)을 정공수송층 물질로 사용하여, 다음과 같은 구조를 갖는 유기발광소자를 제작하였다: ITO/2-TNATA(80nm)/α-NPD(30nm)/화합물a+화합물f(30nm)/Alq3(30nm)/LiF(0.5nm) /Al(60nm).

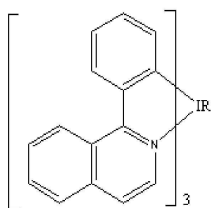
[0577] 애노드는 코닝(Corning)사의 15Ω/cm² (1000Å) ITO 유리 기판을 50mm x 50mm x 0.7mm크기로 잘라서 아세톤 이소프로필 알콜과 순수물 속에서 각 15분 동안 초음파 세정한 후, 30분 동안 UV 오존 세정하여 사용하였다. 상기 기판 상부에 2-TANATA를 진공 증착하여 80nm 두께의 정공주입층을 형성하였다. 상기 정공주입층 상부에, α-NPD를 진공 증착하여 30nm 두께의 정공수송층을 형성하였다. 상기 정공수송층 상부에 화학식 a로 표시되는 호스트 화합물 a에 화학식 f로 표시되는 화합물 f를 10.0% 도핑하여 25nm두께의 발광층을 형성하였다. 이후, 상기 발광층 상부에 Alq3 화합물을 30nm의 두께로 진공증착하여 전자수송층을 형성하였다. 상기 전자수송층 상부에 LiF 0.5nm(전자주입층)과 Al 600nm(캐소드)를 순차적으로 진공증착하여, 도 1b에 도시된 바와 같은 유기발광소자를 제조하였다. 이를 비교샘플 3이라고 한다.

[0578] 비교예 4

[0579] 상기 화학식 e로 표시되는 화합물 e를 발광층 호스트 물질로 사용하고, 하기화학식 f로 표시되는 화합물 f를 도판트 물질로 사용하고, 화학식 c로 표시되는 2-TNATA(4,4',4"-tris(N-naphthalen-2-yl)-N-phenylamino)-triphenylamine)을 정공주입층 물질로 사용하고, 화학식 d로 표시되는 α-NPD(N,N'-di(naphthalene-1-yl)-N,N'-diphenylbenzidine)을 정공수송층 물질로 사용하여, 다음과 같은 구조를 갖는 유기발광소자를 제작하였다: ITO/2-TNATA(80nm)/α-NPD(30nm)/화합물e+화합물f(30nm)/Alq3(30nm)/LiF(0.5nm) /Al(60nm).

[0580] 애노드는 코닝(Corning)사의 15Ω/cm² (1000Å) ITO 유리 기판을 50mm x 50mm x 0.7mm크기로 잘라서 아세톤 이소프로필 알콜과 순수물 속에서 각 15분 동안 초음파 세정한 후, 30분 동안 UV 오존 세정하여 사용하였다. 상기 기판 상부에 2-TANATA를 진공 증착하여 80nm 두께의 정공주입층을 형성하였다. 상기 정공주입층 상부에, α-NPD를 진공 증착하여 30nm 두께의 정공수송층을 형성하였다. 상기 정공수송층 상부에 화학식 e로 표시되는 호스트 화합물 e에 화학식 f로 표시되는 화합물 f를 10.0% 도핑하여 25nm두께의 발광층을 형성하였다. 이후, 상기 발광층 상부에 Alq3 화합물을 30nm의 두께로 진공증착하여 전자수송층을 형성하였다. 상기 전자수송층 상부에 LiF 0.5nm(전자주입층)과 Al 600nm(캐소드)를 순차적으로 진공증착하여, 도 1b에 도시된 바와 같은 유기발광소자를 제조하였다. 이를 비교샘플 4이라고 한다.

[0581] <화학식 f>



[0582]

[0583] 실시예 73-76

[0584] 상기 비교예 3 중, 발광층 화합물로서 화합물 a 대신 상기 합성예에 개시된 화합물 19, 38, 67, 및 73을 호스트 화합물로 각각 이용한 것을 제외하고는 상기 비교예 3와 동일한 방법으로 ITO/DNTPD(80nm)/ α -NPD(30nm)/[호스트 화합물 19, 38, 67, 및 73 중 하나 및 도판트 화합물 f(10.0%)](25nm)/Alq3(30nm)/LiF(0.5nm)/Al(60nm)의 구조를 갖는 유기발광소자를 제조하였다. 이를 각각 샘플 73 내지 76이라고 한다.

[0585] 평가예 2 : 비교샘플 3, 4 및 샘플 73~76의 발광 특성 평가

[0586] 비교샘플 3, 4 및 샘플 73~76에 대하여, Keithley SMU 235, PR650를 이용하여 구동전압, 발광 휘도, 발광 효율, 발광피크를 각각 평가하여, 그 결과를 하기 표 2에 나타내었다. 상기 샘플들은 610~616nm 범위에서 적색 발광피크값을 보여주었다.

[0587] <표 2>

시편 No.	호스트 화합물 No.	도판트 화합물 No.	구동 전압 [V]	휘도 [cd/m^2]	효율 [cd/A]	발광 피크 [nm]
비교 시편 3	a	f	6.8	795	7.9	616
비교 시편 4	e	f	6.5	869	8.6	610
73	19	f	6.1	985	9.8	616
74	38	f	5.8	962	9.6	616
75	67	f	5.8	897	8.9	610
76	73	f	5.9	953	9.5	610

[0589] 상기 표 2에 보여지는 바와 같이 샘플 73 내지 76은 비교샘플3, 4에 비하여 향상된 발광 특성을 나타내었다.

[0590] 비교예 5

[0591] 상기 화학식 a로 표시되는 화합물 a를 발광층 호스트 물질로 사용하고, 하기화학식 g로 표시되는 화합물 g를 도판트 물질로 사용하고, 화학식 c로 표시되는 2-TNATA(4,4',4"-tris(N-naphthalen-2-yl)-N-phenylamino)-triphenylamine)을 정공주입층 물질로 사용하고, 화학식 d로 표시되는 α -NPD(N,N'-di(naphthalene-1-yl)-N,N'-diphenylbenzidine)을 정공수송층 물질로 사용하여, 다음과 같은 구조를 갖는 유기발광소자를 제작하였다: ITO/2-TNATA(80nm)/ α -NPD(30nm)/화합물a+화합물g(30nm)/Alq3(30nm)/LiF(0.5nm) /Al(60nm).

[0592] 애노드는 코닝(Corning)사의 $15\Omega/\text{cm}^2$ (1000Å) ITO 유리 기판을 50mm x 50mm x 0.7mm크기로 잘라서 아세톤 이소프로필 알콜과 순수물 속에서 각 15분 동안 초음파 세정한 후, 30분 동안 UV 오존 세정하여 사용하였다. 상기 기판 상부에 2-TANATA를 진공 증착하여 80nm 두께의 정공주입층을 형성하였다. 상기 정공주입층 상부에, α -NPD를 진공 증착하여 30nm 두께의 정공수송층을 형성하였다. 상기 정공수송층 상부에 화학식 a로 표시되는 호스트 화합물 a에 화학식 g로 표시되는 화합물 g를 8.0% 도핑하여 25nm두께의 발광층을 형성하였다. 이후, 상기 발광층 상부에 Alq3 화합물을 30nm의 두께로 진공증착하여 전자수송층을 형성하였다. 상기 전자수송층 상부에 LiF 0.5nm(전자주입층)과 Al 600nm(캐소드)를 순차적으로 진공증착하여, 도 1b에 도시된 바와 같은 유기발광소자를 제조하였다. 이를 비교샘플 5이라고 한다.

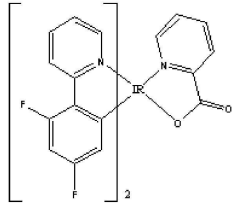
[0593] 비교예 6

[0594] 상기 화학식 h로 표시되는 화합물 h를 발광층 호스트 물질로 사용하고, 하기화학식 g로 표시되는 화합물 g를 도판트 물질로 사용하고, 화학식 c로 표시되는 2-TNATA(4,4',4"-tris(N-naphthalen-2-yl)-N-phenylamino)-triphenylamine)을 정공주입층 물질로 사용하고, 화학식 d로 표시되는 α -NPD(N,N'-di(naphthalene-1-yl)-N,N'-diphenylbenzidine)을 정공수송층 물질로 사용하여, 다음과 같은 구조를 갖는 유기발광소자를 제작하였다: ITO/2-TNATA(80nm)/ α -NPD(30nm)/화합물h+화합물g(30nm)/Alq3(30nm)/LiF(0.5nm) /Al(60nm).

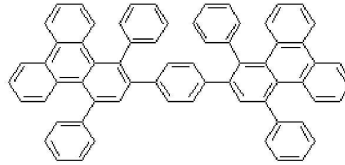
[0595] 애노드는 코닝(Corning)사의 $15\Omega/\text{cm}^2$ (1000Å) ITO 유리 기판을 50mm x 50mm x 0.7mm크기로 잘라서 아세톤 이소프로필 알콜과 순수물 속에서 각 15분 동안 초음파 세정한 후, 30분 동안 UV 오존 세정하여 사용하였다. 상기 기판 상부에 2-TANATA를 진공 증착하여 80nm 두께의 정공주입층을 형성하였다. 상기 정공주입층 상부에, α -NPD를 진공 증착하여 30nm 두께의 정공수송층을 형성하였다. 상기 정공수송층 상부에 화학식 h로 표시되는 호스트 화합물 h에 화학식 g로 표시되는 화합물 g를 8.0% 도핑하여 25nm두께의 발광층을 형성하였다. 이후, 상기

발광층 상부에 Alq3 화합물을 30nm의 두께로 진공증착하여 전자수송층을 형성하였다. 상기 전자수송층 상부에 LiF 0.5nm(전자주입층)과 Al 600nm(캐소드)를 순차적으로 진공증착하여, 도 1b에 도시된 바와 같은 유기발광소자를 제조하였다. 이를 비교샘플 6이라고 한다.

[0596] <화학식 g>



<화학식 h>



[0597]

[0598] 실시예 77~81

[0599] 상기 비교예 5 중, 발광층 화합물로서 화합물 a 대신 상기 합성예에 개시된 화합물 29, 34, 57, 68, 및 72을 호스트 화합물로 각각 이용한 것을 제외하고는 상기 비교예 3과 동일한 방법으로 ITO/DNTPD(80nm)/α-NPD(30nm)/[호스트 화합물 29, 34, 57, 68 및 72 중 하나 및 도판트 화합물 g(8.0%)](25nm)/Alq3(30nm)/LiF(0.5nm)/Al(60nm)의 구조를 갖는 유기발광소자를 제조하였다. 이를 각각 샘플 77 내지 81이라고 한다.

[0600] 평가예 3 : 비교샘플 5, 6 및 샘플 77~81의 발광 특성 평가

[0601] 비교샘플 5, 6 및 샘플 77~81에 대하여, Keithley SMU 235, PR650를 이용하여 구동전압, 발광 휘도, 발광 효율, 발광피크를 각각 평가하여, 그 결과를 하기 표 2에 나타내었다. 상기 샘플들은 471~475nm 범위에서 청색 발광피크값을 보여주었다.

[0602] <표 3>

[0603]

시편 No.	호스트 화합물 No.	도판트 화합물 No.	구동 전압 [V]	휘도 [cd/m ²]	효율 [cd/A]	발광 피크 [nm]
비교 시편 5	a	g	6.7	662	6.6	475
비교 시편 6	h	g	6.4	774	7.7	475
77	29	g	6.1	851	8.5	471
78	34	g	5.8	873	8.7	471
79	57	g	5.7	834	8.3	471
80	68	g	5.5	920	9.2	471
81	72	g	5.7	909	9.0	471

[0604] 상기 표 3에 보여지는 바와 같이 샘플 79 내지 83은 비교샘플 5, 6에 비하여 향상된 발광 특성을 나타내었다.

도면의 간단한 설명

[0605] 도 1a 내지 1c는 각각, 본 발명을 따르는 유기발광소자의 일 구현예의 구조를 간략하게 나타낸 단면도이다.

도면

도면1a

제2전극
전자주입층
전자수송층
발광층
정공주입층
제1전극

도면1b

제2전극
전자주입층
전자수송층
발광층
정공수송층
정공주입층
제1전극

도면1c

제2전극
전자주입층
전자수송층
정공저지층
발광층
정공수송층
정공주입층
제1전극

专利名称(译)	有机发光化合物和具有该有机发光化合物的有机发光器件		
公开(公告)号	KR1020110043270A	公开(公告)日	2011-04-27
申请号	KR1020090100311	申请日	2009-10-21
申请(专利权)人(译)	氛围有限公司凯		
当前申请(专利权)人(译)	氛围有限公司凯		
[标]发明人	KIM BOK YOUNG 김복영 AHN JUNG BOK 안중복 CHIN SUNG MIN 진성민 LEE JEA SUNG 이재성 AHN DO HWAN 안도환 KANG JI SOUNG 강지승 PARK NO GIL 박노길 HAN KEUN HEE 한근희 SI SANG MAN 시상만		
发明人	김복영 안중복 진성민 이재성 안도환 강지승 박노길 한근희 시상만		
IPC分类号	C09K11/06 H01L51/54		
CPC分类号	C09K11/06 C07C2603/97 C09K2211/1011 C09K2211/1014 C09K2211/1025 H01L51/0061 H01L51/0062 H01L51/50 H01L51/5012		
外部链接	Espacenet		

摘要(译)

用途：提供一种有机发光化合物，当应用于有机发光器件时，其表现出优异的发光效率和发光亮度。组成：有机发光化合物由化学式1表示。在化学式1中，X1和X2各自独立地为共价键或-C(=O)-；Ar 1和Ar 2各自独立地为氢，氘，取代或未取代的C 6 -C 20芳基或取代或未取代的C 2 -C 20杂芳基；a是1-4的整数；R1是氢，氘，苯基或二苯基。

제2전극
전자주입층
전자수송층
발광층
정공수송층
정공주입층
제1전극