



(19) 대한민국특허청(KR)  
(12) 공개특허공보(A)

(11) 공개번호 10-2014-0083897  
(43) 공개일자 2014년07월04일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)  
C09K 11/06 (2006.01) C07D 403/14 (2006.01)  
H01L 51/50 (2006.01)  
(21) 출원번호 10-2013-0162263  
(22) 출원일자 2013년12월24일  
심사청구일자 없음  
(30) 우선권주장  
1020120153389 2012년12월26일 대한민국(KR)

(71) 출원인  
에스에프씨 주식회사  
충청북도 청원군 오창읍 과학산업5로 89  
(72) 발명자  
박상우  
서울특별시 종로구 창신8길 31 (창신동)  
이세진  
대전광역시 동구 성동로7번길 52-1 (자양동)  
(74) 대리인  
특허법인충현

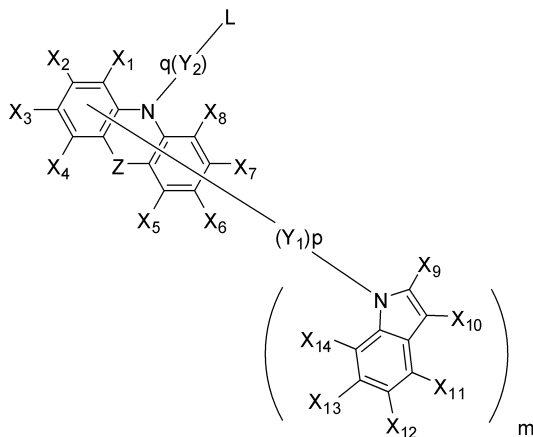
전체 청구항 수 : 총 13 항

(54) 발명의 명칭 유기발광 화합물 및 이를 포함하는 유기전계발광소자

(57) 요약

본 발명은 하기 [화학식 1]로 표시되는 유기발광 화합물 및 이를 포함하는 유기전계발광소자에 관한 것으로서, 본 발명에 따른 유기발광 화합물은 발광 효율 및 재료의 수명 특성이 우수하여 발광효율이 우수하면서 동시에 전력효율 및 장수명 특성을 갖는 유기전계발광소자를 제조할 수 있다.

[화학식 1]



대표도 - 도1

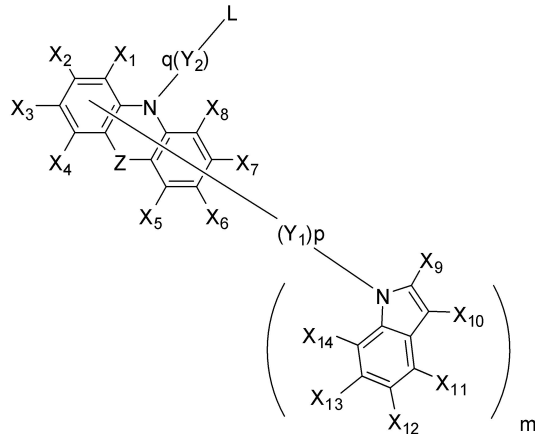
|    |
|----|
| 80 |
| 70 |
| 60 |
| 50 |
| 40 |
| 30 |
| 20 |
| 10 |

## 특허청구의 범위

### 청구항 1

하기 [화학식 1]로 표시되는 유기발광 화합물:

[화학식 1]



상기 [화학식 1]에서,

L은 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 60의 아릴기 및 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 60의 헤테로아릴기 중에서 선택되며,

$Y_1$  및  $Y_2$ 는 단일결합이거나 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬렌기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 30의 알케닐렌기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 30의 알키닐렌기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 30의 시클로알킬렌기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 50의 아릴렌기 및 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 50의 헤테로아릴렌기 중에서 선택되는 연결기이고, p 및 q는 0 내지 5의 정수이고, 상기 p 및 q가 2 이상인 경우 복수 개의  $Y_1$ 과  $Y_2$ 는 각각 서로 동일하거나 상이하하며,

Z는 단일 결합 또는  $CR_1R_2$ , O, S,  $SiR_3R_4$  및  $NR_5$  중에서 선택되는 어느 하나이고, 상기  $R_1$  내지  $R_5$ 는 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 40의 아릴기 및 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 30의 헤테로아릴기 중에서 선택되고, 서로 또는 인접한 치환기와 결합하여 포화 또는 불포화 고리를 형성할 수 있으며,

$X_1$  내지  $X_{14}$ 는 서로 동일하거나 상이하고 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠기, 시아노기, 히드록실기, 니트로기, 아미디노기, 히드라진, 하드라존, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염, 인산이나 이의 염, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 30의 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 60의 아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 60의 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알콕시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬아미노기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴아미노기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬실릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴실릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 50의 아릴알킬아미노기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 60의 아릴싸이오기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 30의 알케닐기 및 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 30의 알키닐기 중에서 선택되고, 상기  $X_1$  내지  $X_{14}$ 는 각각 인접한 치환기와 서로 결합하여 포화 또는 불포화 고리를 형성할 수 있고,

m은 0 내지 8의 정수이다.

### 청구항 2

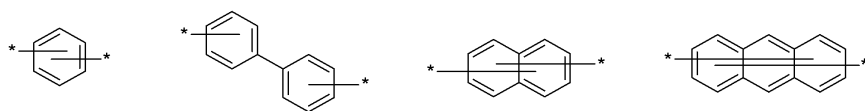
제1항에 있어서,

상기 L, Y<sub>1</sub>, Y<sub>2</sub>, R<sub>1</sub> 내지 R<sub>5</sub> 및 X<sub>1</sub> 내지 X<sub>14</sub>가 더 치환되는 경우 탄소수 1 내지 30의 알킬기, 탄소수 3 내지 30의 시클로알킬기, 탄소수 6 내지 50의 아릴기, 탄소수 3 내지 50의 헤테로아릴기, 탄소수 1 내지 30의 알콕시기, 탄소수 6 내지 30의 아릴옥시기, 탄소수 1 내지 20의 알킬아미노기, 탄소수 6 내지 30의 아릴아미노기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 20의 알킬실릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴실릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 50의 아릴알킬아미노기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 50의 알케닐기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 50의 알키닐기, 히드록실기, 니트로기, 아미디노기, 히드라진, 히드라존, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염, 인산이나 이의 염, 치환 또는 비치환된 탄소수 5내지 60의 아릴싸이오기, 시아노기, 할로젠기 및 중소수 중에서 선택되는 1종 이상으로 치환되는 것을 특징으로 하는 유기발광 화합물.

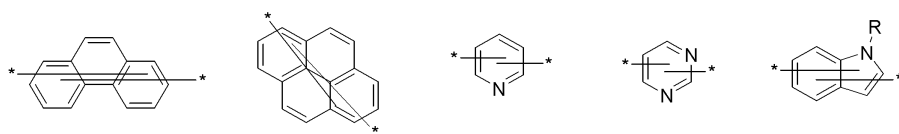
### 청구항 3

제1항에 있어서,

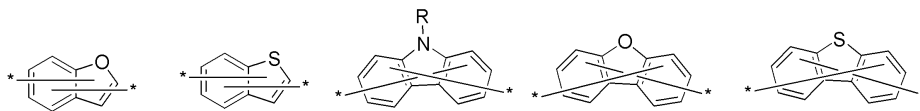
상기 Y<sub>1</sub> 및 Y<sub>2</sub>는 하기 [구조식 C1] 내지 [구조식 C14] 중에서 선택되는 어느 하나인 것을 특징으로 하는 유기발광 화합물:



[구조식 C1]      [구조식 C2]      [구조식 C3]      [구조식 C4]



[구조식 C5]      [구조식 C6]      [구조식 C7]      [구조식 C8]      [구조식 C9]



[구조식 C10]      [구조식 C11]      [구조식 C12]      [구조식 C13]      [구조식 C14]

상기 [구조식C1] 내지 [구조식 C14]에서,

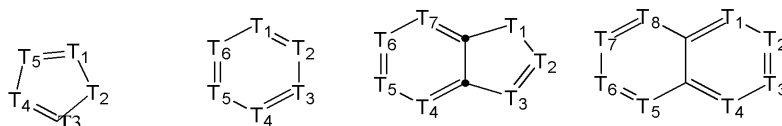
각 구조식 내 고리의 탄소자리에는 수소 또는 중수소가 결합될 수 있으며, 상기 R은 상기 [화학식 1]에서의 X<sub>1</sub> 내지 X<sub>14</sub>의 정의와 동일하다.

### 청구항 4

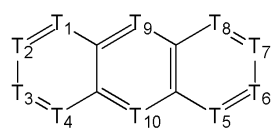
제1항에 있어서,

상기 Y<sub>2</sub>에 연결되는 L은 하기 [구조식 1] 내지 [구조식 10] 중에서 선택되는 어느 하나인 것을 특징으로 하는 유기발광 화합물:

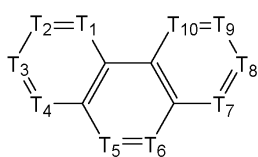
[구조식 1]      [구조식 2]      [구조식 3]      [구조식 4]



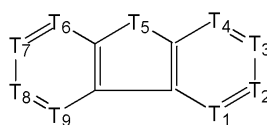
[구조식 5]



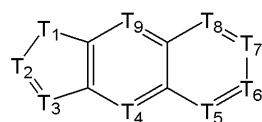
[구조식 6]



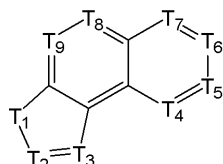
[구조식 7]



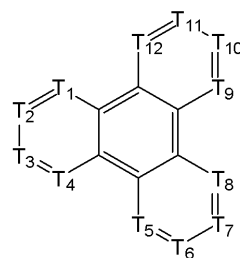
[구조식 8]



[구조식 9]



[구조식 10]



상기 [구조식 1] 내지 [구조식 10]에서,

T<sub>1</sub> 내지 T<sub>12</sub>은 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로, C(R<sub>41</sub>), C(R<sub>42</sub>)(R<sub>43</sub>), N, N(R<sub>44</sub>), O 및 S 중에서 선택되며, 상기 R<sub>41</sub> 내지 R<sub>44</sub>은 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 30의 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 30의 아릴기 및 치환 또는 비치환되고 이종 원자로 O, N, S 또는 P를 갖는 탄소수 2 내지 30의 헤테로아릴기 중에서 선택된다.

## 청구항 5

제1항에 있어서,

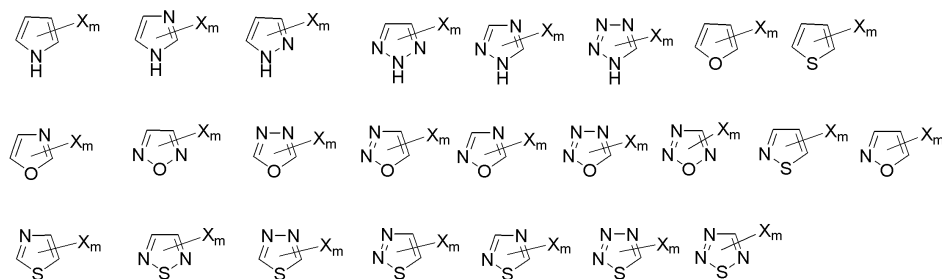
상기 L은 적어도 하나 이상의 질소를 포함하는 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 60의 헤테로아릴기인 것을 특징으로 하는 유기발광 화합물.

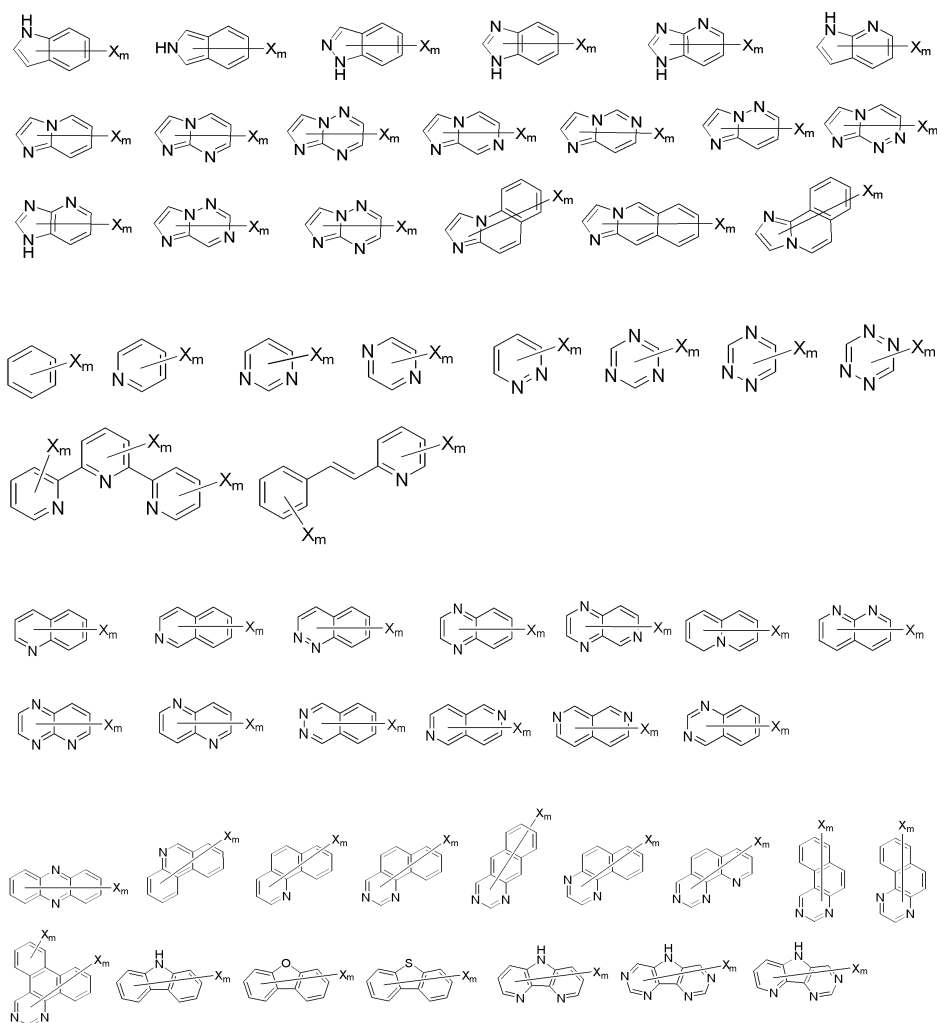
## 청구항 6

제4항에 있어서,

상기 [구조식 1] 내지 [구조식 10]은 하기 [구조식 11] 중에서 선택되는 어느 하나인 것을 특징으로 하는 유기발광 화합물:

[구조식 11]





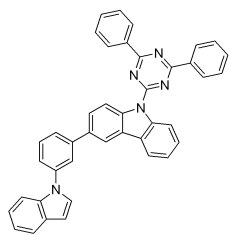
상기 [구조식 11]에서,

X는 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 30의 아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 30의 알케닐기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 20의 알키닐기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 30의 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 30의 시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알콕시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬티옥시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 30의 아릴티옥시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬아민기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 30의 아릴기, 치환 또는 비치환되고 이종원자로 O, N, S 또는 P를 갖는 탄소수 2 내지 30의 헤테로아릴기, 시아노기, 니트로기 및 할로젠기로 중에서 선택되고, m 은 1 내지 11의 정수이며, m이 2 이상인 경우 복수 개의 X는 서로 동일하거나 상이하다.

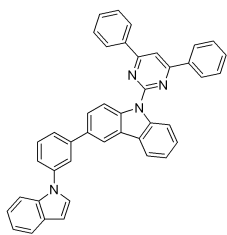
## 청구항 7

제1항에 있어서,

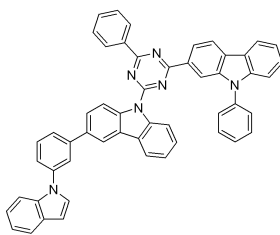
상기 [화학식 1]은 하기 [화학식 2] 내지 [화학식 228]로 표시되는 화합물 중에서 선택되는 어느 하나인 것을 특징으로 하는 유기발광 화합물:



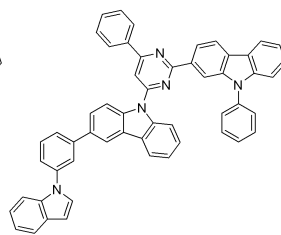
[화학식 2]



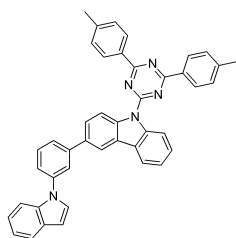
[화학식 3]



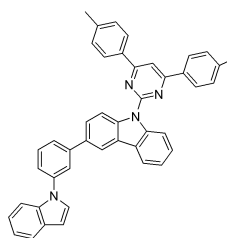
[화학식 4]



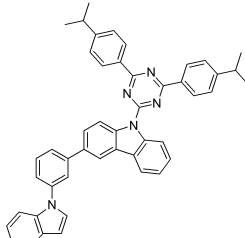
[화학식 5]



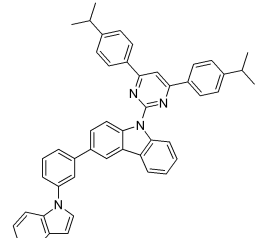
[화학식 6]



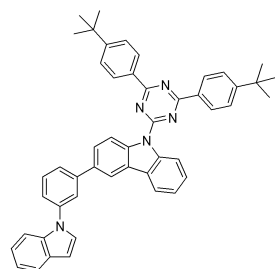
[화학식 7]



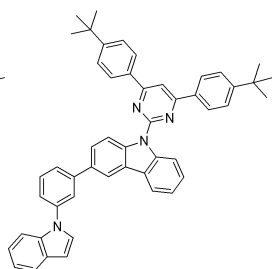
[화학식 8]



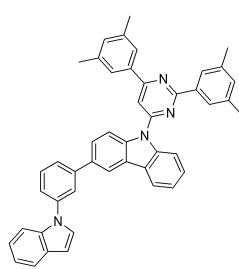
[화학식 9]



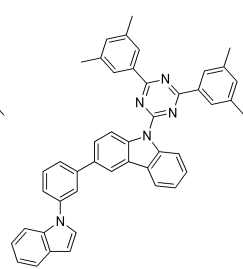
[화학식 10]



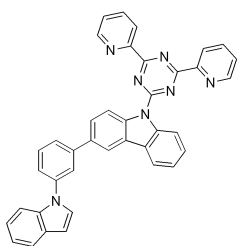
[화학식 11]



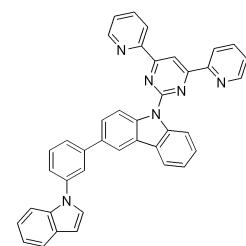
[화학식 12]



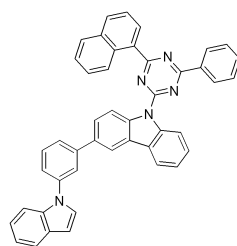
[화학식 13]



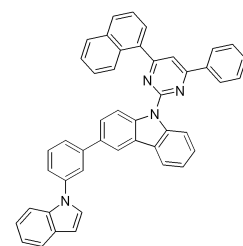
[화학식 14]



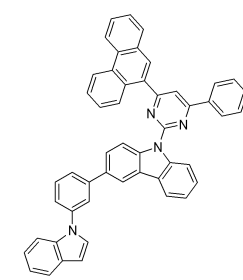
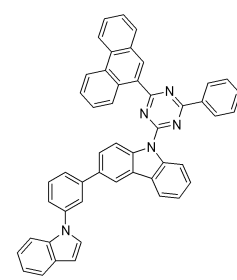
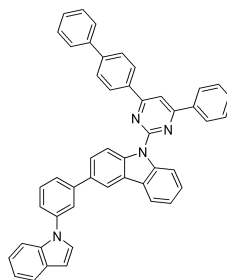
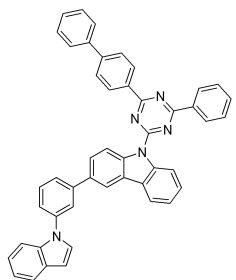
[화학식 15]



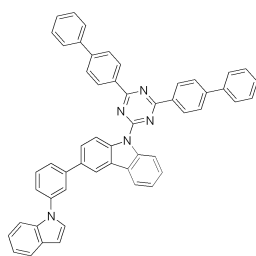
[화학식 16]



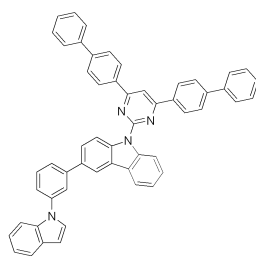
[화학식 17]



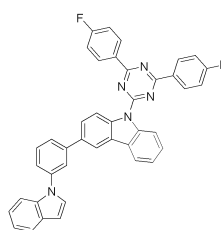
[화학식 18]



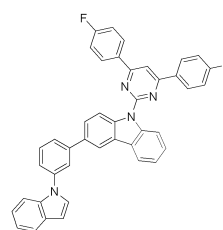
[화학식 19]



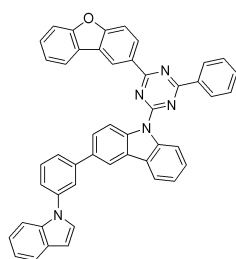
[화학식 20]



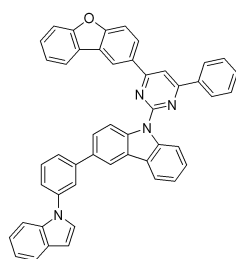
[화학식 21]



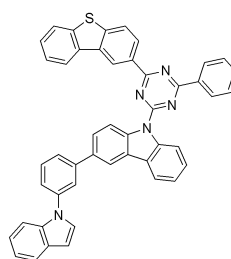
[화학식 22]



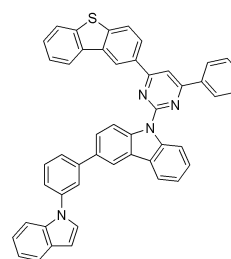
[화학식 23]



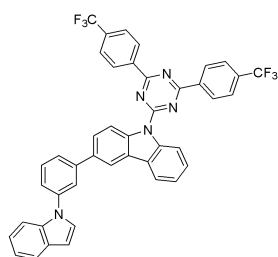
[화학식 24]



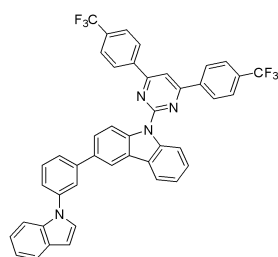
[화학식 25]



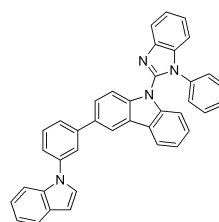
[화학식 26]



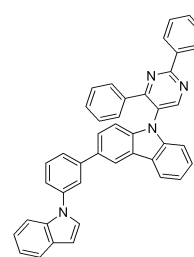
[화학식 27]



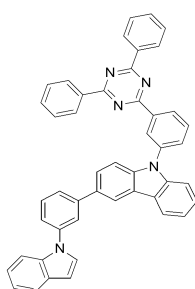
[화학식 28]



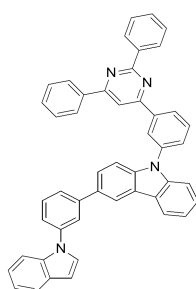
[화학식 29]



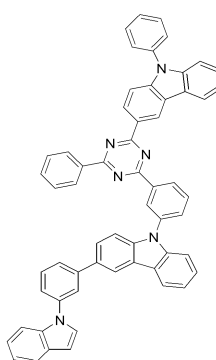
[화학식 30]



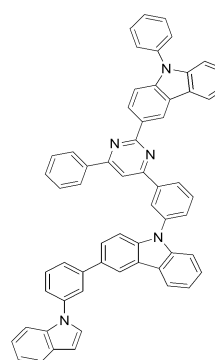
[화학식 31]



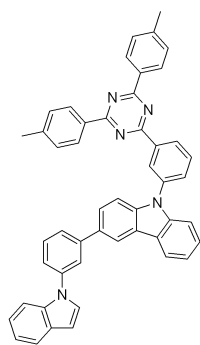
[화학식 32]



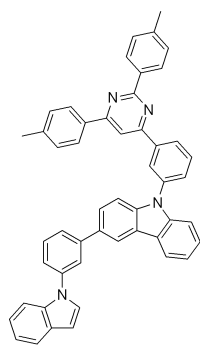
[화학식 33]



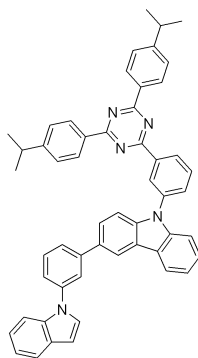
[화학식 34]



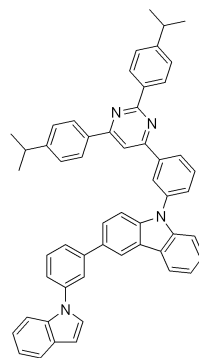
[화학식 35]



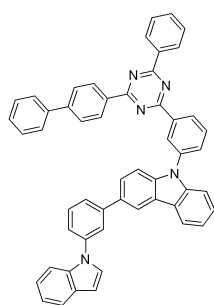
[화학식 36]



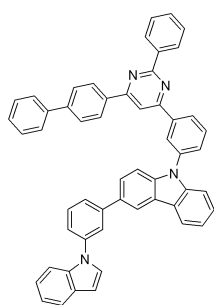
[화학식 37]



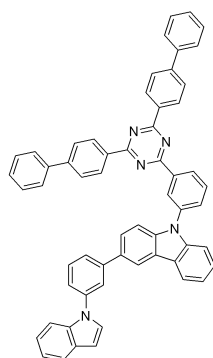
[화학식 38]



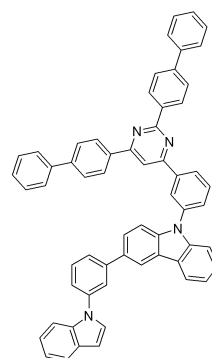
[화학식 39]



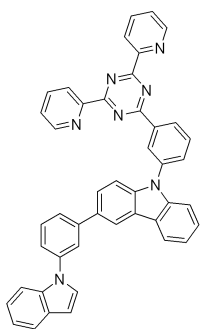
[화학식 40]



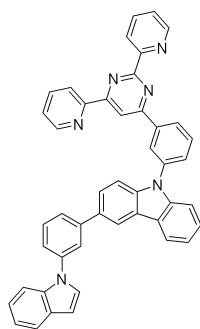
[화학식 41]



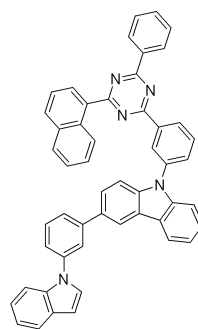
[화학식 42]



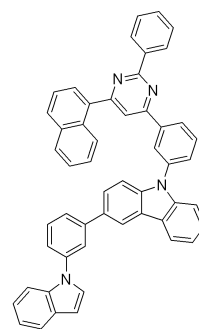
[화학식 43]



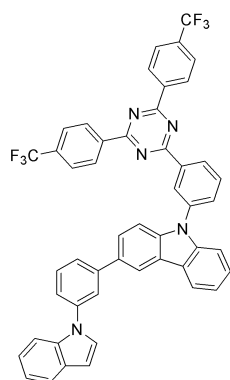
[화학식 44]



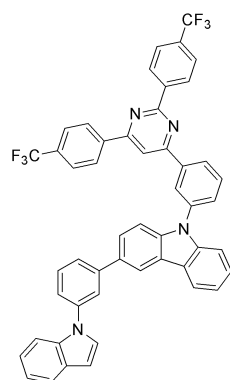
[화학식 45]



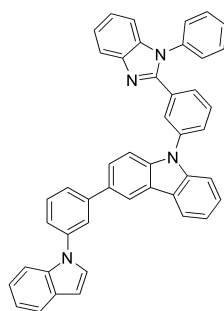
[화학식 46]



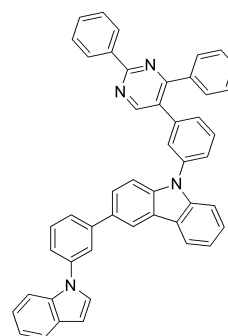
[화학식 47]



[화학식 48]

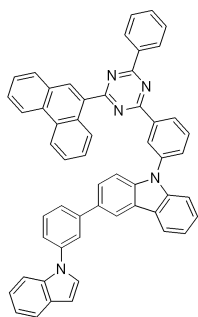


[화학식 49]

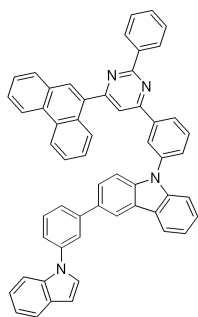




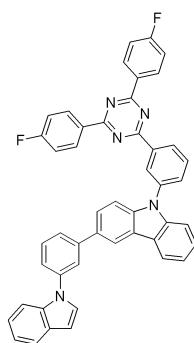
[화학식 50]



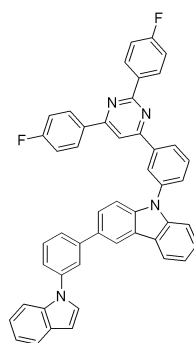
[화학식 51]



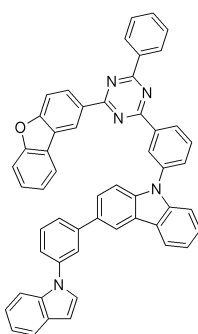
[화학식 52]



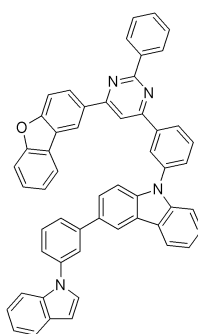
[화학식 53]



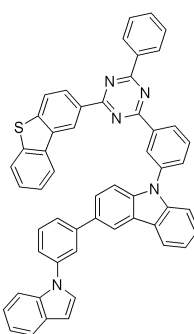
[화학식 54]



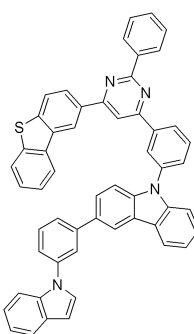
[화학식 55]



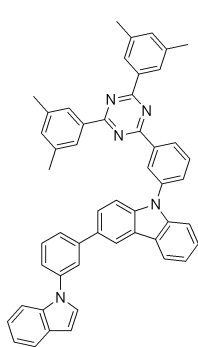
[화학식 56]



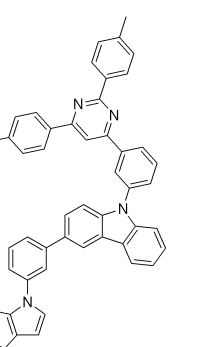
[화학식 57]



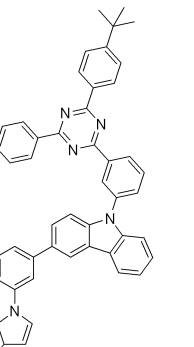
[화학식 58]



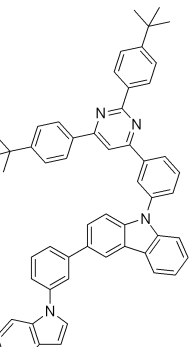
[화학식 59]



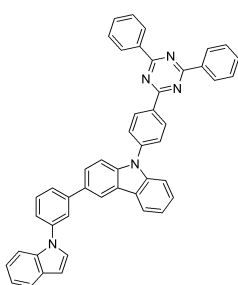
[화학식 60]



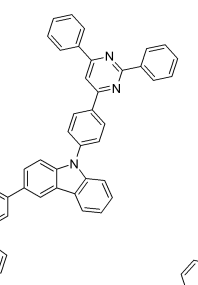
[화학식 61]



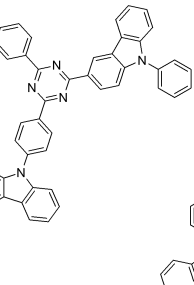
[화학식 62]



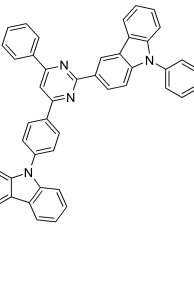
[화학식 63]



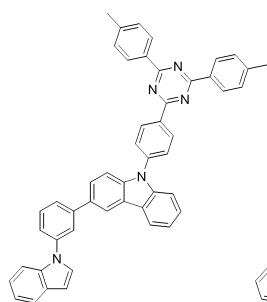
[화학식 64]



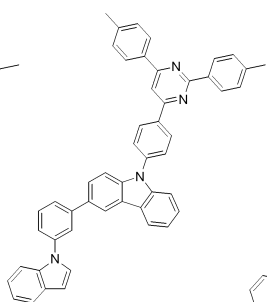
[화학식 65]



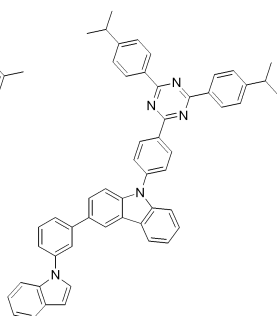
[화학식 66]



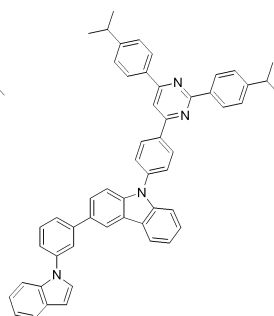
[화학식 67]



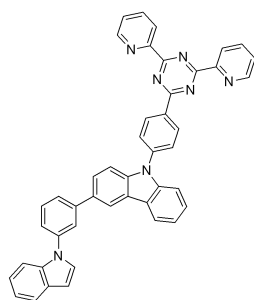
[화학식 68]



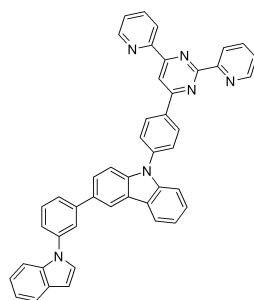
[화학식 69]



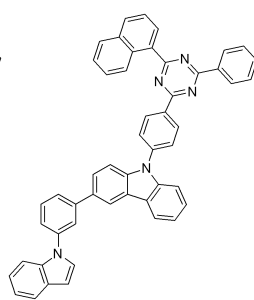
[화학식 70]



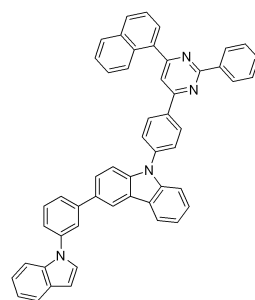
[화학식 71]



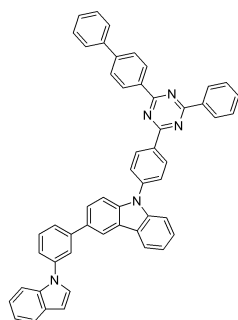
[화학식 72]



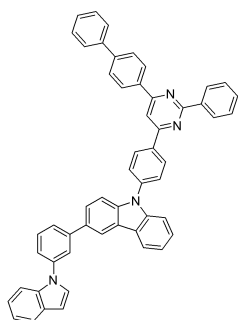
[화학식 73]



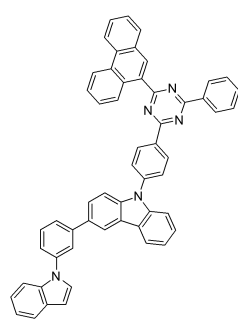
[화학식 74]



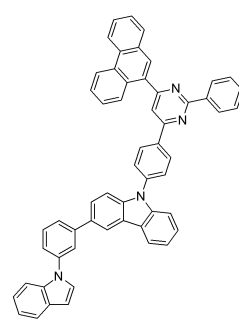
[화학식 75]



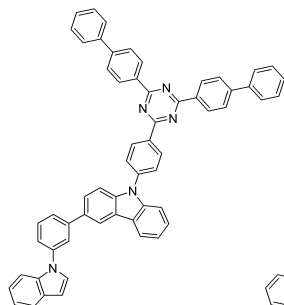
[화학식 76]



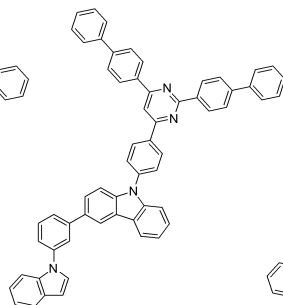
[화학식 77]



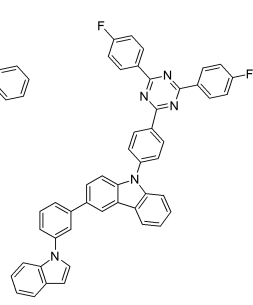
[화학식 78]



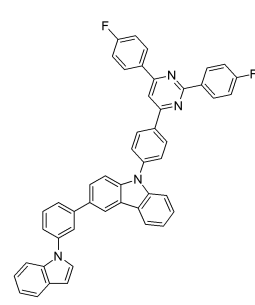
[화학식 79]



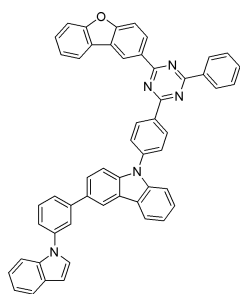
[화학식 80]



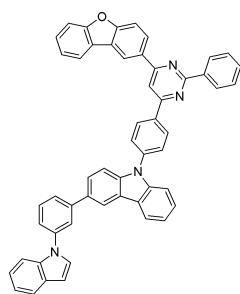
[화학식 81]



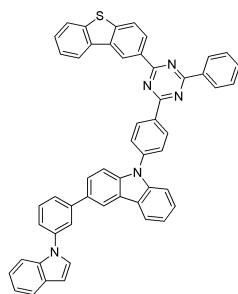
[화학식 82]



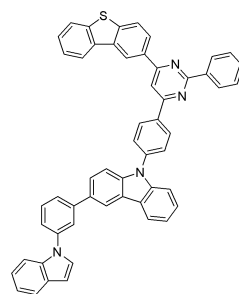
[화학식 83]



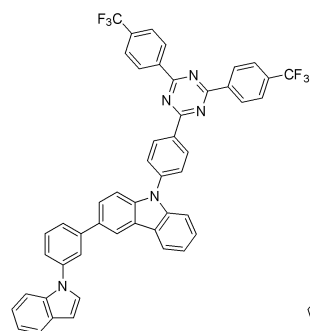
[화학식 84]



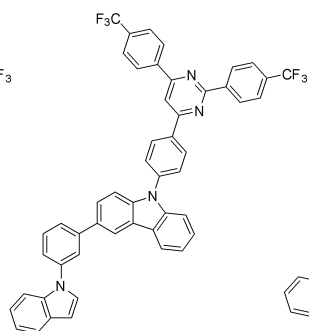
[화학식 85]



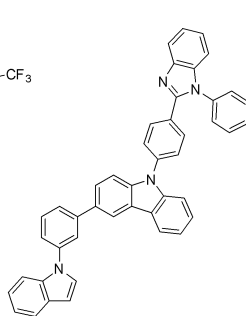
[화학식 86]



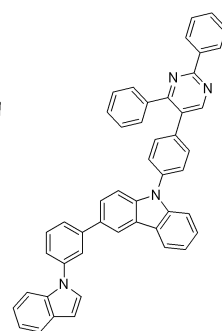
[화학식 87]



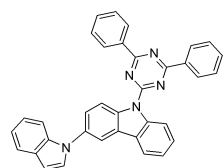
[화학식 88]



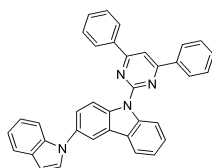
[화학식 89]



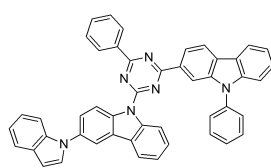
[화학식 90]



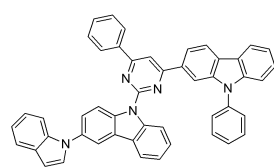
[화학식 91]



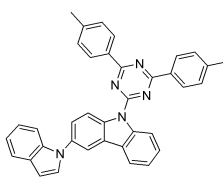
[화학식 92]



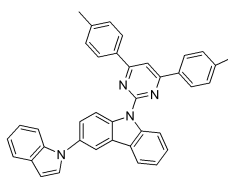
[화학식 93]



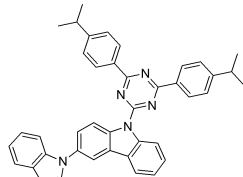
[화학식 94]



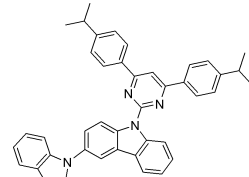
[화학식 95]



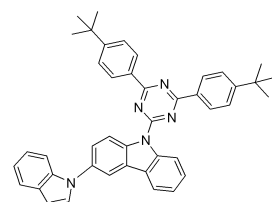
[화학식 96]



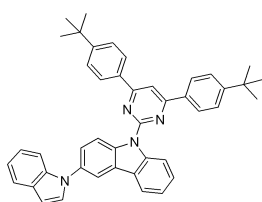
[화학식 97]



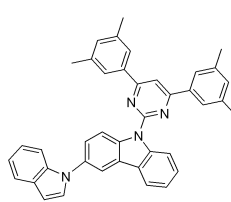
[화학식 98]



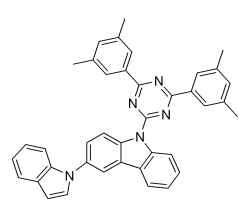
[화학식 99]



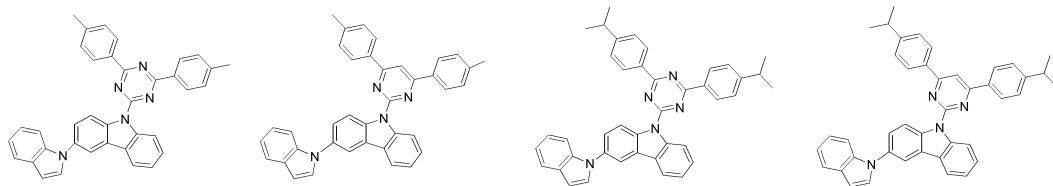
[화학식 100]



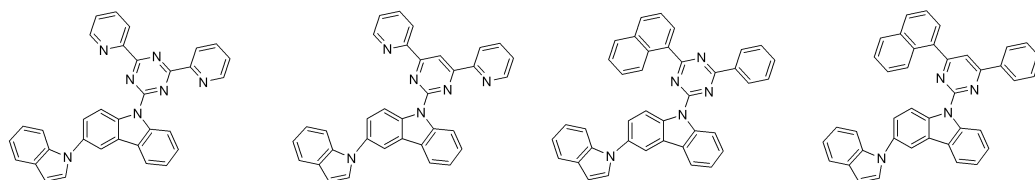
[화학식 101]



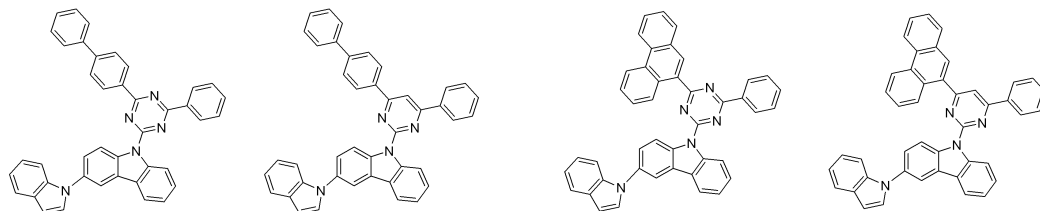
[화학식 102] [화학식 103] [화학식 104] [화학식 105]



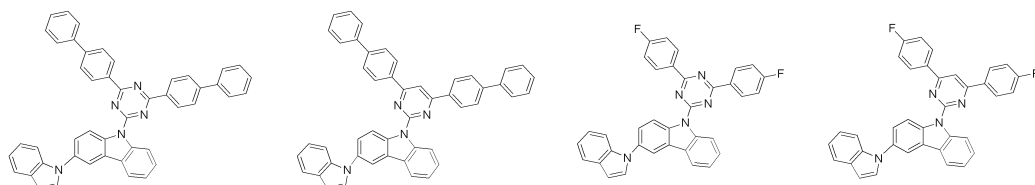
[화학식 106] [화학식 107] [화학식 108] [화학식 109]



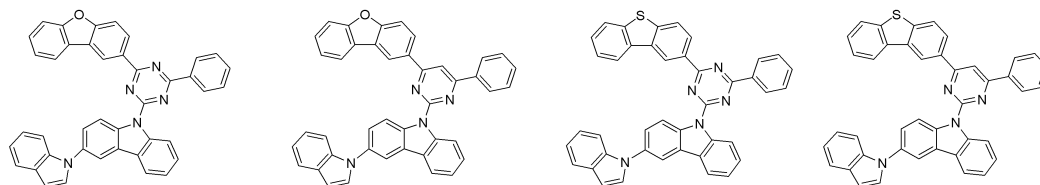
[화학식 110] [화학식 111] [화학식 112] [화학식 113]



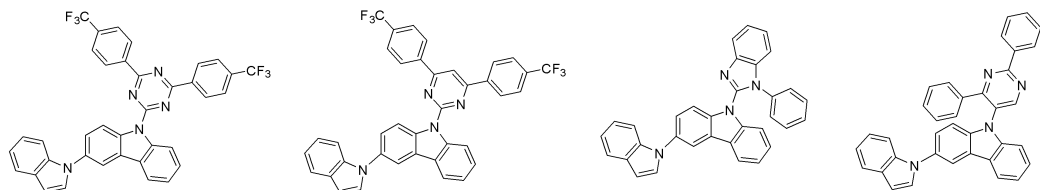
[화학식 114] [화학식 115] [화학식 116] [화학식 117]



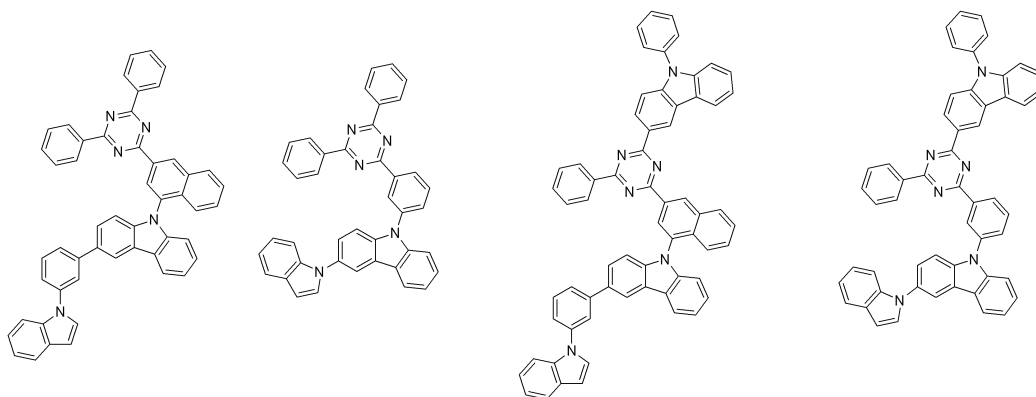
[화학식 118] [화학식 119] [화학식 120] [화학식 121]



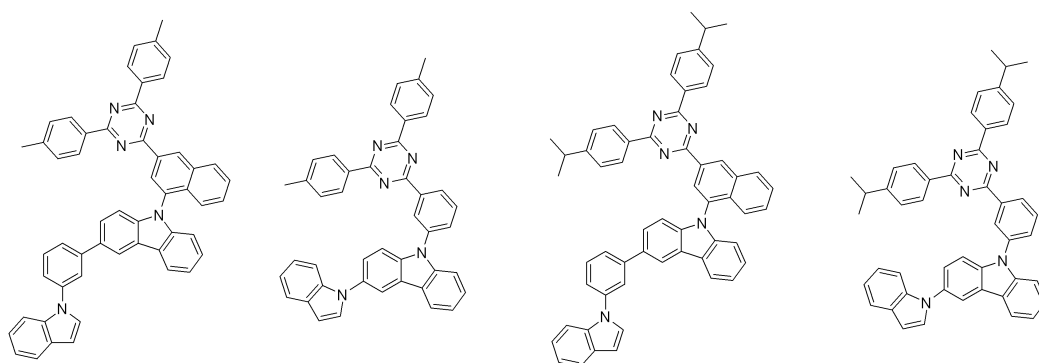
[화학식 122] [화학식 123] [화학식 124] [화학식 125]



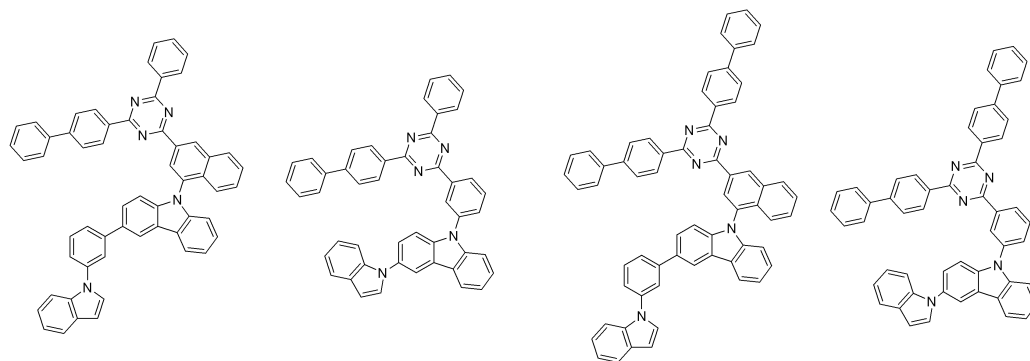
[화학식 126]      [화학식 127]      [화학식 128]      [화학식 129]



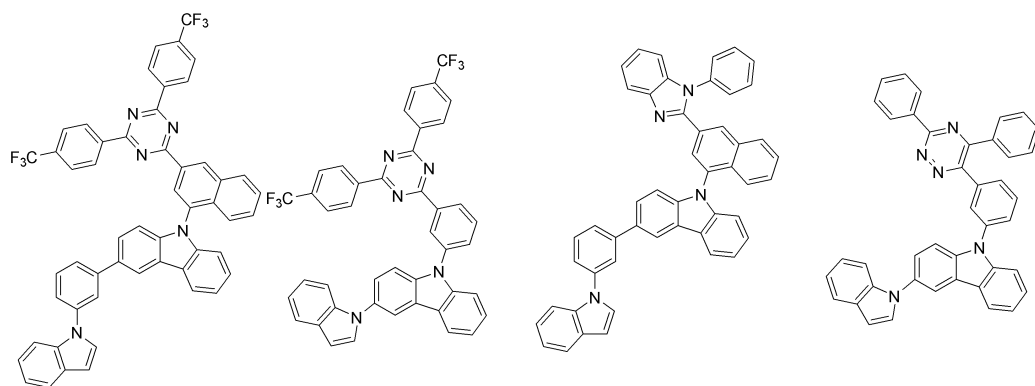
[화학식 130]      [화학식 131]      [화학식 132]      [화학식 133]



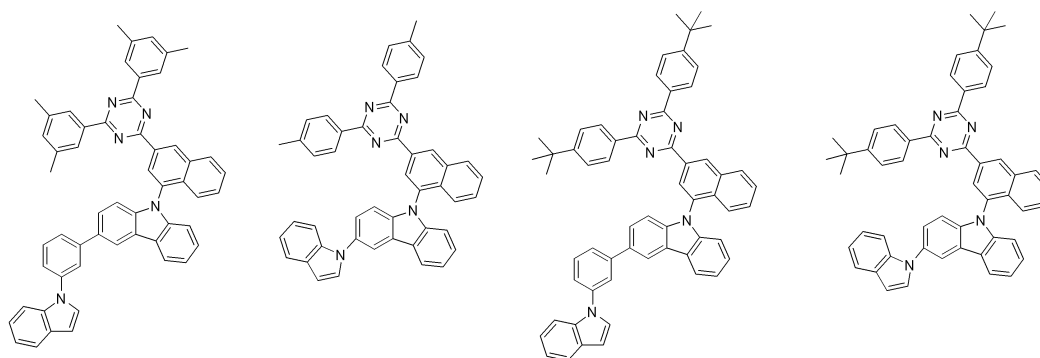
[화학식 134]      [화학식 135]      [화학식 136]      [화학식 137]



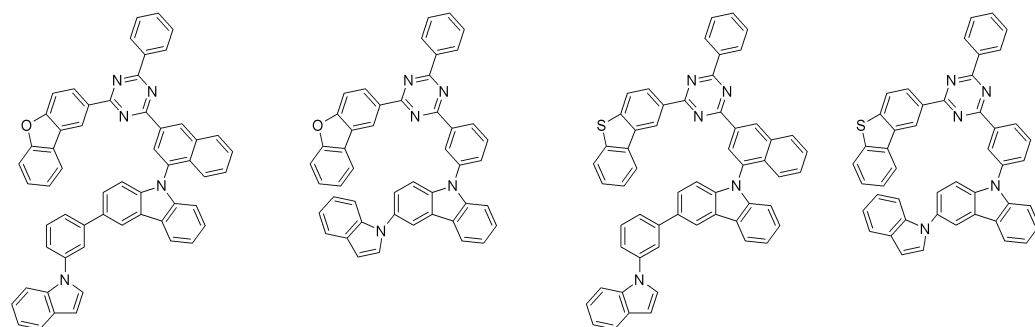
[화학식 138]      [화학식 139]      [화학식 140]      [화학식 141]



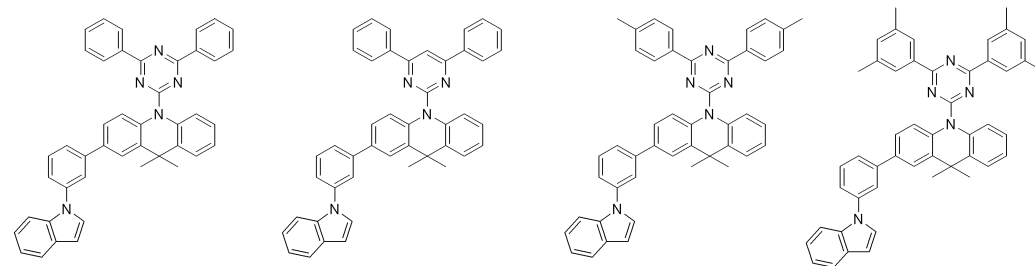
[화학식 142]      [화학식 143]      [화학식 144]      [화학식 145]



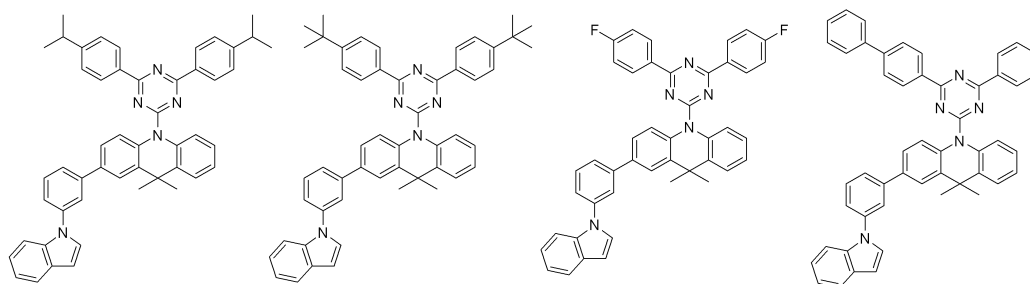
[화학식 146]      [화학식 147]      [화학식 148]      [화학식 149]



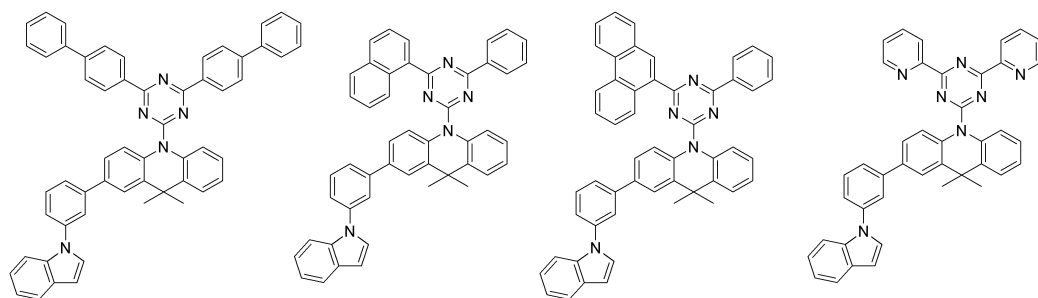
[화학식 150]      [화학식 151]      [화학식 152]      [화학식 153]



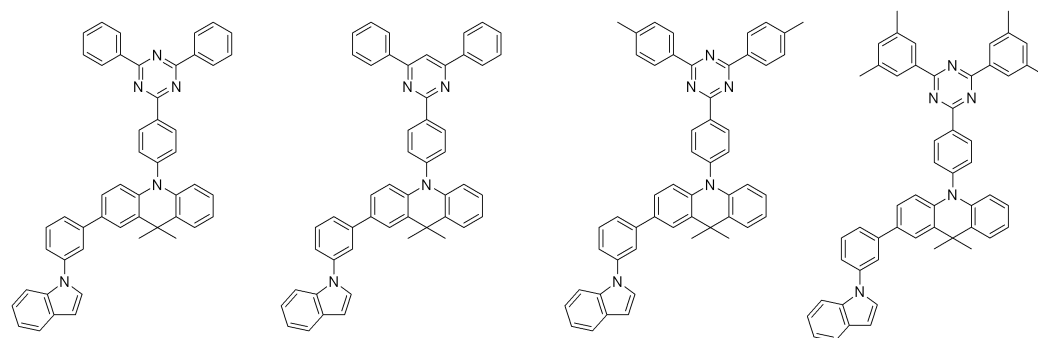
[화학식 154]      [화학식 155]      [화학식 156]      [화학식 157]



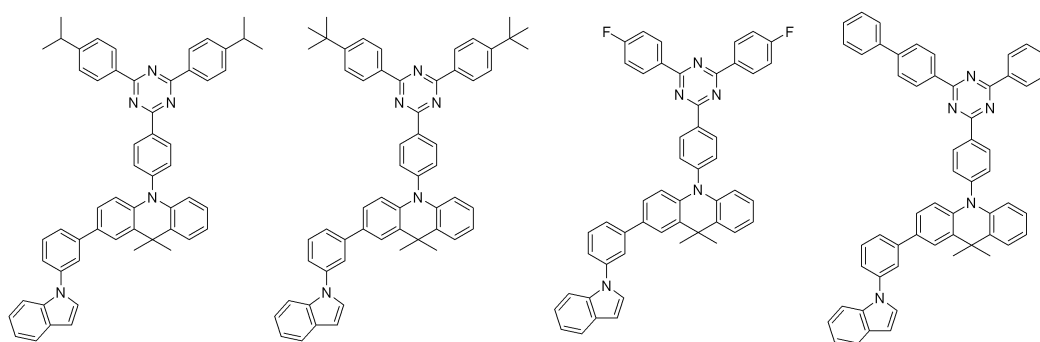
[화학식 158]      [화학식 159]      [화학식 160]      [화학식 161]



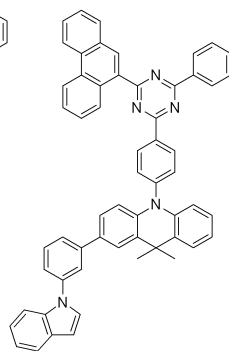
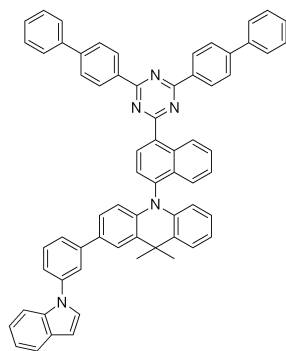
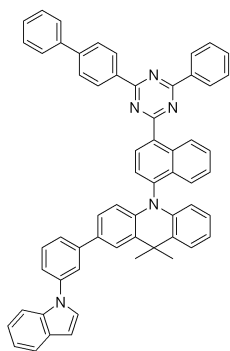
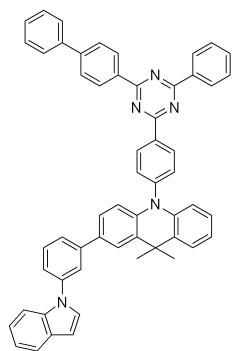
[화학식 162]      [화학식 163]      [화학식 164]      [화학식 165]



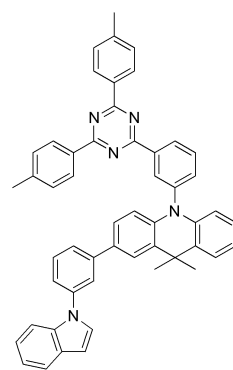
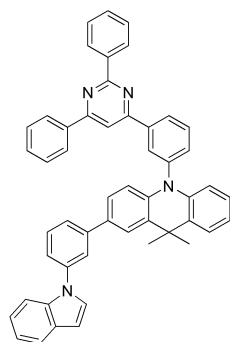
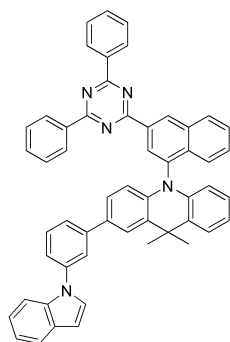
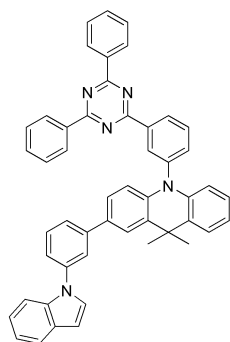
[화학식 166]      [화학식 167]      [화학식 168]      [화학식 169]



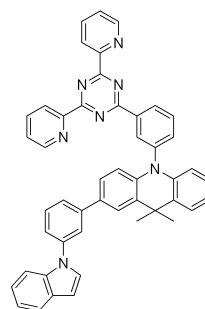
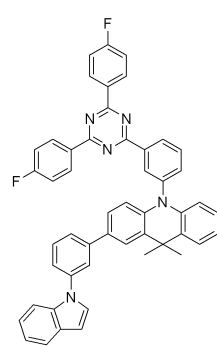
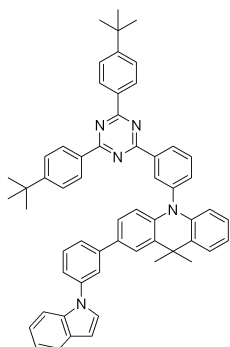
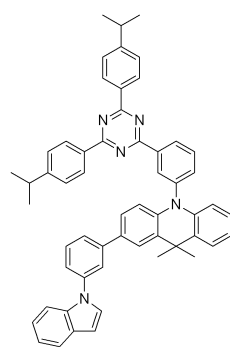
[화학식 170]      [화학식 171]      [화학식 172]      [화학식 173]



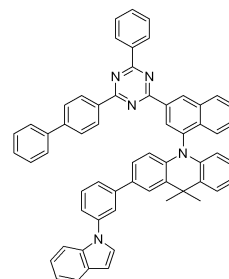
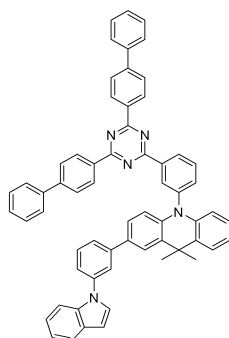
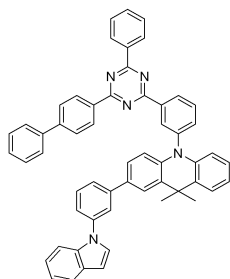
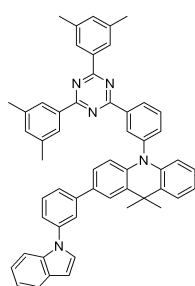
[화학식 174]      [화학식 175]      [화학식 176]      [화학식 177]



[화학식 178]      [화학식 179]      [화학식 180]      [화학식 181]

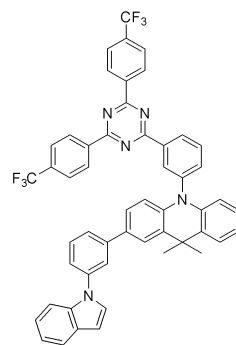
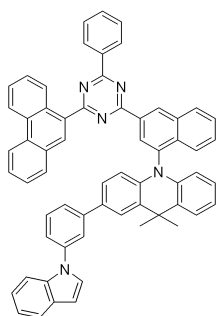
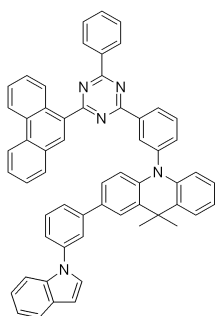
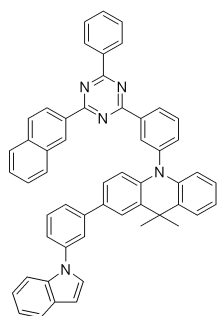


[화학식 182]      [화학식 183]      [화학식 184]      [화학식 185]

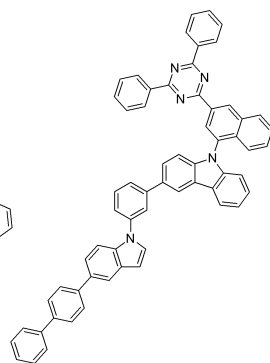
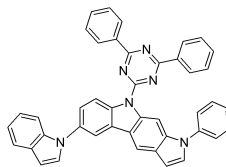
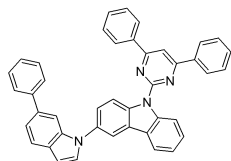
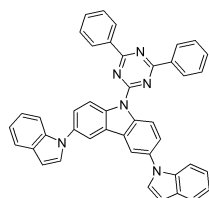




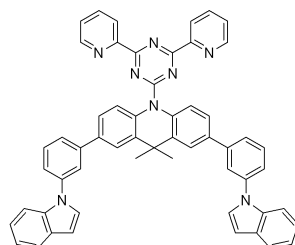
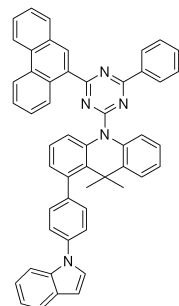
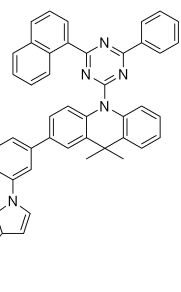
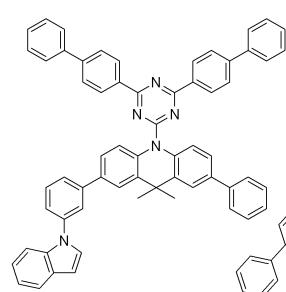
[화학식 186]      [화학식 187]      [화학식 188]      [화학식 189]



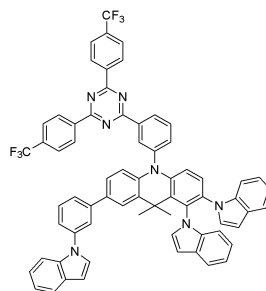
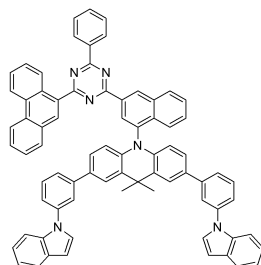
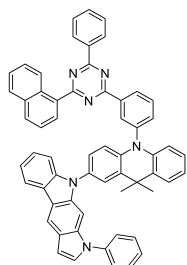
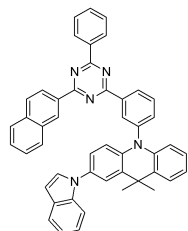
[화학식 190]      [화학식 191]      [화학식 192]      [화학식 193]



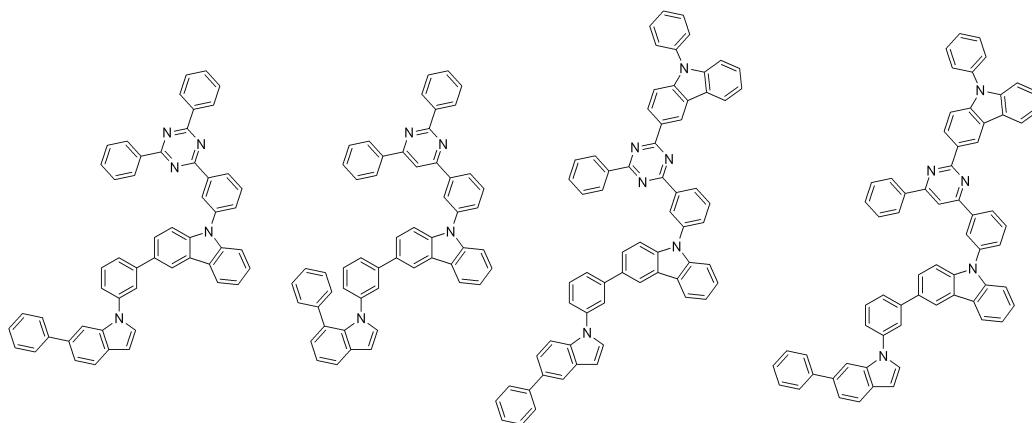
[화학식 194]      [화학식 195]      [화학식 196]      [화학식 197]



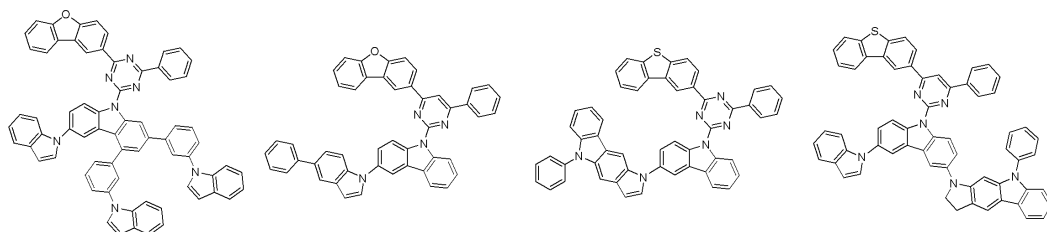
[화학식 198]      [화학식 199]      [화학식 200]      [화학식 201]



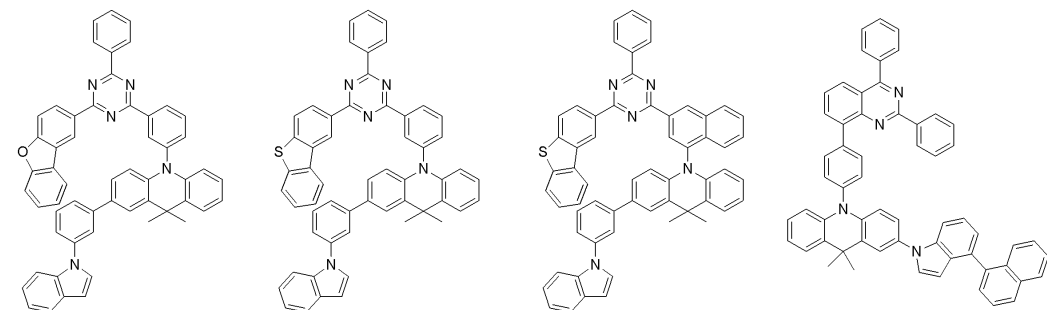
[화학식 202]      [화학식 203]      [화학식 204]      [화학식 205]



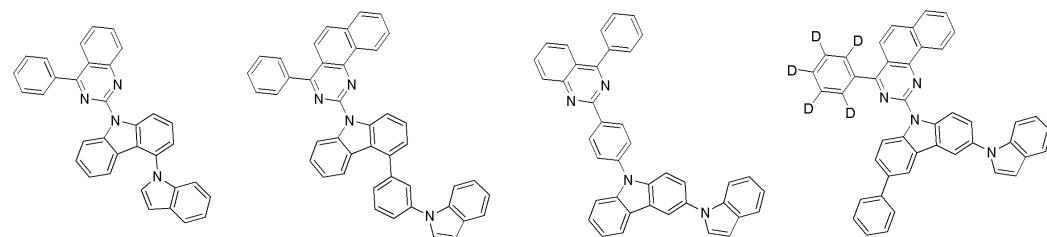
[화학식 206]      [화학식 207]      [화학식 208]      [화학식 209]



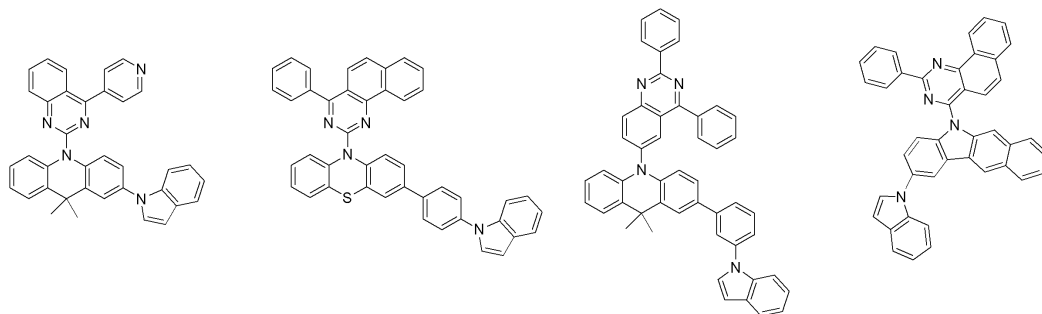
[화학식 210]      [화학식 211]      [화학식 212]      [화학식 213]



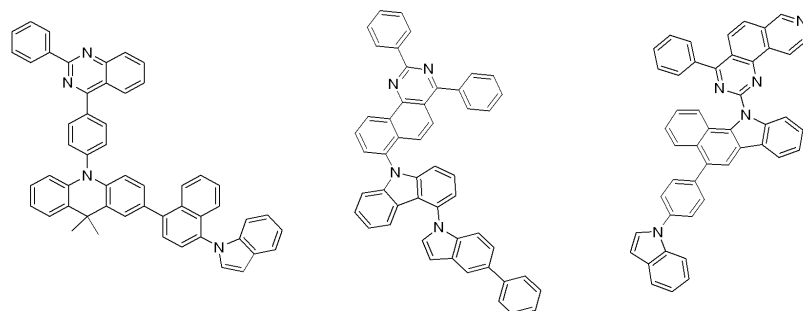
[화학식 214]      [화학식 215]      [화학식 216]      [화학식 217]



[화학식 218] [화학식 219] [화학식 220] [화학식 221]



[화학식 222] [화학식 223] [화학식 224] [화학식 225]



[화학식 226] [화학식 227] [화학식 228]

#### 청구항 8

제1항 내지 제7항 중 어느 한 항에 따른 유기발광 화합물을 최소한 1개 이상 포함하는 것을 특징으로 하는 유기 전계발광소자용 유기 박막층.

#### 청구항 9

제8항에 있어서,

상기 유기 박막층은 상기 [화학식 1]로 표시되는 유기발광 화합물을 호스트로하고, 도펀트 화합물을 최소한 1개 이상 더 포함하는 것을 특징으로 하는 유기박막층.

#### 청구항 10

애노드; 상기 애노드에 대향되는 캐소드; 및 상기 애노드 및 캐소드 사이에 개재되는 제8항에 따른 유기 박막층;을 포함하는 유기전계발광소자.

#### 청구항 11

제10항에 있어서,

상기 유기전계발광소자는 애노드와 캐소드 사이에 발광층, 정공주입층, 정공수송층, 정공저지층, 전자수송층, 전자주입층 및 전자저지층으로 이루어진 군으로부터 선택된 하나 이상의 층을 더 포함하고,

상기 발광층, 정공주입층, 정공수송층, 정공저지층, 전자수송층, 전자주입층 및 전자저지층 중의 하나가 제8항에 따른 유기 박막층인 것을 특징으로 하는 유기전계발광소자.

#### 청구항 12

제11항에 있어서,

상기 발광층이 제8항에 따른 유기 박막층인 것을 특징으로 하는 유기전계 발광소자.

**청구항 13**

제11항에 있어서,

상기 유기전계발광소자는 청색, 적색 또는 녹색 발광을 하는 유기 발광층을 하나 더 이상 포함하여 백색 발광을 하는 것을 특징으로 하는 유기전계발광소자.

**명세서****기술 분야**

[0001] 본 발명은 유기발광 화합물 및 이를 포함하는 유기전계발광소자에 관한 것이다.

**배경 기술**

[0002] 최근 자체 발광형으로 저전압 구동이 가능한 유기전계발광소자는 평판 표시 소자의 주류인 액정디스플레이에 비해, 시야각, 대조비 등이 우수하고 백라이트가 불필요하며 경량 및 박형이 가능하고 소비전력 측면에서도 유리하며 색 재현 범위가 넓어 차세대 표시소자로서 주목받고 있다.

[0003] 유기전계발광소자는 전자 주입 전극(음극)과 정공 주입 전극(양극) 사이에 형성된 유기 발광층에 전하를 주입하면 전자와 정공이 쌍을 이룬 후 소멸하면서 빛을 내는 소자이다.

[0004] 유기전계발광소자는 플라스틱 같이 휘 수 있는 투명 기판 위에도 소자를 형성할 수 있을 뿐 아니라, 플라스마 디스플레이 패널이나 무기전계 발광 디스플레이에 비해 10 V 이하의 낮은 전압에서 구동이 가능하고, 전력 소모가 비교적 적으며, 색감이 뛰어나다는 장점이 있다. 또한, 유기 전계발광소자는 녹색, 청색, 적색의 3 가지 색을 나타낼 수가 있어 차세대 풍부한 색 디스플레이 소자로 많은 관심의 대상이 되고 있다.

[0005] 유기전계발광소자에서 발광효율을 결정하는 가장 중요한 요인은 발광 재료이다. 발광 재료로는 현재 형광 재료가 널리 사용되고 있으나, 발광 메커니즘 상 인광 재료의 개발이 이론적으로 발광 효율을 보다 개선시킬 수 있는 방법 중의 하나이고, 이에 따라 현재까지 다양한 인광 재료에 대해서 개발이 이루어지고 있으며, 특히 인광 발광 호스트 재료로는 현재까지 CBP가 가장 널리 알려져 있고, BAlq 유도체를 호스트로 이용한 유기전계발광소자가 공지되어 있다.

[0006] 그러나, 인광 발광 재료를 사용한 유기전계발광소자는 형광 발광 재료를 사용한 소자에 비해 전류 효율이 상당히 높으나, 인광 발광 재료의 호스트로 BAlq, CBP 등의 재료를 사용할 경우, 형광재료를 사용한 소자에 비해 구동 전압이 높아져 전력 효율면에서 큰 이점이 없고, 또한, 소자의 수명 측면에서도 만족할만한 수준이 되질 못하여 더욱 안정적이고, 고성능의 호스트 재료의 개발이 요구되고 있다.

**발명의 내용****해결하려는 과제**

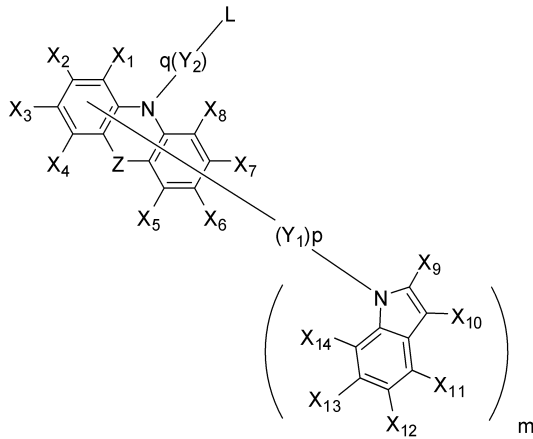
[0007] 따라서, 본 발명이 해결하고자 하는 과제는 상기 문제점을 해결하고자 하는 것으로서, 종래 재료보다 발광 효율이 우수하면서도 동시에 향상된 전력효율과 장수명 특성을 갖는 유기발광 화합물을 제공하는 것이다.

[0008] 또한, 본 발명은 상기 유기발광 화합물을 발광 재료로 채용하여 고효율 및 장수명의 유기전계발광소자를 제공하고자 한다.

**과제의 해결 수단**

[0009] 본 발명은 상기 과제를 해결하기 위하여, 하기 [화학식 1]로 표시되는 유기발광 화합물을 제공하고, 상기 유기발광 화합물을 유기발광 화합물을 최소한 1개 이상 포함하는 것을 특징으로 하는 유기전계발광소자용 유기 박막층을 제공한다.

[0010] [화학식 1]



[0011]

[0012] 각 치환기 또는 골격 원자에 대한 정의는 후술하기로 한다.

[0013] 또한, 본 발명은 상기 [화학식 1]로 구현되는 유기전계 발광 화합물을 최소한 1개 이상 포함하는 유기전계발광 소자용 유기 박막층 및 이를 포함하는 유기전계발광소자를 제공한다.

### 발명의 효과

[0014] 본 발명에 따른 유기발광 화합물은 발광 효율 및 재료의 수명 특성이 우수하여 발광효율이 우수하면서 동시에 전력효율 및 장수명 특성을 갖는 유기전계발광소자를 제조할 수 있다.

### 도면의 간단한 설명

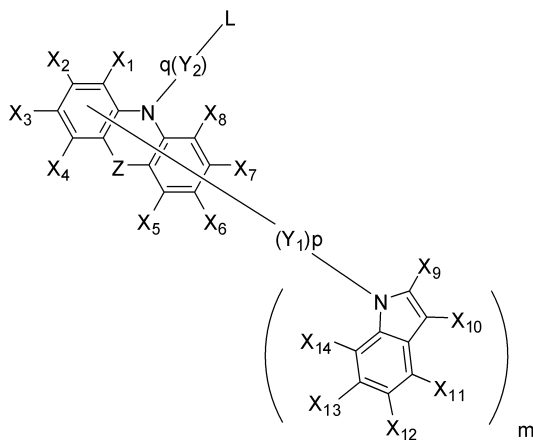
[0015] 도 1은 본 발명의 일 실시예에 따른 유기전계발광소자의 개략도이다.

### 발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

[0016] 이하, 본 발명을 더욱 상세하게 설명한다.

[0017] 본 발명의 일 측면은 하기 [화학식 1]로 표시되는 유기발광 화합물에 관한 것이다.

[0018] [화학식 1]



[0019]

[0020] 상기 [화학식 1]에서,

[0021] L은 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 60의 아릴기 및 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 60의 헤테로아릴기 중에서 선택된다.

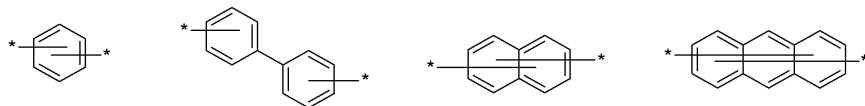
[0022]  $Y_1$  및  $Y_2$ 는 단일결합이거나 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬렌기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 30의 알케닐렌기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 30의 알키닐렌기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 30의 시클로알킬렌기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 50의 아릴렌기 및 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 50의 헤테로아릴렌기 중에서 선택되는 연결기이고,  $p$  및  $q$ 는 0 내지 5의 정수이고, 상기  $p$  및  $q$ 가 2 이상인 경우 복수 개의  $Y_1$ 과  $Y_2$ 는 각각 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

[0023]  $Z$ 는 단일 결합 또는  $CR_1R_2$ ,  $O$ ,  $S$ ,  $SiR_3R_4$  및  $NR_5$  중에서 선택되는 어느 하나이고, 상기  $R_1$  내지  $R_5$ 는 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 40의 아릴기 및 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 30의 헤테로아릴기 중에서 선택되고, 서로 또는 인접한 치환기와 결합하여 포화 또는 불포화 고리를 형성할 수 있다.

[0024]  $X_1$  내지  $X_{14}$ 는 서로 동일하거나 상이하고 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠기, 시아노기, 히드록실기, 니트로기, 아미디노기, 히드라진, 하이드라존, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염, 인산이나 이의 염, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 30의 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 60의 아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 60의 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알콕시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬아미노기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴아미노기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬실릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴실릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 50의 아릴알킬아미노기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 60의 아릴싸이오기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 30의 알케닐기 및 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 30의 알키닐기 중에서 선택되고, 상기  $X_1$  내지  $X_{14}$ 는 각각 인접한 치환기와 서로 결합하여 포화 또는 불포화 고리를 형성할 수 있고,  $m$ 은 0 내지 8의 정수이다.

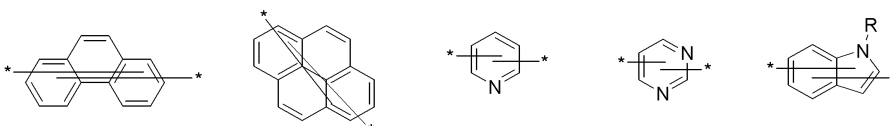
[0025] 또한, 상기 '치환 또는 비치환된'에서 '치환'은  $L$ ,  $Y_1$ ,  $Y_2$ ,  $R_1$  내지  $R_5$  및  $X_1$  내지  $X_{14}$ 가 1종 이상의 치환기로 더 치환되는 경우를 의미하는 것으로서, 상기 1종 이상의 치환기는 탄소수 1 내지 30의 알킬기, 탄소수 3 내지 30의 시클로알킬기, 탄소수 6 내지 50의 아릴기, 탄소수 3 내지 50의 헤테로아릴기, 탄소수 1 내지 30의 알콕시기, 탄소수 6 내지 30의 아릴옥시기, 탄소수 1 내지 20의 알킬아미노기, 탄소수 6 내지 30의 아릴아미노기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 20의 알킬실릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴실릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 50의 아릴알킬아미노기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 50의 알케닐기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 50의 알키닐기, 히드록실기, 니트로기, 아미디노기, 히드라진, 히드라존, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염, 인산이나 이의 염, 치환 또는 비치환된 탄소수 5내지 60의 아릴싸이오기, 시아노기, 할로젠기 및 중수소 중에서 선택된다.

[0026] 본 발명의 바람직한 구현예에 의하면, 상기  $Y_1$  및  $Y_2$ 는 하기 [구조식 C1] 내지 [구조식 C14] 중에서 선택되는 어느 하나일 수 있다.



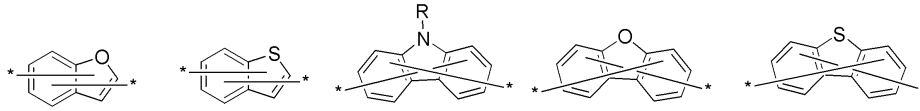
[0027]

[0028] [구조식 C1]      [구조식 C2]      [구조식 C3]      [구조식 C4]



[0029]

[0030] [구조식 C5] [구조식 C6] [구조식 C7] [구조식 C8] [구조식 C9]



[0031]

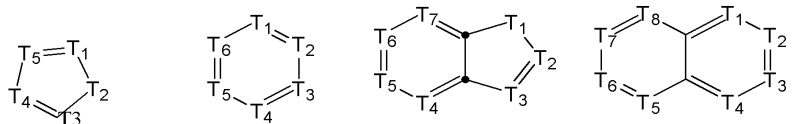
[0032] [구조식 C10] [구조식 C11] [구조식 C12] [구조식 C13] [구조식 C14]

[0033] 상기 [구조식C1] 내지 [구조식 C14]에서, 각 구조식 내 고리의 탄소자리에는 수소 또는 중수소가 결합될 수 있으며, 상기 R은 상기 [화학식 1]에서의  $X_1$  내지  $X_{14}$ 의 정의와 동일하다.

[0034] 본 발명의 바람직한 구현예에 의하면, 상기 L은 적어도 하나 이상의 질소를 포함하는 치환 또는 비치환된 탄소 수 2 내지 60의 헤테로아릴기일 수 있다.

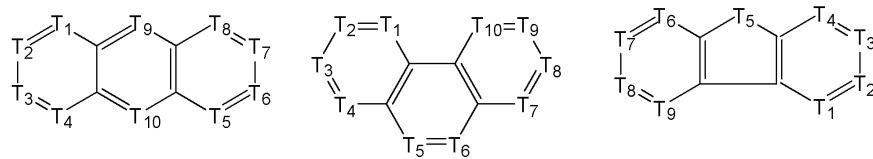
[0035] 본 발명의 바람직한 구현예에 의하면, 상기  $Y_2$ 에 연결되는 L은 하기 [구조식 1] 내지 [구조식 10] 중에서 선택되는 어느 하나일 수 있다. 또한, 본 발명에 따른 유기발광 화합물에 포함된 헤테로아릴기는 하기 [구조식 1] 내지 [구조식 10] 중에서 선택되는 어느 하나일 수 있다.

[0036] [구조식 1] [구조식 2] [구조식 3] [구조식 4]



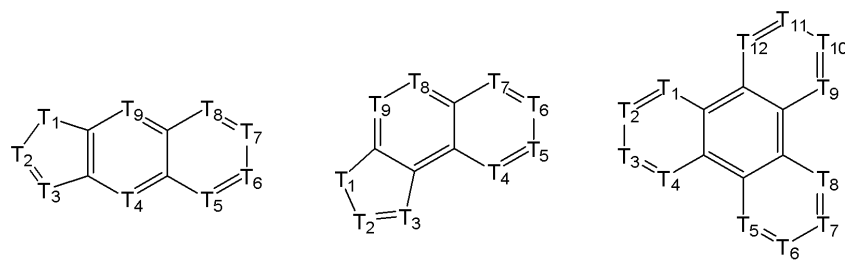
[0037]

[0038] [구조식 5] [구조식 6] [구조식 7]



[0039]

[0040] [구조식 8] [구조식 9] [구조식 10]



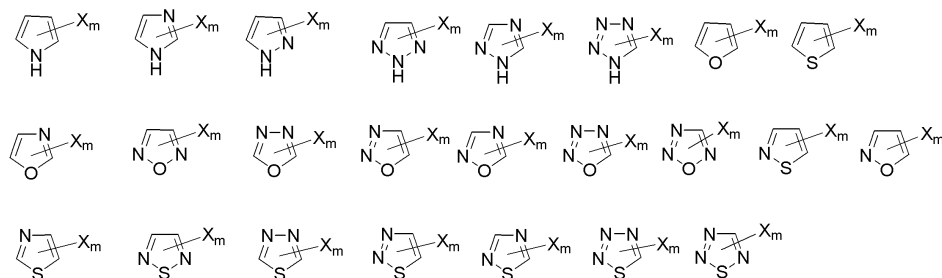
[0041]

[0042] 상기 [구조식 1] 내지 [구조식 10]에서,

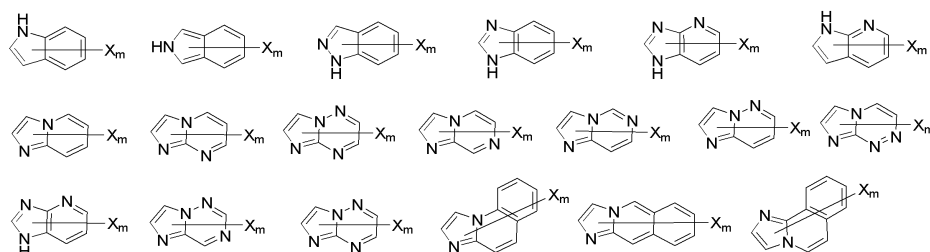
[0043]  $T_1$  내지  $T_{12}$ 은 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로,  $C(R_{41})$ ,  $C(R_{42})(R_{43})$ , N,  $N(R_{44})$ , O 및 S 중에서 선택되며, 상기  $R_{41}$  내지  $R_{44}$ 은 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 탄소 수 1 내지 30의 알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 30의 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 30의 아릴기 및 치환 또는 비치환되고 이종 원자로 O, N, S 또는 P를 갖는 탄소수 2 내지 30의 헤테로아릴기 중에서 선택된다.

[0044] 본 발명의 바람직한 구현예에 의하면, 상기 [구조식 1] 내지 [구조식 10]은 하기 [구조식 11] 중에서 선택되는 어느 하나일 수 있다.

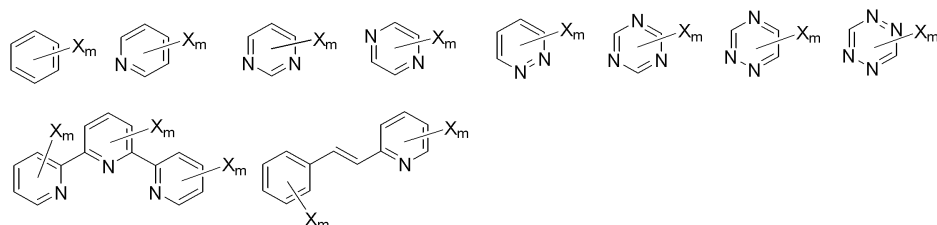
[0045] [구조식 11]



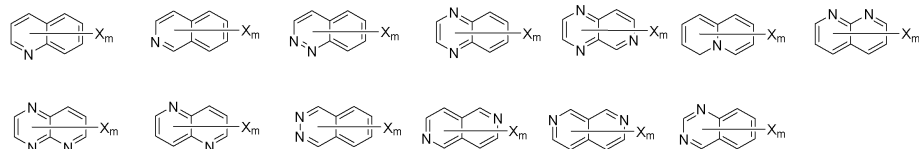
[0046]



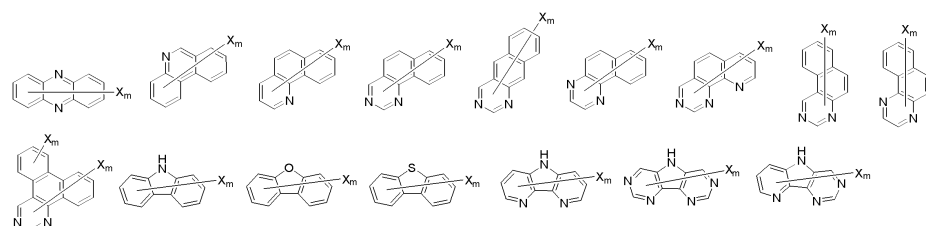
[0047]



[0048]



[0049]



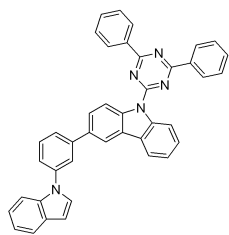
[0050]

[0051] 상기 [구조식 11]에서,

[0052] X는 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 30의 아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 30의 알케닐기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 20의 알키닐기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 30의 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 30의 시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알콕시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬티옥시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 30의 아릴티옥시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬아민기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 30의 아릴기, 치환 또는 비치환되고 이종원자로 O, N, S 또는 P를 갖는 탄소수 2 내지 30의 헤테로아릴기, 시아노기, 니트로기 및 할로젠기로 중에서 선택되고, m 은 1 내지 11의 정수이며, m이 2 이상인 경우 복수 개의 X는 서로 동일하거나 상이하다.



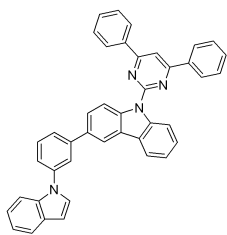
- [0053] 한편, 본 발명에 따른 유기발광 화합물에 포함된 아릴기는 하나의 수소 제거에 의해서 방향족 탄화수소로부터 유도된 유기 라디칼로서, 5 내지 7원, 바람직하게는 5 또는 6원을 포함하는 단일 또는 융합 고리계를 포함하며, 또한 상기 아릴기에 치환기가 있는 경우 이웃하는 치환기와 서로 융합 (fused)되어 고리를 추가로 형성할 수 있다.
- [0054] 상기 아릴기의 구체적인 예로 페닐기, 2-메틸페닐기, 3-메틸페닐기, 4-메틸페닐기, 4-에틸페닐기, o-비페닐기, m-비페닐기, p-비페닐기, 4-메틸비페닐기, 4-에틸비페닐기, o-터페닐기, m-터페닐기, p-터페닐기, 1-나프틸기, 2-나프틸기, 1-메틸나프틸기, 2-메틸나프틸기, 안트릴기, 페난트릴기, 피레닐기, 인데닐, 플루오레닐기, 테트라히드로나프틸기, 피렌일, 페틸렌일, 크라이세닐, 나프타세닐, 플루오란텐일 등과 같은 방향족 그룹을 들 수 있다.
- [0055] 상기 아릴기 중 하나 이상의 수소 원자는 중수소 원자, 할로젠 원자, 히드록시기, 니트로기, 시아노기, 실릴기, 아미노기 ( $-\text{NH}_2$ ,  $-\text{NH}(\text{R})$ ,  $-\text{N}(\text{R}')(\text{R}'')$ ),  $\text{R}'$ 과  $\text{R}''$ 은 서로 독립적으로 탄소수 1 내지 10의 알킬기이며, 이 경우 "알킬아미노기"라 함), 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실기, 술폰산기, 인산기, 탄소수 1 내지 24의 알킬기, 탄소수 1 내지 24의 할로겐화된 알킬기, 탄소수 1 내지 24의 알케닐기, 탄소수 1 내지 24의 알키닐기, 탄소수 1 내지 24의 헤테로알킬기, 탄소수 6 내지 24의 아릴기, 탄소수 6 내지 24의 아릴알킬기, 탄소수 2 내지 24의 헤테로아릴기 또는 탄소수 2 내지 24의 헤테로아릴알킬기로 치환될 수 있다.
- [0056] 본 발명에서 사용되는 치환기인 알킬기의 구체적인 예로는 메틸기, 에틸기, 프로필기, 이소 프로필기, 이소부틸기, sec-부틸기, tert-부틸기, 펜틸기, iso-아밀기, 헥실기, 헵틸기, 옥틸기, 스테아릴기, 트리클로로메틸기, 트리플루오르메틸기 등을 들 수 있으며, 상기 알킬기 중 하나 이상의 수소 원자는 중수소 원자, 할로젠 원자, 히드록시기, 니트로기, 시아노기, 트리플루오로메틸기, 실릴기(이 경우 "알킬실릴기"라 함), 치환 또는 비치환된 아미노기( $-\text{NH}_2$ ,  $-\text{NH}(\text{R})$ ,  $-\text{N}(\text{R}')(\text{R}'')$ ), 여기서  $\text{R}$ ,  $\text{R}'$  및  $\text{R}''$ 은 각각 독립적으로 탄소수 1 내지 24의 알킬기임 (이 경우 "알킬아미노기"라 함)), 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실기, 술폰산기, 인산기, 탄소수 1 내지 24의 알킬기, 탄소수 1 내지 24의 할로겐화된 알킬기, 탄소수 2 내지 24의 알케닐기, 탄소수 2 내지 24의 알키닐기, 탄소수 1 내지 24의 헤테로알킬기, 탄소수 5 내지 24의 아릴기, 탄소수 6 내지 24의 아릴알킬기, 탄소수 3 내지 24의 헤테로아릴기 또는 탄소수 3 내지 24의 헤테로아릴알킬기로 치환될 수 있다.
- [0057] 본 발명에서 사용되는 치환기인 알콕시기의 구체적인 예로는 메톡시기, 에톡시기, 프로폭시기, 이소부틸옥시기, sec-부틸옥시기, 펜틸옥시기, iso-아밀옥시기, 헥실옥시기 등을 들 수 있으며, 상기 알킬기의 경우와 마찬가지로 치환기로 치환가능하다.
- [0058] 본 발명의 화합물에서 사용되는 치환기인 할로겐기의 구체적인 예로는 플루오르(F), 클로린(Cl), 브롬(Br) 등을 들 수 있다.
- [0059] 본 발명에 사용되는 치환기인 아릴옥시기는 -O- 아릴 라디칼을 의미하며, 이때 아릴기는 상기에서 정의된 바와 같고, 구체적인 예로서 페녹시, 나프톡시, 안트라세닐옥시, 페난트레닐옥시, 플루오레닐옥시, 인데닐옥시 등을 들 수 있고, 아릴옥시기에 포함되어 있는 하나 이상의 수소 원자는 추가로 치환가능하다.
- [0060] 본 발명에 사용되는 치환기인 실릴기의 구체적인 예로는 트리메틸실릴, 트리에틸실릴, 트리페닐실릴, 트리메톡시실릴, 디메톡시페닐실릴, 디페닐메틸실릴, 디페닐비닐실릴, 메틸사이클로뷰틸실릴, 디메틸퓨릴실릴 등을 들 수 있다.
- [0061] 본 발명에 사용되는 알케닐기의 구체적인 예로는 직쇄상 또는 분지쇄상의 알케닐기를 나타내고, 3-펜테닐기, 4-헥세닐기, 5-헵테닐기, 4-메틸-3-펜테닐기, 2,4-디메틸-펜테닐기, 6-메틸-5-헵테닐기, 2,6-디메틸-5-헵테닐기 등을 들 수 있다.
- [0062] 또한, 본 발명의 보다 더 바람직한 구현예에 의하면, 상기 [화학식 1]은 하기 [화학식 2] 내지 [화학식 228]로 표시되는 화합물 중에서 선택될 수 있다.



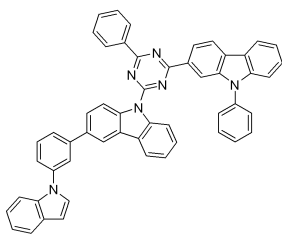
[0063]

[0064]

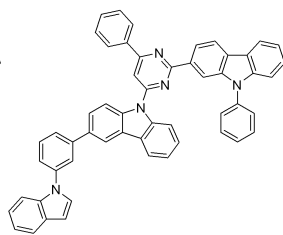
[화학식 2]



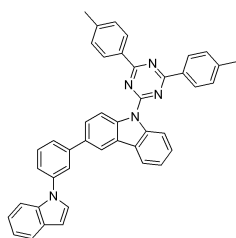
[화학식 3]



[화학식 4]



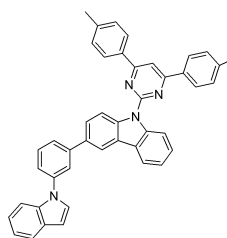
[화학식 5]



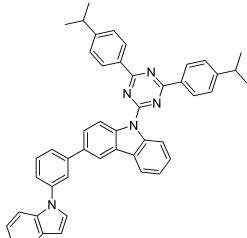
[0065]

[0066]

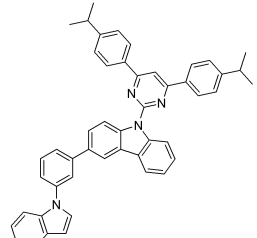
[화학식 6]



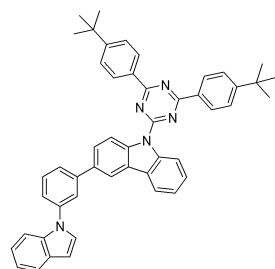
[화학식 7]



[화학식 8]



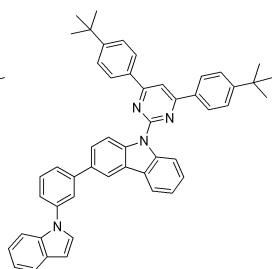
[화학식 9]



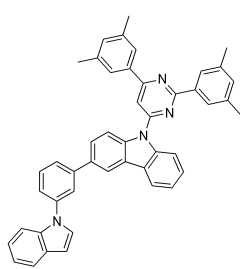
[0067]

[0068]

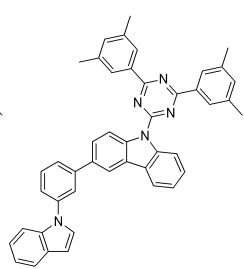
[화학식 10]



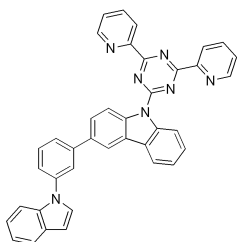
[화학식 11]



[화학식 12]



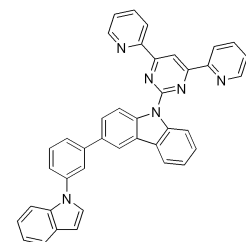
[화학식 13]



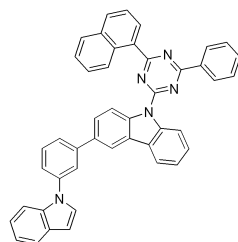
[0069]

[0070]

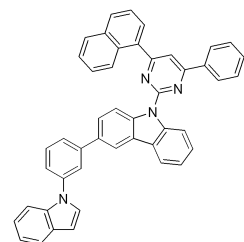
[화학식 14]



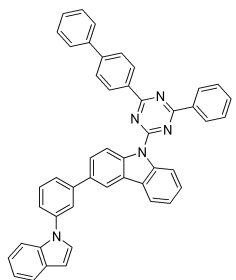
[화학식 15]



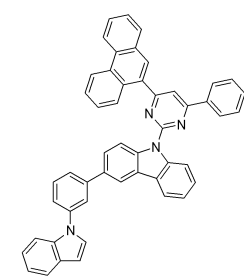
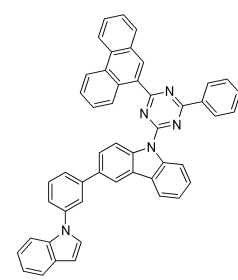
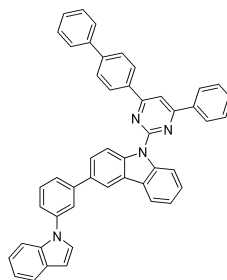
[화학식 16]



[화학식 17]

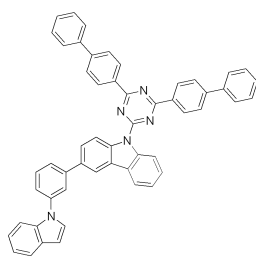


[0071]

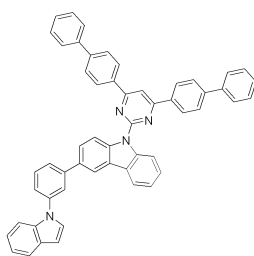


[0072]

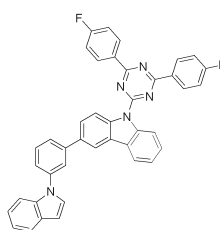
[화학식 18]



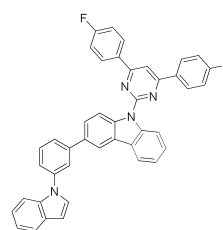
[화학식 19]



[화학식 20]



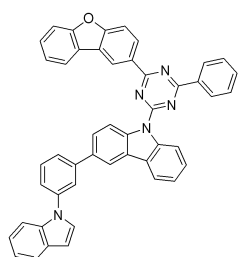
[화학식 21]



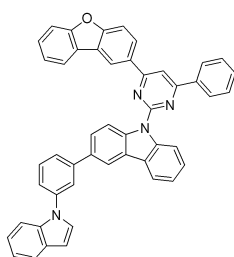
[0073]

[0074]

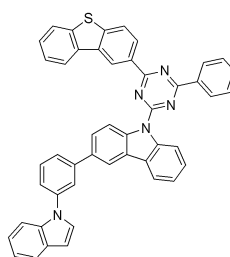
[화학식 22]



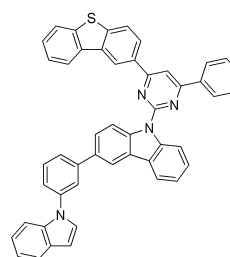
[화학식 23]



[화학식 24]



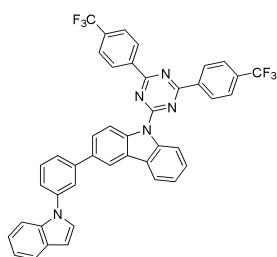
[화학식 25]



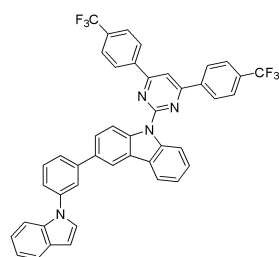
[0075]

[0076]

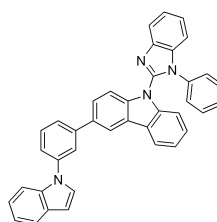
[화학식 26]



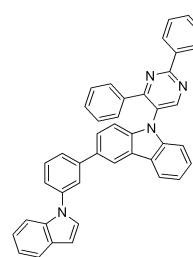
[화학식 27]



[화학식 28]



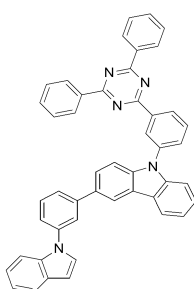
[화학식 29]



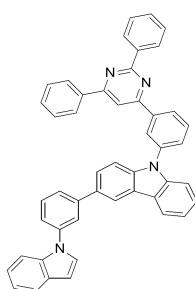
[0077]

[0078]

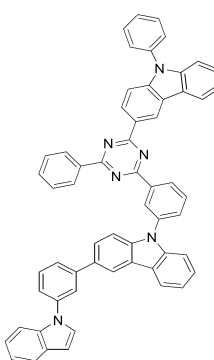
[화학식 30]



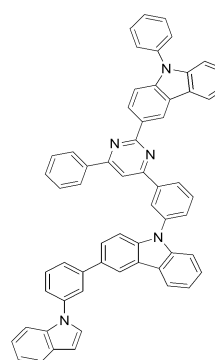
[화학식 31]



[화학식 32]



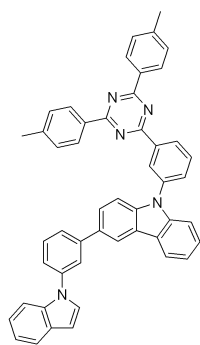
[화학식 33]



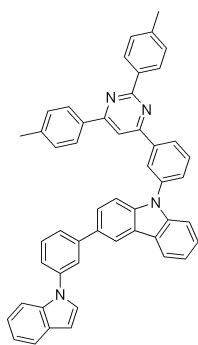
[0079]

[0080]

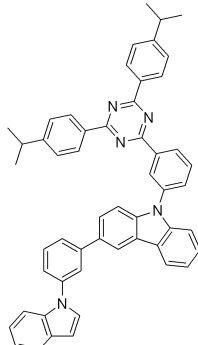
[화학식 34]



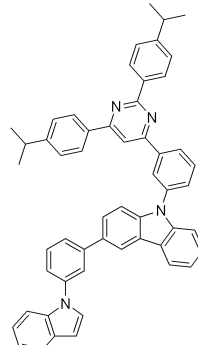
[화학식 35]



[화학식 36]



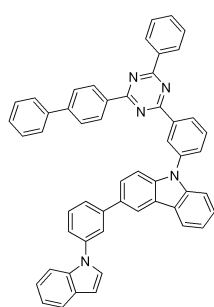
[화학식 37]



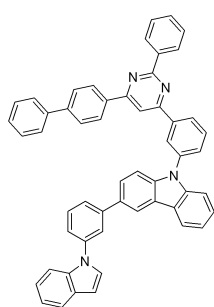
[0081]

[0082]

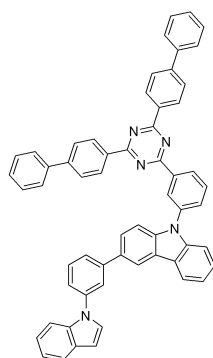
[화학식 38]



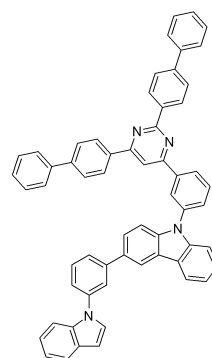
[화학식 39]



[화학식 40]



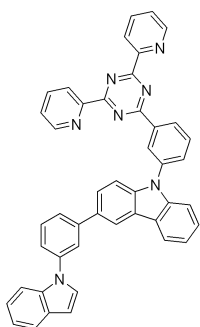
[화학식 41]



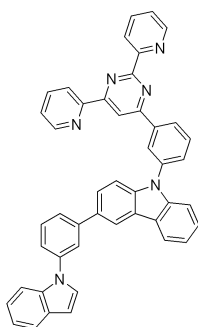
[0083]

[0084]

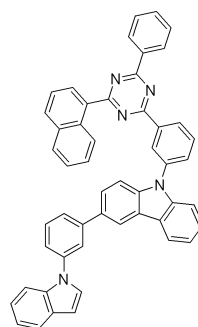
[화학식 42]



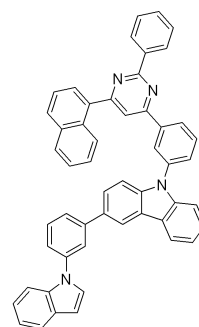
[화학식 43]



[화학식 44]



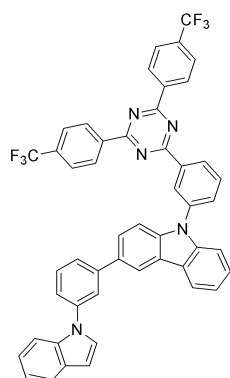
[화학식 45]



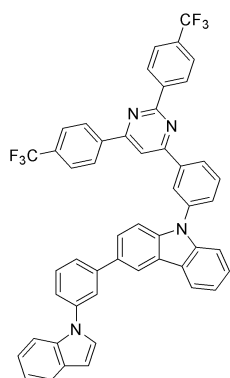
[0085]

[0086]

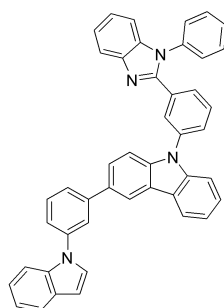
[화학식 46]



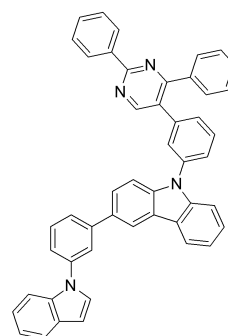
[화학식 47]



[화학식 48]



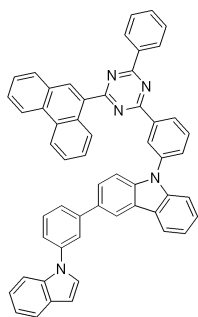
[화학식 49]



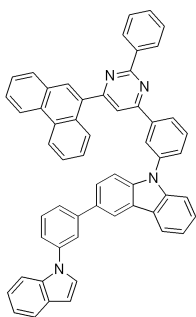
[0087]

[0088]

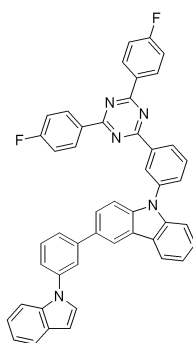
[화학식 50]



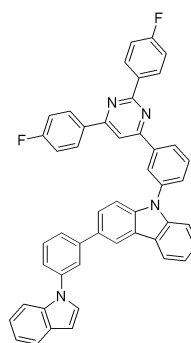
[화학식 51]



[화학식 52]



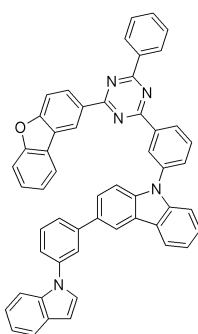
[화학식 53]



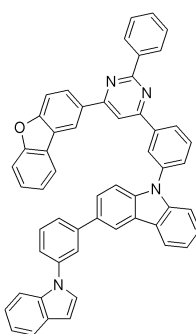
[0089]

[0090]

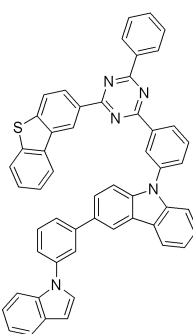
[화학식 54]



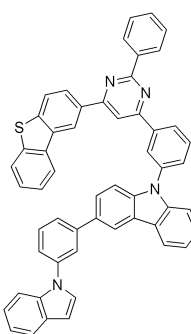
[화학식 55]



[화학식 56]



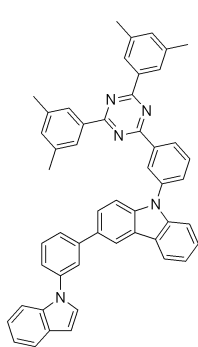
[화학식 57]



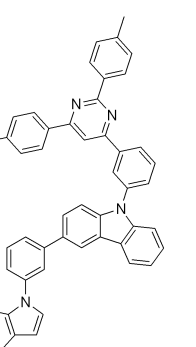
[0091]

[0092]

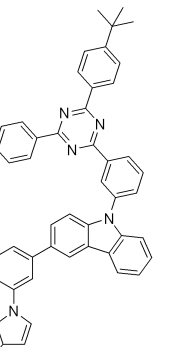
[화학식 58]



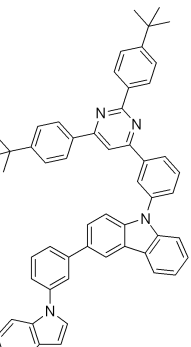
[화학식 59]



[화학식 60]



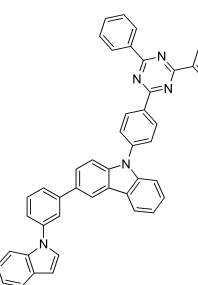
[화학식 61]



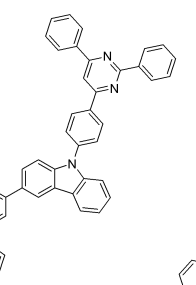
[0093]

[0094]

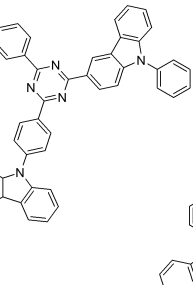
[화학식 62]



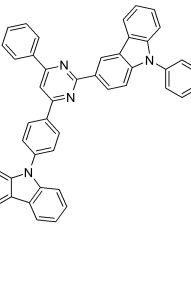
[화학식 63]



[화학식 64]



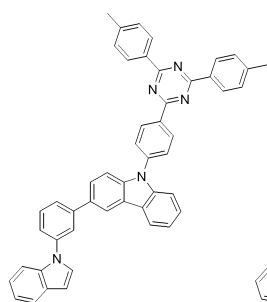
[화학식 65]



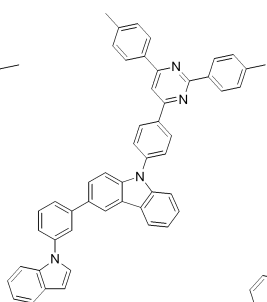
[0095]

[0096]

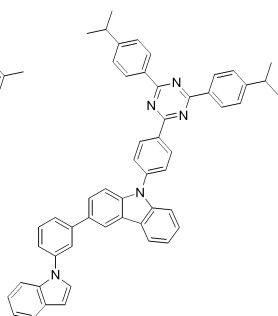
[화학식 66]



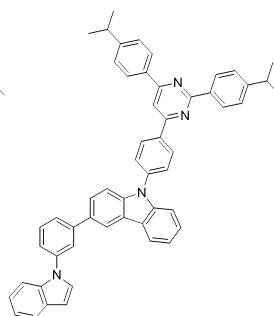
[화학식 67]



[화학식 68]



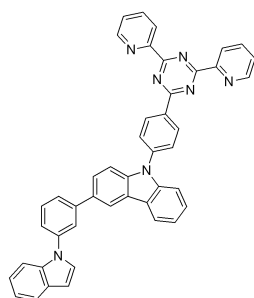
[화학식 69]



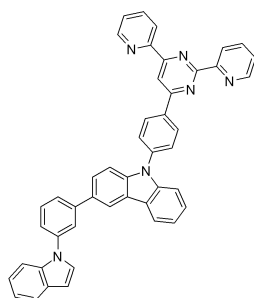
[0097]

[0098]

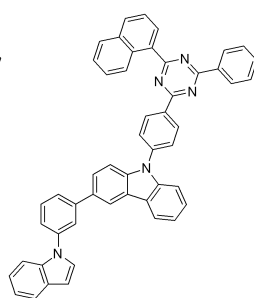
[화학식 70]



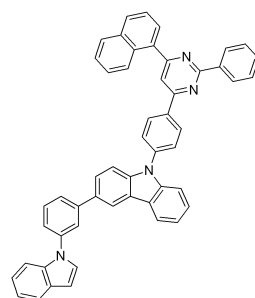
[화학식 71]



[화학식 72]



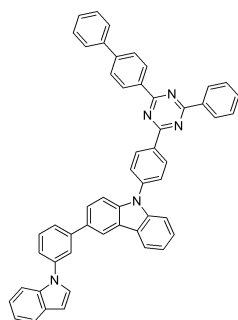
[화학식 73]



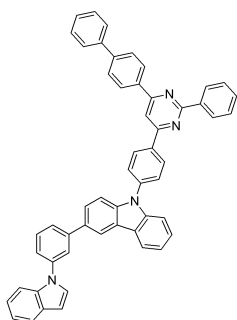
[0099]

[0100]

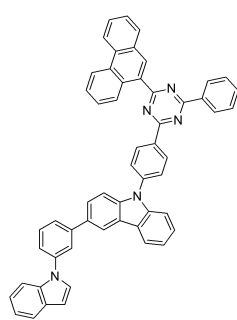
[화학식 74]



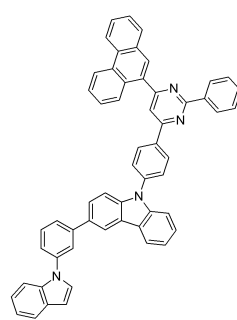
[화학식 75]



[화학식 76]



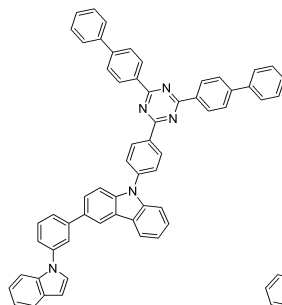
[화학식 77]



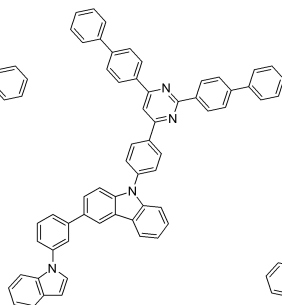
[0101]

[0102]

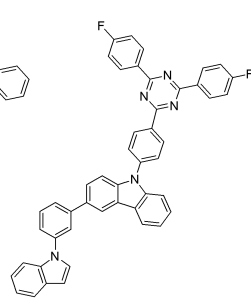
[화학식 78]



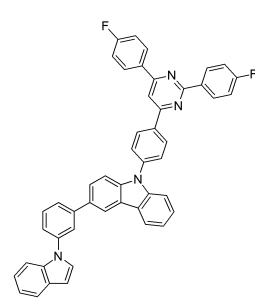
[화학식 79]



[화학식 80]



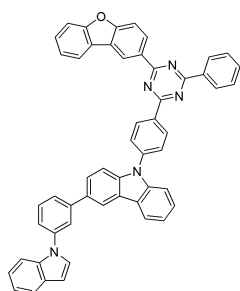
[화학식 81]



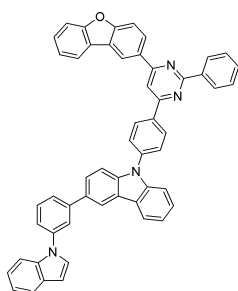
[0103]

[0104]

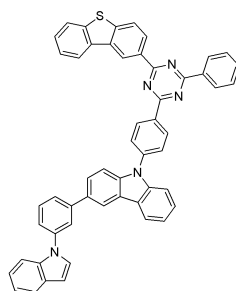
[화학식 82]



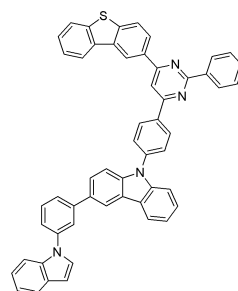
[화학식 83]



[화학식 84]



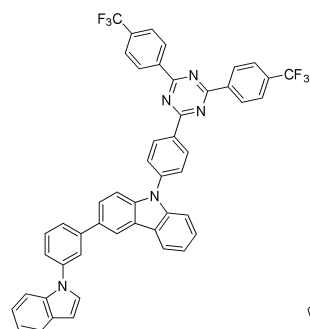
[화학식 85]



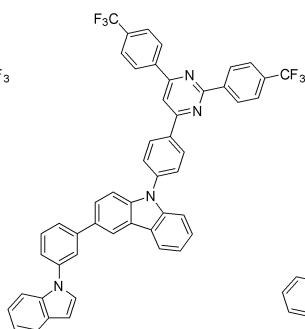
[0105]

[0106]

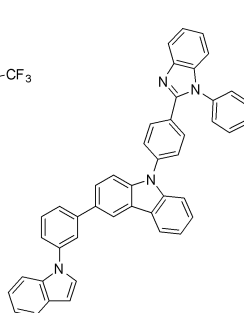
[화학식 86]



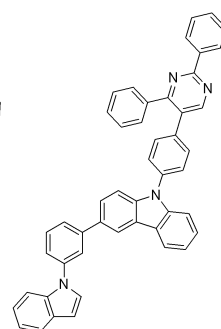
[화학식 87]



[화학식 88]



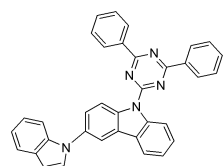
[화학식 89]



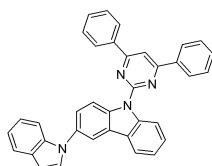
[0107]

[0108]

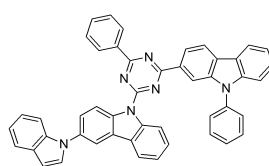
[화학식 90]



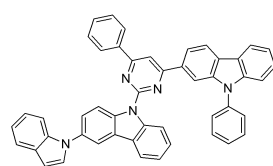
[화학식 91]



[화학식 92]



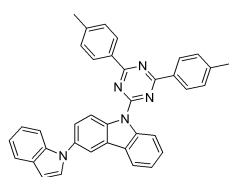
[화학식 93]



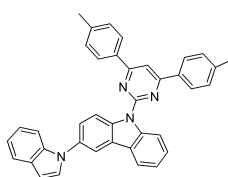
[0109]

[0110]

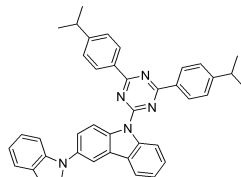
[화학식 94]



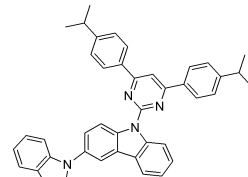
[화학식 95]



[화학식 96]



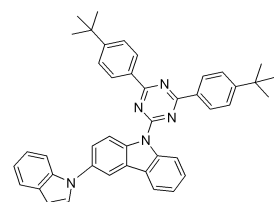
[화학식 97]



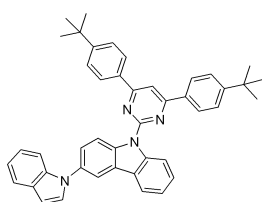
[0111]

[0112]

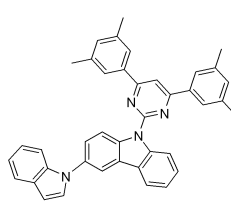
[화학식 98]



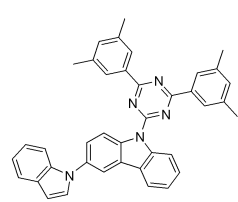
[화학식 99]



[화학식 100]

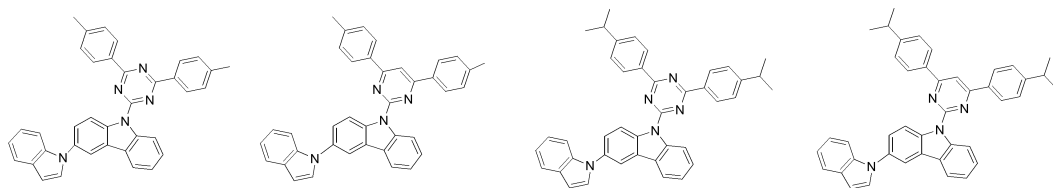


[화학식 101]



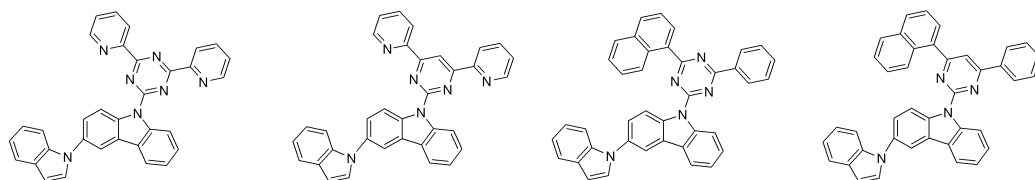
[0113]

[0114] [화학식 102] [화학식 103] [화학식 104] [화학식 105]



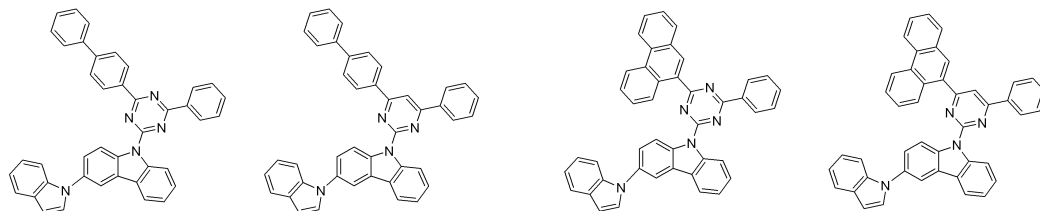
[0115]

[0116] [화학식 106] [화학식 107] [화학식 108] [화학식 109]



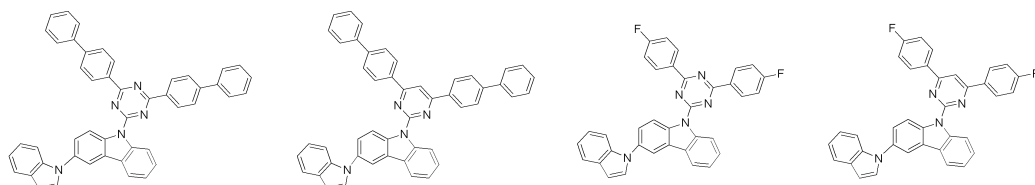
[0117]

[0118] [화학식 110] [화학식 111] [화학식 112] [화학식 113]



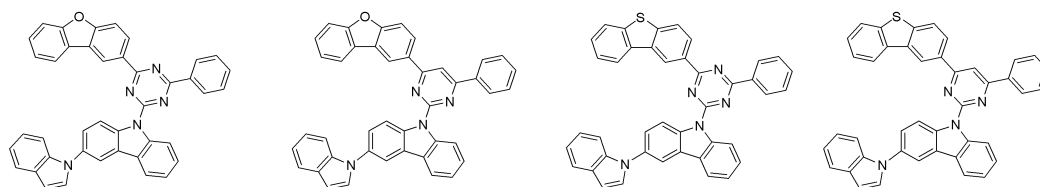
[0119]

[0120] [화학식 114] [화학식 115] [화학식 116] [화학식 117]



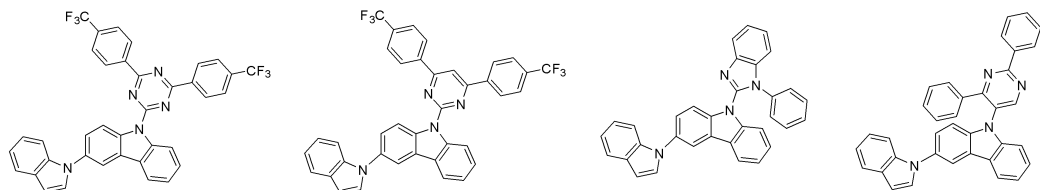
[0121]

[0122] [화학식 118] [화학식 119] [화학식 120] [화학식 121]



[0123]

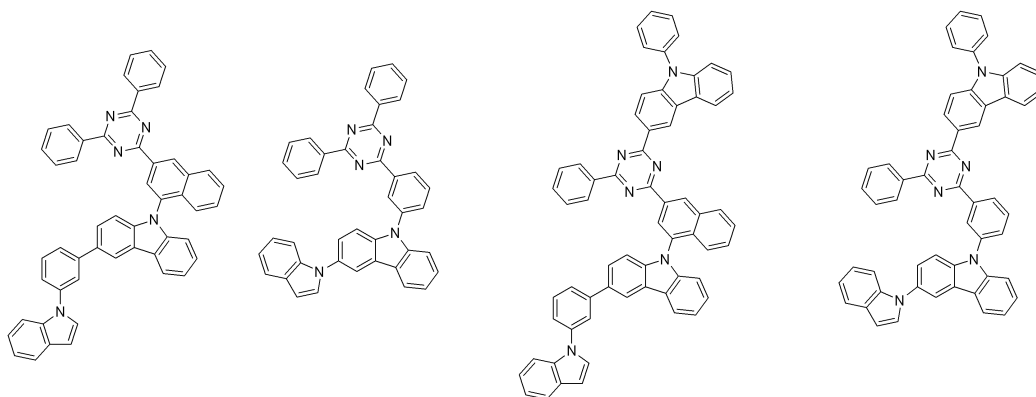
[0124] [화학식 122] [화학식 123] [화학식 124] [화학식 125]



[0125]

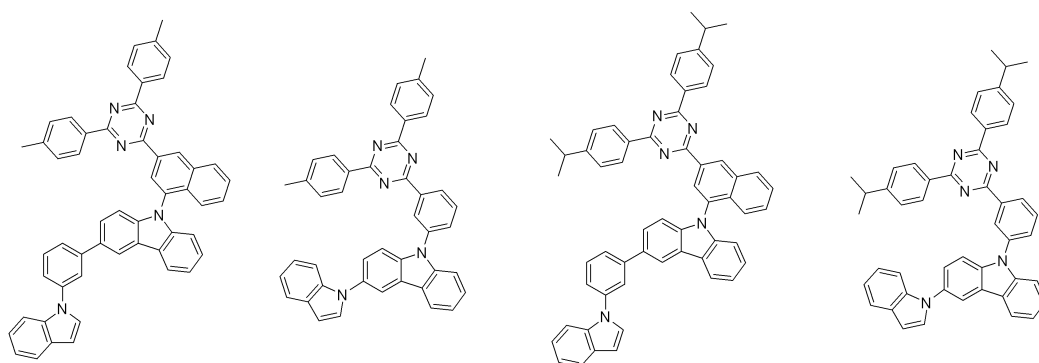


[0126] [화학식 126] [화학식 127] [화학식 128] [화학식 129]



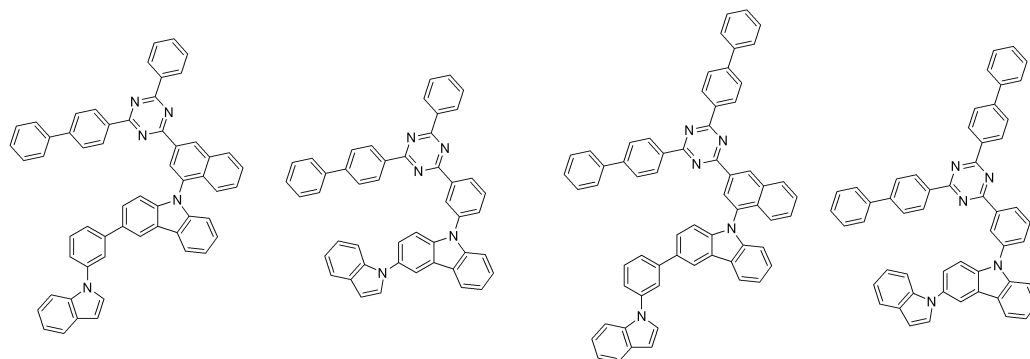
[0127]

[0128] [화학식 130] [화학식 131] [화학식 132] [화학식 133]



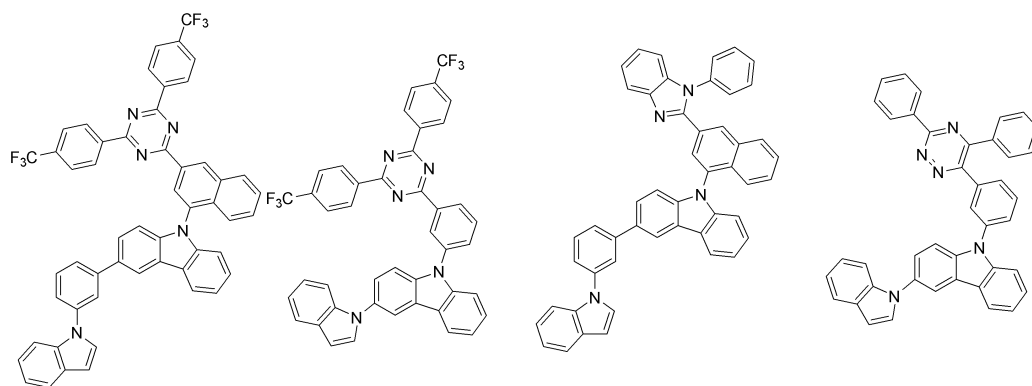
[0129]

[0130] [화학식 134] [화학식 135] [화학식 136] [화학식 137]



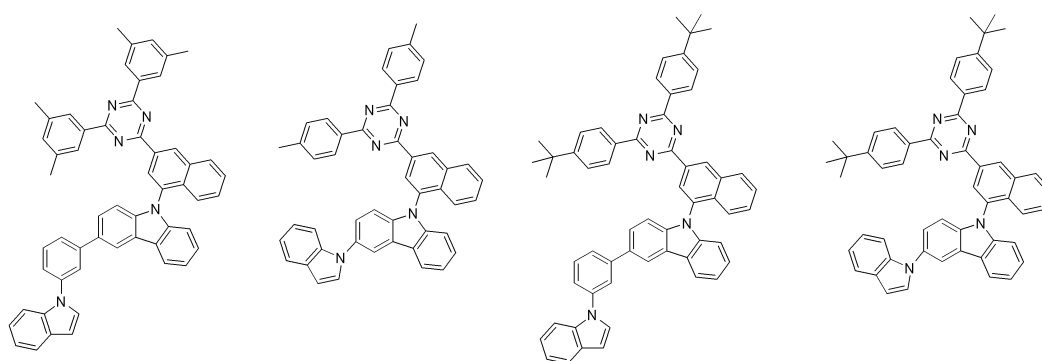
[0131]

[0132] [화학식 138] [화학식 139] [화학식 140] [화학식 141]



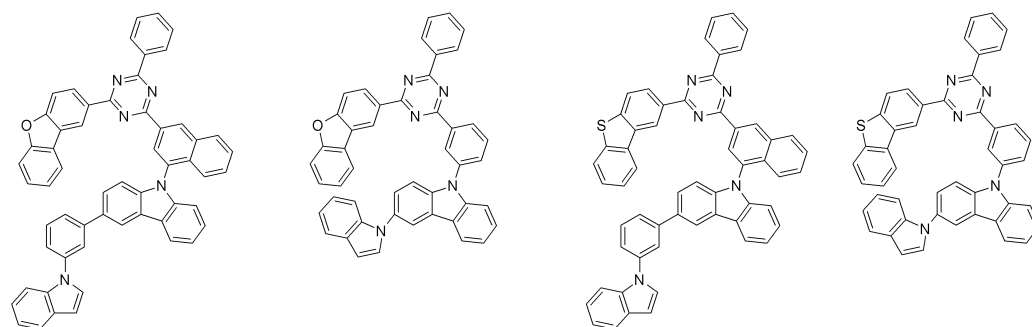
[0133]

[0134] [화학식 142] [화학식 143] [화학식 144] [화학식 145]



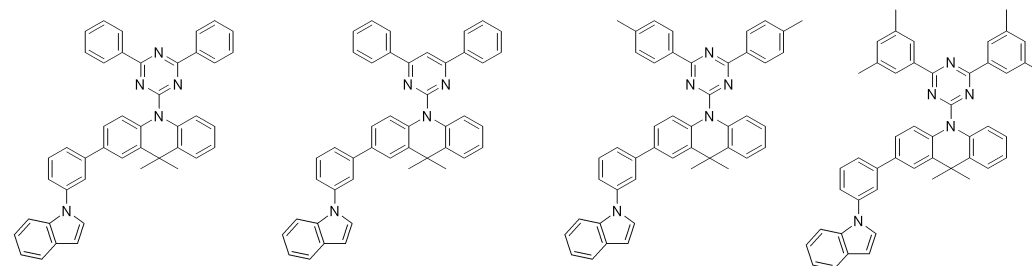
[0135]

[0136] [화학식 146] [화학식 147] [화학식 148] [화학식 149]



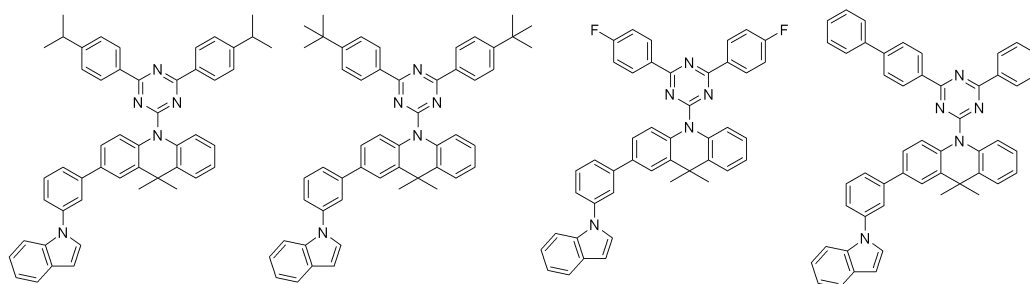
[0137]

[0138] [화학식 150] [화학식 151] [화학식 152] [화학식 153]



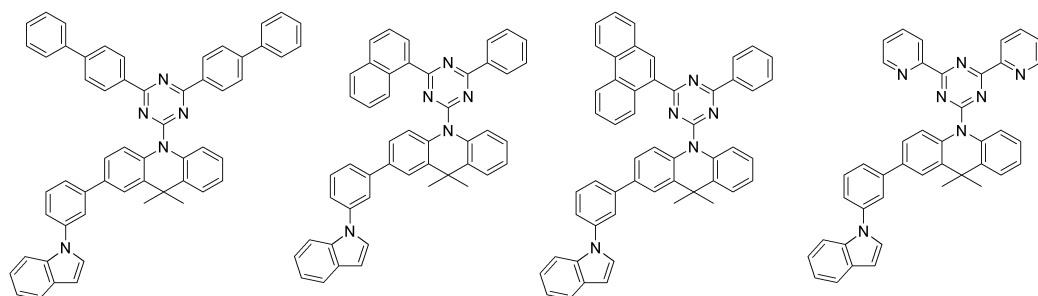
[0139]

[0140] [화학식 154] [화학식 155] [화학식 156] [화학식 157]



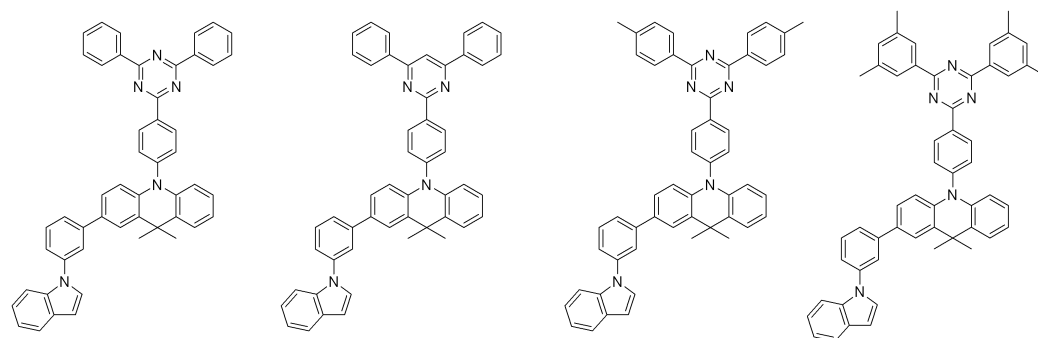
[0141]

[0142] [화학식 158] [화학식 159] [화학식 160] [화학식 161]



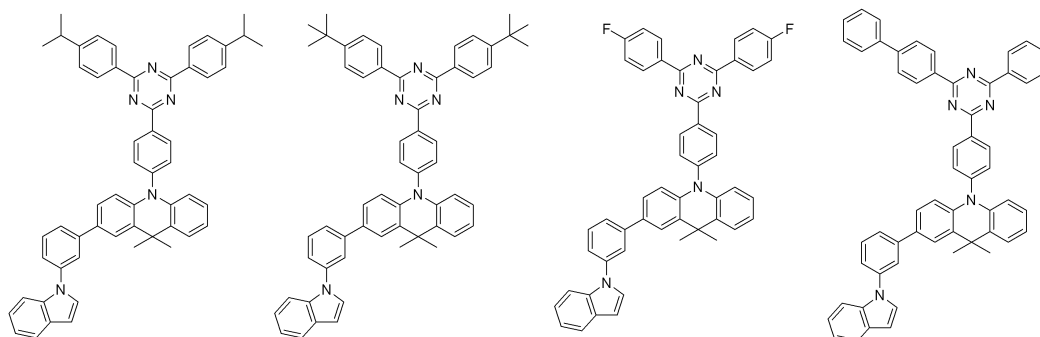
[0143]

[0144] [화학식 162] [화학식 163] [화학식 164] [화학식 165]



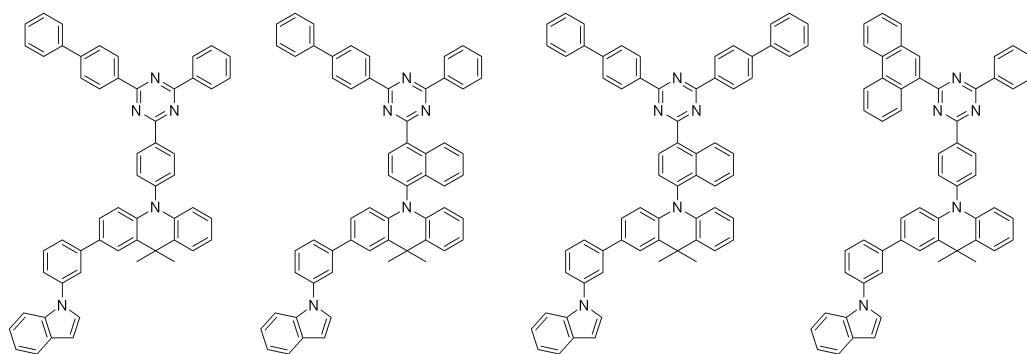
[0145]

[0146] [화학식 166] [화학식 167] [화학식 168] [화학식 169]

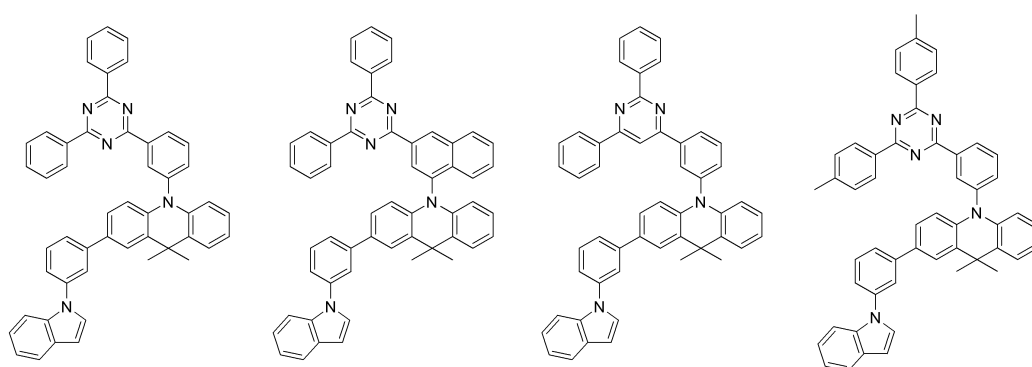


[0147]

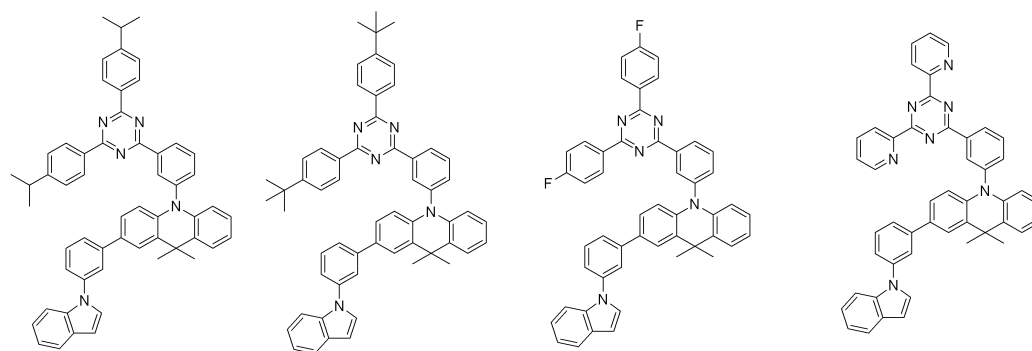
[0148] [화학식 170] [화학식 171] [화학식 172] [화학식 173]



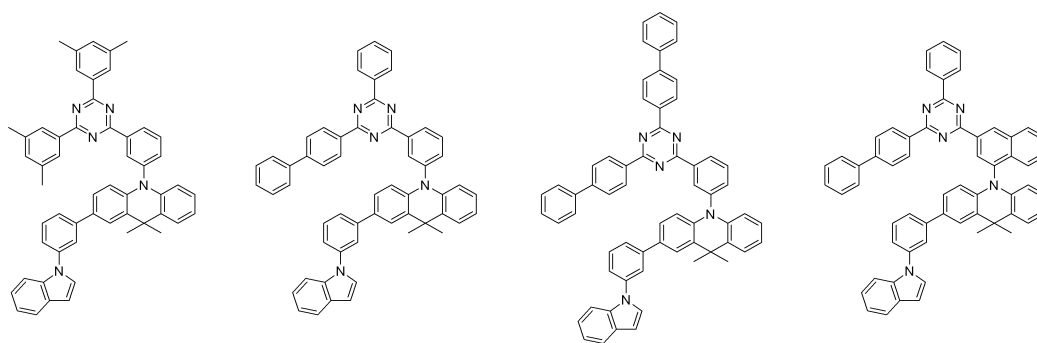
[0149]  
[0150] [화학식 174] [화학식 175] [화학식 176] [화학식 177]



[0151]  
[0152] [화학식 178] [화학식 179] [화학식 180] [화학식 181]

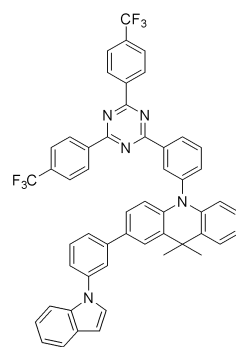
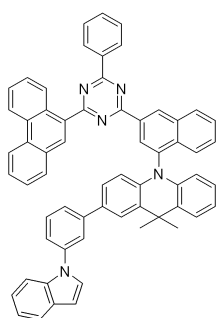
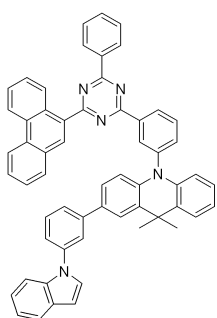
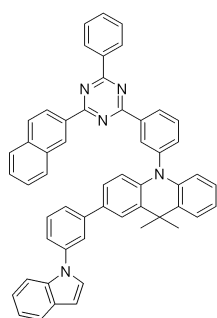


[0153]  
[0154] [화학식 182] [화학식 183] [화학식 184] [화학식 185]



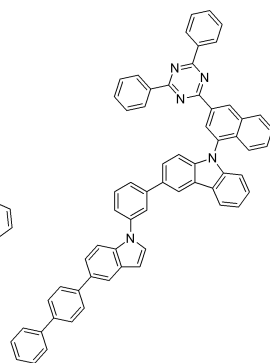
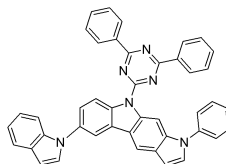
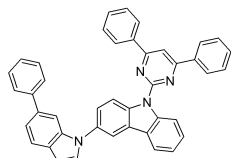
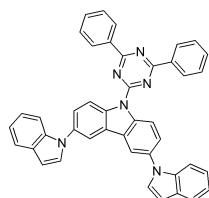
[0155]

[0156] [화학식 186] [화학식 187] [화학식 188] [화학식 189]



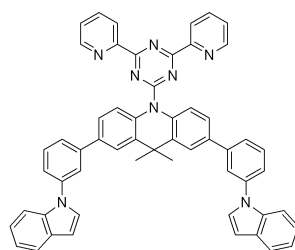
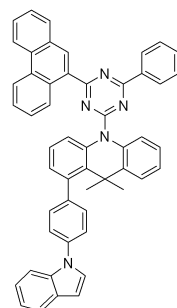
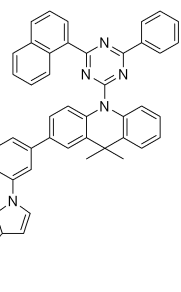
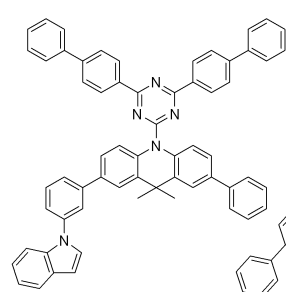
[0157]

[0158] [화학식 190] [화학식 191] [화학식 192] [화학식 193]



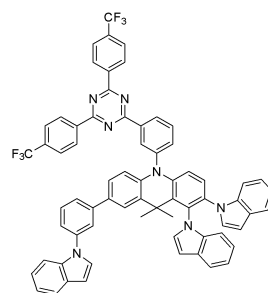
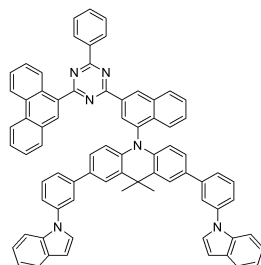
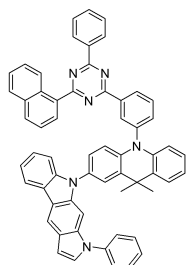
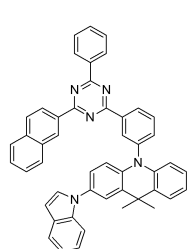
[0159]

[0160] [화학식 194] [화학식 195] [화학식 196] [화학식 197]



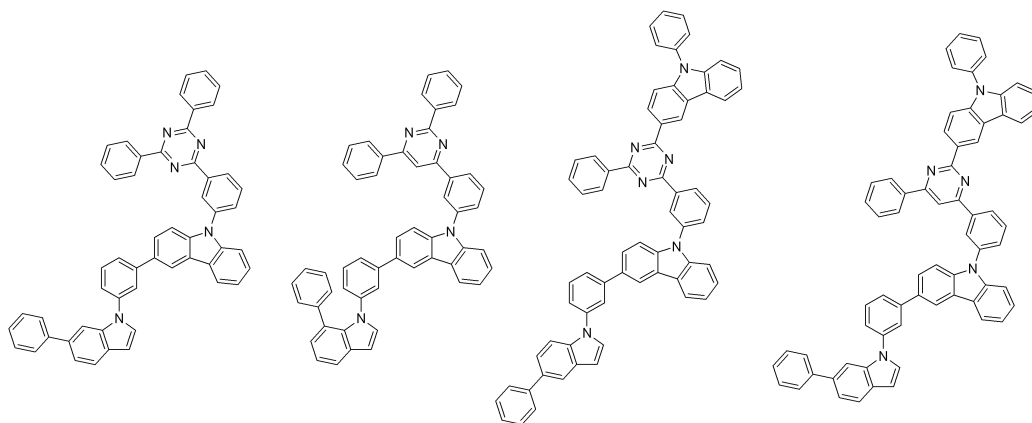
[0161]

[0162] [화학식 198] [화학식 199] [화학식 200] [화학식 201]



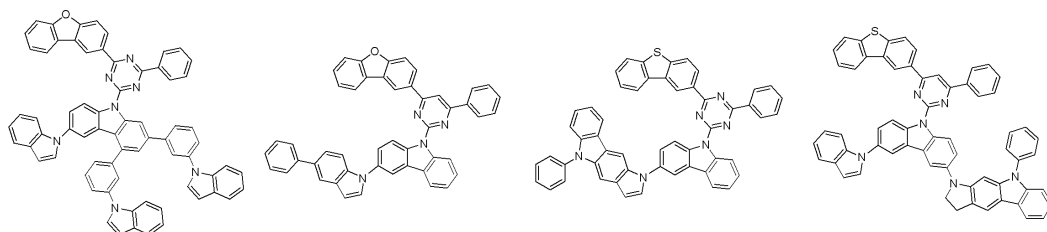
[0163]

[0164] [화학식 202] [화학식 203] [화학식 204] [화학식 205]



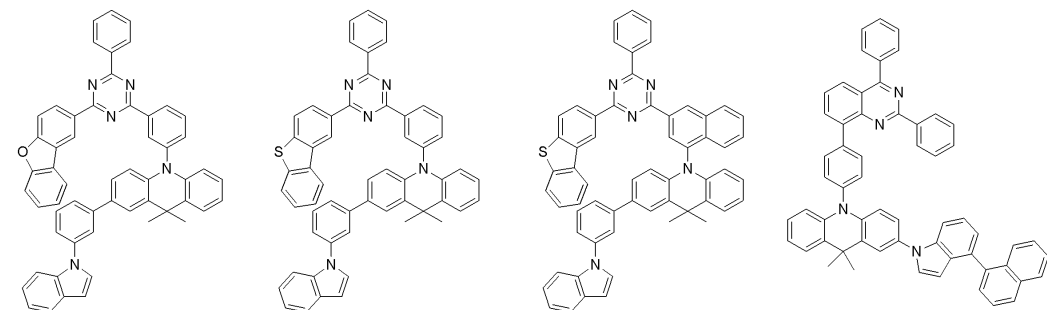
[0165]

[0166] [화학식 206] [화학식 207] [화학식 208] [화학식 209]



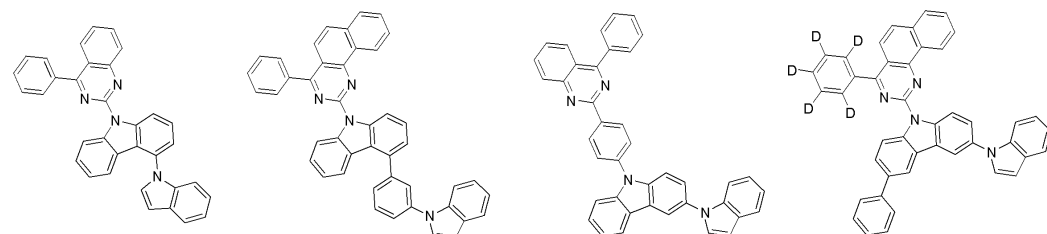
[0167]

[0168] [화학식 210] [화학식 211] [화학식 212] [화학식 213]



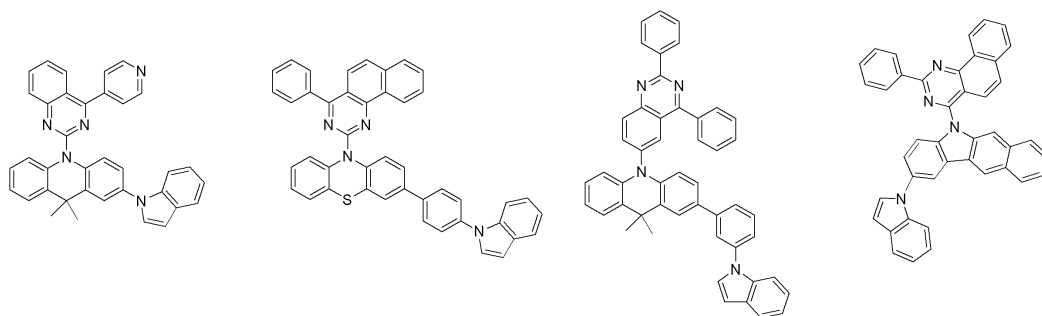
[0169]

[0170] [화학식 214] [화학식 215] [화학식 216] [화학식 217]



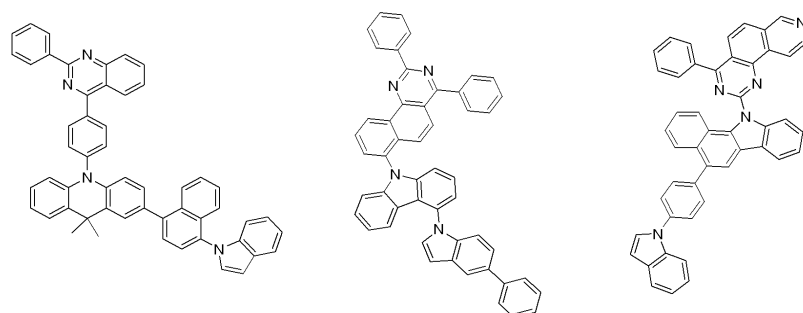
[0171]

[0172] [화학식 218] [화학식 219] [화학식 220] [화학식 221]



[0173]

[0174] [화학식 222] [화학식 223] [화학식 224] [화학식 225]



[0175]

[0176] [화학식 226] [화학식 227] [화학식 228]

[0177] 본 발명의 또 다른 측면은 본 발명의 [화학식 1]에 따른 화합물을 최소한 1개 이상 포함하는 것을 특징으로 하는 유기전계발광소자용 유기 박막층에 관한 것이다.

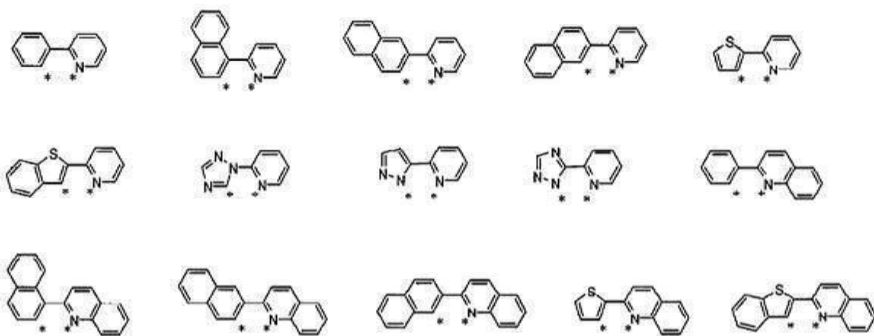
[0178] 본 발명의 일 구현예에 따르면, 상기 유기 박막층은 하기 [화학식 A-1] 내지 [화학식 J-1]로 표시되는 화합물을 최소한 1개 이상을 더 포함하는 것을 특징으로 한다.

[0179] [일반식 A-1]

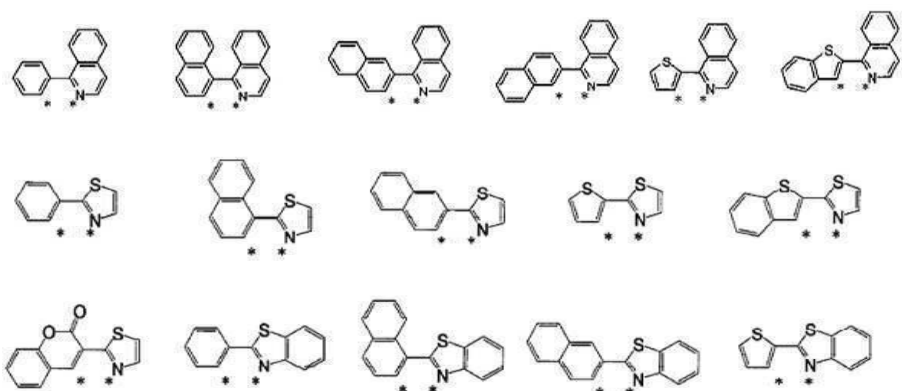
[0180]  $ML_1L_2L_3$

[0181] 상기 M은 7족, 8족, 9족, 10족, 11족, 13족, 14족, 15족 및 16족의 금속으로 이루어진 군으로부터 선택되고, 바람직하게는 Ir, Pt, Pd, Rh, Re, Os, Tl, Pb, Bi, In, Sn, Sb, Te, Au 및 Ag로부터 선택된다. 또한, 상기  $L_1$ ,  $L_2$  및  $L_3$ 는 리간드로 서로 동일하거나 상이하고 각각 독립적으로 하기 [구조식 D]에서 선택되는 어느 하나를 들 수 있지만, 이에 한정되는 것은 아니다. 또한, 하기 [구조식 D]내 \*은 금속 이온 M에 결합하는 사이트(site)를 표현한다.

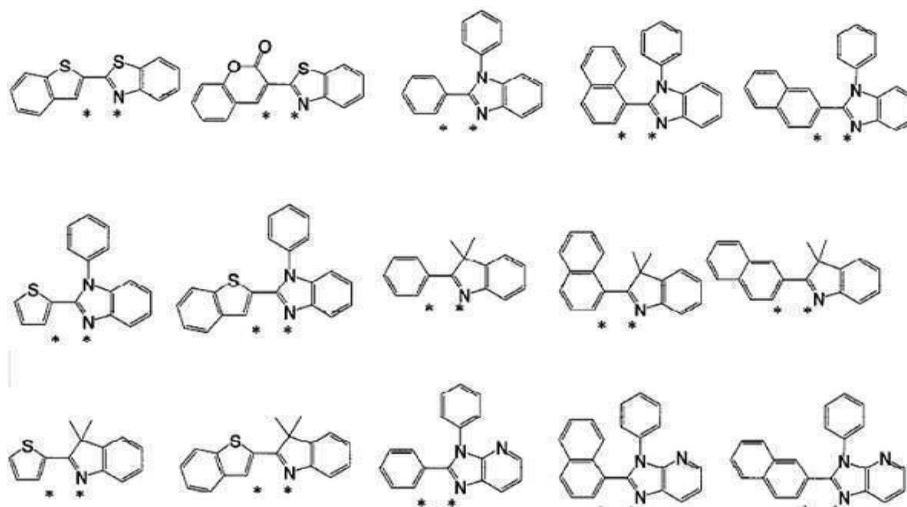
[0182] [구조식 D]



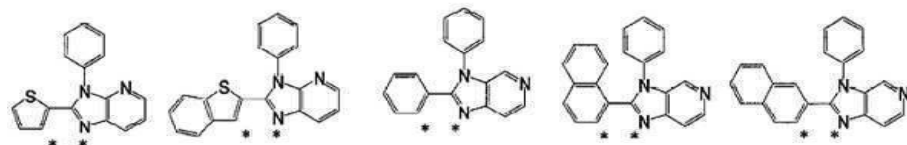
[0183]



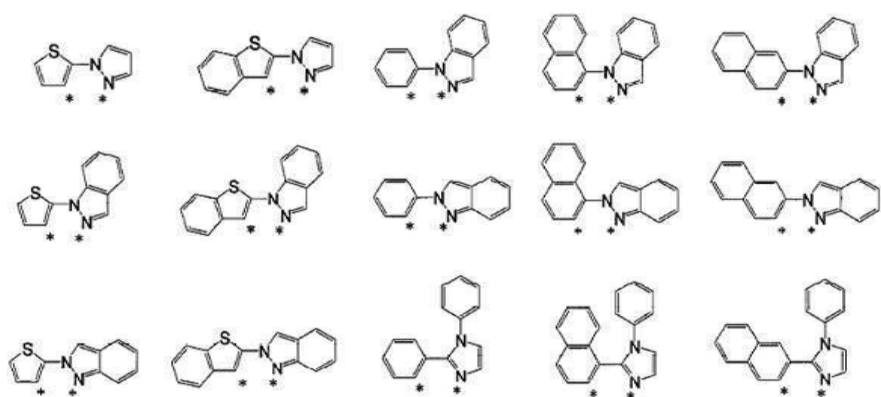
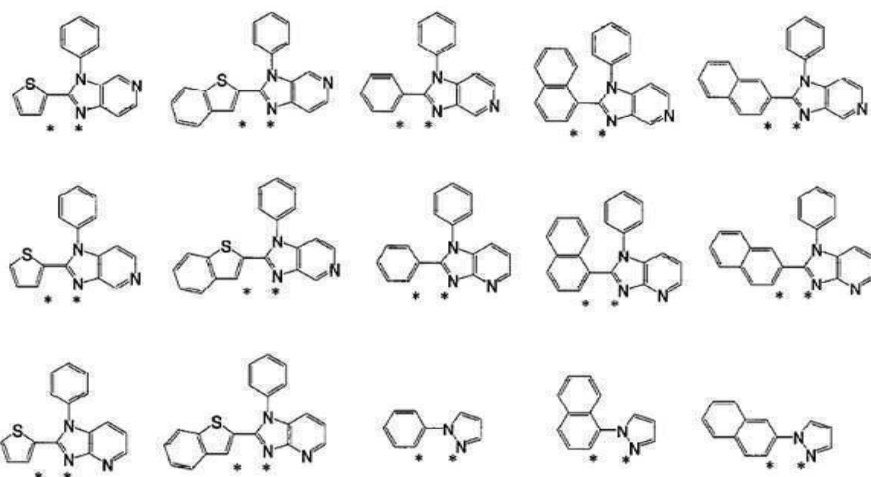
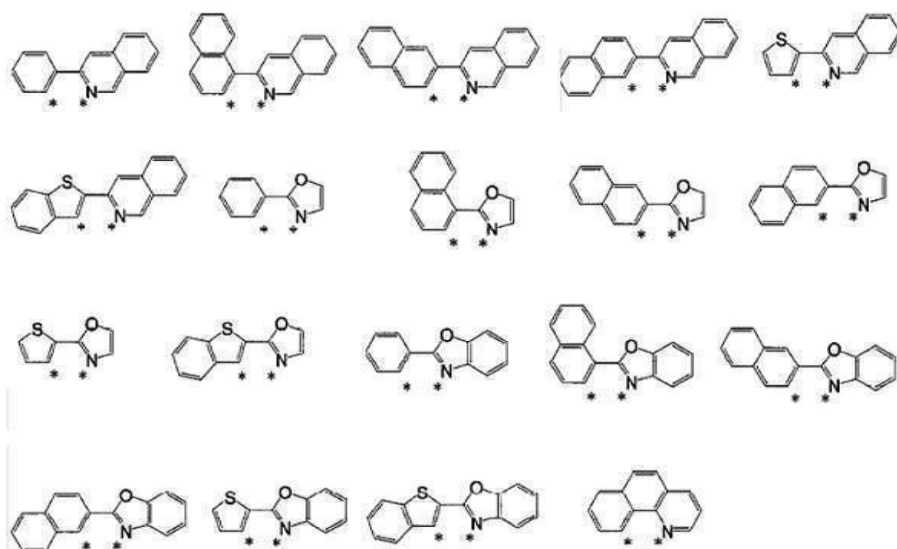
[0184]



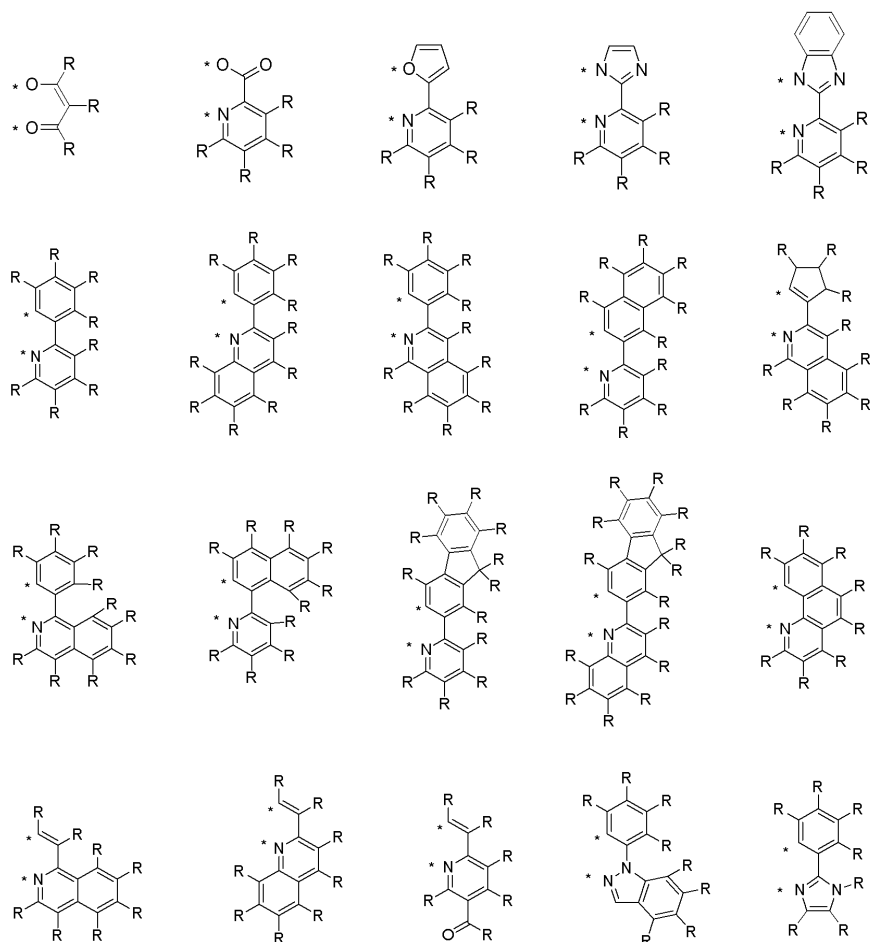
[0185]



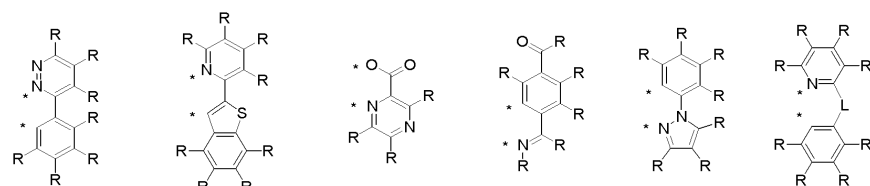








[0191]



[0192]

[0193]

상기 [구조식 D]에서,

[0194]

상기 R은 서로 상이하거나 동일하며 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 시아노기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 50의 아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 50의 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알콕시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 30의 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 30의 알케닐기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬아미노기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬실릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴아미노기 및 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴실릴기 중에서 선택되는 어느 하나일 수 있다.

[0195]

상기 R은 각각 독립적으로 탄소수 1 내지 20의 알킬기, 탄소수 3 내지 20의 시클로알킬기, 탄소수 6 내지 40의 아릴기, 탄소수 3 내지 20의 헤테로아릴기, 시아노기, 할로젠기, 중수소 및 수소 중에서 선택되는 1종 이상의 치환기로 더 치환될 수 있다.

[0196]

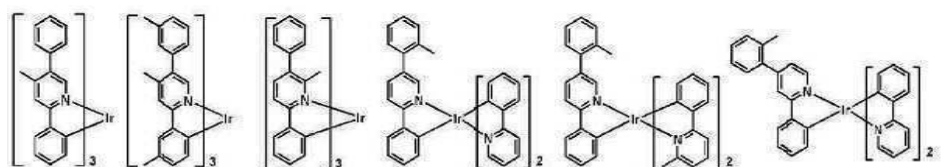
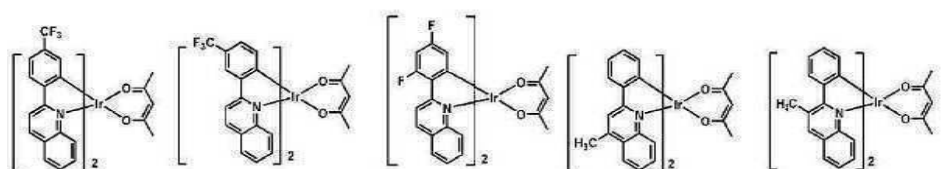
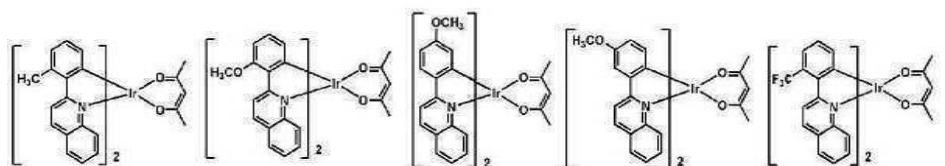
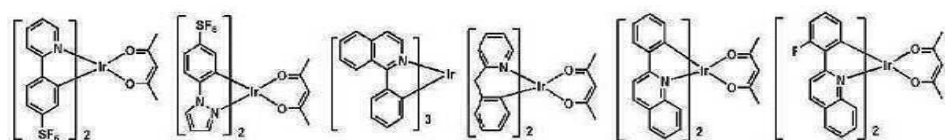
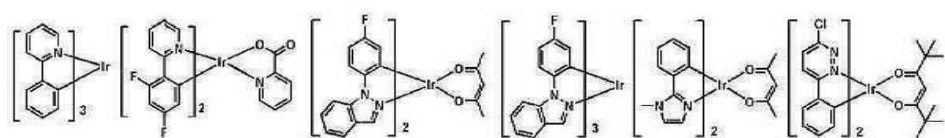
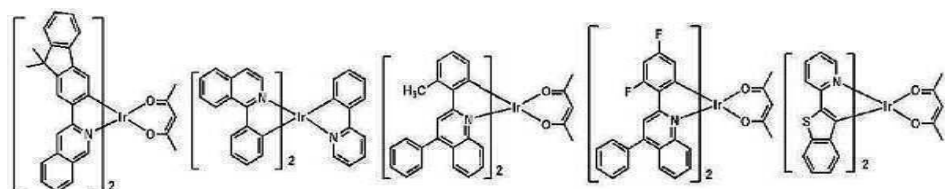
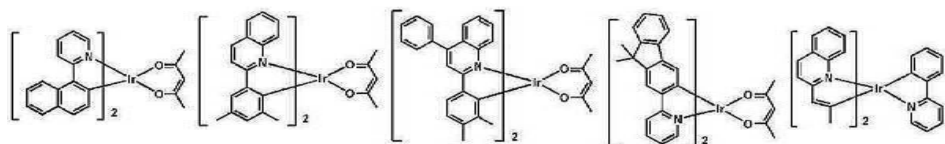
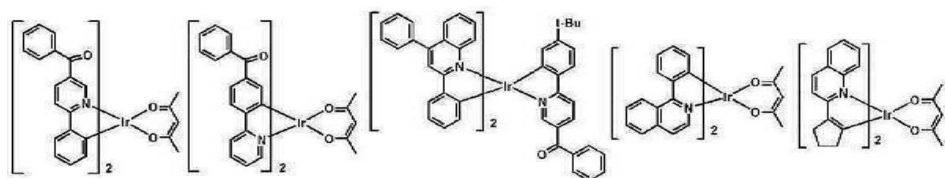
또한, 상기 R은 각각의 인접한 치환기와 알킬렌 또는 알케닐렌으로 연결되어 지환족 고리 및 단일환 또는 다환의 방향족 고리를 형성할 수 있다.

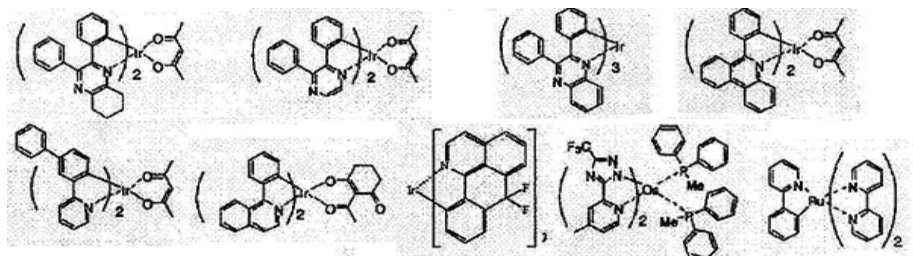
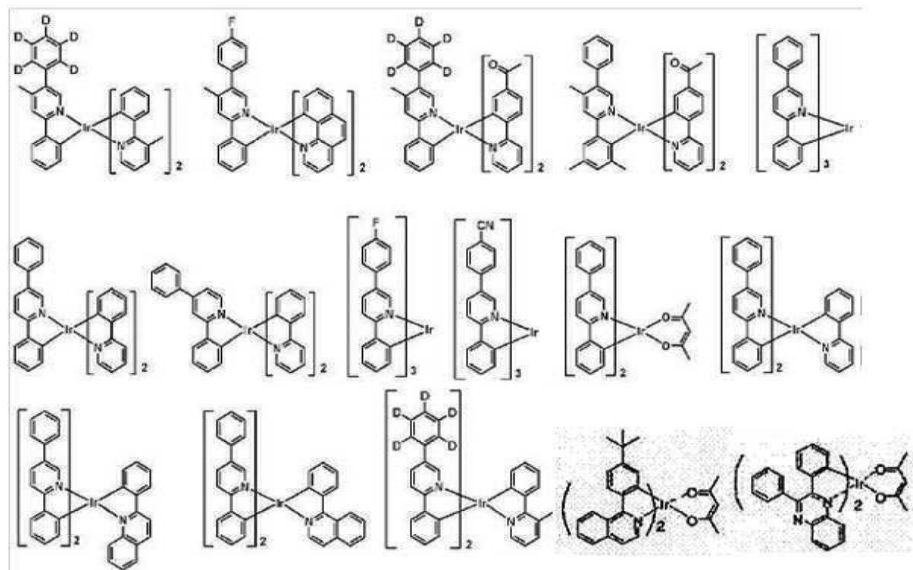
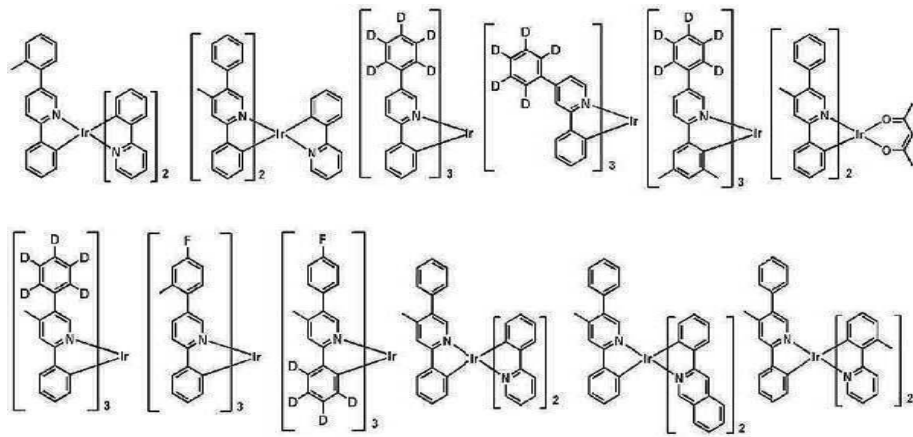
[0197]

상기 L은 인접한 치환체와 알킬렌 또는 알케닐렌으로 연결되어 스피로 고리 또는 융합 고리를 형성할 수 있다.

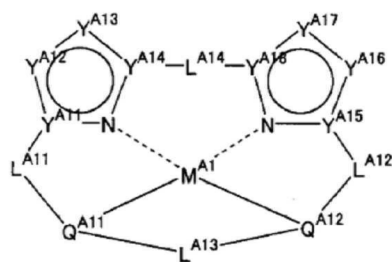
[0198]

구체적인 일 예로서, 상기 [일반식 A-1]으로 표시되는 도펀트는 하기 화합물 중에서 선택된 어느 하나일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.





[일반식 B-1]



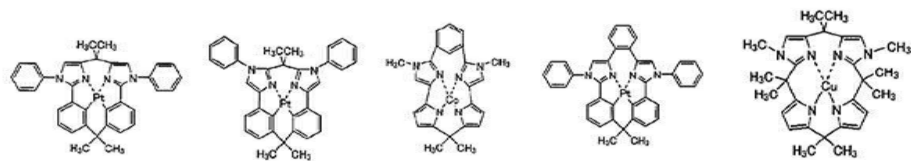
상기 [일반식 B-1]에서,

$M^{A1}$ 은 [일반식 A-1]에서 정의한 바와 동일한 금속 이온을 나타내며, 또한,  $Y^{A11}$ ,  $Y^{A14}$ ,  $Y^{A15}$  및  $Y^{A18}$ 은 각각 독립적으로 탄소 원자 또는 질소 원자를 나타내며,  $Y^{A12}$ ,  $Y^{A13}$ ,  $Y^{A16}$  및  $Y^{A17}$ 은 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 탄소

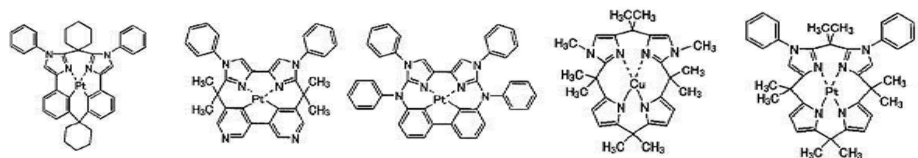


원자, 치환 또는 비치환된 질소원자, 산소원자, 황원자를 나타내고,  $L^{A11}$ ,  $L^{A12}$ ,  $L^{A13}$ ,  $L^{A14}$ 는 각각 앞서 정의한 바와 같은 연결기를 나타내며,  $Q^{A11}$ ,  $Q^{A12}$ 는  $M^{A1}$ 에 결합하는 원자를 함유하는 부분 구조를 나타낸다.

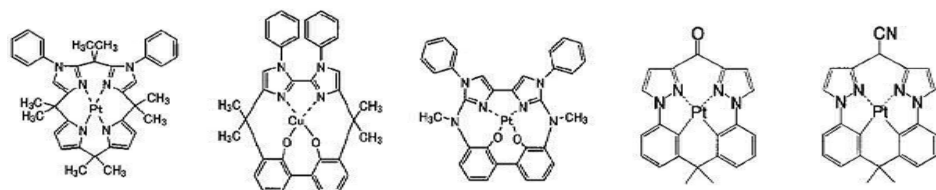
[0209] 상기 [일반식 B-1]으로 표시되는 화합물의 예시적인 구조는 아래와 같으나, 이에 한정되지 않는다.



[0210]

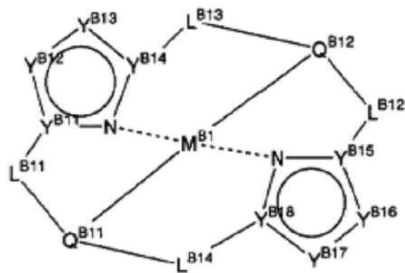


[0211]



[0212]

[일반식 C-1]



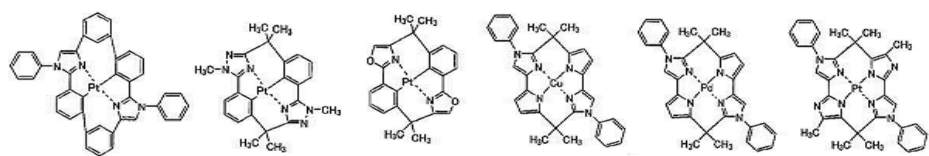
[0214]

상기 [일반식 C-1]에서,

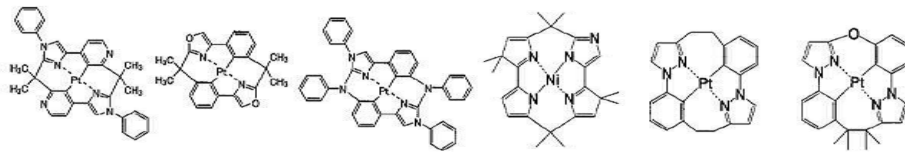
[0215]

$M^{B1}$ 은 [일반식 A-1]에서 정의한 바와 동일한 금속 이온을 나타내며,  $Y^{B11}$ ,  $Y^{B14}$ ,  $Y^{B15}$  및  $Y^{B18}$ 은 각각 독립적으로 탄소 원자 또는 질소 원자를 나타내고,  $Y^{B12}$ ,  $Y^{B13}$ ,  $Y^{B16}$  및  $Y^{B17}$ 은 각각 독립적으로 치환 또는 비치환의 탄소 원자, 치환 또는 비치환의 질소원자, 산소원자, 황원자를 나타내며,  $L^{B11}$ ,  $L^{B12}$ ,  $L^{B13}$ ,  $L^{B14}$ 는 연결기를 나타내고,  $Q^{B11}$ ,  $Q^{B12}$ 는  $M^{B1}$ 에 결합하는 원자를 함유하는 부분 구조를 나타낸다.

[0217] 상기 [일반식 C-1]으로 표시되는 화합물의 예시적인 구조는 아래와 같으나, 이에 한정되지 않는다.



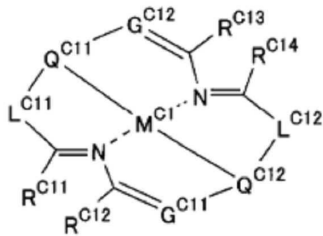
[0218]



[0219]

[0220]

[일반식 D-1]



[0221]

[0222]

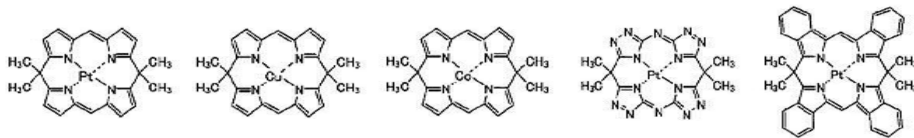
상기 [일반식 D-1]에서,

[0223]

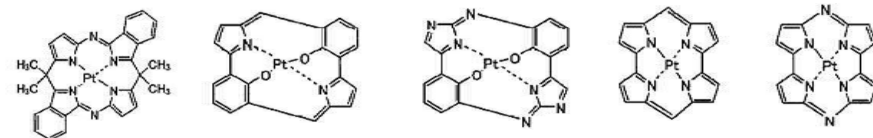
$M^{C1}$ 은 금속 이온을 [일반식 A-1]에서 정의한 바와 동일한 금속 이온을 나타내며,  $R^{C11}$ ,  $R^{C12}$ 는 각각 독립적으로 수소 원자, 서로 연결하고 5 원 고리를 형성하는 치환기, 서로 연결하는 것의 없는 치환기를 나타내며,  $R^{C13}$ ,  $R^{C14}$ 는 각각 독립에 수소 원자, 서로 연결하고 5 원 고리를 형성하는 치환기, 서로 연결하는 것의 것이 없는 치환기를 나타내며,  $G^{C11}$ ,  $G^{C12}$ 는 각각 독립에 질소 원자, 치환 또는 비치환의 탄소 원자를 나타내며,  $L^{C11}$ ,  $L^{C12}$ 는 연결기를 나타내며,  $Q^{C11}$ ,  $Q^{C12}$ 는  $M^{C1}$ 에 결합하는 원자를 함유하는 부분 구조를 나타낸다.

[0224]

상기 [일반식 D-1]으로 표시되는 화합물의 예시적인 구조는 아래와 같으나, 이에 한정되지 않는다.



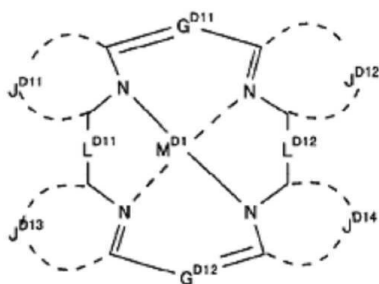
[0225]



[0226]

[0227]

[일반식 E-1]



[0228]

[0229]

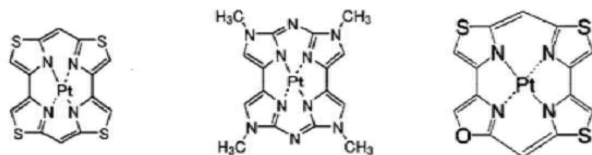
상기 [일반식 E-1]에서,

[0230]

$M^{D1}$ 은 [일반식 A-1]에서 정의한 바와 동일한 금속 이온을 나타내며,  $G^{D11}$ ,  $G^{D12}$ 는 각각 독립적으로 질소 원자, 치

환 또는 비치환된 탄소 원자를 나타내며,  $J^{D11}$ ,  $J^{D12}$ ,  $J^{D13}$  및  $J^{D14}$ 는 각각 독립에 5 원 고리를 형성하는데도 필요한 원자군을 나타내며,  $L^{D11}$ ,  $L^{D12}$ 는 연결기를 나타낸다.

[0231] 상기 [일반식 E-1]으로 표시되는 화합물의 예시적인 구조는 아래와 같으나, 이에 한정되지 않는다.



[0232]

[0233] [일반식 F-1]

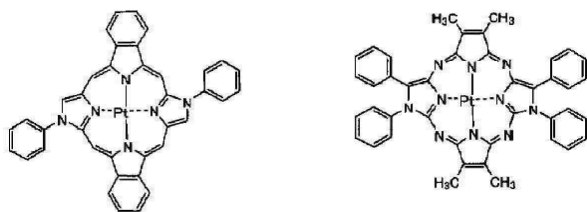


[0234]

[0235] 상기 [일반식 F-1]에서,

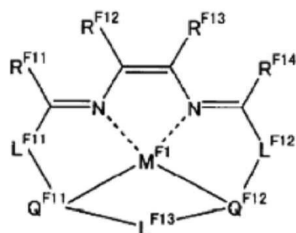
[0236]  $M^{E1}$ 은 [일반식 A-1]에서 정의한 바와 동일한 금속 이온을 나타내며,  $J^{E11}$ ,  $J^{E12}$ 는 각각 독립적으로 5 원 고리를 형성하는데도 필요한 원자군을 나타내며,  $G^{E11}$ ,  $G^{E12}$ ,  $G^{E13}$  및  $G^{E14}$ 는 각각 독립적으로 질소 원자, 치환 또는 비치환된 탄소 원자를 나타내며,  $Y^{E11}$ ,  $Y^{E12}$ ,  $Y^{E13}$  및  $Y^{E14}$ 는 각각 독립적으로 질소 원자, 치환 또는 비치환된 탄소원자를 나타낸다.

[0237] 상기 [일반식 F-1]으로 표시되는 화합물의 예시적인 구조는 아래와 같으나, 이에 한정되지 않는다.



[0238]

[0239] [일반식 G-1]



[0240]

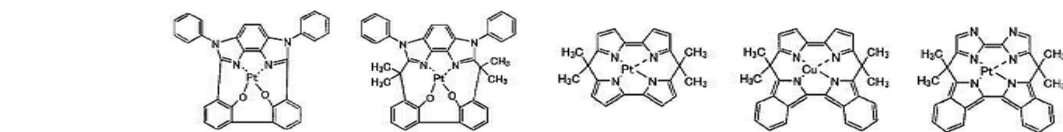
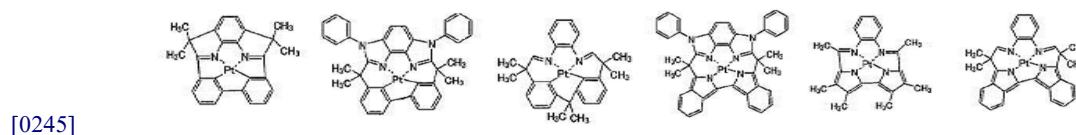
[0241] 상기 [일반식 G-1]에서,



[0242]  $M^{F1}$ 은 [일반식 A-1]에서 정의한 바와 동일한 금속 이온을 나타낸다.

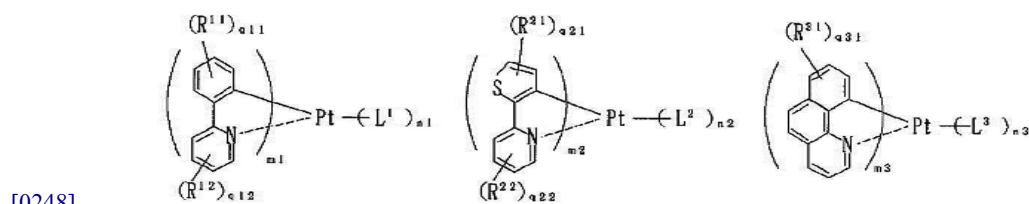
[0243]  $L^{F11}$ ,  $L^{F12}$  및  $L^{F13}$ 은 연결기를 나타내며,  $R^{F11}$ ,  $R^{F12}$ ,  $R^{F13}$  및  $R^{F14}$ 는 치환기를 나타내고,  $R^{F11}$ 과  $R^{F12}$ ,  $R^{F12}$ 와  $R^{F13}$ ,  $R^{F13}$ 과  $R^{F14}$ 는 서로 연결되어 고리를 형성할 수 있고, 이때  $R^{F1}$ 과  $R^{F12}$ ,  $R^{F13}$ 과  $R^{F14}$ 가 형성하는 고리는 5 원환이다. 또한  $Q^{F11}$ ,  $Q^{F12}$ 는  $M^{F1}$ 에 결합하는 원자를 함유하는 부분 구조를 나타낸다.

[0244] 상기 [일반식 G-1]으로 표시되는 화합물의 예시적인 구조는 아래와 같으나, 이에 한정되지 않는다.



[0246]

[0247] [일반식 H-1] [일반식 H-2] [일반식 H-3]



[0249] 상기 [일반식 H-1] 내지 [일반식 H-3]에서,

[0250]  $R^{11}$ ,  $R^{12}$ 는 알킬, 아릴 또는 헤테로아릴의 치환기이며; 또한 서로 인접한 치환기와 융합고리를 형성할 수 있고,  $q_{11}$ ,  $q_{12}$ 는 0 내지 4의 정수로서, 바람직하게는 0 내지 2가 될 수 있다.

[0251] 또한,  $q_{11}$ ,  $q_{12}$ 가 2 내지 4인 경우, 복수 개의  $R_{11}$  및  $R_{12}$ 는 각각 동일하거나 상이할 수 있다.

[0252]  $L^1$ 은 백금에 결합하는 리간드로서, 오르토 메탈(ortho metal)화 백금 착체를 형성할수 있는 리간드, 함질소헤테로환 리간드, 디케톤 리간드, 할로겐 리간드가 바람직하고, 보다 바람직하게는 오르토 메탈(ortho metal)화 백금 착체를 형성하는 리간드, 비피리딜 리간드 또는 페난트로린 리간드이다.

[0253]  $n^1$ 은 0 내지 3의 정수이며, 바람직하게는 0이고,  $m^1$ 은 1 또는 2이고 바람직하게는 2이다.

[0254] 또한, 상기  $n^1$ ,  $m^1$ 은 상기 일반식 H-1로 나타나는 금속 착체가 중성 착체가 되도록 하는 것이 바람직하다.

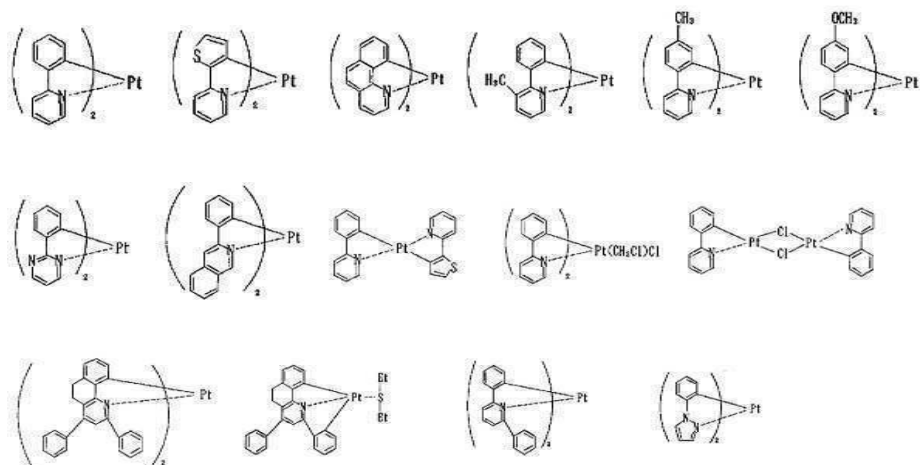
[0255] 상기 [일반식 H-2]에서,

[0256]  $R^{21}$ ,  $R^{22}$ ,  $n^2$ ,  $m^2$ ,  $q^{22}$ ,  $L^2$ 는 각각 상기  $R^{11}$ ,  $R^{12}$ ,  $n^1$ ,  $m^1$ ,  $q^{12}$ ,  $L^1$ 과 동일하고,  $q^{21}$ 은 0 내지 2의 정수이며, 0이 바람직하다.

[0257] 상기 [일반식 H-3]에서,

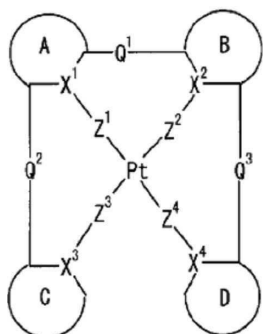
[0258]  $R^{31}$ ,  $n^3$ ,  $m^3$ ,  $L^3$ 은 각각 상기  $R^{11}$ ,  $n^1$ ,  $m^1$ ,  $L^1$ 과 동일하고,  $q^{31}$ 은 0 내지 8의 정수를 나타내고, 0 내지 2가 바람직하고, 0이 보다 바람직하다.

[0259] 상기 [일반식 H-1] 내지 [일반식 H-3]의 구체적인 화합물의 예는 다음과 같으나, 이에 한정되는 것은 아니다.



[0260]

[0261] [일반식 I-1]

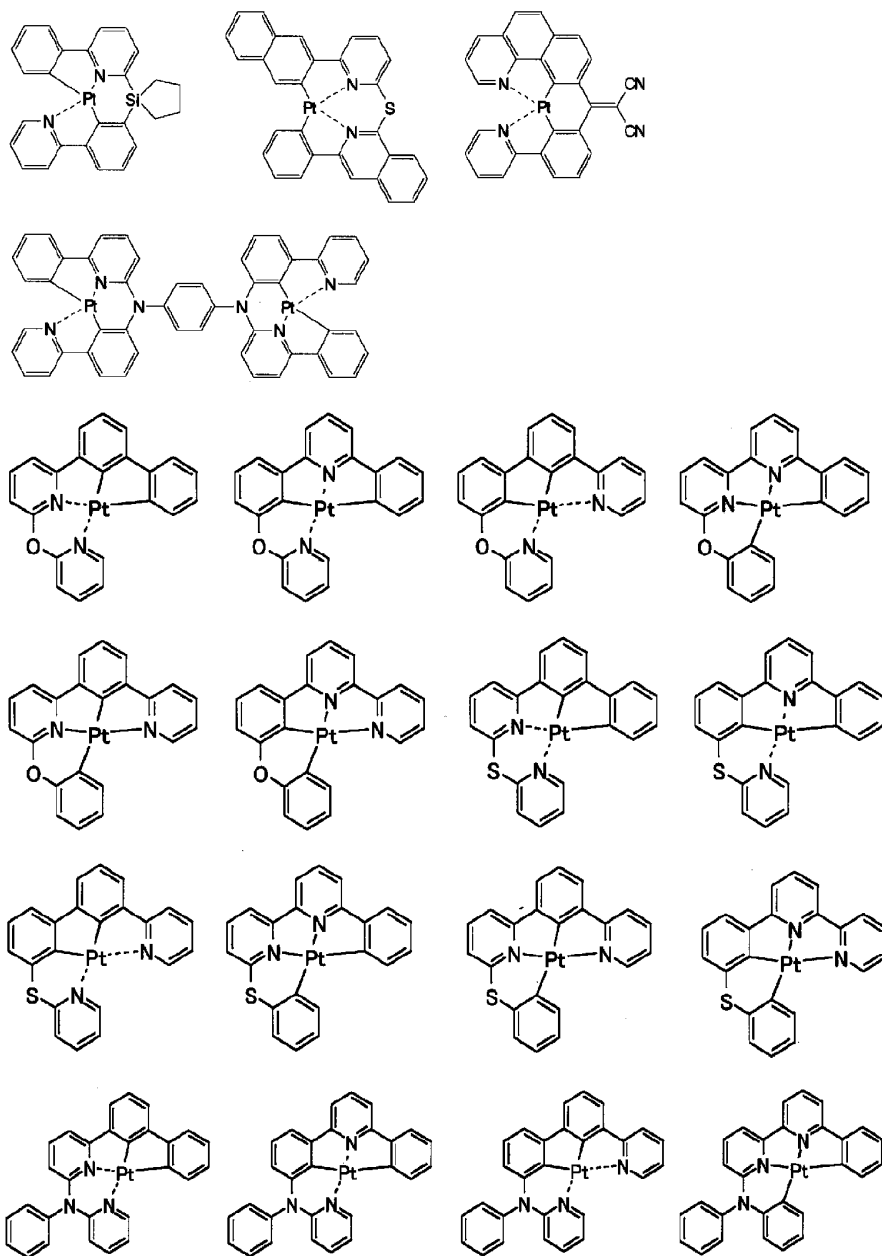


[0262]

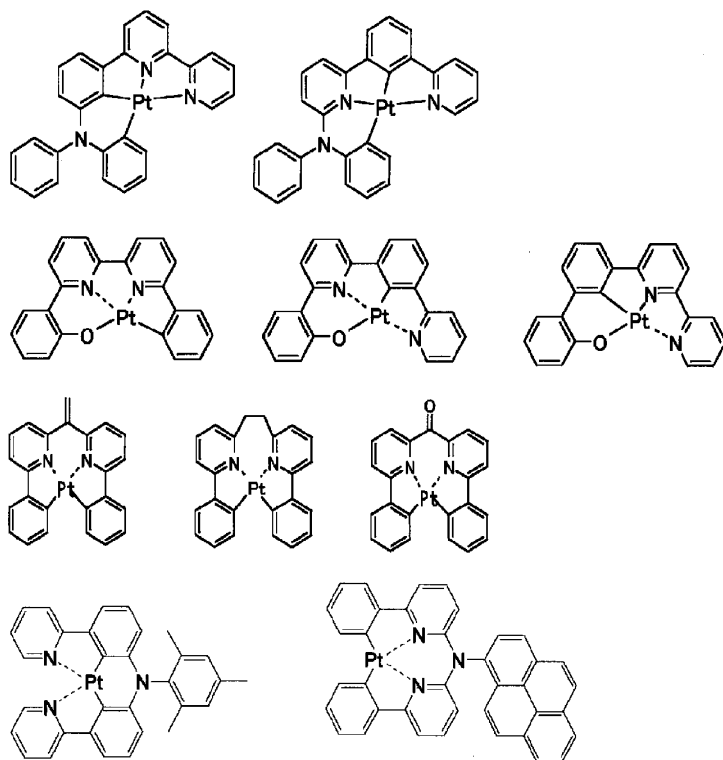
[0263] 상기 [일반식 I-1]에서,

[0264] 고리A, 고리B, 고리C 및 고리D는 상기 고리 A내지 D중의 어느 2개의 고리는 치환기를 가질 수 있는 질소 함유 헤테로고리를 나타내고, 나머지 2개의 환은 고리는 치환기를 가질 수 있는 아릴고리 또는 헤테로아릴고리를 나타내고, 나타내며, 고리A와 고리B, 고리A와 고리C 및/또는 고리B와 고리D로 축합환을 형성할 수 있다.  $X^1$ ,  $X^2$ ,  $X^3$  및  $X^4$ 는 이 중의 어느 2개가 백금원자에 배위결합하는 질소원자를 나타내고, 나머지 2개는 탄소원자 또는 질소원자를 나타낸다.  $Q^1$ ,  $Q^2$  및  $Q^3$ 은 각각 독립적으로 2가의 원자(단) 또는 결합을 나타내지만,  $Q^1$ ,  $Q^2$  및  $Q^3$ 이 동시에 결합을 나타내지는 않는다.  $Z^1$ ,  $Z^2$ ,  $Z^3$  및  $Z^4$ 는 어느 2개가 배위결합을 나타내고, 나머지 2개는 공유결합, 산소원자 또는 황원자를 나타낸다.





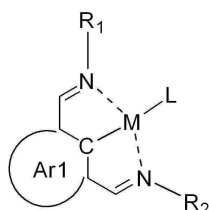
[0267]



[0268]

[0269]

[일반식 J-1]



[0270]

[0271]

상기 [일반식 J-1]에 있어서,

[0272]

M은 [일반식 A-1]에서 정의한 바와 동일한 금속 이온을 나타내며, Ar1은 치환 또는 비치환의 고리구조를 표현하고, 상기 M에 결합하는 2개의 아조메틴(azomethine) 결합( $-C=N-$ )에 있어서, 질소원자(N)는 각각 상기 M에 결합하고, 전체로서 상기 M에 3좌에서 결합되는 3좌 배위자를 형성하고 있다.

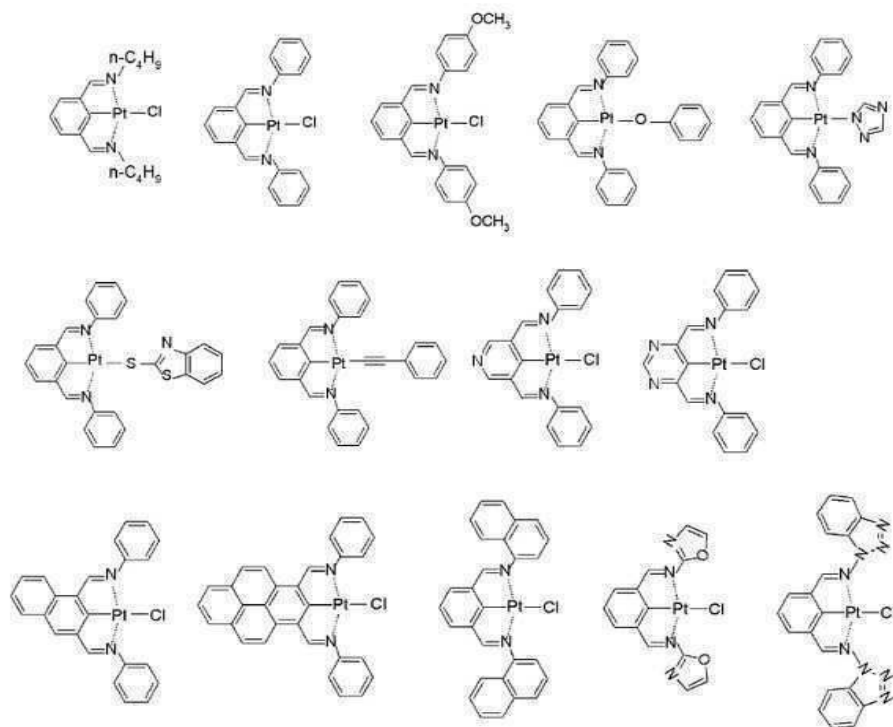
[0273]

또한, Ar1에 있어서 C는 Ar1으로 표시되는 고리구조를 구성하는 탄소원자를 나타낸다. 또한 상기 R1 및 R2는, 서로 동일하거나 상이할 수 있고, 각각 치환 또는 비치환의 알킬기 또는 아릴기를 나타내며, L은 1좌 배위자를 표현한다.

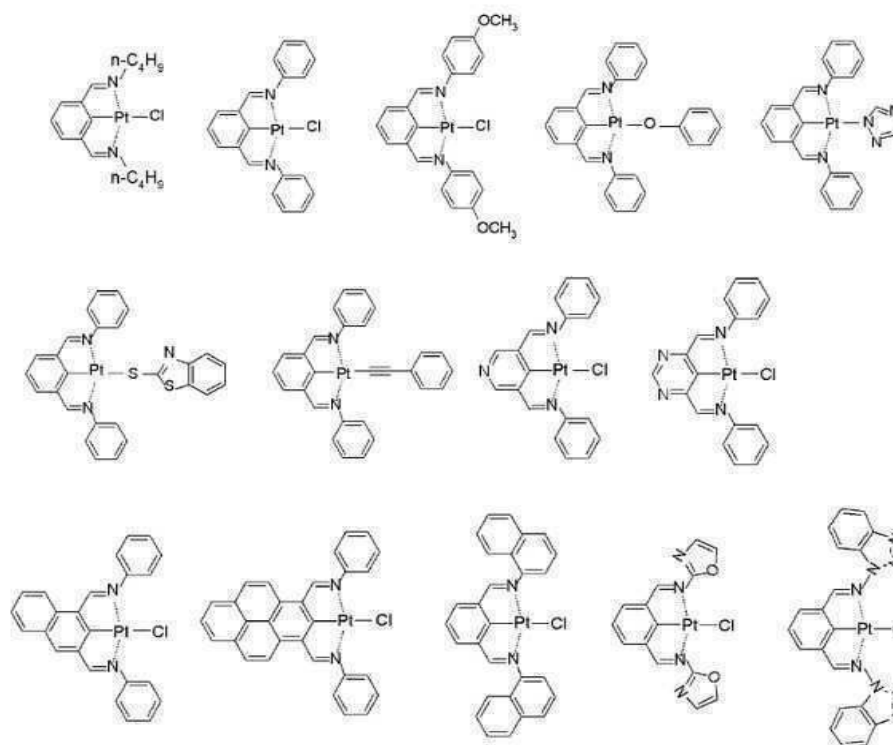
[0274]

상기 [일반식J-1]에 있어서, 상기 M은 Pt인 것이 바람직하다. 또한, 상기 Ar1으로서는, 5원환, 6원환 및 이들의 축합환기부터 선택되는 것이 바람직하다.

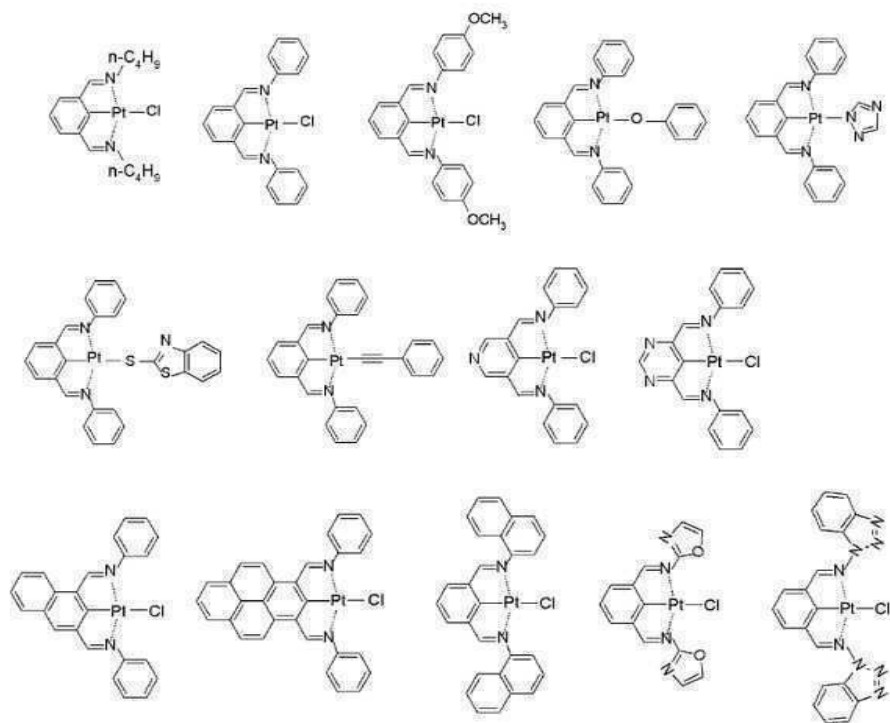
[0275] 상기 [일반식 J-1]의 구체적인 화합물의 예는 다음과 같으나, 이에 한정되는 것은 아니다.



[0276]



[0277]



[0278]

[0279]

또한, 상기 유기 박막층은 본 발명에 따른 유기전계발광 화합물과 상기 도판트 화합물 이외에도 다양한 호스트 화합물과 다양한 도판트 화합물을 더 포함할 수 있다.

[0280]

본 발명의 또 다른 측면은 상기 유기 박막층을 포함하는 유기전계발광소자에 관한 것으로서, 상기 유기전계발광 소자 음극과 양극 사이에 발광층을 포함하는 1 이상의 유기 박막층이 협지되어 있고, 유기 박막층의 적어도 한 층이 본 발명에 따른 [화학식 1]의 유기발광 화합물을 단독 또는 혼합물의 성분으로 포함하고, 추가로 상기 예시된 도판트 화합물을 더 포함할 수 있다.

[0281]

본 발명에 따른 유기전계발광소자는 발광층 외에 정공주입층, 정공수송층, 전자저지층, 정공저지층, 전자수송층 및 전자주입층으로 이루어진 군으로부터 선택된 하나 이상의 층을 더 포함할 수 있고, 본 발명에 따른 유기발광 화합물은 발광층 외에, 정공 주입층, 정공 수송층, 전자 주입층, 전자 수송층에 이용할 수도 있다.

[0282]

구체적인 예로서, 정공수송층(HTL, Hole Transport Layer)이 추가로 적층되어 있고, 상기 캐소드와 상기 유기발광층 사이에 전자수송층(ETL, Electron Transport Layer)이 추가로 적층되어 있는 것일 수 있는데, 상기 정공수송층은 애노드로부터 정공을 주입하기 쉽게 하기 위하여 적층되는 것으로서, 상기 정공수송층의 재료로는 이온화 포텐셜이 작은 전자공여성 분자가 사용되는데, 주로 트리페닐아민을 기본 골격으로 하는 디아민, 트리아민 또는 테트라아민 유도체가 많이 사용되고 있다.

[0283]

본 발명에서도 상기 정공수송층의 재료로서 당업계에서 통상적으로 사용되는 것인 한 특별히 제한되지 않으며, 예를 들어, N,N'-비스(3-메틸페닐)-N,N'-디페닐-[1,1'-비페닐]-4,4'-디아민(TPD) 또는 N,N'-디(나프탈렌-1-일)-N,N'-디페닐 벤지딘( $\alpha$ -NPD) 등을 사용할 수 있다.

[0284]

상기 정공수송층의 하부에는 정공주입층(HIL, Hole Injecting Layer)을 추가적으로 더 적층할 수 있는데, 상기 정공주입층 재료 역시 당업계에서 통상적으로 사용되는 것인 한 특별히 제한되지 않고 사용할 수 있으며, 예를 들어 CuPc(copper phthalocyanine) 또는 스타버스트(Starburst)형 아민류인 TCTA(4,4',4"-tri(N-carbazolyl)triphenyl-amine), m-MTDATA(4,4',4"-tris-(3-methylphenylphenylamino)triphenylamine)등을 사용할 수 있다.

[0285]

또한, 본 발명에 따른 유기전계발광소자에 사용되는 상기 전자수송층은 캐소드로부터 공급된 전자를 유기발광층으로 원활히 수송하고 상기 유기발광층에서 결합하지 못한 정공의 이동을 억제함으로써 발광층 내에서 재결합할 수 있는 기회를 증가시키는 역할을 한다.

[0286]

상기 전자수송층 재료로는 당 기술분야에서 통상적으로 사용되는 것이면 특별히 제한되지 않고 사용할 수 있음



은 물론이며, 예를 들어 옥사디아졸 유도체인 PBD, BMD, BND 또는 Alq3 등을 사용할 수 있다.

[0287] 한편, 상기 전자수송층의 상부에는 캐소드로부터의 전자 주입을 용이하게 해주어 궁극적으로 파워효율을 개선시키는 기능을 수행하는 전자주입층(EIL, Electron Injecting Layer)을 더 적층시킬 수도 있는데, 상기 전자주입층 재료 역시 당 기술분야에서 통상적으로 사용되는 것이면 특별한 제한없이 사용할 수 있으며, 예를 들어, LiF, NaCl, CsF, Li2O, BaO 등의 물질을 이용할 수 있다.

[0288] 본 발명에 따른 유기전계발광소자는 표시소자, 디스플레이 소자 및 단색 또는 백색 조명용 소자 등에 사용될 수 있다.

[0289] 도 1은 본 발명의 유기전계발광소자의 구조를 나타내는 단면도이다. 본 발명에 따른 유기전계발광소자는 애노드(20), 정공수송층(40), 유기발광층(50), 전자수송층(60) 및 캐소드(80)를 포함하며, 필요에 따라 정공주입층(30)과 전자주입층(70)을 더 포함할 수 있으며, 그 이외에도 1층 또는 2층의 중간층을 더 형성하는 것도 가능하며, 정공저지층 또는 전자저지층을 더 형성시킬 수도 있다.

[0290] 도 1을 참조하여 본 발명의 유기전계발광소자 및 그 제조방법에 대하여 살펴보면 다음과 같다. 먼저 기판(10) 상부에 애노드 전극용 물질을 코팅하여 애노드(20)를 형성한다. 여기에서 기판(10)으로는 통상적인 유기 EL 소자에서 사용되는 기판을 사용하는데 투명성, 표면 평활성, 취급용이성 및 방수성이 우수한 유기 기판 또는 투명 플라스틱 기판이 바람직하다. 그리고, 애노드 전극용 물질로는 투명하고 전도성이 우수한 산화인듐주석(ITO), 산화인듐아연(IZO), 산화주석(SnO2), 산화아연(ZnO) 등을 사용한다.

[0291] 상기 애노드(20) 전극 상부에 정공 주입층 물질을 진공열 증착, 또는 스핀 코팅하여 정공주입층(30)을 형성한다. 그 다음으로 상기 정공주입층(30)의 상부에 정공수송층 물질을 진공 열증착 또는 스핀 코팅하여 정공수송층(40)을 형성한다.

[0292] 이어서, 상기 정공수송층(40)의 상부에 유기발광층(50)을 적층하고 상기 유기발광층(50)의 상부에 선택적으로 정공저지층(미도시)을 진공 증착 방법, 또는 스핀 코팅 방법으로서 박막을 형성할 수 있다. 상기 정공저지층은 정공이 유기발광층을 통과하여 캐소드로 유입되는 경우에는 소자의 수명과 효율이 감소되기 때문에 HOMO(Highest Occupied Molecular Orbital) 레벨이 매우 낮은 물질을 사용함으로써 이러한 문제를 방지하는 역할을 한다. 이 때, 사용되는 정공 저지 물질은 특별히 제한되지는 않으나 전자수송능력을 가지면서 발광 화합물보다 높은 이온화 포텐셜을 가져야 하며 대표적으로 BAlq, BCP, TPBI 등이 사용될 수 있다.

[0293] 이러한 정공저지층 위에 전자수송층(60)을 진공 증착 방법, 또는 스핀 코팅 방법을 통해 증착한 후에 전자주입층(70)을 형성하고 상기 전자주입층(70)의 상부에 캐소드 형성용 금속을 진공 열증착하여 캐소드(80) 전극을 형성함으로써 유기 EL 소자가 완성된다. 여기에서 캐소드 형성용 금속으로는 리튬(Li), 마그네슘(Mg), 알루미늄(Al), 알루미늄-리튬(Al-Li), 칼슘(Ca), 마그네슘-인듐(Mg-In), 마그네슘-은(Mg-Ag) 등을 사용할 수 있으며, 전면 발광 소자를 얻기 위해서는 ITO, IZO를 사용한 투과형 캐소드를 사용할 수 있다.

[0294] 또한, 본 발명의 다른 일실시예에 의하면, 상기 정공주입층, 정공수송층, 전자저지층, 발광층, 정공저지층, 전자수송층 및 전자주입층으로부터 선택된 하나 이상의 층은 단분자 증착방식 또는 용액공정에 의하여 형성될 수 있으며, 본 발명에 따른 유기전계발광소자는 표시소자, 디스플레이 소자 및 단색 또는 백색 조명용 소자에 사용될 수 있다.

[0295] 이하, 바람직한 실시예를 들어 본 발명을 더욱 상세하게 설명한다. 그러나, 이들 실시예는 본 발명을 보다 구체적으로 설명하기 위한 것으로, 본 발명의 범위가 이에 의하여 제한되지 않고, 본 발명의 범주 및 기술사상 범위 내에서 다양한 변경 및 수정이 가능함은 당업계의 통상의 지식을 가진 자에게 자명할 것이다.

[0296] <실시예>

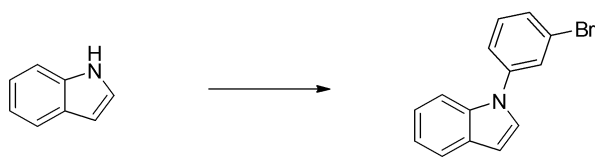
[0297] <실시예 1> [화학식 2]로 표시되는 화합물의 합성

[0298] (1) [화학식 1-a]로 표시되는 화합물의 합성

[0299] 하기 [반응식 1]에 의하여 [화학식 1-a]로 표시되는 화합물을 합성하였다.



[0300] [반응식 1]



[0301]

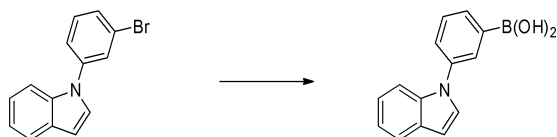
[0302] [화학식 1-a]

[0303] 인돌 50.0 g (426.8 mmol), 1-브로모-3-아이오도벤젠 181.1 g (640.2 mmol), 구리분말 63.5 g (853.6 mmol), 18-크라운-6 22.6 g (83.4 mmol), 탄산칼륨 176.9 g (1280.4 mmol)을 순서대로 넣고, 1,2-디클로로벤젠 500 mL를 가한 후, 180 °C에서 1일 동안 환류 교반시킨다. 반응이 종료되면, 고온필터 후 용액을 농축하고 헥산 단독으로 컬럼크로마토그래피를 하여 [화학식 1-a]로 표시되는 화합물 48 g을 얻었다. (수율 41%)

[0304] (2) [화학식 1-b]로 표시되는 화합물의 합성

[0305] 하기 [반응식 2]에 의하여 [화학식 1-b]로 표시되는 화합물을 합성하였다.

[0306] [반응식 2]



[0307]

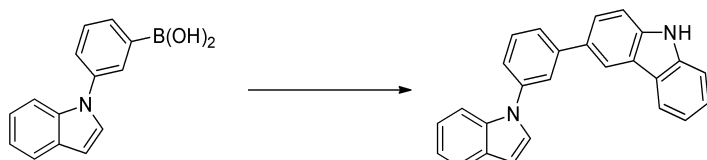
[0308] [화학식 1-a] [화학식 1-b]

[0309] 상기 [반응식 1]로부터 얻은 [화학식 1-a]로 표시되는 화합물 48.0 g (176.4 mmol)을 질소 기류하에서 테트라하이드로퓨란 480 mL에 녹인 후 -78 °C에서 교반하면서 1.6 M 노르말-부틸리튬 132 mL (211.6 mmol)을 천천히 적가하고, 적가가 완료되면 -78 °C를 유지하면서 1시간 동안 교반시킨다. 그 후 트리메틸보레이트 25.7 g (246.9 mmol)을 천천히 적가한 후 상온으로 올려서 1시간 동안 교반시킨다. 반응이 종료되면 1 M 염산수용액 200 mL를 상온에서 적가한 후 30분간 교반시킨다. 그 후 에틸아세테이트와 물로 추출하고 유기층을 감압농축하고 메틸렌클로라이드와 헥산에서 재결정하여 [화학식 1-b]로 표시되는 화합물 25.2 g을 얻었다. (수율 60 %)

[0310] (3) [화학식 1-c]로 표시되는 화합물의 합성

[0311] 하기 [반응식 3]에 의하여 [화학식 1-c]로 표시되는 화합물을 합성하였다.

[0312] [반응식 3]



[0313]

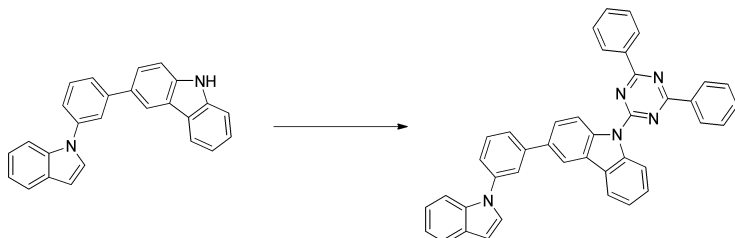
[0314] [화학식 1-b] [화학식 1-c]

[0315] 상기 [반응식 2]로부터 얻은 [화학식 1-b]로 표시되는 화합물 10.0 g (40.6 mmol), 3-브로모카바졸 14.45 g (60.95 mmol), 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐 940 mg (0.8 mmol), 탄산칼륨 11.23 g (81.27 mmol), 1,4-다이옥산 50 mL, 톨루엔 50 mL, 증류수 20 mL에 넣고 100 °C에서 12시간 동안 교반시킨다. 반응이 종료되면 메틸렌클로라이드와 증류수를 사용하여 추출한다. 유기층을 감압농축하고 메틸렌클로라이드와 아세톤으로 재결정하여 [화학식 1-c]로 표시되는 화합물 8.2 g을 얻었다. (수율 56%)

[0316] (4) [화학식 2]로 표시되는 화합물의 합성

[0317] 하기 [반응식 4]에 의하여 [화학식 2]로 표시되는 화합물을 합성하였다.

[0318] [반응식 4]



[0319]

[0320] [화학식 1-c]

[화학식 2]

[0321] 상기 [반응식 3]로부터 얻은 [화학식 1-c]로 표시되는 화합물 20.0 g (55.80 mmol), 60% 소듐 하이드라이드 5.58 g (83.70 mmol)을 디메틸포름아마이드 300 mL에 넣고 상온에서 30분 동안 교반시킨다. 그 후 클로로디페닐 트리아진 17.93 g (66.96 mmol)을 디메틸포름아마이드 200 mL에 녹여 천천히 적가한 후 1시간 동안 교반시킨다. 반응이 종료되면 증류수 200 mL를 첨가해주고 여과 후 재결정하여 [화학식 2]로 표시되는 화합물 22.0 g을 얻었다. (수율 67%)

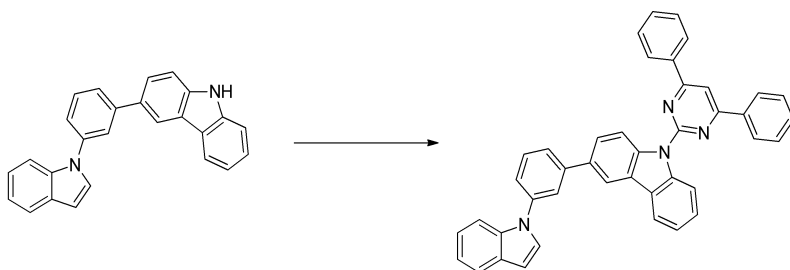
[0322] MS  $[M]^+$  589.23

[0323] <실시예 2> [화학식 3]로 표시되는 화합물의 합성

[0324] (1) [화학식 3]로 표시되는 화합물의 합성

[0325] 하기 [반응식 5]에 의하여 [화학식 3]로 표시되는 화합물을 합성하였다.

[0326] [반응식 5]



[0327]

[0328] [화학식 1-c]

[화학식 3]

[0329] 상기 [반응식 3]로부터 얻은 [화학식 1-c]로 표시되는 화합물 20.0 g (55.80 mmol), 60% 소듐 하이드라이드 5.58 g (83.70 mmol)을 디메틸포름아마이드 300 mL에 넣고 상온에서 30분 동안 교반시킨다. 그 후 클로로디페닐 피리미딘 17.86 g (66.96 mmol)을 디메틸포름아마이드 200 mL에 녹여 천천히 적가한 후 1시간 동안 교반시킨다. 반응이 종료되면 증류수 200 mL를 첨가해주고 여과 후 재결정하여 [화학식 3]로 표시되는 화합물 24.0 g을 얻었다. (수율 73%)

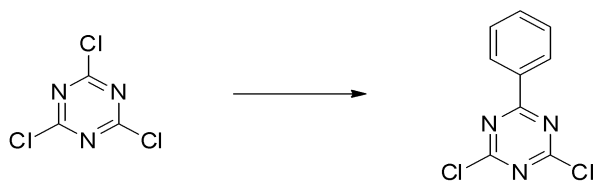
[0330] MS  $[M]^+$  588.23

[0331] <실시예 3> [화학식 26]로 표시되는 화합물의 합성

[0332] (1) [화학식 3-a]로 표시되는 화합물의 합성

[0333] 하기 [반응식 6]에 의하여 [화학식 3-a]로 표시되는 화합물을 합성하였다.

[0334] [반응식 6]



[0335]

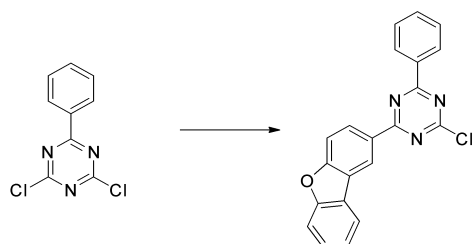
[0336] [화학식 3-a]

[0337] 2,4,6-트리클로로트리아진 20.0 g (109 mmol), 브로모벤젠 17.1 g (109.0 mmol) 및 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐 2.5 g (2.2 mmol), 탄산칼륨 30.1 g (218.0 mmol)을 테트라히드라퓨란 600 mL와 톨루엔 400 mL, 증류수 400 mL의 혼합용매에 넣고 9시간 동안 교반 환류시킨다. 반응이 종료되면 추출 후 유기층을 염화나트륨 포화수용액으로 세정하고, 무수 황산나트륨으로 건조시킨다. 유기용매를 감압 하에서 증류하여 제거한 후, 톨루엔으로 재결정하여 [화학식 3-a]로 표시되는 화합물 20.7 g을 얻었다. (수율 84%)

[0338] (2) [화학식 3-b]로 표시되는 화합물의 합성

[0339] 하기 [반응식 7]에 의하여 [화학식 3-b]로 표시되는 화합물을 합성하였다.

[0340] [반응식 7]



[0341]

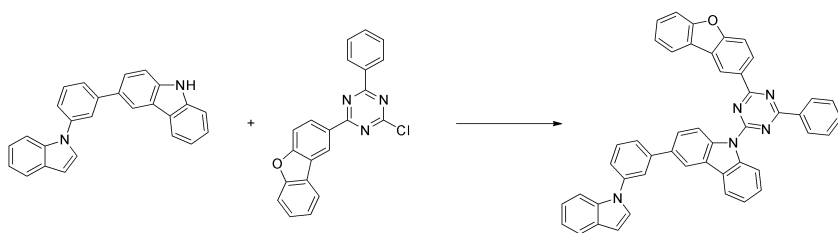
[0342] [화학식 3-a] [화학식 3-b]

[0343] 상기 [반응식 6]로부터 얻은 [화학식 3-a]로 표시되는 화합물 20.7 g (91.56 mmol), 디벤조퓨란-2-보로닉산 19.4 g (91.56 mmol) 및 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐 2.1 g (1.8 mmol), 탄산칼륨 25.3 g (183.1 mmol)을 테트라히드라퓨란 600 mL와 톨루엔 400 mL, 증류수 400 mL의 혼합용매에 넣고 12시간 동안 교반 환류시킨다. 반응이 종료되면 추출 후 유기층을 염화나트륨 포화수용액으로 세정하고, 무수 황산나트륨으로 건조시킨다. 유기용매를 감압 하에서 증류하여 제거한 후, 메틸렌클로라이드와 헥산으로 재결정하여 [화학식 3-b]로 표시되는 화합물 21.9 g을 얻었다. (수율 69%)

[0344] (3) [화학식 26]로 표시되는 화합물의 합성

[0345] 하기 [반응식 8]에 의하여 [화학식 26]로 표시되는 화합물을 합성하였다.

[0346] [반응식 8]



[0347]

[0348] [화학식 1-c] [화학식 3-b] [화학식 26]

[0349] 상기 [반응식 3]로부터 얻은 [화학식 1-c]로 표시되는 화합물 20.0 g (55.80 mmol), 60% 소듐 하이드라이드 5.58 g (83.70 mmol)을 디메틸포름아마이드 300 mL에 넣고 상온에서 30분 동안 교반시킨다. 그 후 [반응식 7]로부터 얻은 [화학식 3-b]로 표시되는 화합물 23.96 g (66.96 mmol)을 디메틸포름아마이드 200 mL에 녹여 천천히 적가한 후 1시간 동안 교반시킨다. 반응이 종료되면 증류수 200 mL를 첨가해주고 여과 후 재결정하여 [화학식 26]로 표시되는 화합물 33.7 g을 얻었다. (수율 89%)

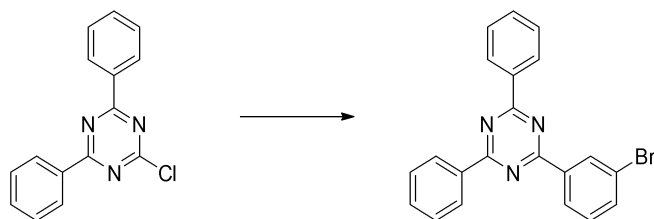
[0350] MS  $[M]^+$  679.24

[0351] <실시예 4> [화학식 34]로 표시되는 화합물의 합성

[0352] (1) [화학식 4-a]로 표시되는 화합물의 합성

[0353] 하기 [반응식 9]에 의하여 [화학식 4-a]로 표시되는 화합물을 합성하였다.

[0354] [반응식 9]



[0355]

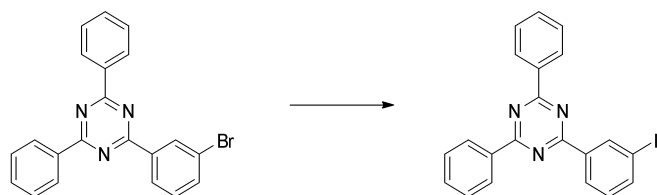
[0356] [화학식 4-a]

[0357] 클로로디페닐트리아진 20.0 g (74.7 mmol), 3-브로모페닐보로닉산 18.0 g (89.7 mmol), 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐 1.7 g (1.5 mmol), 탄산칼륨 20.7 g (149.4 mmol), 1,4-다이옥산 100 mL, 톨루엔 100 mL, 증류수 50 mL에 넣고 100 °C에서 12시간 동안 교반시킨다. 반응이 종료되면 에틸아세테이트와 증류수를 사용하여 추출한다. 유기층을 무수 황산나트륨으로 건조하고, 감압농축 한 후 메틸렌클로라이드와 아세톤으로 재결정하여 [화학식 4-a]로 표시되는 화합물 23.2 g을 얻었다. (수율 80%)

[0358] (2) [화학식 4-b]로 표시되는 화합물의 합성

[0359] 하기 [반응식 10]에 의하여 [화학식 4-b]로 표시되는 화합물을 합성하였다.

[0360] [반응식 10]



[0361]

[0362] [화학식 4-a]

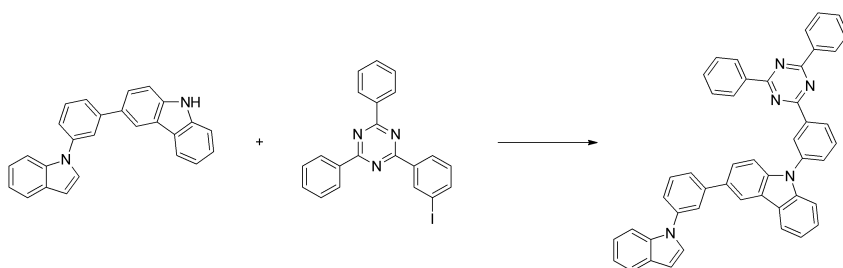
[화학식 4-b]

[0363] 상기 [반응식 9]로부터 얻은 [화학식 4-a]로 표시되는 화합물 23.2 g (59.8 mmol)을 질소 기류하에서 테트라하이드로퓨란 230 mL에 녹인 후 -78 °C에서 교반하면서 1.6 M 노르말-부틸리튬 45 mL (71.76 mmol)을 천천히 적가하고, 적가가 완료되면 -78 °C를 유지하면서 1시간 동안 교반시킨다. 그 후 아이오딘 18.2 g (71.76 mmol)을 천천히 적가한 후 상온으로 올려서 1시간 교반시킨다. 반응이 완료되면 쏘름 싸이오설페이트 수용액 200 mL를 적가한 후 30분간 교반시킨다. 그 후 에틸아세테이트와 물로 추출하고 유기층을 무수 황산나트륨으로 건조하고, 감압농축하여 [화학식 4-b]로 표시되는 화합물 23.2 g을 얻었다. (수율 89%)

[0364] (3) [화학식 34]로 표시되는 화합물의 합성

[0365] 하기 [반응식 11]에 의하여 [화학식 34]로 표시되는 화합물을 합성하였다.

[0366] [반응식 11]



[0367]

[0368] [화학식 1-c]

[화학식 4-b]

[화학식 34]

[0369] 상기 [반응식 3]로부터 얻은 [화학식 1-c]로 표시되는 화합물 20.0 g (55.80 mmol), 상기 [반응식 10]로부터 얻은 [화학식 4-b]로 표시되는 화합물 36.43g (88.7 mmol), 구리분말 7.09 g (111.6 mmol), 18-크라운-6 2.95 g (11.16 mmol), 탄산칼륨 123.14 g (167.4 mmol)을 순서대로 넣고, 1,2-디클로로벤젠 200 mL를 가한 후, 180 °C에서 1일 동안 환류, 교반시킨다. 반응이 종료되면, 고온필터 후 용액을 감압농축하고 유기층 용액을 메틸렌클로라이드와 아세톤으로 재결정하여 [화학식 34]로 표시되는 화합물 27.3 g을 얻었다. (수율 73%)

[0370] MS [M]<sup>+</sup> 665.26

[0371] <실시예 5> [화학식 35]로 표시되는 화합물의 합성

[0372] (1) [화학식 5-a]로 표시되는 화합물의 합성

[0373] 하기 [반응식 12]에 의하여 [화학식 5-a]로 표시되는 화합물을 합성하였다.

[0374] [반응식 12]



[0375]

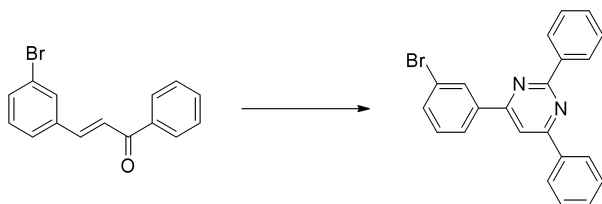
[0376] [화학식 5-a]

[0377] 3-브로모벤즈알데히드 250.0 g (1.35 mol), 아세토펜은 162.35 g (1.35 mol), 3 M KOH 1000 mL, 에탄올 2500 mL를 투입 후 24시간 환류, 교반하였다. 반응이 종료되면 상온으로 온도를 조절한 후 여과하고 에탄올 1000 mL로 세척하여 [화학식 5-a]로 표시되는 화합물 330 g을 얻었다. (수율 85%)

[0378] (2) [화학식 5-b]로 표시되는 화합물의 합성

[0379] 하기 [반응식 13]에 의하여 [화학식 5-b]로 표시되는 화합물을 합성하였다.

[0380] [반응식 13]



[0381]

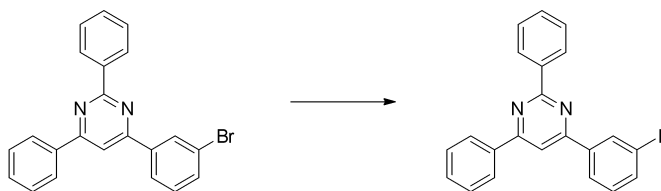
[0382] [화학식 5-a] [화학식 5-b]

[0383] 상기 [반응식 12]로부터 얻은 [화학식 5-a]로 표시되는 화합물 330 g (1.15 mol), 벤즈아미딘 염산염 179.98 g (1.15 mol), NaOH 91.94 g (2.3 mol)을 에탄올 4500 mL에 넣고 24시간 환류 교반 하였다. 반응이 종료되면 헥산 1000 mL로 여과 세척한다. 헥산과 메틸렌클로라이드로 재결정하여 [화학식 5-b]로 표시되는 화합물 175 g을 얻었다. (수율 39%)

[0384] (3) [화학식 5-c]로 표시되는 화합물의 합성

[0385] 하기 [반응식 14]에 의하여 [화학식 5-c]로 표시되는 화합물을 합성하였다.

[0386] [반응식 14]



[0387]

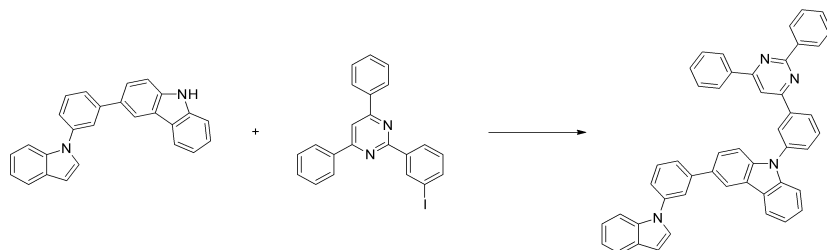
[0388] [화학식 5-b] [화학식 5-c]

[0389] 상기 [반응식 13]로부터 얻은 [화학식 5-b]로 표시되는 화합물 23.2 g (59.9 mmol)을 질소 기류하에서 테트라하이드로퓨란 230 mL에 녹인 후 -78 ℃에서 교반하면서 1.6 M 노르말-부틸리튬 45 mL(71.76 mmol)을 천천히 적가하고, 적가가 완료되면 -78 ℃를 유지하면서 1시간 동안 교반시킨다. 그 후 아이오딘 18.2 g (71.76 mmol)을 천천히 적가한 후 상온으로 올려서 1시간 교반시킨다. 반응이 완료되면 쏘듐 싸이오설파이트 수용액 200 mL를 적가한 후 30분간 교반시킨다. 그 후 에틸아세테이트와 물로 추출하고 유기층을 무수 황산나트륨으로 건조하고, 감압농축하여 [화학식 5-c]로 표시되는 화합물 23.2 g을 얻었다. (수율 89%)

[0390] (4) [화학식 35]로 표시되는 화합물의 합성

[0391] 하기 [반응식 15]에 의하여 [화학식 35]로 표시되는 화합물을 합성하였다.

[0392] [반응식 15]



[0393]

[0394] [화학식 1-c] [화학식 5-c] [화학식 35]

[0395] 상기 [반응식 3]로부터 얻은 [화학식 1-c]로 표시되는 화합물 20.0 g (55.80 mmol), 상기 [반응식 14]로부터 얻은 [화학식 5-c] 36.43 g (88.8 mmol), 구리분말 7.09 g (111.6 mmol), 18-크라운-6 2.95 g (11.16 mmol), 탄산칼륨 123.14 g (167.4 mmol)을 순서대로 넣고, 1,2-디클로로벤젠 200 ml를 가한 후, 180 °C에서 1일 동안 환류, 교반시킨다. 반응이 종료되면, 고온필터 후 용액을 감압농축하고 유기층 용액을 메틸렌클로라이드와 아세톤으로 재결정하여 [화학식 35]로 표시되는 화합물 31 g을 얻었다. (수율 83%)

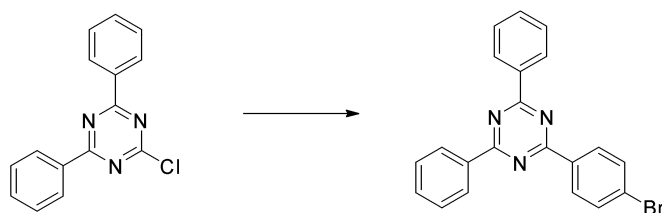
[0396] MS  $[M]^+$  664.26

[0397] <실시예 6> [화학식 66]로 표시되는 화합물의 합성

[0398] (1) [화학식 6-a]로 표시되는 화합물의 합성

[0399] 하기 [반응식 16]에 의하여 [화학식 6-a]로 표시되는 화합물을 합성하였다.

[0400] [반응식 16]



[0401]

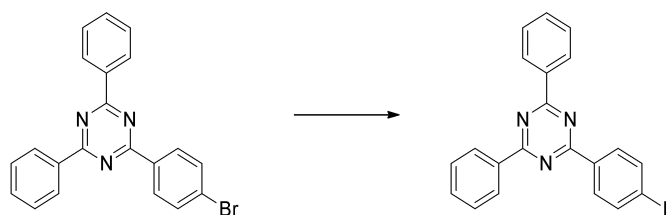
[0402] [화학식 6-a]

[0403] 클로로디페닐트리아진 20.0 g (74.7 mmol), 4-브로모페닐보로닉산 18.0 g (89.7 mmol), 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐 1.7 g (1.5 mmol), 탄산칼륨 20.7 g (149.4 mmol), 1,4-다이옥산 100 mL, 톨루엔 100 mL, 증류수 50 mL에 넣고 100 °C에서 12시간 동안 교반시킨다. 반응이 종료되면 에틸아세테이트와 증류수를 사용하여 추출한다. 유기층을 무수 황산나트륨으로 건조하고, 감압농축 한 후 메틸렌클로라이드와 아세톤으로 재결정하여 [화학식 6-a]로 표시되는 화합물 23.2 g을 얻었다. (수율 80%)

[0404] (2) [화학식 6-b]로 표시되는 화합물의 합성

[0405] 하기 [반응식 17]에 의하여 [화학식 6-b]로 표시되는 화합물을 합성하였다.

[0406] [반응식 17]



[0407]

[0408] [화학식 6-a]

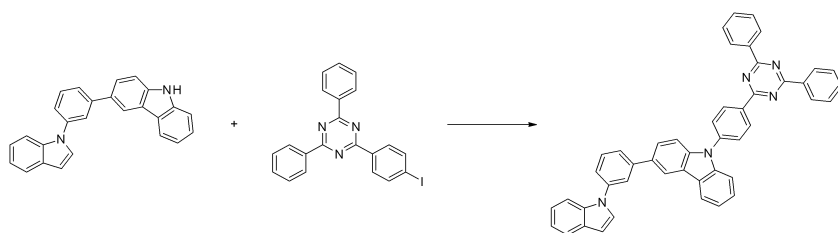
[화학식 6-b]

[0409] 상기 [반응식 16]로부터 얻은 [화학식 6-a]로 표시되는 화합물 23.2 g (59.8 mmol)을 질소 기류하에서 테트라하이드로퓨란 230 mL에 녹인 후 -78 °C에서 교반하면서 1.6 M 노르말-부틸리튬 45 mL (71.76 mmol)을 천천히 적가하고, 적가가 완료되면 -78 °C를 유지하면서 1시간 동안 교반시킨다. 그 후 아이오딘 18.2 g (71.76 mmol)을 천천히 적가한 후 상온으로 올려서 1시간 교반시킨다. 반응이 완료되면 쏘름 싸이오설페이트 수용액 200 mL를 적가한 후 30분간 교반시킨다. 그 후 에틸아세테이트와 물로 추출하고 유기층을 무수 황산나트륨으로 건조하고, 감압농축하여 [화학식 6-b]로 표시되는 화합물 23.2 g을 얻었다. (수율 89%)

[0410] (3) [화학식 66]로 표시되는 화합물의 합성

[0411] 하기 [반응식 18]에 의하여 [화학식 66]로 표시되는 화합물을 합성하였다.

[0412] [반응식 18]



[0413]

[0414] [화학식 1-c]

[화학식 6-b]

[화학식 66]

[0415] 상기 [반응식 3]로부터 얻은 [화학식 1-c]로 표시되는 화합물 20.0 g (55.80 mmol), 상기 [반응식 17]로부터 얻은 [화학식 6-b]로 표시되는 화합물 36.43g (88.7 mmol), 구리분말 7.09 g (111.6 mmol), 18-크라운-6 2.95 g (11.16 mmol), 탄산칼륨 123.14 g (167.4 mmol)을 순서대로 넣고, 1,2-디클로로벤젠 200 mL를 가한 후, 180 °C에서 1일 동안 환류, 교반시킨다. 반응이 종료되면, 고온필터 후 용액을 감압농축하고 유기층 용액을 메틸렌클로라이드와 아세톤으로 재결정하여 [화학식 66]로 표시되는 화합물 27.3 g을 얻었다. (수율 73%)

[0416] MS  $[M]^+$  665.26

[0417] <실시예 7> [화학식 67]로 표시되는 화합물의 합성

[0418] (1) [화학식 7-a]로 표시되는 화합물의 합성

[0419] 하기 [반응식 19]에 의하여 [화학식 7-a]로 표시되는 화합물을 합성하였다.



[0420] [반응식 19]



[0421]

[0422]

[화학식 7-a]

[0423]

4-브로모벤즈알데히드 250.0 g (1.35 mol), 아세토펜은 162.35 g (1.35 mol), 3 M KOH 1000 mL, 에탄올 2500 mL를 투입 후 24시간 환류, 교반하였다. 반응이 종료되면 상온으로 온도를 조절한 후 여과하고 에탄올 1000 mL로 세척하여 [화학식 7-a]로 표시되는 화합물 298 g을 얻었다. (수율 77%)

[0424]

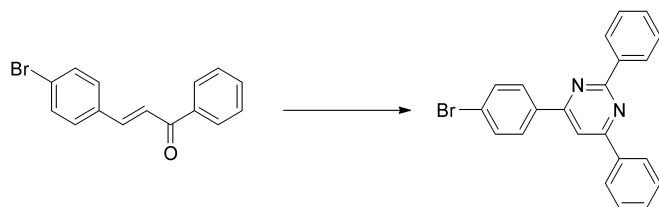
(2) [화학식 7-b]로 표시되는 화합물의 합성

[0425]

하기 [반응식 20]에 의하여 [화학식 7-b]로 표시되는 화합물을 합성하였다.

[0426]

[반응식 20]



[0427]

[0428]

[화학식 7-a]

[화학식 7-b]

[0429]

상기 [반응식 19]로부터 얻은 [화학식 7-a]로 표시되는 화합물 298g (1.04 mol), 벤즈아미딘 염산염 162.53 g (1.04 mol), 수산화 나트륨 83.02 g (2.08 mol)을 에탄올 4500 mL에 넣고 24시간 환류 교반 하였다. 반응이 종료되면 헥산 1000 mL로 여과 세척한다. 헥산과 메틸렌클로라이드로 재결정하여 [화학식 7-b]로 표시되는 화합물 160 g을 얻었다. (수율 40%)

[0430]

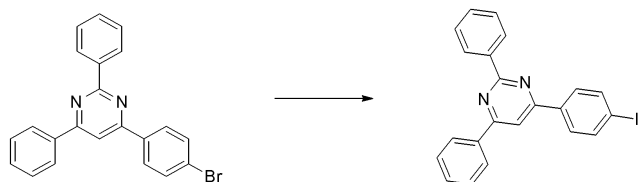
(3) [화학식 7-c]로 표시되는 화합물의 합성

[0431]

하기 [반응식 21]에 의하여 [화학식 7-c]로 표시되는 화합물을 합성하였다.

[0432]

[반응식 21]



[0433]

[0434]

[화학식 7-b]

[화학식 7-c]

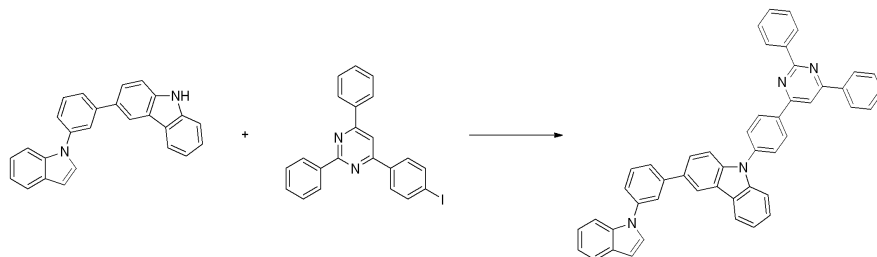
[0435]

상기 [반응식 20]로부터 얻은 [화학식 7-b]로 표시되는 화합물 23.2 g (59.9 mmol)을 질소 기류하에서 테트라하이드로퓨란 230 mL에 녹인 후 -78 ℃에서 교반하면서 1.6 M 노르말-부틸리튬 45 mL (71.76 mmol)을 천천히 적가하고, 적가가 완료되면 -78 ℃를 유지하면서 1시간 동안 교반시킨다. 그 후 아이오딘 18.2 g (71.76 mmol)을 천천히 적가한 후 상온으로 올려서 1시간 교반시킨다. 반응이 완료되면 쏘름 싸이오설페이트 수용액 200 mL를 적가한 후 30분간 교반시킨다. 그 후 에틸아세테이트와 물로 추출하고 유기층을 무수 황산나트륨으로 건조하고, 감압농축하여 [화학식 7-c]로 표시되는 화합물 23.2 g을 얻었다. (수율 89%)

[0436] (4) [화학식 67]로 표시되는 화합물의 합성

[0437] 하기 [반응식 22]에 의하여 [화학식 67]로 표시되는 화합물을 합성하였다.

[0438] [반응식 22]



[0439]

[0440] [화학식 1-c] [화학식 7-c] [화학식 67]

[0441] 상기 [반응식 3]로부터 얻은 [화학식 1-c]로 표시되는 화합물 20.0 g (55.80 mmol), 상기 [반응식 21]로부터 얻은 [화학식 7-c]로 표시되는 화합물 38.5 g (88.8 mmol), 구리분말 7.09 g (111.6 mmol), 18-크라운-6 2.95 g (11.16 mmol), 탄산칼륨 123.14 g (167.4 mmol)을 순서대로 넣고, 1,2-디클로로벤젠 200 mL를 가한 후, 180 °C에서 1일 동안 환류, 교반시킨다. 반응이 종료되면, 고온필터 후 용액을 감압농축하고 유기층 용액을 메틸렌클로라이드와 아세톤으로 재결정하여 [화학식 34]로 표시되는 화합물 31.5 g을 얻었다. (수율 85%)

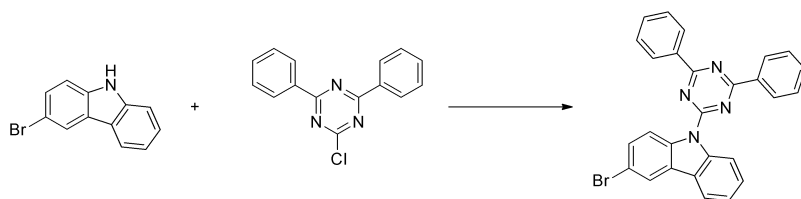
[0442] MS  $[M]^+$  664.26

[0443] <실시예 8> [화학식 94]로 표시되는 화합물의 합성

[0444] (1) [화학식 8-a]로 표시되는 화합물의 합성

[0445] 하기 [반응식 23]에 의하여 [화학식 8-a]로 표시되는 화합물을 합성하였다.

[0446] [반응식 23]



[0447]

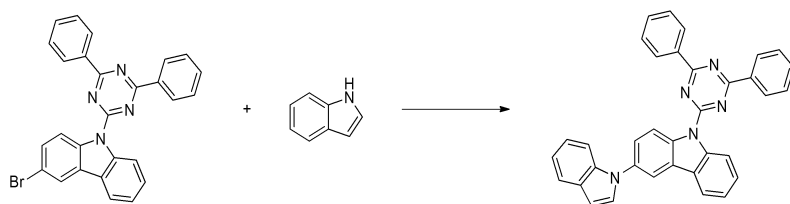
[0448] [화학식 8-a]

[0449] 3-브로모카바졸 20.0 g (81.26 mmol), 60% 소듐 하이드라이드 8.1 g (121.9 mmol)을 디메틸포름아마이드 300 mL에 넣고 상온에서 30분 동안 교반시킨다. 그 후 클로로디페닐트리아진 26.11 g (97.52 mmol)을 디메틸포름아마이드 200 mL에 녹여 천천히 적가한 후 1시간 동안 교반시킨다. 반응이 종료되면 증류수 200 mL를 첨가해주고 여과 후 재결정하여 [화학식 8-a]로 표시되는 화합물 32.30 g을 얻었다. (수율 83%)

[0450] (2) [화학식 94]로 표시되는 화합물의 합성

[0451] 하기 [반응식 24]에 의하여 [화학식 94]로 표시되는 화합물을 합성하였다.

[0452] [반응식 24]



[0453]

[0454] [화학식 8-a]

[화학식 94]

[0455] 상기 [반응식 23]로부터 얻은 [화학식 8-a]로 표시되는 화합물 10.0 g (21 mmol), 인돌 2.95 g (25 mmol) 및 트리스(디벤질리텐아세톤)디팔라듐 0.38 g (0.4 mmol), 트리 터셔리부틸 포스포늄 테트라 플로로 보레이트 0.6 g (2.09 mmol) 소듐 터셔리 부톡사이드 5.79 g (41.90 mmol)을 자일렌 100 mL의 혼합용매에 넣고 12시간 동안 교반, 환류시킨다. 반응이 종료되면 추출 후 유기층을 염화나트륨 포화수용액으로 세정하고, 무수 황산나트륨으로 건조시킨다. 유기용매를 감압 하에서 증류하여 제거한 후, 메틸렌클로라이드와 헥산으로 재결정하여 [화학식 94]로 표시되는 화합물 7.1 g을 얻었다. (수율 66%)

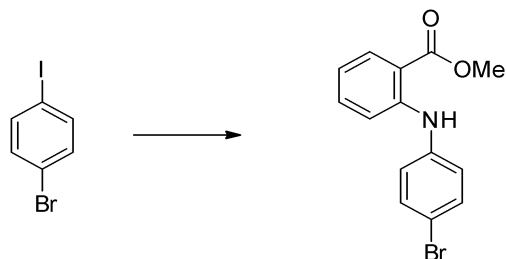
[0456] MS  $[M]^+$  513.20

[0457] <실시예 9> [화학식 154]로 표시되는 화합물의 합성

[0458] (1) [화학식 9-a]로 표시되는 화합물의 합성

[0459] 하기 [반응식 25]에 의하여 [화학식 9-a]로 표시되는 화합물을 합성하였다.

[0460] [반응식 25]



[0461]

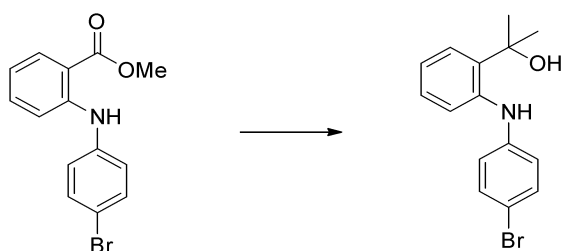
[0462] [화학식 9-a]

[0463] 1-브로모4-아이오도벤젠 187.1 g (661 mmol), 2-아미노-벤조산 메틸 에스터 100 g (661 mmol), 잔트포스 15.31 g (26 mmol), 세슘 카보네이트 306.15 g (926 mmol), 팔라듐 아세테이트 2.97 g (13 mmol)과 톨루엔 1500 mL를 투입 후 24시간 환류, 교반하였다. 반응이 종료되면 여과 후 감압농축하고, 컬럼크로마토그래피로 분리하여 [화학식 9-a]로 표시되는 화합물 140 g을 얻었다. (수율 69%)

[0464] (2) [화학식 9-b]로 표시되는 화합물의 합성

[0465] 하기 [반응식 26]에 의하여 [화학식 9-b]로 표시되는 화합물을 합성하였다.

[0466] [반응식 26]



[0467]

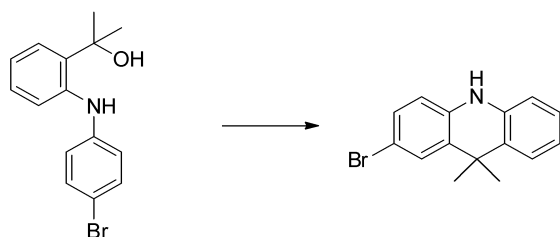
[0468] [화학식 9-a] [화학식 9-b]

[0469] 상기 [반응식 25]로부터 얻은 [화학식 9-a]로 표시되는 화합물 70 g (228.6 mmol)을 테트라하이드로퓨란 550 mL에 녹인 후 0 °C로 낮춘다. 3.0 M 메틸마그네슘브로마이드 228 mL (685.8mmol)을 천천히 적가하고, 적가가 완료되면 상온으로 올려서 12시간 동안 교반시킨다. 반응이 종료되면 2 M 염산수용액 300 mL를 상온에서 적가한 후 30분간 교반시킨다. 그 후 에틸아세테이트와 물로 추출하고, 유기층을 감압농축 한 후 메틸렌클로라이드와 헥산으로 재결정하여 [화학식 9-b]로 표시되는 화합물 60.3 g을 얻었다. (수율 91%)

[0470] (3) [화학식 9-c]로 표시되는 화합물의 합성

[0471] 하기 [반응식 27]에 의하여 [화학식 9-c]로 표시되는 화합물을 합성하였다.

[0472] [반응식 27]



[0473]

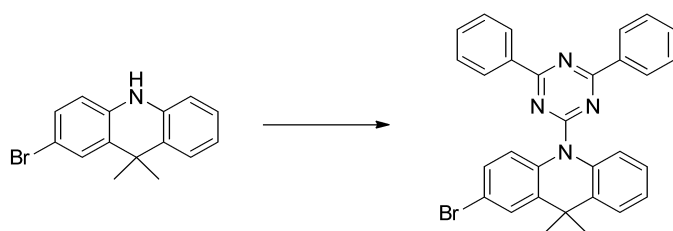
[0474] [화학식 9-b] [화학식 9-c]

[0475] 상기 [반응식 26]로부터 얻은 [화학식 9-b]로 표시되는 화합물 60g (196.8 mmol)을 인산 1200 mL에 넣고 24시간 동안 교반한다. 반응이 종료되면 에틸 아세테이트와 물로 추출하고, 유기층을 감압 농축한 후 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 [화학식 9-c]로 표시되는 화합물 48.3 g을 얻었다. (수율 88%)

[0476] (3) [화학식 9-d]로 표시되는 화합물의 합성

[0477] 하기 [반응식 28]에 의하여 [화학식 9-d]로 표시되는 화합물을 합성하였다.

[0478] [반응식 28]



[0479]

[0480] [화학식 9-c] [화학식 9-d]

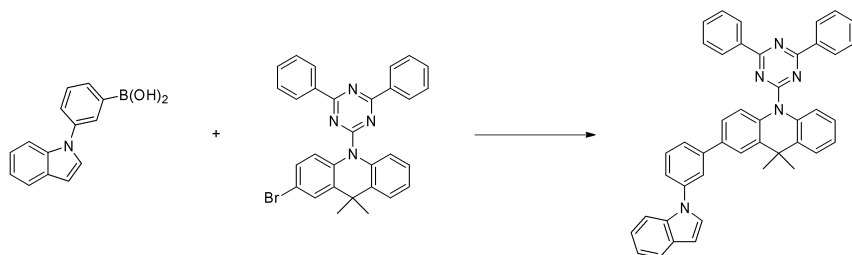
[0481] 상기 [반응식 27]로부터 얻은 [화학식 9-c]로 표시되는 화합물 20.0 g (69.40 mmol), 60% 소듐 하이드라이드

6.9 g (104.1 mmol)을 디메틸포름아마이드 300 mL에 넣고 상온에서 30분 동안 교반시킨다. 그 후 클로로디페닐 트리아진 22.3 g(83.28 mmol)을 디메틸포름아마이드 200 mL에 녹여 천천히 적가한 후 1시간 동안 교반시킨다. 반응이 종료되면 증류수 200 mL를 첨가해주고 여과 후 재결정하여 [화학식 9-d]로 표시되는 화합물 29.5 g을 얻었다. (수율 90%)

[0482] (4) [화학식 154]로 표시되는 화합물의 합성

[0483] 하기 [반응식 29]에 의하여 [화학식 154]로 표시되는 화합물을 합성하였다.

[0484] [반응식 29]



[0485] [화학식 1-b] [화학식 9-c] [화학식 154]

[0487] 상기 [반응식 2]로부터 얻은 [화학식 1-b]로 표시되는 화합물 6.85 g (28.88 mmol), 상기 [반응식 28]로부터 얻은 [화학식 9-c]로 표시되는 화합물 10 g(19.25 mmol), 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐 414 mg (0.39 mmol), 탄산칼륨 5.32 g (38.5 mmol), 1,4-다이옥산 50 mL, 톨루엔 50 mL, 증류수 20 mL에 넣고 100 °C에서 12 시간 동안 교반시킨다. 반응이 종료되면 상온으로 온도를 조절한 후 결정을 여과하고, 그 결정을 메틸렌클로라이드와 아세톤으로 재결정하여 [화학식 154]로 표시되는 화합물 8.2 g을 얻었다. (수율 67%)

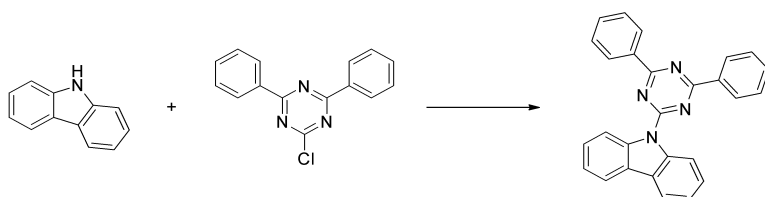
[0488] MS  $[M]^+$  631.27

[0489] <실시예 10> [화학식 194]으로 표시되는 화합물의 합성

[0490] (1) [화학식 10-a]로 표시되는 화합물의 합성

[0491] 하기 [반응식 30]에 의하여 [화학식 10-a]로 표시되는 화합물을 합성하였다.

[0492] [반응식 30]



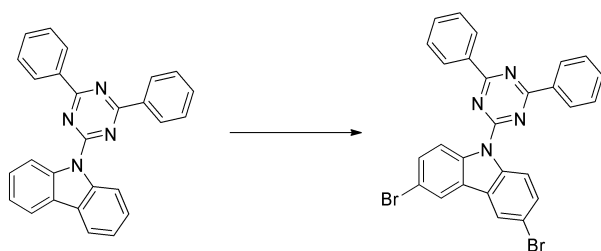
[0493] [화학식 10-a]

[0495] 카바졸 20.0 g (119.61 mmol), 60% 소듐 하이드라이드 11.97 g (179.42 mmol)을 디메틸포름아마이드 300 mL에 넣고 상온에서 30분 동안 교반시킨다. 그 후 클로로디페닐트리아진 38.42 g (143.53 mmol)을 디메틸포름아마이드 200 mL에 녹여 천천히 적가한 후 1시간 동안 교반시킨다. 반응이 종료되면 증류수 200 mL를 첨가해주고 여과 후 재결정하여 [화학식 10-a]로 표시되는 화합물 40 g을 얻었다. (수율 84%)

[0496] (2) [화학식 10-b]로 표시되는 화합물의 합성

[0497] 하기 [반응식 31]에 의하여 [화학식 10-b]로 표시되는 화합물을 합성하였다.

[0498] [반응식 31]



[0499]

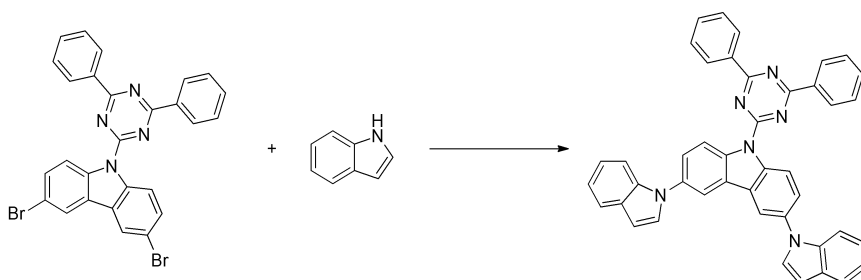
[0500] [화학식 10-a] [화학식 10-b]

[0501] 상기 [반응식 30]로부터 얻은 [화학식 10-a]로 표시되는 화합물 40 g (100.39 mmol)을 디메틸포름아마이드 1.0 L에 녹인 후 0 °C에서 교반시킨다. 그 후 N-브로모석신이미드 23.69 g (200.77 mmol)을 디메틸포름아마이드 0.5 L 녹여서 0°C 를 유지하면서 1시간 동안 천천히 적가시킨다. 적가가 완료되면 상온으로 올린 후 12시간 동안 교반시킨다. 반응이 종료되면 증류수를 상온에서 적가한 후 갈색 결정이 생기면 결정을 여과한 후 톨루엔, 메탄올로 재결정하여 [화학식 10-b]로 표시되는 화합물 47 g을 얻었다. (수율 84%)

[0502] (3) [화학식 194]로 표시되는 화합물의 합성

[0503] 하기 [반응식 32]에 의하여 [화학식 194]로 표시되는 화합물을 합성하였다.

[0504] [반응식 32]



[0505]

[0506] [화학식 10-b] [화학식 194]

[0507] 상기 [반응식 31]로부터 얻은 [화학식 10-b]로 표시되는 화합물 47 g (84.49 mmol), 인돌 24.7 g (211.23 mmol) 및 트리스(디벤질리덴아세톤)디팔라듐 1.5 g (1.69 mmol), 트리터셔리부틸포스포늄테트라플로로보레이트 2.45 g (8.44mmol), 소듐터셔리부톡사이드 58.38 g (422.47 mmol)을 자일렌 500 mL의 혼합용매에 넣고 12시간 동안 교반, 환류시킨다. 반응이 종료되면 추출 후 유기층을 염화나트륨 포화수용액으로 세정하고, 무수 황산나트륨으로 건조시킨다. 유기용매를 감압 하에서 증류하여 제거한 후, 메틸렌클로라이드와 헥산으로 재결정하여 [화학식 194]로 표시되는 화합물 46 g을 얻었다. (수율 87%)

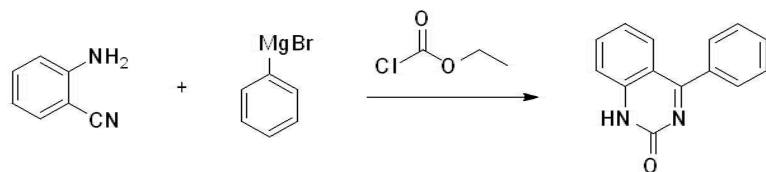
[0508] MS  $[M]^+$  628.24

[0509] <실시예 11> [화학식 218]로 표시되는 화합물의 합성

[0510] (1) [화학식 11-a]로 표시되는 화합물의 합성

[0511] 하기 [반응식 33]에 의하여 [화학식 11-a]로 표시되는 화합물을 합성하였다.

[0512] [반응식 33]



[0513]

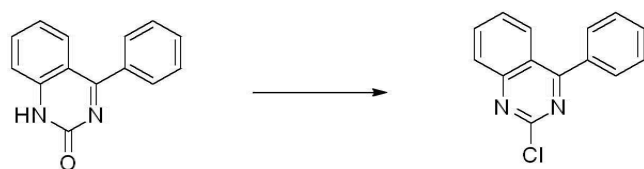
[0514] [화학식 11-a]

[0515] 건조된 2 L 반응기에 질소를 채워준 후 2-아미노벤조니트릴 45.0 g (381 mmol), 테트라하이드로퓨란 405 mL를 넣고 0 °C에서 3 M 페닐마그네슘브로마이드 279 mL (838 mmol)를 천천히 적가한 후 3 시간 환류 교반시킨다. 저온으로 낮춘 후 에틸클로로포메이트 62 g (0.571 mmol)을 테트라하이드로퓨란 200 mL에 녹인 후 천천히 적가한 후 2 시간 환류교반시킨다. 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 [화학식 11-a]로 표시되는 화합물 50 g 을 얻었다. (수율 58%)

[0516] (2) [화학식 11-b]로 표시되는 화합물의 합성

[0517] 하기 [반응식 34]에 의하여 [화학식 11-b]로 표시되는 화합물을 합성하였다.

[0518] [반응식 34]



[0519]

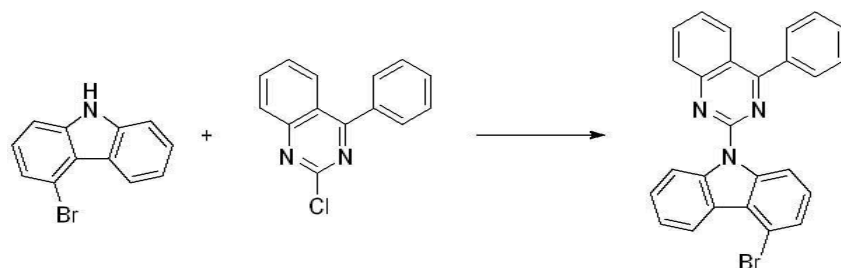
[0520] [화학식 11-b]

[0521] 상기 [반응식 33]으로부터 얻은 [화학식 11-a] 50 g (225 mmol), 포스포러스 옥시클로라이드 500 mL에 넣고 5 시간 동안 환류교반시킨다. 반응이 종료되면 온도를 낮춘 물에 천천히 적가한다. 적가가 완료되면 여과한 후 메틸렌클로라이드와 물로 추출하고 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 [화학식 11-b]로 표시되는 화합물 41 g 을 얻었다. (수율 75%)

[0522] (3) [화학식 11-c]로 표시되는 화합물의 합성

[0523] 하기 [반응식 35]에 의하여 [화학식 11-c]로 표시되는 화합물을 합성하였다.

[0524] [반응식 35]



[0525]

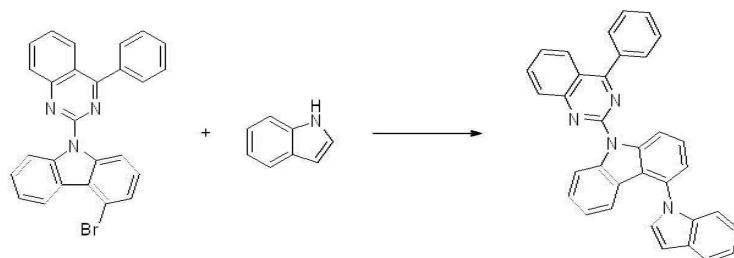
[0526] [화학식 11-b]

[0527] 60% 소듐 하이드라이드 2.1 g (53 mmol)에 디메틸포름아마이드 50 mL를 넣고 상온에서 약 30 분간 교반하였다. 4-브로모-9H-카바졸 10.0 g (41 mmol)과 디메틸포름아마이드 100 mL를 적하한 후 약 1시간 정도 더 교반하였다. 상기 [반응식 34]로부터 얻은 [화학식 11-b] 12.9 g (53 mmol)와 디메틸포름아마이드 100 mL를 투입하고 밤새 교반하였다. 플라스크에 증류수 600 mL를 넣어서 생긴 고체를 여과하였다. 톨루엔으로 재결정하여 [화학식 11-c]로 표시되는 화합물 16.2 g를 얻었다. (수율 79%)

[0528] (4) [화학식 218]로 표시되는 화합물의 합성

[0529] 하기 [반응식 36]에 의하여 [화학식 218]로 표시되는 화합물을 합성하였다.

[0530] [반응식 36]



[0531]

[0532] [화학식 11-c]

[화학식 218]

[0533] 상기 [반응식 35]로부터 얻은 [화학식 11-c]로 표시되는 화합물 12.7 g (28.16 mmol), 인돌 2.93 g (25.01 mmol) 및 트리스(디벤질리덴아세톤)디팔라듐 1.5 g (1.69 mmol), 트리터셔리부틸포스포늄테트라플로로보레이트 2.45 g (8.44 mmol), 소듐 터셔리부톡사이드 9.73 g (70.41 mmol)을 자일렌 500 mL의 혼합용매에 넣고 12시간 동안 교반 환류시킨다. 반응이 종료되면 추출 후 유기층을 염화나트륨 포화수용액으로 세정하고, 무수 황산나트륨으로 건조시킨다. 유기용매를 감압 하에서 증류하여 제거한 후, 메틸렌클로라이드와 헥산으로 재결정하여 [화학식 218]로 표시되는 화합물 10 g을 얻었다. (수율 82%)

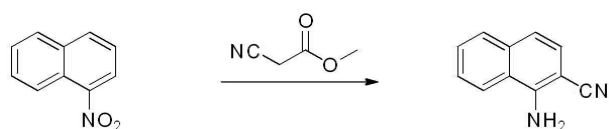
[0534] MS  $[M]^+$  : 486.18

[0535] <실시예 12> [화학식 223]로 표시되는 화합물의 합성

[0536] (1) [화학식 12-a]로 표시되는 화합물의 합성

[0537] 하기 [반응식 37]에 의하여 [화학식 12-a]로 표시되는 화합물을 합성하였다.

[0538] [반응식 37]



[0539]

[0540] [화학식 12-a]

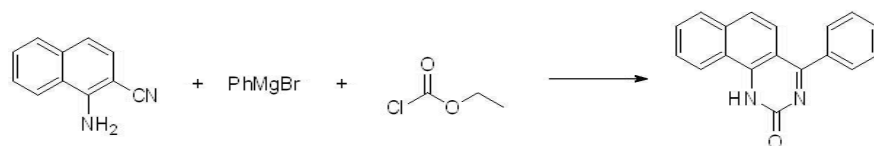
[0541] 1-니트로나프탈렌 97 g (0.56 mol), 메틸 시아노아세테이트 166.5 g (1.68 mol), 시안화칼륨 40.1 g (0.62 mol), 수산화칼륨 62.9 g (1.12 mol)을 넣고 교반하였다. 디메틸포름아마이드 970 mL을 넣고 60 ℃에서 밤새 교반하였다. 상온에서 감압농축 하여 용매를 제거한 뒤 10% 수산화나트륨수용액 500 mL을 넣고 약 1시간 동안 환류시켰다. 에틸 아세테이트로 추출한 뒤 컬럼 크로마토그래피로 분리한 후 톨루엔과 헵탄으로 재결정하여 [화학식 12-a]로 표시되는 화합물 50.8 g을 얻었다. (수율 54%)

[0542] (2) [화학식 12-b]로 표시되는 화합물의 합성

[0543] 하기 [반응식 38]에 의하여 [화학식 12-b]로 표시되는 화합물을 합성하였다.



[0544] [반응식 38]



[0545]

[0546] [화학식 12-a]

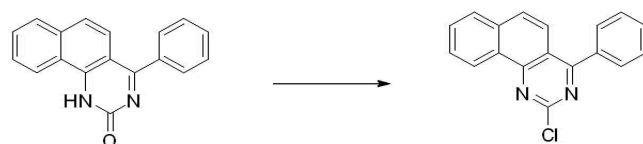
[화학식 12-b]

[0547] 상기 [반응식 37]로부터 얻은 [화학식 12-a] 25.0 g (149 mmol)를 테트라하이드로퓨란 200 mL에 넣고 교반하였다. 페닐 마그네슘브로마이드 (3.0 M in Et<sub>2</sub>O) 87.4 mL (297 mmol)를 적하하고 0 °C에서 약 1시간 동안 환류시켰다. 에틸 클로로포메이트 19.4 g (179 mmol)를 적하한 후 약 1시간 정도 환류시켰다. 암모늄클로라이드 수용액을 약산성이 될 때까지 투입하고 물과 헤파탄으로 씻어주어 [화학식 12-b]로 표시되는 화합물 32.4 g을 얻었다. (수율 80%)

[0548] (3) [화학식 12-c]로 표시되는 화합물의 합성

[0549] 하기 [반응식 39]에 의하여 [화학식 12-c]로 표시되는 화합물을 합성하였다.

[0550] [반응식 39]



[0551]

[0552] [화학식 12-b]

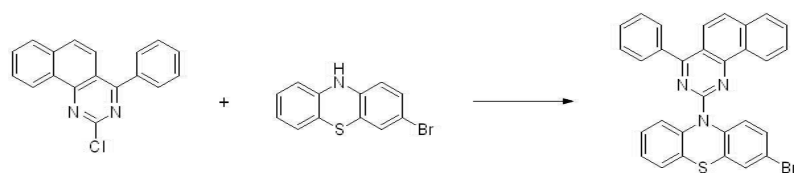
[화학식 12-c]

[0553] 상기 [반응식 38]로부터 얻은 [화학식 12-b] 30 g (110 mmol)를 옥시염화인 약 80 mL에 넣고 밤새 환류시켰다. 온도를 -20 °C로 냉각한 후 증류수를 약 400 mL를 천천히 넣었다. 물, 메탄올, 헤파탄으로 씻어주고 톨루엔과 헤파탄으로 재결정하여 [중간체 1-c]로 표시되는 화합물 14.1 g (수율 44%)을 얻었다.

[0554] (4) [화학식 12-d]로 표시되는 화합물의 합성

[0555] 하기 [반응식 40]에 의하여 [화학식 12-d]로 표시되는 화합물을 합성하였다.

[0556] [반응식 40]



[0557]

[0558] [화학식 12-c]

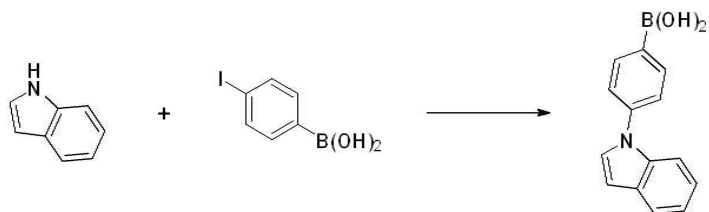
[화학식 12-d]

[0559] 60% 소듐 하이드라이드 2.1 g (53 mmol)에 디메틸포름아마이드 50 mL를 넣고 상온에서 약 30분간 교반하였다. 10H-페녹사진 11.4 g (41 mmol)과 디메틸포름아마이드 100 mL를 적하한 후 약 1시간 정도 더 교반하였다. 상기 [반응식 39]로부터 얻은 [화학식 12-c] 12.9 g (53 mmol)와 디메틸포름아마이드 100 mL를 투입하고 밤새 교반하였다. 플라스크에 증류수 600 mL를 넣어서 생긴 고체를 여과하였다. 톨루엔으로 재결정하여 [화학식 12-d]로 표시되는 화합물 15.3 g을 얻었다. (수율 70%)

[0560] (5) [화학식 12-e]로 표시되는 화합물의 합성

[0561] 하기 [반응식 41]에 의하여 [화학식 12-e]로 표시되는 화합물을 합성하였다.

[0562] [반응식 41]



[0563]

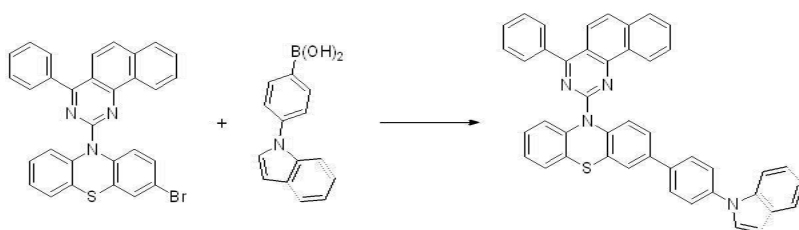
[0564] [화학식 12-e]

[0565] 인돌 9.5 g (81.3 mmol), 4-아이오도페닐 보론산 40.3 g (162.5 mmol), 구리분말 10.3 g (162.5 mmol), 18-크라운-6 4.3 g (16.3 mmol), 탄산칼륨 33.7 g (243.9 mmol)에 1,2-디클로로벤젠 200 mL를 가한 후, 180 °C에서 1일 동안 환류시켰다. 고온필터 후 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 [화학식 12-e]로 표시되는 화합물 16.9 g를 얻었다. (수율 88%)

[0566] (6) [화학식 223]으로 표시되는 화합물의 합성

[0567] 하기 [반응식 42]에 의하여 [화학식 223]로 표시되는 화합물을 합성하였다.

[0568] [반응식 42]



[0569]

[0570] [화학식 12-d] [화학식 12-e] [화학식 223]

[0571] 상기 [반응식 40]으로부터 얻은 [화학식 12-d] 15 g, (28 mmol), 상기 [반응식 41]로부터 얻은 [화학식 12-e] 8.1 g (34 mmol), 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐 0.7 g (0.64 mmol), 탄산칼륨 8.9 g (64 mmol)에 1,4-다이옥산 80 mL, 톨루엔 80 mL, 증류수 30 mL를 넣고 밤새 환류시켰다. 에틸아세테이트로 추출하고 디클로로메탄과 아세톤으로 재결정하여 [화합물 223]으로 표시되는 화합물 13.2 g을 얻었다. (수율 73%)

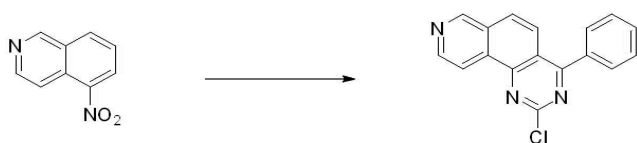
[0572] MS  $[M]^+$  : 644.20

[0573] <실시예 13> [화학식 228]로 표시되는 화합물의 합성

[0574] (1) [화학식 13-a]로 표시되는 화합물의 합성

[0575] 하기 [반응식 43]에 의하여 [화학식 13-a]로 표시되는 화합물을 합성하였다.

[0576] [반응식 43]



[0577]

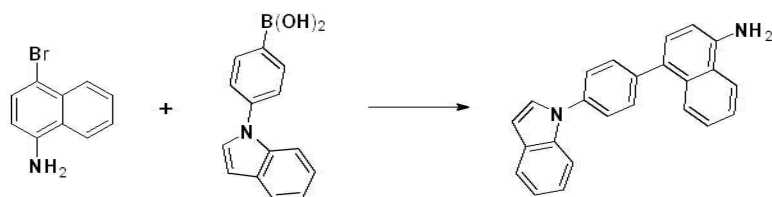
[0578] [화학식 13-a]

[0579] 상기 [반응식 37]에서 사용한 1-니트로나프탈렌 대신 5-니트로아이소퀴놀린을 사용하여 상기 [반응식 37] 내지 [반응식 39]와 동일한 방법으로 합성하여 [화학식 13-a]로 표시되는 화합물을 얻었다. (수율 42%)

[0580] (2) [화학식 13-b]로 표시되는 화합물의 합성

[0581] 하기 [반응식 44]에 의하여 [화학식 13-b]로 표시되는 화합물을 합성하였다.

[0582] [반응식 44]



[0583]

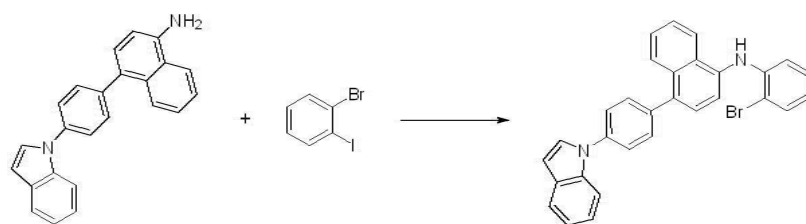
[0584] [화학식 13-b]

[0585] 상기 [반응식 42]에서 사용한 [화학식 12-d] 대신 1-아미노-4-브로모나프탈렌을 사용하여 동일한 방법으로 합성하여 [화학식 13-b]로 표시되는 화합물을 얻었다. (수율 70%)

[0586] (3) [화학식 13-c]로 표시되는 화합물의 합성

[0587] 하기 [반응식 45]에 의하여 [화학식 13-c]로 표시되는 화합물을 합성하였다.

[0588] [반응식 45]



[0589]

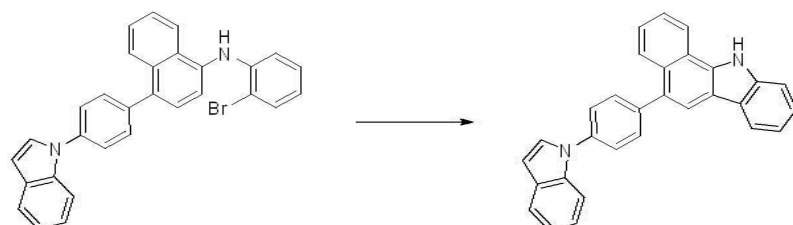
[0590] [화학식 13-b] [화학식 13-c]

[0591] 상기 [반응식 44]로부터 얻은 [화학식 13-b] 26.7 g (0.08 mol), 2-브로모아이오도벤젠 22.6 g (0.08 mol), 트리스(디벤질리덴아세톤)디팔라듐 1.1 g (0.1 mmol), 1,1'-비스(디페닐포스피노)페로센 0.7 g (0.1 mmol), 소듐 터셔리부톡사이드 15.3 g (0.16 mol)을 톨루엔 250 mL에 넣고 24시간 동안 환류시켰다. 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 [화학식 13-c]로 표시되는 화합물 17.2 g (수율 44%)을 얻었다.

[0592] (4) [화학식 13-d]로 표시되는 화합물의 합성

[0593] 하기 [반응식 46]에 의하여 [화학식 13-d]로 표시되는 화합물을 합성하였다.

[0594] [반응식 46]

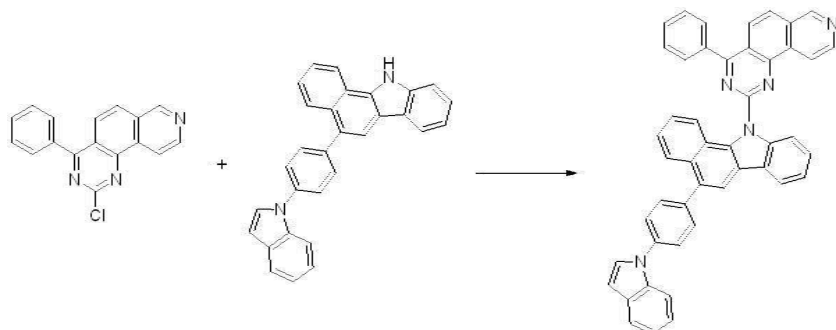


[0595]

[0596] [화학식 13-c] [화학식 13-d]

[0597] 상기 [반응식 45]로부터 얻은 [화학식 13-c] 14.7 g (0.03 mol), 아세트산 칼륨 4.0 g (0.04 mol), 테트라키스 트리페닐포스핀팔라듐 0.8 g (0.001 mol)을 디메틸포름아마이드 125 mL에 넣고 150 °C에서 24 시간 동안 교반시켰다. 컬럼 크로마토그래피로 분리하고 헥산으로 재결정하여 [화학식 13-d]로 표시되는 화합물 4.0 g 을 얻었다. (수율 33%)

- [0598] (5) [화학식 228]로 표시되는 화합물의 합성
- [0599] 하기 [반응식 47]에 의하여 [화학식 228]로 표시되는 화합물을 합성하였다.
- [0600] [반응식 47]



- [0601]
- [0602] [화학식 13-a]                      [화학식 13-d]                      [화학식 228]

- [0603] 상기 [반응식 40]에서 사용한 [화학식 12-c] 대신 상기 [반응식 43]으로부터 얻은 [화학식 13-a]를 사용하고, 10H-페녹사진 대신 상기 [반응식 46]으로부터 얻은 [화학식 13-d]를 사용하여 동일한 방법으로 합성하여 [화학식 228]로 표시되는 화합물을 얻었다. (수율 64%)

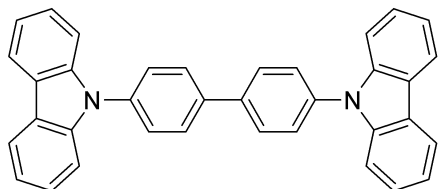
- [0604] MS  $[M]^+$  : 663.24

[0605] **실시예 1 내지 24 : 유기 발광다이오드의 제조**

- [0606] ITO 글래스의 발광 면적이  $2\text{ mm} \times 2\text{ mm}$  크기가 되도록 패터닝한 후 세정하였다. 기판을 진공 챔버에 장착한 후 베이스 압력이  $1 \times 10^{-6}$  torr가 되도록 한 후 유기물을 상기 ITO위에 DTPD(700 Å), NPD(300 Å), 본 발명에 의해 제조된 화합물 + Ir(ppy)<sub>3</sub> (10%)(300 Å), Alq<sub>3</sub> (350 Å), LiF(5 Å), Al(1,000 Å)의 순서로 성막하였으며, 0.4 mA에서 측정을 하였다.

[0607] **비교예 1**

- [0608] 비교예를 위한 유기발광다이오드 소자는 상기 실시예의 소자구조에서 발명에 의해 제조된 화합물 대신 일반적으로 인광호스트 물질로 많이 사용되고 있는 CBP를 사용한 점을 제외하고 동일하게 제작하였으며 상기 CBP의 구조는 아래와 같다.



- [0609]

**표 1**

| 구분   | 호스트 | 도펀트                  | 도핑농도% | V   | Cd/m <sup>2</sup> | CIE <sub>x</sub> | CIE <sub>y</sub> | T <sub>80</sub> (Hr) |
|------|-----|----------------------|-------|-----|-------------------|------------------|------------------|----------------------|
| 비교예1 | CBP | Ir(ppy) <sub>3</sub> | 10    | 7.9 | 3800              | 0.297            | 0.624            | 68                   |
| 실시예1 | 4   | Ir(ppy) <sub>3</sub> | 10    | 4.2 | 4980              | 0.315            | 0.620            | 180                  |
| 실시예2 | 5   | Ir(ppy) <sub>3</sub> | 10    | 4.0 | 5110              | 0.311            | 0.619            | 224                  |

- [0610]

|       |     |                      |    |     |      |       |       |     |
|-------|-----|----------------------|----|-----|------|-------|-------|-----|
| 실시예3  | 9   | Ir(ppy) <sub>3</sub> | 10 | 4.6 | 5890 | 0.303 | 0.627 | 125 |
| 실시예4  | 11  | Ir(ppy) <sub>3</sub> | 10 | 3.7 | 5160 | 0.309 | 0.640 | 187 |
| 실시예5  | 73  | Ir(ppy) <sub>3</sub> | 10 | 3.9 | 5240 | 0.317 | 0.621 | 216 |
| 실시예6  | 76  | Ir(ppy) <sub>3</sub> | 10 | 3.7 | 5250 | 0.310 | 0.639 | 191 |
| 실시예7  | 94  | Ir(ppy) <sub>3</sub> | 10 | 4.5 | 5250 | 0.310 | 0.625 | 190 |
| 실시예8  | 98  | Ir(ppy) <sub>3</sub> | 10 | 4.3 | 4990 | 0.306 | 0.628 | 213 |
| 실시예9  | 12  | Ir(ppy) <sub>3</sub> | 10 | 4.7 | 5050 | 0.314 | 0.621 | 174 |
| 실시예10 | 13  | Ir(ppy) <sub>3</sub> | 10 | 4.4 | 5190 | 0.312 | 0.619 | 179 |
| 실시예11 | 24  | Ir(ppy) <sub>3</sub> | 10 | 3.6 | 5190 | 0.304 | 0.628 | 186 |
| 실시예12 | 25  | Ir(ppy) <sub>3</sub> | 10 | 4.1 | 4960 | 0.310 | 0.625 | 197 |
| 실시예13 | 59  | Ir(ppy) <sub>3</sub> | 10 | 3.6 | 5230 | 0.316 | 0.627 | 203 |
| 실시예14 | 60  | Ir(ppy) <sub>3</sub> | 10 | 4.1 | 5110 | 0.312 | 0.624 | 184 |
| 실시예15 | 70  | Ir(ppy) <sub>3</sub> | 10 | 4.1 | 5240 | 0.321 | 0.624 | 198 |
| 실시예16 | 75  | Ir(ppy) <sub>3</sub> | 10 | 4.7 | 5270 | 0.306 | 0.625 | 211 |
| 실시예17 | 77  | Ir(ppy) <sub>3</sub> | 10 | 3.8 | 5010 | 0.321 | 0.629 | 130 |
| 실시예18 | 82  | Ir(ppy) <sub>3</sub> | 10 | 4.3 | 5120 | 0.315 | 0.619 | 188 |
| 실시예19 | 83  | Ir(ppy) <sub>3</sub> | 10 | 4.0 | 5250 | 0.307 | 0.621 | 200 |
| 실시예20 | 85  | Ir(ppy) <sub>3</sub> | 10 | 3.8 | 5140 | 0.309 | 0.621 | 183 |
| 실시예21 | 90  | Ir(ppy) <sub>3</sub> | 10 | 4.4 | 5090 | 0.318 | 0.614 | 189 |
| 실시예22 | 99  | Ir(ppy) <sub>3</sub> | 10 | 4.2 | 5250 | 0.301 | 0.611 | 147 |
| 실시예23 | 114 | Ir(ppy) <sub>3</sub> | 10 | 4.9 | 5130 | 0.323 | 0.614 | 171 |
| 실시예24 | 127 | Ir(ppy) <sub>3</sub> | 10 | 4.5 | 4890 | 0.315 | 0.624 | 197 |

#### [0611] 실시예 25 내지 28 : 유기 발광다이오드의 제조

[0612] ITO 글래스의 발광 면적이 2 mm × 2 mm 크기가 되도록 패터닝한 후 세정하였다. 기판을 진공 챔버에 장착한 후 베이스 압력이 1 × 10<sup>-6</sup> torr가 되도록 한 후 유기물을 상기 ITO위에 DNTPD(700 Å), α-NPB (300 Å), 본 발명에 의해 제조된 화합물 + (piq)<sub>2</sub>Ir(acac) (10%) (300 Å), Alq<sub>3</sub> (350 Å), LiF (5 Å), Al (1,000 Å)의 순서로 성막하였으며, 0.4 mA에서 측정을 하였다.

#### [0613] 비교예 2

[0614] 비교예 2를 위한 유기발광다이오드 소자는 상기 실시예 25 내지 28의 소자구조에서 발명에 의해 제조된 화합물 대신 일반적으로 인광호스트 물질로 많이 사용되고 있는 CBP를 사용하였다.

표 2

| 구분    | 호스트 | 도펀트                         | 전압(V) | Cd/m <sup>2</sup> | CIEx  | CIEx  | T <sub>90</sub> (Hr) |
|-------|-----|-----------------------------|-------|-------------------|-------|-------|----------------------|
| 비교예2  | CBP | (piq) <sub>2</sub> Ir(acac) | 7.5   | 410               | 0.667 | 0.328 | 410                  |
| 실시예25 | 218 | (piq) <sub>2</sub> Ir(acac) | 4.2   | 4980              | 0.671 | 0.328 | 1105                 |
| 실시예26 | 219 | (piq) <sub>2</sub> Ir(acac) | 4.0   | 5110              | 0.670 | 0.327 | 1125                 |
| 실시예27 | 223 | (piq) <sub>2</sub> Ir(acac) | 4.1   | 5890              | 0.671 | 0.327 | 1020                 |
| 실시예28 | 228 | (piq) <sub>2</sub> Ir(acac) | 4.2   | 5160              | 0.671 | 0.329 | 1077                 |



|                |                                                                                                                     |         |            |
|----------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|---------|------------|
| 专利名称(译)        | 标题：有机发光化合物和含有它的有机电致发光器件                                                                                             |         |            |
| 公开(公告)号        | <a href="#">KR1020140083897A</a>                                                                                    | 公开(公告)日 | 2014-07-04 |
| 申请号            | KR1020130162263                                                                                                     | 申请日     | 2013-12-24 |
| [标]申请(专利权)人(译) | SFC股份有限公司                                                                                                           |         |            |
| 申请(专利权)人(译)    | 에스에프씨주식회사                                                                                                           |         |            |
| 当前申请(专利权)人(译)  | 에스에프씨주식회사                                                                                                           |         |            |
| [标]发明人         | PARK SANG WOO<br>박상우<br>LEE SE JIN<br>이세진                                                                           |         |            |
| 发明人            | 박상우<br>이세진                                                                                                          |         |            |
| IPC分类号         | C09K11/06 C07D403/14 H01L51/50                                                                                      |         |            |
| CPC分类号         | C09K11/06 C09K2211/1044 C09K2211/1048 C09K2211/1051 C09K2211/1059 C09K2211/1062 C09K2211/1066 H01L51/0071 H01L51/50 |         |            |
| 优先权            | 1020120153389 2012-12-26 KR                                                                                         |         |            |
| 外部链接           | <a href="#">Espacenet</a>                                                                                           |         |            |

#### 摘要(译)

本发明涉及由[化学式1]表示的有机发光化合物和包含其的有机电致发光器件。并且，根据本发明的有机发光化合物可以制造具有同时，功率效率和长耐久性的有机电致发光器件，材料的寿命性能和发光效率优异并且发光效率优异。[化学式1]图像的存在（专业参考）。

|    |
|----|
| 80 |
| 70 |
| 60 |
| 50 |
| 40 |
| 30 |
| 20 |
| 10 |