



(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 공개특허공보(A)

(11) 공개번호 10-2015-0144121
(43) 공개일자 2015년12월24일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)

C09K 11/06 (2006.01) C07D 403/04 (2006.01)

C07D 403/10 (2006.01) H01L 51/50 (2006.01)

(21) 출원번호 10-2014-0072819

(22) 출원일자 2014년06월16일

심사청구일자 없음

(71) 출원인

에스에프씨 주식회사

충청북도 청원군 오창읍 과학산업5로 89

(72) 발명자

신봉기

전라북도 정읍시 용흥2길 14 102동 803호(상평동, 신흥장미아파트)

박지희

경상남도 창원시 진해구 태백서로45번길 3 101동 805호(태백동, 원창시인의마을)

(뒷면에 계속)

(74) 대리인

정은열

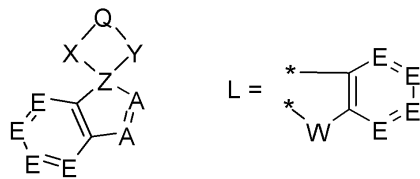
전체 청구항 수 : 총 8 항

(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 화합물을 채용한 유기전계발광소자는 종래 재료를 채용한 소자에 비하여 저전압 구동, 향상된 발광효율 및 장수명 특성을 갖는다.

[화학식 1]



대표도 - 도1

80
70
60
50
40
30
20
10

(72) 발명자

박부배

대구광역시 북구 구암로 180 102동 702호(구암동,
칠곡동서영남타운)

이승수

대전광역시 서구 갈마로 262 111동 1702호(내동,
맑은아침아파트)

박경화

강원도 춘천시 공지로 188-53 (석사동)

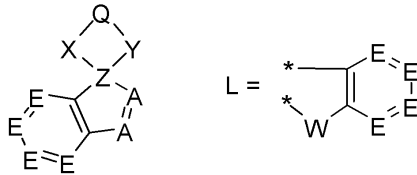
명세서

청구범위

청구항 1

하기 [화학식 1]로 표시되는 유기발광 화합물:

[화학식 1]



상기 [화학식 1]에서,

L의 *가 A와 결합하여 고리를 형성하고, Z는 C, Si 또는 Ge이고, W는 CR_1R_2 , SiR_3R_4 , GeR_5R_6 , NR_7 , O, S, Se, Te 또는 BR_8 이며,

상기 R_1 과 R_2 , R_3 와 R_4 , R_5 와 R_6 는 각각 서로 연결되어 고리를 형성할 수 있고,

X 및 Y는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 30의 알케닐기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 30의 시클로알킬기 또는 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 50의 아릴기이며,

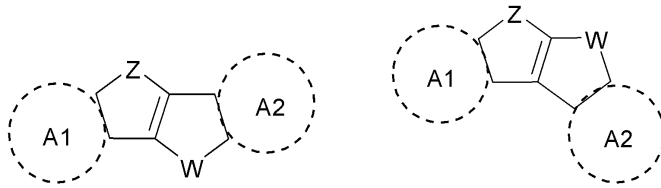
단, 상기 X 및 Y 모두가 동시에 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 50의 아릴기인 경우는 제외하고,

Q는 상기 X와 Y를 연결하는 연결기로서, 단일결합이거나 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬렌기 또는 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 30의 알케닐렌기이며,

상기 X, Y 및 Q에서의 하나 이상의 탄소원자는 헤테로원자로 치환될 수 있고,

상기 R_1 내지 R_8 및 E는 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 30의 알케닐기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 30의 알킬닐기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 30의 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 30의 헤테로시클로알킬기, 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 아릴아민기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 50의 아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 50의 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 실릴기, 치환 또는 비치환된 게르마늄기, 치환 또는 비치환된 붕소기, 치환 또는 비치환된 알루미늄기, 카르보닐기, 포스포릴기, 아미노기, 싸이올기, 시아노기, 히드록시기, 니트로기, 할로젠기, 셀레늄기, 텔루륨기, 아미드기, 에테르기, 에스테르기, 하기 [화학식 E], [화학식 F] 및 [화학식 G] 중에서 선택되며, 상기 인접한 E는 서로 결합하여 고리를 형성할 수 있고,

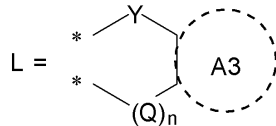
[화학식 E] [화학식 F]



상기 [화학식 E] 내지 [화학식 F]에서,

A1 내지 A2는 각각 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 50의 방향족 탄화수소 고리, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 50의 헤테로고리, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 30의 시클로알킬기 및 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 30의 헤테로시클로알킬기 중에서 선택되며,

상기 A1 내지 A2의 치환기 중 인접한 두 개는 하기 L과 결합하여 축합고리를 형성할 수 있으며([*]는 결합 사이트를 의미함),

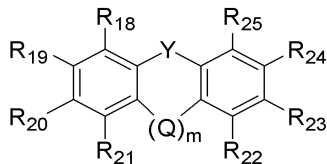


상기 [화학식 E] 내지 [화학식 F] 및 L에서,

A3는 상기 A1 내지 A2의 정의와 동일하고,

Y, Z, W 및 Q는 각각 독립적으로 NR_9 , $\text{CR}_{10}\text{R}_{11}$, O, S, $\text{SiR}_{12}\text{R}_{13}$, $\text{GeR}_{14}\text{R}_{15}$, BR_{16} , PR_{17} , C=O, Se, Te 또는 Po고, 상기 Y, Z, W 및 Q 중 적어도 하나 이상은 NR_9 이며(단, n은 0 내지 3의 정수임),

[화학식 G]



상기 [화학식 G]에서,

Y 및 Q는 각각 독립적으로 NR_{26} , $\text{CR}_{27}\text{R}_{28}$, O, S, $\text{SiR}_{29}\text{R}_{30}$, $\text{GeR}_{31}\text{R}_{32}$, BR_{33} , PR_{34} , C=O, Se, Te 또는 Po이고(단, m은 1 내지 3의 정수임),

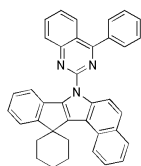
상기 R_{18} 내지 R_{25} 중의 인접한 두 개는 서로 연결되어 치환족 탄화수소 고리, 단일환 또는 다환의 방향족 탄화수소 고리를 형성할 수 있으며, 상기 형성된 치환족, 방향족 탄화수소 고리의 탄소원자는 N, S, O, Se, Te, Po, NR_{35} , $\text{SiR}_{36}\text{R}_{37}$, $\text{GeR}_{38}\text{R}_{39}$, PR_{40} 및 BR_{41} 중에서 선택되는 어느 하나 이상의 치환 또는 비치환된 헤테로원자로 치환될 수 있고,

상기 R_9 내지 R_{41} 은 상기 R_1 내지 R_8 의 정의와 동일하고, 상기 R_{10} 과 R_{11} , R_{12} 와 R_{13} , R_{14} 와 R_{15} , R_{27} 과 R_{28} , R_{29} 과 R_{30} , R_{31} 과 R_{32} , R_{36} 과 R_{37} , R_{38} 과 R_{39} 는 각각 서로 연결되어 고리를 형성할 수 있다.

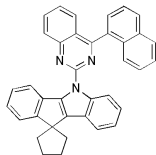
청구항 2

제1항에 있어서,

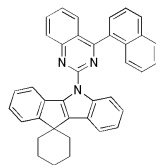
상기 [화학식 1]은 하기 [화학식 2] 내지 [화학식 217] 중에서 선택되는 것을 특징으로 하는 유기발광 화합물:



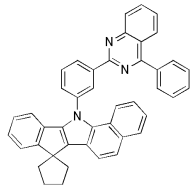
[화학식 2]



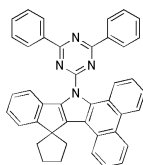
[화학식 3]



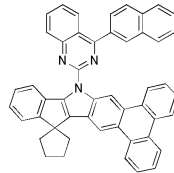
[화학식 4]



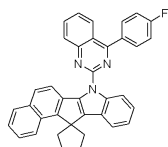
[화학식 5]



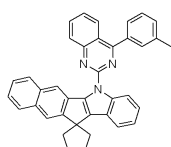
[화학식 6]



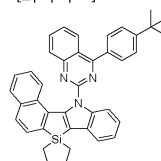
[화학식 7]



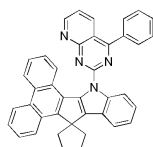
[화학식 8]



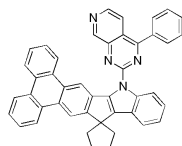
[화학식 9]



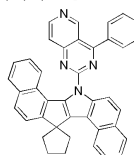
[화학식 10]



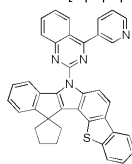
[화학식 11]



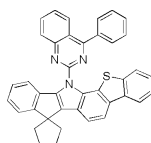
[화학식 12]



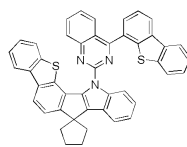
[화학식 13]



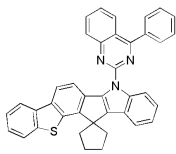
[화학식 14]



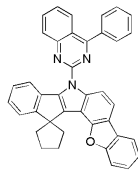
[화학식 15]



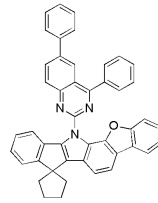
[화학식 16]



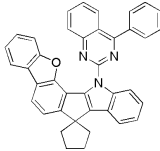
[화학식 17]



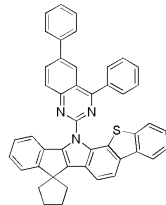
[화학식 18]



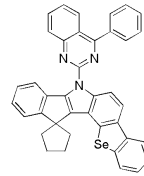
[화학식 19]



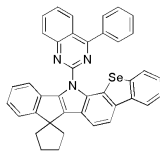
[화학식 20]



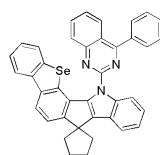
[화학식 21]



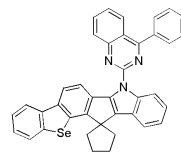
[화학식 22]



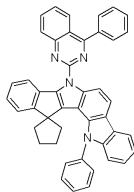
[화학식 23]



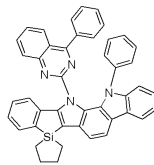
[화학식 24]



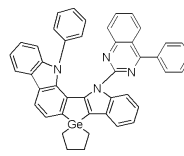
[화학식 25]



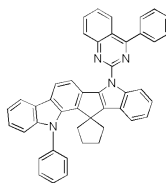
[화학식 26]



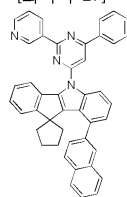
[화학식 27]



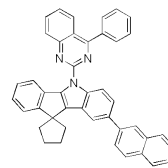
[화학식 28]



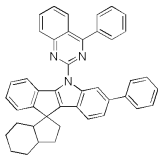
[화학식 29]



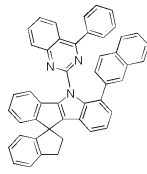
[화학식 30]



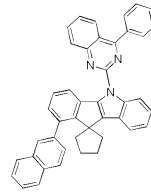
[화학식 31]



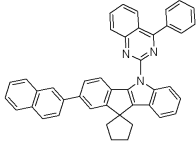
[화학식 32]



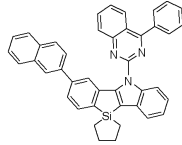
[화학식 33]



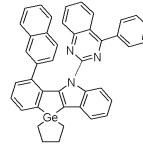
[화학식 34]



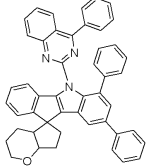
[화학식 35]



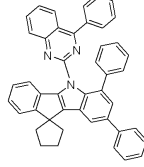
[화학식 36]



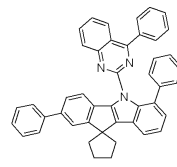
[화학식 37]



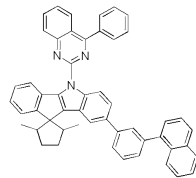
[화학식 38]



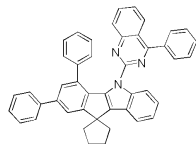
[화학식 39]



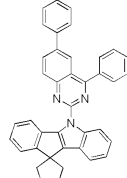
[화학식 40]



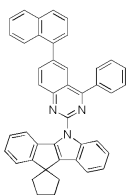
[화학식 41]



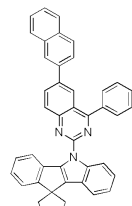
[화학식 42]



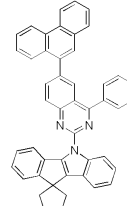
[화학식 43]



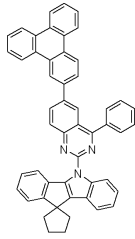
[화학식 44]



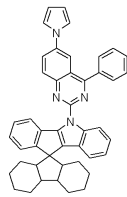
[화학식 45]



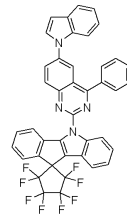
[화학식 46]



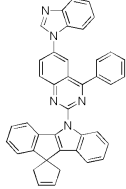
[화학식 47]



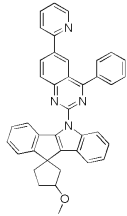
[화학식 48]



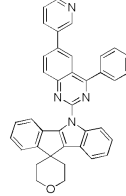
[화학식 49]



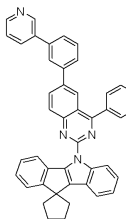
[화학식 50]



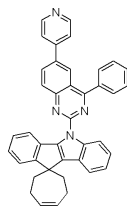
[화학식 51]



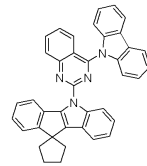
[화학식 52]



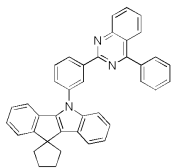
[화학식 53]



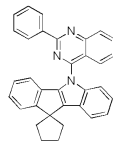
[화학식 54]



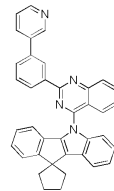
[화학식 55]



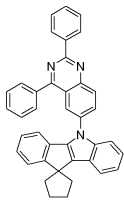
[화학식 56]



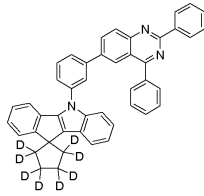
[화학식 57]



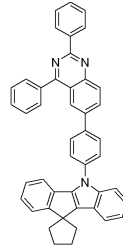
[화학식 58]



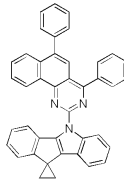
[화학식 59]



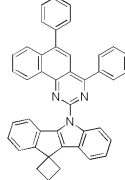
[화학식 60]



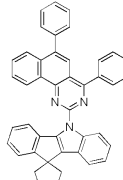
[화학식 61]



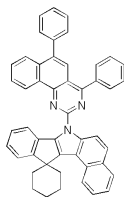
[화학식 62]



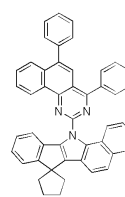
[화학식 63]



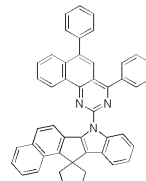
[화학식 64]



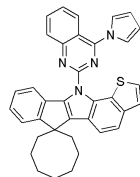
[화학식 65]



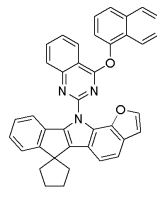
[화학식 66]



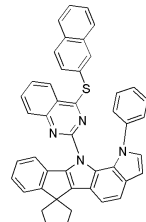
[화학식 67]



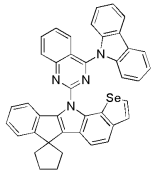
[화학식 68]



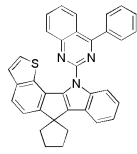
[화학식 69]



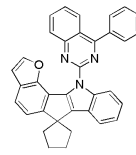
[화학식 70]



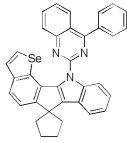
[화학식 71]



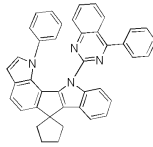
[화학식 72]



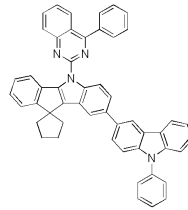
[화학식 73]



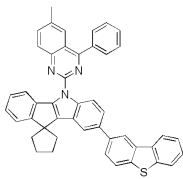
[화학식 74]



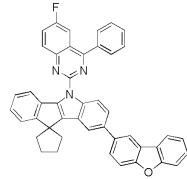
[화학식 75]



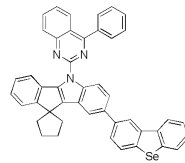
[화학식 76]



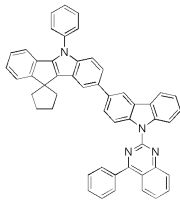
[화학식 77]



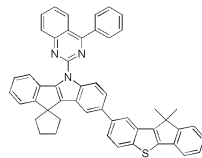
[화학식 78]



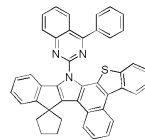
[화학식 79]



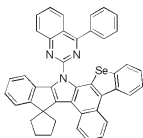
[화학식 80]



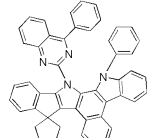
[화학식 81]



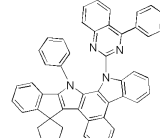
[화학식 82]



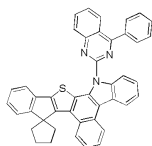
[화학식 83]



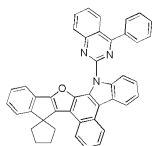
[화학식 84]



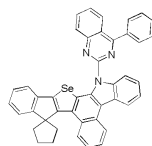
[화학식 85]



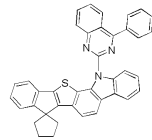
[화학식 86]



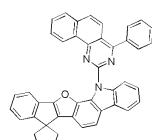
[화학식 87]



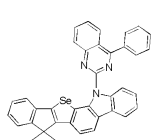
[화학식 88]



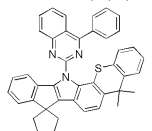
[화학식 89]



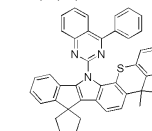
[화학식 90]



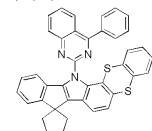
[화학식 91]



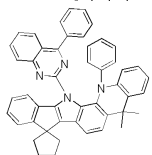
[화학식 92]



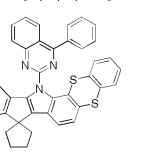
[화학식 93]



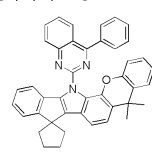
[화학식 94]



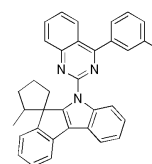
[화학식 95]



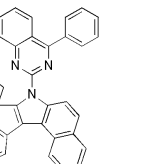
[화학식 96]



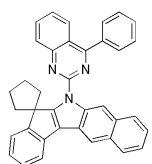
[화학식 97]



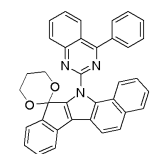
[화학식 98]



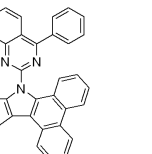
[화학식 99]



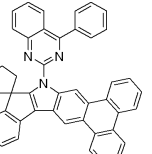
[화학식 100]



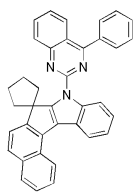
[화학식 101]



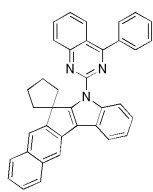
[화학식 102]



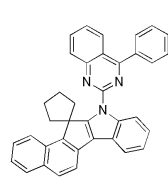
[화학식 103]



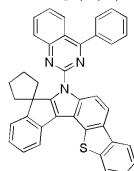
[화학식 104]



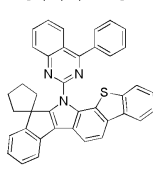
[화학식 105]



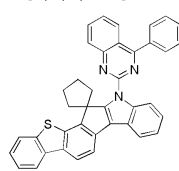
[화학식 106]



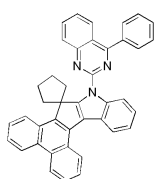
[화학식 107]



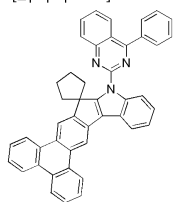
[화학식 108]



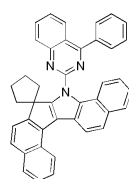
[화학식 109]



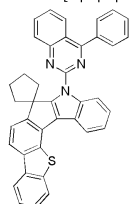
[화학식 110]



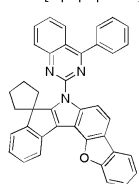
[화학식 111]



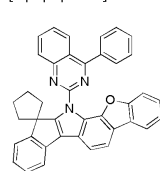
[화학식 112]



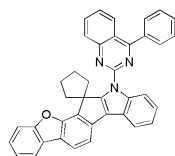
[화학식 113]



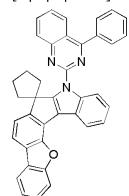
[화학식 114]



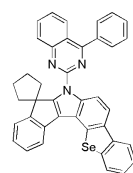
[화학식 115]



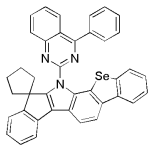
[화학식 116]



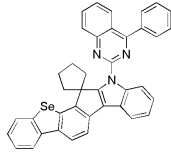
[화학식 117]



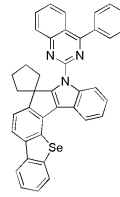
[화학식 118]



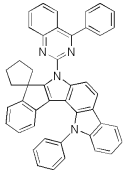
[화학식 119]



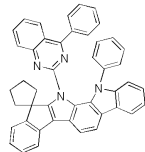
[화학식 120]



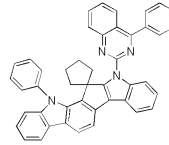
[화학식 121]



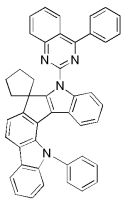
[화학식 122]



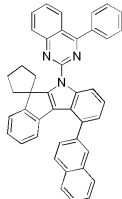
[화학식 123]



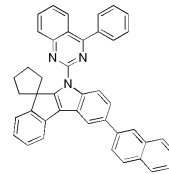
[화학식 124]



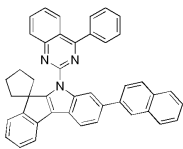
[화학식 125]



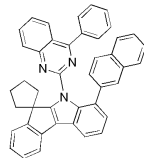
[화학식 126]



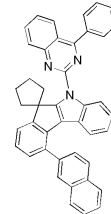
[화학식 127]



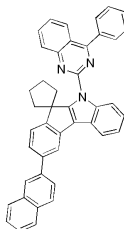
[화학식 128]



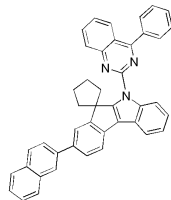
[화학식 129]



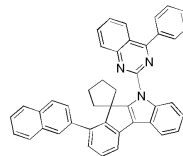
[화학식 130]



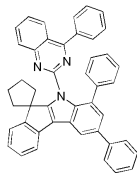
[화학식 131]



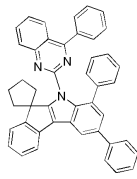
[화학식 132]



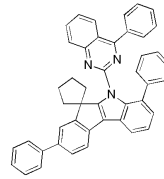
[화학식 133]



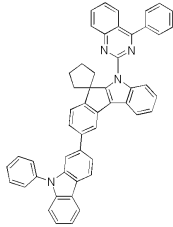
[화학식 134]



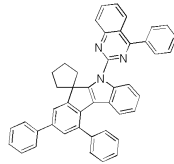
[화학식 135]



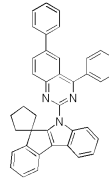
[화학식 136]



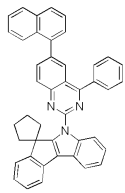
[화학식 137]



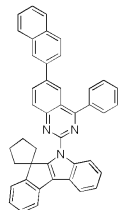
[화학식 138]



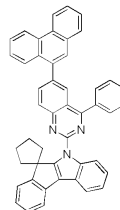
[화학식 139]



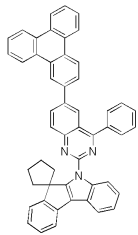
[화학식 140]



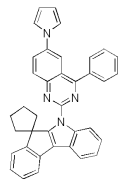
[화학식 141]



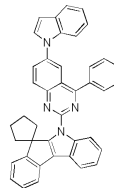
[화학식 142]



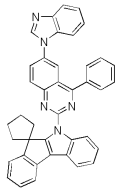
[화학식 143]



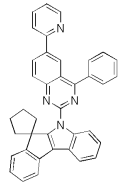
[화학식 144]



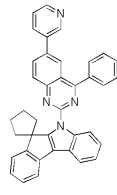
[화학식 145]



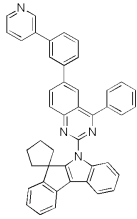
[화학식 146]



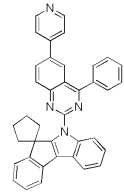
[화학식 147]



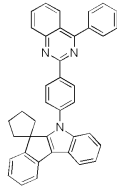
[화학식 148]



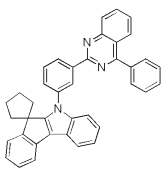
[화학식 149]



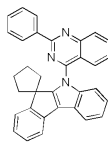
[화학식 150]



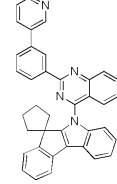
[화학식 151]



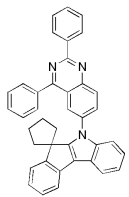
[화학식 152]



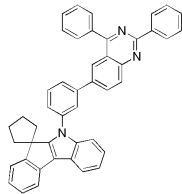
[화학식 153]



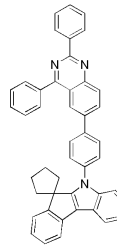
[화학식 154]



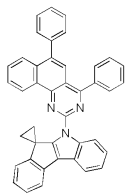
[화학식 155]



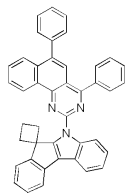
[화학식 156]



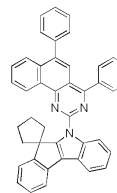
[화학식 157]



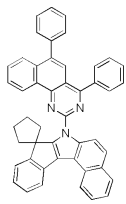
[화학식 158]



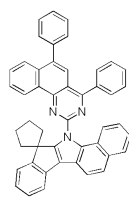
[화학식 159]



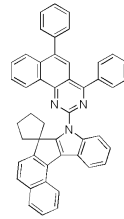
[화학식 160]



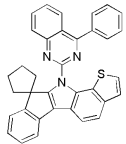
[화학식 161]



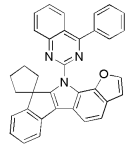
[화학식 162]



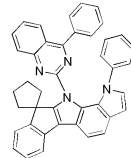
[화학식 163]



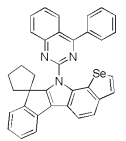
[화학식 164]



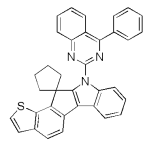
[화학식 165]



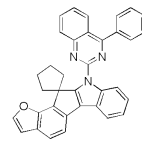
[화학식 166]



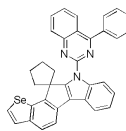
[화학식 167]



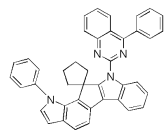
[화학식 168]



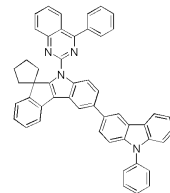
[화학식 169]



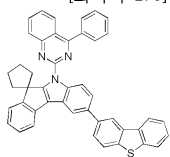
[화학식 170]



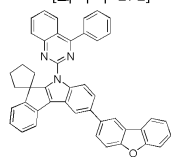
[화학식 171]



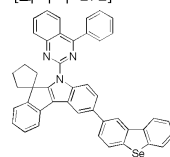
[화학식 172]



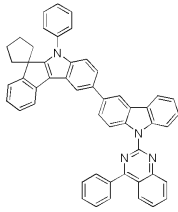
[화학식 173]



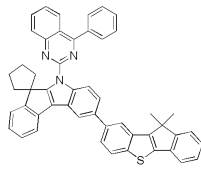
[화학식 174]



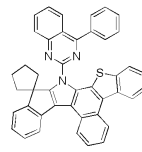
[화학식 175]



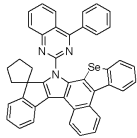
[화학식 176]



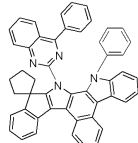
[화학식 177]



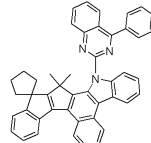
[화학식 178]



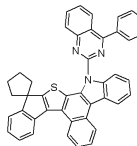
[화학식 179]



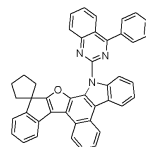
[화학식 180]



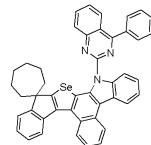
[화학식 181]



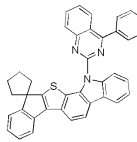
[화학식 182]



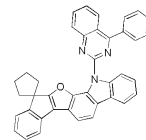
[화학식 183]



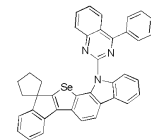
[화학식 184]



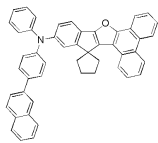
[화학식 185]



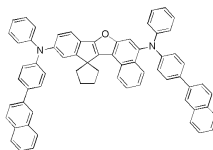
[화학식 186]



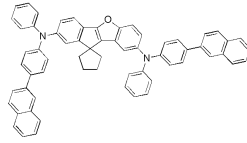
[화학식 187]



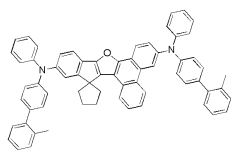
[화학식 188]



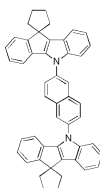
[화학식 189]



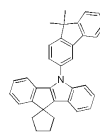
[화학식 190]



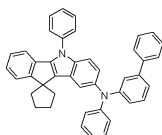
[화학식 191]



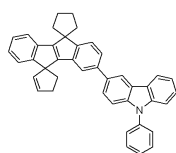
[화학식 192]



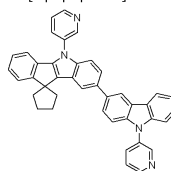
[화학식 193]



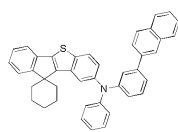
[화학식 194]



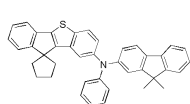
[화학식 195]



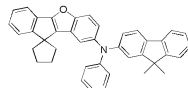
[화학식 196]



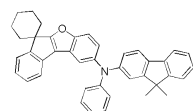
[화학식 197]



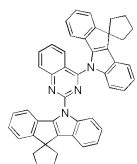
[화학식 198]



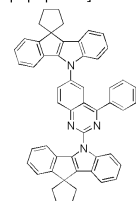
[화학식 199]



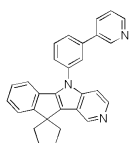
[화학식 200]



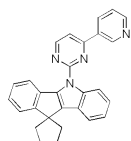
[화학식 201]



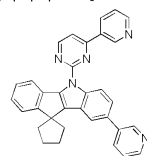
[화학식 202]



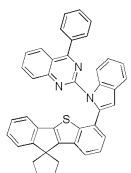
[화학식 203]



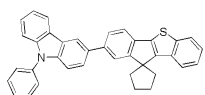
[화학식 204]



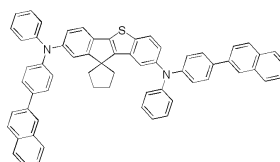
[화학식 205]



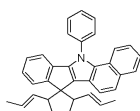
[화학식 206]



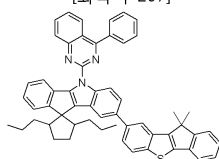
[화학식 207]



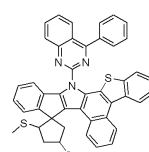
[화학식 208]



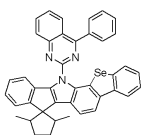
[화학식 209]



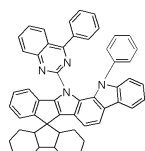
[화학식 210]



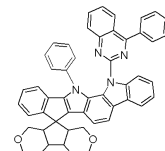
[화학식 211]



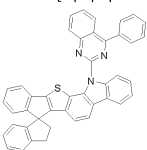
[화학식 212]



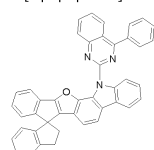
[화학식 213]



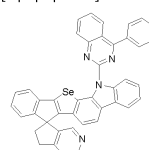
[화학식 214]



[화학식 215]



[화학식 216]



[화학식 217]

청구항 3

제1 전극, 제2 전극, 및 상기 제1 전극과 제2 전극 사이에 배치된 1층 이상의 유기물층을 포함하는 유기전계발광소자로서,

상기 유기물층 중 1 층 이상은 상기 제1항에 따른 [화학식 1]의 유기발광 화합물을 포함하는 것을 특징으로 하는 유기전계발광소자.

청구항 4

제3항에 있어서,

상기 유기물층은 정공 주입층, 정공 수송층 및 정공 주입과 정공 수송을 동시에 하는 층 중 1층 이상을 포함하고, 상기 층들 중 1층 이상이 상기 [화학식 1]로 표시되는 유기발광 화합물을 포함하는 것을 특징으로 하는 유기전계발광소자.

청구항 5

제3항에 있어서,

상기 유기물층은 발광층을 포함하고, 상기 발광층이 상기 [화학식 1]로 표시되는 유기발광 화합물을 포함하는 것을 특징으로 하는 유기전계발광소자.

청구항 6

제5항에 있어서,

상기 [화학식 1]로 표시되는 유기발광 화합물은 상기 발광층 내의 호스트 화합물로 사용되는 것을 특징으로 하는 유기전계발광소자.

청구항 7

제3항에 있어서,

상기 유기물층은 전자 수송층, 전자 주입층 및 전자 수송과 전자 주입을 동시에 하는 층 중 1층 이상을 포함하고, 상기 층들 중 1층 이상이 상기 [화학식 1]로 표시되는 유기발광 화합물을 포함하는 것을 특징으로 하는 유기전계발광소자.

청구항 8

제3항에 있어서,

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

발명의 설명

기술 분야

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

배경 기술

[0002] 유기발광 현상이란 유기 물질을 이용하여 전기 에너지를 빛 에너지로 전환시켜주는 현상을 말한다. 유기발광 현상을 이용하는 유기발광소자는 통상 양극과 음극 및 이 사이에 유기물층을 포함하는 구조를 가진다. 여기서 유기물층은 유기발광소자의 효율과 안정성을 높이기 위하여 각기 다른 물질로 구성된 다층의 구조로 이루어진 경우가 많으며, 예컨대 정공주입층, 정공수송층, 발광층, 전자수송층, 전자주입층 등으로 이루어질 수 있다. 이러한 유기발광소자의 구조에서 두 전극 사이에 전압을 걸어주게 되면 양극에서는 정공이, 음극에서는 전자가 유기물층에 주입되게 되고, 주입된 정공과 전자가 만났을 때 엑시톤(exciton)이 형성되며, 이 엑시톤이 다시 바닥상태로 떨어질 때 빛이 나게 된다. 이러한 유기발광소자는 자발광, 고휘도, 고효율, 낮은 구동 전압, 넓은

시아각, 높은 콘트라스트, 고속 응답성 등의 특성을 갖는 것으로 알려져 있다.

[0003] 유기발광소자에서 유기물층으로 사용되는 물질은 기능에 따라, 발광 물질과 전하 수송 물질, 정공 주입 물질, 정공 수송 물질, 전자 수송 물질, 전자 주입 물질 등으로 분류될 수 있다. 또한, 발광 물질은 발광색에 따라 청색, 녹색, 적색 발광 물질과 보다 나은 천연색을 구현하기 위해 필요한 노란색 및 주황색 발광 물질로 구분될 수 있다. 한편, 발광 물질로서 하나의 물질만 사용하는 경우 분자간 상호 작용에 의하여 최대 발광 파장이 장파장으로 이동하고 색순도가 떨어지거나 발광 감쇄 효과로 소자의 효율이 감소되는 문제가 발생하므로, 색순도의 증가와 에너지 전이를 통한 발광 효율을 증가시키기 위하여 발광 물질로서 호스트/도판트 계를 사용할 수 있다.

[0004] 유기발광소자가 전술한 우수한 특징들을 충분히 발휘하기 위해서는 소자 내 유기물층을 이루는 물질, 예컨대 정공 주입 물질, 정공 수송 물질, 발광 물질, 전자 수송 물질, 전자 주입 물질 등이 안정하고 효율적인 재료에 의하여 뒷받침되는 것이 선행되어야 하나, 아직까지 안정하고 효율적인 유기 발광 소자용 유기물층 재료의 개발이 충분히 이루어지지 않은 상태이다. 따라서 새로운 재료의 개발이 계속 요구되고 있다.

발명의 내용

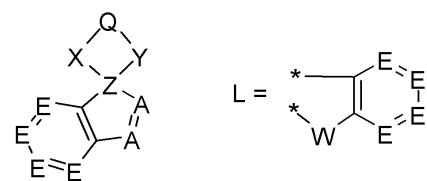
해결하려는 과제

[0005] 따라서, 본 발명이 해결하고자 하는 과제는 상기 문제점을 해결하고자 하는 것으로서, 종래 재료보다 저전압 구동이 가능하고, 보다 향상된 발광효율 및 장수명 특성을 갖는 유기발광 화합물 및 이를 포함하는 유기전계발광소자를 제공하는 것이다.

과제의 해결 수단

[0006] 본 발명은 상기 과제를 해결하기 위하여, 하기 [화학식 1]로 표시되는 유기발광 화합물을 제공한다.

[0007] [화학식 1]



[0008]

[0009] 상기 [화학식 1]의 구조 및 각 치환기에 대한 구체적인 내용은 후술한다.

[0010] 또한, 본 발명은 제1 전극, 상기 제1 전극에 대향된 제2 전극 및 상기 제1 전극과 상기 제2 전극 사이에 개재되는 1층 이상의 유기층으로 이루어지고, 상기 유기층은 상기 [화학식 1]로 구현되는 유기발광 화합물을 하나 이상 포함하는 것을 특징으로 하는 유기전계발광소자를 제공한다.

발명의 효과

[0011] 본 발명에 따른 유기발광 화합물을 채용한 유기전계발광소자는 종래 재료를 채용한 소자에 비하여 저전압 구동, 향상된 발광효율 및 장수명 특성을 갖는다.

도면의 간단한 설명

[0012] 도 1은 본 발명의 일 구현예에 따른 다층 구조의 유기전계발광소자를 나타낸 개념도이다.

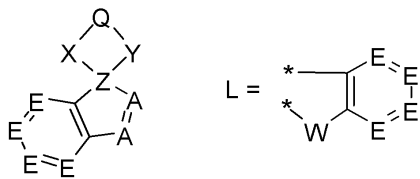
발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

[0013] 이하, 본 발명을 더욱 상세하게 설명한다.

[0014] 본 발명의 일 측면은 하기 [화학식 1]로 표시되는 신규한 유기발광 화합물에 관한 것으로서, 기본적으로 6환-5환-5환-6환 고리에 스피로 결합이 형성된 코어 구조에 다양한 치환기가 결합되어 코어 구조 및 치환기의 고유 특성이 구현되는 유기발광 화합물에 관한 것이다. 또한, 상기 코어 구조는 이의 치환기들이 인접한 치환기와 서

로 연결되어 하나 이상의 고리가 더 축합된 형태의 코어 구조일 수 있다.

[화학식 1]



상기 [화학식 1]의 코어 구조와 이에 결합되는 다양한 치환기에 대해서 설명하면 다음과 같다.

상기 [화학식 1]에서, L의 *가 A와 각각 결합하여 고리를 형성한다. 이에 의해서 6환-5환-5환-6환 고리에 스피로 결합이 형성된 코어 구조를 형성한다.

Z는 C, Si 또는 Ge이고, X 및 Y는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 30의 알케닐기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 30의 시클로알킬기 또는 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 50의 아릴기일 수 있다. 다만, 상기 X 및 Y 모두가 동시에 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 50의 아릴기인 경우는 제외한다.

Q는 상기 X와 Y를 연결하는 연결기로서, 단일결합이거나 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬렌기 또는 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 30의 알케닐렌기이다.

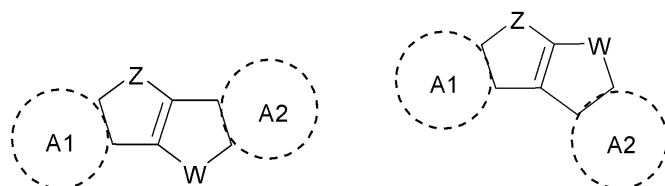
또한, 상기 X, Y 및 Q에서의 하나 이상의 탄소원자는 헤테로원자로 치환될 수 있다.

상기 X, Y, Z 및 Q의 정의에 의해서 본 발명에 따른 [화학식 1]은 스피로(spiro) 구조를 갖는 것을 특징으로 하고, 구체적으로 인텐, 벤조실올(benzosilole) 또는 벤조저몰(benzogermole)이 시클로알킬기 또는 아릴기, 헤테로아릴기, 시클로알킬기 및 헤테로시클로알킬기 중에서 선택된 하나 이상이 융합된 시클로알킬기와 함께 스피로 구조를 형성한다.

W는 CR_1R_2 , SiR_3R_4 , GeR_5R_6 , NR_7 , O, S, Se, Te 또는 BR_8 이며, 상기 R_1 과 R_2 , R_3 와 R_4 , R_5 와 R_6 는 각각 서로 연결되어 고리를 형성할 수 있다.

상기 R_1 내지 R_8 및 E는 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 30의 알케닐기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 30의 알키닐기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 30의 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 30의 헤테로시클로알킬기, 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 아릴아민기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 50의 아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 50의 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 실릴기, 치환 또는 비치환된 게르마닐기, 치환 또는 비치환된 붕소기, 치환 또는 비치환된 알루미늄기, 카르보닐기, 포스포릴기, 아미노기, 싸이올기, 시아노기, 히드록시기, 니트로기, 할로젠기, 셀레늄기, 텔루륨기, 아미드기, 에테르기, 에스테르기, 하기 [화학식 E], [화학식 F] 및 [화학식 G] 중에서 선택되며, [화학식 E], [화학식 F] 및 [화학식 G]는 각각 다음과 같다. 또한, 상기 인접한 E는 서로 결합하여 고리를 형성할 수 있다.

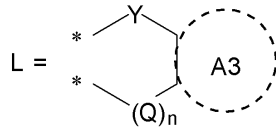
[화학식 E] [화학식 F]



상기 [화학식 E] 내지 [화학식 F]에서,

[0028] A1 내지 A2는 각각 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 50의 방향족 탄화수소 고리, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 50의 헤테로고리, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 30의 시클로알킬기 및 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 30의 헤테로시클로알킬기 중에서 선택된다.

[0029] 상기 A1 내지 A2의 치환기 중 인접한 두 개는 하기 L과 결합하여 축합고리를 형성할 수 있다([*]는 결합 사이트를 의미함).

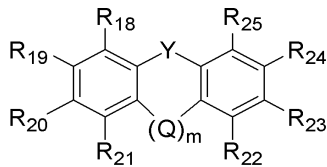


[0030]

[0031] 상기 [화학식 E] 내지 [화학식 F] 및 L에서,

[0032] A3는 상기 A1 내지 A2의 정의와 동일하고, Y, Z, W 및 Q는 각각 독립적으로 NR₉, CR₁₀R₁₁, O, S, SiR₁₂R₁₃, GeR₁₄R₁₅, BR₁₆, PR₁₇, C=O, Se, Te 또는 Po고, 상기 Y, Z, W 및 Q 중 적어도 하나 이상은 NR₉이다(단, n은 0 내지 3의 정수임).

[0033] [화학식 G]



[0034]

[0035] 상기 [화학식 G]에서,

[0036] Y 및 Q는 각각 독립적으로 NR₂₆, CR₂₇R₂₈, O, S, SiR₂₉R₃₀, GeR₃₁R₃₂, BR₃₃, PR₃₄, C=O, Se, Te 또는 Po이다(단, m은 1 내지 3의 정수임).

[0037] 상기 R₁₈ 내지 R₂₅중의 인접한 두 개는 서로 연결되어 치환족 탄화수소 고리, 단일환 또는 다환의 방향족 탄화수소 고리를 형성할 수 있으며, 상기 형성된 치환족, 방향족 탄화수소 고리의 탄소원자는 N, S, O, Se, Te, Po, NR₃₅, SiR₃₆R₃₇, GeR₃₈R₃₉, PR₄₀ 및 BR₄₁ 중에서 선택되는 어느 하나 이상의 치환 또는 비치환된 헤테로원자로 치환될 수 있다.

[0038] 상기 R₉ 내지 R₄₁은 상기 R₁ 내지 R₈의 정의와 동일하고, 상기 R₁₀과 R₁₁, R₁₂와 R₁₃, R₁₄와 R₁₅, R₂₇과 R₂₈, R₂₉과 R₃₀, R₃₁과 R₃₂, R₃₆과 R₃₇, R₃₈과 R₃₉는 각각 서로 연결되어 고리를 형성할 수 있다.

[0039] 한편, 상기 '치환 또는 비치환된'에서의 '치환'은 X, Y, Q, A1 내지 A3, R₁ 내지 R₄₁ 및 이들의 치환기 등이 1종 이상의 치환기로 더 치환된 경우를 의미하는 것으로서, 상기 1종 이상의 치환기는 구체적으로 중수소, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 30의 알케닐기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 30의 알킬닐기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 30의 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 30의 헤테로시클로알킬기, 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 아릴아민기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 50의 아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 50의 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 실릴기, 치환 또는 비치환된 게르마늄기, 치환 또는 비치환된 붕소기, 치환 또는 비치환된 알루미늄기, 카르보닐기, 포스포릴기, 아미노기, 싸이올기, 시아노기, 히드록시기, 니트로기, 할로젠기, 셀레늄기, 텔루륨기, 아미드기, 에테르기, 에스테르기, 상기 [화학식 E], [화학식 F] 및 [화학식 G] 중에서 선택된다.

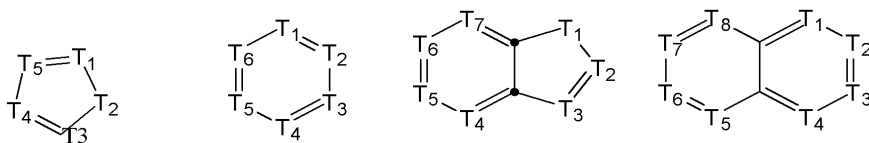
[0040] 본 발명에 따른 유기발광 화합물에 포함된 아릴기는 하나의 수소 제거에 의해서 방향족 탄화수소로부터 유도된 유기 라디칼로서, 5 내지 7원, 바람직하게는 5 또는 6원을 포함하는 단일 또는 융합 고리계를 포함하며, 또한 상기 아릴기에 치환기가 있는 경우 이웃하는 치환기와 서로 융합 (fused)되어 고리를 추가로 형성할 수 있다.

[0041] 상기 아릴기의 구체적인 예로서, 페닐기, o-비페닐기, m-비페닐기, p-비페닐기, o-터페닐기, m-터페닐기, p-터페닐기, 나프틸기, 안트릴기, 페난트릴기, 피레닐기, 인데닐, 플루오레닐기, 테트라히드로나프틸기, 페릴렌일, 크라이세닐, 나프타세닐, 플루오란텐일 등과 같은 방향족 그룹을 들 수 있다.

[0042] 또한, 상기 아릴기 역시 상기 R_1 내지 R_6 의 정의로 기재된 치환기 중에서 선택된 1종 이상의 치환기로 더 치환될 수 있으며, 보다 구체적으로 아릴기 중 하나 이상의 수소 원자는 중수소 원자, 할로겐 원자, 히드록시기, 니트로기, 시아노기, 실릴기, 아미노기($-NH_2$, $-NH(R)$, $-N(R')(R'')$, R' 과 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, 탄소수 2 내지 24의 헤테로아릴알킬기 등으로 치환될 수 있다.

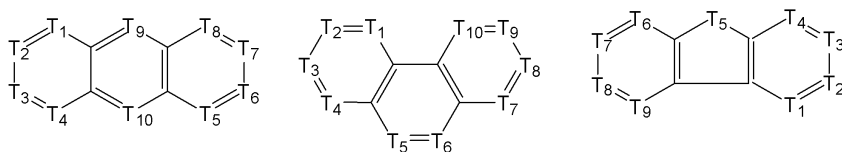
[0043] 본 발명에 따른 유기발광 화합물에 포함된 헤테로아릴기는 하기 [구조식 1] 내지 [구조식 10] 중에서 선택되는 어느 하나일 수 있다.

[0044] [구조식 1] [구조식 2] [구조식 3] [구조식 4]



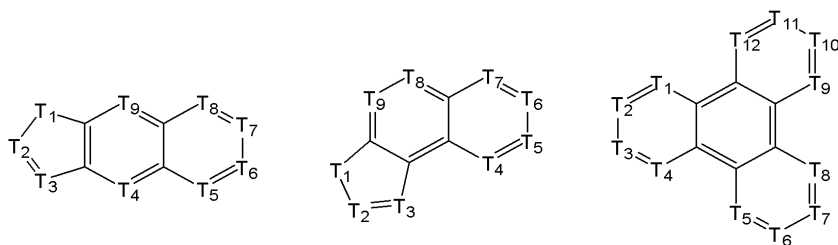
[0045]

[0046] [구조식 5] [구조식 6] [구조식 7]



[0047]

[0048] [구조식 8] [구조식 9] [구조식 10]



[0049]

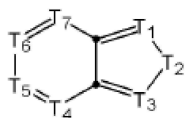
[0050] 상기 [구조식 1] 내지 [구조식 10]에서,

[0051] T_1 내지 T_{12} 은 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로, $C(R_{12})$, $C(R_{43})(R_{44})$, N , $N(R_{45})$, O , S , Se , Te , $Si(R_{46})(R_{47})$ 및 $Ge(R_{48})(R_{49})$ 중에서 선택되는 어느 하나일 수 있고, T_1 내지 T_{12} 가 동시에 모두 탄소 원자인 경우는 없으며, 상기 R_{42} 내지 R_{49} 는 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 이중 원자로 O, N, S 또는 P를 갖는 탄소수 2 내지 30의 헤테로아릴기 중에서 선택된다.

[0052] 또한, 상기 [구조식 3]은 전자의 이동에 따른 공명구조에 의해 하기 [구조식 3-1]로 표시되는 화합물을 포함할 수 있다.

[0053] [구조식 3-1]

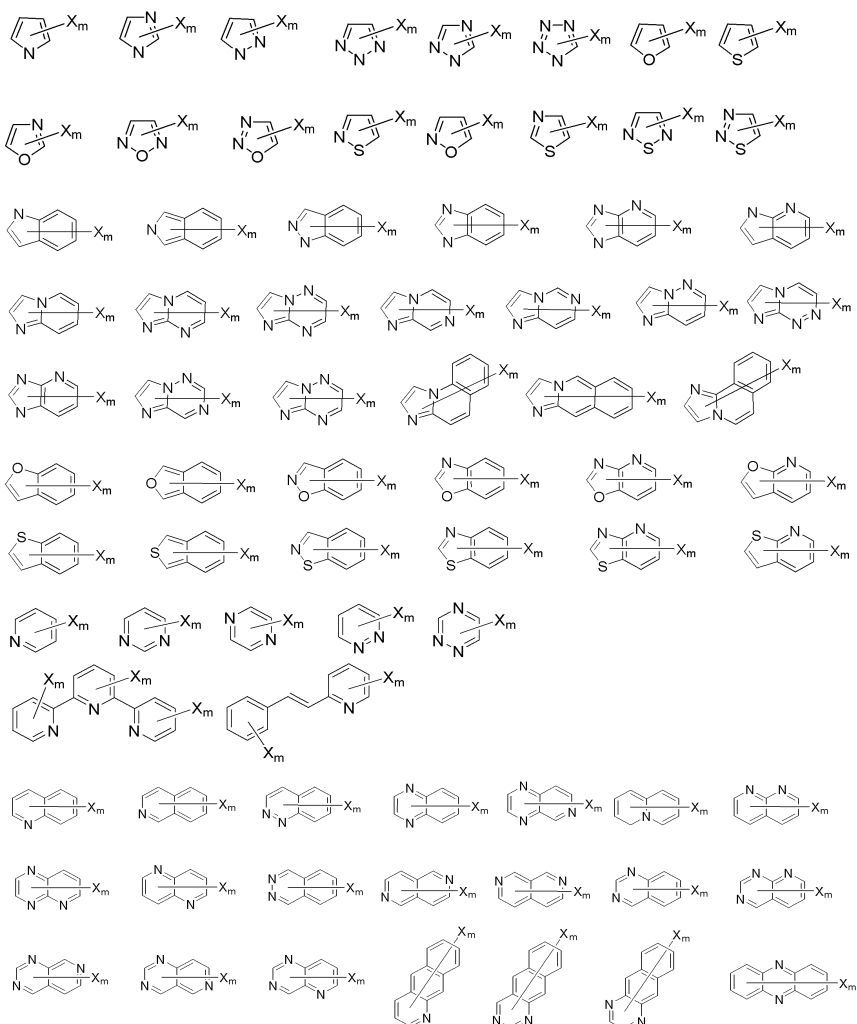


[0054]

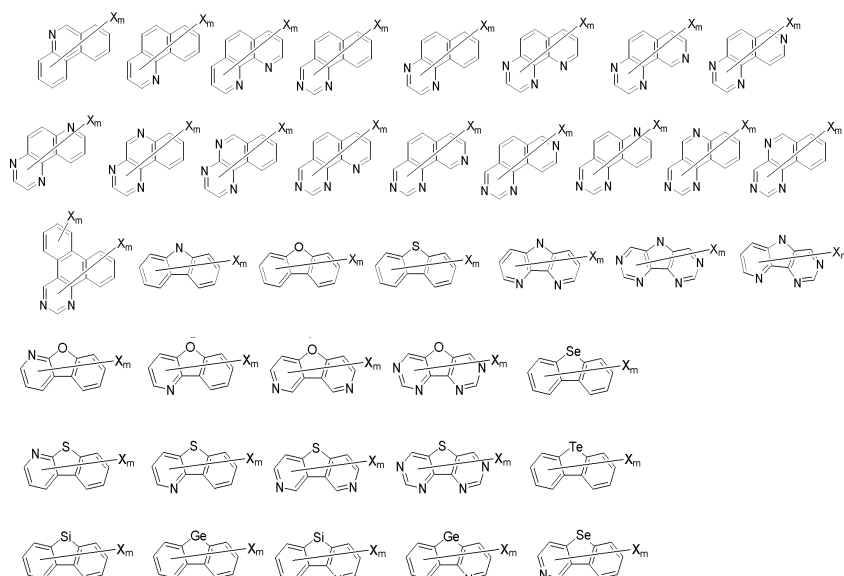
[0055] 상기 [구조식 3-1]에서, T₁ 내지 T₇은 상기 [구조식 1] 내지 [구조식 10]에서 정의한 바와 동일하다.

[0056] 본 발명의 바람직한 실시예에 의하면, 상기 [구조식 1] 내지 [구조식 10]은 하기 [구조식 11] 중에서 선택될 수 있다.

[0057] [구조식 11]



[0058]



[0059]

[0060]

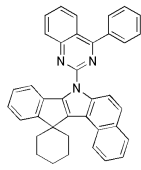
[0061]

상기 [구조식 11]에서,

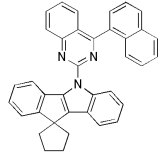
X는 상기 [화학식 1]에서의 R_1 내지 R_8 의 정의와 동일하고, m 은 1 내지 11의 정수이며, m이 2 이상인 경우 복수 개의 X는 서로 동일하거나 상이하며, 상기 [화학식 1], [화학식 E], [화학식 F] 및 [화학식 G]의 치환기와 연결될 수 있다.

[0062]

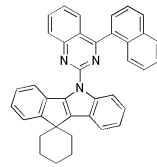
본 발명에 따른 [화학식 1]의 유기발광 화합물은 보다 구체적으로 하기 [화학식 2] 내지 [화학식 217] 중에서 선택될 수 있고, 다만 아래의 구체적인 화합물은 본 발명에 따른 [화학식 1]의 구체적인 예시로서, 이에 의해서 본 발명 [화학식 1]의 범위가 제한되는 것은 아니다.



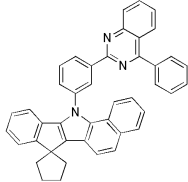
[화학식 2]



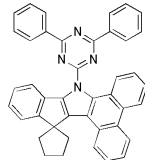
[화학식 3]



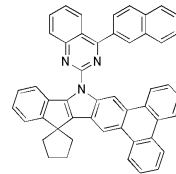
[화학식 4]



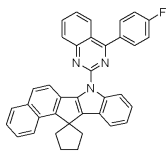
[화학식 5]



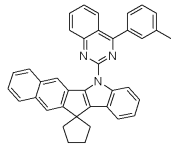
[화학식 6]



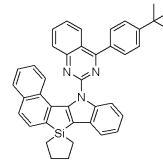
[화학식 7]



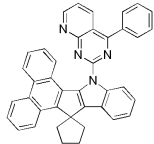
[화학식 8]



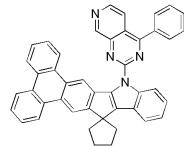
[화학식 9]



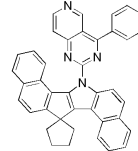
[화학식 10]



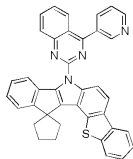
[화학식 11]



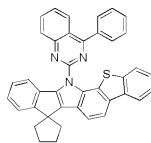
[화학식 12]



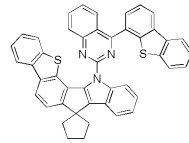
[화학식 13]



[화학식 14]

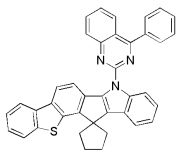


[화학식 15]

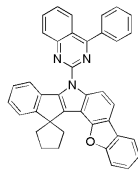


[화학식 16]

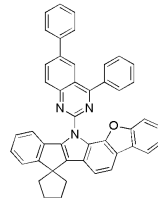
[0063]



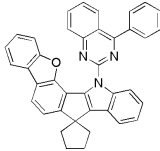
[화학식 17]



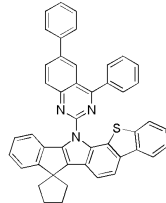
[화학식 18]



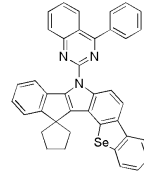
[화학식 19]



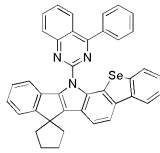
[화학식 20]



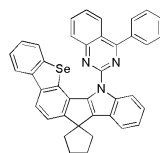
[화학식 21]



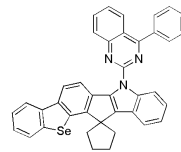
[화학식 22]



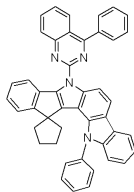
[화학식 23]



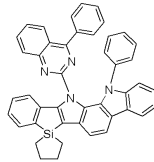
[화학식 24]



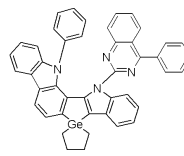
[화학식 25]



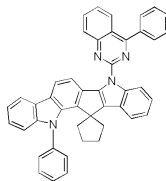
[화학식 26]



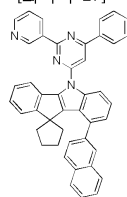
[화학식 27]



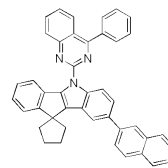
[화학식 28]



[화학식 29]

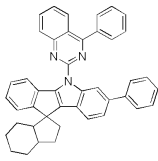


[화학식 30]

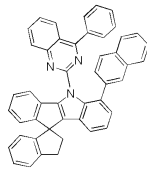


[화학식 31]

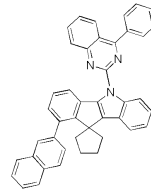
[0064]



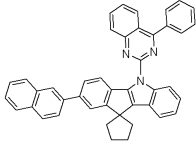
[화학식 32]



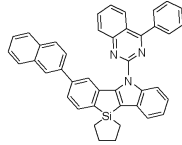
[화학식 33]



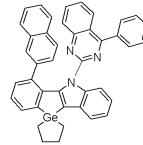
[화학식 34]



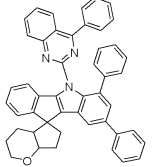
[화학식 35]



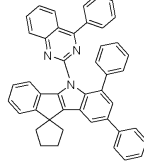
[화학식 36]



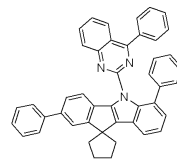
[화학식 37]



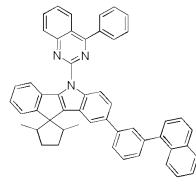
[화학식 38]



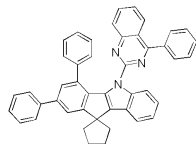
[화학식 39]



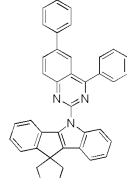
[화학식 40]



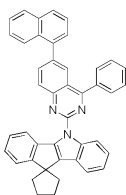
[화학식 41]



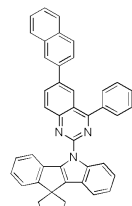
[화학식 42]



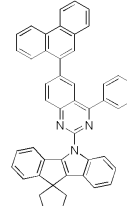
[화학식 43]



[화학식 44]

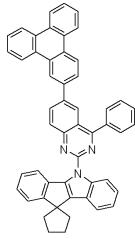


[화학식 45]

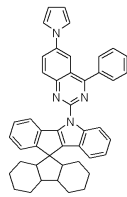


[화학식 46]

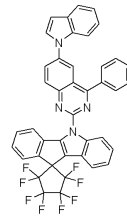
[0065]



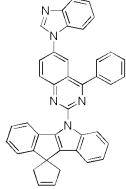
[화학식 47]



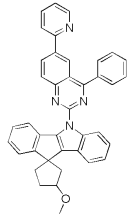
[화학식 48]



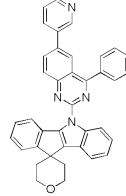
[화학식 49]



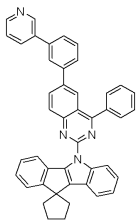
[화학식 50]



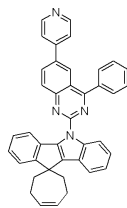
[화학식 51]



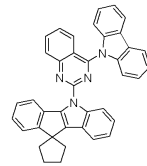
[화학식 52]



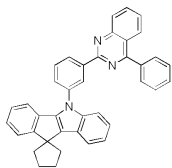
[화학식 53]



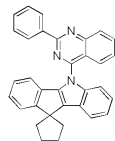
[화학식 54]



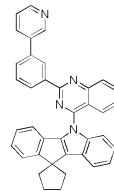
[화학식 55]



[화학식 56]

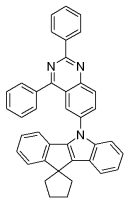


[화학식 57]

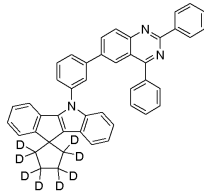


[화학식 58]

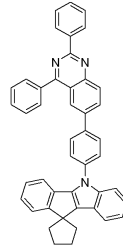
[0066]



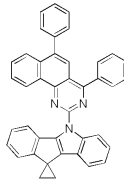
[화학식 59]



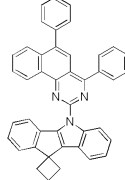
[화학식 60]



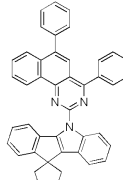
[화학식 61]



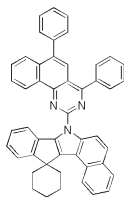
[화학식 62]



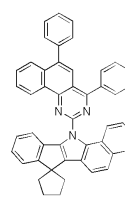
[화학식 63]



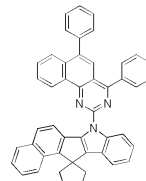
[화학식 64]



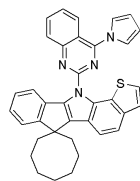
[화학식 65]



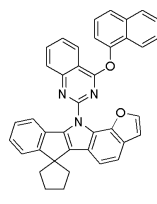
[화학식 66]



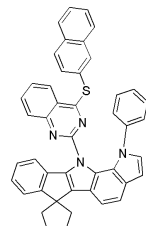
[화학식 67]



[화학식 68]

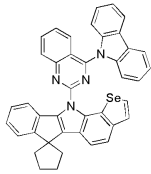


[화학식 69]

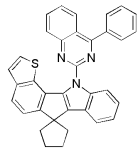


[화학식 70]

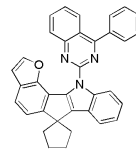
[0067]



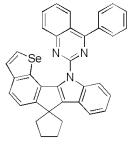
[화학식 71]



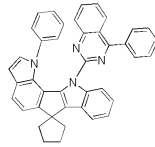
[화학식 72]



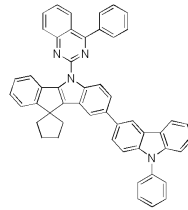
[화학식 73]



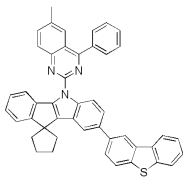
[화학식 74]



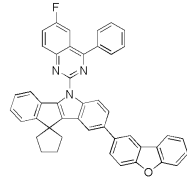
[화학식 75]



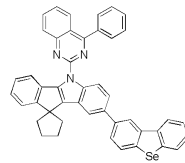
[화학식 76]



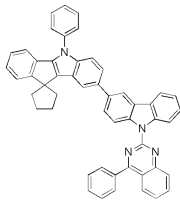
[화학식 77]



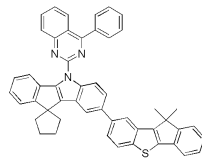
[화학식 78]



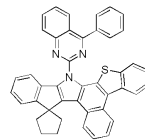
[화학식 79]



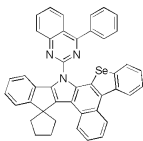
[화학식 80]



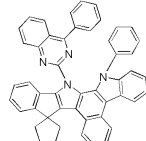
[화학식 81]



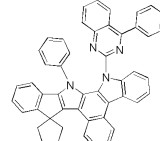
[화학식 82]



[화학식 83]

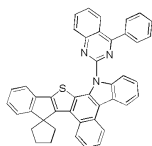


[화학식 84]

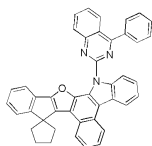


[화학식 85]

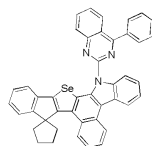
[0068]



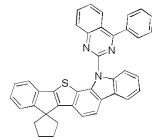
[화학식 86]



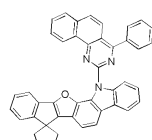
[화학식 87]



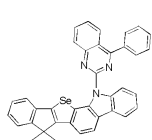
[화학식 88]



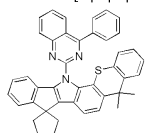
[화학식 89]



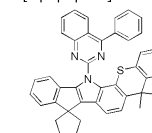
[화학식 90]



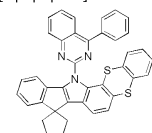
[화학식 91]



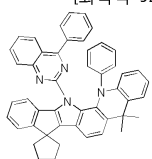
[화학식 92]



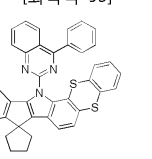
[화학식 93]



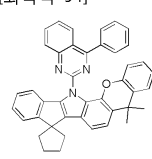
[화학식 94]



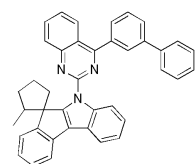
[화학식 95]



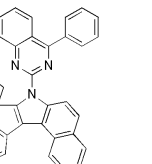
[화학식 96]



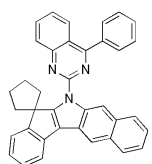
[화학식 97]



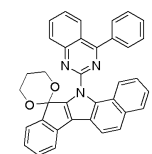
[화학식 98]



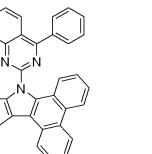
[화학식 99]



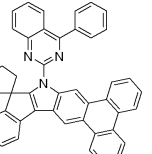
[화학식 100]



[화학식 101]

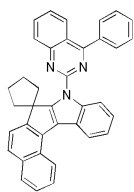


[화학식 102]

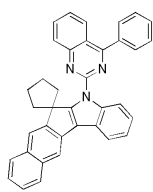


[화학식 103]

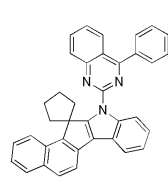
[0069]



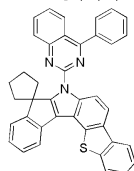
[화학식 104]



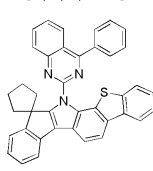
[화학식 105]



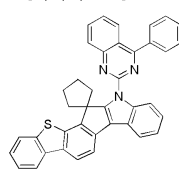
[화학식 106]



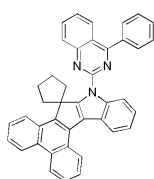
[화학식 107]



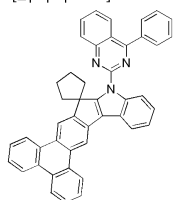
[화학식 108]



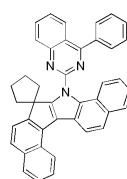
[화학식 109]



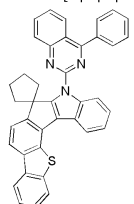
[화학식 110]



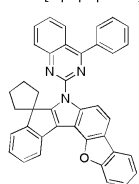
[화학식 111]



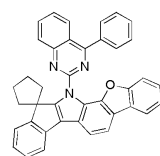
[화학식 112]



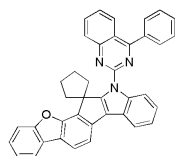
[화학식 113]



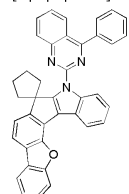
[화학식 114]



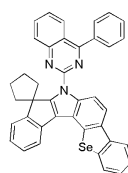
[화학식 115]



[화학식 116]

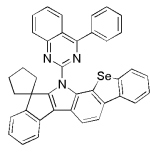


[화학식 117]

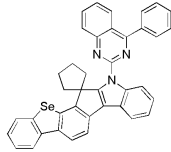


[화학식 118]

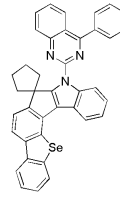
[0070]



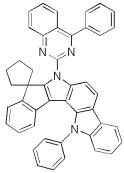
[화학식 119]



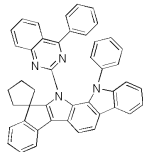
[화학식 120]



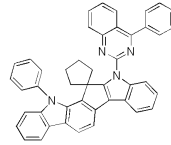
[화학식 121]



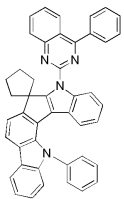
[화학식 122]



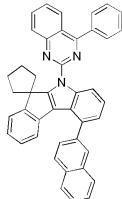
[화학식 123]



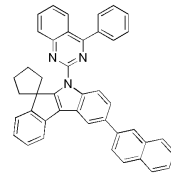
[화학식 124]



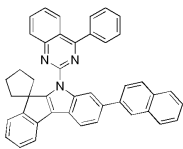
[화학식 125]



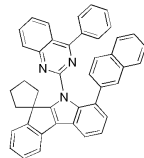
[화학식 126]



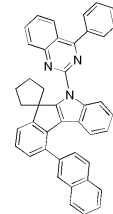
[화학식 127]



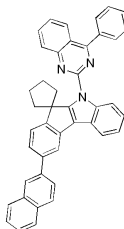
[화학식 128]



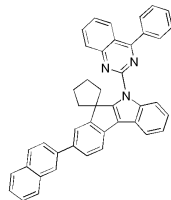
[화학식 129]



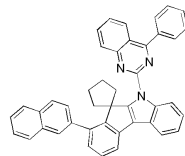
[화학식 130]



[화학식 131]

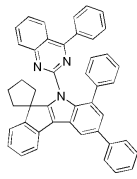


[화학식 132]

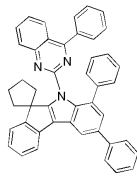


[화학식 133]

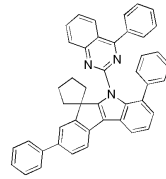
[0071]



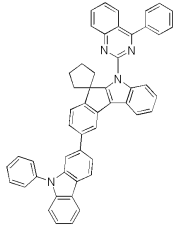
[화학식 134]



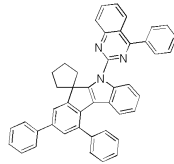
[화학식 135]



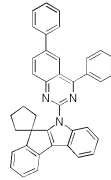
[화학식 136]



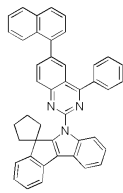
[화학식 137]



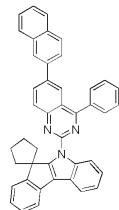
[화학식 138]



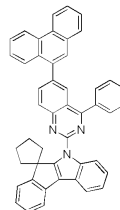
[화학식 139]



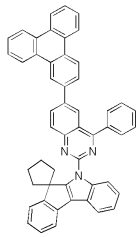
[화학식 140]



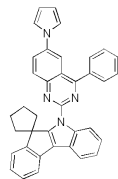
[화학식 141]



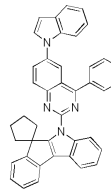
[화학식 142]



[화학식 143]

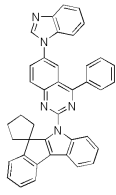


[화학식 144]

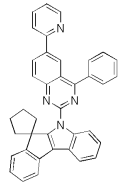


[화학식 145]

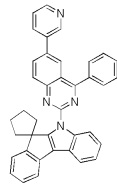
[0072]



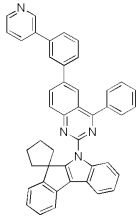
[화학식 146]



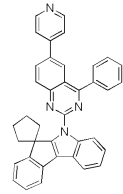
[화학식 147]



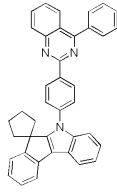
[화학식 148]



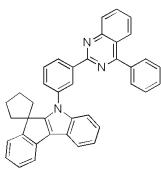
[화학식 149]



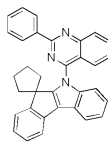
[화학식 150]



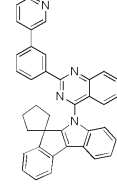
[화학식 151]



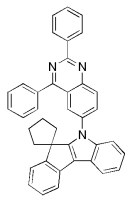
[화학식 152]



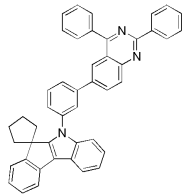
[화학식 153]



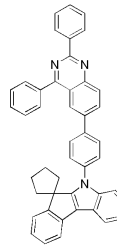
[화학식 154]



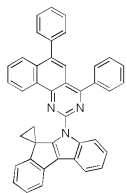
[화학식 155]



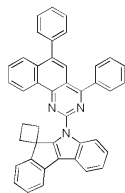
[화학식 156]



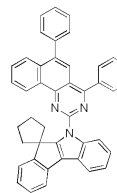
[화학식 157]



[화학식 158]

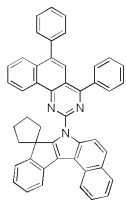


[화학식 159]

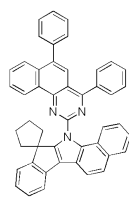


[화학식 160]

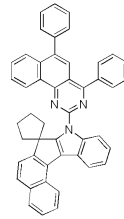
[0073]



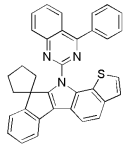
[화학식 161]



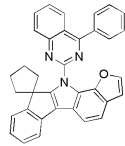
[화학식 162]



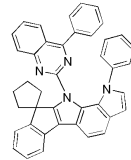
[화학식 163]



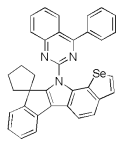
[화학식 164]



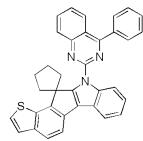
[화학식 165]



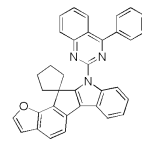
[화학식 166]



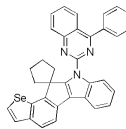
[화학식 167]



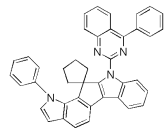
[화학식 168]



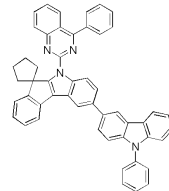
[화학식 169]



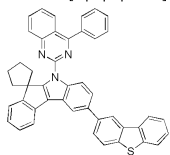
[화학식 170]



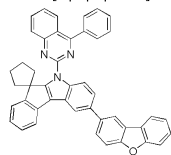
[화학식 171]



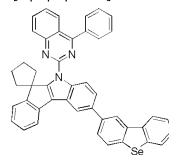
[화학식 172]



[화학식 173]

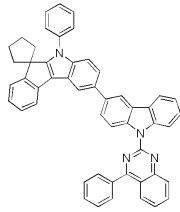


[화학식 174]

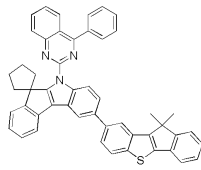


[화학식 175]

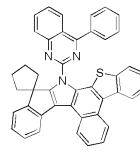
[0074]



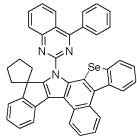
[화학식 176]



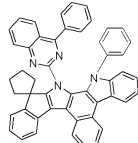
[화학식 177]



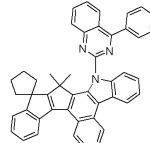
[화학식 178]



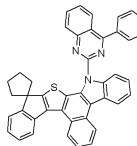
[화학식 179]



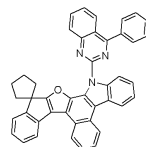
[화학식 180]



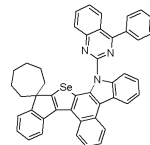
[화학식 181]



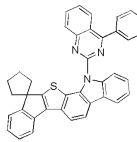
[화학식 182]



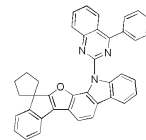
[화학식 183]



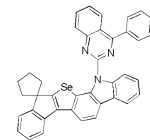
[화학식 184]



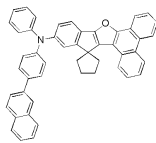
[화학식 185]



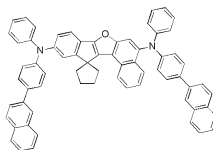
[화학식 186]



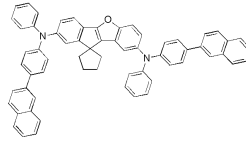
[화학식 187]



[화학식 188]

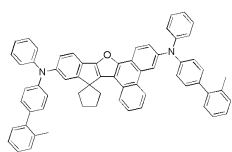


[화학식 189]

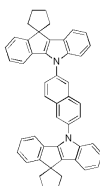


[화학식 190]

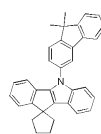
[0075]



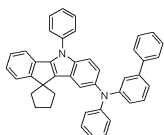
[화학식 191]



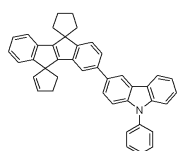
[화학식 192]



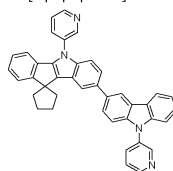
[화학식 193]



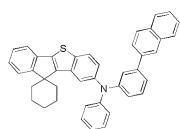
[화학식 194]



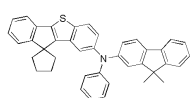
[화학식 195]



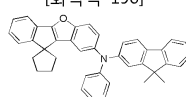
[화학식 196]



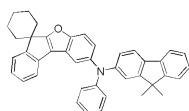
[화학식 197]



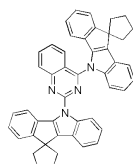
[화학식 198]



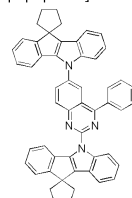
[화학식 199]



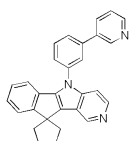
[화학식 200]



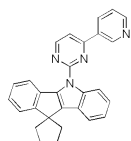
[화학식 201]



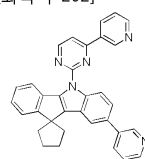
[화학식 202]



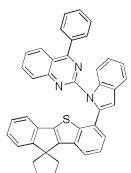
[화학식 203]



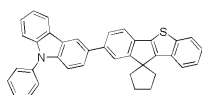
[화학식 204]



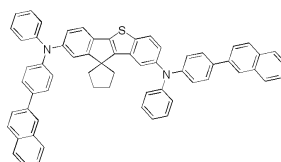
[화학식 205]



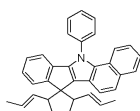
[화학식 206]



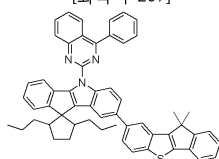
[화학식 207]



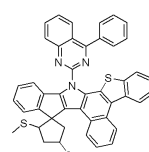
[화학식 208]



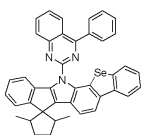
[화학식 209]



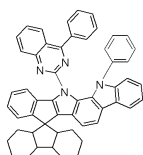
[화학식 210]



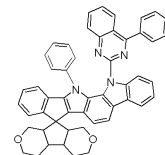
[화학식 211]



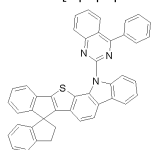
[화학식 212]



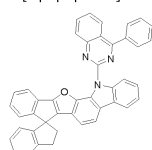
[화학식 213]



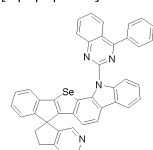
[화학식 214]



[화학식 215]



[화학식 216]



[화학식 217]

[0076]

[0077]

- [0078] 상기와 같이 본 발명에 따른 유기발광 화합물은 [화학식 1]에 표시된 코어구조에 다양한 치환기를 도입함으로써, 코어 구조가 갖는 고유 특성뿐만 아니라, 도입된 치환기의 고유 특성을 갖는 유기발광 화합물을 구현할 수 있다. 예컨대, 유기전계발광소자의 정공 주입층 물질, 정공 수송층 물질, 발광층 물질 및 전자 수송층 물질에 사용되는 치환기를 코어 구조에 도입함으로써 각 유기물층에서 요구하는 조건들을 충족시키는 물질을 구현할 수 있다.
- [0079] 또한, 본 발명의 다른 일 측면은 제1 전극, 제2 전극 및 상기 제1 전극 및 제2 전극 사이에 개재되는 1층 이상의 유기층으로 이루어진 유기전계발광소자에 관한 것으로서, 상기 유기층에 상기 [화학식 1]로 표시되는 본 발명에 따른 유기발광 화합물을 최소한 1 개 이상 포함할 수 있다.
- [0080] 즉, 본 발명의 일 실시예에 따른 유기전계발광소자는 제1 전극과 제2 전극 및 이 사이에 배치된 유기물층을 포함하는 구조로 이루어질 수 있으며, 본 발명에 따른 [화학식 1]의 유기발광 화합물을 소자의 유기물층에 사용한 것을 제외하고는 통상의 소자의 제조 방법 및 재료를 사용하여 제조될 수 있다.
- [0081] 본 발명에 따른 유기전계발광소자의 유기물층은 단층 구조로 이루어질 수도 있으나, 2층 이상의 유기물층이 적층된 다층 구조로 이루어질 수 있다. 예컨대, 정공 주입층, 정공 수송층, 발광층, 전자 수송층, 전자 주입층 등을 포함하는 구조를 가질 수 있다. 그러나, 이에 한정되지 않고 더 적은 수 또는 더 많은 수의 유기물층을 포함할 수도 있다.
- [0082] 따라서, 본 발명의 유기전계발광소자에서, 상기 유기물층은 정공 주입층, 정공 수송층 및 정공 주입과 정공 수송을 동시에 하는 층 중 1층 이상을 포함할 수 있고, 상기 층들 중 1층 이상이 상기 [화학식 1]로 표시되는 화합물을 포함할 수 있다.
- [0083] 또한, 본 발명의 유기전계발광소자에서, 상기 유기물층은 전자 주입층, 전자 수송층 및 전자 주입과 전자 수송을 동시에 하는 층 중 1층 이상을 포함할 수 있고, 상기 층들 중 1층 이상이 상기 [화학식 1]로 표시되는 화합물을 포함할 수 있다.
- [0084] 또한, 상기 유기물층은 발광층을 포함할 수 있고, 상기 발광층이 상기 [화학식 1]로 표시되는 화합물을 포함할 수 있다. 여기서, 상기 [화학식 1]로 표시되는 화합물은 발광층 내 호스트 물질로서 포함될 수 있다. 상기 [화학식 1]로 표시되는 화합물이 발광층 내 호스트 물질로서 포함되는 경우에, 상기 발광층은 1종 이상의 도판트 화합물을 더 포함할 수 있다. 이와 같이, 본 발명에서 상기 발광층에는 호스트와 더불어 도판트 재료가 사용될 수 있다. 상기 발광층이 호스트 및 도판트를 포함할 경우, 도판트의 함량은 통상적으로 호스트 약 100 중량부를 기준으로 하여 약 0.01 내지 약 20 중량부의 범위에서 선택될 수 있다.
- [0085] 또한, 이와 같은 다층 구조의 유기물층에서 상기 [화학식 1]로 표시되는 화합물은 발광층, 정공 주입/정공 수송과 발광을 동시에 하는 층, 정공 수송과 발광을 동시에 하는 층 또는 전자 수송과 발광을 동시에 하는 층 등에 포함될 수 있다.
- [0086] 이하, 본 발명에 따른 유기전계발광소자의 일 실시예를 하기 도 1을 통해 보다 상세히 설명하고자 한다.
- [0087] 도 1은 본 발명의 유기전계발광소자의 구조를 나타내는 단면도로서, 본 발명에 따른 유기전계발광소자는 애노드(20), 정공수송층(40), 유기발광층(50), 전자수송층(60) 및 캐소드(80)을 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 있으며, 소자의 특성에 따라 다양한 기능을 갖는 유기층을 더 포함할 수 있다.
- [0088] 도 1을 참조하여 본 발명의 유기전계발광소자 및 그 제조방법에 대하여 살펴보면 다음과 같다.
- [0089] 먼저 기판(10) 상부에 애노드 전극용 물질을 코팅하여 애노드(20)를 형성한다. 여기에서 기판(10)으로는 통상적인 유기전계발광소자에서 사용되는 기판을 사용하는데 투명성, 표면 평활성, 취급 용이성 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.

[0090] 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.

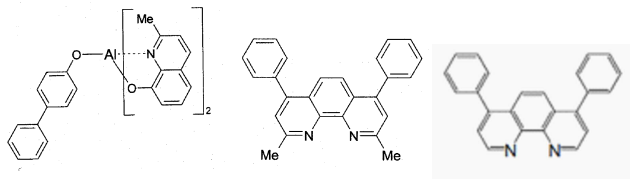
[0091] 상기 정공주입층 재료는 본 발명에 따른 유기발광 화합물 외에, 당업계에서 통상적으로 사용되는 것이라면, 특별히 제한되지 않고 사용할 수 있으며, 구체적인 예시로서, 2-TNATA[4,4',4"-tris(2-naphthylphenyl-phenylamino)-triphenylamine], NPD[N,N'-di(1-naphthyl)-N,N'-diphenylbenzidine], TPD[N,N'-diphenyl-N,N'-bis(3-methylphenyl)-1,1'-biphenyl-4,4'-diamine], DNTPD[N,N'-diphenyl-N,N'-bis-[4-(phenyl-m-tolyl-amino)-phenyl]-biphenyl-4,4'-diamine] 등을 사용할 수 있다.

[0092] 또한, 상기 정공수송층 재료 역시 본 발명에 따른 유기발광 화합물 외에, 당업계에 통상적으로 사용되는 것이라면, 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'-디페닐벤지딘(α -NPD) 등을 사용할 수 있다.

[0093] 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 화합물 보다 높은 이온화 포텐셜을 가져야 하며 대표적으로 BA1q, BCP, TPBI 등이 사용될 수 있다.

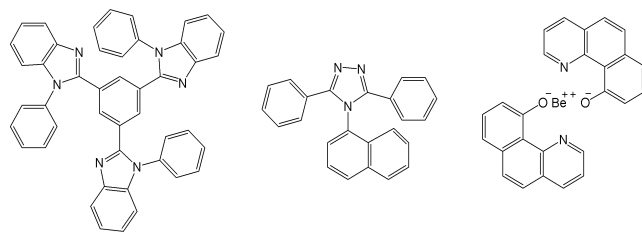
[0094] 상기 정공저지층에 사용되는 물질로서, BA1q, BCP, Bphen, TPBI, NTAZ, BeBq₂, OXD-7, Liq 및 [화학식 501] 내지 [화학식 507] 중에서 선택되는 어느 하나가 사용될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0095] BA1q BCP Bphen



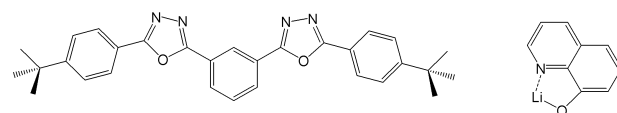
[0096]

[0097] TPBI NTAZ BeBq₂



[0098]

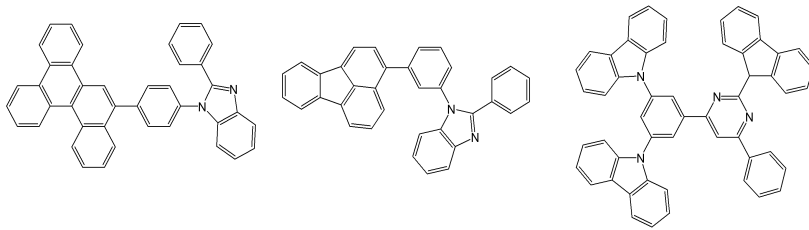
[0099] OXD-7 Liq



[0100]

[0101]

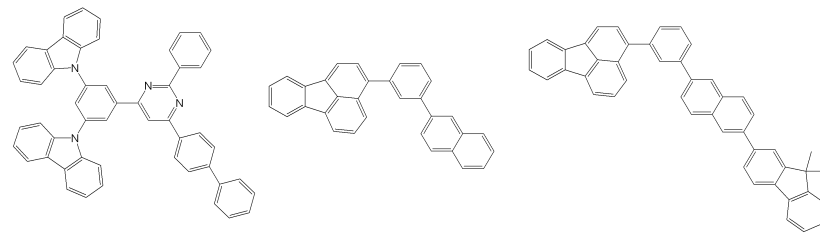
[화학식 501] [화학식 502] [화학식 503]



[0102]

[0103]

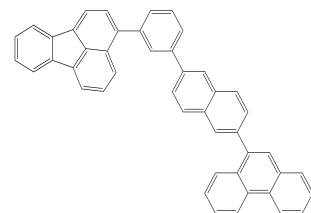
[화학식 504] [화학식 505] [화학식 506]



[0104]

[0105]

[화학식 507]



[0106]

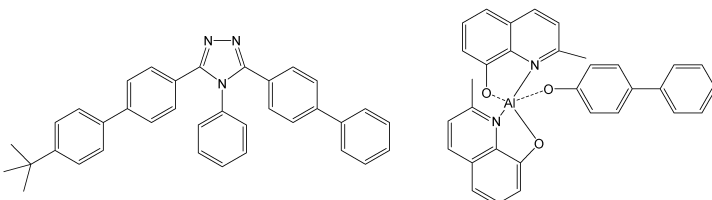
[0107]

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.

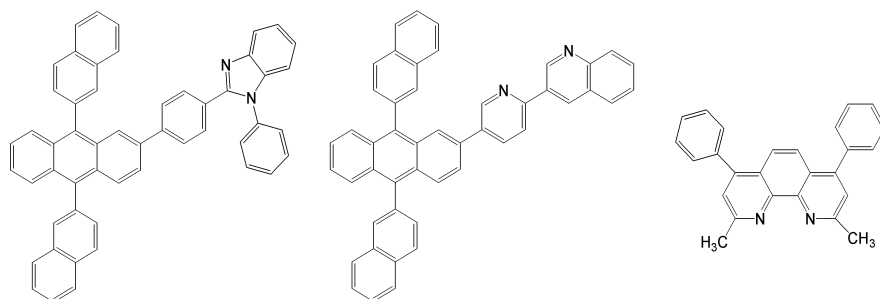
[0108]

상기 전자 수송층 재료로는 전자주입전극(Cathode)로부터 주입된 전자를 안정하게 수송하는 기능을 하는 것으로서, 본 발명에 따른 유기발광 화합물 외에, 공지의 전자 수송 물질을 이용할 수 있다. 공지의 전자 수송 물질의 예로는, 퀴놀린 유도체, 특히 트리스(8-퀴놀리노레이트)알루미늄(Alq3), TAZ, Balq, 베릴륨 비스(벤조퀴놀리-10-노에이트)(beryllium bis(benzoquinolin-10-olate: Bebq2), ADN, [화학식 401], [화학식 402], 옥사디아졸 유도체인 PBD, BMD, BND 등과 같은 재료를 사용할 수도 있다.

[0109]

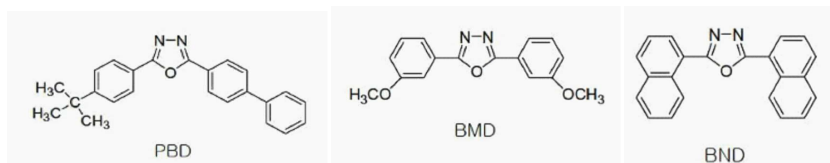


[0110] TAZ BAlq



[0111]

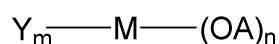
[0112] [화합물 401] [화합물 402] BCP



[0113]

[0114] 또한, 본 발명에서 사용되는 전자 수송층은 하기 [화학식 C]로 표시되는 유기 금속 화합물이 단독 또는 상기 전자수송층 재료와 혼합으로 사용될 수 있다.

[0115] [화학식 C]



[0116]

[0117] 상기 [화학식 C]에서,

[0118] Y는 C, N, O 및 S에서 선택되는 어느 하나가 상기 M에 직접 결합되어 단일결합을 이루는 부분과, C, N, O 및 S에서 선택되는 어느 하나가 상기 M에 배위결합을 이루는 부분을 포함하며, 상기 단일결합과 배위결합에 의해 킬레이트된 리간드이다. M은 알칼리 금속, 알칼리 토금속, 알루미늄(Al) 또는 붕소(B)원자이다.

[0119] OA는 상기 M과 단일결합 또는 배위결합 가능한 1가의 리간드로서, 상기 O는 산소이며, 상기 A는 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 50의 아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 30의 알케닐기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 20의 알킬닐기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 30의 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 30의 시클로알케닐기 및 치환 또는 비치환되고 이종 원자로 O, N 또는 S를 갖는 탄소수 2 내지 50의 헤테로아릴기 중에서 선택되는 어느 하나이다.

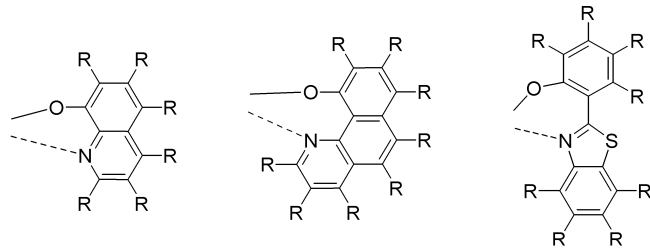
[0120] 또한, 상기 M이 알칼리 금속에서 선택되는 하나의 금속인 경우에는 m=1, n=0이고, 상기 M이 알칼리 토금속에서 선택되는 하나의 금속인 경우에는 m=1, n=1이거나, 또는 m=2, n=0이고, 상기 M이 붕소 또는 알루미늄인 경우에는 m=1 내지 3중 어느 하나이며, n은 0 내지 2 중 어느 하나로서 m+n=3을 만족한다.

[0121] 상기 '치환 또는 비치환된'에서의 '치환'은 중수소, 시아노기, 할로젠기, 히드록시기, 니트로기, 알킬기, 알콕시기, 알킬아미노기, 아릴아미노기, 헤테로 아릴아미노기, 알킬실릴기, 아릴실릴기, 아릴옥시기, 아릴기, 헤테로아릴기, 게르마늄, 인 및 보론으로 이루어진 군에서 선택된 1개 이상의 치환기로 치환되는 것을 의미한다.

[0122] 또한, 상기 Y는 각각 동일하거나 상이하며, 서로 독립적으로 하기 [구조식 C1] 내지 [구조식 C39]부터 선택되는 어느 하나일 수 있으나 이에 한정되는 것은 아니다.

[0123]

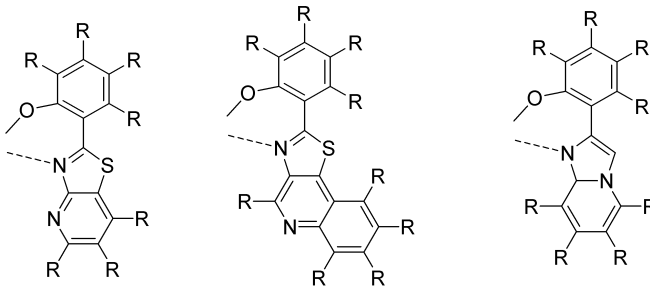
[구조식 C1] [구조식 C2] [구조식 C3]



[0124]

[0125]

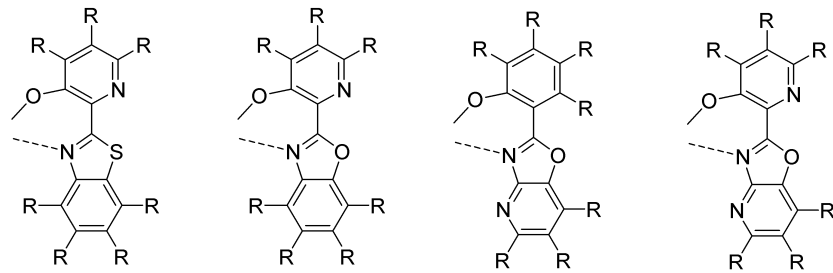
[구조식 C4] [구조식 C5] [구조식 C6]



[0126]

[0127]

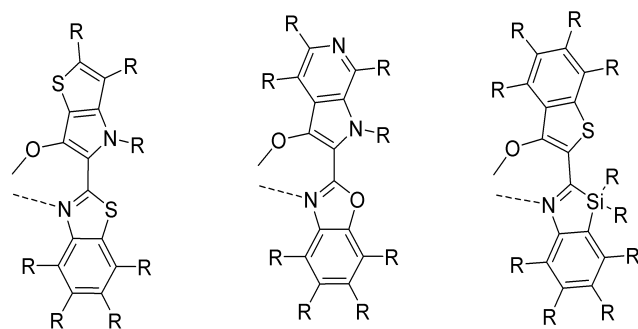
[구조식 C7] [구조식 C8] [구조식 C9] [구조식 C10]



[0128]

[0129]

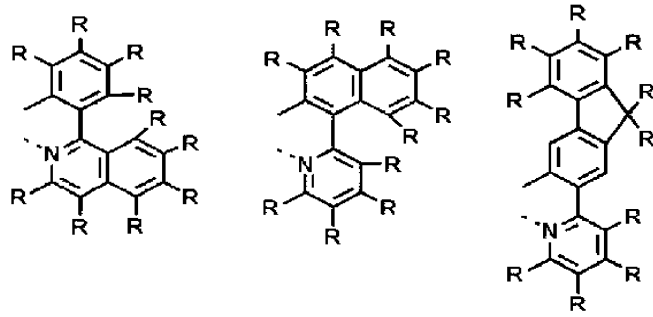
[구조식 C11] [구조식 C12] [구조식 C13]



[0130]

[0131]

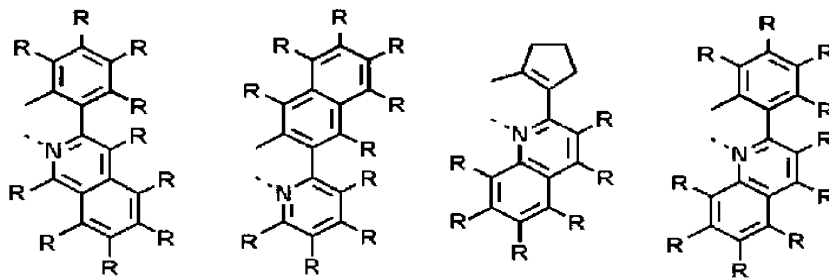
[구조식 C14] [구조식 C15] [구조식 C16]



[0132]

[0133]

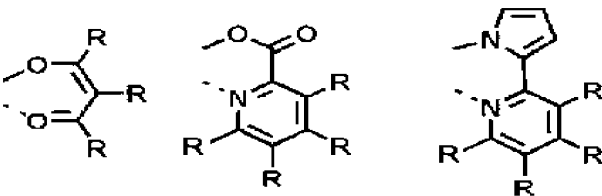
[구조식 C17] [구조식 C18] [구조식 C19] [구조식 C20]



[0134]

[0135]

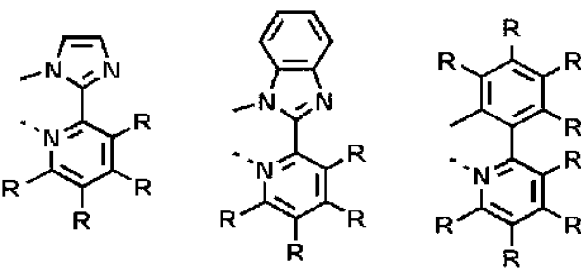
[구조식 C21] [구조식 C22] [구조식 C23]



[0136]

[0137]

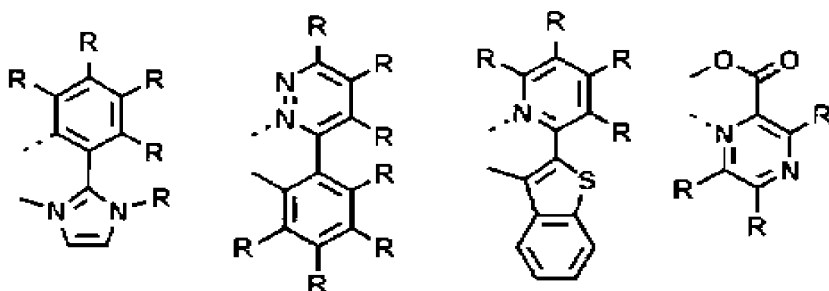
[구조식 C24] [구조식 C25] [구조식 C26]



[0138]

[0139]

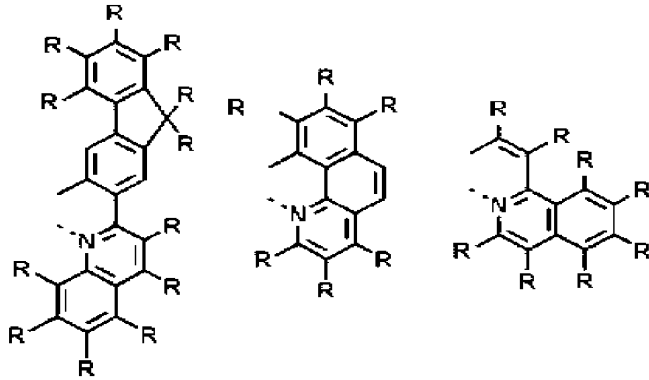
[구조식 C27] [구조식 C28] [구조식 C29] [구조식 C30]



[0140]

[0141]

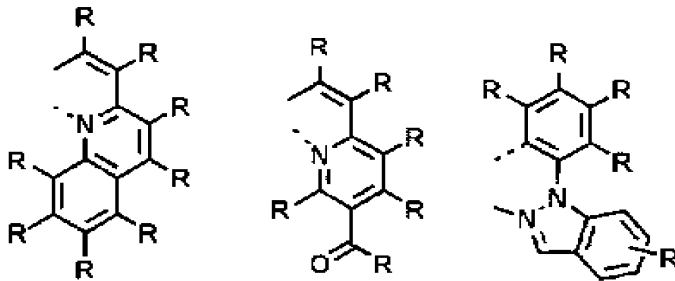
[구조식 C31] [구조식 C32] [구조식 C33]



[0142]

[0143]

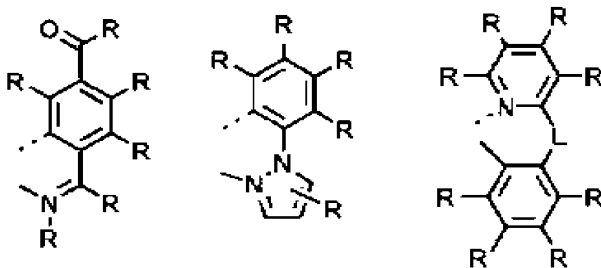
[구조식 C34] [구조식 C35] [구조식 C36]



[0144]

[0145]

[구조식 C37] [구조식 C38] [구조식 C39]



[0146]

[0147]

상기 [구조식 C1] 내지 [구조식 C39]에서,

[0148]

R은 서로 동일하거나 상이하며, 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 시아노기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 30의 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 선택되고, 인접한 치환체와 알킬렌 또는 알케닐렌으로 연결되어 스피로고리 또는 융합고리를 형성할 수 있다.

[0149]

L은 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알콕시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 30의 헤테로아릴기 및 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 30의 시클로알킬기 중에서 선택되고, 상기 L은 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 치환되며, 인접한 치환체와 알킬렌 또는 알케닐렌으로 연결되어 스피로고리 또는 융합고리를 형성할 수 있다.

[0150] 또한, 본 발명에 따른 유기전계발광소자는 상기 유기층이 발광층을 포함하며, 상기 발광층은 1종 이상의 도판트 화합물을 더 포함할 수 있으며, 본 발명의 유기전계발광소자에 적용되는 발광 도판트 화합물은 특별히 제한되지는 않으나, 하기 [일반식 A-1] 내지 [일반식 J-1]으로 표시되는 화합물 중에서 선택되는 1종 이상의 화합물일 수 있다.

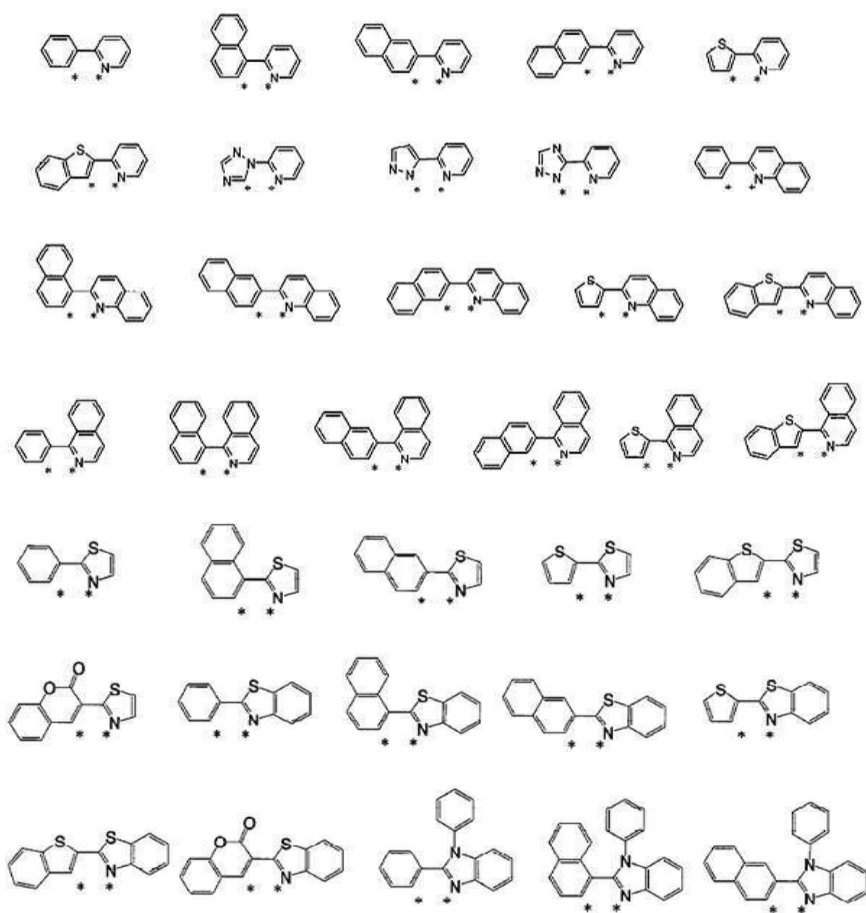
[0151] [일반식 A-1]



[0152]

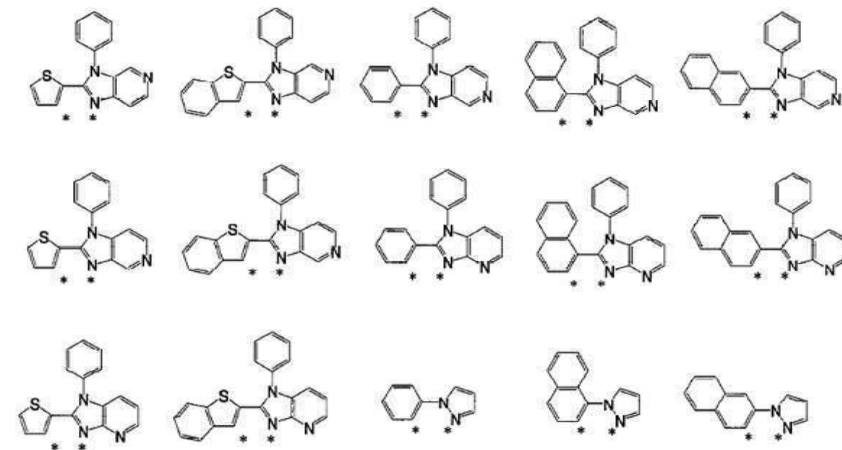
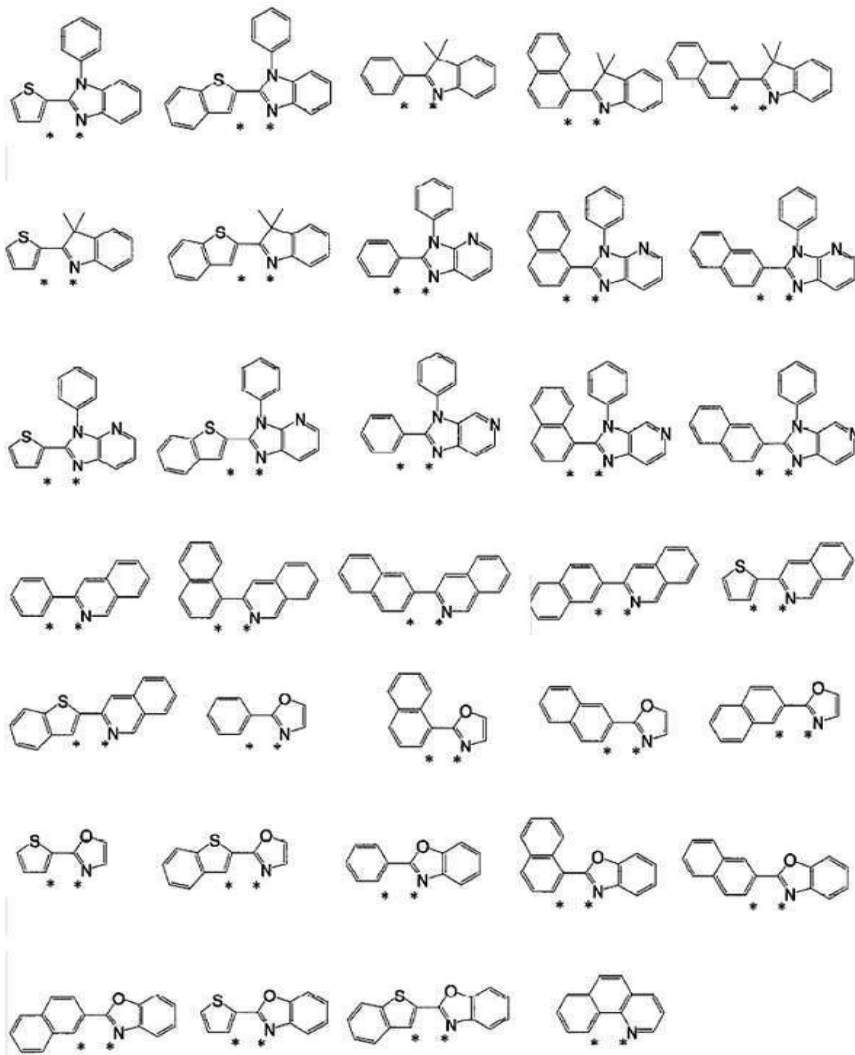
[0153] 상기 M은 7족, 8족, 9족, 10족, 11족, 13족, 14족, 15족 및 16족의 금속으로 이루어진 군으로부터 선택되고, 바람직하게는 Ir, Pt, Pd, Rh, Re, Os, Tl, Pb, Bi, In, Sn, Sb, Te, Au 및 Ag로부터 선택된다. 또한, 상기 L₁, L₂ 및 L₃은 리간드로 서로 동일하거나 상이하고 각각 독립적으로 하기 [구조식 D]에서 선택되는 어느 하나를 들 수 있지만, 이에 한정되는 것은 아니다. 또한, 하기 [구조식 D]내 *은 금속 이온 M에 결합하는 사이트(site)를 표현한다.

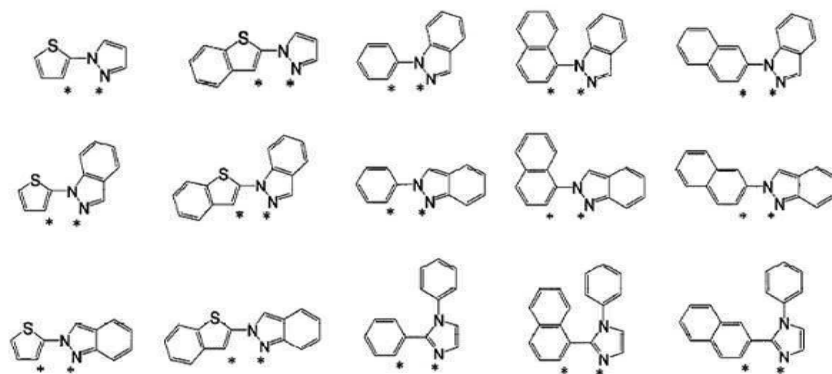
[0154] [구조식 D]



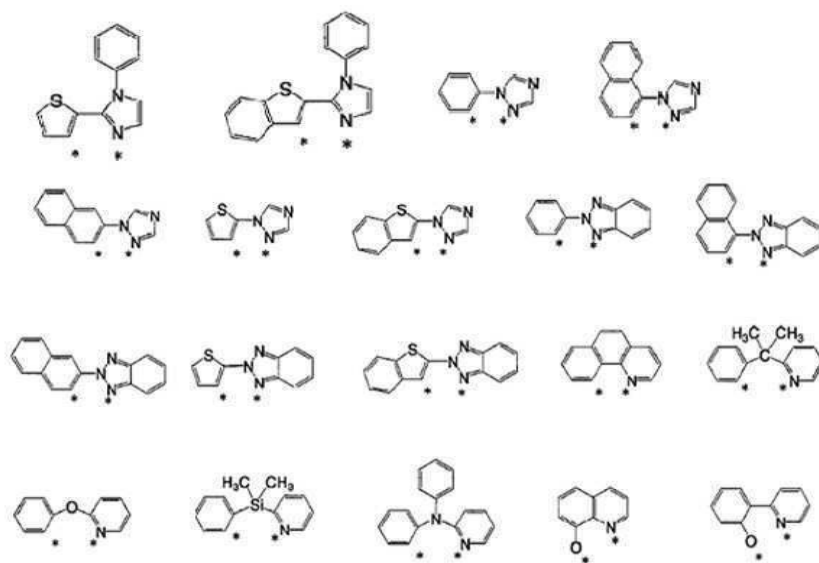
[0155]

[0156]

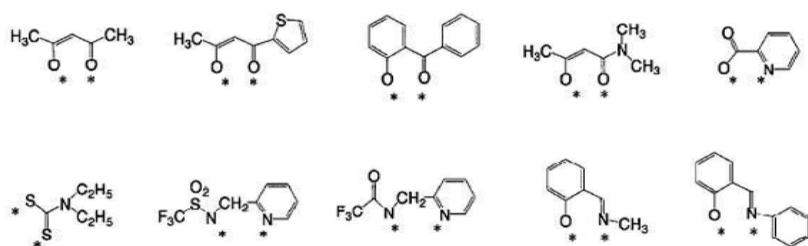




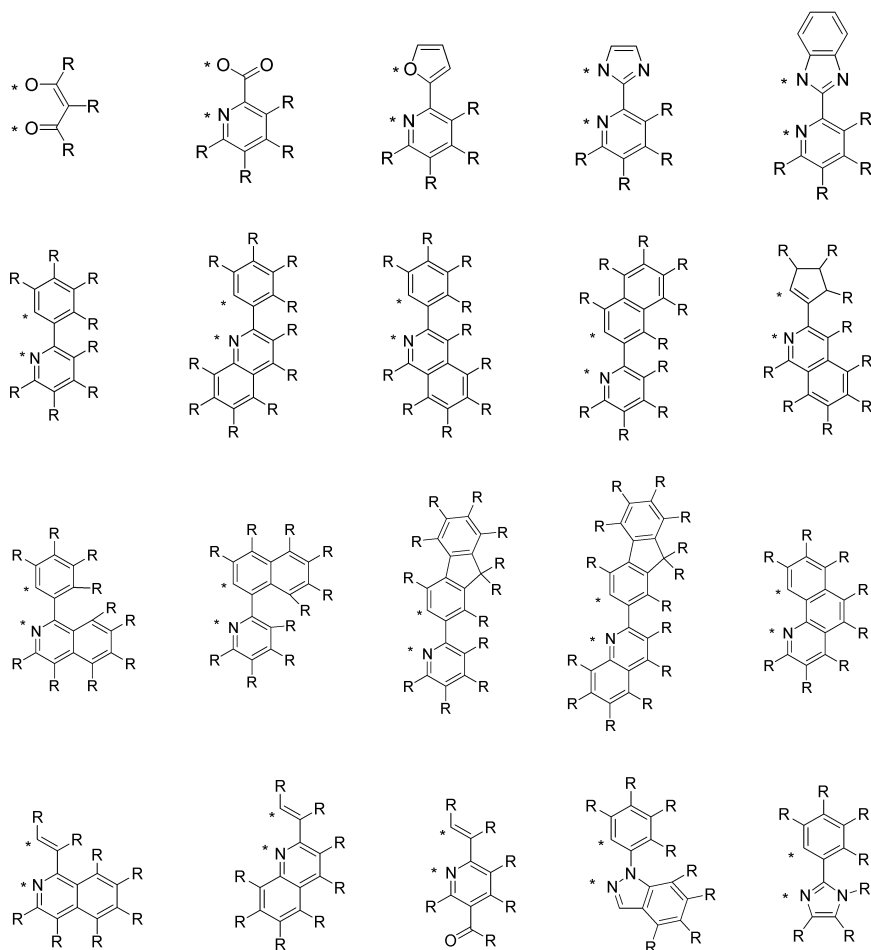
[0160]



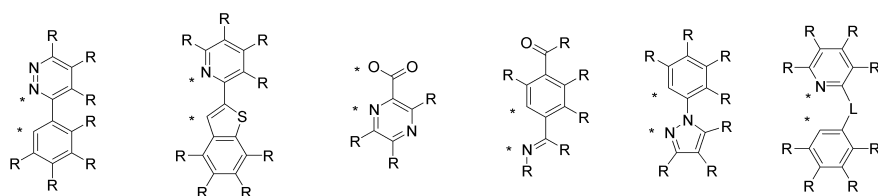
[0161]



[0162]



[0163]



[0164]

[0165]

상기 [구조식 D]에서,

[0166]

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.

[0167]

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.

[0168]

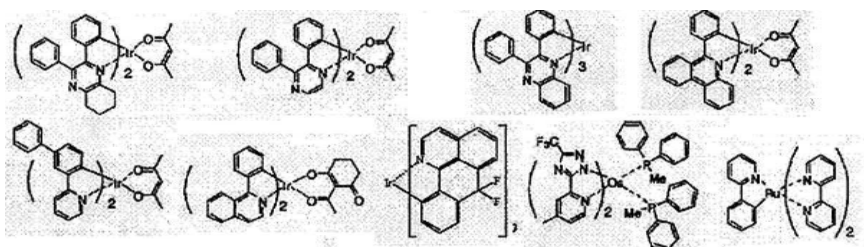
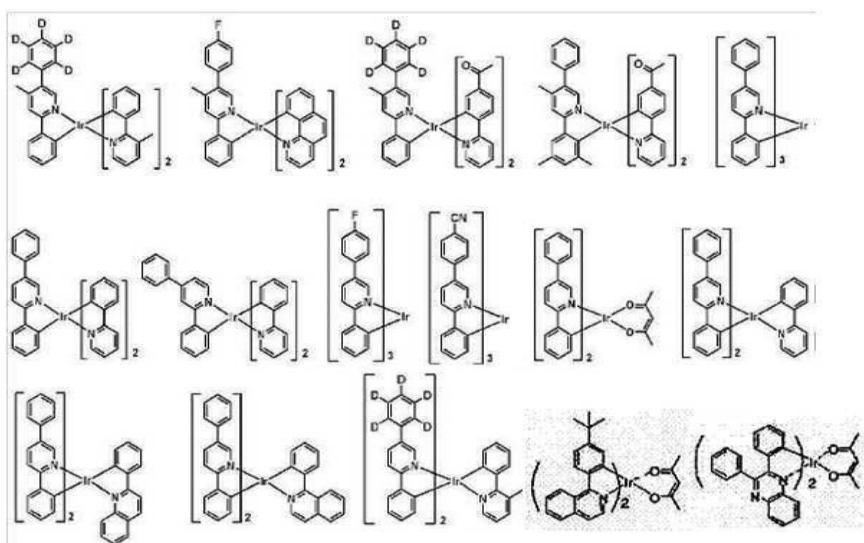
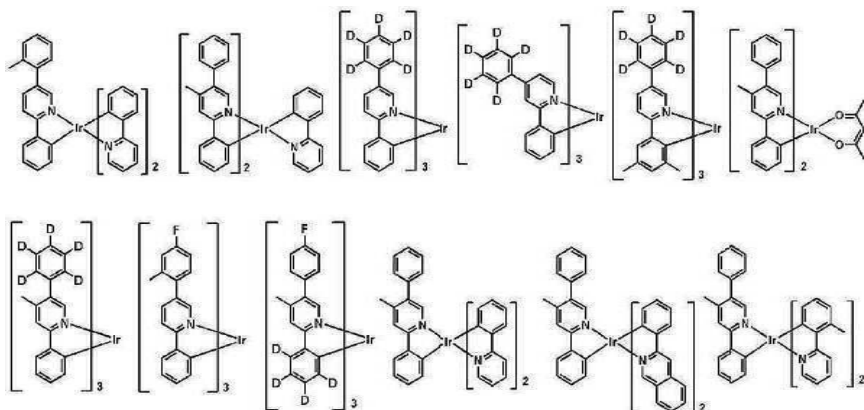
또한, 상기 R은 각각의 인접한 치환기와 알킬렌 또는 알케닐렌으로 연결되어 지환족 고리 및 단일환 또는 다환의 방향족 고리를 형성할 수 있다.

[0169]

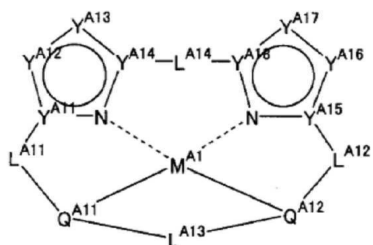
상기 L은 인접한 치환체와 알킬렌 또는 알케닐렌으로 연결되어 스피로 고리 또는 융합 고리를 형성할 수 있다.

[0170]

일 예로서, 상기 [일반식 A-1]으로 표시되는 도편트는 하기 화합물 중에서 선택된 어느 하나일 수 있으나 이에



[일반식 B-1]

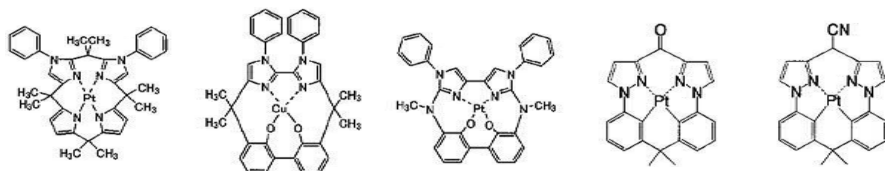
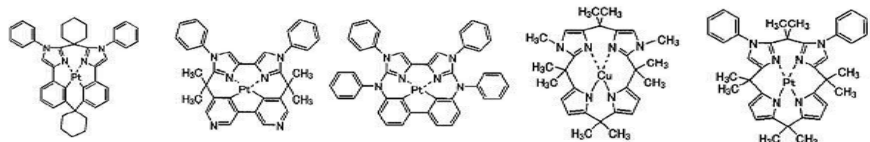
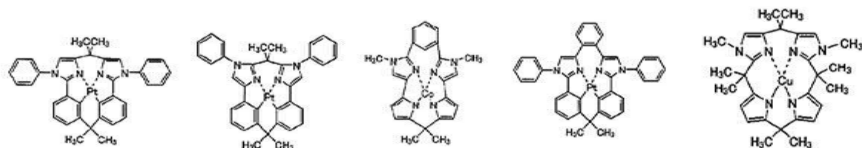


상기 [일반식 B-1]에서,

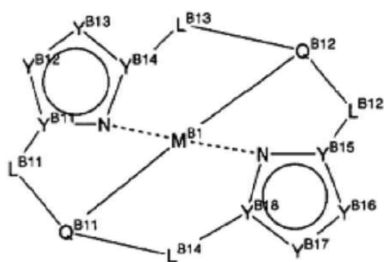
M^{A1} 은 [일반식 A-1]에서 정의한 바와 동일한 금속 이온을 나타내며, 또한, Y^{A11} , Y^{A14} , Y^{A15} 및 Y^{A18} 은 각각 독립적으로 탄소 원자 또는 질소 원자를 나타내며, Y^{A12} , Y^{A13} , Y^{A16} 및 Y^{A17} 은 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 탄소

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.

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



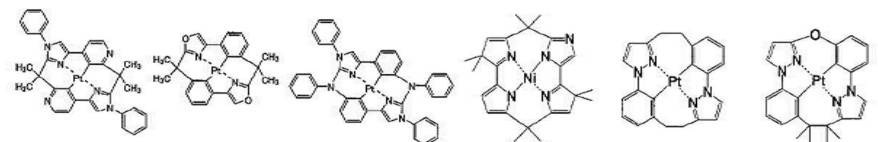
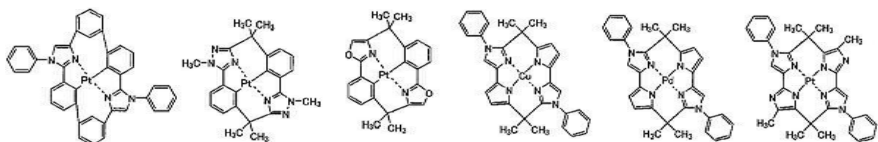
[일반식 C-1]



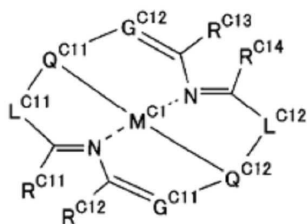
상기 [일반식 C-1]에서,

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.

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



[0192] [일반식 D-1]

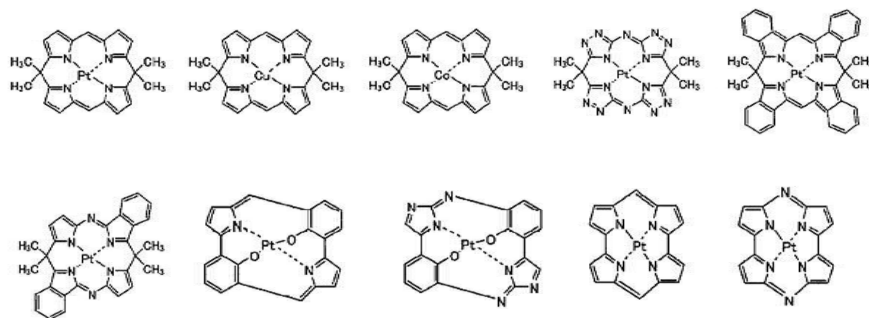


[0193]

[0194] 상기 [일반식 D-1]에서,

[0195] 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.

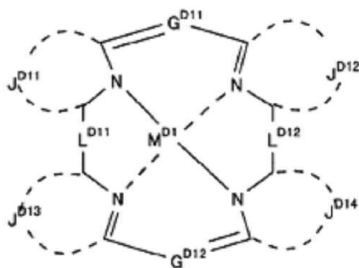
[0196] 상기 [일반식 D-1]으로 표시되는 화합물의 예시적인 구조는 아래와 같으나, 이에 한정되지 않는다.



[0197]

[0198]

[0199] [일반식 E-1]

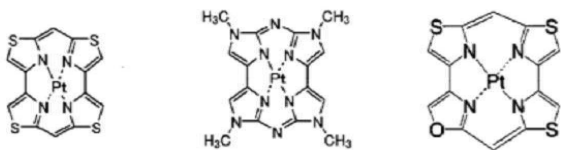


[0200]

[0201] 상기 [일반식 E-1]에서,

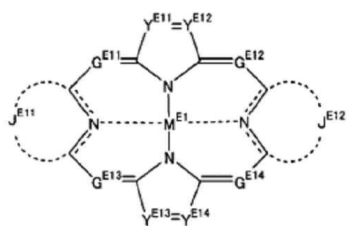
[0202] M^{D1} 은 [일반식 A-1]에서 정의한 바와 동일한 금속 이온을 나타내며, G^{D11} , G^{D12} 는 각각 독립적으로 질소 원자, 치환 또는 비치환된 탄소 원자를 나타내며, J^{D11} , J^{D12} , J^{D13} 및 J^{D14} 는 각각 독립에 5 원 고리를 형성하는데 필요한 원자군을 나타내며, L^{D11} , L^{D12} 는 연결기를 나타낸다.

[0203] 상기 [일반식 E-1]으로 표시되는 화합물의 예시적인 구조는 아래와 같으나, 이에 한정되지 않는다.



[0204]

[0205] [일반식 F-1]

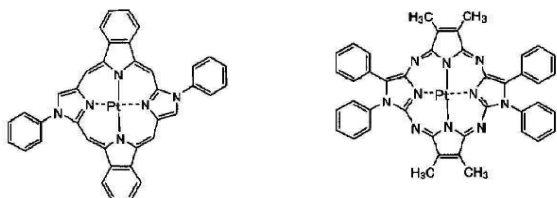


[0206]

[0207] 상기 [일반식 F-1]에서,

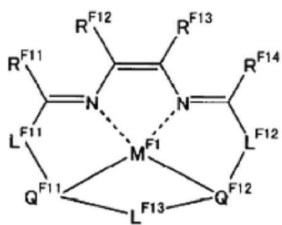
[0208] M^{E1} 은 [일반식 A-1]에서 정의한 바와 동일한 금속 이온을 나타내며, J^{E11} , J^{E12} 는 각각 독립적으로 5 원 고리를 형성하는데도 필요한 원자군을 나타내며, G^{E11} , G^{E12} , G^{E13} 및 G^{E14} 는 각각 독립적으로 질소 원자, 치환 또는 비치환된 탄소 원자를 나타내며, Y^{E11} , Y^{E12} , Y^{E13} 및 Y^{E14} 는 각각 독립적으로 질소 원자, 치환 또는 비치환된 탄소원자를 나타낸다.

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



[0210]

[0211] [일반식 G-1]



[0212]

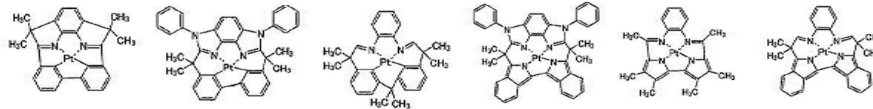
[0213] 상기 [일반식 G-1]에서,

[0214] M^{F1} 은 [일반식 A-1]에서 정의한 바와 동일한 금속 이온을 나타낸다.

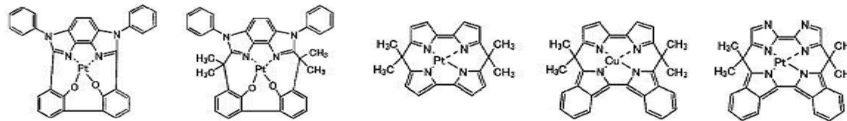
[0215] L^{F11} , L^{F12} 및 L^{F13} 은 연결기를 나타내며, R^{F11} , R^{F12} , R^{F13} 및 R^{F14} 는 치환기를 나타내고, R^{F11} 과 R^{F12} , R^{F12} 와 R^{F13} , R^{F13} 과 R^{F14}

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^F 에 결합하는 원자를 함유하는 부분 구조를 나타낸다.

[0216] 상기 [일반식 G-1]으로 표시되는 화합물의 예시적인 구조는 아래와 같으나, 이에 한정되지 않는다.

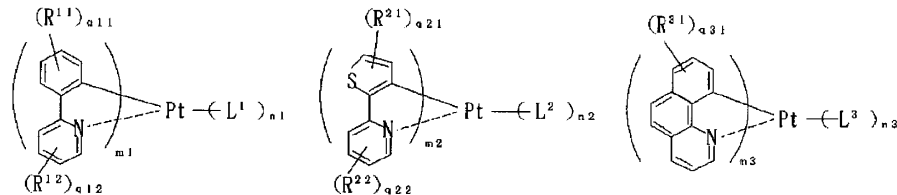


[0217]



[0218]

[0219] [일반식 H-1] [일반식 H-2] [일반식 H-3]



[0220]

[0221] 상기 [일반식 H-1] 내지 [일반식 H-3]에서,

[0222] 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.

[0223] 또한, q_{11} , q_{12} 가 2 내지 4인 경우, 복수 개의 R^{11} 및 R^{12} 는 각각 동일하거나 상이할 수 있다.

[0224] L^1 은 백금에 결합하는 리간드로서, 오르토 메탈(ortho metal)화 백금 착체를 형성할 수 있는 리간드, 함질소헤테로환 리간드, 디케톤 리간드, 할로젠 리간드가 바람직하고, 보다 바람직하게는 오르토 메탈(ortho metal)화 백금 착체를 형성하는 리간드, 비피리딜 리간드 또는 페난트로린 리간드이다.

[0225] n^1 은 0 내지 3의 정수이며, 바람직하게는 0이고, m^1 은 1 또는 2이고 바람직하게는 2이다.

[0226] 또한, 상기 n^1 , m^1 은 상기 일반식 H-1로 나타나는 금속 착체가 중성 착체가 되도록 하는 것이 바람직하다.

[0227] 상기 [일반식 H-2]에서,

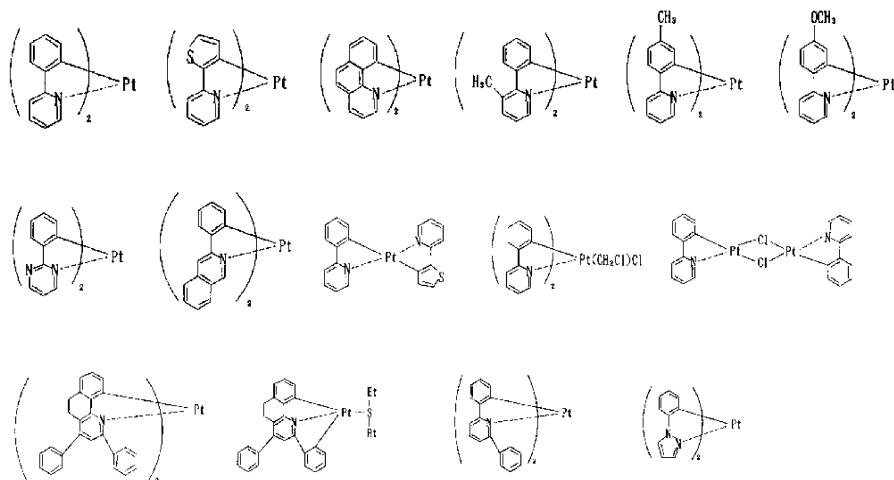
[0228] R^{21} , R^{22} , n^2 , m^2 , q^{21} , L^2 는 각각 상기 R^{11} , R^{12} , n^1 , m^1 , q^{12} , L^1 과 동일하고, q^{21} 은 0 내지 2의 정수이며, 0이 바람직하다.

[0229] 상기 [일반식 H-3]에서,

[0230] 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.

[0231]

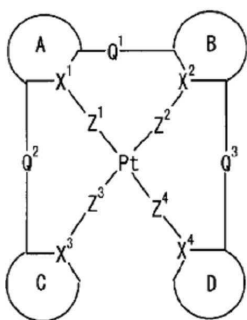
상기 [일반식 H-1] 내지 [일반식H-3]의 구체적인 화합물의 예는 다음과 같으나, 이에 한정되는 것은 아니다.



[0232]

[0233]

[일반식 I-1]



[0234]

[0235]

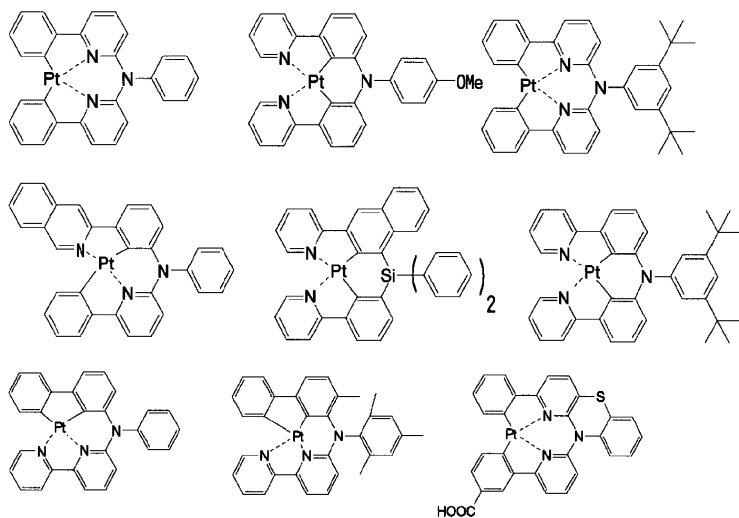
상기 [일반식 I-1]에서,

[0236]

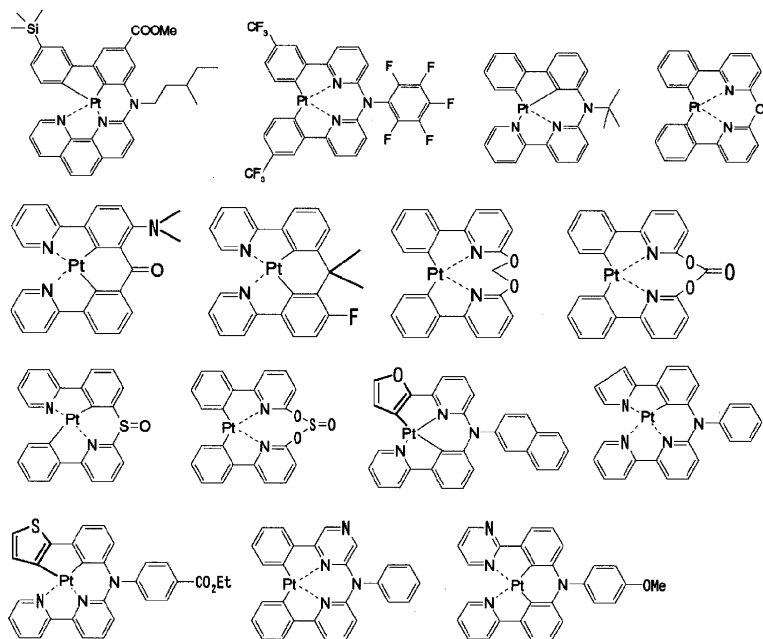
고리A, 고리B, 고리C 및 고리D는 상기 고리 A내지 D중의 어느 2개의 고리는 치환기를 가질 수 있는 질소 함유 헤테로고리를 나타내고, 나머지 2개의 환은 고리는 치환기를 가질 수 있는 아릴고리 또는 헤테로아릴고리를 나타내고, 나타내며, 고리A와 고리B, 고리A와 고리C 및/또는 고리B와 고리D로 축합환을 형성할 수 있다. X^1 , X^2 , X^3 및 X^4 는 이 중의 어느 2개가 백금원자에 배위결합하는 질소원자를 나타내고, 나머지 2개는 탄소원자 또는 질소원자를 나타낸다. Q^1 , Q^2 및 Q^3 은 각각 독립적으로 2가의 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.

[0237]

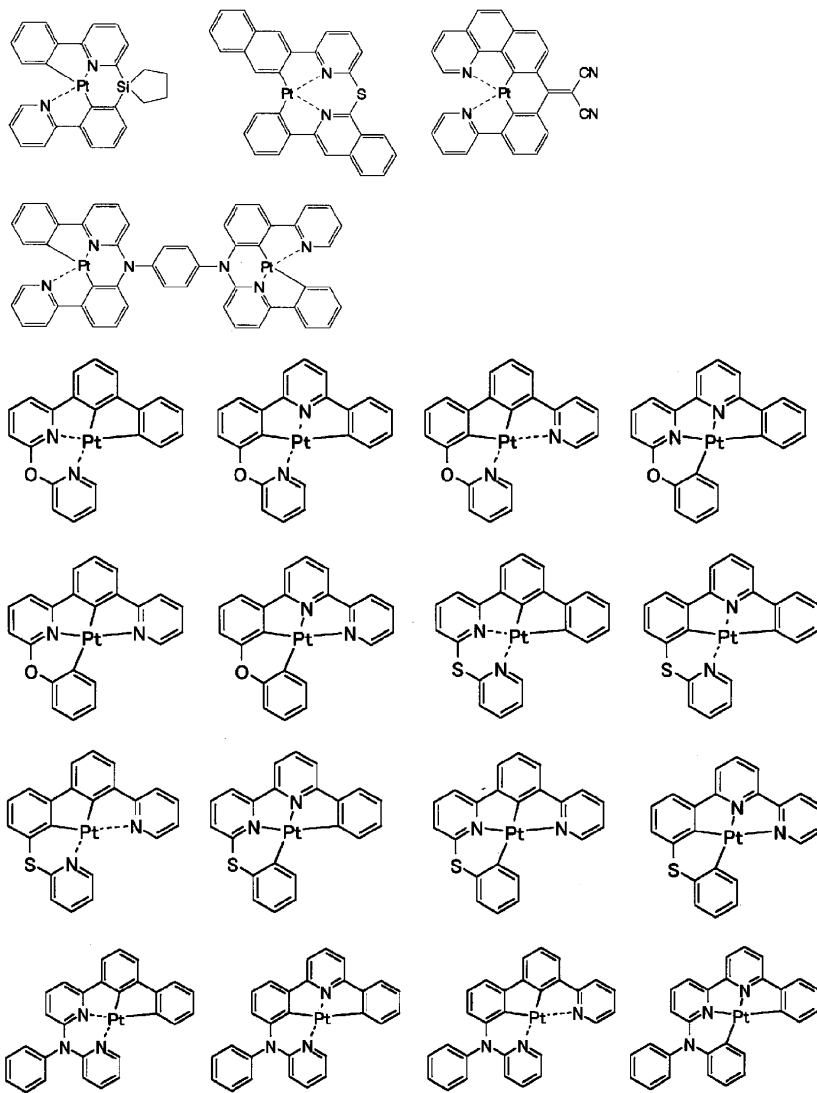
상기 [일반식 I-1]의 구체적인 화합물의 예는 다음과 같으나, 이에 한정되는 것은 아니다.



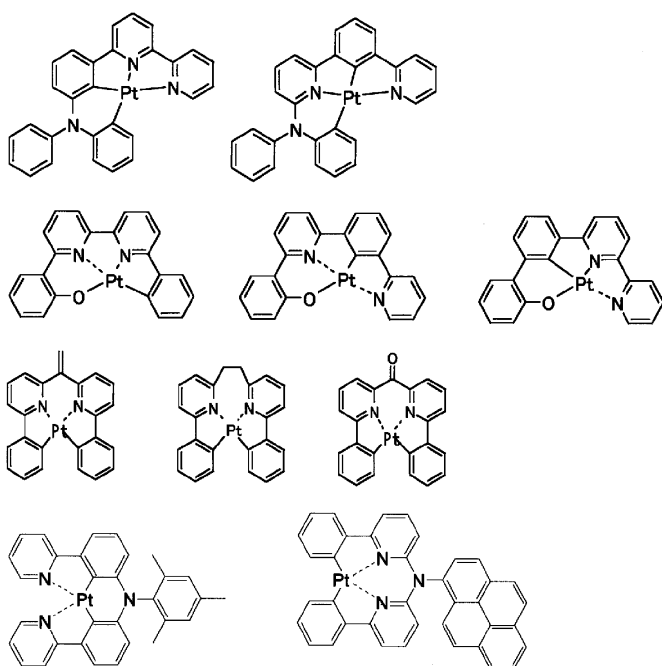
[0238]



[0239]



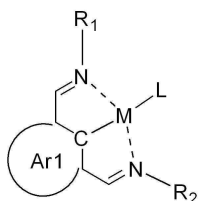
[0240]



[0241]

[0242]

[일반식 J-1]



[0243]

[0244]

상기 [일반식 J-1]에 있어서,

[0245]

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.

[0246]

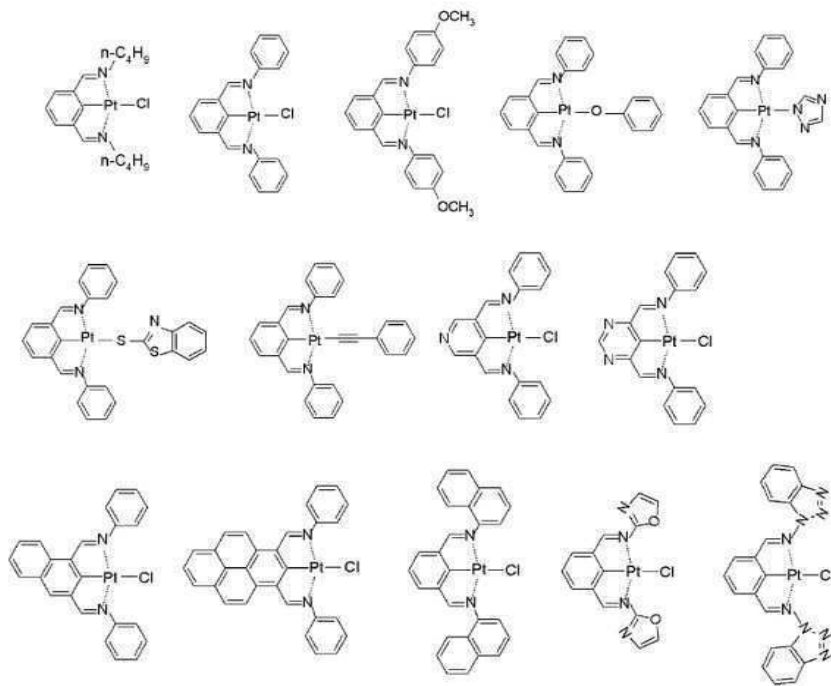
또한, Ar1에 있어서 C는 Ar1으로 표시되는 고리구조를 구성하는 탄소원자를 나타낸다. 또한 상기 R1 및 R2는, 서로 동일하거나 상이할 수 있고, 각각 치환 또는 비치환의 알킬기 또는 아릴기를 나타내며, L은 1좌 배위자를 표현한다.

[0247]

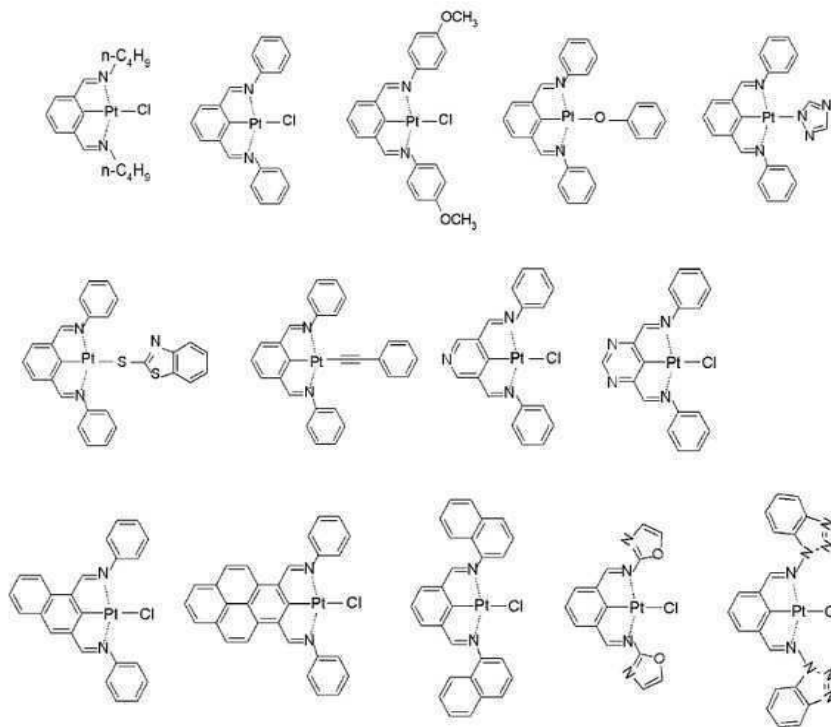
상기 [일반식 J-1]에 있어서, 상기 M은 Pt인 것이 바람직하다. 또한, 상기 Ar1으로서는, 5원환, 6원환 및 이들의 축합환기부터 선택되는 것이 바람직하다.

[0248]

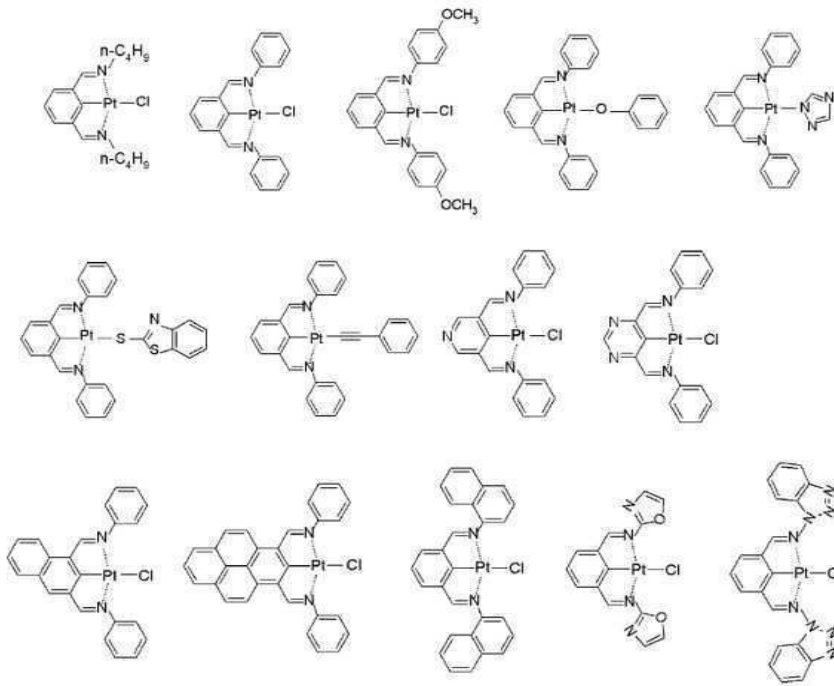
상기 [일반식 J-1]의 구체적인 화합물의 예는 다음과 같으나, 이에 한정되는 것은 아니다.



[0249]



[0250]



[0251]

[0252]

또한, 상기 발광층은 상기 도판트와 호스트 이외에도 다양한 호스트와 다양한 도판트 물질을 추가로 포함할 수 있다.

[0253]

또한, 상기 정공주입층, 정공수송층, 전자저지층, 발광층, 정공저지층, 전자수송층 및 전자주입층으로부터 선택된 하나 이상의 층은 단분자 증착방식 또는 용액공정에 의하여 형성될 수 있으며, 여기서 상기 증착 방식은 상기 각각의 층을 형성하기 위한 재료로 사용되는 물질을 진공 또는 저압상태에서 가열 등을 통해 증발시켜 박막을 형성하는 방법을 의미하고, 상기 용액공정은 상기 각각의 층을 형성하기 위한 재료로 사용되는 물질을 용매와 혼합하고 이를 잉크젯 인쇄, 롤투롤 코팅, 스크린 인쇄, 스프레이 코팅, 딥 코팅, 스핀 코팅 등과 같은 방법을 통하여 박막을 형성하는 방법을 의미한다.

[0254]

또한, 본 발명에 따른 유기전계발광소자는 평판 디스플레이 장치, 플렉시블 디스플레이 장치, 단색 또는 백색의 평판 조명용 장치 및 단색 또는 백색의 플렉시블 조명용 장치에서 선택되는 장치에 사용될 수 있다.

[0255]

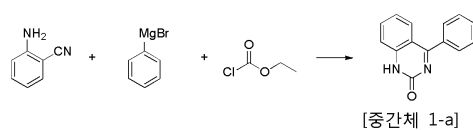
이하, 바람직한 실시예를 들어 본 발명을 더욱 상세하게 설명한다. 그러나, 이들 실시예는 본 발명을 보다 구체적으로 설명하기 위한 것으로, 본 발명의 범위가 이에 의하여 제한되지 않는다는 것은 당업계의 통상의 지식을 가진 자에게 자명할 것이다.

[0256]

[합성예 1] 화학식 2의 합성

[0257]

[반응식 1-1] [중간체 1-a]의 합성



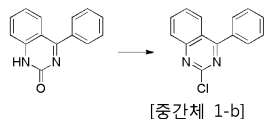
[0258]

[0259]

2 L 반응기에 2-아미노벤조니트릴 45.0 g(232 mmol), 테트라하이드로퓨란 450 mL를 넣고 교반하였다. 0 ℃로 냉각한 후, 3M-페닐마그네슘브로마이드 88.2 mL(487 mmol)를 적가한 다음, 3시간 동안 환류시켰다. 0 ℃로 냉각한 후, 에틸클로로포메이트 44.3 g(732 mmol)을 테트라하이드로퓨란 200 mL에 녹여 적가한 다음 2시간 동안 환류시켰다. 0 ℃로 냉각한 후 포화 염화암모늄 수용액을 넣은 다음, 에틸아세테이트와 물을 사용하여 유기층을 추출

하였다. 유기층을 감압농축한 후 컬럼크로마토그래피로 분리하여 [중간체 1-a]로 표시되는 화합물 46.0 g (수율 80.0 %)을 얻었다.

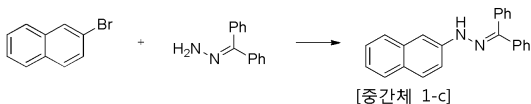
[0260] [반응식 1-2] [중간체 1-b]의 합성



[0261]

[0262] 2 L 반응기에 상기 [반응식 1-1]에서 얻은 [중간체 1-a] 40 g(134 mmol), 포스포러스 옥시클로라이드 500 mL를 넣고, 5 시간 동안 환류시켰다. 0 ℃로 냉각한 후, 증류수를 적가하였다. 반응액을 여과한 후, 고체를 컬럼크로마토그래피로 분리하여 [중간체 1-b]로 표시되는 화합물 30.5 g (수율 70.6 %)을 얻었다.

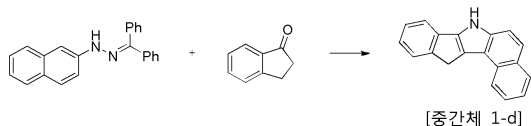
[0263] [반응식 1-3] [중간체 1-c]의 합성



[0264]

[0265] 2 L 반응기에 2-브로모나프탈렌 100 g(483 mmol), 벤조페논하이드라존 104.3 g(531 mmol), 다이팔라듐 아세테이트 10.8 g(48 mmol), 2,2'-비스(다이페닐포스포노)-1,1'-바이나프틸 30.1 g(48 mmol), 소듐터셔리부톡사이드 65.0 g(676 mmol) 및 톨루엔 800 mL를 넣고 12 시간 동안 환류시켰다. 고온에서 여과한 후, 여액을 감압 농축한 다음 컬럼크로마토그래피로 정제하여 [중간체 1-c]으로 표시되는 화합물 116.7 g (수율 75.0 %)을 얻었다.

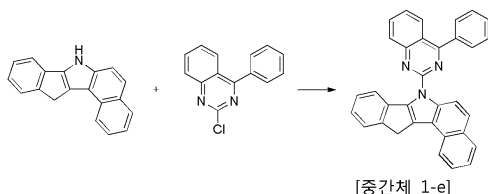
[0266] [반응식 1-4] [중간체 1-d]의 합성



[0267]

[0268] 2 L 반응기에 상기 [반응식 1-3]에서 얻은 [중간체 1-c] 116.7 g(362 mmol), 1-인다는 71.8 g(543 mmol), 파라-톨루엔설폰산 206.6 g(1086 mmol), 에탄올 1167 mL를 넣고 48시간 동안 환류시켰다. 반응액을 감압농축하고 컬럼크로마토그래피로 정제하여 [중간체 1-d]로 표시되는 화합물 56.8 g (수율 61.5 %)을 얻었다.

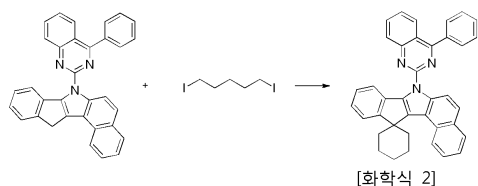
[0269] [반응식 1-5] [중간체 1-e]의 합성



[0270]

[0271] 300 mL 반응기에 상기 [반응식 1-4]에서 얻은 [중간체 1-d]로 표시되는 화합물 7.0 g (27 mmol), [반응식 1-2]에서 얻은 [중간체 1-b] 8.6 g (36 mmol), 트리스(다이벤지리덴아세톤) 다이팔라듐 0.5 g (0.5 mmol), 트리터셔리 부틸포스포늄 테트라플루오로보레이트 0.8 g (2.7 mmol), 소듐터셔리부톡사이드 5.3 g (55 mmol) 및 자일렌 35 mL를 넣고 12 시간 동안 환류시켰다. 고온에서 여과한 후, 여액을 감압농축한 다음 컬럼크로마토그래피로 분리하여 [중간체 1-e]로 표시되는 화합물 9.7 g (수율 72.9 %)을 얻었다.

[0272] [반응식 1-6] [화학식 2]의 합성



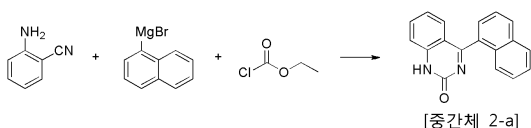
[0273]

[0274] 300 mL 반응기에 상기 [반응식 1-5]에서 얻은 [중간체 1-e] 9.7 g (21 mmol), 테트라하이드로퓨란 77 mL를 넣고, 0 °C로 냉각하였다. 0 °C에서 포타슘-터셔리-부톡사이드 7.1 g (63 mmol)을 천천히 넣고 교반한다. 10분 뒤 0 °C에서 1,5-디아요도펜탄 10.3 g (32 mmol)을 테트라하이드로퓨란 10 mL에 녹인 용액을 적가하고, 상온으로 승온하여 24시간 동안 교반하였다. 물을 넣고, 유기층을 추출하고 감압농축 한 후, 얻어진 고체를 재결정으로 정제하여 [화학식 2]로 표시되는 화합물 4.7 g (수율 42.2 %)을 얻었다.

[0275] MS [M]⁺ : 528.

[0276] [합성예 2] 화학식 3의 합성

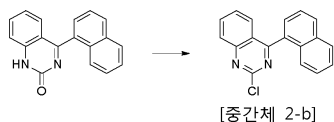
[0277] [반응식 2-1] [중간체 2-a]의 합성



[0278]

[0279] 합성예 1 [반응식 1-1]에서 페닐마그네슘브로마이드 대신 1-나프틸마그네슘브로마이드를 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 합성하여 [중간체 2-a]로 표시되는 화합물 59.7 g (수율 73.8 %)을 얻었다.

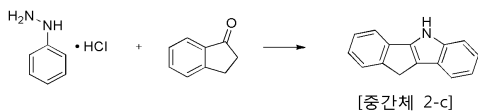
[0280] [반응식 2-2] [중간체 2-b]의 합성



[0281]

[0282] 합성예 1 [반응식 1-2]에서 [중간체 1-a] 대신 상기 [반응식 2-1]에서 얻은 [중간체 2-b]를 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 합성하여 [중간체 2-b]로 표시되는 화합물 59.4 g (수율 70.1 %)을 얻었다.

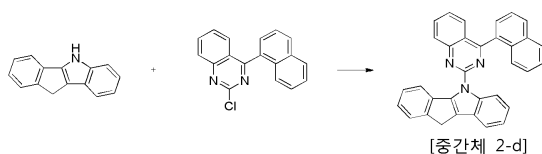
[0283] [반응식 2-3] [중간체 2-c]의 합성



[0284]

[0285] 1-인다는 60 g (375 mmol), 페닐 히드라진 염산염 87.5 g (450 mmol)에 아세트산 600 mL, 염산 30 mL를 넣고 12시간 환류 교반시킨다. 반응이 종료되면 에틸아세테이트와 물로 추출한 후 유기층을 감압농축하고 컬럼크로마토그래피로 분리하여 [중간체 2-c]로 표시되는 화합물 77.0 g (수율 74.3 %)을 얻었다.

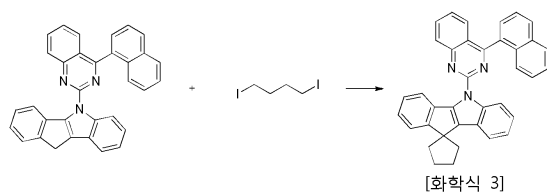
[0286] [반응식 2-4] [중간체 2-d]의 합성



[0287]

[0288] 합성예 1 [반응식 1-5]에서 [중간체 1-b] 대신 상기 [반응식 2-2]에서 얻은 [중간체 2-b]를 [중간체 1-d] 대신 [중간체 2-c]를 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 합성하여 [중간체 2-d]로 표시되는 화합물 64.5 g (수율 67.3 %)을 얻었다.

[0289] [반응식 2-5] [화학식 3]의 합성



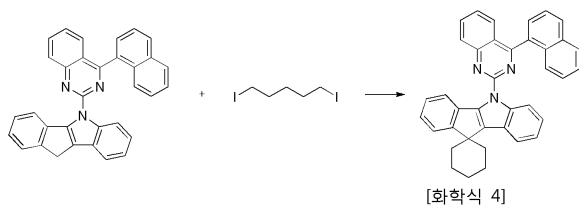
[0290]

[0291] 합성예 1 [반응식 1-6]에서 [중간체 1-e] 대신 상기 [반응식 2-4]에서 얻은 [중간체 2-d]를 1,5-디아이오도펜탄 대신 1,4-디아이오도부탄을 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 합성하여 [화학식 3]로 표시되는 화합물 4.3 g (수율 45.2 %)을 얻었다.

[0292] MS $[M]^+$: 514

[0293] [합성예 3] 화학식 4의 합성

[0294] [반응식 3-1] [화학식 4]의 합성



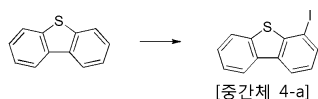
[0295]

[0296] 합성예 1 [반응식 1-6]에서 [중간체 1-e] 대신 상기 [반응식 2-4]에서 얻은 [중간체 2-d]를 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 합성하여 [화학식 4]로 표시되는 화합물 3.9 g (수율 38.6 %)을 얻었다.

[0297] MS $[M]^+$: 528

[0298] [합성예 4] 화학식 15의 합성

[0299] [반응식 4-1] [중간체 4-a]의 합성

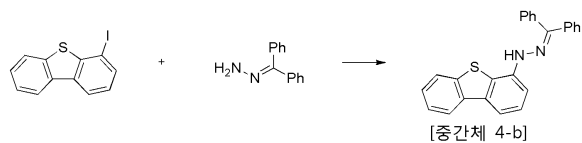


[0300]

[0301] 테트라하이드로퓨란 400 mL가 들어 있는 둥근 바닥 플라스크에 디벤조싸이오펜 50 g (271 mmol)을 넣어준 후 질소 분위기 하에서 온도를 -78°C 로 조절하였다. 30분 후 노르말 부틸리튬 178 mL (285 mmol)을 천천히 적가한 다음, 12시간 후 요오드 69 g (271 mmol)을 천천히 적가하고, 상온까지 승온시켰다. 2시간 교반 후 싸이오황산 나트륨 수용액을 넣어 준다. 추출하여 유기층을 모아 감압증류하였다. 헥산으로 재결정하여 생성된 고체를 여과

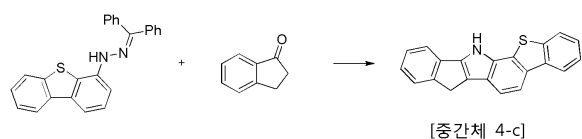
하여 [중간체 4-a]로 표시되는 화합물 52.1 g (수율 60 %)을 얻었다.

[반응식 4-2] [중간체 4-b]의 합성



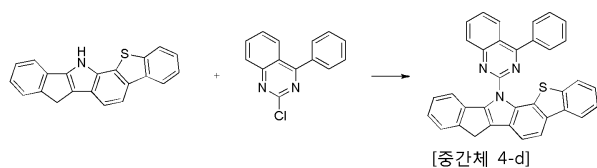
합성예 1 [반응식 1-3]에서 2-브로모나프탈렌 대신 상기 [반응식 4-1]에서 얻은 [중간체 4-a]를 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 합성하여 [중간체 4-b]로 표시되는 화합물 64.3 g (수율 74.2 %)을 얻었다.

[반응식 4-3] [중간체 4-c]의 합성



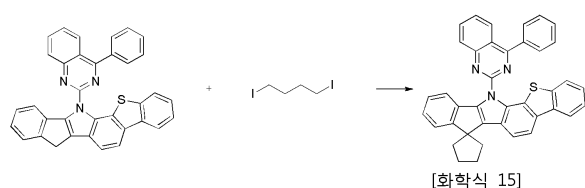
합성예 1 [반응식 1-4]에서 [중간체 1-c] 대신 상기 [반응식 4-2]에서 얻은 [중간체 4-b]를 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 합성하여 [중간체 4-c]로 표시되는 화합물 35.7 g (수율 68.2 %)을 얻었다.

[반응식 4-4] [중간체 4-d]의 합성



합성예 1 [반응식 1-5]에서 [중간체 1-d] 대신 상기 [반응식 4-3]에서 얻은 [중간체 4-c]를 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 합성하여 [중간체 4-d]로 표시되는 화합물 28.4 g (수율 72.6 %)을 얻었다.

[반응식 4-5] [화학식 15]의 합성

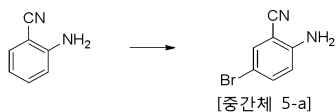


합성예 1 [반응식 1-6]에서 [중간체 1-e] 대신 상기 [반응식 4-4]에서 얻은 [중간체 4-d]를 1,5-디아이오도펜탄 대신 1,4-디아이오도부탄을 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 합성하여 [화학식 15]로 표시되는 화합물 4.3 g (수율 45.2 %)을 얻었다.

MS [M]⁺ : 570

[합성예 5] [화학식 19]의 합성

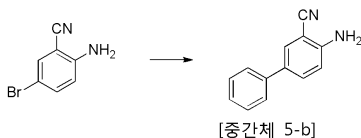
[0316] [반응식 5-1] [중간체 5-a]의 합성



[0317]

[0318] 1 L 반응기에 질소를 채워준 후 2-아미노벤조니트릴 35.1 g (297 mmol), 디메틸포름아마이드 350 mL을 교반시킨다. 그 후 N-브로모석신이미드 55.56 g (312 mmol)을 반응기에 천천히 넣는다. 상온으로 올린 후 4시간 동안 교반시킨다. 반응이 종료되면 증류수를 상온에서 적가한 후 갈색 결정이 생기면 결정을 여과하고 컬럼크로마토그래피로 분리하여 [중간체 5-a]로 표시되는 화합물 54.2 g (수율 92.6%)을 얻었다.

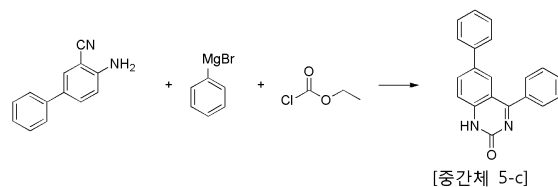
[0319] [반응식 5-2] [중간체 5-b]의 합성



[0320]

[0321] 상기 [반응식 5-1]으로부터 얻은 [중간체 5-a]로 표시되는 화합물 12 g (60.72 mmol), 페닐 보론산 8.88 g (72.8 mmol), 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐 1.4 g (1.21 mmol), 탄산칼륨 16.78 g (121.44 mmol), 1,4-다이옥산 60 mL, 톨루엔 60 mL, 증류수 24 mL에 넣고 100 ℃에서 12시간 동안 교반시킨다. 반응이 종료되면 상온으로 온도를 조절한 후 에틸아세테이트로 추출하여 유기층을 농축 후 컬럼 크로마토그래피를 하여 [중간체 5-b]로 표시되는 화합물 11.4 g (수율 97 %)을 얻었다.

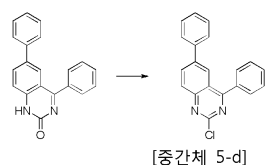
[0322] [반응식 5-3] [중간체 5-c]의 합성



[0323]

[0324] 합성에 1 [반응식 1-1]에서 2-아미노벤조니트릴 대신 상기 [반응식 5-2]에서 얻은 [중간체 5-b]를 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 합성하여 [중간체 5-c]로 표시되는 화합물 8.9 g (수율 84.8 %)을 얻었다.

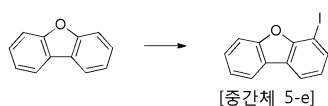
[0325] [반응식 5-4][중간체 5-d]의 합성



[0326]

[0327] 합성에 1 [반응식 1-2]에서 [중간체 1-a] 대신 상기 [반응식 5-3]에서 얻은 [중간체 5-c]를 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 합성하여 [중간체 5-d]로 표시되는 화합물 7.8 g (수율 73.5 %)을 얻었다.

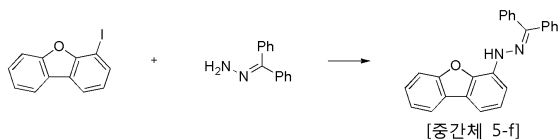
[0328] [반응식 5-5] [중간체 5-e]의 합성



[0329]

[0330] 합성에 4 [반응식 4-1]에서 디벤조싸이오펜 대신 디벤조퓨란을 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 합성하여 [중간체 5-e]로 표시되는 화합물 129.7 g (수율 78.4 %)을 얻었다.

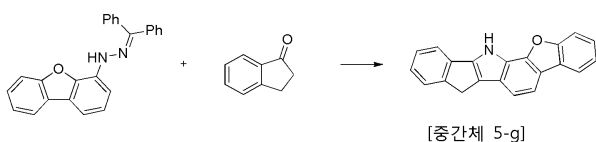
[0331] [반응식 5-6] [중간체 5-f]의 합성



[0332]

[0333] 합성에 1 [반응식 1-3]에서 2-브로모나프탈렌 대신 상기 [반응식 5-5]에서 얻은 [중간체 5-d]를 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 합성하여 [중간체 5-f]로 표시되는 화합물 64.3 g (수율 74.2 %)을 얻었다.

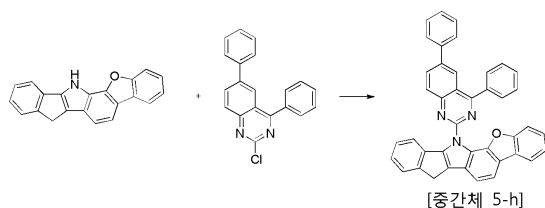
[0334] [반응식 5-7] [중간체 5-g]의 합성



[0335]

[0336] 합성에 1 [반응식 1-4]에서 [중간체 1-c] 대신 상기 [반응식 5-6]에서 얻은 [중간체 5-f]를 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 합성하여 [중간체 5-g]로 표시되는 화합물 57.4 g (수율 75.1 %)을 얻었다.

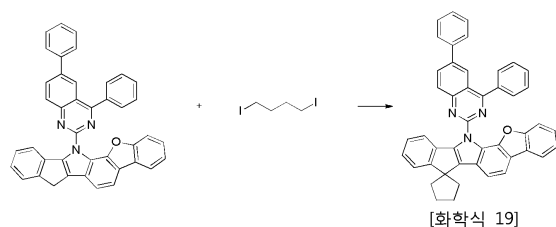
[0337] [반응식 5-8] [중간체 5-h]의 합성



[0338]

[0339] 합성에 1 [반응식 1-5]에서 [중간체 1-d] 대신 상기 [반응식 5-7]에서 얻은 [중간체 5-h]를 [중간체 1-b] 대신 [중간체 5-d]를 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 합성하여 [중간체 5-h]로 표시되는 화합물 22.4 g (수율 70.6 %)을 얻었다.

[0340] [반응식 5-9] [화학식 19]의 합성



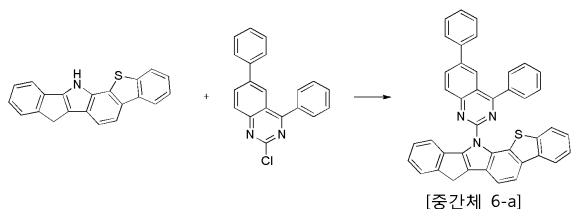
[0341]

[0342] 합성에 1 [반응식 1-6]에서 [중간체 1-e] 대신 상기 [반응식 5-8]에서 얻은 [중간체 5-h]를 1,5-디아이오도펜탄 대신 1,4-디아이오도부탄을 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 합성하여 [화학식 19]로 표시되는 화합물 4.3 g (수율 45.2 %)을 얻었다.

[0343] MS $[M]^+$: 630

[0344] [합성예 6] [화학식 21]의 합성

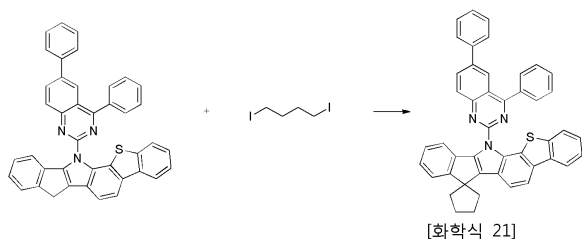
[0345] [반응식 6-1] [중간체 6-a]의 합성



[0346]

[0347] 합성예 1 [반응식 1-5]에서 [중간체 1-d] 대신 상기 [반응식 4-3]에서 얻은 [중간체 4-c]를 [중간체 1-b] 대신 [중간체 5-d]를 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 합성하여 [중간체 6-a]로 표시되는 화합물 12.3 g (수율 68.7 %)을 얻었다.

[0348] [반응식 6-2] [화학식 21]의 합성



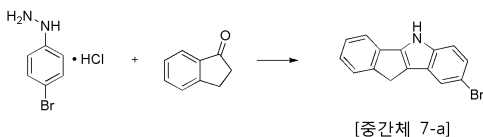
[0349]

[0350] 합성예 1 [반응식 1-6]에서 [중간체 1-e] 대신 상기 [반응식 6-1]에서 얻은 [중간체 6-a]를 1,5-디아이오도펜탄 대신 1,4-디아이오도부탄을 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 합성하여 [화학식 21]로 표시되는 화합물 5.7 g (수율 47.6 %)을 얻었다.

[0351] MS $[M]^+$: 646

[0352] [합성예 7] [화학식 31]의 합성

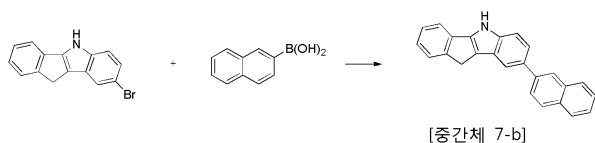
[0353] [반응식 7-1] [중간체 7-a]의 합성



[0354]

[0355] 합성예 2 [반응식 2-3]에서 페닐 히드라진 염산염 대신 4-브로모페닐 히드라진 염산염을 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 합성하여 [중간체 7-a]로 표시되는 화합물 76.1 g (수율 57.3 %)을 얻었다.

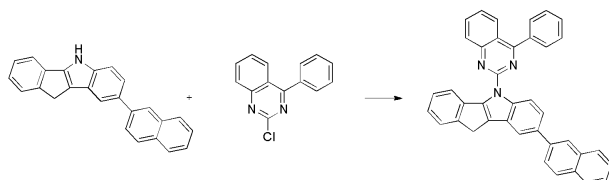
[0356] [반응식 7-2] [중간체 7-b]의 합성



[0357]

[0358] 합성예 5 [반응식 5-2]에서 [중간체 5-a] 대신 상기 [반응식 7-1]에서 얻은 [중간체 7-a]를 페닐보론산 대신 2-나프틸보론산을 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 합성하여 [중간체 7-b]로 표시되는 화합물 31.8 g (수율 71.3 %)을 얻었다.

[0359] [반응식 7-3] [중간체 7-c]의 합성

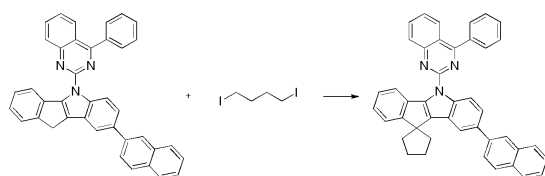


[중간체 7-c]

[0360]

[0361] 합성예 1 [반응식 1-5]에서 [중간체 1-d] 대신 상기 [반응식 7-2]에서 얻은 [중간체 7-b]를 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 합성하여 [중간체 7-c]로 표시되는 화합물 12.8 g (수율 69.4 %)을 얻었다.

[0362] [반응식 7-4] [화학식 31]의 합성



[화학식 31]

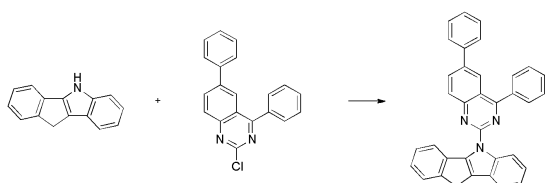
[0363]

[0364] 합성예 1 [반응식 1-6]에서 [중간체 1-e] 대신 상기 [반응식 7-3]에서 얻은 [중간체 7-c]를 1,5-디아이오도펜탄 대신 1,4-디아이오도부탄을 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 합성하여 [화학식 31]로 표시되는 화합물 5.7 g (수율 47.6 %)을 얻었다.

[0365] MS $[M]^+$: 590

[0366] [합성예 8] [화학식 43]의 합성

[0367] [반응식 8-1] [중간체 8-a]의 합성

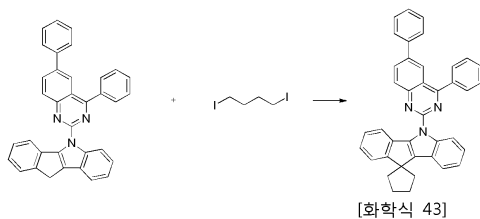


[중간체 8-a]

[0368]

[0369] 합성예 1 [반응식 1-5]에서 [중간체 1-d] 대신 상기 [반응식 2-3]에서 얻은 [중간체 2-c]를 [중간체 1-b] 대신 상기 [반응식 5-4]에서 얻은 [중간체 5-d]를 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 합성하여 [중간체 8-a]로 표시되는 화합물 10.5 g (수율 72.8 %)을 얻었다.

[0370] [반응식 8-2] [화학식 43]의 합성



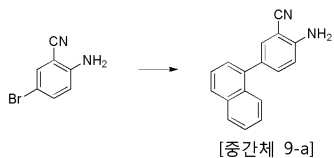
[0371]

[0372] 합성예 1 [반응식 1-6]에서 [중간체 1-e] 대신 상기 [반응식 8-1]에서 얻은 [중간체 8-a]를 1,5-디아이오도펜탄 대신 1,4-디아이오도부탄을 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 합성하여 [화학식 43]로 표시되는 화합물 4.5 g (수율 41.7 %)을 얻었다.

[0373] MS $[M]^+$: 540

[0374] [합성예 9] [화학식 44]의 합성

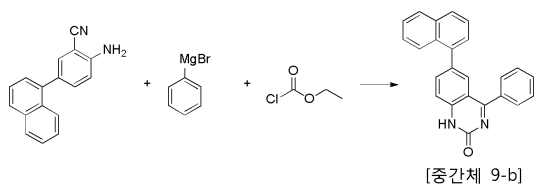
[0375] [반응식 9-1] [중간체 9-a]의 합성



[0376]

[0377] 합성예 5 [반응식 5-2]에서 페닐보론산 대신 1-나프틸보론산을 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 합성하여 [중간체 9-a]로 표시되는 화합물 27.6 g (수율 73.4 %)을 얻었다.

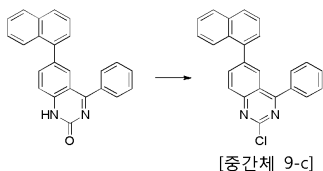
[0378] [반응식 9-2] [중간체 9-b]의 합성



[0379]

[0380] 합성예 1 [반응식 1-1]에서 2-아미노벤조니트릴 대신 상기 [반응식 9-1]에서 얻은 [중간체 9-b]를 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 합성하여 [중간체 9-b]로 표시되는 화합물 18.4 g (수율 69.5 %)을 얻었다.

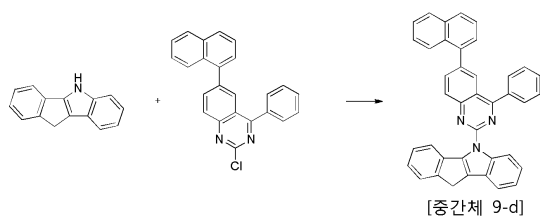
[0381] [반응식 9-3] [중간체 9-c]의 합성



[0382]

[0383] 합성예 1 [반응식 1-2]에서 [중간체 1-a] 대신 상기 [반응식 9-2]에서 얻은 [중간체 9-b]를 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 합성하여 [중간체 9-c]로 표시되는 화합물 15.4 g (수율 70.7 %)을 얻었다.

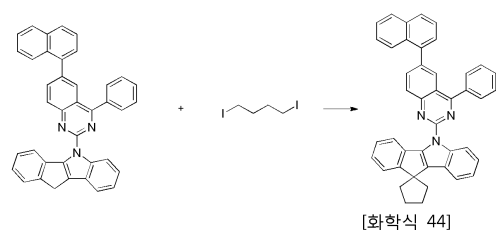
[0384] [반응식 9-4] [중간체 9-d]의 합성



[0385]

[0386] 합성예 1 [반응식 1-5]에서 [중간체 1-d] 대신 상기 [반응식 2-3]에서 얻은 [중간체 2-c]를 [중간체 1-b] 대신 상기 [반응식 9-3]에서 얻은 [중간체 9-c]를 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 합성하여 [중간체 9-d]로 표시되는 화합물 12.7 g (수율 67.1 %)을 얻었다.

[0387] [반응식 9-5] [화학식 44]의 합성



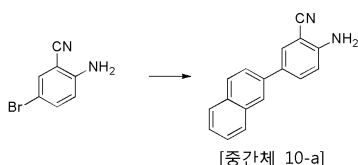
[0388]

[0389] 합성예 1 [반응식 1-6]에서 [중간체 1-e] 대신 상기 [반응식 9-4]에서 얻은 [중간체 9-d]를 1,5-디아이오도펜탄 대신 1,4-디아이오도부탄을 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 합성하여 [화학식 44]로 표시되는 화합물 3.9 g (수율 37.6 %)을 얻었다.

[0390] MS $[M]^+$: 590

[0391] [합성예 10] [화학식 45]의 합성

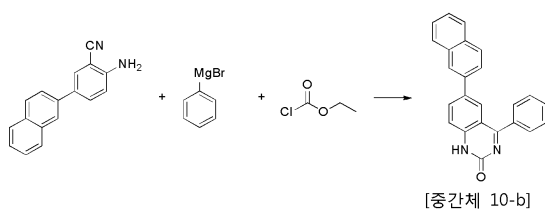
[0392] [반응식 10-1] [중간체 10-a]의 합성



[0393]

[0394] 합성예 5 [반응식 5-2]에서 페닐보론산 대신 2-나프틸보론산을 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 합성하여 [중간체 10-a]로 표시되는 화합물 30.7 g (수율 72.6 %)을 얻었다.

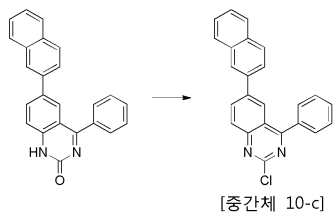
[0395] [반응식 10-2] [중간체 10-b]의 합성



[0396]

[0397] 합성예 1 [반응식 1-1]에서 2-아미노벤조니트릴 대신 상기 [반응식 10-1]에서 얻은 [중간체 10-a]를 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 합성하여 [중간체 10-b]로 표시되는 화합물 25.7 g (수율 79.5 %)을 얻었다.

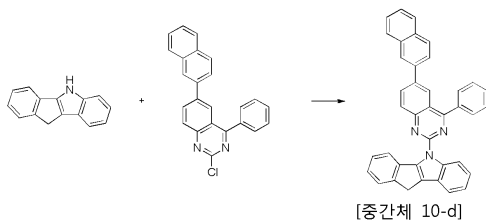
[0398] [반응식 10-3] [중간체 10-c]의 합성



[0399]

[0400] 합성예 1 [반응식 1-2]에서 [중간체 1-a] 대신 상기 [반응식 10-2]에서 얻은 [중간체 10-b]를 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 합성하여 [중간체 10-c]로 표시되는 화합물 17.6 g (수율 72.4 %)을 얻었다.

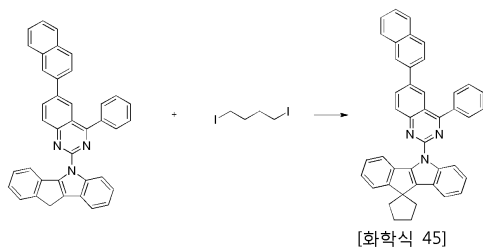
[0401] [반응식 10-4] [중간체 10-d]의 합성



[0402]

[0403] 합성예 1 [반응식 1-5]에서 [중간체 1-d] 대신 상기 [반응식 2-3]에서 얻은 [중간체 2-c]를 [중간체 1-b] 대신 상기 [반응식 10-3]에서 얻은 [중간체 10-c]를 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 합성하여 [중간체 10-d]로 표시되는 화합물 11.3 g (수율 68.1 %)을 얻었다.

[0404] [반응식 10-5] [화학식 45]의 합성



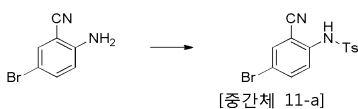
[0405]

[0406] 합성예 1 [반응식 1-6]에서 [중간체 1-e] 대신 상기 [반응식 10-4]에서 얻은 [중간체 10-d]를 1,5-디아이오도펜탄 대신 1,4-디아이오도부탄을 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 합성하여 [화학식 45]로 표시되는 화합물 4.3 g (수율 38.4 %)을 얻었다.

[0407] MS $[M]^+$: 590

[0408] [합성예 11] [화학식 48]의 합성

[0409] [반응식 11-1] [중간체 11-a]의 합성

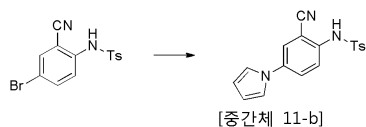


[0410]

[0411] 2 L 반응기에 상기 [반응식 5-1]에서 얻은 [중간체 5-a] 50.0 g (254 mmol)을 디클로로메탄 500 mL에 녹여 교반했다. 파라톨루엔설폰산 53.2 g (279 mmol)을 피리딘 60.2 g (761 mmol)에 녹여 적가 후 상온에서

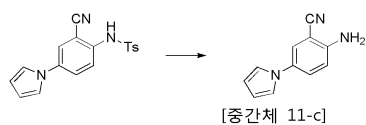
교반하였다. 반응이 종료되면 디클로로메탄과 물로 추출한 후 유기층을 감압농축하고 컬럼크로마토그래피로 분리하여 [중간체 11-a]로 표시되는 화합물 65.3 g(수율 73.3 %)을 얻었다.

[반응식 11-2] [중간체 11-b]의 합성



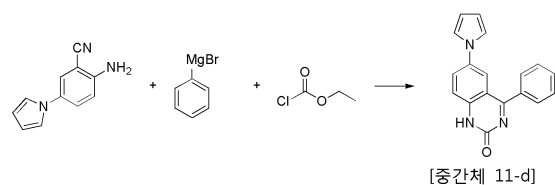
합성예 1 [반응식 1-5]에서 [중간체 1-d] 대신 피롤을 [중간체 1-b] 대신 상기 [반응식 11-1]에서 얻은 [중간체 11-a]를 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 합성하여 [중간체 11-b]로 표시되는 화합물 46.7 g (수율 70.6 %)을 얻었다.

[반응식 11-3] [중간체 11-c]의 합성



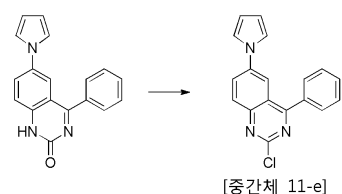
1 L 반응기에 상기 [반응식 11-2]에서 얻은 [중간체 11-b] 46.7 g (138 mmol), 세슘카보네이트 49.6 g (152 mmol), 테트라하이드로퓨란 280 mL, 메탄올 140 mL에 녹여 환류 교반하였다. 반응이 종료되면 디클로로메탄과 물로 추출한 후 유기층을 감압농축하고 컬럼크로마토그래피로 분리하여 [중간체 11-c]로 표시되는 화합물 31.2 g(수율 64.2 %)을 얻었다.

[반응식 11-4] [중간체 11-d]의 합성



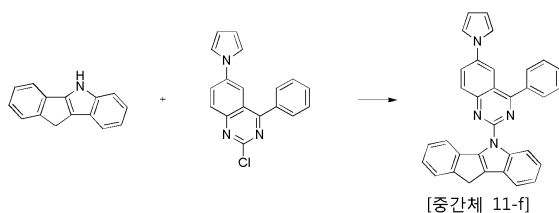
합성예 1 [반응식 1-1]에서 2-아미노벤조니트릴 대신 상기 [반응식 11-3]에서 얻은 [중간체 11-c]를 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 합성하여 [중간체 11-d]로 표시되는 화합물 31.4 g (수율 62.4 %)을 얻었다.

[반응식 11-5] [중간체 11-e]의 합성



합성예 1 [반응식 1-2]에서 [중간체 1-a] 대신 상기 [반응식 11-4]에서 얻은 [중간체 11-d]를 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 합성하여 [중간체 11-e]로 표시되는 화합물 15.9 g (수율 69.1 %)을 얻었다.

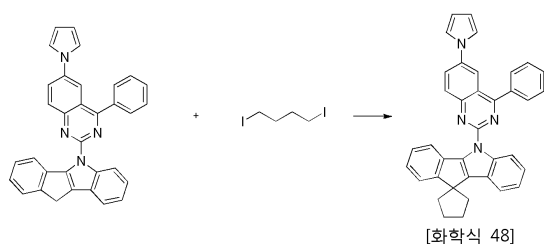
[0424] [반응식 11-6] [중간체 11-f]의 합성



[0425]

[0426] 합성예 1 [반응식 1-5]에서 [중간체 1-d] 대신 상기 [반응식 2-3]에서 얻은 [중간체 2-c]를 [중간체 1-b] 대신 상기 [반응식 11-5]에서 얻은 [중간체 11-d]를 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 합성하여 [중간체 11-f]로 표시되는 화합물 16.5 g (수율 70.8 %)을 얻었다.

[0427] [반응식 11-7] [화학식 48]의 합성



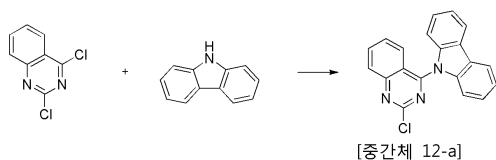
[0428]

[0429] 합성예 1 [반응식 1-6]에서 [중간체 1-e] 대신 상기 [반응식 11-6]에서 얻은 [중간체 11-f]를 1,5-디아이오도펜탄 대신 1,4-디아이오도부탄을 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 합성하여 [화학식 48]로 표시되는 화합물 2.8 g (수율 30.7 %)을 얻었다.

[0430] MS [M]⁺ : 529

[0431] [합성예 12] [화학식 55]의 합성

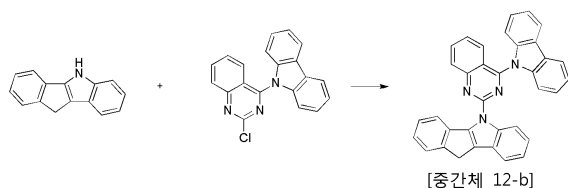
[0432] [반응식 12-1] [중간체 12-a]의 합성



[0433]

[0434] 300 mL 반응기에 카바졸 9.2 g (55 mmol)을 테트라하이드로퓨란 20 mL에 녹여 넣어준 후 질소 분위기 하에서 온도를 -10 °C로 조절하였다. 30분 후 노르말 부틸리튬 34.5 mL (55 mmol)을 천천히 적가한 다음, 30분동안 상온에서 교반시켰다. 2,4-다이클로로퀴나졸린 10.0 g (50 mmol)을 테트라하이드로퓨란 50 mL에 녹여 -10 °C에서 천천히 적가한 후 1시간 상온에서 교반하였다. 반응종료후 물을 넣어 준다. 에틸아세테이트로 추출하여 유기층을 농축 후 컬럼 크로마토그래피를 하여 [중간체 12-a]로 표시되는 화합물 13.4 g (수율 80.9 %)을 얻었다.

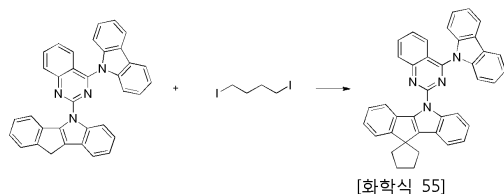
[0435] [반응식 12-2] [중간체 12-b]의 합성



[0436]

[0437] 합성예 1 [반응식 1-5]에서 [중간체 1-d] 대신 상기 [반응식 2-3]에서 얻은 [중간체 2-c]를 [중간체 1-b] 대신 상기 [반응식 12-1]에서 얻은 [중간체 12-a]를 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 합성하여 [중간체 12-b]로 표시되는 화합물 11.8 g (수율 67.3 %)을 얻었다.

[0438] [반응식 12-3] [화학식 55]의 합성



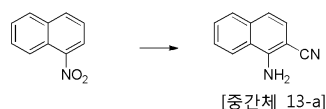
[0439]

[0440] 합성예 1 [반응식 1-6]에서 [중간체 1-e] 대신 상기 [반응식 12-2]에서 얻은 [중간체 12-b]를 1,5-디아이오도펜탄 대신 1,4-디아이오도부탄을 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 합성하여 [화학식 55]로 표시되는 화합물 4.5 g (수율 41.8 %)을 얻었다.

[0441] MS $[M]^+$: 553.

[0442] [합성예 13] [화학식 64]의 합성

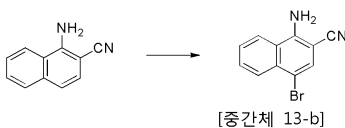
[0443] [반응식 13-1] [중간체 13-a]의 합성



[0444]

[0445] 2 L 반응기에 질소 하에서 에틸 시아노아세테이트 139.8 g (1.236 mol), 포타슘 시아나이드 29.5 g (0.453 mol), 포타슘 하이드록사이드 46.2 g (0.824 mol), 디메틸포름아마이드 920 mL 에 녹인 후 10 °C 에서 20분 동안 교반한다. 그 후 1-니트로나프탈렌 92 g (412 mol)을 반응물에 넣고 60 °C에서 4시간 동안 교반한다. 반응 종료 후 용매를 농축하고 10% 소듐 하이드록사이드 수용액을 600 mL을 넣고 1시간 동안 환류 교반한다. 고체를 여과하고 메틸렌 클로라이드와 헵탄으로 컬럼크로마토그래피를 하여 [중간체 13-a]로 표시되는 화합물 50 g (수율 60 %)을 얻었다.

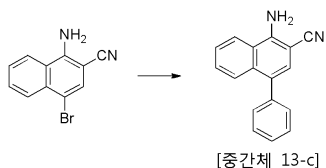
[0446] [반응식 13-2] [중간체 13-b]의 합성



[0447]

[0448] 합성예 5 [반응식 5-1]에서 2-아미노 벤조니트릴 대신 상기 [반응식 13-2]에서 얻은 [중간체13-a]를 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 합성하여 [중간체 13-b]로 표시되는 화합물 68 g (수율 92.6 %)을 얻었다.

[0449] [반응식 13-3] [중간체 13-c]의 합성

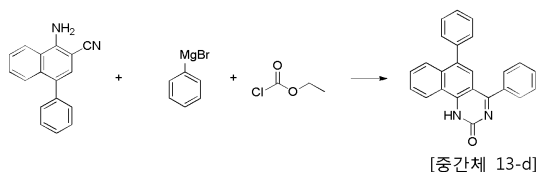


[0450]

[0451] 합성예 5 [반응식 5-2]에서 [중간체 5-a] 대신 상기 [반응식 13-2]에서 얻은 [중간체13-b]를 사용한 것을 제외

하고는 동일한 방법으로 합성하여 [중간체 13-b]로 표시되는 화합물 71.3 g (수율 86.4 %)을 얻었다.

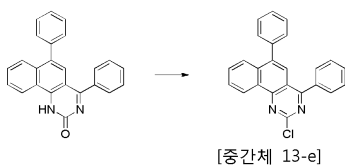
[0452] [반응식 13-4] [중간체 13-d]의 합성



[0453]

[0454] 합성에 1 [반응식 1-1]에서 2-아미노벤조니트릴 대신 상기 [반응식 13-3]에서 얻은 [중간체 13-c]를 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 합성하여 [중간체 13-d]로 표시되는 화합물 59.4 g (수율 68.2 %)을 얻었다.

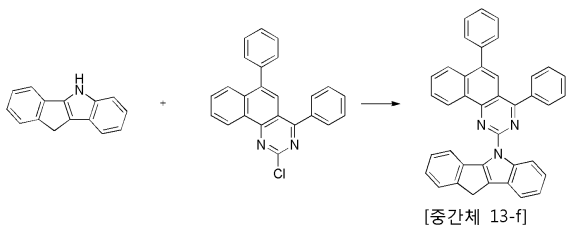
[0455] [반응식 13-5] [중간체 13-e]의 합성



[0456]

[0457] 합성에 1 [반응식 1-2]에서 [중간체 1-a] 대신 상기 [반응식 13-4]에서 얻은 [중간체 13-d]를 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 합성하여 [중간체 13-e]로 표시되는 화합물 21.6 g (수율 73.4 %)을 얻었다.

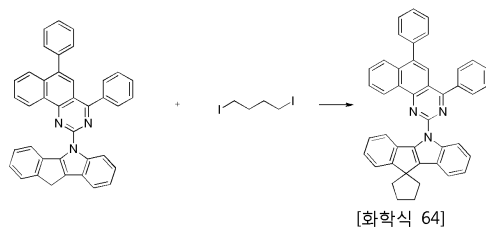
[0458] [반응식 13-6] [중간체 13-f]의 합성



[0459]

[0460] 합성에 1 [반응식 1-5]에서 [중간체 1-d] 대신 상기 [반응식 2-3]에서 얻은 [중간체 2-c]를 [중간체 1-b] 대신 상기 [반응식 13-5]에서 얻은 [중간체 13-d]를 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 합성하여 [중간체 13-f]로 표시되는 화합물 11.9 g (수율 68.4 %)을 얻었다.

[0461] [반응식 13-7] [화학식 64]의 합성



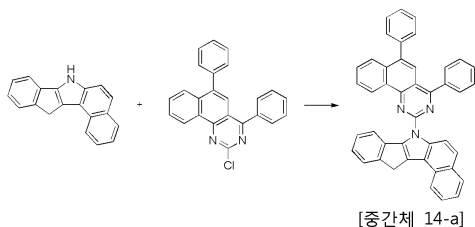
[0462]

[0463] 합성에 1 [반응식 1-6]에서 [중간체 1-e] 대신 상기 [반응식 13-6]에서 얻은 [중간체 13-f]를 1,5-디아이오도펜탄 대신 1,4-디아이오도부탄을 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 합성하여 [화학식 64]로 표시되는 화합물 4.5 g (수율 39.7 %)을 얻었다.

[0464] MS $[M]^+$: 590

[0465] [합성예 14] [화학식 65]의 합성

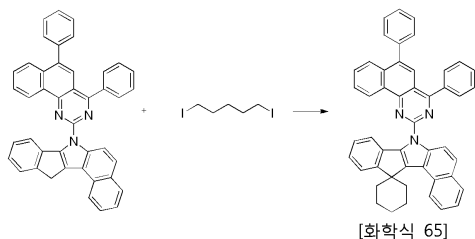
[0466] [반응식 14-1] [중간체 14-a]의 합성



[0467]

[0468] 합성예 1 [반응식 1-5]에서 [중간체 1-b] 대신 상기 [반응식 13-5]에서 얻은 [중간체 13-d]를 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 합성하여 [중간체 14-a]로 표시되는 화합물 14.7 g (수율 71.9 %)을 얻었다.

[0469] [반응식 14-2] [화학식 65]의 합성



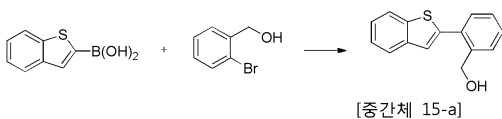
[0470]

[0471] 합성예 1 [반응식 1-6]에서 [중간체 1-e] 대신 상기 [반응식 14-1]에서 얻은 [중간체 14-a]를 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 합성하여 [화학식 65]로 표시되는 화합물 3.7 g (수율 35.7 %)을 얻었다.

[0472] MS $[M]^+$: 654

[0473] [합성예 15] [화학식 89]의 합성

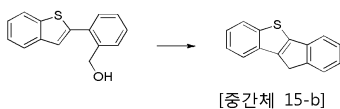
[0474] [반응식 15-1] [중간체 15-a]의 합성



[0475]

[0476] 합성예 5 [반응식 5-2]에서 [중간체 5-a] 대신 2-브로모벤질알코올을 페닐보론산 대신 벤조싸이오펜-2-보론산을 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 합성하여 [중간체 15-a]로 표시되는 화합물 80.3 g (수율 71.6 %)을 얻었다.

[0477] [반응식 15-2] [중간체 15-b]의 합성

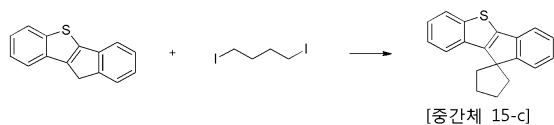


[0478]

[0479] 2 L 반응기에 상기 [반응식 15-1]에서 얻은 [중간체 15-a] 80.3 g (334 mmol)과 인산 280 mL를 넣고 12 시간동안 교반하였다. 메틸렌클로라이드와 증류수를 사용하여 유기층을 추출한 후, 감압농축한 다음 컬럼크로마토그래

피로 분리하여 [중간체 15-b]로 표시되는 화합물 60.7 g (수율 81.7 %)을 얻었다.

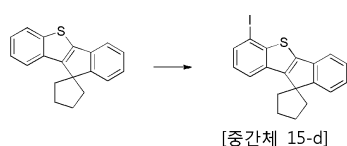
[0480] [반응식 15-3] [중간체 15-c]의 합성



[0481]

[0482] 합성에 1 [반응식 1-6]에서 [중간체 1-e] 대신 상기 [반응식 15-2]에서 얻은 [중간체 15-b]를 1,5-디아이오도펜탄 대신 1,4-디아이오도부탄을 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 합성하여 [중간체 15-c]로 표시되는 화합물 57.1 g (수율 76.4 %)을 얻었다.

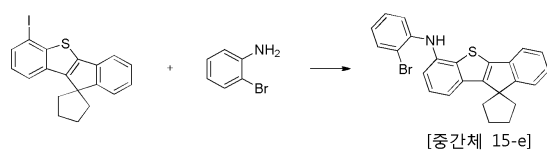
[0483] [반응식 15-4] [중간체 15-d]의 합성



[0484]

[0485] 합성에 4 [반응식 4-1]에서 디벤조싸이오펜 대신 상기 [반응식 15-3]에서 얻은 [중간체 15-c]를 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 합성하여 [중간체 15-d]로 표시되는 화합물 97.3 g (수율 74.9 %)을 얻었다.

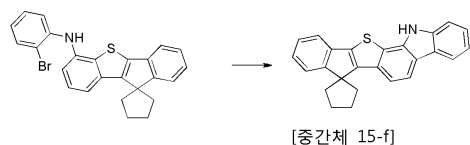
[0486] [반응식 15-5] [중간체 15-e]의 합성



[0487]

[0488] 2 L 반응기에 상기 [반응식 15-4]에서 얻은 [중간체 15-d]로 표시되는 화합물 20.0 g (50 mmol), 2-브로모아닐린 10.3 g (60 mmol), 디팔라듐 아세테이트 0.2 g (1 mmol), 잔트포스 1.7 g (3 mmol), 세슘카보네이트 22.7 g (70 mmol) 및 톨루엔 160 mL를 넣고 12 시간 동안 환류시켰다. 고온에서 여과한 후, 여액을 감압 농축한 다음 컬럼크로마토그래피로 분리하여 [중간체 15-e]로 표시되는 화합물 17.2 g (수율 78.0 %)을 얻었다.

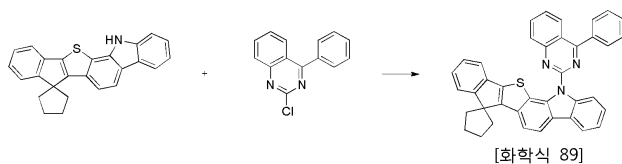
[0489] [반응식 15-6] [중간체 15-f]의 합성



[0490]

[0491] 2 L 반응기에 상기 [반응식 15-5]에서 얻은 [중간체 15-e]로 표시되는 화합물 17.3 g (39 mmol), 트리사이클로헥실포스핀 테트라플루오로보레이트 0.3 g (1 mmol), 디팔라듐 아세테이트 0.09 g (0.4 mmol), 탄산칼륨 10.7 g (78 mmol) 및 톨루엔 140 mL를 넣고 12 시간 동안 환류시켰다. 감압농축한 다음 컬럼크로마토그래피로 분리하여 [중간체 15-f]로 표시되는 화합물 11.3 g (수율 79.8 %)을 얻었다.

[0492] [반응식 15-7] [화학식 89]의 합성



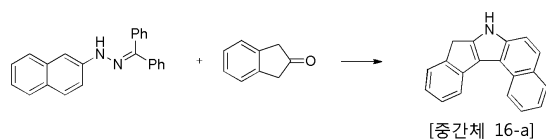
[0493]

[0494] 합성에 1 [반응식 1-5]에서 [중간체 1-d] 대신 상기 [반응식 15-6]에서 얻은 [중간체 15-f]를 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 합성하여 [화학식 89]로 표시되는 화합물 4.8 g (수율 43.8 %)을 얻었다.

[0495] MS $[M]^+$: 570

[0496] [합성예 16] [화학식 99]의 합성

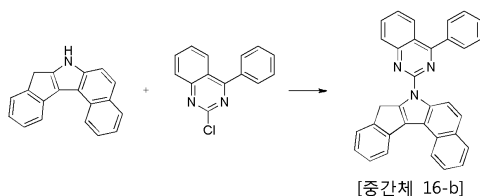
[0497] [반응식 16-1] [중간체 16-a]의 합성



[0498]

[0499] 합성에 1 [반응식 1-4]에서 1-인다는 대신 2-인다는를 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 합성하여 [중간체 16-a]로 표시되는 화합물 57.9 g (수율 65.3 %)을 얻었다.

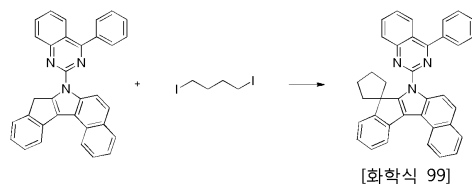
[0500] [반응식 16-2] [중간체 16-b]의 합성



[0501]

[0502] 합성에 1 [반응식 1-5]에서 [중간체 1-d] 대신 상기 [반응식 16-2]에서 얻은 [중간체 16-a]를 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 합성하여 [중간체 16-b]로 표시되는 화합물 21.8 g (수율 63.9 %)을 얻었다.

[0503] [반응식 16-3] [화학식 99]의 합성



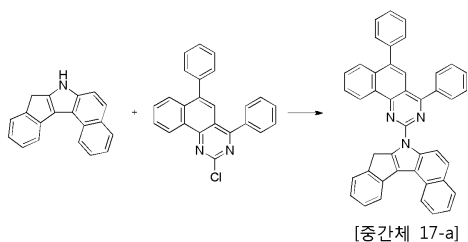
[0504]

[0505] 합성에 1 [반응식 1-6]에서 [중간체 1-e] 대신 상기 [반응식 16-2]에서 얻은 [중간체 16-b]를 1,5-디아이오도펜탄 대신 1,4-디아이오도부탄을 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 합성하여 [화학식 99]로 표시되는 화합물 4.1 g (수율 38.6 %)을 얻었다.

[0506] MS $[M]^+$: 514

[0507] [합성예 17] [화학식 161]의 합성

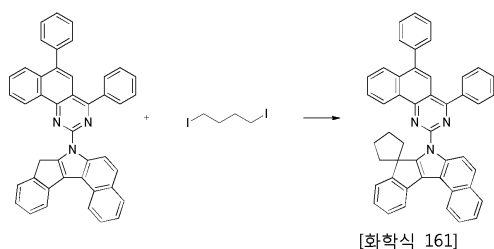
[0508] [반응식 17-1] [중간체 17-a]의 합성



[0509]

[0510] 합성예 1 [반응식 1-5]에서 [중간체 1-b] 대신 상기 [반응식 13-5]에서 얻은 [중간체 13-d] 를 [중간체 1-d] 대신 상기 [반응식 16-2]에서 얻은 [중간체 16-a]를 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 합성하여 [중간체 17-a]로 표시되는 화합물 16.3 g (수율 65.1 %)을 얻었다.

[0511] [반응식 17-2] [화학식 161]의 합성



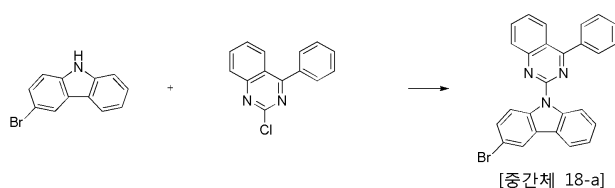
[0512]

[0513] 합성예 1 [반응식 1-6]에서 [중간체 1-e] 대신 상기 [반응식 17-1]에서 얻은 [중간체 17-a]를 1,5-디아이오도펜탄 대신 1,4-디아이오도부탄을 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 합성하여 [화학식 161]로 표시되는 화합물 3.5 g (수율 40.7 %)을 얻었다.

[0514] MS $[M]^+$:640

[0515] [합성예 18] [화학식 176]의 합성

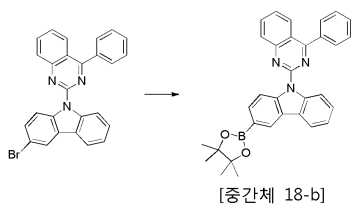
[0516] [반응식 18-1] [중간체 18-a]의 합성



[0517]

[0518] 합성예 1 [반응식 1-6]에서 [중간체 1-d] 대신 3-브로모카바졸을 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 합성하여 [중간체 18-a]로 표시되는 화합물 28.3 g (수율 70.4 %)을 얻었다.

[0519] [반응식 18-2] [중간체 18-b]의 합성

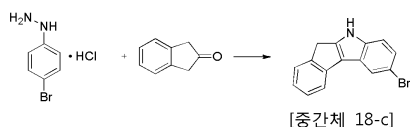


[0520]

[0521] 1 L 반응기에 상기 [반응식 18-1]에서 얻은 [중간체 18-a] 28.3 g (63 mmol)과 비스(피나콜라토)다이보론 22.3

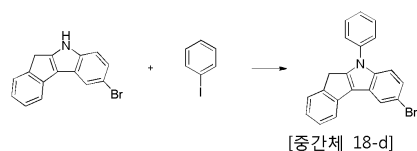
g (88 mmol), 포타슘아세테이트 14.3 g (179 mmol), PdCl₂(dppf) 1.5 g, (2 mmol) 및 톨루엔 230 mL를 투입하고 12 시간 동안 환류시켰다. 셀라이트를 사용하여 반응액을 여과한 후, 여액을 감압농축한 다음, 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 [중간체 18-b]로 표시되는 화합물 21.9 g (수율 70.1%)을 얻었다.

[반응식 18-3] [중간체 18-c]의 합성



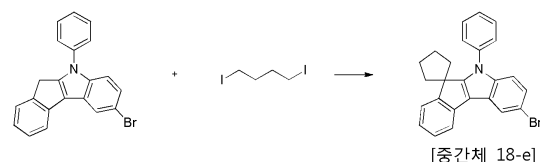
합성예 2 [반응식 2-3]에서 페닐 히드라진 염산염 대신 4-브로모페닐 히드라진 염산염을 1-인다는 대신 2-인다는 것을 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 [중간체 18-c]로 표시되는 화합물 63.8 g (수율 56.1 %)을 얻었다.

[반응식 18-4] [중간체 18-d]의 합성



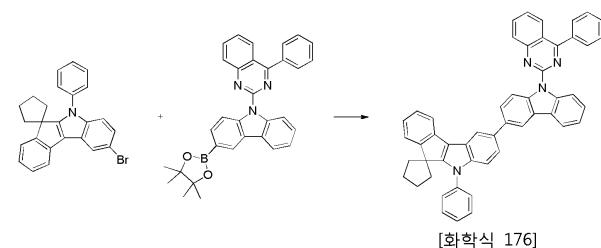
1 L 반응기에 상기 [반응식 18-3]에서 얻은 [중간체 18-c] 63.8 g (225 mmol), 아이오도벤젠 55.03 g (269 mmol), 요오드구리 2.1 g (11 mmol), 인산칼륨 100.1 g (472 mmol)과 1,2-시클로헥실디아민 53.8 g (472 mmol), 1,4-다이옥산 640 mL를 넣고 100 °C에서 12시간 동안 교반하였다. 고온에서 여과한 후 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 [중간체 18-d]로 표시되는 화합물 62.7 g (수율 77.5 %)을 얻었다.

[반응식 18-5] [중간체 18-e]의 합성



합성예 1 [반응식 1-6]에서 [중간체 1-e] 대신 상기 [반응식 18-4]에서 얻은 [중간체 18-d]를 1,5-디아이오도펜탄 대신 1,4-디아이오도부탄을 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 합성하여 [중간체 18-e]로 표시되는 화합물 21.7 g (수율 68.4 %)을 얻었다.

[반응식 18-6] [화학식 176]의 합성



합성예 5 [반응식 5-2]에서 [중간체 5-a] 대신 상기 [반응식 18-2]에서 얻은 [중간체 18-b]를 페닐보론산 대신 상기 [반응식 18-2]에서 얻은 [중간체 18-b]를 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 합성하여 [화학식 17

6]로 표시되는 화합물 5.4 g (수율 60.2 %)을 얻었다.

[0534] MS $[M]^+$: 705

[0535] [합성예 19] [화학식 202]의 합성

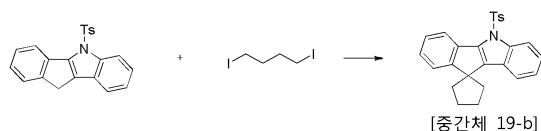
[0536] [반응식 19-1] [중간체 19-a]의 합성



[0537]

[0538] 합성예 11 [반응식 11-1]에서 [중간체 5-a] 대신 상기 [반응식 2-3]에서 얻은 [중간체 2-c]를 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 [중간체 19-a]로 표시되는 화합물 67.3 g(수율 76.9 %)을 얻었다.

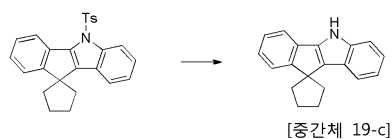
[0539] [반응식 19-2] [중간체 19-b]의 합성



[0540]

[0541] 합성예 1 [반응식 1-6]에서 [중간체 1-e] 대신 상기 [반응식 19-1]에서 얻은 [중간체 19-a]를 1,5-디아이오도펜탄 대신 1,4-디아이오도부탄을 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 합성하여 [중간체 19-b]로 표시되는 화합물 31.7 g (수율 68.3 %)을 얻었다.

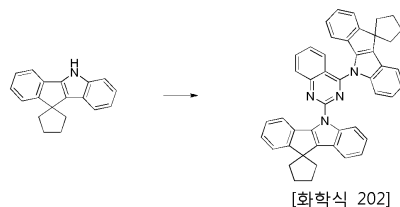
[0542] [반응식 19-3] [중간체 19-c]의 합성



[0543]

[0544] 합성예 11 [반응식 11-3]에서 [중간체 11-b] 대신 상기 [반응식 19-2]에서 얻은 [중간체 19-b]를 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 [중간체 19-c]로 표시되는 화합물 15.4 g(수율 77.5 %)을 얻었다.

[0545] [반응식 19-4] [화학식 202]의 합성



[0546]

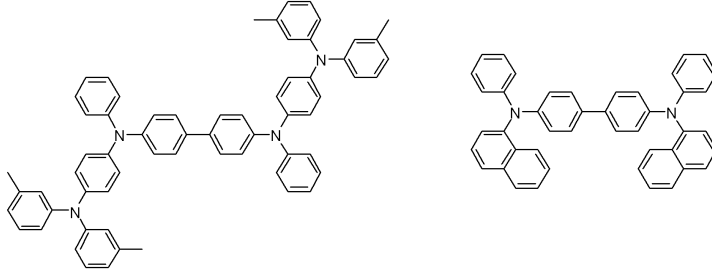
[0547] 합성예 1 [반응식 1-5]에서 [중간체 1-b] 대신 2,4-디클로로퀴나졸린을, [중간체 1-d] 대신 상기 [반응식 19-3]에서 얻은 [중간체 19-c]를 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 합성하여 [화학식 202]로 표시되는 화합물 5.1 g (수율 49.3 %)을 얻었다.

[0548] MS $[M]^+$: 645

[0549] 실시예 : 유기 발광다이오드의 제조

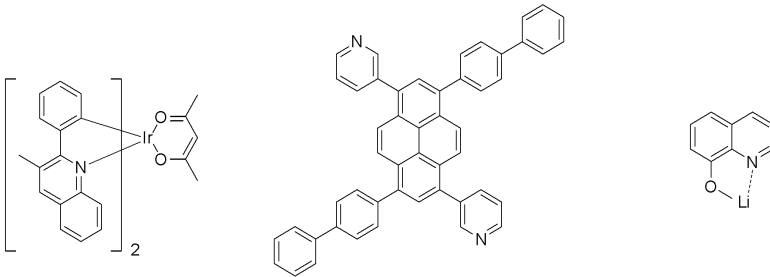
[0550] ITO 글래스의 발광 면적이 $2\text{ mm} \times 2\text{ mm}$ 크기가 되도록 패터닝한 후 세정하였다. 기판을 진공 챔버에 장착한 후 베이스 압력이 1×10^{-6} torr가 되도록 한 후 유기물을 상기 ITO 위에 DNTPD(700 Å), NPD(300 Å), 본 발명에 의해 제조된 화합물 + RD-1 (3%)(300 Å), 화합물 E : Liq = 1:1 (250 Å), Liq(10 Å), Al(1,000 Å)의 순서로 성막하였으며, 0.4 mA에서 측정을 하였다.

[0551] 상기 DNTPD, NPD, RD-1, 화합물 E, Liq의 구조는 다음과 같다.



[0552]

[0553] <DNTPD> <NPD>

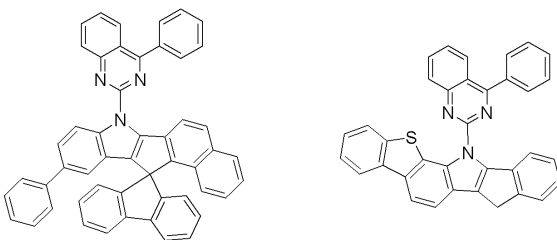


[0554]

[0555] <RD-1> <화합물 E> <Liq>

[0556] 비교예

[0557] 비교예를 위한 유기발광다이오드 소자는 상기 실시예의 소자구조에서 발명에 의해 제조된 화합물 대신 화합물 A, 화합물 B를 사용한 점을 제외하고 동일하게 제작하였으며 상기 화합물 A, 화합물 B의 구조는 아래와 같다.



[0558]

[0559] <화합물 A> <화합물 B>

[0560] 상기 실시예 1, 비교예 1 내지 2 에 따라 제조된 유기전계발 광소자에 대하여, 전압, 전류밀도, 휘도, 색 좌표 및 수명을 측정하고 그 결과를 하기 [표 1]에 나타내었다. T95은 휘도가 초기휘도(3000 cd/m^2)에서 95%로 감소되는데 소요되는 시간을 의미한다.

표 1

구분	호스트	도핑농도%	V	Cd/m ²	CIE _x	CIE _y	T ₉₅ (Hr)
비교예1	화합물 A	3	5.7	1700	0.665	0.335	150
비교예2	화합물 B	3	3.6	1350	0.665	0.335	50
실시예1	15	3	3.9	2300	0.665	0.335	400

상기 [표 1]에서 보는 바와 같이 본 발명에 따른 유기발광 화합물은 화합물 A, 화합물 B에 비하여 저전압 구동, 높은 발광 효율 및 장수명 특성을 갖는다.

도면

도면1

80
70
60
50
40
30
20
10

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	KR1020150144121A	公开(公告)日	2015-12-24
申请号	KR1020140072819	申请日	2014-06-16
[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	SHIN BONG KI 신봉기 PARK JI HEE 박지희 PARK BU BAE 박부배 LEE SEUNG SOO 이승수 PARK KYUNG HWA 박경화		
发明人	신봉기 박지희 박부배 이승수 박경화		
IPC分类号	C09K11/06 C07D403/04 C07D403/10 H01L51/50		
CPC分类号	Y02B20/181		
外部链接	Espacenet		

摘要(译)

本发明涉及由化学式1表示的有机发光化合物，并涉及包含该化合物的有机电致发光器件。与应用现有材料的装置相比，应用根据本发明的有机发光化合物的有机电致发光装置以低电压，改善的发光效率和高耐久性驱动.COPYRIGHT KIPO 2016

80
70
60
50
40
30
20
10