

	(19) 대한민국특허청(KR) (12) 공개특허공보(A)	(11) 공개번호 10-2014-0060220 (43) 공개일자 2014년05월19일
(51) 국제특허분류(Int. Cl.) C09K 11/06 (2006.01) C07D 401/10 (2006.01) H01L 51/50 (2006.01) (21) 출원번호 10-2013-0104023 (22) 출원일자 2013년08월30일 심사청구일자 없음 (30) 우선권주장 1020120126545 2012년11월09일 대한민국(KR)		(71) 출원인 에스케이케미칼주식회사 경기도 성남시 분당구 판교로 310 (삼평동) (72) 발명자 강주식 경기 화성시 동탄반석로 232, 131동 2403호 (석우동, 예당마을신일유토빌아파트) 박정호 경기 성남시 분당구 동판교로 275, 121동 504호 (삼평동, 봇들마을풍성신미주아파트) (뒷면에 계속) (74) 대리인 특허법인 다해

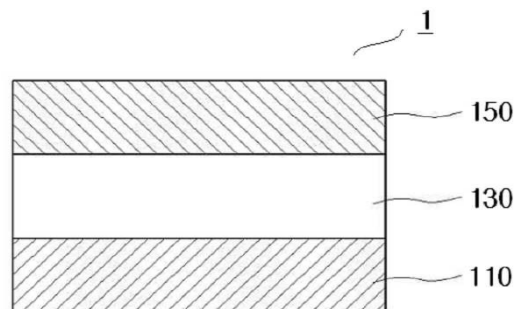
전체 청구항 수 : 총 12 항

(54) 발명의 명칭 유기전계발광소자용 화합물 및 이를 포함하는 유기전계발광소자

(57) 요약

유기전계발광소자용 화합물 및 이를 포함하는 유기전계발광소자가 개시된다. 본 발명에 따르면 본 발명의 유기전계발광소자용 화합물을 포함하는 유기전계발광소자의 열 안정성 및 발광 효율을 개선할 수 있고, 정공 수송층 물질로 본 발명의 화합물을 이용하여 인광성 발광 물질의 삼중항 에너지를 높여 유기전계발광소자의 발광효율을 개선할 수 있다.

대표도 - 도1



(72) 발명자

전석운

경기 수원시 팔달구 정자천로32번길 27, 151동
2305호 (화서동, 꽃피버들마을금강아파트)

신용준

서울 서대문구 수색로 100, 114동 2503호 (북가좌
동, DMC래미안e편한세상)

장유미

경기 광주시 송정로 69, 102동 1504호 (경안동, 나
산아파트)

양남철

서울 서초구 바우피로 99, 110동 507호 (양재동,
우성아파트)

박재균

인천 남구 소성로 120, 113동 904호 (학익동, 동아
풍림아파트)

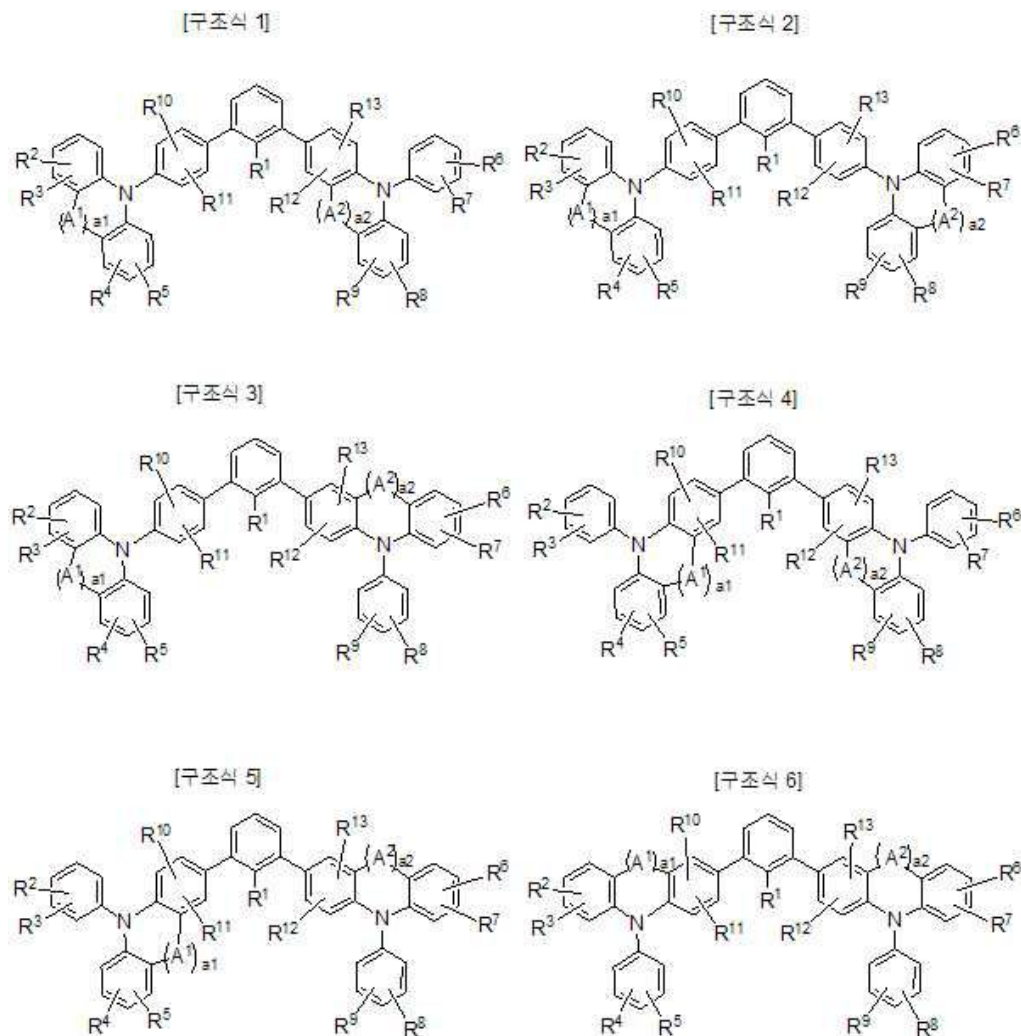
이송

서울 영등포구 당산로50길 19, (당산동6가)

특허청구의 범위

청구항 1

하기 구조식 1 내지 6 중 어느 하나로 표시되는 유기전계발광소자용 화합물.



상기 구조식 1 내지 6에서,

R^1 은 수소원자, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30의 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴기이고,

R^2 내지 R^{13} 은 서로 같거나 다를 수 있고, R^2 내지 R^{13} 은 각각 독립적으로 수소원자, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30의 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴기이거나, 또는 R^2 내지 R^{13} 중 적어도 어느 하나는 그 어느 하나가 결합된 탄소원자의 이웃한 탄소원자와 추가로 결합하여 치환 또는 비치환된 융합된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 융합된 C1 내지 C30 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 융합된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 융합된 C1 내지 C30 헤테로아릴기를 형성할 수 있고,

A^1 및 A^2 는 서로 같거나 다를 수 있고, A^1 및 A^2 는 각각 독립적으로 원자가 결합 또는



R^{14} 및 R^{15} 는 서로 같거나 다를 수 있고, R^{14} 및 R^{15} 는 각각 독립적으로 수소원자 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30의 알킬기이고,

a1은 0 또는 1이고,

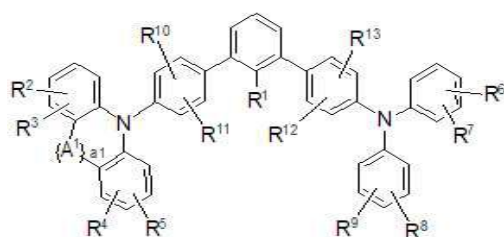
a2는 0 또는 1이다.

청구항 2

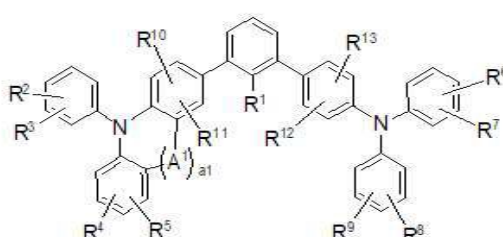
제1항에 있어서,

상기 유기전계발광소자용 화합물은 하기 구조식 7 내지 9 중 어느 하나로 표시되고,

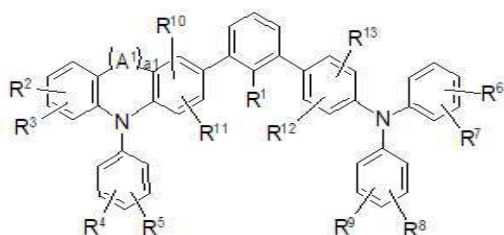
[구조식 7]



[구조식 8]



[구조식 9]



상기 구조식 7 내지 9에서,

R^1 은 수소원자, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30의 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴기이고,

R^2 내지 R^{13} 는 서로 같거나 다를 수 있고, R^2 내지 R^{13} 는 각각 독립적으로 수소원자, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30의 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴기이거나, 또는 R^2 내지 R^{13} 중 적어도 어느 하나는 그 어느 하나가 결합된 탄소원자의 이웃한 탄소원자와 추가로 결합하여 치환 또는 비치환된 융합된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 융합된 C1 내지 C30 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 융합된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 융합된 C1 내지 C30 헤테로아릴기를 형성할 수 있고,

A^1 은 원자가 결합 또는  이고,

R^{14} 및 R^{15} 는 서로 같거나 다를 수 있고, R^{14} 및 R^{15} 는 각각 독립적으로 수소원자 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30의 알킬기이고,

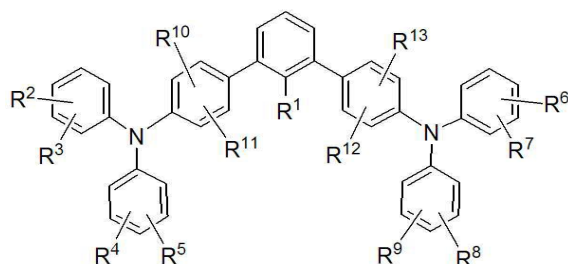
a1은 0 또는 1인 것을 특징으로 하는 유기전계발광소자용 화합물.

청구항 3

제1항에 있어서,

상기 유기전계발광소자용 화합물은 하기 구조식 10으로 표시되고,

[구조식 10]



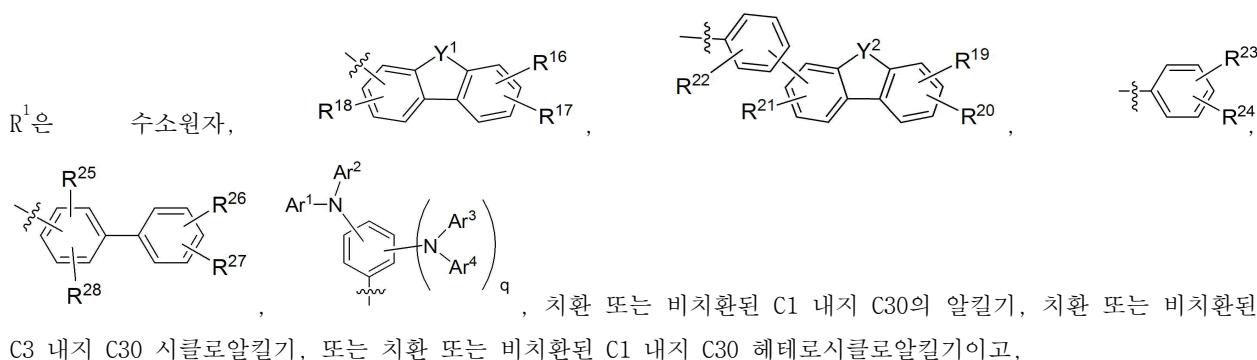
상기 구조식 10에서,

R¹은 수소원자, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30의 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴기이고,

R^2 내지 R^{13} 은 서로 같거나 다를 수 있고, R^2 내지 R^{13} 은 각각 독립적으로 수소원자, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30의 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴기이거나, 또는 R^2 내지 R^{13} 중 적어도 어느 하나는 그 어느 하나가 결합된 탄소원자의 이웃한 탄소원자와 추가로 결합하여 치환 또는 비치환된 융합된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 융합된 C1 내지 C30 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 융합된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 융합된 C1 내지 C30 헤테로아릴기를 형성하는 것을 특징으로 하는 유기전계발광소자용 화합물.

청구항 4

제1항에 있어서,



Y¹ 및 Y²는 서로 같거나 다를 수 있고, Y¹ 및 Y²는 각각 독립적으로 산소원자, 황원자,  또는  이고,

Ar⁵는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30의 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴기이고,

R^{29} 및 R^{30} 은 서로 같거나 다를 수 있고, R^{29} 및 R^{30} 은 각각 독립적으로 수소원자, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30의 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴기이고,

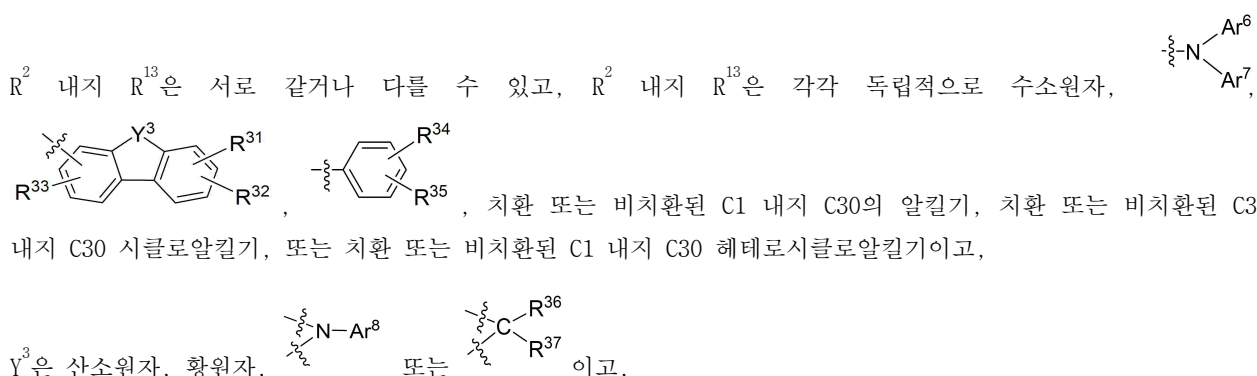
Ar^1 내지 Ar^4 는 서로 같거나 다를 수 있고, Ar^1 내지 Ar^4 는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30의 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴기이거나, 또는 Ar^1 과 Ar^2 , 및 Ar^3 과 Ar^4 는 각각 서로 결합하여 그들 사이의 질소원자와 함께 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로시클로알킬기, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴기를 형성하거나, 또는 Ar^1 내지 Ar^4 중 적어도 어느 하나는 그 어느 하나가 결합된 질소원자의 β 위치의 탄소원자와 추가로 결합하여 치환 또는 비치환된 융합된 C1 내지 C30 헤테로시클로알킬기, 또는 치환 또는 비치환된 융합된 C1 내지 C30 헤테로아릴기를 형성할 수 있고,

q는 0 또는 1이고,

R^{16} 내지 R^{28} 은 서로 같거나 다를 수 있고, R^{16} 내지 R^{28} 은 각각 독립적으로 수소원자, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30의 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴기인 것을 특징으로 하는 유기전계발광소자용 화합물.

청구항 5

제1항에 있어서,



Ar^8 은 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30의 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴기이고,

R^{36} 및 R^{37} 은 서로 같거나 다를 수 있고, R^{36} 및 R^{37} 은 각각 독립적으로 수소원자, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30의 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴기이고,

Ar^6 및 Ar^7 은 서로 같거나 다를 수 있고, Ar^6 및 Ar^7 은 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30의 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴기이거나, 또는 Ar^6 및 Ar^7 은 서로 결합하여 그들 사이의 질소원자와 함께 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로시클로알킬기, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴기를 형성하거나, 또는 Ar^6 및 Ar^7 중 적어도 어느 하나는 그 어느 하나가 결합된 질소원자의 β 위치의 탄소원자와 추가로 결합하여 치환 또는 비치환된 융합된 C1 내지 C30 헤테로시클로알킬기, 또는 치환 또는 비치환된 융합된 C1 내지 C30 헤테로아릴기를 형성할 수 있고,

R^{31} 내지 R^{35} 는 서로 같거나 다를 수 있고, R^{31} 내지 R^{35} 는 각각 독립적으로 수소원자, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30의 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴기인 것을 특징으로 하는 유기전계발광소자용 화합물.

청구항 6

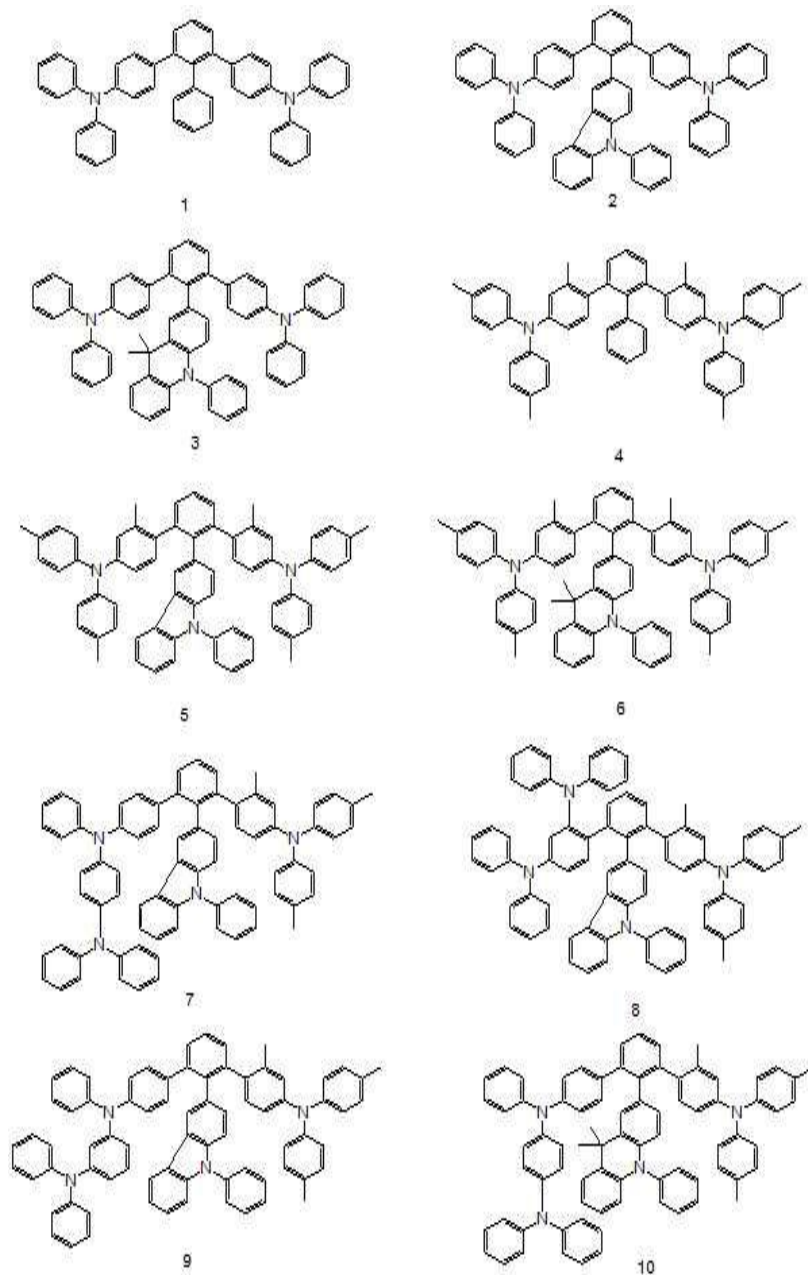
제5항에 있어서,

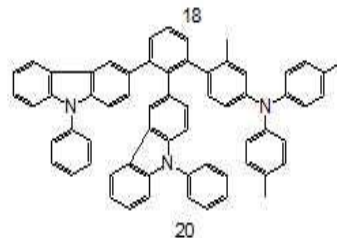
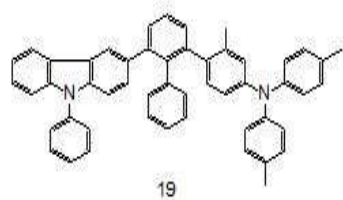
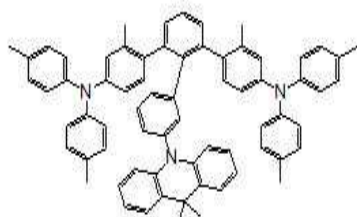
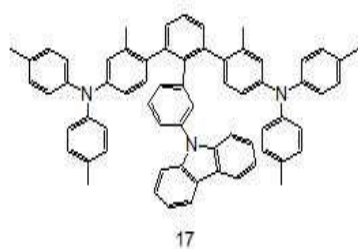
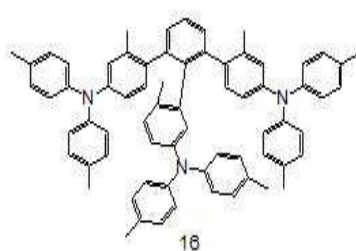
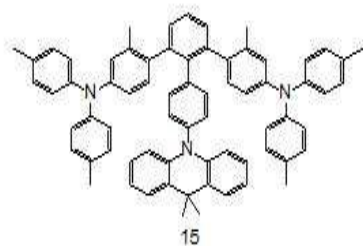
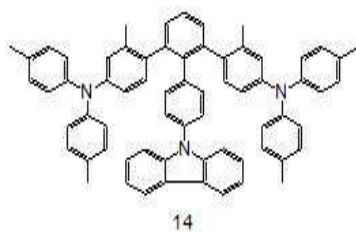
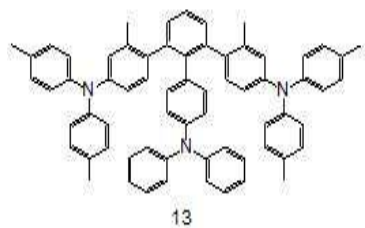
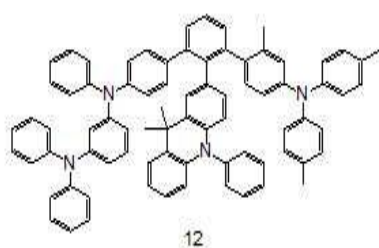
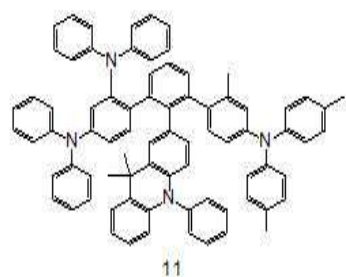
Ar^6 및 Ar^7 은 서로 같거나 다를 수 있고, Ar^6 및 Ar^7 은 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30의 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴기인 것을 특징으로 하는 유기전계발광소자용 화합물.

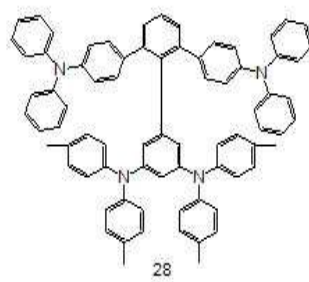
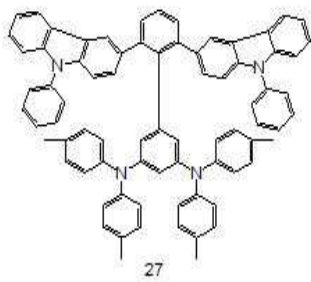
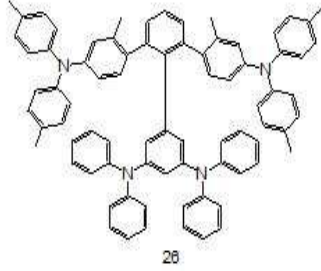
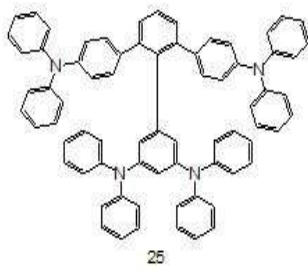
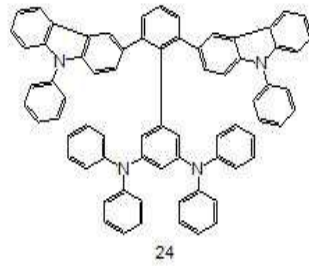
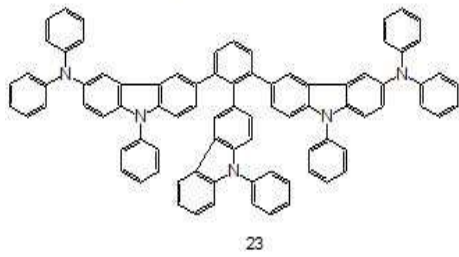
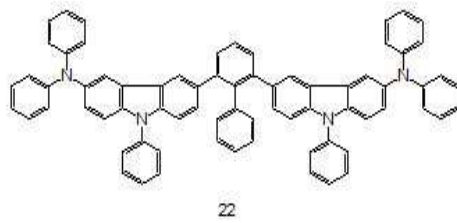
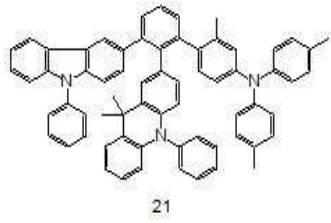
청구항 7

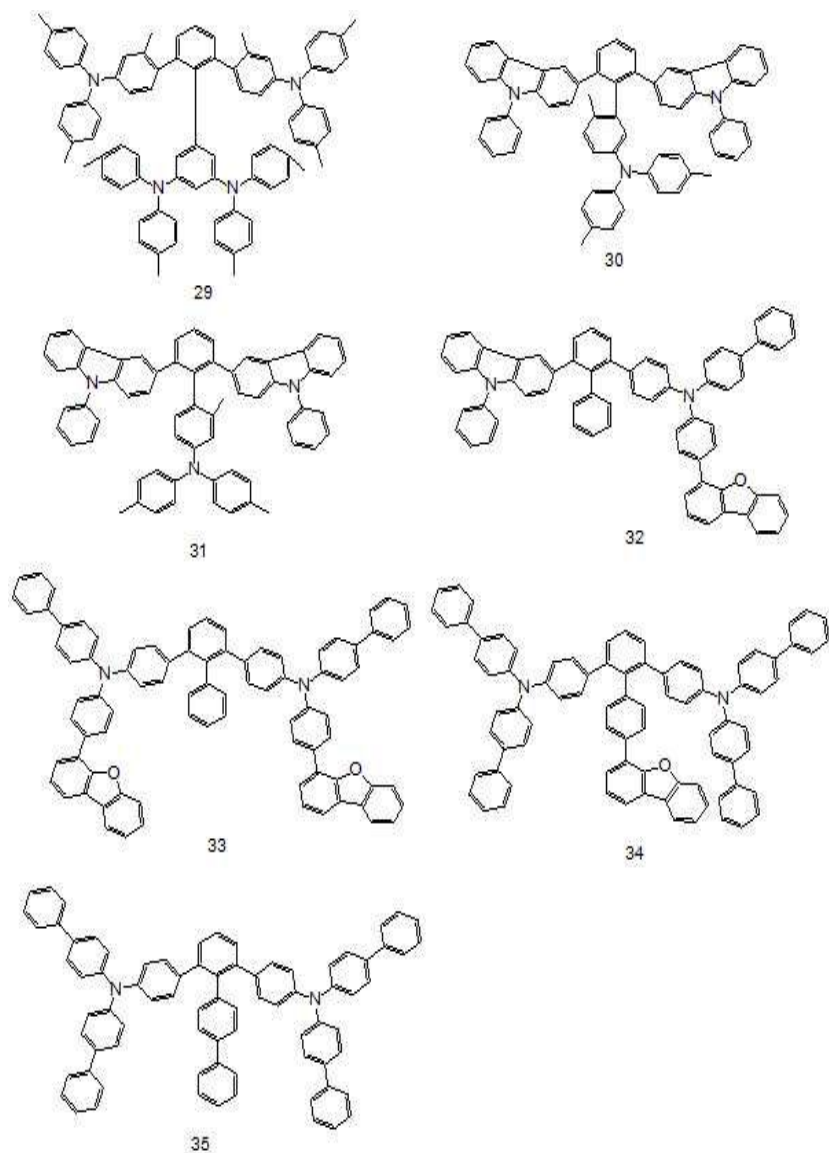
제1항에 있어서,

상기 유기전계발광소자용 화합물은 하기 화학식으로 표시되는 화합물 1 내지 35 중에서 선택된 어느 하나인 것을 특징으로 하는 유기전계발광소자용 화합물.









청구항 8

제1항에 따른 유기전계발광소자용 화합물을 포함하는 유기전계발광소자.

청구항 9

제1전극, 제2전극 및 제1전극과 제2전극 사이에 단수 또는 복수의 유기물층을 포함하는 유기전계발광소자에 있어서,

상기 단수 또는 복수의 유기물층 중에서 선택된 1종 이상의 유기물층은 제1항에 따른 유기전계발광소자용 화합물을 포함하는 것을 특징으로 하는 유기전계발광소자.

청구항 10

제9항에 있어서,

상기 단수 또는 복수의 유기물층은 발광층을 포함하는 것을 특징으로 하는 유기전계발광소자.

청구항 11

제9항에 있어서,

상기 복수의 유기물층은 발광층을 포함하고, 상기 복수의 유기물층은 전자주입층, 전자수송층, 정공차단층, 전자차단층, 정공수송층 및 정공주입층 중에서 선택된 1종 이상을 추가로 포함하는 것을 특징으로 하는 유기전계

발광소자.

청구항 12

제10항에 있어서,

상기 발광층은 호스트와 도펀트를 포함하는 것을 특징으로 하는 유기전계발광소자.

명세서

기술분야

[0001] 본 발명은 유기전계발광소자용 화합물 및 이를 포함하는 유기전계발광소자에 관한 것으로서, 보다 상세하게는 발광효율이 우수한 아민계 유기전계발광소자용 화합물 및 이를 포함하는 유기전계발광소자에 관한 것이다.

배경기술

[0002] 유기전계발광소자는 기존 액정 표시 장치(LCD), 플라즈마 디스플레이 패널(PDP) 그리고 전계 방출 디스플레이(FED)등의 타 평판 표시 소자에 비해 구조가 간단하고, 제조 공정상 다양한 장점이 있으며 높은 휘도 및 시야각 특성이 우수하며, 응답속도가 빠르고 구동전압이 낮아 벽걸이 TV등의 평판 디스플레이 또는 디스플레이의 배면광, 조명, 광고판 등의 광원으로 사용되도록 활발하게 개발이 진행되고 있다.

[0003] 유기전계발광소자는 일반적으로 직류 전압을 인가하였을 때 양극으로부터 주입된 정공과 음극으로부터 주입된 전자가 재결합하여 전자-정공 쌍인 엑시톤을 형성하며 이 엑시톤이 안정한 바닥 상태로 돌아오면서 그에 해당하는 에너지를 발광 재료에 전달함에 의해 빛으로 변환된다.

[0004] 유기전계발광소자의 효율과 안정성을 높이기 위해 이스트만 코닥사의 탕(C. W. Tang) 등에 의해 두 개의 반대 전극 사이에 적층형 유기물 박막을 구성하여 저전압 구동 유기전계발광소자가 보고(C. W. Tang, S. A. Vanslyke, Applied Physics Letters, 51권 913페이지, 1987년)된 이래, 다층 박막 구조형 유기전계발광소자용 유기 재료에 대한 연구가 활발히 진행되고 있다. 이러한 적층형 유기전계발광소자의 효율과 수명은 박막을 구성하는 재료의 분자구조와 관련이 깊다. 예컨대, 박막을 구성하는 재료 중 호스트물질, 정공수송층 물질, 또는 전자수송층 물질 등의 구조에 따라 양자효율이 크게 영향을 받으며, 열안정성이 떨어질 경우 고온 또는 구동온도에서 재료의 결정화가 이루어져 소자의 수명을 단축시키는 원인이 되고 있다.

[0005] 지금까지 알려져 있는 유기전계발광소자의 정공 수송 물질은 진공 증착에 의해 형성된 박막이 열 및 전기적으로 충분히 안정하지 않기 때문에, 소자 구동시의 발열에 의해 상기 박막의 결정화가 촉진되고 막질이 변화되어 궁극적으로 소자의 발광 효율의 저하된다. 또한, 다크 스팟이라고 하는 비발광부가 발생 및 증가하고, 정전류 구동시의 전압의 상승 등을 초래하여, 결국은 소자의 파괴에 이를 수 있는 문제점이 있다.

[0006] 또한 낮은 삼중항 에너지로 인해 인광성 발광 재료를 사용한 유기전계발광소자는 발광층의 발광 재료에서 생성된 삼중항 엑시톤을 구속하지 못하는 단점이 있어, 결국 소자의 발광 효율이 저하되는 문제가 있다.

발명의 내용

해결하려는 과제

[0007] 본 발명의 하나의 실시예에 따르면, 본 발명은 열 안정성이 높고, 삼중항 에너지가 높은 정공 수송성을 갖는 유기전계발광소자용 화합물을 제공하는 데 있다.

[0008] 또한, 본 발명의 유기전계발광소자용 화합물을 포함하는 유기전계발광소자의 열 안정성 및 발광 효율을 개선하고, 발광층과 접촉하는 정공 수송층 물질로 상기 화합물을 이용하여, 삼중항 에너지를 높여 유기전계발광소자의 효율을 개선할 수 있다.

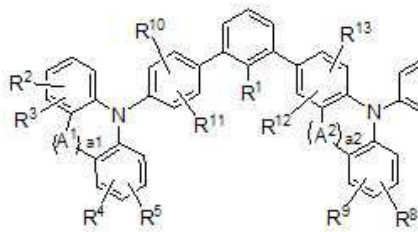
[0009] 그러나, 본원이 해결하고자 하는 과제는 이상에서 언급한 과제로 제한되지 않으며, 언급되지 않은 또 다른 과제들은 아래의 기재로부터 당업자에게 명확하게 이해될 수 있을 것이다.

과제의 해결 수단

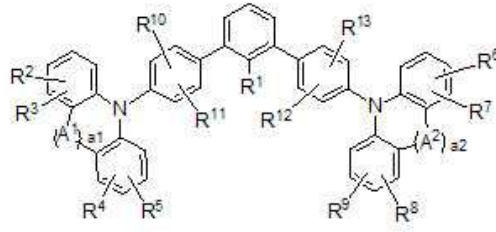
[0010] 본 발명의 하나의 측면에 따르면, 하기 구조식 1 내지 6 중 어느 하나로 표시되는 유기전계발광소자용 화합물이

제공된다.

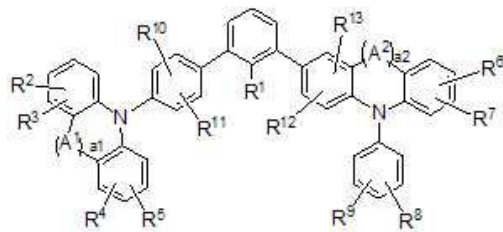
[구조식 1]



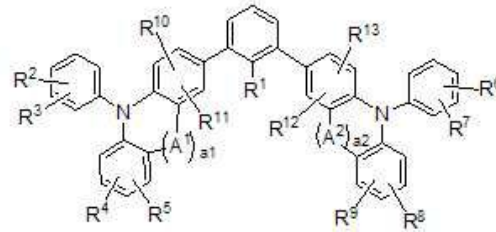
[구조식 2]



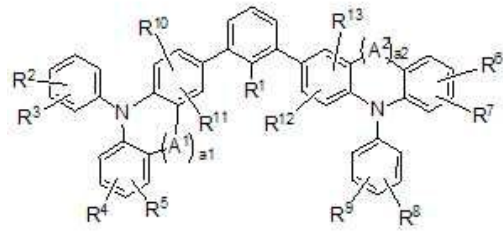
[구조식 3]



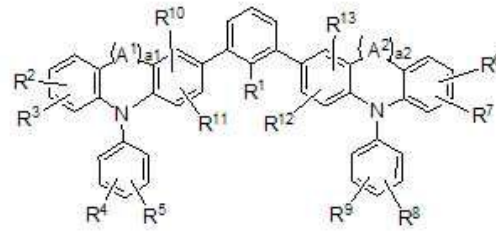
[구조식 4]



[구조식 5]



[구조식 6]



[0011]

[0012]

상기 구조식 1 내지 6에서,

[0013]

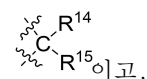
R^1 은 수소원자, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30의 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴기이고,

[0014]

R^2 내지 R^{13} 은 서로 같거나 다를 수 있고, R^2 내지 R^{13} 은 각각 독립적으로 수소원자, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30의 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴기이거나, 또는 R^2 내지 R^{13} 중 적어도 어느 하나는 그 어느 하나가 결합된 탄소원자의 이웃한 탄소원자와 추가로 결합하여 치환 또는 비치환된 융합된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 융합된 C1 내지 C30 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 융합된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 융합된 C1 내지 C30 헤테로아릴기를 형성할 수 있고,

[0015]

A^1 및 A^2 는 서로 같거나 다를 수 있고, A^1 및 A^2 는 각각 독립적으로 원자가 결합 또는



[0016]

R^{14} 및 R^{15} 는 서로 같거나 다를 수 있고, R^{14} 및 R^{15} 는 각각 독립적으로 수소원자 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30의 알킬기이고,

[0017]

a_1 은 0 또는 1이고,

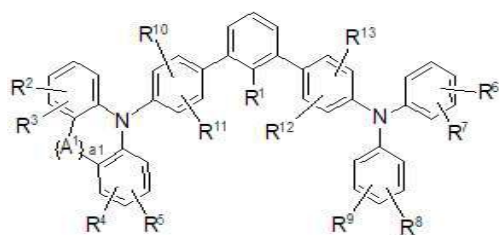
[0018]

a_2 는 0 또는 1이다.

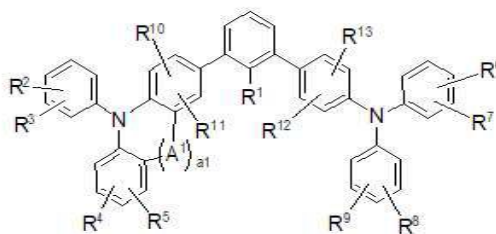
[0019] 본 발명의 일 실시예에 따르면, 바람직하게는,

[0020] 상기 유기전계발광소자용 화합물은 하기 구조식 7 내지 9 중 어느 하나로 표시되고,

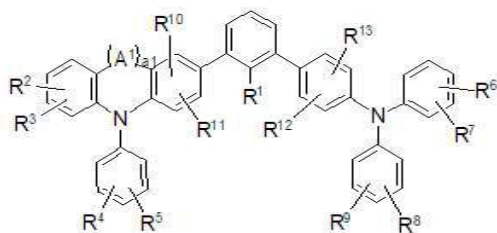
[구조식 7]



[구조식 8]



[구조식 9]



[0021]

[0022] 상기 구조식 7 내지 9에서,

[0023] R^1 은 수소원자, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30의 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴기이고,

[0024] R^2 내지 R^{13} 은 서로 같거나 다를 수 있고, R^2 내지 R^{13} 은 각각 독립적으로 수소원자, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30의 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴기이거나, 또는 R^2 내지 R^{13} 중 적어도 어느 하나는 그 어느 하나가 결합된 탄소원자의 이웃한 탄소원자와 추가로 결합하여 치환 또는 비치환된 융합된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 융합된 C1 내지 C30 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 융합된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 융합된 C1 내지 C30 헤테로아릴기를 형성할 수 있고,

[0025]

A^1 은 원자가 결합 또는  이고,

[0026]

R^{14} 및 R^{15} 은 서로 같거나 다를 수 있고, R^{14} 및 R^{15} 은 각각 독립적으로 수소원자 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30의 알킬기이고,

[0027]

a_1 은 0 또는 1일 수 있다.

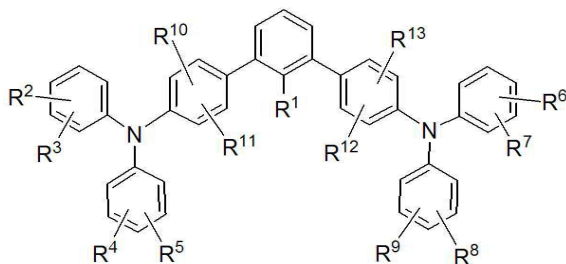
[0028]

본 발명의 다른 또 하나의 실시예에 있어서, 바람직하게는,

[0029]

상기 유기전계발광소자용 화합물은 하기 구조식 10으로 표시되고,

[0030] [구조식 10]



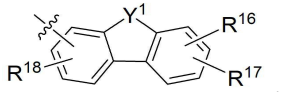
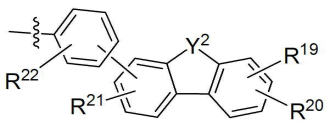
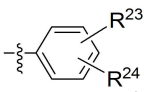
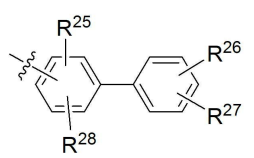
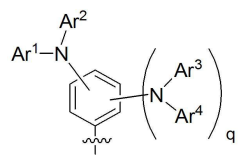
[0031]

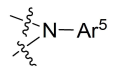
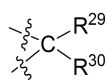
[0032] 상기 구조식 10에서,

[0033] R^1 은 수소원자, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30의 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴기이고,

[0034] R^2 내지 R^{13} 은 서로 같거나 다를 수 있고, R^2 내지 R^{13} 은 각각 독립적으로 수소원자, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30의 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴기이거나, 또는 R^2 내지 R^{13} 중 적어도 어느 하나는 그 어느 하나가 결합된 탄소원자의 이웃한 탄소원자와 추가로 결합하여 치환 또는 비치환된 융합된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 융합된 C1 내지 C30 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 융합된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 융합된 C1 내지 C30 헤테로아릴기를 형성하는 것일 수 있다.

[0035] 본 발명의 다른 또 하나의 실시예에 따르면, 바람직하게는,

[0036] R^1 은 수소원자, , , , , , 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30의 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로시클로알킬기이고,

[0037] Y^1 및 Y^2 는 서로 같거나 다를 수 있고, Y^1 및 Y^2 는 각각 독립적으로 산소원자, 황원자, , 또는  이고,

[0038] Ar^5 는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30의 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴기이고,

[0039] R^{29} 및 R^{30} 은 서로 같거나 다를 수 있고, R^{29} 및 R^{30} 은 각각 독립적으로 수소원자, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30의 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴기이고,

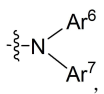
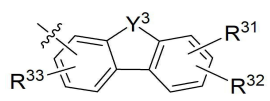
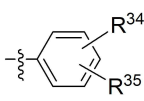
[0040] Ar^1 내지 Ar^4 는 서로 같거나 다를 수 있고, Ar^1 내지 Ar^4 는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30의 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴기이거나, 또는 Ar^1

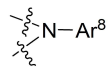
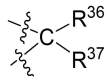
과 Ar^2 , 및 Ar^3 과 Ar^4 는 각각 서로 결합하여 그들 사이의 질소원자와 함께 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로시클로알킬기, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴기를 형성하거나, 또는 Ar^1 내지 Ar^4 중 적어도 어느 하나는 그 어느 하나가 결합된 질소원자의 β 위치의 탄소원자와 추가로 결합하여 치환 또는 비치환된 융합된 C1 내지 C30 헤테로시클로알킬기, 또는 치환 또는 비치환된 융합된 C1 내지 C30 헤테로아릴기를 형성할 수 있고,

[0041] q는 0 또는 1이고,

[0042] R^{16} 내지 R^{28} 은 서로 같거나 다를 수 있고, R^{16} 내지 R^{28} 은 각각 독립적으로 수소원자, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30의 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴기일 수 있다.

[0043] 본 발명의 다른 또 하나의 실시예에 따르면, 바람직하게는,

[0044] R^2 내지 R^{13} 은 서로 같거나 다를 수 있고, R^2 내지 R^{13} 은 각각 독립적으로 수소원자, , , , 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30의 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로시클로알킬기이고,

[0045] Y^3 은 산소원자, 황원자, , 또는  이고,

[0046] Ar^8 은 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30의 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴기이고,

[0047] R^{36} 및 R^{37} 은 서로 같거나 다를 수 있고, R^{36} 및 R^{37} 은 각각 독립적으로 수소원자, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30의 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴기이고,

[0048] Ar^6 및 Ar^7 은 서로 같거나 다를 수 있고, Ar^6 및 Ar^7 은 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30의 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴기이거나, 또는 Ar^6 및 Ar^7 은 서로 결합하여 그들 사이의 질소원자와 함께 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로시클로알킬기, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴기를 형성하거나, 또는 Ar^6 및 Ar^7 중 적어도 어느 하나는 그 어느 하나가 결합된 질소원자의 β 위치의 탄소원자와 추가로 결합하여 치환 또는 비치환된 융합된 C1 내지 C30 헤테로시클로알킬기, 또는 치환 또는 비치환된 융합된 C1 내지 C30 헤테로아릴기를 형성할 수 있고,

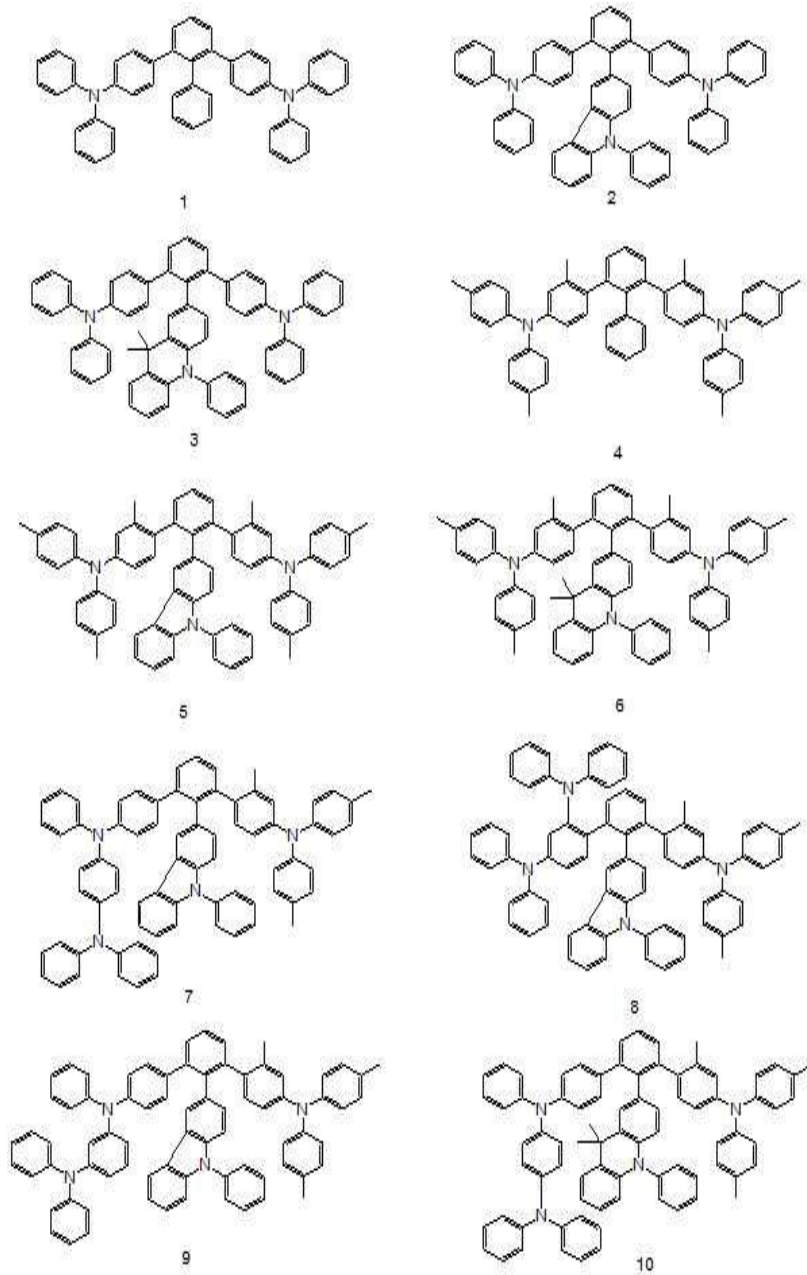
[0049] R^{31} 내지 R^{35} 은 서로 같거나 다를 수 있고, R^{31} 내지 R^{35} 은 각각 독립적으로 수소원자, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30의 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴기일 수 있다.

[0050] 본 발명의 다른 또 하나의 실시예에 따르면, 바람직하게는,

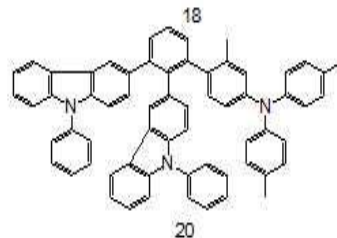
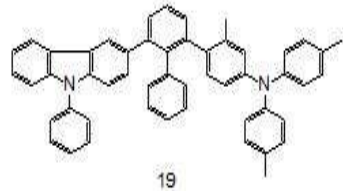
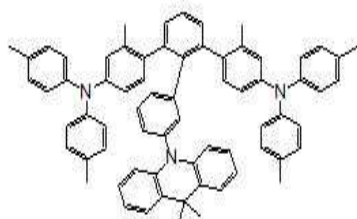
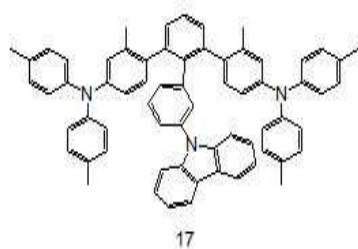
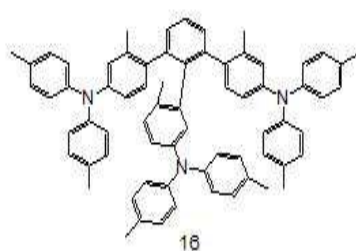
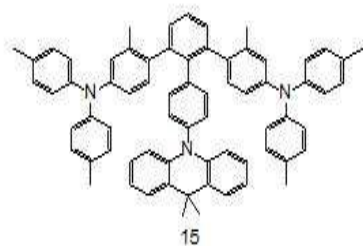
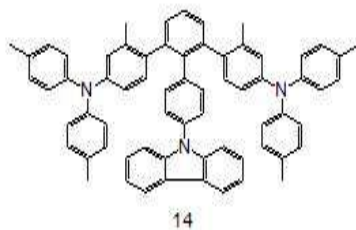
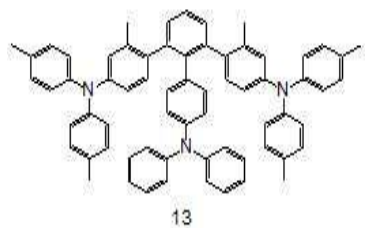
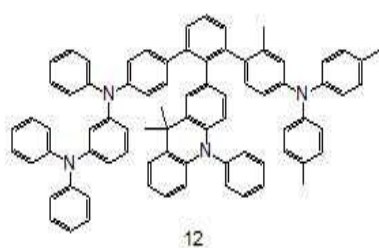
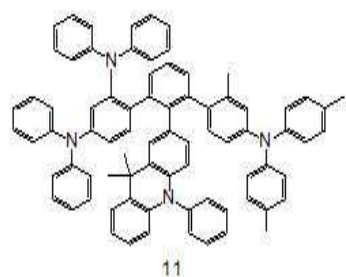
[0051] Ar^6 및 Ar^7 은 서로 같거나 다를 수 있고, Ar^6 및 Ar^7 은 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30의 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴기일 수 있다.

[0052] 본 발명의 다른 또 하나의 실시예에 따르면, 바람직하게는,

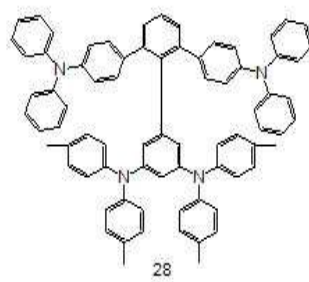
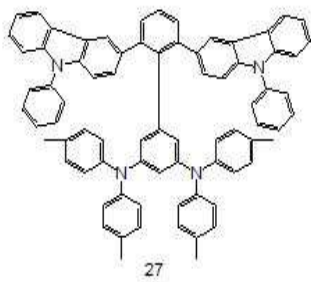
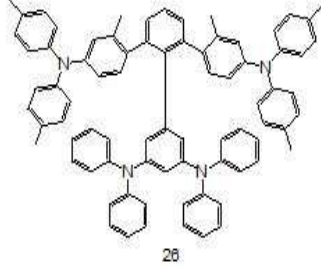
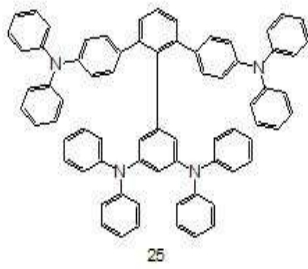
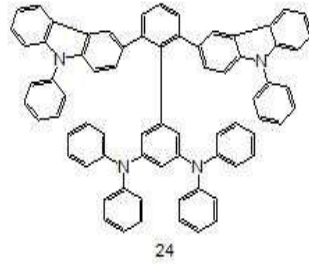
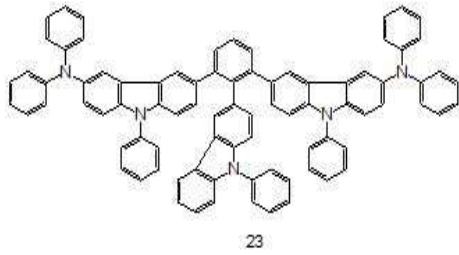
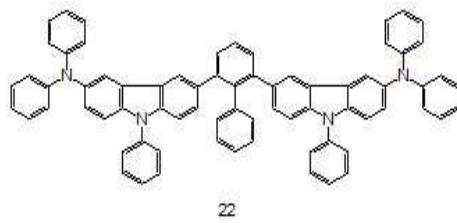
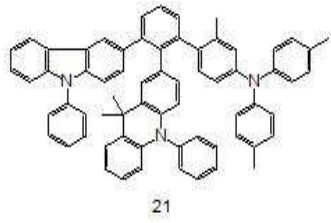
[0053] 상기 유기전계발광소자용 화합물은 하기 화학식으로 표시되는 화합물 1 내지 35 중에서 선택된 어느 하나일 수 있다.



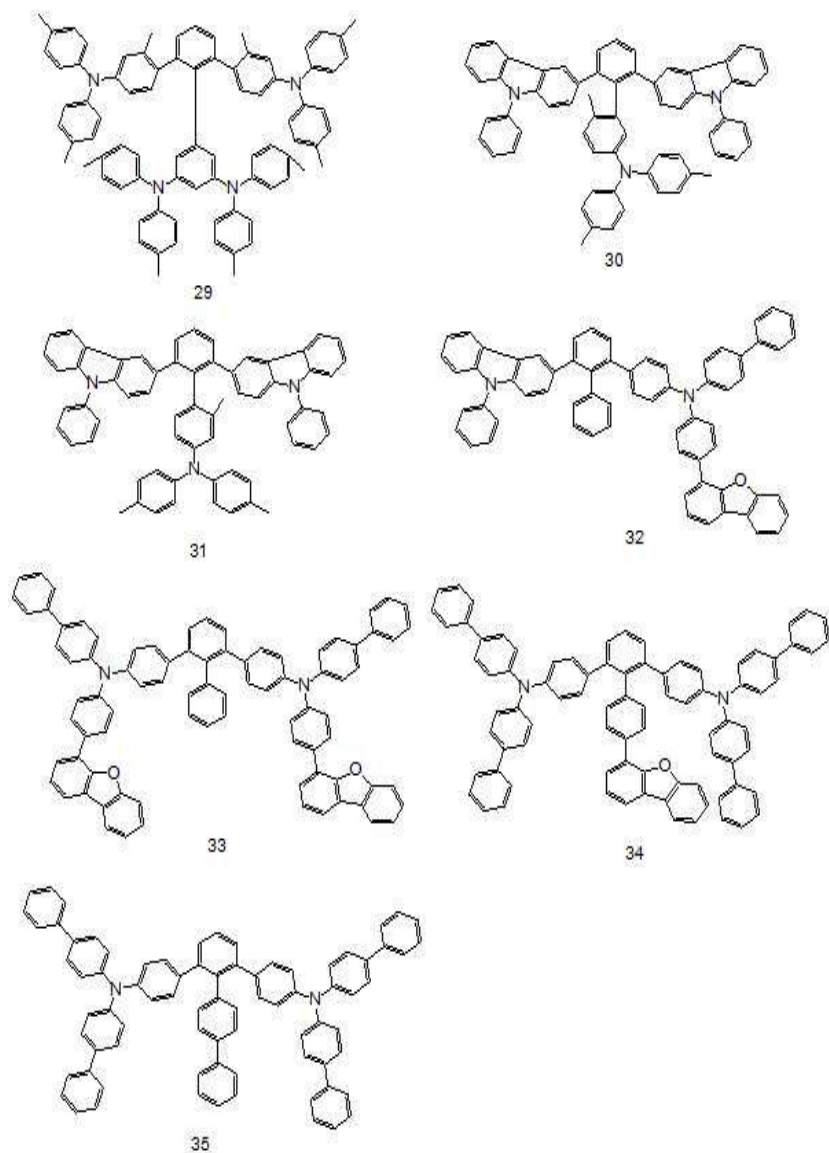
[0054]



[0055]



[0056]



[0057]

[0058]

본 발명의 다른 하나의 측면에 따르면, 상기 유기전계발광소자용 화합물을 포함하는 유기전계발광소자가 제공될 수 있다.

[0059]

본 발명의 다른 또 하나의 측면에 따르면, 제1전극, 제2전극 및 제1전극과 제2전극 사이에 단수 또는 복수의 유기물층을 포함하는 유기전계발광소자에 있어서,

[0060]

상기 단수 또는 복수의 유기물층 중에서 선택된 1종 이상의 유기물층은 제1항에 따른 유기전계발광소자용 화합물을 포함하는 것을 특징으로 하는 유기전계발광소자가 제공될 수 있다.

[0061]

본 발명의 하나의 실시예에 따르면, 상기 단수 또는 복수의 유기물층은 발광층을 포함할 수 있다.

[0062]

상기 복수의 유기물층은 발광층을 포함하고, 상기 복수의 유기물층은 전자주입층, 전자수송층, 정공차단층, 전자차단층, 정공수송층 및 정공주입층 중에서 선택된 1종 이상을 추가로 포함할 수 있다.

[0063]

상기 발광층은 호스트와 도펀트를 포함할 수 있다.

발명의 효과

[0064]

본 발명의 하나의 실시예에 따르면, 중심 벤젠고리에 두개의 페닐기를 서로 메타(meta)위치에 결합시키고, 상기 페닐기의 메타 위치에 디아릴아민을 결합하여 공액길이(conjugation length)를 짧게 하여 우수한 HOMO와 LUMO 에너지 준위를 실현하였으며, HOMO와 LUMO를 분리하여 높은 삼중항 에너지를 갖는 유기전계발광소자용 화합물을 얻을 수 있다.

[0065]

또한 본 발명은 이와 같은 화합물을 이용함으로써 유기전계발광소자의 열 안정성 및 발광 효율을 개선하고, 발

광층과 접촉하는 정공 수송층 물질로 본 발명의 화합물을 이용하여, 인광성 발광 물질의 삼중항 에너지를 높여 유기전계발광소자의 효율을 개선할 수 있다.

도면의 간단한 설명

[0066] 도 1은 본 발명의 하나의 실시예에 따른 유기전계발광소자의 단면도를 나타낸 도면이다.

도 2는 본 발명의 하나의 실시예에 따른 유기전계발광소자의 단면도를 나타낸 사진이다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

[0067] 본 발명은 다양한 변환을 가할 수 있고 여러 가지 실시예를 가질 수 있는 바, 특정 실시예들을 예시하고 상세한 설명에 상세하게 설명하고자 한다. 그러나, 이는 본 발명을 특정한 실시 형태에 대해 한정하려는 것이 아니며, 본 발명의 사상 및 기술 범위에 포함되는 모든 변환, 균등물 내지 대체물을 포함하는 것으로 이해되어야 한다. 본 발명을 설명함에 있어서 관련된 공지 기술에 대한 구체적인 설명이 본 발명의 요지를 흐릴 수 있다고 판단되는 경우 그 상세한 설명을 생략한다.

[0068] 또한, 이하에서 사용될 제1, 제2 등과 같이 서수를 포함하는 용어는 다양한 구성요소들을 설명하는데 사용될 수 있지만, 상기 구성요소들은 상기 용어들에 의해 한정되지는 않는다. 상기 용어들은 하나의 구성요소를 다른 구성요소로부터 구별하는 목적으로만 사용된다. 예를 들어, 본 발명의 권리 범위를 벗어나지 않으면서 제1 구성요소는 제2 구성요소로 명명될 수 있고, 유사하게 제2 구성요소도 제1 구성요소로 명명될 수 있다.

[0069] 또한, 어떤 구성요소가 다른 구성요소 상에 "형성되어" 있다거나 "적층되어" 있다고 언급된 때에는, 그 다른 구성요소의 표면 상의 전면 또는 일면에 직접 부착되어 형성되어 있거나 적층되어 있을 수도 있지만, 중간에 다른 구성요소가 더 존재할 수도 있다고 이해되어야 할 것이다.

[0070] 단수의 표현은 문맥상 명백하게 다르게 뜻하지 않는 한, 복수의 표현을 포함한다. 본 출원에서, "포함하다" 또는 "가지다" 등의 용어는 명세서상에 기재된 특징, 숫자, 단계, 동작, 구성요소, 부품 또는 이들을 조합한 것이 존재함을 지정하려는 것이지, 하나 또는 그 이상의 다른 특징들이나 숫자, 단계, 동작, 구성요소, 부품 또는 이들을 조합한 것들의 존재 또는 부가 가능성을 미리 배제하지 않는 것으로 이해되어야 한다.

[0071] 본 명세서에서 "원자가결합"이란 별도의 정의가 없는 한, 단일결합, 이중결합 또는 삼중결합을 의미한다.

[0072] 본 명세서에서 "치환"이란 별도의 정의가 없는 한, 치환기 또는 화합물 중의 적어도 하나의 수소가 중수소, 할로젠기, 히드록시기, 아미노기, C1 내지 C30 아민기, 니트로기, C1 내지 C30 실릴기, C1 내지 C30 알킬기, C1 내지 C30 알킬실릴기, C3 내지 C30 시클로알킬기, C1 내지 C30 헤테로시클로알킬기, C6 내지 C30 아릴기, C1 내지 C30 헤테로 아릴기, C1 내지 C20 알콕시기, C1 내지 C10 트리플루오로알킬기 또는 시아노기로 치환된 것을 의미한다.

[0073] 또한 상기 치환된 할로젠기, 히드록시기, 아미노기, C1 내지 C30 아민기, C3 내지 C30 실릴기, C1 내지 C30 알킬기, C1 내지 C30 알킬실릴기, C3 내지 C30 시클로알킬기, C6 내지 C30 아릴기, C1 내지 C20 알콕시기, C1 내지 C10 트리플루오로알킬기 또는 시아노기 중 인접한 두 개의 치환기가 융합되어 고리를 형성할 수도 있다.

[0074] 본 명세서에서 "헤테로"란 별도의 정의가 없는 한, 하나의 작용기 내에 N, O, S 및 P로 이루어진 군에서 선택되는 헤테로 원자를 1 내지 4개 함유하고, 나머지는 탄소인 것을 의미한다.

[0075] 본 명세서에서 "이들의 조합"이란 별도의 정의가 없는 한, 둘 이상의 치환기가 연결기로 결합되어 있거나, 둘 이상의 치환기가 축합하여 결합되어 있는 것을 의미한다.

[0076] 본 명세서에서 "수소"란 별도의 정의가 없는 한, 일중수소, 이중수소, 또는 삼중수소를 의미한다.

[0077] 본 명세서에서 "알킬(alkyl)기"란 별도의 정의가 없는 한, 지방족 탄화수소기를 의미한다.

[0078] 알킬기는 어떠한 이중결합이나 삼중결합을 포함하고 있지 않은 "포화 알킬(saturated alkyl)기"일 수 있다.

[0079] 알킬기는 적어도 하나의 이중결합 또는 삼중결합을 포함하고 있는 "불포화 알킬(unsaturated alkyl)기"일 수도 있다.

[0080] "알케닐렌(alkenylene)기"는 적어도 두 개의 탄소원자가 적어도 하나의 탄소-탄소 이중 결합으로 이루어진 작용기를 의미하며, "알키닐렌(alkynylene)기"는 적어도 두 개의 탄소원자가 적어도 하나의 탄소-탄소 삼중 결합으로 이루어진 작용기를 의미한다.

로 이루어진 작용기를 의미한다. 포화이든 불포화이든 간에 알킬기는 분지형, 직쇄형 또는 환형일 수 있다.

[0081] 알킬기는 C1 내지 C30 알킬기일 수 있다. 보다 구체적으로 알킬기는 C1 내지 C20 알킬기, C1 내지 C10 알킬기 또는 C1 내지 C6 알킬기일 수도 있다.

[0082] 예를 들어, C1 내지 C4 알킬기는 알킬쇄에 1 내지 4 개의 탄소원자, 즉, 알킬쇄는 메틸, 에틸, 프로필, 이소-프로필, n-부틸, 이소-부틸, sec-부틸 및 t-부틸로 이루어진 군에서 선택됨을 나타낸다.

[0083] 구체적인 예를 들어 상기 알킬기는 메틸기, 에틸기, 프로필기, 이소프로필기, 부틸기, 이소부틸기, t-부틸기, 펜틸기, 헥실기, 에테닐기, 프로페닐기, 부테닐기, 시클로프로필기, 시클로부틸기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기 등을 의미한다.

[0084] "아민기"는 아릴아민기, 알킬아민기, 아릴알킬아민기, 또는 알킬아릴아민기를 포함한다.

[0085] "시클로알킬(cycloalkyl)기"는 모노시클릭 또는 융합고리 폴리시클릭(즉, 탄소원자들의 인접한 쌍들을 나뉘 가지는 고리) 작용기를 포함한다.

[0086] "헤테로시클로알킬(heterocycloalkyl)기"는 시클로알킬기 내에 N, O, S 및 P로 이루어진 군에서 선택되는 헤테로원자를 1 내지 4개 함유하고, 나머지는 탄소인 것을 의미한다. 상기 헤테로시클로알킬기가 융합고리인 경우, 적어도 하나의 고리가 상기 헤테로 원자를 1 내지 4개 포함할 수 있다.

[0087] "방향족(aromatic)기"는 고리 형태인 작용기의 모든 원소가 p-오비탈을 가지고 있으며, 이들 p-오비탈이 공액(conjugation)을 형성하고 있는 작용기를 의미한다. 구체적인 예로 아릴기와 헤테로아릴기가 있다.

[0088] "아릴(aryl)기"는 모노시클릭 또는 융합 고리 폴리시클릭(즉, 탄소원자들의 인접한 쌍들을 나뉘 가지는 고리) 작용기를 포함한다.

[0089] "헤테로아릴(heteroaryl)기"는 아릴기 내에 N, O, S 및 P로 이루어진 군에서 선택되는 헤테로원자를 1 내지 4개 함유하고, 나머지는 탄소인 것을 의미한다. 상기 헤테로아릴기가 융합고리인 경우, 적어도 하나의 고리가 상기 헤테로 원자를 1 내지 4개 포함할 수 있다.

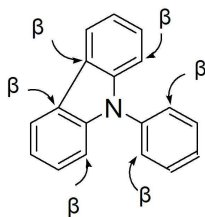
[0090] 아릴기 및 헤테로아릴기에서 고리의 원자수는 탄소수 및 비탄소원자수의 합이다.

[0091] "알킬아릴기" 또는 "아릴알킬기"와 같이 조합하여 사용할 때, 상기에 든 각각의 알킬 및 아릴의 용어는 상기 나타낸 의미와 내용을 가진다.

[0092] "아릴알킬기"이란 용어는 벤질과 같은 아릴 치환된 알킬 라디칼을 의미하며 알킬기에 포함된다.

[0093] "알킬아릴기"이란 용어는 알킬 치환된 아릴 라디칼을 의미하며 아릴기에 포함된다.

[0094] 어떤 원자의 " β 위치의 탄소원자"는 그 어떤 원자가 결합된 다른 원자와 이웃하는 탄소원자를 말한다. 예를 들어 질소원자의 β 위치의 탄소원자는 아래 구조식에서 화살표로 가리키는 탄소원자이다.

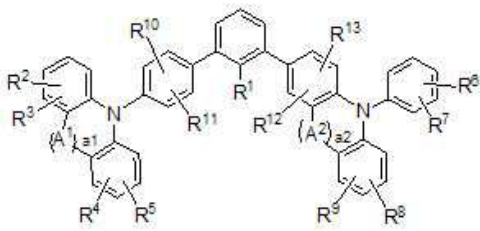


[0095]

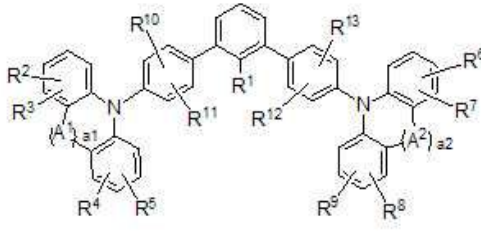
[0096] 이하, 본 발명의 실시예를 첨부도면을 참조하여 설명하기로 하며, 첨부 도면을 참조하여 설명함에 있어, 동일하거나 대응하는 구성 요소는 동일한 도면번호를 부여하고 이에 대한 중복되는 설명은 생략하기로 한다.

[0097] 본 발명의 하나의 측면에 따르면, 하기 구조식 1 내지 6 중 어느 하나로 표시되는 유기전계발광소자용 화합물이 제공된다.

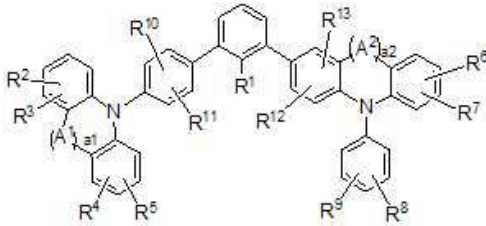
[구조식 1]



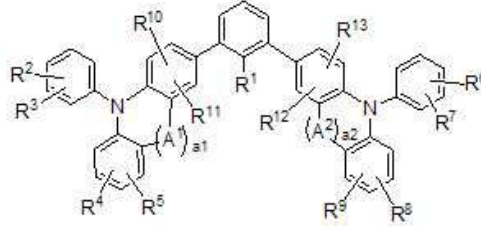
[구조식 2]



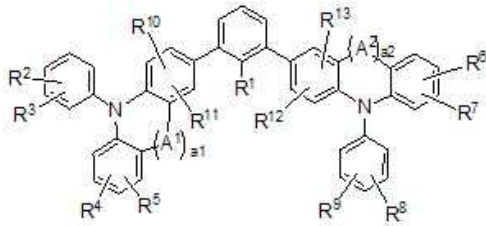
[구조식 3]



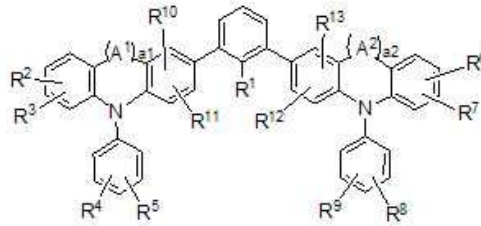
[구조식 4]



[구조식 5]



[구조식 6]



[0098]

[0099]

상기 구조식 1 내지 6에서,

[0100]

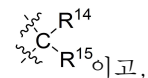
R^1 은 수소원자, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30의 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴기이고,

[0101]

R^2 내지 R^{13} 은 서로 같거나 다를 수 있고, R^2 내지 R^{13} 은 각각 독립적으로 수소원자, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30의 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴기이거나, 또는 R^2 내지 R^{13} 중 적어도 어느 하나는 그 어느 하나가 결합된 탄소원자의 이웃한 탄소원자와 추가로 결합하여 치환 또는 비치환된 융합된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 융합된 C1 내지 C30 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 융합된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 융합된 C1 내지 C30 헤테로아릴기를 형성할 수 있고,

[0102]

A^1 및 A^2 는 서로 같거나 다를 수 있고, A^1 및 A^2 는 각각 독립적으로 원자가 결합 또는



[0103]

R^{14} 및 R^{15} 는 서로 같거나 다를 수 있고, R^{14} 및 R^{15} 는 각각 독립적으로 수소원자 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30의 알킬기이고,

[0104]

a_1 은 0 또는 1이고,

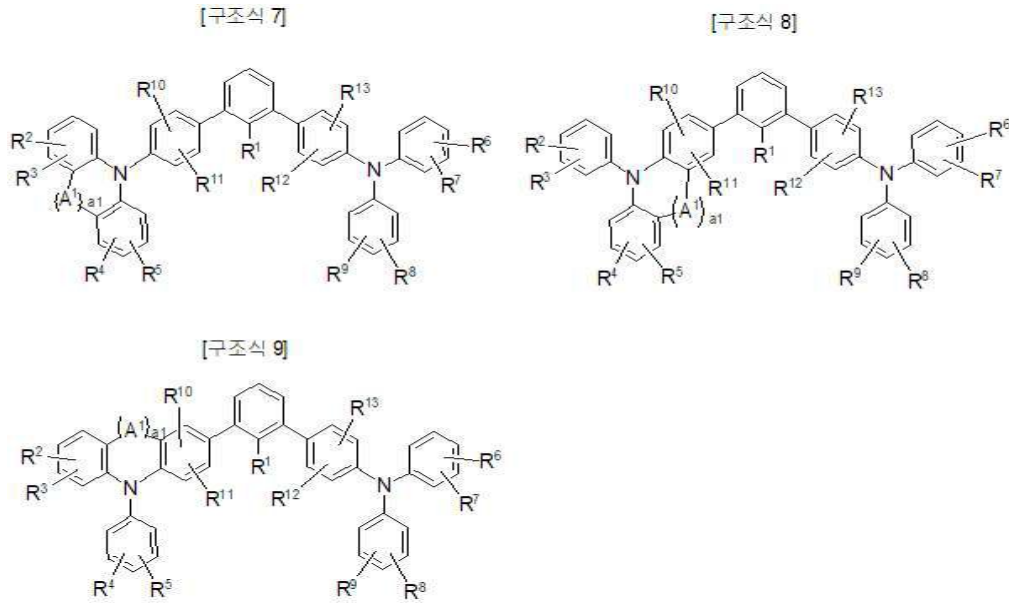
[0105]

a_2 는 0 또는 1이다.

[0106]

본 발명의 일 실시예에 따르면, 바람직하게는,

[0107] 상기 유기전계발광소자용 화합물은 하기 구조식 7 내지 9 중 어느 하나로 표시되고,



[0108]

[0109] 상기 구조식 7 내지 9에서,

[0110] R^1 은 수소원자, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30의 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴기이고,

[0111] R^2 내지 R^{13} 은 서로 같거나 다를 수 있고, R^2 내지 R^{13} 은 각각 독립적으로 수소원자, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30의 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴기이거나, 또는 R^2 내지 R^{13} 중 적어도 어느 하나는 그 어느 하나가 결합된 탄소원자의 이웃한 탄소원자와 추가로 결합하여 치환 또는 비치환된 융합된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 융합된 C1 내지 C30 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 융합된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 융합된 C1 내지 C30 헤테로아릴기를 형성할 수 있고,

[0112] A^1 은 원자가 결합 또는  이고,

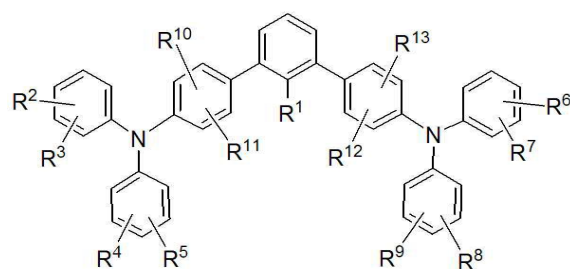
[0113] R^{14} 및 R^{15} 는 서로 같거나 다를 수 있고, R^{14} 및 R^{15} 는 각각 독립적으로 수소원자 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30의 알킬기이고,

[0114] a1은 0 또는 1일 수 있다.

[0115] 본 발명의 다른 또 하나의 실시예에 있어서, 바람직하게는,

[0116] 상기 유기전계발광소자용 화합물은 하기 구조식 10으로 표시되고,

[0117] [구조식 10]



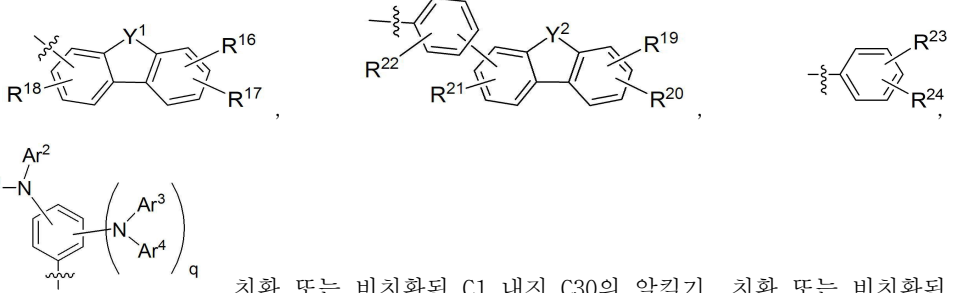
[0118]

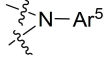
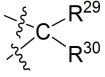
[0119] 상기 구조식 10에서,

[0120] R^1 은 수소원자, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30의 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴기이고,

[0121] R^2 내지 R^{13} 은 서로 같거나 다를 수 있고, R^2 내지 R^{13} 은 각각 독립적으로 수소원자, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30의 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴기이거나, 또는 R^2 내지 R^{13} 중 적어도 어느 하나는 그 어느 하나가 결합된 탄소원자의 이웃한 탄소원자와 추가로 결합하여 치환 또는 비치환된 융합된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 융합된 C1 내지 C30 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 융합된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 융합된 C1 내지 C30 헤테로아릴기를 형성하는 것일 수 있다.

[0122] 본 발명의 다른 또 하나의 실시예에 따르면, 바람직하게는,

[0123] R^1 은 수소원자, , 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30의 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로시클로알킬기이고,

[0124] Y^1 및 Y^2 는 서로 같거나 다를 수 있고, Y^1 및 Y^2 는 각각 독립적으로 산소원자, 황원자,  또는  이고,

[0125] Ar^5 는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30의 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴기이고,

[0126] R^{29} 및 R^{30} 은 서로 같거나 다를 수 있고, R^{29} 및 R^{30} 은 각각 독립적으로 수소원자, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30의 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴기이고,

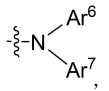
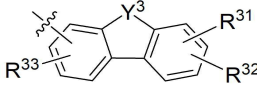
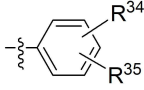
[0127] Ar^1 내지 Ar^4 는 서로 같거나 다를 수 있고, Ar^1 내지 Ar^4 는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30의 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴기이거나, 또는 Ar^1 과 Ar^2 , 및 Ar^3 과 Ar^4 는 각각 서로 결합하여 그들 사이의 질소원자와 함께 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로시클로알킬기, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴기를 형성하거나, 또는 Ar^1 내지 Ar^4 중 적어도 어느 하나는 그 어느 하나가 결합된 질소원자의 β 위치의 탄소원자와 추가로 결합하여 치환 또는 비치환된 융합된 C1 내지 C30 헤테로시클로알킬기, 또는 치환 또는 비치환된 융합된 C1 내지 C30 헤테로아릴기를 형성할 수 있고,

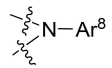
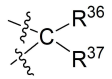
[0128] q 는 0 또는 1이고,

[0129] R^{16} 내지 R^{28} 은 서로 같거나 다를 수 있고, R^{16} 내지 R^{28} 은 각각 독립적으로 수소원자, 치환 또는 비치환된 C1 내

지 C30의 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴기일 수 있다.

[0130] 본 발명의 다른 또 하나의 실시예에 따르면, 바람직하게는,

[0131] R^2 내지 R^{13} 은 서로 같거나 다를 수 있고, R^2 내지 R^{13} 은 각각 독립적으로 수소원자, , , , 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30의 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로시클로알킬기이고,

[0132] Y^3 은 산소원자, 황원자, , 또는  이고,

[0133] Ar^8 은 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30의 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴기이고,

[0134] R^{36} 및 R^{37} 은 서로 같거나 다를 수 있고, R^{36} 및 R^{37} 은 각각 독립적으로 수소원자, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30의 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴기이고,

[0135] Ar^6 및 Ar^7 은 서로 같거나 다를 수 있고, Ar^6 및 Ar^7 은 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30의 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴기이거나, 또는 Ar^6 및 Ar^7 은 서로 결합하여 그들 사이의 질소원자와 함께 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로시클로알킬기, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴기를 형성하거나, 또는 Ar^6 및 Ar^7 중 적어도 어느 하나는 그 어느 하나가 결합된 질소원자의 β 위치의 탄소원자와 추가로 결합하여 치환 또는 비치환된 융합된 C1 내지 C30 헤테로시클로알킬기, 또는 치환 또는 비치환된 융합된 C1 내지 C30 헤테로아릴기를 형성할 수 있고,

[0136] R^{31} 내지 R^{35} 은 서로 같거나 다를 수 있고, R^{31} 내지 R^{35} 은 각각 독립적으로 수소원자, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30의 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴기일 수 있다.

[0137] 본 발명의 다른 또 하나의 실시예에 따르면, 바람직하게는,

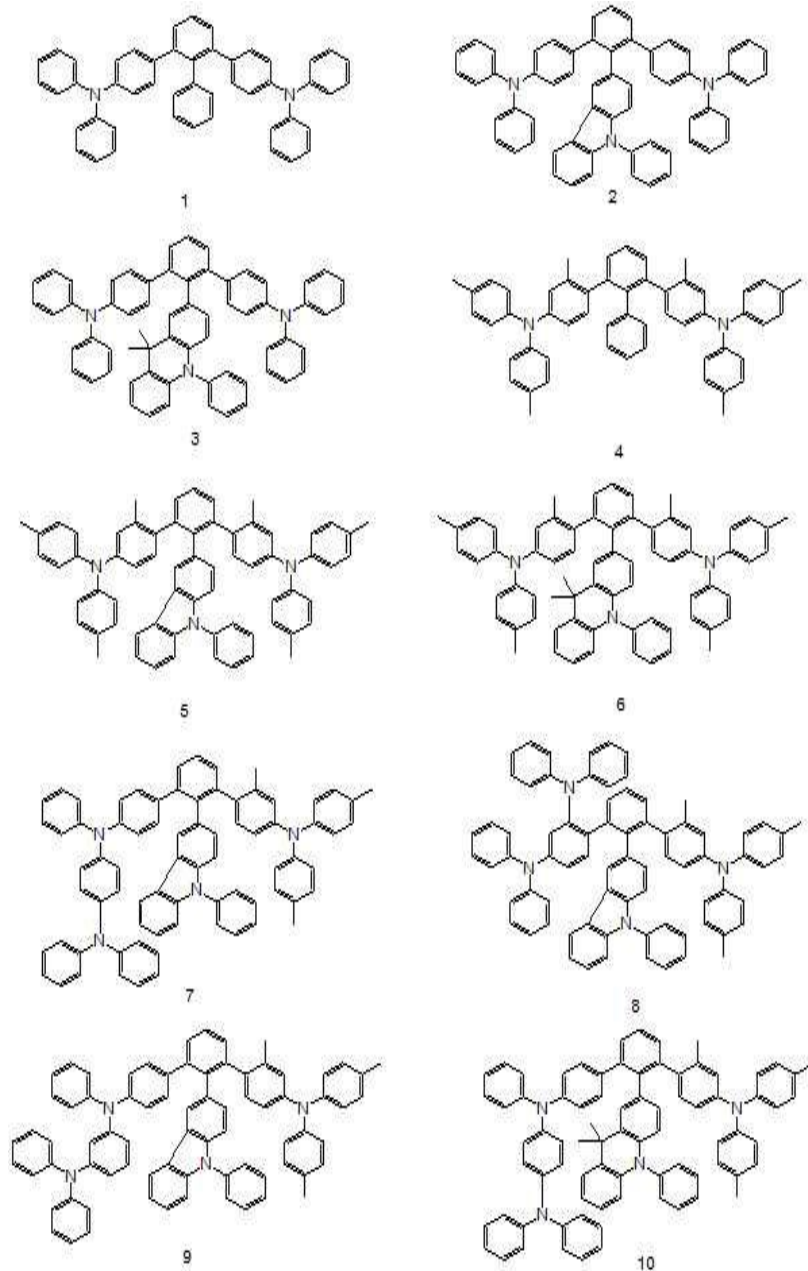
[0138] Ar^6 및 Ar^7 은 서로 같거나 다를 수 있고, Ar^6 및 Ar^7 은 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30의 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴기일 수 있다.

[0139] 상기 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기의 예는 치환 또는 비치환된 페닐기, 치환 또는 비치환된 바이페닐기, 치환 또는 비치환된 터페닐기, 치환 또는 비치환된 나프탈레닐기, 치환 또는 비치환된 안트라세닐기, 치환 또는 비치환된 페난트레닐기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐기, 치환 또는 비치환된 스파이로플루오레닐기, 치환 또는 비치환된 파이레닐기, 또는 치환 또는 비치환된 페릴레닐기일 수 있다.

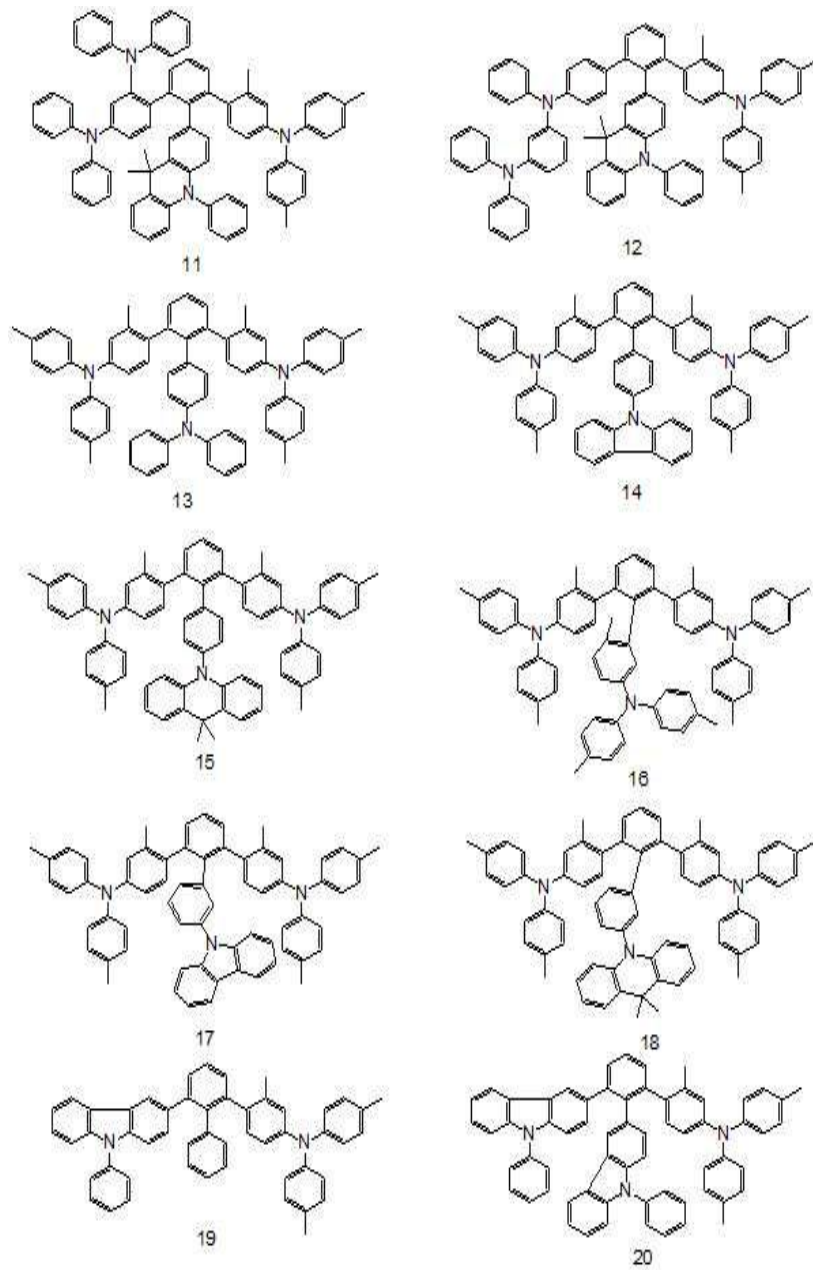
[0140] 상기 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴기의 예는 치환 또는 비치환된 피리디닐기, 치환 또는 비치환된 피리미디닐기, 치환 또는 비치환된 트리아지닐기, 치환 또는 비치환된 싸이오페닐기, 치환 또는 비치환된 피롤릴기, 치환 또는 비치환된 벤조싸이오페닐기, 치환 또는 비치환된 인돌릴기, 치환 또는 비치환된 이미다조[1,2-a]피리디닐기, 치환 또는 비치환된 벤지이미다졸릴기, 치환 또는 비치환된 인다졸릴기, 치환 또는 비치환된 페노티아지닐기, 치환 또는 비치환된 페나지닐기, 치환 또는 비치환된 카바졸릴기, 치환 또는 비치환된 디벤

조싸이오펜기, 치환 또는 비치환된 이미다졸릴기, 치환 또는 비치환된 트리아졸릴기, 치환 또는 비치환된 테트라졸릴기, 치환 또는 비치환된 옥사다리아졸릴기, 치환 또는 비치환된 옥사트리아졸릴기, 치환 또는 비치환된 싸이아트리아졸릴기, 치환 또는 비치환된 벤조트리아졸릴기, 치환 또는 비치환된 피라지닐기, 치환 또는 비치환된 피리다지닐기, 치환 또는 비치환된 퓨리닐기, 치환 또는 비치환된 퀴놀리닐기, 치환 또는 비치환된 이소퀴놀리닐기, 치환 또는 비치환된 프탈라지닐기, 치환 또는 비치환된 나프피리디닐기, 치환 또는 비치환된 퀴녹살리닐기, 치환 또는 비치환된 퀴나졸리닐기, 치환 또는 비치환된 아크리디닐기, 또는 치환 또는 비치환된 페난트롤리닐기, 바람직하게는 치환 또는 비치환된 피리디닐기, 치환 또는 비치환된 피리미디닐기, 치환 또는 비치환된 트리아지닐기, 치환 또는 비치환된 싸이오펜기, 치환 또는 비치환된 피롤릴기, 치환 또는 비치환된 벤조싸이오펜기, 치환 또는 비치환된 인돌릴기, 치환 또는 비치환된 이미다조[1,2-a]피리디닐기, 치환 또는 비치환된 벤지이미다졸릴기, 치환 또는 비치환된 인다졸릴기, 치환 또는 비치환된 페노티아지닐기, 치환 또는 비치환된 페나지닐기, 치환 또는 비치환된 카바졸릴기, 또는 치환 또는 비치환된 디벤조싸이오펜기일 수 있다.

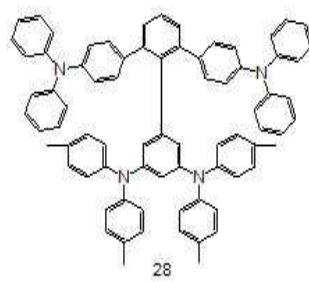
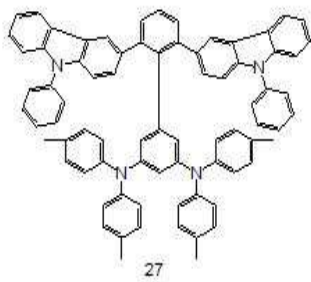
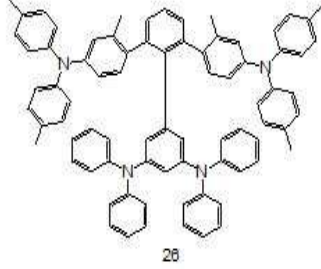
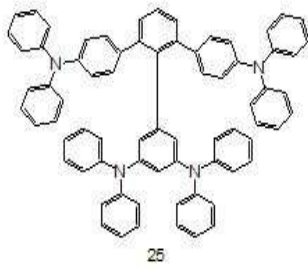
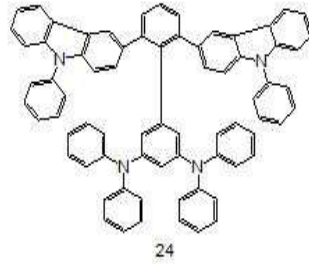
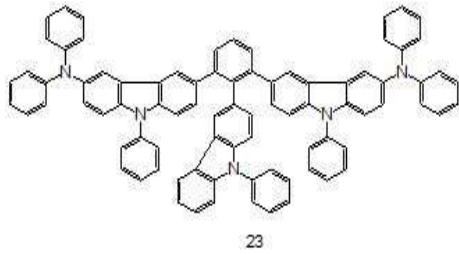
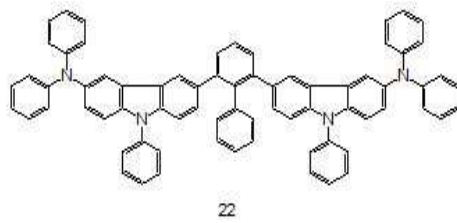
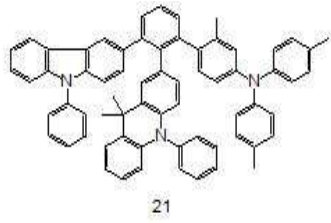
[0141] 본 발명의 다른 또 하나의 측면에 따르면, 하기 구조식으로 표시되는 화합물 1 내지 35 중에서 선택된 어느 하나인 유기전계발광소자용 화합물이 제공될 수 있다.



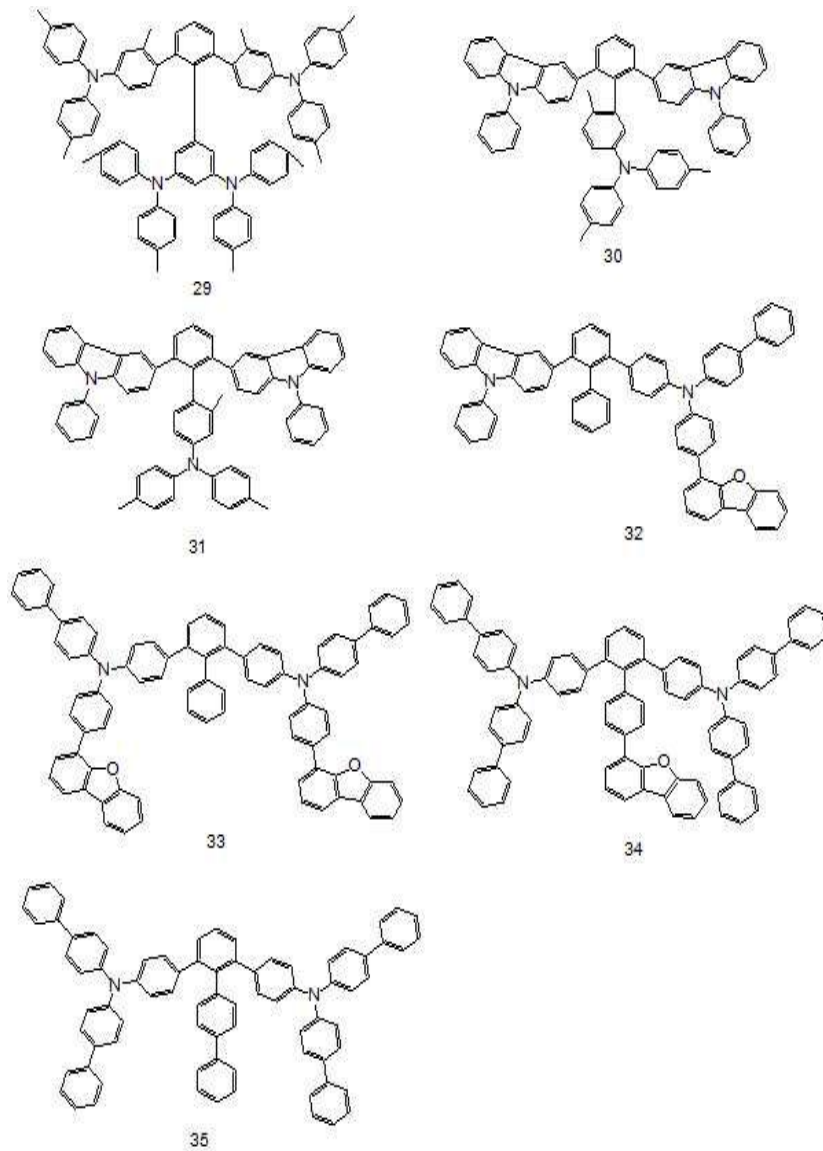
[0142]



[0143]



[0144]



[0145]

[0146]

도 1 및 2를 참고하면, 본 발명의 실시예에 따르면 본 발명에 따른 유기전계발광소자용 화합물을 포함하는 유기 전계발광소자(1)가 제공될 수 있다.

[0147]

본 발명의 다른 실시예에 따르면, 상기 유기전계발광소자는 제1전극(110); 제2전극(150); 및 상기 제1전극과 제2전극 사이에 단수 또는 복수의 유기물층(130)을 포함하며, 상기 단수 또는 복수의 유기물층(130) 중에서 선택된 1종 이상의 유기물층은 본 발명에 따른 유기발광소자용 화합물을 포함할 수 있다.

[0148]

여기서, 상기 단수 또는 복수의 유기물층(130)은 발광층(134)을 포함할 수 있다.

[0149]

또한 상기 복수의 유기물층(130)은 발광층(134)을 포함하고, 상기 복수의 유기물층은 전자주입층(131), 전자수송층(132), 정공차단층(133), 전자차단층(135), 정공수송층(136) 및 정공주입층(137) 중에서 선택된 1종 이상을 추가로 포함할 수 있다.

[0150]

상기 발광층(134)은 호스트와 도펀트를 포함할 수 있다.

[0151]

상기 유기전계발광소자는 바람직하게는 투명기판에 의하여 지지된다. 투명기판의 재료로는 양호한 기계적 강도, 열안정성 및 투명성을 갖는 한 특별한 제한은 없다. 구체적인 예를 들면, 유리, 투명 플라스틱 필름 등을 사용할 수 있다.

[0152]

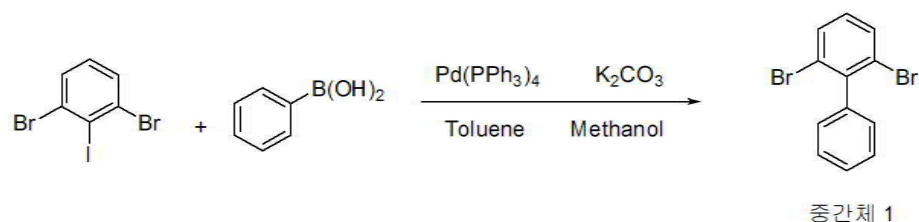
본 발명의 유기전계발광소자의 양극재료로서는 4eV 이상의 일함수를 갖는 금속, 합금, 전기전도성 화합물 또는 이의 혼합물을 사용할 수 있다. 구체적으로는 금속인 Au 또는 CuI, ITO(인듐 주석 산화물), SnO₂ 및 ZnO와 같은 투명 전도성 재료를 들 수 있다. 양극 필름의 두께는 10 내지 200nm 가 바람직하다.

- [0153] 본 발명의 유기전계발광소자의 음극 재료로서는 4eV 미만의 일함수를 갖는 금속, 합금, 전기 전도성 화합물 또는 이의 혼합물을 사용할 수 있다. 구체적으로는, Na, Na-K 합금, 칼슘, 마그네슘, 리튬, 리튬 합금, 인듐, 알루미늄, 마그네슘 합금, 알루미늄 합금을 들 수 있다. 이외에, 알루미늄/AlO₂, 알루미늄/리튬, 마그네슘/은 또는 마그네슘/인듐 등도 사용될 수 있다. 음극필름의 두께는 10 내지 200nm 가 바람직하다.
- [0154] 유기 EL 소자의 발광효율을 높이기 위해서는 하나 이상의 전극은 바람직하게는 10% 이상의 광투과율을 가지는 것이 바람직하다. 전극의 쉬트저항은 바람직하게는 수백 Ω/mm 이하이다. 전극의 두께는 10nm 내지 1μm, 보다 바람직하게는 10 내지 400nm 이다. 이러한 전극은 화학적 기상증착(CVD), 물리적 기상증착(PVD) 등의 기상증착법 또는 스퍼터링법을 통하여 상기한 전극 재료를 박막으로 형성하여 제조할 수 있다.
- [0155] 또한 본 발명의 목적에 적합하게 본 발명의 유기전계발광소자용 화합물이 사용될 때, 공지된 정공수송 물질, 정공주입 물질, 발광층 물질, 발광층의 호스트 물질, 전자수송 물질, 및 전자주입 물질이 상기 각각의 유기물층에서 단독으로 사용되거나 또는 본 발명의 유기전계발광소자용 화합물과 선택적으로 병행하여 사용될 수 있다.
- [0156] 정공 수송 물질로서 N,N-dicarbazolyl-3,5-benzene(mCP), poly(3,4-ethylenedioxythiophene):polystyrenesulfonate (PEDOT:PSS), N, N' -di(1-naphthyl)-N,N' -diphenylbenzidine(NPD), N,N'-디페닐-N,N'-디(3-메틸페닐)-4,4'-디아미노비페닐(TPD), N,N'-디페닐-N,N'-디나프틸-4,4'-디아미노비페닐, N,N,N',N'-테트라-p-톨릴-4,4'-디아미노비페닐, N,N,N',N'-테트라페닐-4,4'-디아미노비페닐, 코퍼(II)1,10,15,20-테트라페닐-21H,23H-포피린 등과 같은 포피린(porphyrin)화합물 유도체, 주쇄 또는 측쇄내에 방향족 3차아민을 갖는 중합체, 1,1-비스(4-디-p-톨릴아미노페닐)시클로헥산, N,N,N-트리(p-톨릴)아민, 4, 4', 4'-트리스[N-(3-메틸페닐)-N-페닐아미노]트리페닐아민과 같은 트리아릴아민 유도체, N-페닐카르바졸 및 폴리비닐카르바졸과 같은 카르바졸 유도체, 무금속 프탈로시아닌, 구리프탈로시아닌과 같은 프탈로시아닌 유도체, 스타버스트 아민 유도체, 엔아민스틸벤계 유도체, 방향족 삼급아민과 스티릴 아민 화합물의 유도체, 및 폴리실란 등을 들 수 있다.
- [0157] 전자 수송 물질로서 diphenylphosphine oxide-4-(triphenylsilyl)phenyl (TSP01), Alq₃, 2,5-디아릴 실롤 유도체(PyPySPyPy), 퍼플루오리네이트드 화합물(PF-6P), Octasubstituted cyclooctatetraene 화합물(COTs)을 들 수 있다.
- [0158] 본 발명의 유기전계발광소자에 있어서, 전자 주입층, 전자 수송층, 정공 수송층 및 정공 주입층은 상기한 화합물의 하나 이상의 종류를 함유하는 단일 층으로 형성되거나, 또는 상호 적층된, 상이한 종류의 화합물을 함유하는 복수의 층으로 구성될 수 있다.
- [0159] 발광재료로서 예를 들면 측광 형광재료, 형광증백제, 레이저 색소, 유기 신틸레이터 및 형광 분석용 시약을 들 수 있다. 구체적으로는, 카바졸계 화합물, 포스핀옥사이드계 화합물, 카바졸계 포스핀옥사이드 화합물, bis((3,5-difluoro-4-cyanophenyl)pyridine) iridium picolinate(FCNIrpic), tris(8-hydroxyquinoline) aluminum(Alq₃), 안트라센, 페난트렌, 피렌, 크리센, 페릴렌, 코로넨, 루브렌 및 퀴나크리돈과 같은 폴리아로마틱 화합물, 퀴터페닐과 같은 올리고페닐렌 화합물, 1,4-비스(2-메틸스티릴)벤젠, 1,4-비스(4-메틸스티릴)벤젠, 1,4-비스(4-메틸-5-페닐-2-옥사졸릴)벤젠, 1,4-비스(5-페닐-2-옥사졸릴)벤젠, 2,5-비스(5-t-부틸-2-벤즈옥사졸릴)사이오펜, 1,4-디페닐-1,3-부타디엔, 1,6-디페닐-1,3,5-헥사트리엔, 1,1,4,4-테트라페닐-1,3-부타디엔과 같은 액체신틸레이션용 신틸레이터, 옥신 유도체의 금속착체, 쿠마린 색소, 디시아노메틸렌피란 색소, 디시아노메틸렌사이오피란 색소, 폴리메틴 색소, 옥소벤즈안트라센 색소, 크산텐 색소, 카르보스티릴 색소, 페릴렌 색소, 옥사진 화합물, 스티벤 유도체, 스피로 화합물, 옥사디아졸 화합물 등을 들 수 있다.
- [0160] 본 발명의 유기 EL 소자를 구성하는 각 층은 진공 증착, 스핀 코팅 또는 캐스팅과 같은 공지된 방법을 통하여 박막으로 형성시키거나, 각 층에서 사용되는 재료를 이용하여 제조할 수 있다. 이들 각층의 막두께에 대해서는 특별한 제한은 없으며, 재료의 특성에 따라 알맞게 선택할 수 있으나, 보통 2nm 내지 5,000nm의 범위에서 결정될 수 있다.
- [0161] 본 발명의 따른 유기전계발광소자용 화합물은 진공 증착법에 의하여 형성될 수 있으므로, 박막 형성 공정이 간편하고, 핀홀(pin hole)이 거의 없는 균질한 박막으로 용이하게 얻을 수 있는 장점이 있다.
- [0162] 이하, 실시예를 통하여 본 발명에 따른 유기전계발광소자용 화합물 및 이를 포함하는 유기전계발광소자의 제조 방법을 더욱 구체적으로 설명한다. 그러나 이는 예시를 위한 것으로서 이에 의하여 본 발명의 범위가 한정되는

것이 아니다.

[0163] [실시예]

[0164] 제조예 1. 중간체 1의 합성

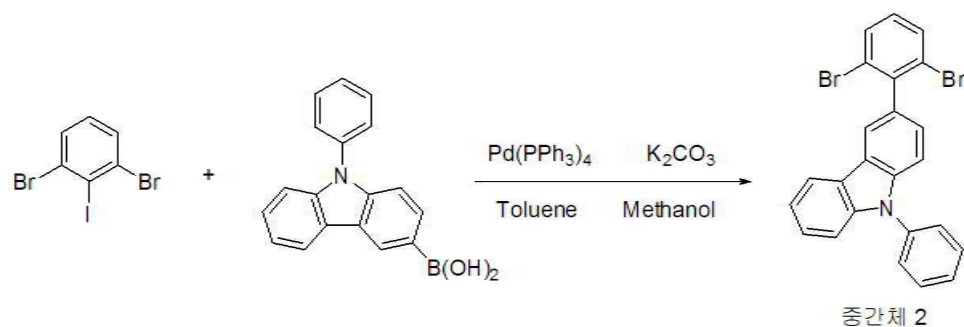


[0165]

[0166] 질소 분위기 하의 250ml 둥근 바닥 3구 플라스크에 1,3-디브로모-2-아이오도벤젠 6g, 페닐보론산 2.2g, 테트라키스 트리페닐포스핀 팔라듐(0) 1.5g, 탄산칼륨 4.6g, 톨루엔 60ml와 메탄올 20ml를 넣고, 65℃로 4시간 교반하였다. 반응액을 냉각 후 디클로로메탄과 물로 추출하고, 추출된 용액을 농축하였다. 디클로로메탄과 n-헥산 혼합용매로 컬럼크로마토그래피 실시한 용액을 농축하여 중간체 1인 2,6-디브로모바이페닐 6.08g을 얻었다. (수율 70%)

[0167] $^1\text{H NMR}(\text{CDCl}_3, 600\text{MHz}) \delta$ 7.64-7.62 (d, 2H), 7.47-7.44 (dd, 2H), 7.43-7.42 (d, 1H), 7.21-7.20 (dd, 2H), 7.08-7.04 (dd, 1H)

[0168] 제조예 2. 중간체 2의 합성

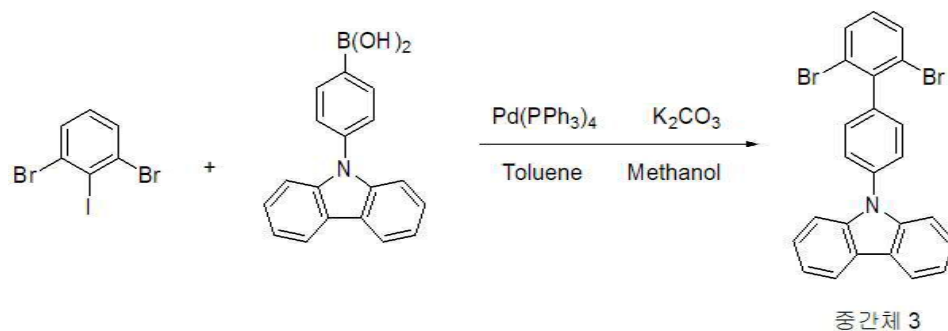


[0169]

[0170] 페닐보론산 대신 N-페닐카바졸-3-보론산 4.7g을 투입한 것을 제외하고는 제조예 1과 동일한 방법으로 중간체 2인 3-(2,6-디브로모페닐)-9-페닐-9H-카바졸 3.6g을 얻었다. (수율 56%)

[0171] $^1\text{H NMR}(\text{CDCl}_3, 600\text{MHz}) \delta$ 8.13-8.12 (d, 1H), 7.98 (s, 1H), 7.68-7.66 (d, 2H), 7.63-7.60 (m, 4H), 7.49-7.47 (m, 2H), 7.42-7.40 (m, 2H), 7.33-7.23 (m, 2H), 7.10-7.071 (dd, 1H)

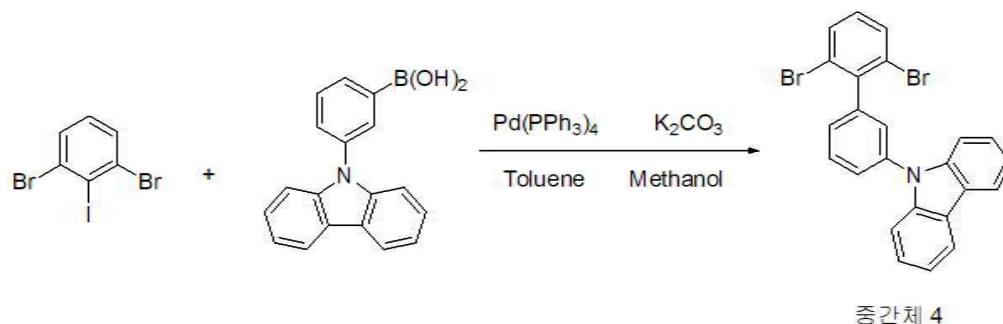
[0172] 제조예 3. 중간체 3의 합성



[0173]

[0174] 페닐보론산 대신 4-(9H-카바졸-9-일)-페닐보론산 4.7g을 사용한 것을 제외하고는 제조예 3와 동일한 방법으로 중간체 3인 9-(2',6'-디브로모비페닐-4-일)-9H-카바졸 3.5g을 얻었다. (수율 44%)

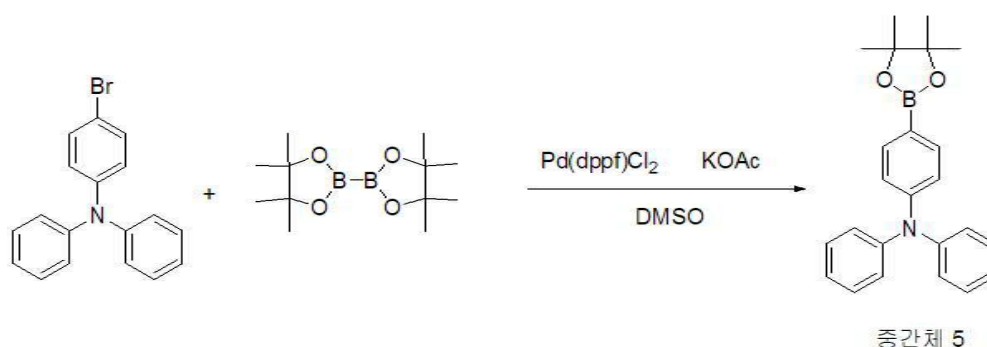
[0175] 제조예 4. 중간체 4의 합성



[0176]

[0177] 페닐보론산 대신 3-(9H-카바졸-9-일)-페닐보론산 4.7g을 사용한 것을 제외하고는 제조예 2와 동일한 방법으로 중간체 4인 9-(2',6'-디브로모비페닐-3-일)-9H-카바졸 3.5g을 얻었다. (수율 44%)

[0178] 제조예 5. 중간체 5의 합성

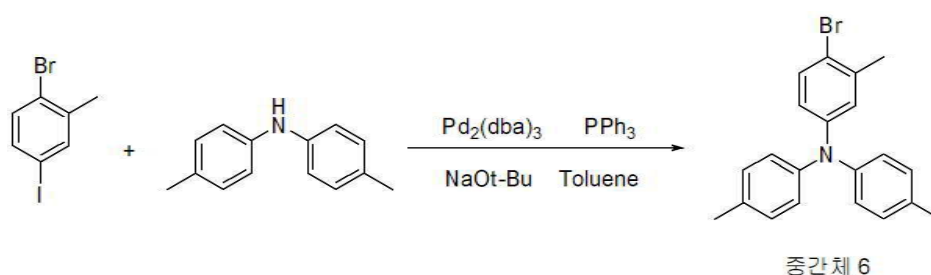


[0179]

[0180] 질소 분위기 하의 둥근바닥 3구 플라스크에 4-브로모-N,N-디페닐벤젠아민 10g, 비스피나콜레이트디보론 11.7g, 아세트산 칼륨 9.1g, [1,1'-비스(다이페닐포스포노페로센)다이클로로팔라듐(II)] 0.76 g 그리고 DMSO 100 ml를 넣고 80℃로 10시간 교반하였다. 반응액을 냉각 후 디클로로메탄과 물로 추출하고, 추출된 용액을 농축하였다. 디클로로메탄과 n-헥산 혼합용매로 컬럼크로마토그래피 실시한 용액을 농축하여 중간체 5인 N,N-디페닐-4-(4,4,5,5-테트라메틸-1,3,2-디옥사보롤란-2-일)벤젠아민 3.9g을 얻었다. (수율 38%)

[0181] $^1\text{H NMR}(\text{CDCl}_3, 600\text{MHz})$ δ 7.57 (s, 1H), 7.49-7.48 (d, 1H), 7.26-7.24 (dd, 1H), 7.22-7.20 (m, 4H), 7.17 (d, 1H), 7.07-7.03 (d 4H), 6.98-6.95 (dd, 2H), 1.31-1.28 (m, 12H)

[0182] 제조예 6. 중간체 6의 합성

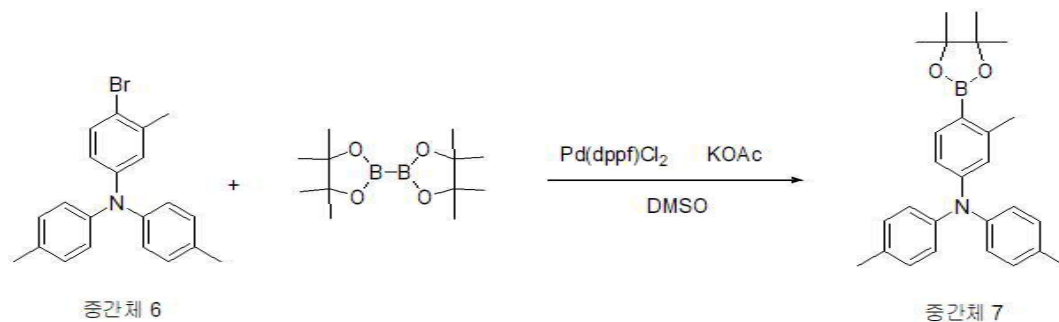


[0183]

[0184] 질소 분위기 하의 둥근바닥 3구 플라스크에 5-브로모-2-요오드 톨루엔 20 g, 다이페닐아민 12.6 g, t-부톡시 나트륨 19.4 g, 트리스(다이벤질리덴아세톤)다이팔라듐(0) 0.5 g, 트리페닐포스핀 0.3 g 그리고 톨루엔 200 ml을 둥근바닥 플라스크에 넣고 녹인 후에 온도를 80℃로 유지시켜주며 교반하였다. 반응기 끝난 용액을 디클로로메탄과 물로 추출하고, 농축한다. 디클로로메탄과 n-헥산으로 컬럼크로마토그래피 실시한 용액을 농축하여 중간체 6인 4-브로모-3-메틸-N,N-다이페닐벤젠아민 화합물 17g을 얻었다. (수율 74%)

[0185] $^1\text{H NMR}(\text{CDCl}_3, 600\text{MHz})$ δ 7.31-7.29 (d, 1H), 7.05-7.04 (d, 4H), 6.96-6.94 (d, 4H), 6.89 (s, 1H), 6.71-6.69 (dd, 1H)

[0186] 제조예 7. 중간체 7의 합성

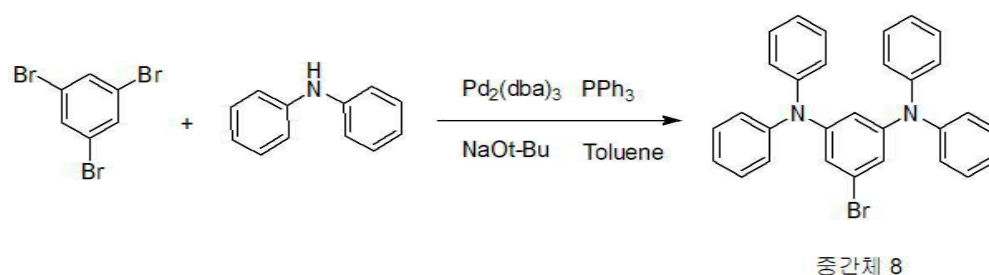


[0187]

[0188] 4-브로모-N,N-디페닐벤젠아민 대신 중간체 6을 투입한 것을 제외하고는 제조예 5와 동일한 방법으로 중간체 7인 3-메틸-4-(4,4,5,5-테트라메틸-1,3,2-디옥사보롤란-2-일)-N,N-디-p-톨릴벤젠아민 10g을 얻었다. (수율 52%)

[0189] $^1\text{H NMR}(\text{CDCl}_3, 600\text{MHz})$ δ 7.79-7.78 (d, 1H), 7.12-7.16 (dd, 1H), 7.06-6.94 (m, 9H), 2.31-2.20 (m, 9H)

[0190] 제조예 8. 중간체 8의 합성

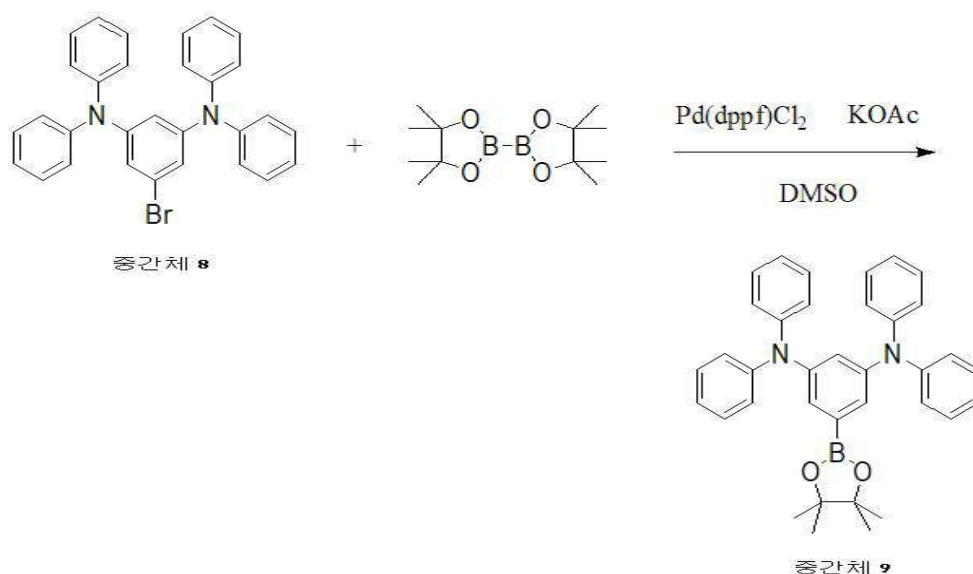


[0191]

[0192] 제조예 6과 동일한 방법으로 1,3,5-트리브로모벤젠 9 g과 디페닐아민 8 g을 사용하여 중간체 8인 3,5-비스(다이페닐아민)-1-브로모벤젠 5g을 얻었다. (수율 35 %)

[0193] $^1\text{H NMR}(\text{CDCl}_3, 600\text{MHz})$ δ 7.24-7.21 (t, 8H), 7.08-7.06 (d, 8H), 7.02-7.00 (t, 4H), 6.75-6.74 (d, 2H), 6.71-6.70 (d, 1H)

[0194] 제조예 9. 중간체 9의 합성



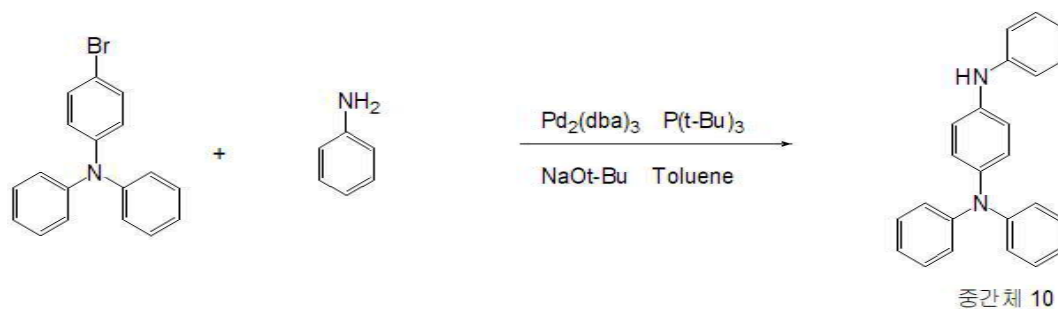
[0195]

[0196] 중간체 8인 3,5-비스(다이페닐아민)-1-브로모벤젠을 10g 사용한 것을 제외하고는 제조예 7과 동일한 방법으로 중간체 9인 3,5-비스(다이페닐아민)-1-브로모벤젠 5g을 얻었다. (수율 35 %)

[0197] $^1\text{H NMR}(\text{CDCl}_3, 600\text{MHz})$ δ 7.20-7.19 (d, 2H), 7.19-7.16 (t, 8H), 7.02-7.01 (d, 8H), 6.94-6.91 (m, 5H),

1.26 (s, 12H)

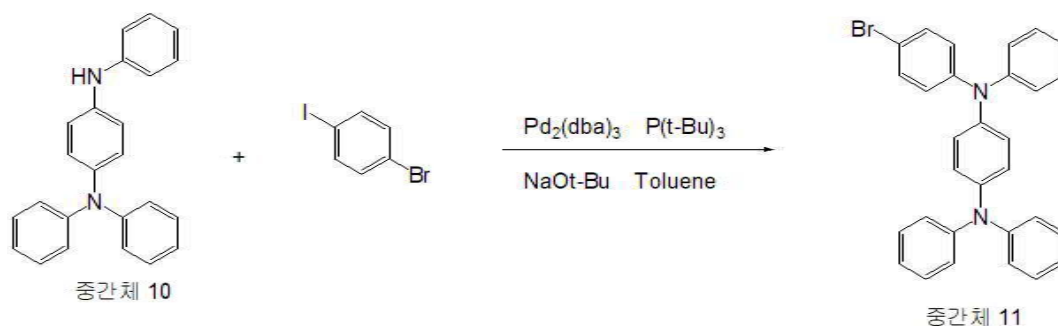
[0198] 제조예 10. 중간체 10의 합성



[0199]

[0200] 질소 분위기 하의 250ml 3구 둥근바닥 플라스크에 4-브로모-N,N-디페닐벤젠아민 10g, 아닐린 4.4g, t-부톡시 나트륨 6g, 트리스(다이벤질리덴아세톤)다이팔라듐(0) 0.8g, 트리스(t-부틸)포스핀 0.4g 그리고 톨루엔 100 ml을 넣고, 90℃로 12시간 교반한다. 반응액을 디클로로메탄으로 추출하고, 농축한다. 디클로로메탄과 n-헥산으로 컬럼크로마토그래피 실시한 용액을 농축하여 중간체 10인 N,N'-트리페닐벤젠-1,4-디아민 6.6g을 얻었다. (수율 65%)

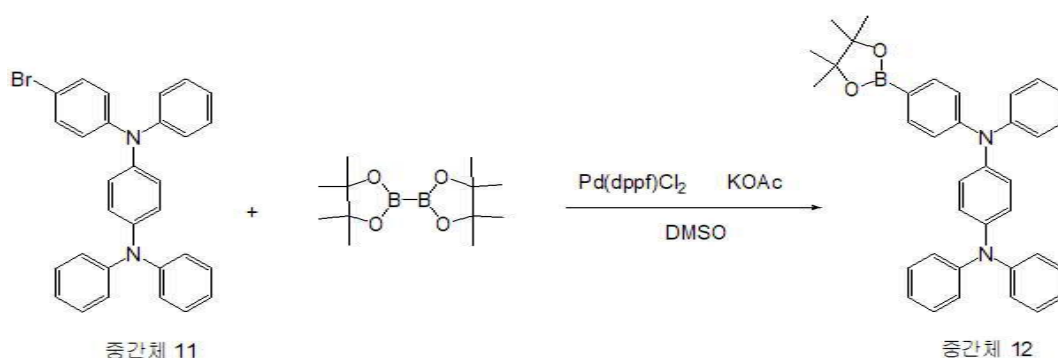
[0201] 제조예 11. 중간체 11의 합성



[0202]

[0203] 제조예 10과 동일한 방법으로 제조예 10에서 제조한 중간체 (10) 6.6g 과 4-브로모-요오드벤젠 10g을 넣고 반응하여 중간체 11인 N-(4-브로모)-N,N',N'-트리페닐벤젠-1,4-디아민 4.6g을 얻었다. (수율 50%)

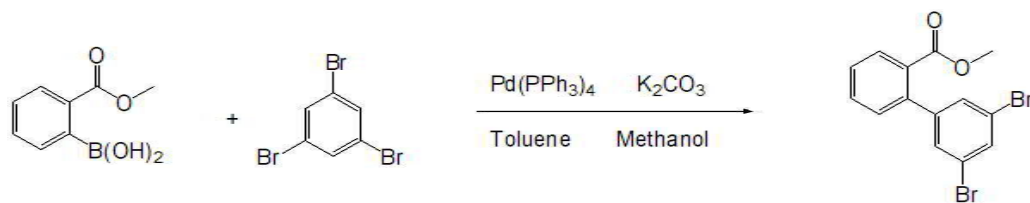
[0204] 제조예 12. 중간체 12의 합성



[0205]

[0206] 제조예 7과 동일한 방법으로 중간체 (11) 4.6g 을 넣고 반응하여 중간체 12인 N,N,N'-트리페닐-N'-(4-(4,4,5,5-테트라메틸-1,3,2-디옥사보롤란-2-일)-페닐)벤젠-1,4-디아민 2.2g을 얻었다. (수율 50%)

[0207] 제조예 13. 중간체 13의 합성



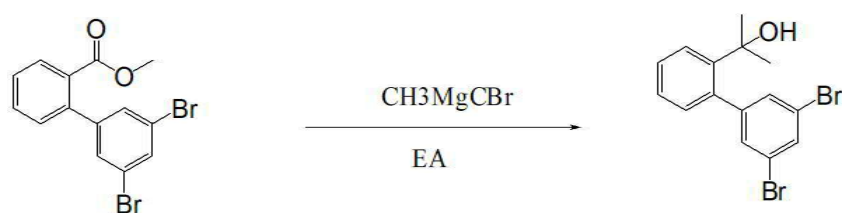
중간체 13

[0208]

[0209] 제조예 1과 동일한 방법으로 2-(메톡시카보닐)페닐보론산 10g과 1,3,5-트리브로모벤젠 19g 을 넣고 반응하여 중간체 13인 2-(메톡시카보닐-3',5'-디브로모바이페닐 11g을 얻었다. (수율 54%)

[0210] $^1\text{H NMR}(\text{CDCl}_3, 600\text{MHz}) \delta$ 7.91-7.88 (d, 1H), 7.65 (s, 1H), 7.54-7.52 (t, 1H), 7.46-7.44 (t, 1H), 7.39-7.38 (s, 2H), 7.30-7.29 (d, 1H)

[0211] 제조예 14. 중간체 14의 합성



중간체 13

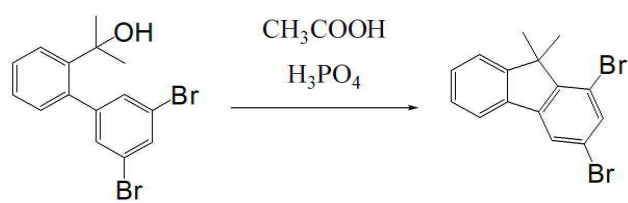
중간체 14

[0212]

[0213] 제조예 13에서 합성한 중간체(13)을 THF에 녹이고, THF에 3M로 희석된 메틸마그네슘브로마이드 40ml를 적가하고, 60℃로 12시간 교반한다. 냉각된 반응액을 에틸아세테이트와 물로 추출하고, 디메틸클로라이드와 n-헥산으로 컬럼크로마토그래피 실시하고 농축하여 중간체 14인 2-(3',5,-디브로모바이페닐-2-일)-프로판-2-올 11g을 얻었다. (수율 82%)

[0214] $^1\text{H NMR}(\text{CDCl}_3, 600\text{MHz}) \delta$ 7.64-7.60 (m, 2H), 7.40 (s, 2H), 7.37-7.34 (t, 1H), 7.25-7.23 (m, 1H), 7.01 (d, 1H), 1.50 (s, 1H)

[0215] 제조예 15. 중간체 15의 합성



중간체 14

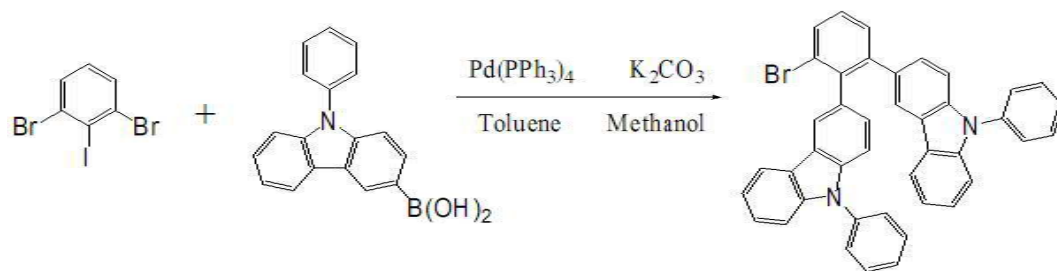
중간체 15

[0216]

[0217] 제조예 14에서 합성한 중간체(14)를 아세트산 200ml와 인산 300ml에 녹이고 120℃로 12시간 교반한다. 냉각된 반응액을 물로 세정하고, 에틸아세테이트로 추출하고 디메틸클로라이드와 n-헥산으로 컬럼크로마토그래피 실시하고 농축하여 중간체 15인 1,3-디브로모-9,9-디메틸-9H-플루오렌 5g을 얻었다. (수율 44%)

[0218] $^1\text{H NMR}(\text{CDCl}_3, 600\text{MHz}) \delta$ 7.79 (s, 1H), 7.65-7.64 (d, 1H), 7.593 (s, 1H), 7.43-7.42 (d, 1H), 7.40-7.32 (m, 2H), 1.62 (s, 6H)

[0219] 제조예 16. 중간체 16의 합성



중간체 16

[0220]

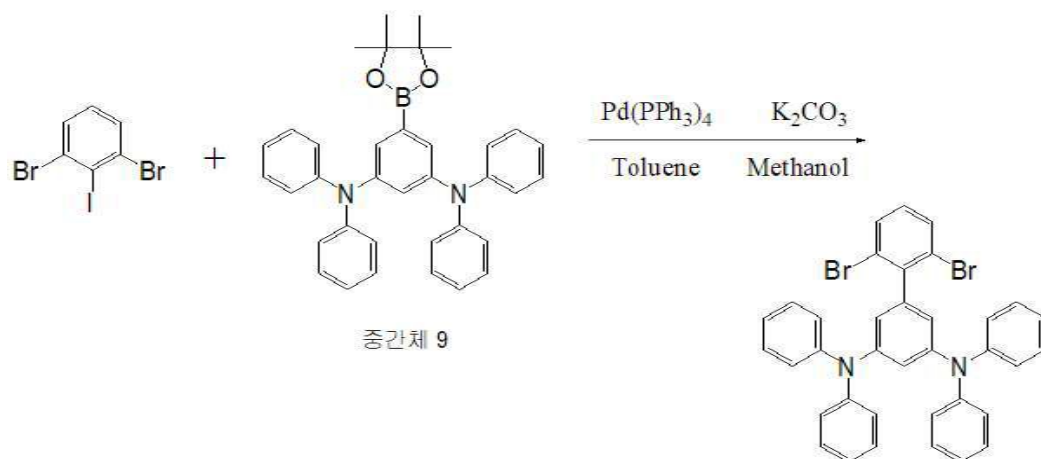
[0221] 제조예 2에서 N-페닐카바졸-3-보론산의 사용량 10g을 실시한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 중간체 16인 3,3'-(3-브로모-1,2-페닐렌)비스(9-페닐-9H-카바졸) 3.5g을 얻었다. (수율 33%)

[0222]

$^1\text{H NMR}(\text{CDCl}_3, 600\text{MHz}) \delta$ 8.02-8.01 (d, 1H), 7.97-7.96 (t, 3H), 7.74-7.73 (d, 1H), 7.53-7.49 (m, 7H), 7.45-7.39 (d, 2H), 7.38-7.30 (m, 7H), 7.23-7.19 (m, 3H), 7.16-7.14 (d, 1H), 7.08-7.04 (m, 2H)

[0223]

제조예 17. 중간체 17의 합성



중간체 17

[0224]

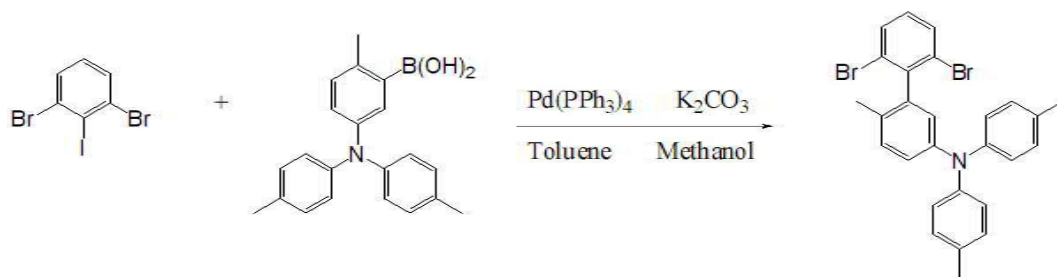
[0225] 제조예 2에서 페닐보론산 대신 제조예 9에서 합성된 중간체 (9)를 8.2g을 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 중간체 17인 3,3'-(3-브로모-1,2-페닐렌)비스(9-페닐-9H-카바졸) 3g을 얻었다. (수율 30%)

[0226]

$^1\text{H NMR}(\text{CDCl}_3, 600\text{MHz}) \delta$ 7.54-7.47 (d, 2H), 7.21-7.19 (m, 8H), 7.14-7.09 (m, 8H), 6.83-6.82 (t, 1H), 6.54-6.52 (d, 2H)

[0227]

제조예 18. 중간체 18의 합성



중간체 18

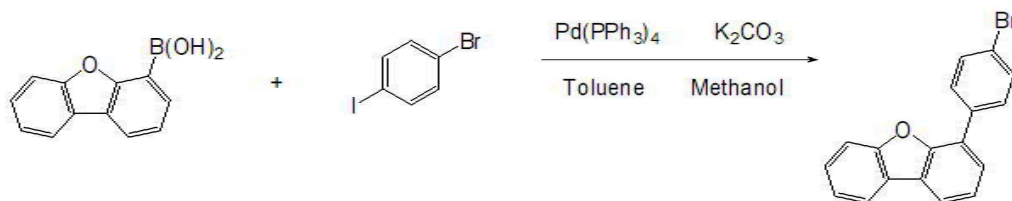
[0228]

[0229] 제조예 1에서 1,3-디브로모-2-아이오도벤젠 대신 5-(디파라-톨릴아미노)-2-메틸페닐보론산 을 5.5g을 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 중간체 18인 2',6'-디브로모-6-메틸-N,N-디파라-톨릴비페닐-3-아민 2.4g을 얻었다.

다. (수율 28%)

[0230] ^1H NMR(CDCl_3 , 600MHz) δ 7.59-7.53 (d, 2H), 7.13-7.12 (d, 1H), 7.03-7.00 (m, 9H), 6.98-6.96 (dd, 1H), 6.81-6.80 (s, 1H), 2.29-2.28 (s, 9H)

[0231] 제조예 19. 중간체 19의 합성



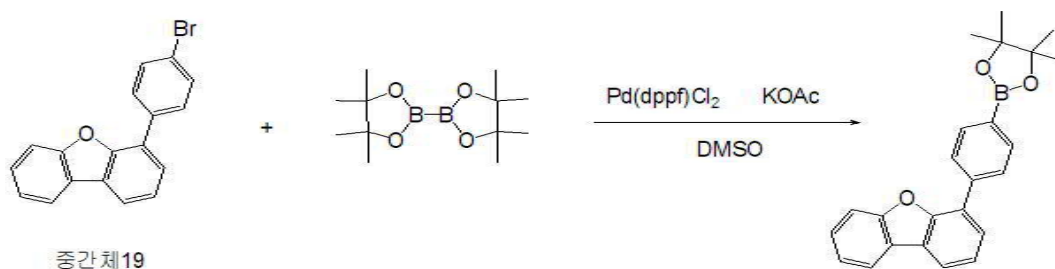
중간체 19

[0232]

[0233] 디벤조퓨란-4-보론산 10g과 4-브로모 요오드벤젠 20g을 넣고 반응하여 중간체(19) 14.1g을 얻었다. (수율 94%)

[0234] ^1H NMR(CDCl_3 , 600MHz) δ 8.00-7.98 (d, 1H), 7.95-7.94 (d, 1H), 7.80-7.79 (d, 2H), 7.67-7.65 (d, 2H), 7.60-7.58 (d, 1H), 7.57-7.55 (d, 1H), 7.47-7.46 (t, 1H), 7.43-7.41 (t, 1H), 7.38-7.35 (t, 1H)

[0235] 제조예 20. 중간체 20의 합성



중간체 19

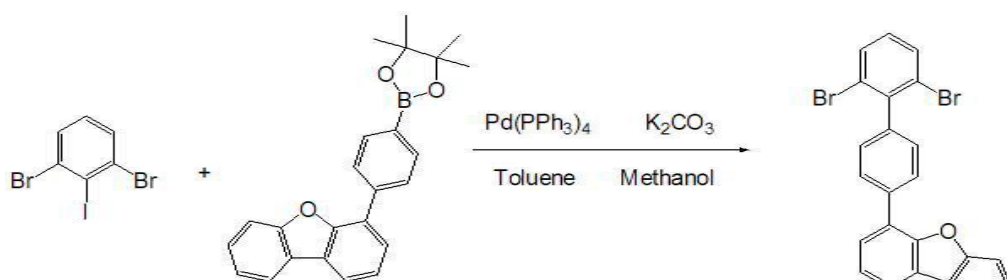
중간체 20

[0236]

[0237] 제조예 5와 동일한 방법으로 중간체(19)을 8g 넣고 반응하여 중간체(20) 7.7g 얻었다. (수율 84%)

[0238] ^1H NMR(CDCl_3 , 600MHz) δ 7.99-7.97 (d, 3H), 7.95-7.94 (d, 1H), 7.92-7.91 (d, 2H), 7.62-7.61 (d, 1H), 7.59-7.58 (d, 1H), 7.47-7.45 (t, 1H), 7.44-7.41 (t, 1H), 7.37-7.34 (t, 1H), 1.35 (s, 12H)

[0239] 제조예 21. 중간체 21의 합성



중간체 20

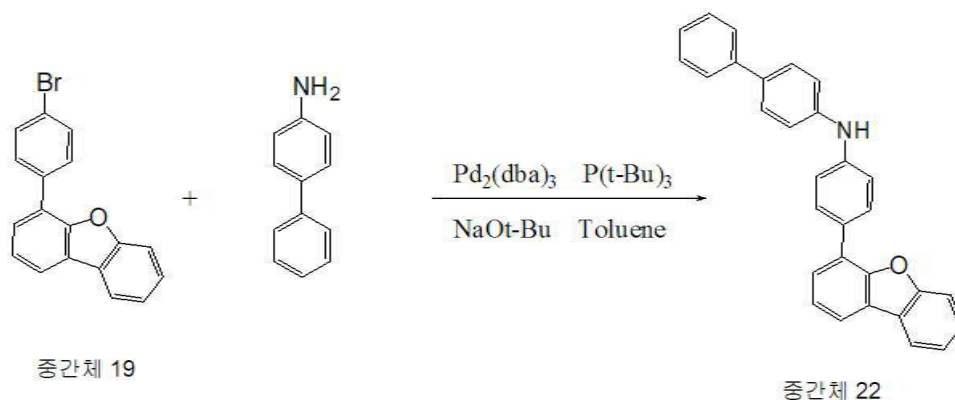
중간체 21

[0240]

[0241] 제조예 1과 동일한 방법으로 중간체(20) 4g과 1,3-디브로모-2-아이오도벤젠 4g을 넣고 반응하여 중간체(21) 2g을 얻었다. (수율 40%)

[0242] ^1H NMR(CDCl_3 , 600MHz) δ 8.07-8.05 (d, 2H), 8.01-7.99 (d, 1H), 7.96-7.95 (d, 1H), 7.72-7.71 (d, 1H), 7.68-7.66 (d, 2H), 7.65-7.64 (d, 1H), 7.49-7.44 (m, 2H), 7.39-7.38 (m, 3H), 7.11-7.08 (t, 1H)

[0243] 제조예 22. 중간체 22의 합성

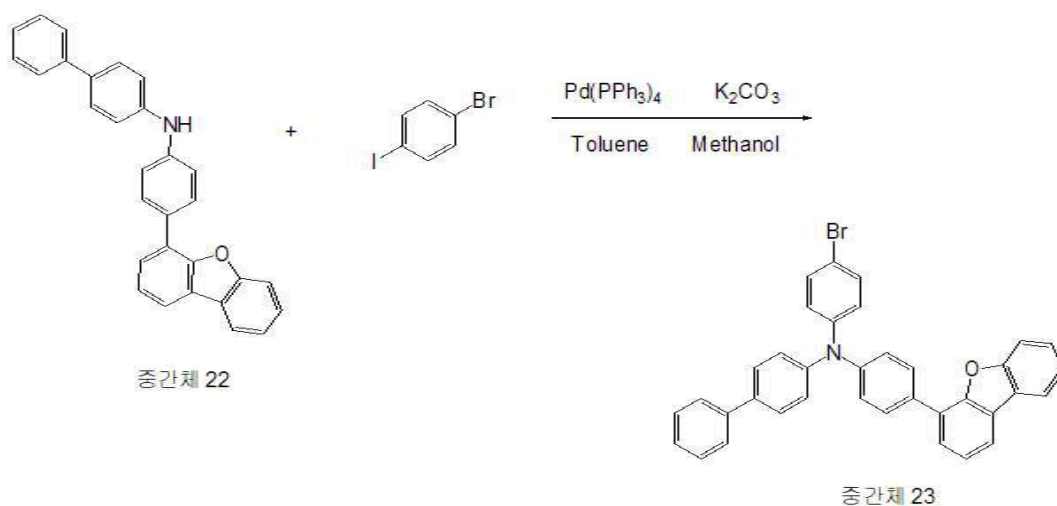


[0244]

[0245] 제조예 19에서 제조한 중간체(19) 6g 과 4-비페닐아민 3.5g을 사용한 것을 제외하고는 제조예(6)과 동일한 방법으로 중간체(22) 5.8g을 얻었다. (수율 76%)

[0246] $^1\text{H NMR}(\text{CDCl}_3, 600\text{MHz}) \delta$ 8.01-7.98 (d, 1H), 7.91-7.87 (m, 3H), 7.61-7.55 (m, 6H), 7.47-7.40 (m, 4H), 7.38-7.35 (t, 1H), 7.33-7.30 (t, 1H), 7.28-7.23 (m, 4H), 5.93 (s, 1H)

[0247] 제조예 23. 중간체 23의 합성

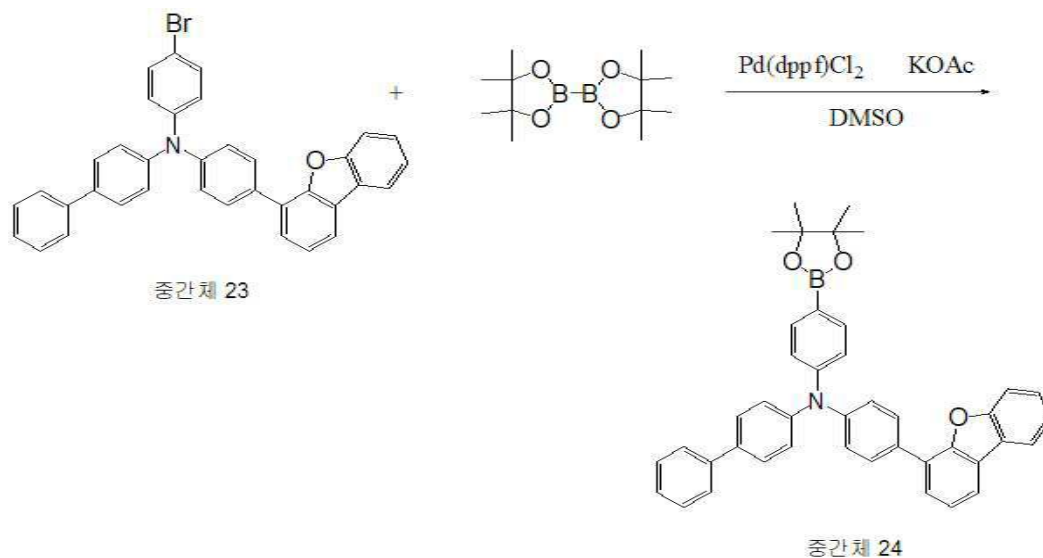


[0248]

[0249] 제조예 22에서 제조한 중간체(22) 5.8g 과 1-브로모-4-아이오도벤젠 6g 을 제조예 22와 동일한 방법으로 반응하여 중간체(23) 4.5g을 얻었다. (수율 59%)

[0250] $^1\text{H NMR}(\text{CDCl}_3, 600\text{MHz}) \delta$ 7.99-7.98 (d, 1H), 7.92-7.90 (d, 1H), 7.87-7.85 (d, 2H), 7.61-7.58 (t, 4H), 7.54-7.52 (d, 2H), 7.46-7.32 (m, 8H), 7.27-7.22 (m, 4H), 7.11-7.09 (d, 2H)

[0251] 제조예 24. 중간체 24의 합성

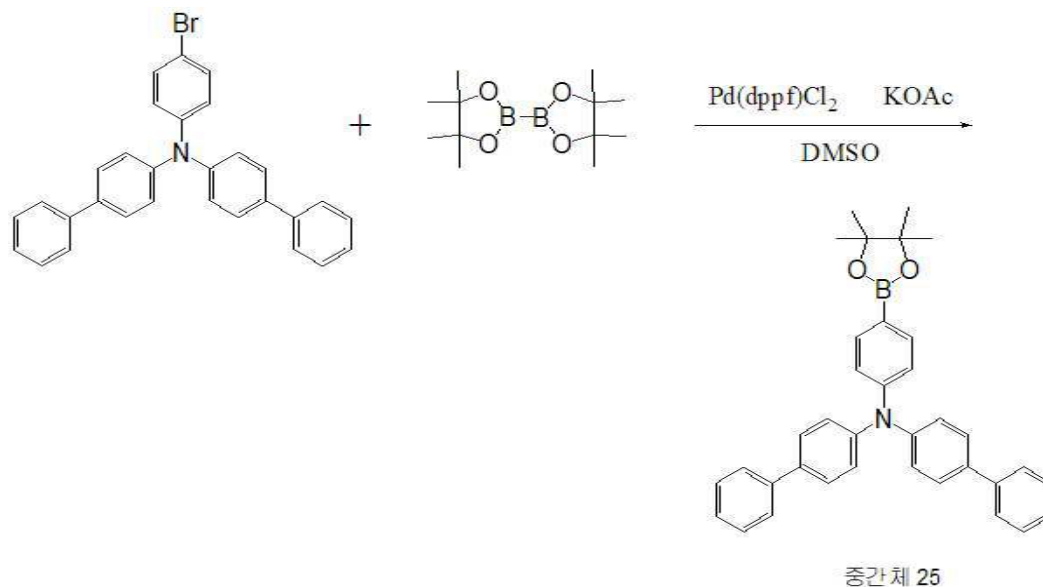


[0252]

[0253] 제조예 23에서 제조한 중간체(23) 4.4g을 사용한 것을 제외하고는 제조예 7과 동일한 방법으로 중간체(24) 4.1g을 얻었다. (수율 87%)

[0254] $^1\text{H NMR}(\text{CDCl}_3, 600\text{MHz})$ δ 7.99-7.98 (d, 1H), 7.91-7.90 (d, 1H), 7.86-7.85 (d, 2H), 7.74-7.73 (d, 2H), 7.61-7.59 (m, 4H), 7.54-7.52 (d, 2H), 7.46-7.40 (m, 4H), 7.36-7.25 (m, 6H), 7.20-7.15 (d, 2H), 1.34 (s, 12H)

[0255] 제조예 25. 중간체 25의 합성

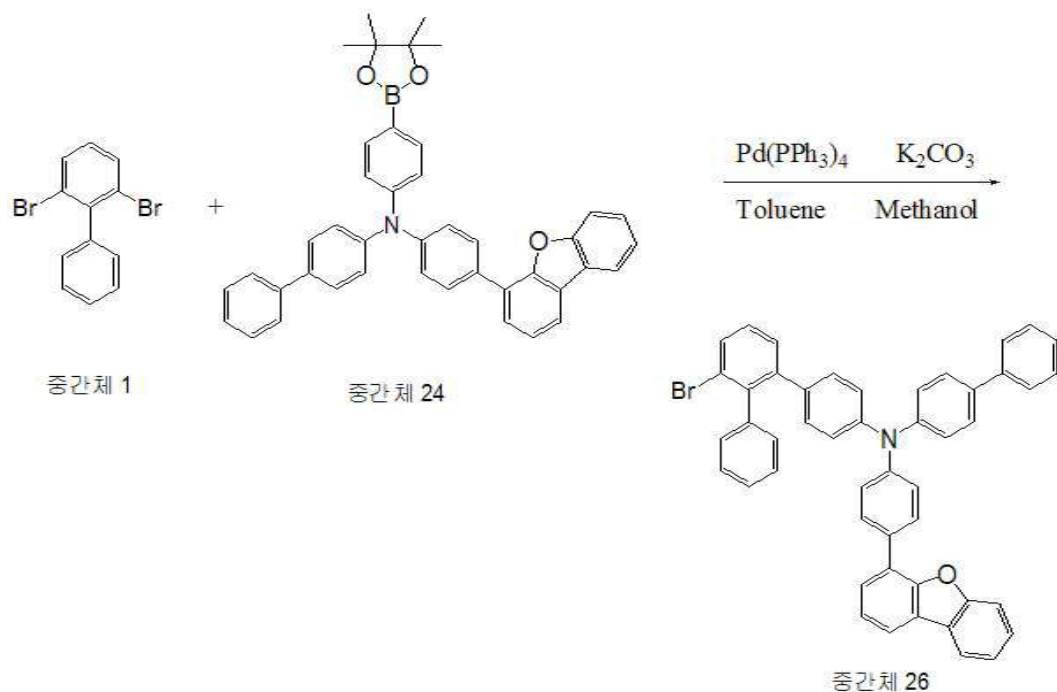


[0256]

[0257] 제조예 24와 동일한 방법으로 N-(비페닐-4-일)-N-(3-브로모페닐)-비페닐-4-아민 10g을 넣고 반응하여 중간체 (25) 10g을 얻었다. (수율 94%)

[0258] $^1\text{H NMR}(\text{CDCl}_3, 600\text{MHz})$ δ 7.72-7.71 (d, 2H), 7.59-7.58 (d, 4H), 7.51-7.50 (d, 4H), 7.44-7.41 (t, 4H), 7.33-7.30 (t, 2H), 7.21-7.20 (d, 4H), 7.14-7.13 (d, 2H), 1.36 (s, 12H)

[0259] 제조예 26. 중간체 26의 합성

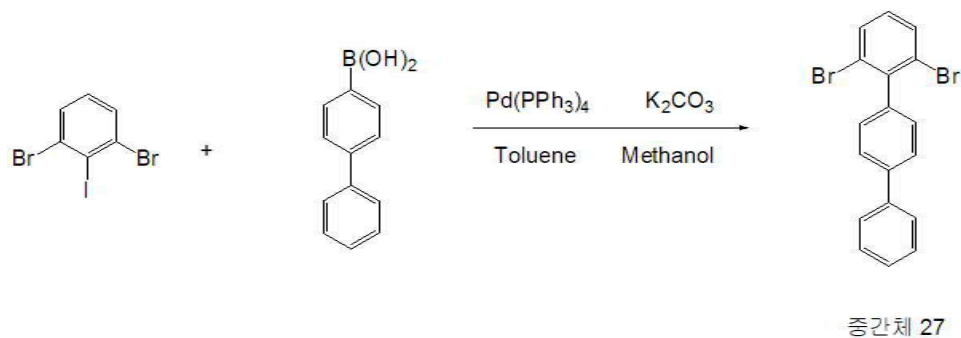


[0260]

[0261] 중간체(1) 1.8g 과 중간체(24) 3.5g을 사용하여 제조예 21과 동일한 방법으로 중간체(26) 2.1g을 얻었다. (수율 51%)

[0262] $^1\text{H NMR}(\text{CDCl}_3, 600\text{MHz})$ δ 7.99-7.98 (d, 1H), 7.91-7.90 (d, 1H), 7.84-7.82 (d, 2H), 7.68-7.67 (d, 1H), 7.61-7.58 (m, 4H), 7.50-7.41 (m, 7H), 7.33-7.32 (t, 1H), 7.30-7.27 (m, 5H), 7.18-7.12 (m, 6H), 6.98-6.93 (m, 4H)

[0263] 제조예 27. 중간체 27의 합성

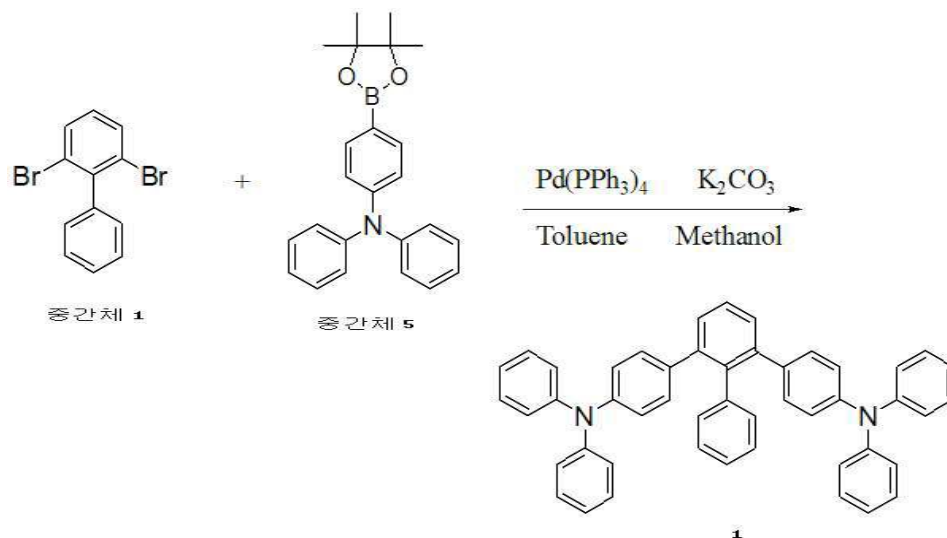


[0264]

[0265] 중간체 (21) 대신 4-비페닐보론산 2.7g을 넣고 제조예 21과 동일한 방법으로 반응하여 중간체(27) 1.1g을 얻었다. (수율 21%)

[0266] $^1\text{H NMR}(\text{CDCl}_3, 600\text{MHz})$ δ 7.70-7.67 (t, 4H), 7.65-7.64 (d, 2H), 7.47-7.44 (t, 2H), 7.37-7.35 (t, 1H), 7.29-7.28 (d, 2H), 7.09-7.06 1H

[0267] 실시예 1. 화합물 1 합성



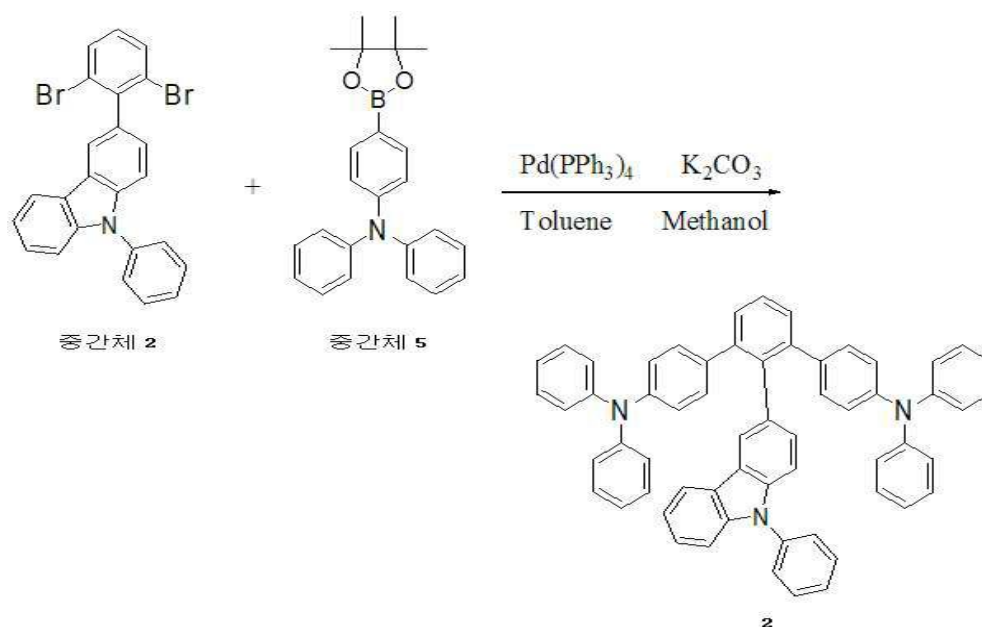
[0268]

[0269] 질소 분위기 하의 250ml 둥근바닥 3구 플라스크에 중간체 1을 2.3g, 중간체 5를 4.7g, 테트라키스 트리페닐포스핀 팔라듐(0) 0.7g, 탄산칼륨 2.5g, 톨루엔 25ml와 메탄올 10ml를 넣고, 65℃로 4시간 교반하였다. 반응액을 냉각 후 디클로로메탄과 물로 추출하고, 추출된 용액을 농축하였다. 디클로로메탄과 n-헥산 혼합용매로 컬럼크로마토그래피 실시한 용액을 농축하고 재결정하여 화합물 1을 2g 얻었다. (수율 43%)

[0270] $^1\text{H NMR}(\text{CDCl}_3, 600\text{MHz}) \delta$ 7.45-7.43 (t, 2H), 7.23-7.19 (t, 10H), 7.06-7.01 (m, 14H), 6.98-6.95 (t, 3H), 6.93-6.91 (t, 3H), 6.86-6.84 (d, 4H)

[0271] LC/Mass[M+H]⁺: 640.9

[0272] 실시예 2. 화합물 2 합성



[0273]

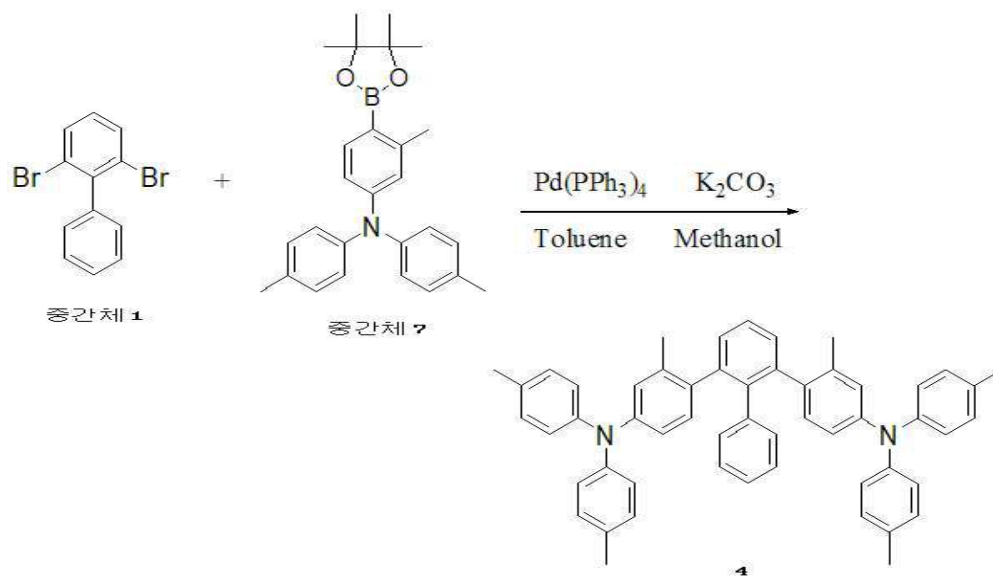
[0274] 중간체 1 대신 중간체 2를 사용한 것을 제외하고는 실시예 1과 동일한 방법으로 화합물 2를 2.6g 얻었다. (수율 43%)

[0275] $^1\text{H NMR}(\text{CDCl}_3, 600\text{MHz}) \delta$ 7.89-7.84 (d, 2H), 7.60-7.57 (m, 5H), 7.44-7.38 (m, 13H), 7.27-7.25 (d, 1H), 7.02-7.00 (d, 1H), 6.89-6.73 (m, 20H), 6.63-6.59 (s, 1H)

[0276] Tg : 103 °C

[0277] LC/Mass[M+H]⁺: 805.9

[0278] 실시예 3. 화합물 4 합성



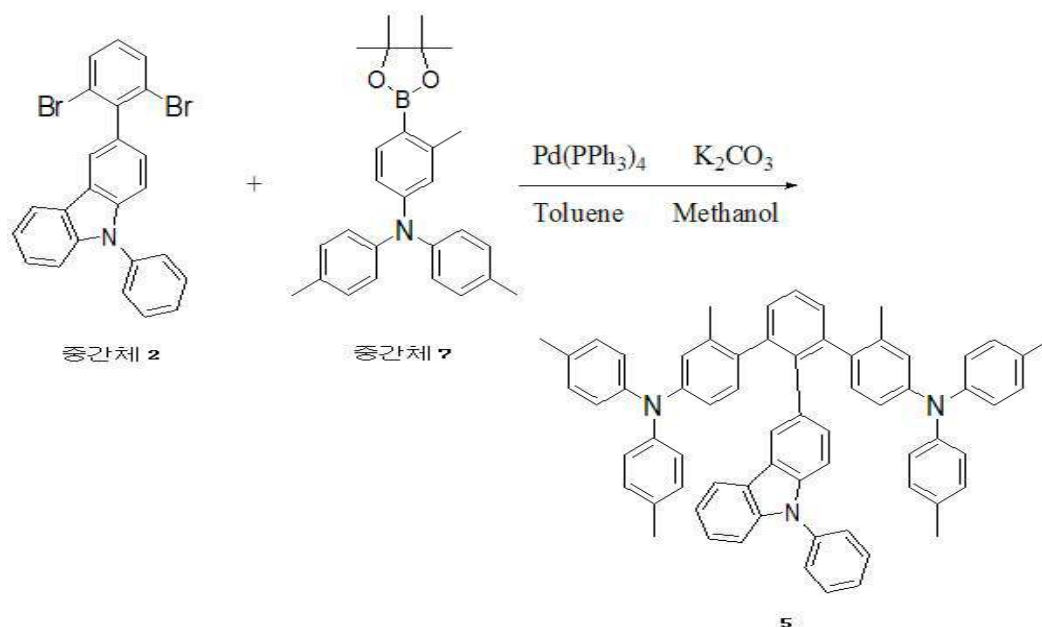
[0279]

[0280] 중간체 5 대신 중간체 7을 6.5g 사용한 것을 제외하고는 실시예 1과 동일한 방법으로 화합물 4를 2.4g 얻었다. (수율 52%)

[0281] ¹H NMR(CDCl₃, 600MHz) δ 7.42-7.38 (dd, 1H), 7.33-7.32 (d, 2H), 7.01-7.00 (d, 9H), 6.95-6.93 (t, 3H), 6.88-6.86 (dd, 8H), 6.81-6.77 (m, 2H), 6.72-6.71 (d, 3H), 6.67-6.64 (dd, 2H), 2.28 (s, 18H)

[0282] LC/Mass[M+H]⁺: 725.4

[0283] 실시예 4: 화합물 5 합성



[0284]

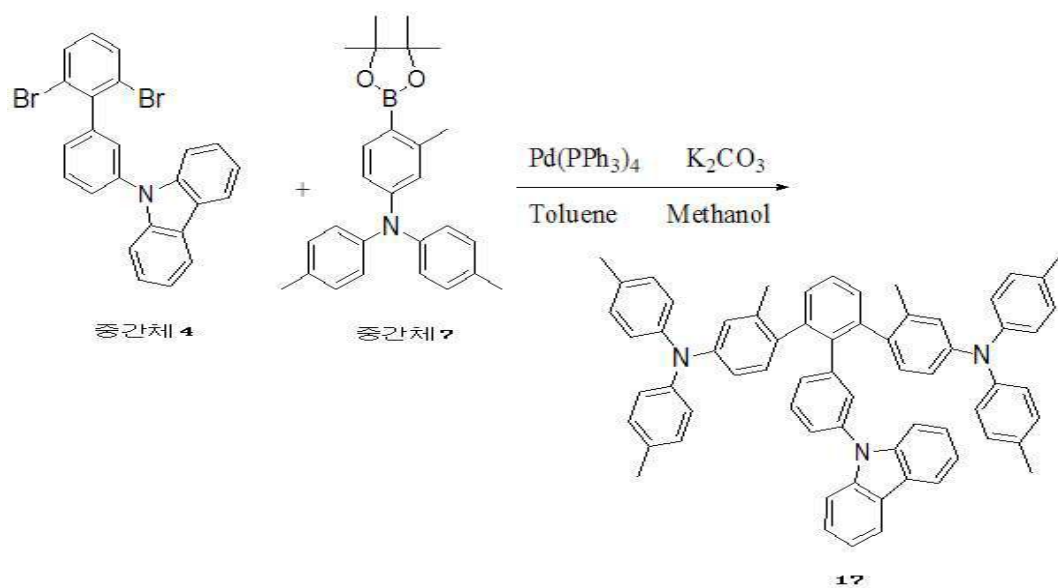
[0285] 중간체 5 대신 중간체 7을 사용한 것을 제외하고는 실시예 2와 동일한 방법으로 화합물 5를 1.4g 얻었다. (수율 45%)

[0286] ¹H NMR(CDCl₃, 600MHz) δ 7.89-7.84 (d, 2H), 7.60-7.57 (m, 5H), 7.44-7.38 (m, 7H), 7.27-7.25 (d, 1H), 7.02-7.00 (d, 1H), 6.89-6.73 (m, 20H), 6.63-6.59 (s, 1H), 2.22 (s, 18H)

[0287] Tg : 133 °C

[0288] LC/Mass[M+H]⁺ : 890.4

[0289] 실시예 5: 화합물 17 합성



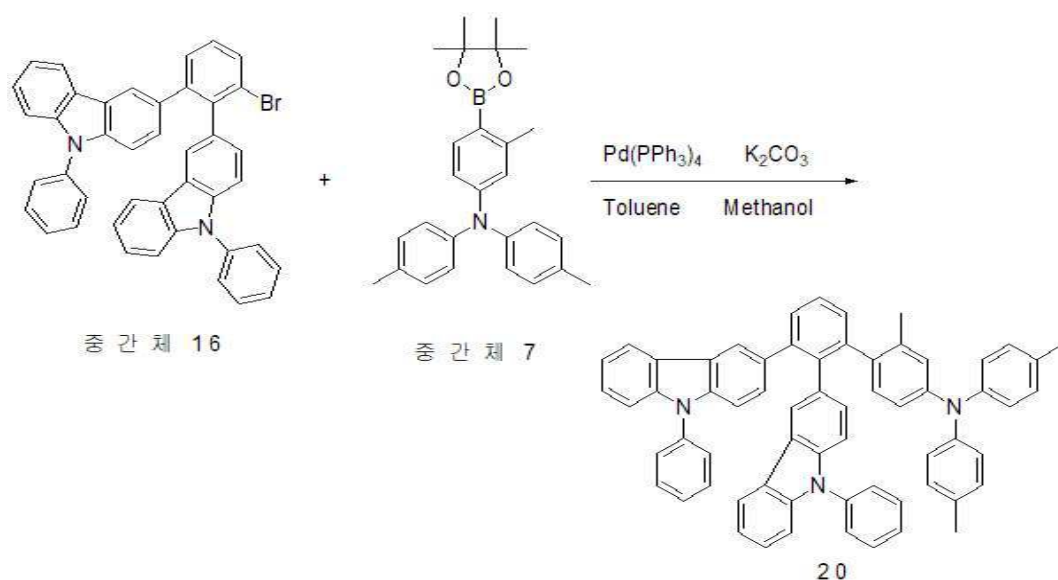
[0290]

[0291] 중간체 2 대신 중간체 4를 사용한 것을 제외하고는 실시예 4와 동일한 방법으로 화합물 17을 1g 얻었다. (수율 32%)

[0292] ¹H NMR(CDCl₃, 600MHz) δ 8.09-8.07 (d, 2H), 7.42-7.40 (d, 1H), 7.33-7.19 (m, 9H), 7.08-7.00 (m, 10H), 6.98-6.88 (m, 12H), 6.84-6.80 (m, 2H), 6.72 (s, 1H), 2.30 (s, 18H)

[0293] LC/Mass[M+H]⁺ : 890.9

[0294] 실시예 6: 화합물 20 합성



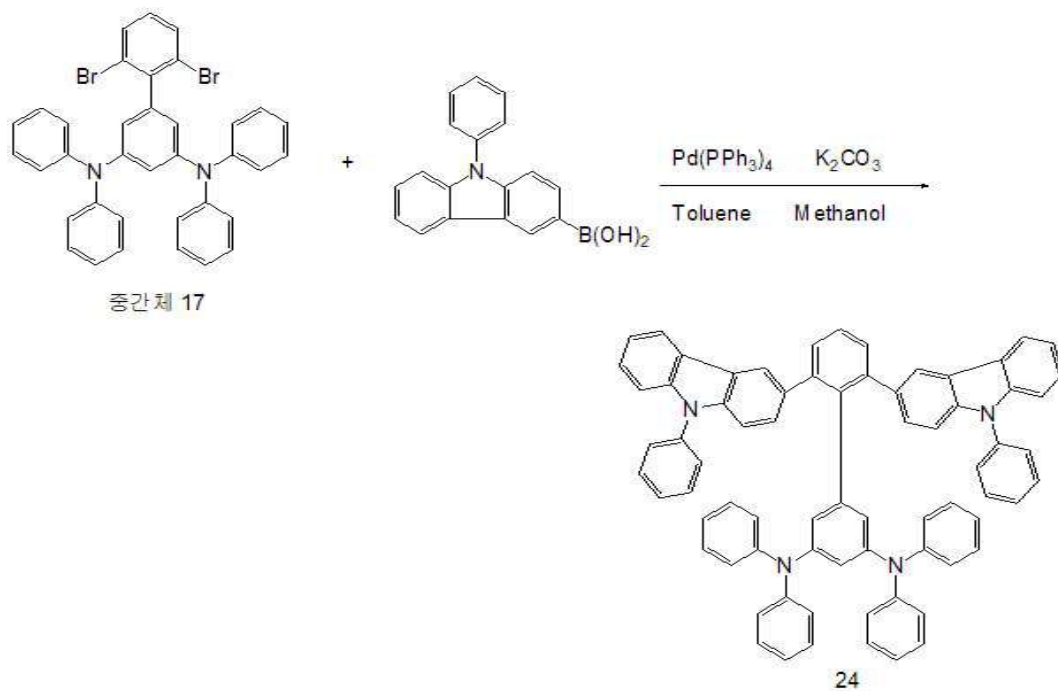
[0295]

[0296] 중간체 2 대신 중간체 16을 1.6g 사용한 것을 제외하고는 실시예 4와 동일한 방법으로 화합물 20을 1g 얻었다. (수율 63%)

[0297] ¹H NMR(CDCl₃, 600MHz) δ 8.10 (s, 1H), 8.01-8.00 (d, 1H), 7.64-7.61 (d, 1H), 7.52-7.32 (m, 24H), 7.25-7.21 (t, 2H), 7.08 (s, 2H), 6.81-6.71 (m, 7H)

[0298] LC/Mass[M+H]⁺: 846.8

[0299] 실시예 7. 화합물 24의 합성



[0300]

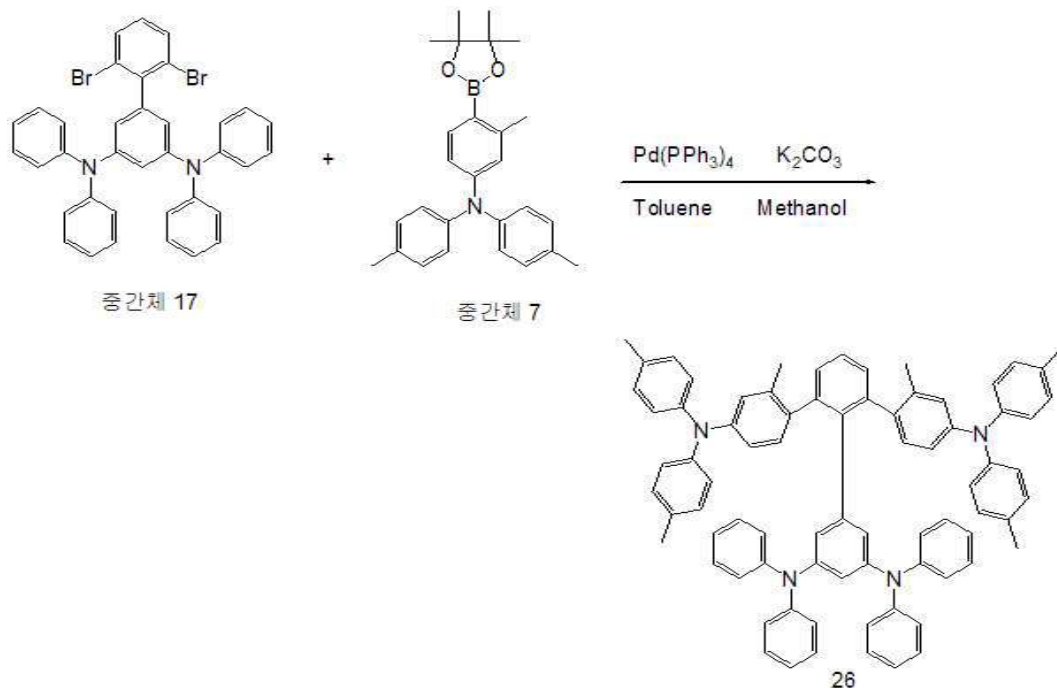
[0301] 실시예 6의 제조방법 중 중간체(16) 대신 중간체(17)을 2.5g 사용하고, 중간체 (7) 대신 N-페닐카바졸-3-보론산 2.5g을 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 화합물(24) 1.6g을 얻었다. (수율 43%)

[0302] ¹H NMR(CDCl₃, 600MHz) δ 8.07-8.06 (d, 2H), 7.88 (s, 2H), 7.63-7.62 (t, 4H), 7.58-7.57 (d, 4H), 7.50-7.47 (m, 10H), 7.36-7.34 (m, 4H), 7.27 (s, 1H), 6.74-6.71 (t, 8H), 6.66-6.64 (t, 4H), 6.56-6.54 (d, 8H), 6.43 (s, 2H), 6.30 (s, 1H)

[0303] Tg : 129 °C

[0304] LC/Mass[M+H]⁺: 971.6

[0305] 실시예 8. 화합물 26의 합성



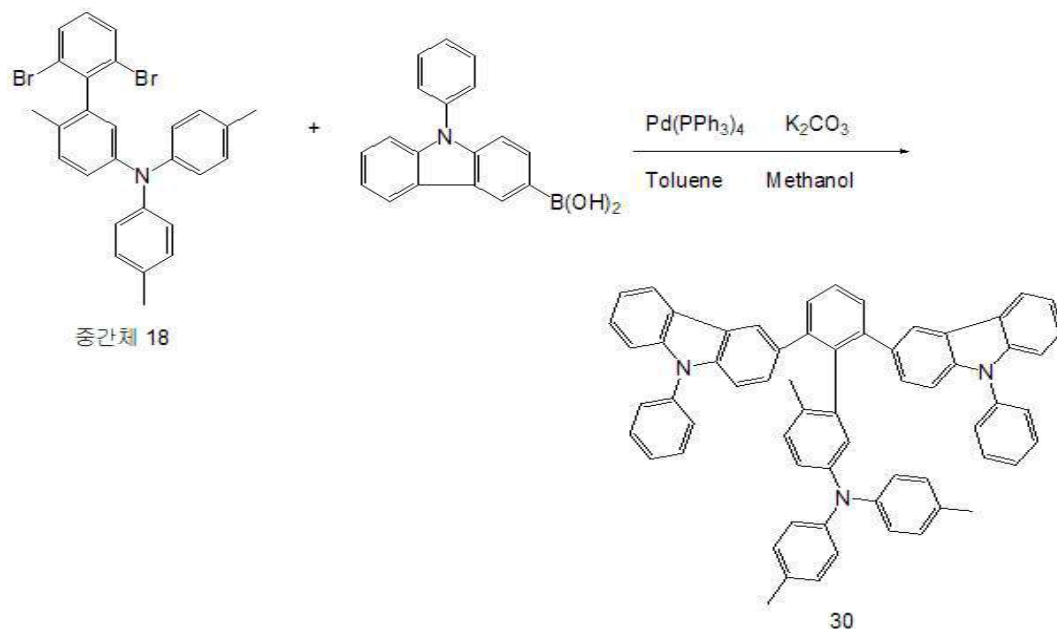
[0306]

[0307] 실시예 7의 제조방법 중 N-페닐카바졸-3-보론산 대신 중간체(7)를 2.6g 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 화합물(26) 0.8g을 얻었다. (수율 30%)

[0308] $^1\text{H NMR}(\text{CDCl}_3, 600\text{MHz})$ δ 7.59-7.58 (d, 1H), 7.29-7.25 (t, 1H), 7.18-7.16 (d, 2H), 7.06-7.02 (m, 18H), 7.01-6.97 (d, 3H), 6.85-6.75 (m, 21H), 6.58 (s, 1H), 6.30 (s, 1H), 2.30 (s, 18H)

[0309] LC/Mass[M+H]⁺: 1059

[0310] 실시예 9. 화합물 30의 합성



[0311]

[0312] 실시예 7의 제조방법 중 중간체(17) 대신 중간체(18)를 2.4g 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 화합물(30) 1.4g을 얻었다. (수율 37%)

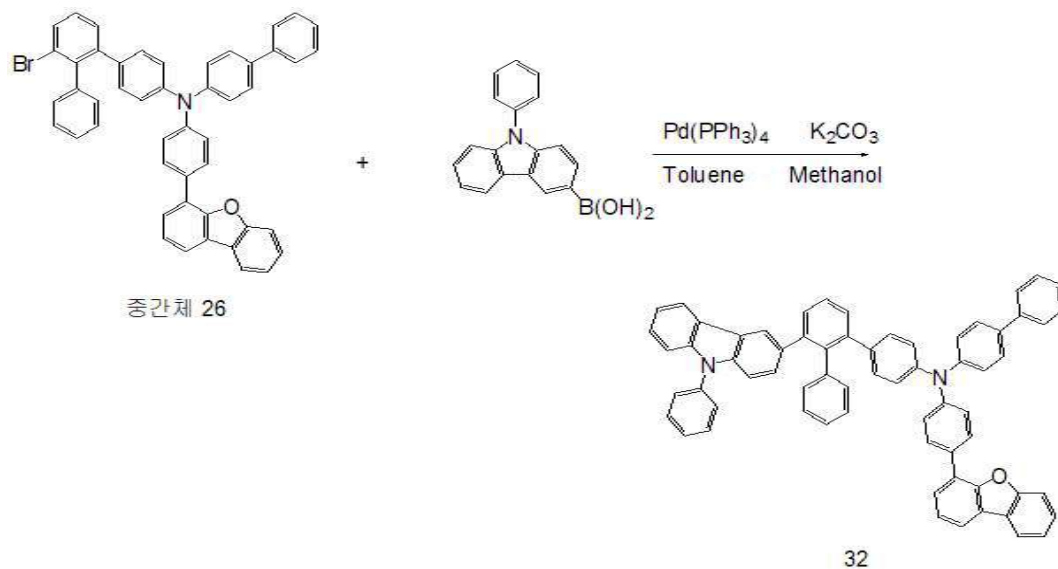
[0313] $^1\text{H NMR}(\text{CDCl}_3, 600\text{MHz})$ δ 8.07-8.06 (d, 2H), 7.88 (s, 2H), 7.63-7.62 (t, 4H), 7.58-7.57 (d, 4H), 7.50-7.47 (m, 10H), 7.29-7.25 (t, 1H), 7.18-7.16 (d, 2H), 7.01-6.97 (d, 3H), 6.85-6.75 (m, 10H), 2.30 (s,

9H)

Tg : 138 °C

LC/Mass[M+H]⁺ : 846.7

실시예 10. 화합물 32의 합성



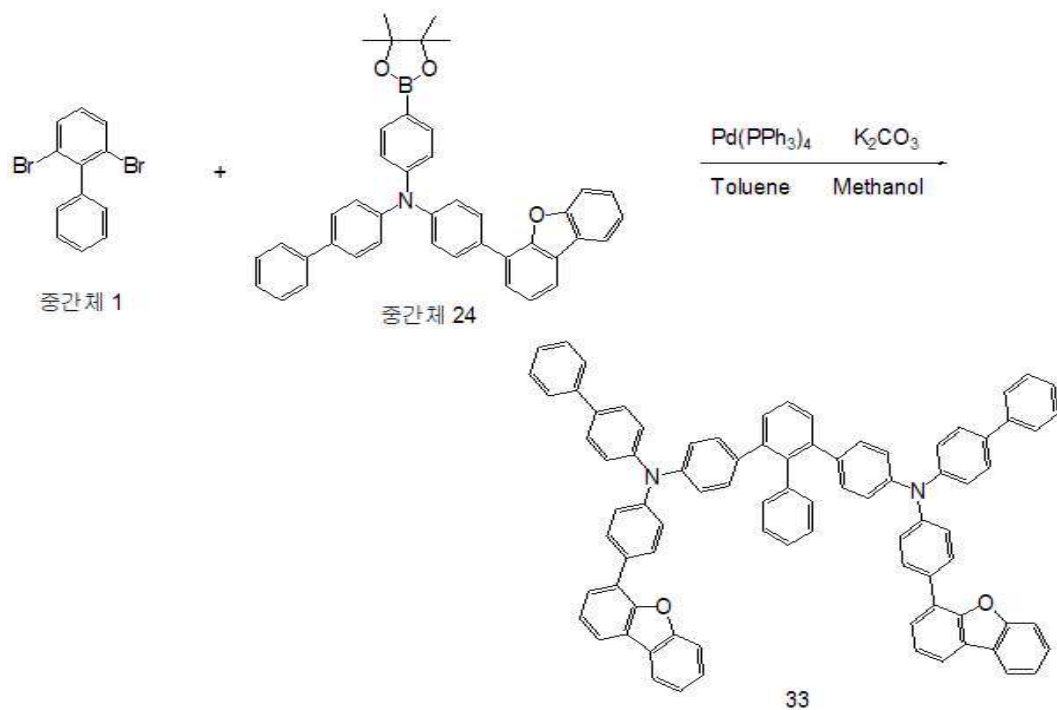
실시예 9의 제조방법 중 중간체(18) 대신 중간체(26)을 1.7g 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 화합물 (32) 1.1g을 얻었다. (수율 55%)

¹H NMR(CDC1₃, 600MHz) δ 8.07-8.06 (d, 2H), 7.99-7.98 (d, 2H), 7.91-7.89 (d, 2H), 7.88 (s, 2H), 7.83-7.82 (d, 4H), 7.61-7.58 (m, 4H), 7.51-7.49 (d, 4H), 7.47-7.40 (m, 8H), 7.37-7.30 (m, 4H), 7.22-7.18 (m, 4H), 7.11 (s, 2H), 7.01 (s, 4H), 6.93-6.92 (t, 2H)

Tg : 148.6 °C

LC/Mass[M+H]⁺ : 880.8

[0322] 실시예 11. 화합물 33의 합성



[0323]

[0324] 실시예 1의 제조방법 중 중간체(5) 대신 중간체(24)를 7g 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 화합물(33) 3.8g을 얻었다. (수율 60%)

[0325]

^1H NMR(CDCl_3 , 600MHz) δ 7.99-7.98 (d, 2H), 7.91-7.89 (d, 2H), 7.83-7.82 (d, 4H), 7.61-7.58 (m, 8H), 7.51-7.49 (d, 6H), 7.47-7.40 (m, 8H), 7.37-7.30 (m, 4H), 7.22-7.18 (m, 10H), 7.11 (s, 2H), 7.01 (s, 8H), 6.93-6.92 (t, 2H)

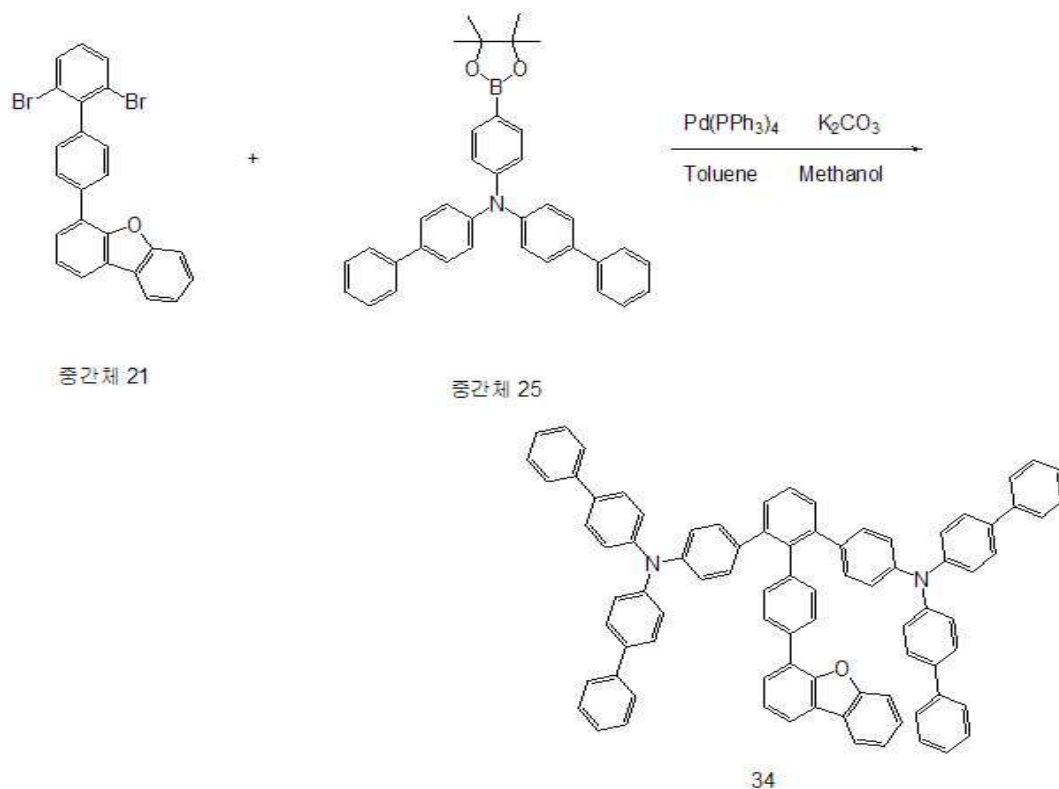
[0326]

Tg : 151.6 $^{\circ}\text{C}$

[0327]

LC/Mass[M+H] $^{+}$: 1125.1

[0328] 실시예 12. 화합물 34의 합성



[0329]

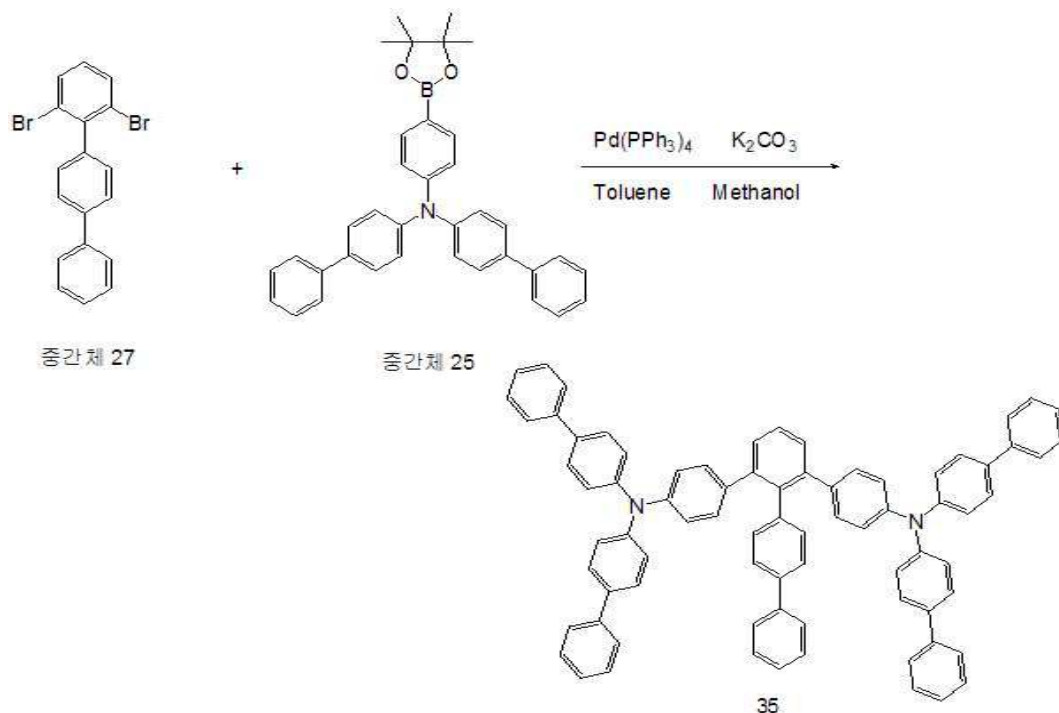
[0330] 중간체(21) 2.1g과 중간체(25) 4.6g 사용하여 실시예 1과 동일한 방법으로 화합물(34) 2.2g을 얻었다. (수율 45%)

[0331] $^1\text{H NMR}(\text{CDCl}_3, 600\text{MHz})$ δ 8.00–7.99 (d, 1H), 7.90–7.89 (d, 1H), 7.80–7.79 (d, 2H), 7.67–7.66 (d, 1H), 7.59–7.57 (d, 1H), 7.53 (s, 3H), 7.43–7.41 (d, 8H), 7.39 (s, 1H), 7.36–7.34 (m, 18H), 7.28–7.27 (d, 4H), 7.12–7.11 (d, 8H), 7.08–7.05 (t, 6H), 7.00–6.99 (d, 4H)

[0332] T_g : 142.9 $^{\circ}\text{C}$

[0333] $\text{LC/Mass}[\text{M}+\text{H}]^+$: 1110.7

[0334] 실시예 13. 화합물 35의 합성



[0335]

[0336] 실시예 12의 중간체(21) 대신 중간체(27) 1.1g 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법으로 화합물(35) 2.5g을 얻었다. (수율 89%)

[0337] $^1\text{H NMR}(\text{CDCl}_3, 600\text{MHz})$ δ 7.63-7.61 (d, 2H), 7.51-7.50 (d, 10H), 7.41-7.38 (m, 18H), 7.37 (s, 2H), 7.34-7.33 (d, 2H), 7.31-7.29 (t, 4H), 7.11-7.10 (d, 8H), 7.03-7.01 (d, 4H), 6.97-6.93 (m, 6H)

[0338] T_g : 139.8 $^{\circ}\text{C}$

[0339] LC/Mass[M+H] $^{+}$: 1020.4

[0340] 소자실시예 1. 화합물 1을 2차 정공 수송층 재료로 하여 유기전계발광소자 제조

[0341] ITO (Indium tin oxide)가 100nm 두께로 박막 코팅된 유리 기판을 이소프로필 알코올 용제로 초음파 세척을 하고 건조시킨 후 플라즈마 세정기로 이송시켜 산소 플라즈마를 이용하여 상기 기판을 5분간 세정하고 진공 증착기로 기판을 이송하였다.

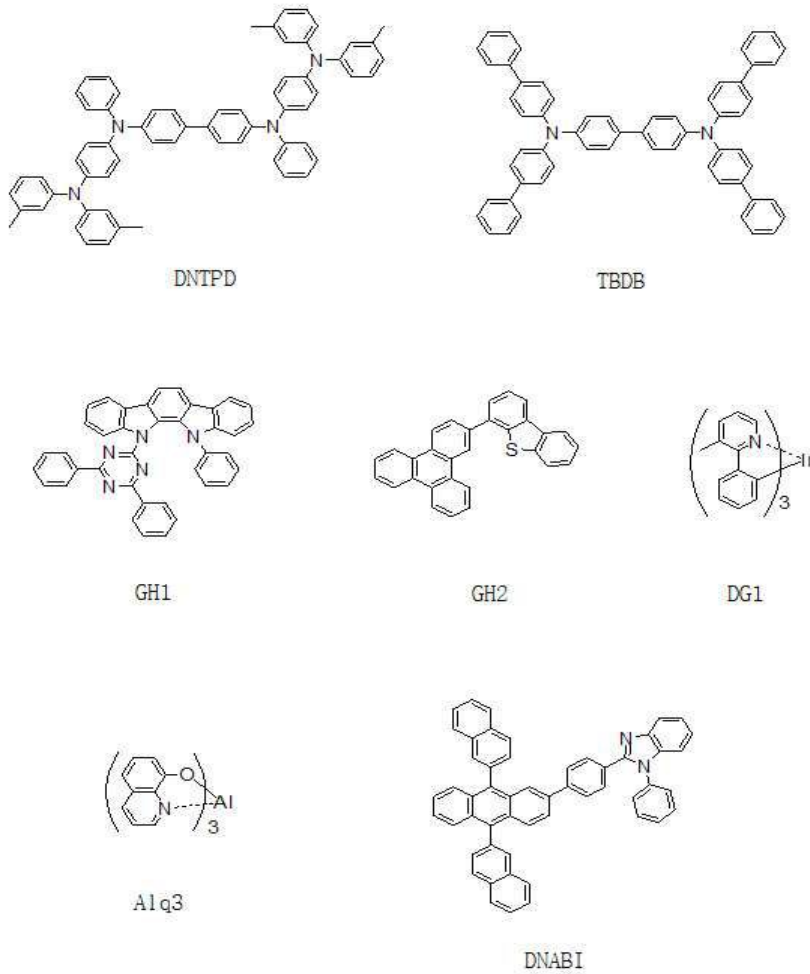
[0342] 이와 같이 준비된 ITO 투명 전극을 양극으로 사용하여 ITO 기판 상에 DNTPD [N,N'-diphenyl-N,N'-bis-(4-(phenyl-m-tolylamino)-phenyl)-biphenyl-4,4'-diamine]를 진공 증착하여 50nm두께의 정공 주입층을 형성하였다. 이어서 1차 정공 수송층으로서 TBDB [N,N,N',N'-tetra(4-biphenyl)-diaminobiphenylene]를 30nm 두께로 진공 증착하고, 1차 정공 수송층 상부에 2차 정공 수송층으로서 화합물 5를 10nm 두께로 형성하였다. 상기 2차 정공 수송층 상부에 GH1을 호스트로 사용하고 도판트로 GD1을 6 부피%로 도핑하여 30nm 두께로 진공증착하여 발광층을 형성하였다.

[0343] 그 후, 상기 발광층 상부에 정공차단층으로서 GH1을 10nm 두께로 성형하였다. 상기 정공차단층 상부에 전자수송층으로서 Alq_3 (tris(8-quinolinolato)-aluminium(III))을 20nm 두께로 형성하였다. 상기 전자수송층 상부에 Liq [lithium quinolate] 2nm와 Al 100nm를 순차적으로 진공 증착하여 음극을 형성함으로써 유기전계발광소자를 제조하였다.

[0344] 소자실시예 2 내지 4

[0345] 화합물 5 대신에 하기 표 1에 기재된 화합물을 2차 정공 수송층 재료로 사용한 것을 제외하고는 소자실시예1과 동일한 방법으로 소자실시예 2 내지 4의 유기전계발광소자를 제조하였다.

- [0346] 소자비교예 1: TBDB를 2차 정공 수송층 재료로 하여 유기전계발광소자 제조
- [0347] 화합물 5 대신에 TBDB를 2차 정공 수송층 재료로 사용한 것을 제외하고는 소자실시에 1과 동일한 방법으로 유기전계발광소자를 제조하였다.
- [0348] 소자실시에 5. 화합물 32를 2차 정공 수송층 재료로 하여 유기전계발광소자 제조
- [0349] ITO (Indium tin oxide)가 100nm 두께로 박막 코팅된 유리 기판을 이소프로필 알코올 용제로 초음파 세척을 하고 건조시킨 후 플라즈마 세정기로 이송시켜 산소 플라즈마를 이용하여 상기 기판을 5분간 세정하고 진공 증착기로 기판을 이송하였다.
- [0350] 이와 같이 준비된 ITO 투명 전극을 양극으로 사용하여 ITO 기판 상에 DNTPD [N,N'-diphenyl-N,N'-bis-[4-(phenyl-m-tolylamino)-phenyl]-biphenyl-4,4'-diamine]를 진공 증착하여 30nm두께의 정공 주입층을 형성하였다. 이어서 중간층으로서 HATCN [1,4,5,8,9,11-hexaazatriphenylene-hexacarbonitrile]을 5nm 두께로 진공 증착하고, 중간층 상부에 1차 정공 수송층으로서 TBDB [N,N,N',N'-tetra(4-biphenyl)-diaminobiphenylene]를 20nm 두께로 진공 증착하고, 1차 정공 수송층 상부에 2차 정공 수송층으로서 화합물 32를 40nm 두께로 형성하였다. 상기 2차 정공 수송층 상부에 GH1과 GH2의 부피비 1:3인 혼합물을 호스트로 사용하고 도판트로 GD1을 11.5 부피%로 도핑하여 40nm 두께로 진공증착하여 발광층을 형성하였다.
- [0351] 그 후, 상기 발광층 상부에 전자수송층으로서 DNABI [2-[4-(9,10-Di-naphthalen-2-yl-anthracen-2-yl)-phenyl]-1-phenyl-1H-benzoimidazole]를 20nm 두께로 형성하였다. 상기 전자수송층 상부에 Liq [lithium quinolate] 2nm와 Al 100nm를 순차적으로 진공 증착하여 음극을 형성함으로써 유기전계발광소자를 제조하였다.
- [0352] 소자실시에 6 내지 8
- [0353] 화합물 32 대신에 하기 표 2에 기재된 화합물을 2차 정공 수송층 재료로 사용한 것을 제외하고는 소자실시에 5와 동일한 방법으로 소자실시에 6 내지 8의 유기전계발광소자를 제조하였다.
- [0354] 소자비교예 2: TBDB를 2차 정공 수송층 재료로 하여 유기전계발광소자 제조
- [0355] 화합물 32 대신에 TBDB를 2차 정공 수송층 재료로 사용한 것을 제외하고는 소자실시에 5와 동일한 방법으로 유기전계발광소자를 제조하였다.
- [0356] 상기 소자실시에 및 소자비교예에서 사용한 DNTPD, TBDB, GH1, GH2, GD1, Alq₃ 및 DNABI의 구조식은 아래와 같다.



[0357]

[0358]

유기전계발광소자의 특성 분석

[0359]

이하, 소자실시에 1 내지 4 및 소자비교예 1에 따라 제조된 유기전계발광소자를 1000 cd/m^2 휘도에서 특성을 비교하여 그 결과를 하기 표 1에 나타내었다.

[0360]

또한, 소자실시에 5 내지 8 및 소자비교예 2에 따라 제조된 유기전계발광 소자를 1000 cd/m^2 휘도에서 특성을 비교하여 그 결과를 하기 표 2에 나타내었다.

표 1

[0361]

	2차 정공 수송층 재료	전류 밀도 (mA/cm^2)	휘도 효율 (cd/A)	색좌표 CIE (x,y)
소자실시에 1	화합물 5	2.61	38.50	0.32,0.62
소자실시에 2	화합물 20	2.33	43.10	0.33,0.62
소자실시에 3	화합물 24	1.96	51.14	0.33,0.62
소자실시에 4	화합물 30	2.41	41.88	0.33,0.62
소자비교예 1	TBDB	3.53	30.34	0.33,0.62

표 2

[0362]

	2차 정공 수송층 재료	전류 밀도 (mA/cm^2)	휘도 효율 (cd/A)	색좌표 CIE (x,y)
소자실시에 5	화합물 32	2.2	46.8	0.34,0.61
소자실시에 6	화합물 33	2.2	48.0	0.34,0.62

소자실시예 7	화합물 34	2.0	49.7	0.34,0.61
소자실시예 8	화합물 35	2.2	49.6	0.33,0.62
소자비교예 2	TBDB	2.2	43.0	0.33,0.62

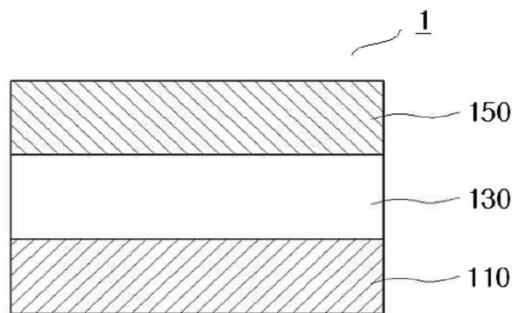
[0363] 전류밀도는 유기발광소자에 대해, 전압을 0V 부터 10V까지 상승시키면서 전류-전압계(Keithley 2635A Source Meter)를 이용하여 단위소자에 전류값을 측정하고, 측정된 전류값을 면적으로 나누어 결과를 얻었다.

[0364] 휘도효율은 전압을 0 V 부터 10 V까지 상승시키면서 휘도계(Minolta CS-2000)를 이용하여 그때의 휘도를 측정하고, 측정된 휘도값을 전류값으로 나누어 결과를 얻었다. 또한, 색좌표 값은 색좌표는 휘도계(Minolta CS-2000)를 이용하여 측정하였다.

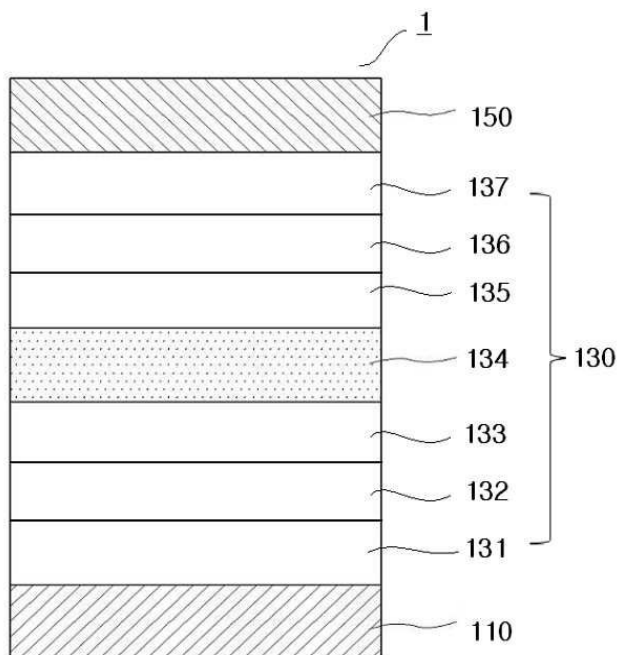
[0365] 상기 표 1 및 2에 따르면, 본 발명에 의한 화합물을 2차 정공수송층으로 유기전계발광소자에 사용한 결과, 종래 물질인 TBDB를 2차 정공수송층으로 사용한 것에 비해 전류밀도는 떨어지고, 휘도효율은 향상된 우수한 특성을 보이는 것을 확인할 수 있었다.

도면

도면1



도면2



专利名称(译)	标题：用于有机电致发光器件的化合物和含有该化合物的有机电致发光器件		
公开(公告)号	KR1020140060220A	公开(公告)日	2014-05-19
申请号	KR1020130104023	申请日	2013-08-30
[标]申请(专利权)人(译)	SK化学株式会社		
申请(专利权)人(译)	SK化工有限公司		
当前申请(专利权)人(译)	SK化工有限公司		
[标]发明人	KANG JU SIK 강주식 PARK JEONG HO 박정호 JUN SUK WOON 전석운 SHIN YONG JUN 신용준 CHANG YU MI 장유미 YANG NAM CHOUL 양남철 PARK JAE KYUN 박재균 LEE SONG 이송		
发明人	강주식 박정호 전석운 신용준 장유미 양남철 박재균 이송		
IPC分类号	C09K11/06 C07D401/10 H01L51/50		
CPC分类号	H01L51/0059 C07C211/54 C07D209/86 C07D219/02 C07D307/91 C07D401/10 C07D405/12 C09K11/06 C09K2211/1007 C09K2211/1014 C09K2211/1029 C09K2211/1088 H01L51/0054 H01L51/0072 H01L51/0073 H01L51/0074 H01L51/0081 H01L51/0085 H01L51/5004 H01L51/5056 H01L51/5221 H01L51/0071 H01L51/006 H01L51/5012 H01L51/5024 H01L51/504		
优先权	1020120126545 2012-11-09 KR		
外部链接	Espacenet		

摘要(译)

公开了用于有机电致发光器件的化合物，以及包含其的有机电致发光器件。根据本发明，可以改善包括用于有机电致发光器件的化合物的有机电致发光器件的热稳定性和发光效率，并且可以通过增强磷光的三重态能量来提高有机电致发光器件的发光效率 - 使用本发明化合物作为空穴传输层材料发射材料。

