



(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 공개특허공보(A)

(11) 공개번호 10-2014-0141970
(43) 공개일자 2014년12월11일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)
C09K 11/06 (2006.01) C07D 487/04 (2006.01)
H01L 51/50 (2006.01)
(21) 출원번호 10-2013-0063400
(22) 출원일자 2013년06월03일
심사청구일자 없음

(71) 출원인
에스에프씨 주식회사
충청북도 청원군 오창읍 과학산업5로 89
(72) 발명자
심소영
대전 동구 대전로 646, 106동 1302호 (효동, 효동
현대아파트)
유세진
경북 경산시 백자로10길 57, 109동 1105호 (사동,
사동휴먼시아1단지)
이상해
대전 유성구 반석서로 98, 603동 1002호 (반석동,
반석마을6단지아파트)
(74) 대리인
특허법인충현

전체 청구항 수 : 총 9 항

(54) 발명의 명칭 유기발광 화합물 및 이를 포함하는 유기전계발광소자

(57) 요약

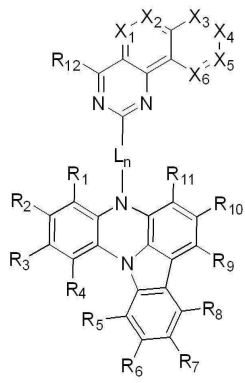
본 발명은 하기 [화학식 I] 내지 [화학식 III]으로 표시되는 유기발광 화합물 및 이를 포함하는 유기전계발광소자에 관한 것으로서, 본 발명에 따른 유기발광 화합물을 포함하는 유기전계발광소자는 휘도 및 발광 효율이 우수하면서도 동시에 저전압 구동이 가능하여 향상된 전력 효율을 갖는다.

(뒷면에 계속)

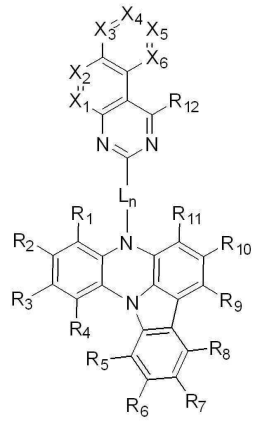
대표도 - 도1

80
70
60
50
40
30
20
10

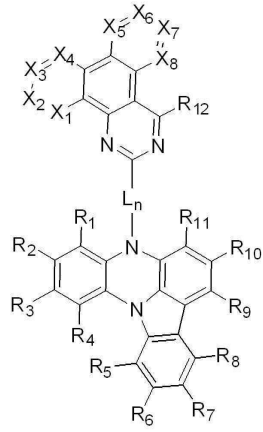
[화학식 I]



[화학식 II]



[화학식 III]



특허청구의 범위

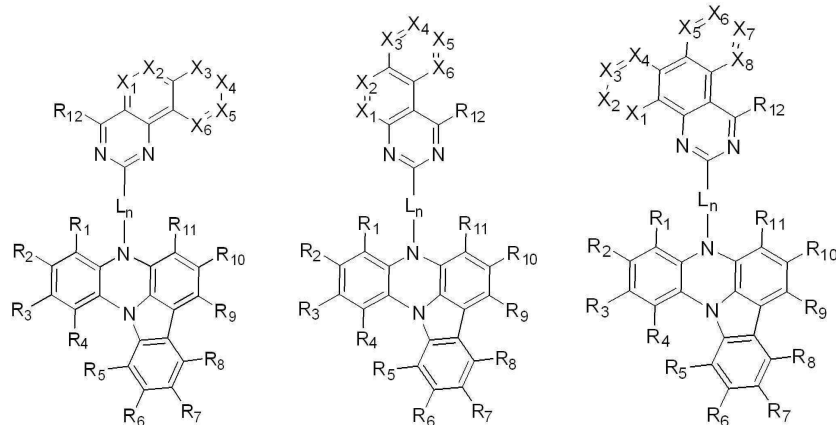
청구항 1

하기 [화학식 I] 내지 [화학식 III]으로 나타내는 유기발광 화합물:

[화학식 I]

[화학식 II]

[화학식 III]



상기 [화학식 I] 내지 [화학식 III]에서,

X₁ 내지 X₈은 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 N 또는 CR₁₃이고,

R₁ 내지 R₁₃은 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠기, 시아노기, 히드록실기, 니트로기, 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 2 내지 50의 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 30의 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 30의 시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 50의 아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알콕시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 50의 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬아미노기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴아미노기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬실릴기 및 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 50의 아릴실릴기로 이루어지는 군으로부터 선택되고,

상기 R₁ 내지 R₁₃은 서로 또는 인접한 치환기와 결합하여 지환족, 방향족의 단일환 또는 다환 고리를 형성할 수 있으며, 상기 형성된 고리의 탄소원자는 N, S, O 및 P 중에서 선택되는 어느 하나 이상의 헤테로원자로 치환될 수 있으며,

L은 단일 결합이거나 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬렌기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 30의 알케닐렌기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 30의 알킬닐렌기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 30의 시클로알킬렌기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 50의 아릴렌기 및 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 50의 헤테로아릴렌기 중에서 선택되고,

n은 0 내지 3의 정수이며, 상기 n이 2 이상인 경우에 복수의 L은 서로 동일하거나 상이하고, 서로 또는 인접한 치환기와 결합하여 포화 또는 불포화 고리를 형성할 수 있다.

청구항 2

제1항에 있어서,

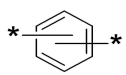
상기 n이 1인 경우, 상기 L은 단일결합이거나, 하기 [구조식 A1] 내지 [구조식 A8] 중에서 선택되는 어느 하나인 것을 특징으로 하는 유기발광 화합물:

[구조식 A1]

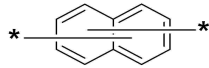
[구조식 A2]

[구조식 A3]

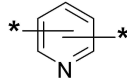
[구조식 A4]



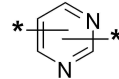
[구조식 A5]



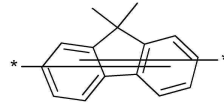
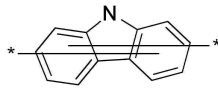
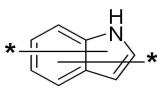
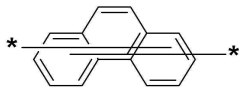
[구조식 A6]



[구조식 A7]



[구조식 A8]



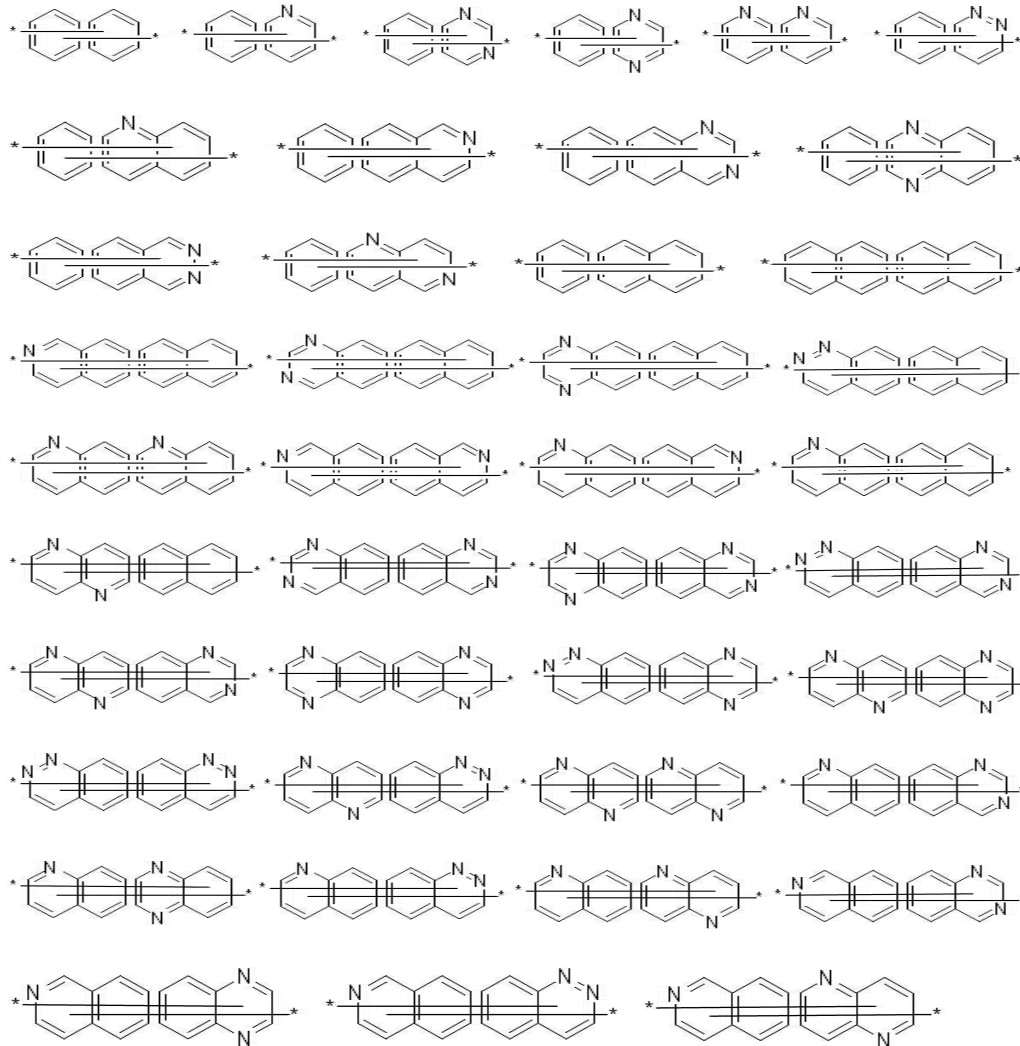
상기 [구조식 A1] 내지 [구조식 A8]에서, 각 구조식 내 방향족 고리의 탄소에는 수소 또는 중수소가 결합될 수 있다.

청구항 3

제1항에 있어서,

상기 n이 2인 경우, 상기 L은 하기 [구조식 B] 중에서 선택되는 어느 하나인 것을 특징으로 하는 유기발광 화합물:

[구조식 B]



상기 [구조식 B]에서, 각 구조식 내 방향족 고리의 탄소에는 수소 또는 중수소가 결합될 수 있고, 수소 이외의 치환기일 경우, 인접하는 치환기와 서로 결합하여 포화 또는 불포화 고리를 형성할 수 있다.

청구항 4

제1항에 있어서,

상기 R_1 내지 R_{13} 및 L은 각각 독립적으로 중수소, 시아노기, 할로젠기, 히드록시기, 니트로기, 탄소수 1 내지 20의 알킬기, 탄소수 1 내지 20의 알케닐기, 탄소수 1 내지 20의 알키닐기, 탄소수 1 내지 20의 할로젠화 알킬기, 탄소수 5 내지 24의 아릴기, 탄소수 2 내지 24의 헤테로아릴기, 탄소수 1 내지 20의 알콕시기, 탄소수 5 내지 24의 아릴옥시기, 탄소수 1 내지 20의 알킬실릴기, 탄소수 5 내지 24의 아릴실릴기, 탄소수 1 내지 20의 알킬아민기 및 탄소수 6 내지 24의 아릴아민기 중에서 선택되는 하나 이상의 치환기로 더 치환되는 것을 특징으로 하는 유기발광 화합물.

청구항 5

제1전극; 제2전극; 및 상기 제1 전극 및 제2전극 사이에 개재되는 1층 이상의 유기층;으로 이루어지고,

상기 유기층은 제1항에 따른 [화학식 I] 내지 [화학식 III]으로 표시되는 유기발광 화합물을 하나 이상 포함하는 것을 특징으로 하는 유기전계발광소자.

청구항 6

제5항에 있어서,

상기 유기층은 정공 주입층, 정공 수송층, 정공 주입 기능과 정공 수송 기능을 동시에 갖는 기능층, 발광층, 전자 수송층, 및 전자 주입층 중에서 선택되는 1층 이상을 포함하는 것을 특징으로 하는 유기전계발광소자.

청구항 7

제5항에 있어서,

상기 제1전극과 상기 제2전극 사이에 개재된 유기층이 발광층을 포함하는 것을 특징으로 하는 유기전계발광소자.

청구항 8

제7항에 있어서,

상기 발광층은 호스트 화합물과 도판트 화합물로 이루어지고, 상기 [화학식 I] 내지 [화학식 III]의 유기발광 화합물이 호스트로 사용되며, 상기 발광층은 도판트 화합물을 하나 이상 더 포함하는 것을 특징으로 하는 유기전계발광소자.

청구항 9

제5항에 있어서,

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

명세서

기술 분야

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

배경 기술

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

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

[0004] 유기전계발광소자는 플라스틱 같이 휘 수 있는 투명 기판 위에도 소자를 형성할 수 있을 뿐 아니라, 플라즈마

디스플레이 패널이나 무기 전계 발광 디스플레이에 비해 10 V 이하의 낮은 전압에서 구동이 가능하고, 전력 소모가 비교적 적으며, 색감이 뛰어나다는 장점이 있다. 또한, 유기 전계발광소자는 녹색, 청색, 적색의 3 가지 색을 나타낼 수가 있어 차세대 풍부한 색 디스플레이 소자로 많은 관심의 대상이 되고 있다.

유기전계발광소자에서 발광효율을 결정하는 가장 중요한 요인은 발광 재료이다. 발광 재료로는 현재 형광 재료가 널리 사용되고 있으나, 발광 메커니즘 상 인광 재료의 개발이 이론적으로 발광 효율을 보다 개선시킬 수 있는 방법 중의 하나이고, 이에 따라 현재까지 다양한 인광 재료에 대해서 개발이 이루어지고 있으며, 특히 인광 발광 호스트 재료로는 현재까지 CBP(4,4'-N,N'-dicarbazolbiphenyl)가 가장 널리 알려져 있고, 카바졸에 다양한 치환기가 도입된 물질들이 (일본 특허공개 2008-214244, 일본 특허공개 2003-133075) 또는 BALq 유도체를 호스트로 이용한 유기전계발광소자가 공지되어 있다.

그러나, 인광 발광 재료를 사용한 유기전계발광소자는 형광 발광 재료를 사용한 소자에 비해 전류 효율이 상당히 높으나, 인광 발광 재료의 호스트로 BA1q, CBP 등의 재료를 사용할 경우, 형광재료를 사용한 소자에 비해 구동 전압이 높아서 전력 효율면에서 큰 이점이 없고, 또한, 소자의 수명 측면에서도 만족할만한 수준이 되질 못하여 구동 전압, 수명 특성 등에 있어서 더욱 안정적이고, 고성능 호스트 재료의 개발이 요구되고 있다.

발명의 내용

해결하려는 과제

본 발명은 종래 재료보다 휘도 및 발광 효율이 우수하면서도 동시에 저전압 구동이 가능하여 향상된 전력 효율을 갖는 유기발광 화합물을 제공하고자 한다.

또한, 본 발명은 상기 유기발광 화합물을 발광 재료로 채용하여 저전압 구동이 가능하여 보다 향상된 전력 효율과 고휘도, 고효율의 유기전계발광소자를 제공하고자 한다.

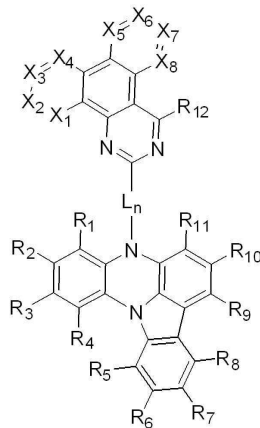
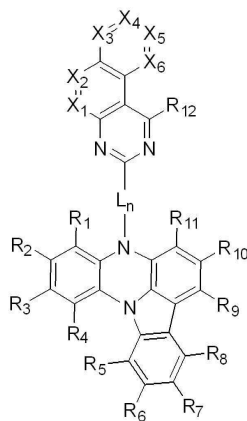
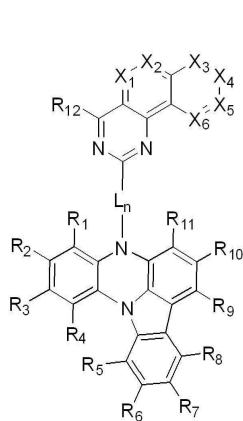
과제의 해결 수단

본 발명은 상기 과제를 해결하기 위하여, 하기 [화학식 I] 내지 [화학식 III]으로 표시되는 유기발광 화합물을 제공한다.

[화학식 I]

[화학식 II]

[화학식 III]



또한, 본 발명은 제1전극, 상기 제1전극에 대향된 제2전극 및 상기 제1전극과 상기 제2전극 사이에 개재되는 1층 이상의 유기층으로 이루어지고, 상기 유기층은 상기 [화학식 I] 내지 [화학식 III]으로 표시되는 유기발광 화합물을 하나 이상 포함하는 것을 특징으로 하는 유기전계발광소자를 제공한다.

본 발명에 따른 [화학식 I] 내지 [화학식 III]으로 표시되는 유기발광 화합물의 구체적인 치환기에 대해서는 후술한다.

발명의 효과

본 발명에 따른 유기발광 화합물을 유기전계발광소자에 채용하는 경우, 저전압 구동이 가능하여소자의 전력 효율이 우수하고, 고휘도 및 고효율의 특성을 갖는 소자를 구현할 수 있다.

도면의 간단한 설명

도 1은 본 발명의 일 실시예에 따른 유기전계발광소자의 구조를 나타낸 개념도이다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

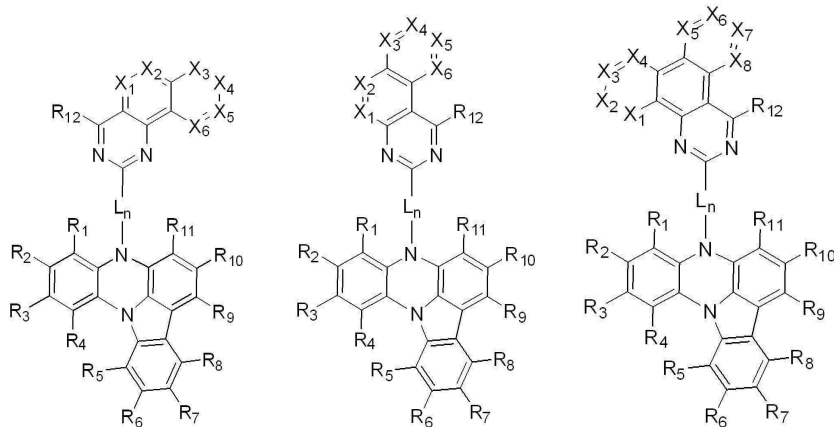
이하, 본 발명을 더욱 상세하게 설명한다.

본 발명에 따른 유기발광 화합물은 하기 [화학식 I] 내지 [화학식 III]으로 표시되는 것을 특징으로 한다.

[화학식 I]

[화학식 II]

[화학식 III]



상기 [화학식 I] 내지 [화학식 III]에서,

X_1 내지 X_8 은 서로 동일하거나 상이할 수 있고, 각각 독립적으로 N 또는 CR_{13} 이다.

R₁ 내지 R₁₃은 서로 동일하거나 상이할 수 있고, 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠기, 시아노기, 히드록실기, 니트로기, 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 2 내지 50의 헥테로아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 30의 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 30의 시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 50의 아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알콕시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 50의 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬아미노기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴아미노기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬실릴기 및 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 50의 아릴실릴기로 이루어지는 군으로부터 선택된다.

L은 연결기로서, 단일 결합이거나 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬렌기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 30의 알케닐렌기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 30의 알키닐렌기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 30의 시클로알킬렌기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 50의 아릴렌기 및 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 50의 헤테로아릴렌기 중에서 선택된다.

또한, n 은 0 내지 3의 정수이며, 상기 n 이 2 이상인 경우에 복수의 L 은 서로 동일하거나 상이하고, 상기 L 은 서로 또는 인접한 치환기와 결합하여 포화 또는 불포화 고리를 형성할 수 있다.

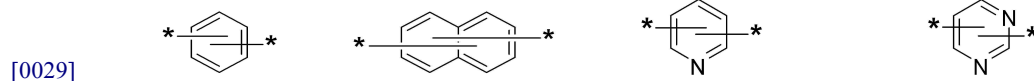
본 발명의 일 실시예에 의하면, 상기 R₁ 내지 R₁₃은 서로 또는 인접한 치환기와 결합하여 치환족, 방향족의 단일 환 또는 다환 고리를 형성할 수 있다. 또한, 상기 형성된 고리의 탄소원자는 N, S, O 및 P 중에서 선택되는 어느 하나 이상의 헤테로원자로 치환될 수 있다.

본 발명의 일 실시예에 의하면, 상기 L 및 R₁ 내지 R₁₃은 보다 구체적으로 각각 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 20의 알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 20의 알케닐기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 20의 아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 20의 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 20의 알킬실릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 20의 아릴실릴기, 비치환된 탄소수 1 내지 20의 알킬아민기 및 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 20의 아릴아민기 중에서 선택되는 어느 하나이고, 상기

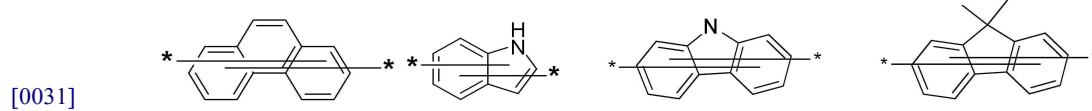
n은 단일결합, 1 또는 2인 것을 특징으로 한다.

[0027] 본 발명의 일 구현예에 의하면, 상기 n이 1인 경우, 상기 L은 하기 [구조식 A1] 내지 [구조식 A8] 중에서 선택되는 어느 하나의 연결기일 수 있다.

[0028] [구조식 A1] [구조식 A2] [구조식 A3] [구조식 A4]



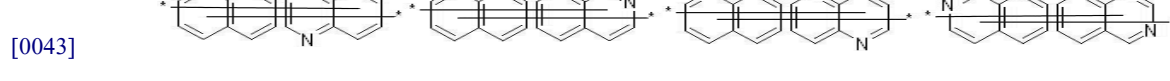
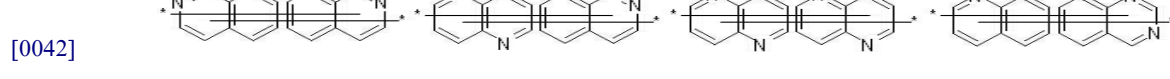
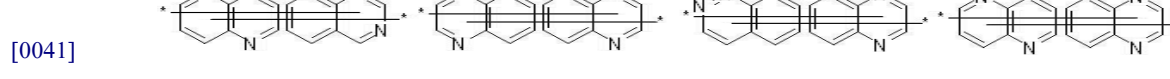
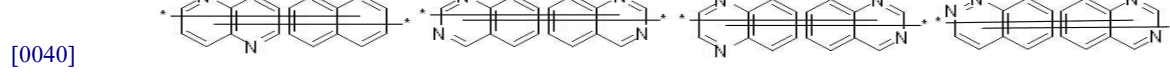
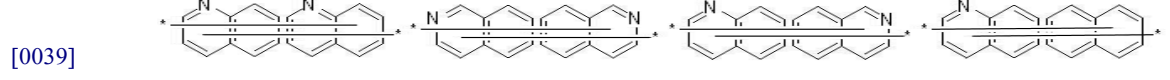
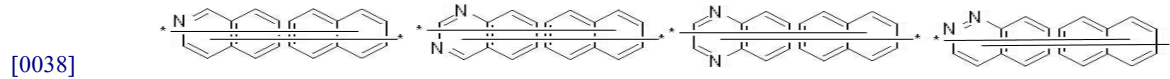
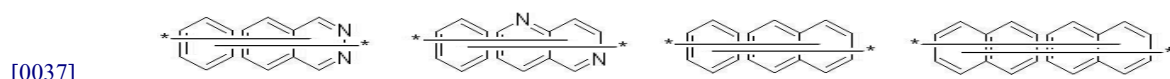
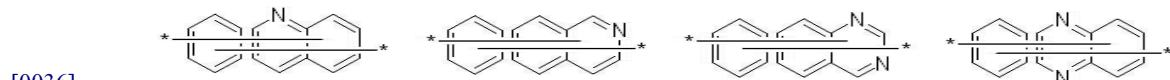
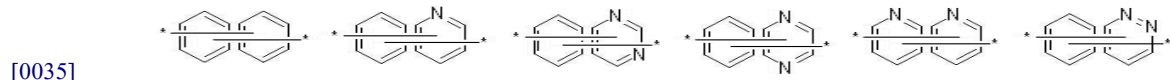
[0030] [구조식 A5] [구조식 A6] [구조식 A7] [구조식 A8]



[0032] 상기 [구조식 A1] 내지 [구조식 A8]에서, 각 구조식 내 방향족 고리의 탄소에는 수소 또는 중수소가 결합될 수 있다.

[0033] 본 발명의 다른 구현예에 의하면, 상기 n이 2인 경우, 상기 L은 하기 [구조식 B] 중에서 선택되는 어느 하나의 연결기일 수 있다.

[0034] [구조식 B]



[0045] 상기 [구조식 B]에서, 각 구조식 내 방향족 고리의 탄소에는 수소 또는 중수소가 결합될 수 있고, 수소 이외의 치환기일 경우, 인접하는 치환기와 서로 결합하여 포화 또는 불포화 고리를 형성할 수 있다.

[0046] 상기 '치환 또는 비치환된'에서의 '치환'은 중수소, 시아노기, 할로젠기, 히드록시기, 니트로기, 탄소수 1 내지 20의 알킬기, 탄소수 1 내지 20의 알케닐기, 탄소수 1 내지 20의 알킬닐기, 탄소수 1 내지 20의 할로젠화알킬기, 탄소수 5 내지 24의 아릴기, 탄소수 2 내지 24의 헤테로아릴기, 탄소수 1 내지 20의 알콕시기, 탄소수 5 내지 24의 아릴옥시기, 탄소수 1 내지 20의 알킬실릴기, 탄소수 5 내지 24의 아릴실릴기, 탄소수 1 내지 20의 알킬아민기 및 탄소수 6 내지 24의 아릴아민기 중에서 선택되는 하나 이상의 치환기로 더 치환되는 것을 의미하는 것으로서, 상기 R₁ 내지 R₁₃ 및 L은 각각 독립적으로 상기의 치환기에 의해서 더 치환될 수 있다.

[0047] 또한, 상기 "치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬기" 또는 "치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 50의 아릴기" 등에서의 상기 알킬기 또는 아릴기의 탄소수 범위는 상기 치환기가 치환된 부분을 고려하지 않고 비치환된 것으로 보았을 때의 알킬 부분 또는 아릴 부분을 구성하는 전체 탄소수를 의미하는 것이다. 예컨대, 파라 위치에 부틸기가 치환된 페닐기는 탄소수 4의 부틸기로 치환된 탄소수 6의 아릴기에 해당하는 것을 의미한다.

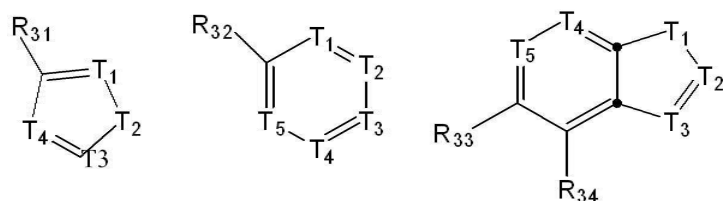
[0048] 한편, 본 발명에서 사용되는 치환기인 아틸기는 하나의 수소 제거에 의해서 방향족 탄화수소로부터 유도된 유기 라디칼로, 5 내지 7원, 바람직하게는 5 또는 6원을 포함하는 단일 또는 융합고리계를 포함하며, 또한 상기 아틸기에 치환기가 있는 경우 이웃하는 치환기와 서로 융합(fused)되어 고리를 추가로 형성할 수 있다.

[0049] 상기 아릴의 구체적인 예로 페닐기, 2-메틸페닐기, 3-메틸페닐기, 4-메틸페닐기, 4-에틸페닐기, o-비페닐기, m-비페닐기, p-비페닐기, 4-메틸비페닐기, 4-에틸비페닐기, o-터페닐기, m-터페닐기, p-터페닐기, 1-나프틸기, 2-나프틸기, 1-메틸나프틸기, 2-메틸나프틸기, 안트릴기, 페난트릴기, 피레닐기, 인데닐, 플루오레닐기, 테트라히드로나프틸기, 피렌일, 페릴렌일, 크라이세닐, 나프타세닐, 플루오란텐일 등과 같은 방향족 그룹을 들 수 있다.

[0050] 상기 아릴기 중 하나 이상의 수소 원자는 중수소 원자, 할로젠 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 할로젠화된 알킬기, 탄소수 1 내지 24의 알케닐기, 탄소수 1 내지 24의 알키닐기, 탄소수 1 내지 24의 헤테로알킬기, 탄소수 6 내지 24의 아릴기, 탄소수 6 내지 24의 아릴알킬기, 탄소수 2 내지 24의 헤테로아릴기 또는 탄소수 2 내지 24의 헤테로아릴알킬기로 치환될 수 있다.

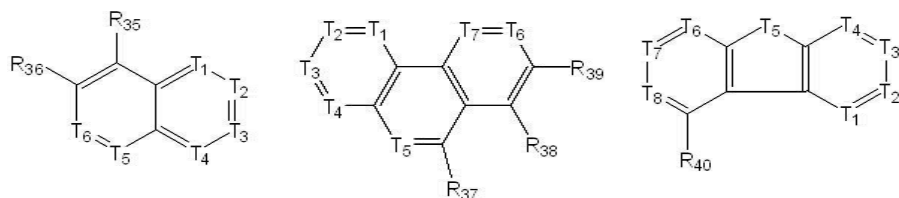
[0051] 본 발명에서 사용되는 치환기인 헤테로아릴기는 하기 [구조식 1] 내지 [구조식 6] 중에서 선택되는 어느 하나일 수 있다.

[0052] [구조식 1] [구조식 2] [구조식 3]



[0053]

[0054] [구조식 4] [구조식 5] [구조식 6]



[0055]

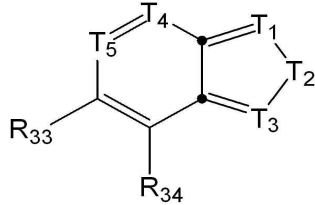
[0056] 상기 [구조식 1] 내지 [구조식 6]에서,

[0057] T₁ 내지 T₈은 서로 동일하거나 상이하며 각각 독립적으로, C(R₄₁), C(R₄₂)(R₄₃), N, N(R₄₄), O 및 S 중에서 선택되는 어느 하나일 수 있고, 상기 R₃₁ 내지 R₄₄은 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 30의 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 30의 아릴기 및 치환 또는 비치환되고 이종 원자로 O, N, S 및 P를 갖는 탄소수 2 내지 30

의 헤테로아릴기 중에서 선택되는 어느 하나일 수 있으며, 상기 각각의 [구조식 1] 내지 [구조식 6]에서 상기 R₃₁ 내지 R₄₄ 중 하나는 상기 [화학적 I] 내지 [화학적 III] 내의 치환기 또는 질소와 단일결합을 이룰 수 있다.

[0058] 또한, 상기 [구조식 3]은 전자의 이동에 따른 공명구조에 의해 하기 [구조식 3-1]로 표시되는 화합물을 포함할 수 있다.

[0059] [구조식 3-1]

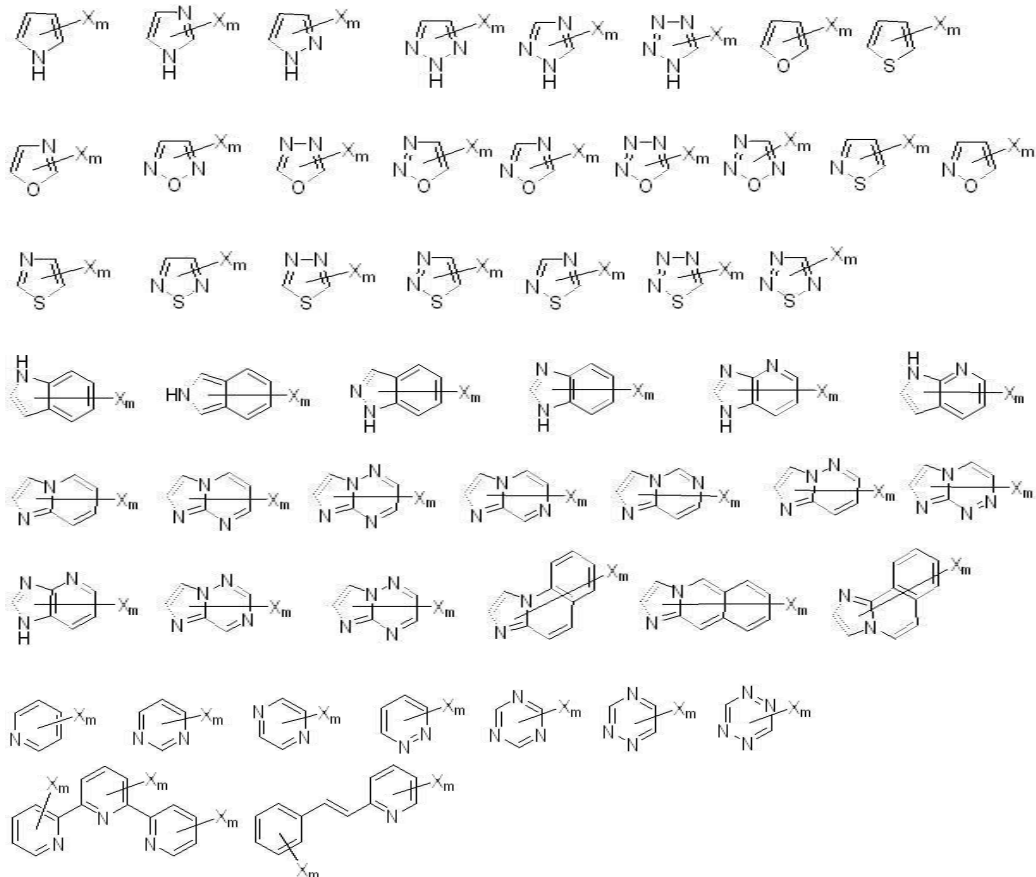


[0060]

상기 [구조식 3-1]에서, T₁ 내지 T₅와 R₃₃ 및 R₃₄는 앞서 정의한 바와 동일하다.

[0062] 또한, 본 발명의 바람직한 실시예에 의하면, 상기 [구조식 1] 내지 [구조식 6]은 하기 [구조식 7] 중에서 선택될 수 있다.

[0063] [구조식 7]



[0064]

[0065]

[0066]

[0067]

[0069] 상기 [구조식 7]에서,

[0070] X는 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 30의 아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 30의 알케닐기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 20의 알키닐기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 30의 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 30의 시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알콕시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬티옥시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 30의 아릴티옥시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬아민기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 6의 아릴기, 치환 또는 비치환되고 이종원자로 O, N, S 및 P를 갖는 탄소수 2 내지 30의 헤테로아릴기, 시아노기, 니트로기, 할로젠기로 이루어진 군 중에서 선택되는 어느 하나이고, m 은 1 내지 11의 정수이며, m이 2 이상인 경우 복수 개의 X는 서로 동일하거나 상이하고, 상기 하나 이상의 X 중 어느 하나는 상기 [화학식 I] 내지 [화학식 III] 내의 치환기 또는 질소와 단일결합을 이룰 수 있다.

[0071] 본 발명에서 사용되는 치환기인 알킬기의 구체적인 예로는 메틸기, 에틸기, 프로필기, 이소프로필기, 이소부틸기, sec-부틸기, tert-부틸기, 펜틸기, iso-아밀기, 헥실기, 헵틸기, 옥틸기, 스테아릴기, 트리클로로메틸기, 트리플루오르메틸기 등을 들 수 있으며, 상기 알킬기 중 하나 이상의 수소 원자는 중수소 원자, 할로젠 원자, 히드록시기, 니트로기, 시아노기, 트리플루오로메틸기, 실릴기(이 경우 "알킬실릴기"라 함), 치환 또는 비치환된 아미노기($-NH_2$, $-NH(R)$, $-N(R')(R'')$), 여기서 R, R' 및 R''은 각각 독립적으로 탄소수 1 내지 24의 알킬기임(이 경우 "알킬아미노기"라 함)), 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실기, 술폰산기, 인산기, 탄소수 1 내지 24의 알킬기, 탄소수 1 내지 24의 할로젠화된 알킬기, 탄소수 2 내지 24의 알케닐기, 탄소수 2 내지 24의 알키닐기, 탄소수 1 내지 24의 헤테로알킬기, 탄소수 5 내지 24의 아릴기, 탄소수 6 내지 24의 아릴알킬기, 탄소수 3 내지 24의 헤테로아릴기 또는 탄소수 3 내지 24의 헤테로아릴알킬기로 치환될 수 있다.

[0072] 본 발명에서 사용되는 치환기인 알콕시기의 구체적인 예로는 메톡시기, 에톡시기, 프로폭시기, 이소부틸옥시기, sec-부틸옥시기, 펜틸옥시기, iso-아밀옥시기, 헥실옥시기 등을 들 수 있으며, 상기 알킬기의 경우와 마찬가지로의 치환기로 치환가능하다.

[0073] 본 발명의 화합물에서 사용되는 치환기인 할로겐기의 구체적인 예로는 플루오르(F), 클로린(Cl), 브롬(Br) 등을 들 수 있다.

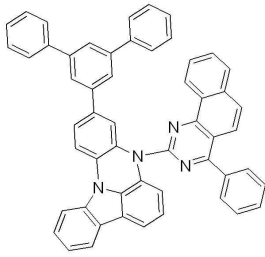
[0074] 본 발명에 사용되는 치환기인 아릴옥시기는 -O- 아릴 라디칼을 의미하며, 이때 아릴기는 상기에서 정의된 바와 같고, 구체적인 예로서 페녹시, 나프톡시, 안트라세닐옥시, 페난트레닐옥시, 플루오레닐옥시, 인데닐옥시 등을 들 수 있고, 아릴옥시기에 포함되어 있는 하나 이상의 수소 원자는 추가로 치환가능하다.

[0075] 본 발명에 사용되는 치환기인 실릴기의 구체적인 예로는 트리메틸실릴, 트리에틸실릴, 트리페닐실릴, 트리메톡시실릴, 디메톡시페닐실릴, 디페닐메틸실릴, 디페닐비닐실릴, 메틸사이클로부틸실릴, 디메틸퓨릴실릴 등을 들 수 있다.

[0076] 본 발명에 사용되는 알케닐기의 구체적인 예로는 직쇄상 또는 분지쇄상의 알케닐기를 나타내고, 3-펜테닐기, 4-헥세닐기, 5-헵테닐기, 4-메틸-3-펜테닐기, 2,4-디메틸-펜테닐기, 6-메틸-5-헵테닐기, 2,6-디메틸-5-헵테닐기 등을 들 수 있다.

[0077] 본 발명에 따른 [화합식 I] 내지 [화합식 III]으로 표시되는 유기발광 화합물은 보다 구체적으로 하기 [화합물 1] 내지 [화합물 15]로부터 선택될 수 있지만 이에 한정되지는 않는다.

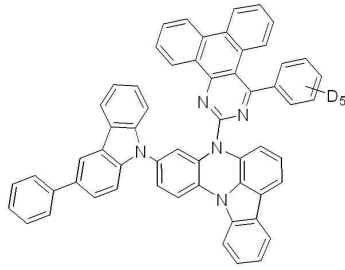
[0078] [화합물 1] [화학식 2] [화학식 3]



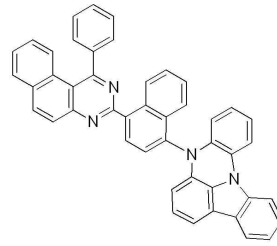
[0079]

[0080]

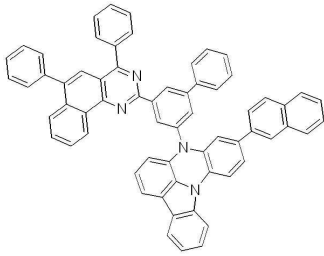
[화합물 4]



[화학식 5]



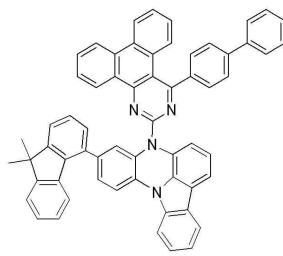
[화학식 6]



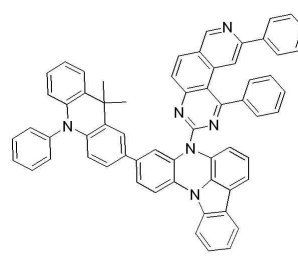
[0081]

[0082]

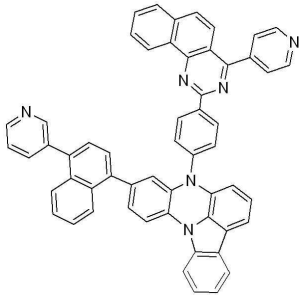
[화합물 7]



[화학식 8]



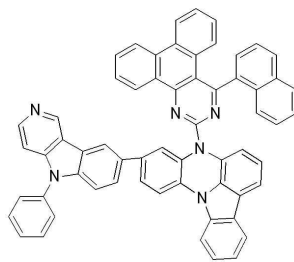
[화학식 9]



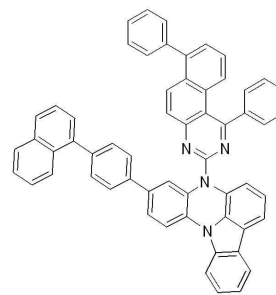
[0083]

[0084]

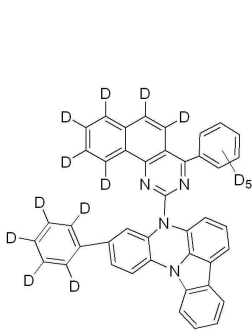
[화합물 10]



[화학식 11]



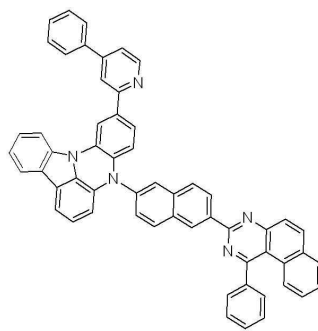
[화학식 12]



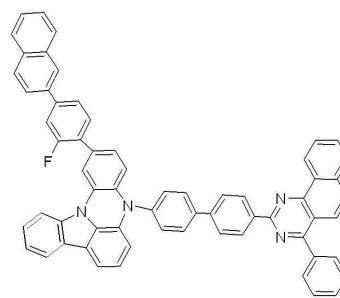
[0085]

[0086]

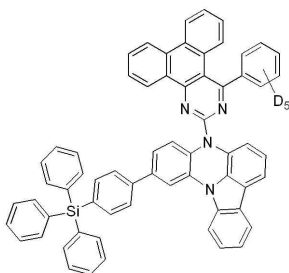
[화합물 13]



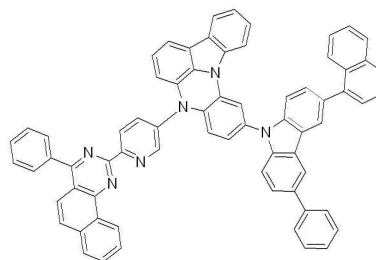
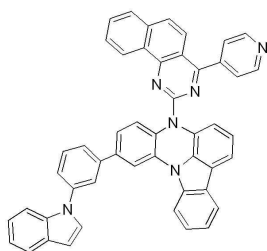
[화학식 14]



[화학식 15]



[0087]



[0088]

또한, 본 발명은 제1전극, 상기 제1전극에 대향된 제2전극 및 상기 제1전극과 상기 제2전극 사이에 개재되는 유

기층을 포함하고, 상기 유기층이 본 발명에서의 상기 [화학식 I] 내지 [화학식 III]으로 표시되는 유기발광 화합물을 1종 이상 포함할 수 있다.

[0089] 또한, 상기 본 발명의 유기발광 화합물이 포함된 유기층은 정공 주입층, 정공 수송층, 정공 주입 기능 및 정공 수송 기능을 동시에 갖는 기능층, 발광층, 전자 수송층, 및 전자 주입층 중 적어도 하나를 포함할 수 있다. 이 때, 상기 제1전극과 상기 제2전극 사이에 개재된 유기층이 발광층을 포함할 수 있으며, 상기 발광층은 호스트와 도판트로 이루어지고, 본 발명의 유기발광 화합물은 호스트로서 사용될 수 있다.

[0090] 한편, 본 발명에서 상기 발광층에는 호스트와 더불어 도펀트 재료가 사용될 수 있다. 상기 발광층이 호스트 및 도펀트를 포함할 경우, 도펀트의 함량은 통상적으로 호스트 약 100 중량부를 기준으로 하여 약 0.01 내지 약 20 중량부의 범위에서 선택될 수 있다.

[0091] 이하, 본 발명의 유기전계발광소자를 도 1을 통해 설명하고자 한다.

[0092] 도 1은 본 발명의 유기전계발광소자의 구조를 나타내는 단면도이다. 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 있다.

[0093] 도 1을 참조하여 본 발명의 유기전계발광소자 및 그 제조방법에 대하여 살펴보면 다음과 같다.

[0094] 먼저 기판(10) 상부에 애노드 전극용 물질을 코팅하여 애노드(20)를 형성한다. 여기에서 기판(10)으로는 통상적인 유기 EL 소자에서 사용되는 기판을 사용하는데 투명성, 표면 평활성, 취급용이성 및 방수성이 우수한 유기 기판 또는 투명 플라스틱 기판이 바람직하다. 그리고, 애노드 전극용 물질로는 투명하고 전도성이 우수한 산화인듐주석(ITO), 산화인듐아연(IZO), 산화주석(SnO_2), 산화아연(ZnO) 등을 사용한다.

[0095] 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.

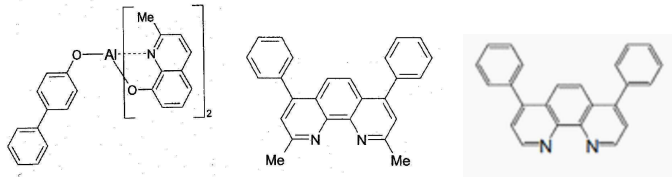
[0096] 상기 정공주입층 재료는 당업계에서 통상적으로 사용되는 것인 한 특별히 제한되지 않고 사용할 수 있으며, 예를 들어 2-TNATA[4,4',4''-tris(2-naphthylphenyl-phenylamino)-triphenylamine], NPD[N,N'-di(1-naphthyl)-N,N'-diphenylbenzidine)], TPD[N,N'-diphenyl-N,N'-bis(3-methylphenyl)-1,1'-biphenyl-4,4'-diamine], DNTPD[N,N'-diphenyl-N,N'-bis-[4-(phenyl-m-tolyl-amino)-phenyl]-biphenyl-4,4'-diamine] 등을 사용할 수 있다.

[0097] 또한 상기 정공수송층의 재료로서 당업계에 통상적으로 사용되는 것인 한 특별히 제한되지 않으며, 예를 들어, N,N'-비스(3-메틸페닐)-N,N'-디페닐-[1,1-비페닐]-4,4'-디아민(TPD) 또는 N,N'-디(나프탈렌-1-일)-N,N'-디페닐 벤지딘(α -NPD) 등을 사용할 수 있다.

[0098] 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. 이때, 사용되는 정공 저지 물질은 특별히 제한되지는 않으나 전자수송능력을 가지면서 발광 화합물보다 높은 이온화 포텐셜을 가져야 하며 대표적으로 BAlq, BCP, TPBI 등이 사용될 수 있다.

[0099] 상기 정공저지층에 사용되는 물질로써, BA1q, BCP, Bphen, TPBI, NTAZ, BeBq₂, OXD-7, Liq 및 [화학식 101] 내지 [화학식 107] 중에서 선택되는 어느 하나가 사용될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

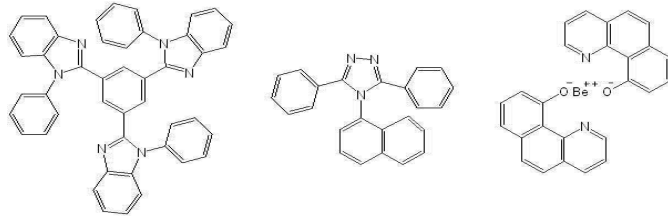
[0100] BA1a BCP Bphen



TPBI

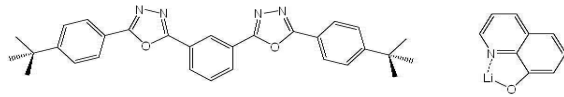
NTAZ

BeBq₂



OXD-7

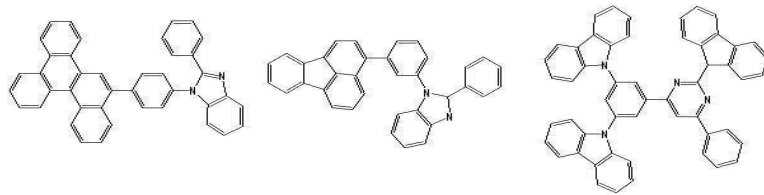
Liq



화학식 101

화학식 102

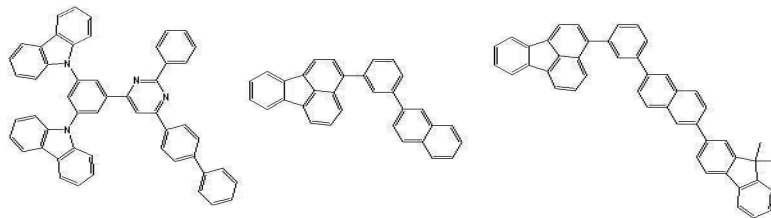
화학식 103



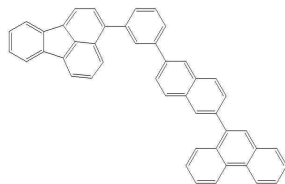
화학식 104

화학식 105

화학식 106



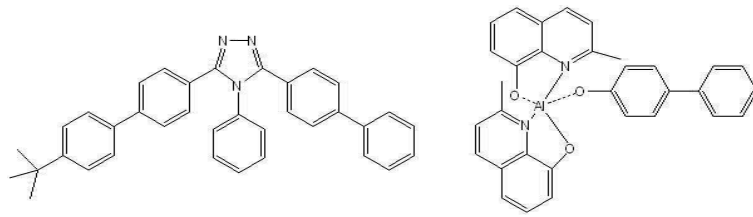
화학식 107



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.

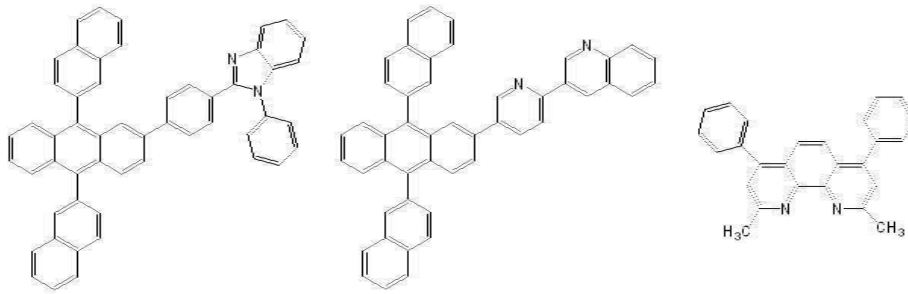
상기 전자 수송층 재료로는 전자주입전극(Cathode)로부터 주입된 전자를 안정하게 수송하는 기능을 하는 것으로서 공지의 전자 수송 물질을 이용할 수 있다. 공지의 전자 수송 물질의 예로는, 퀴놀린 유도체, 특히 트리스(8-퀴놀리노레이트)알루미늄(Alq₃), TAZ, Balq, 베릴륨 비스(벤조퀴놀리-10-노에이트)(beryllium

bis(benzoquinolin-10-olate: Bebq2), ADN, [화합물 201], [화합물 202], 옥사디아졸 유도체인 PBD, BMD, BND 등과 같은 재료를 사용할 수도 있다.



TAZ

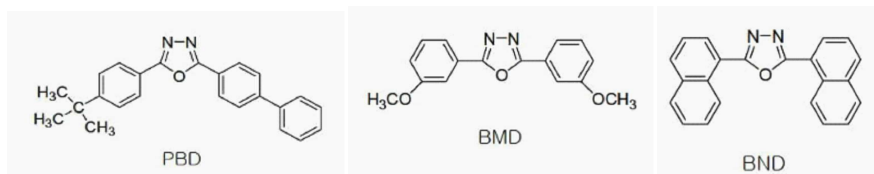
BA1q



[화합물 201]

[화합물 202]

BCP



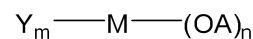
PBD

BMD

BND

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

[화합식 C]



상기 [화합식 C]에서,

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.

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 이중 원자로 O, N 또는 S를 갖는 탄소수 2 내지 50의 헤테로아릴기 중에서 선택되는 어느 하나이다.

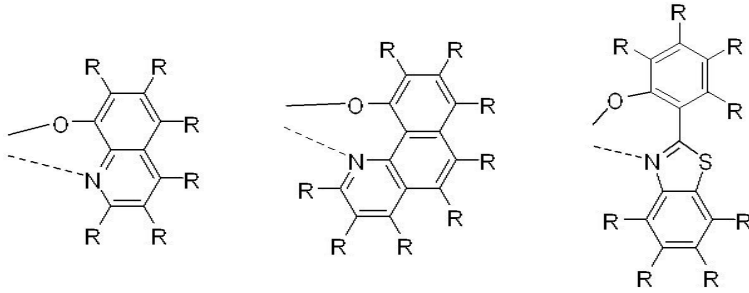
또한, 상기 M이 알칼리 금속에서 선택되는 하나의 금속인 경우에는 $m=1$, $n=0$ 이고, 상기 M이 알칼리 토금속에서 선택되는 하나의 금속인 경우에는 $m=1$, $n=1$ 이거나, 또는 $m=2$, $n=0$ 이고, 상기 M이 붕소 또는 알루미늄인 경우에는 $m=1$ 내지 3중 어느 하나이며, n 은 0 내지 2 중 어느 하나로서 $m+n=3$ 을 만족한다.

상기 '치환 또는 비치환된'에서의 '치환'은 중수소, 시아노기, 할로젠기, 히드록시기, 니트로기, 알킬기, 알콕시기, 알킬아미노기, 아릴아미노기, 헤테로 아릴아미노기, 알킬실릴기, 아릴실릴기, 아릴옥시기, 아릴기, 헤테

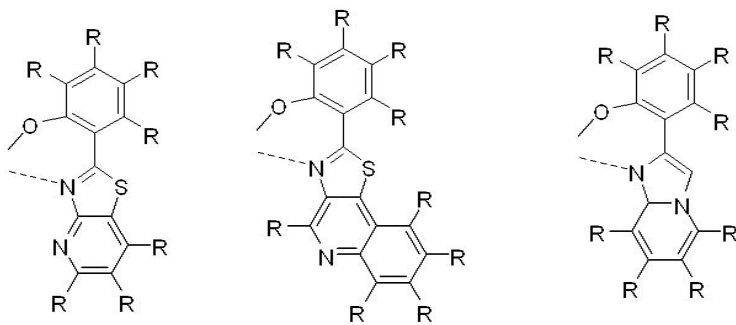
로아릴기, 게르마늄, 인 및 보론으로 이루어진 군에서 선택된 1개 이상의 치환기로 치환되는 것을 의미한다.

[0128] 또한, 상기 Y는 각각 동일하거나 상이하며, 서로 독립적으로 하기 [구조식 C1] 내지 [구조식 C39]부터 선택되는 어느 하나일 수 있다.

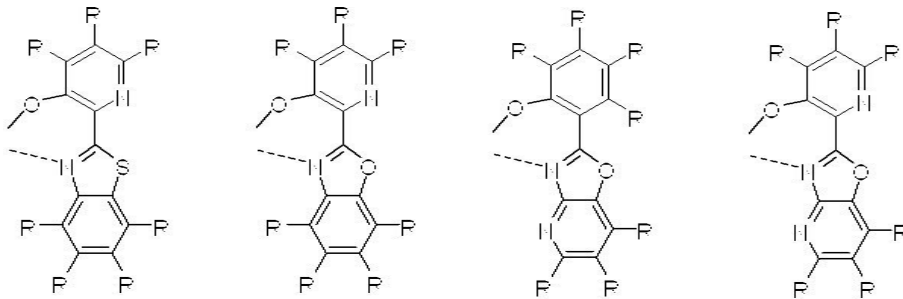
[0129] [구조식 C1] [구조식 C2] [구조식 C3]



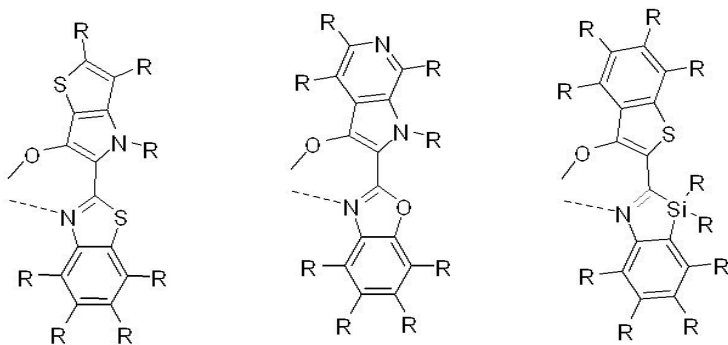
[0130] [구조식 C4] [구조식 C5] [구조식 C6]



[0132] [구조식 C7] [구조식 C8] [구조식 C9] [구조식 C10]

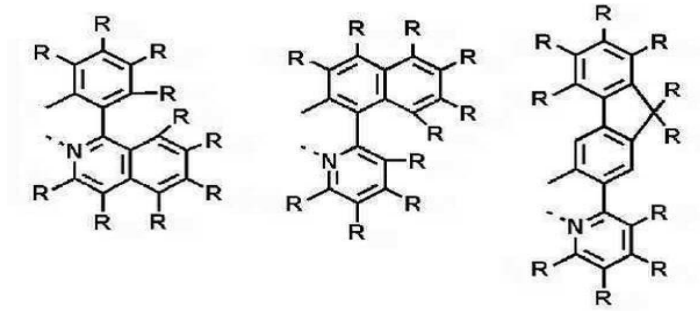


[0134] [구조식 C11] [구조식 C12] [구조식 C13]



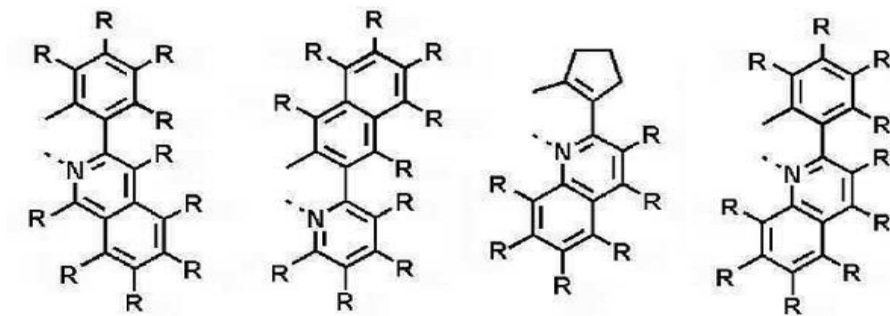
[0136]

[0137] [구조식 C14] [구조식 C15] [구조식 C16]



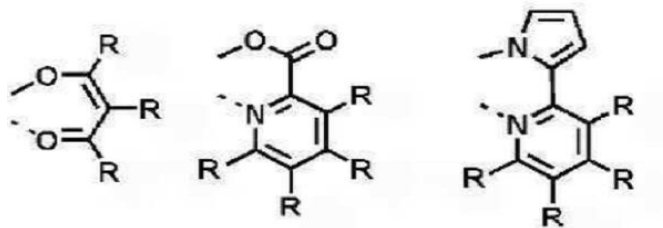
[0138]

[0139] [구조식 C17] [구조식 C18] [구조식 C19] [구조식 C20]



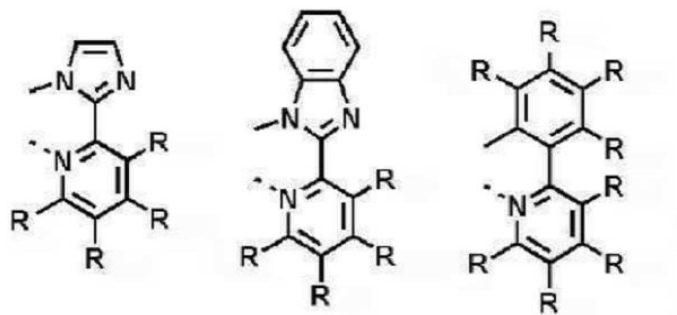
[0140]

[0141] [구조식 C21] [구조식 C22] [구조식 C23]



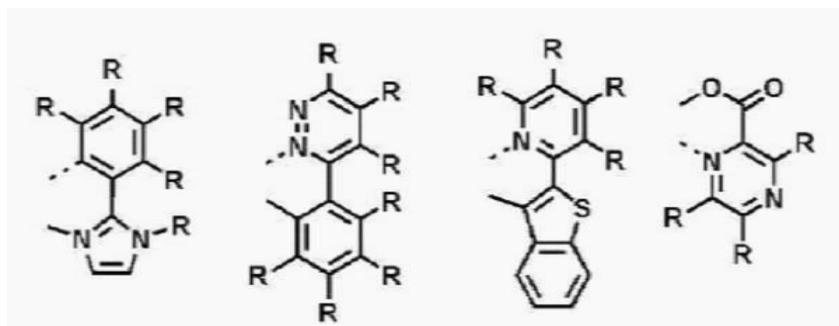
[0142]

[0143] [구조식 C24] [구조식 C25] [구조식 C26]



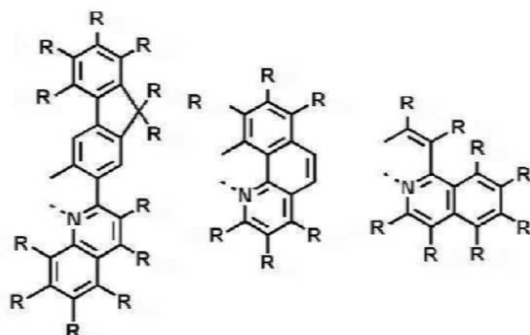
[0144]

[0145] [구조식 C27] [구조식 C28] [구조식 C29] [구조식 C30]



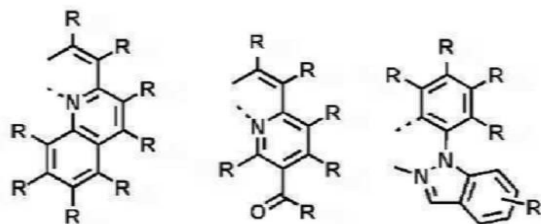
[0146]

[0147] [구조식 C31] [구조식 C32] [구조식 C33]



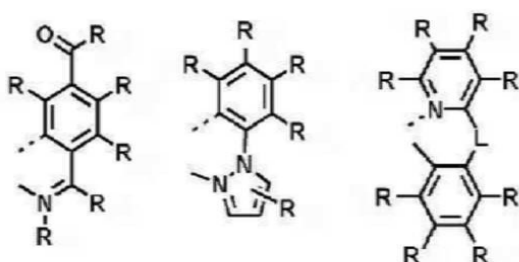
[0148]

[0149] [구조식 C34] [구조식 C35] [구조식 C36]



[0150]

[0151] [구조식 C37] [구조식 C38] [구조식 C39]



[0152]

[0153] 상기 [구조식 C1] 내지 [구조식 C39]에서,

[0154] 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.

[0155] 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.

[0156] 본 발명에 따른 유기전계발광소자는 상기 유기층이 발광층을 포함하며, 상기 발광층은 상기 [화학식 I] 내지 [화학식 III]으로 표시되는 하나 이상의 유기발광 화합물 이외에 하나 이상의 인광 도펀트를 더 포함하는 것을 특징으로 하며, 본 발명의 유기전계발광소자에 적용되는 발광 도펀트는 특별히 제한되지는 않으나, 하기 [일반식 A-1] 내지 [일반식 J-1]으로 표시되는 화합물 중에서 선택되는 1종 이상의 화합물일 수 있다.

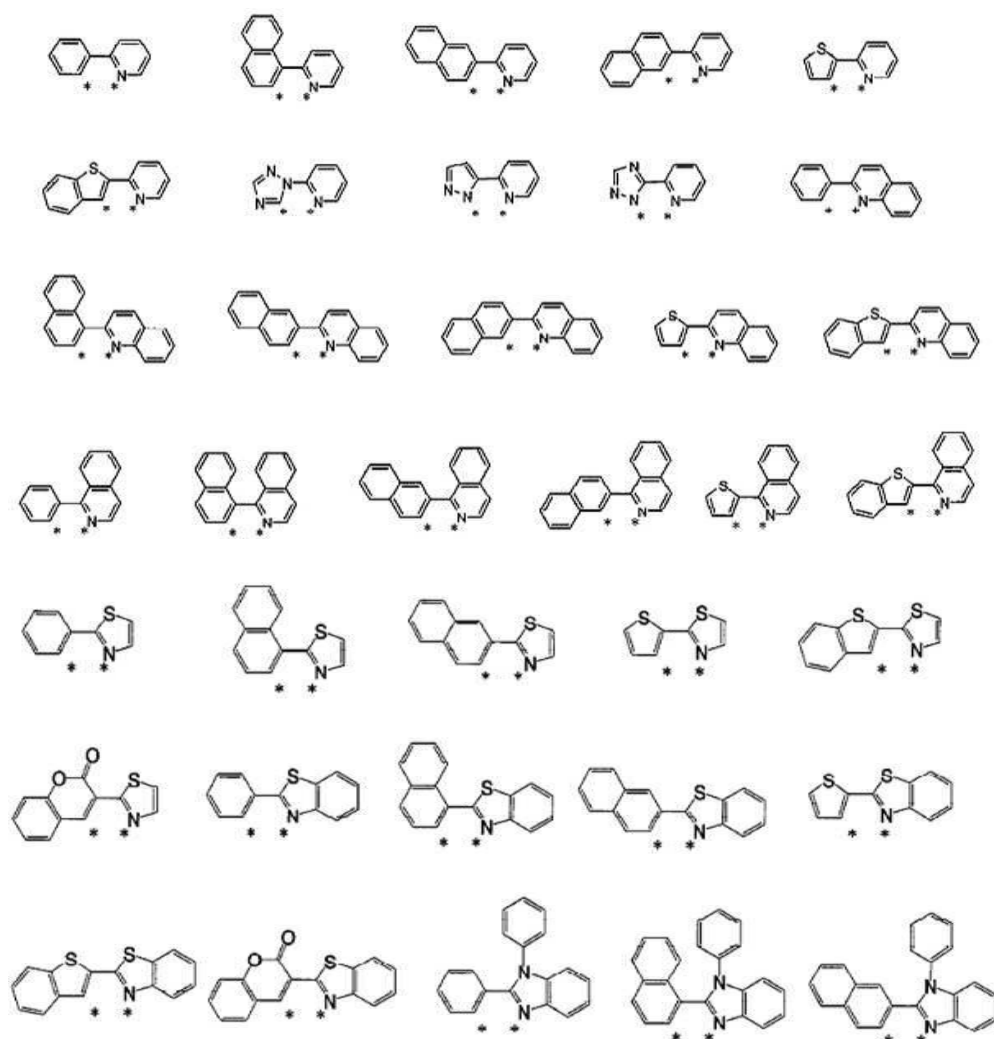
[0157] [일반식 A-1]

[0158] $ML_1L_2L_3$

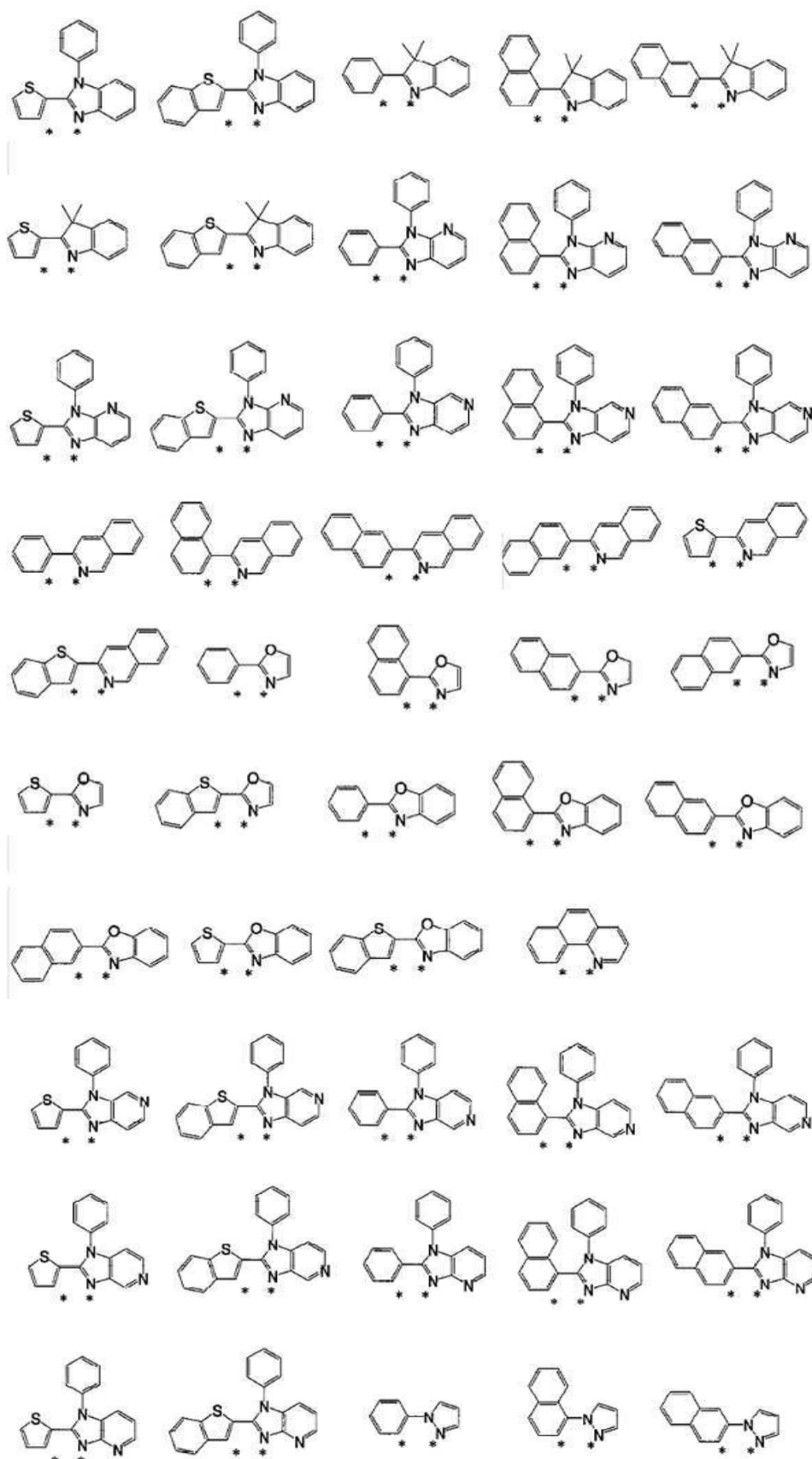
[0159] 상기 M은 7족, 8족, 9족, 10족, 11족, 13족, 14족, 15족 및 16족의 금속으로 이루어진 군으로부터 선택되고, 바람직하게는 Ir, Pt, Pd, Rh, Re, Os, Tl, Pb, Bi, In, Sn, Sb, Te, Au 및 Ag로부터 선택된다. 또한, 상기 L_1 , L_2 및 L_3 는 리간드로 서로 동일하거나 상이하고 각각 독립적으로 하기 [구조식 D]에서 선택되는 어느 하나를 들 수 있지만, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0160] 또한, 하기 [구조식 D]내 *은 금속 이온 M에 배위하는 사이트(site)를 표현한다.

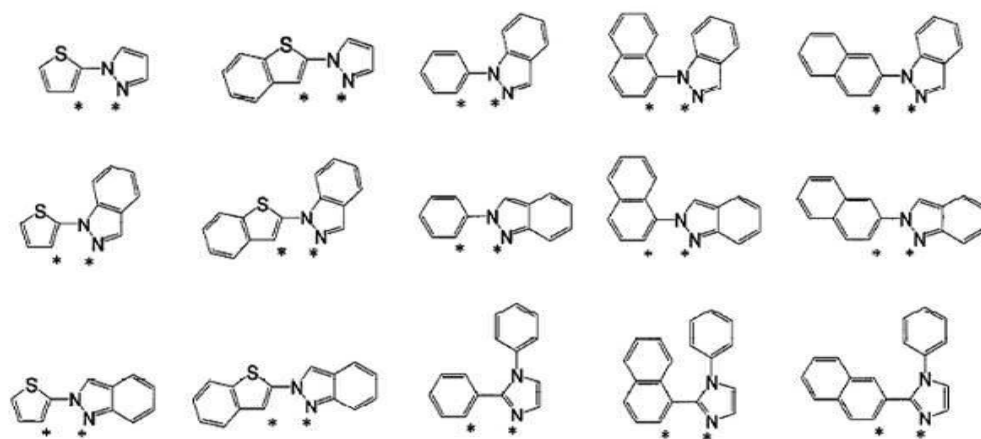
[0161] [구조식 D]



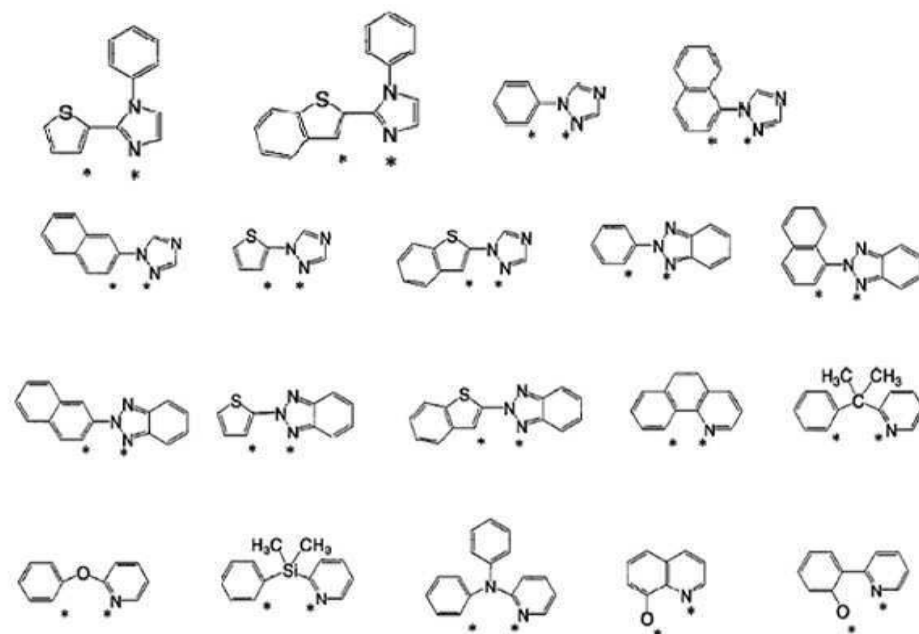
[0163]



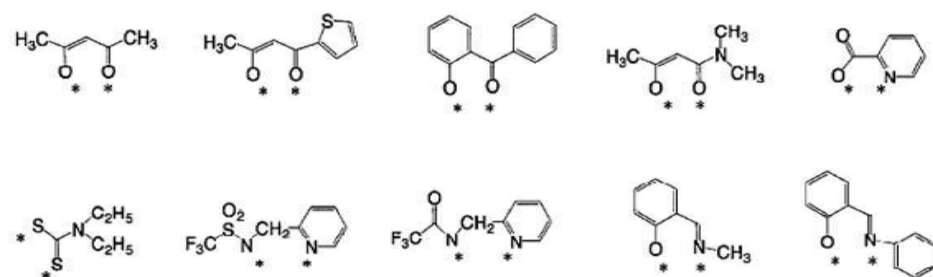
[0164]



[0165]



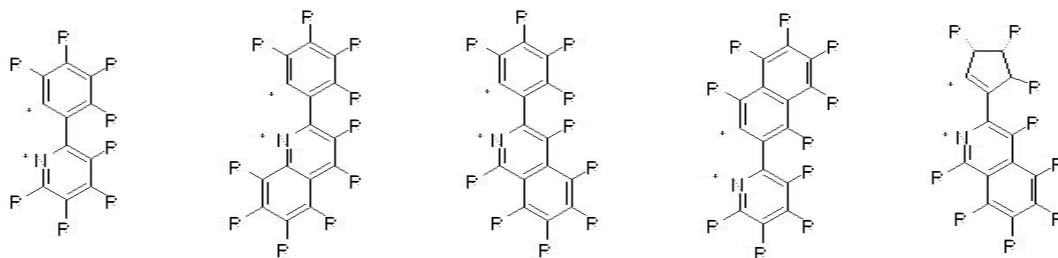
[0166]



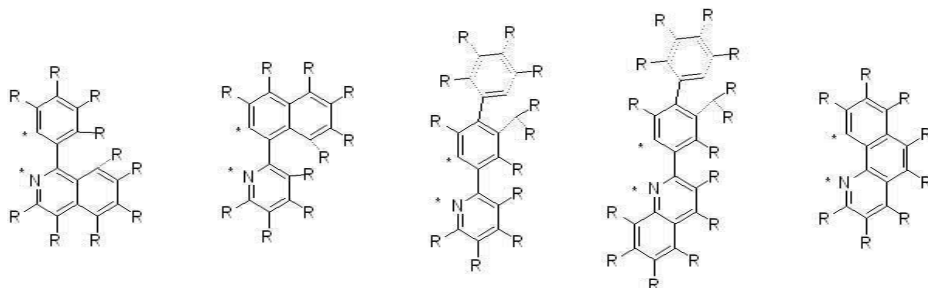
[0167]



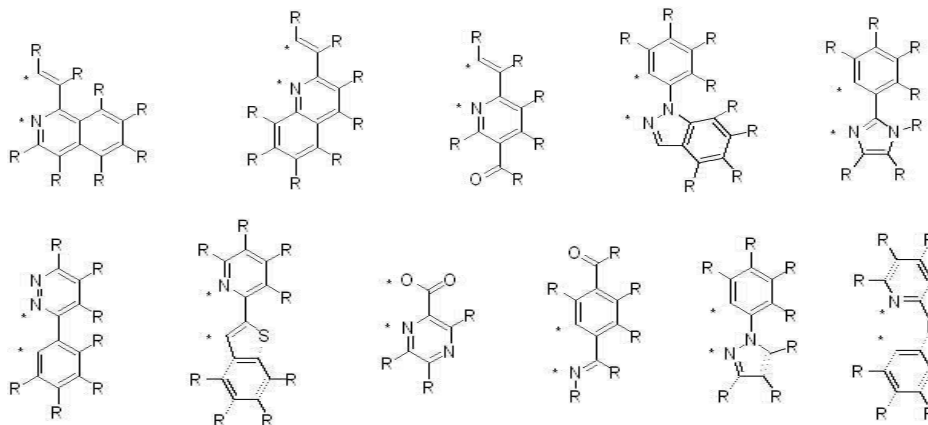
[0168]



[0169]



[0170]



[0171]

상기 [구조식 D]에서,

[0172]

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.

[0173]

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.

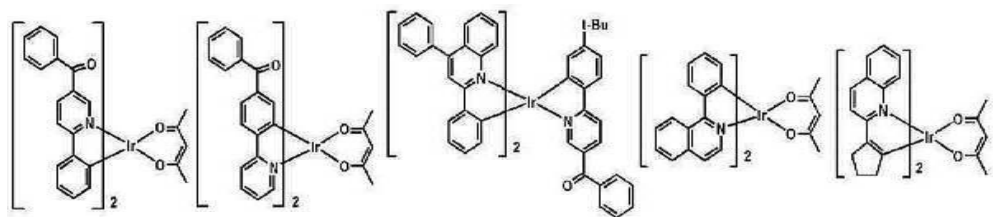
[0174]

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

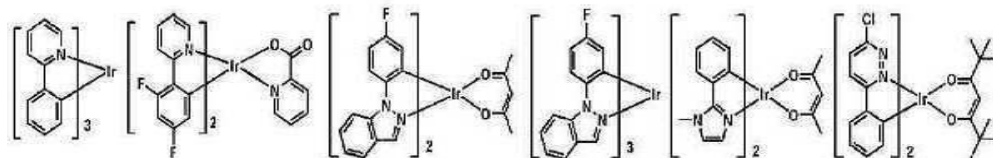
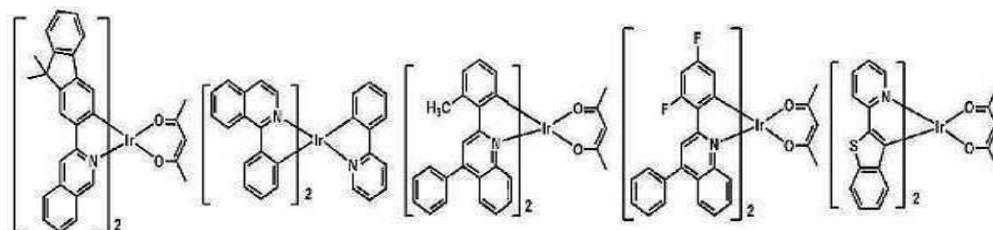
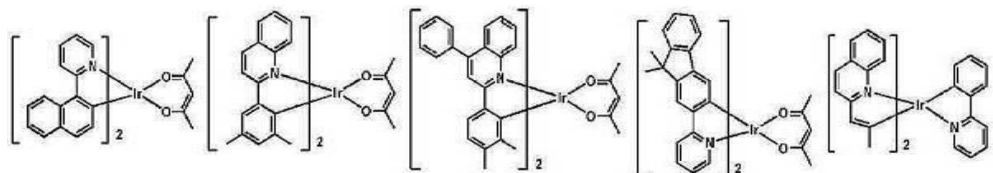
[0175]

상기 L은 인접한 치환체와 알킬렌 또는 알케닐렌으로 연결되어 스피로고리 또는 융합고리를 형성할 수 있다.

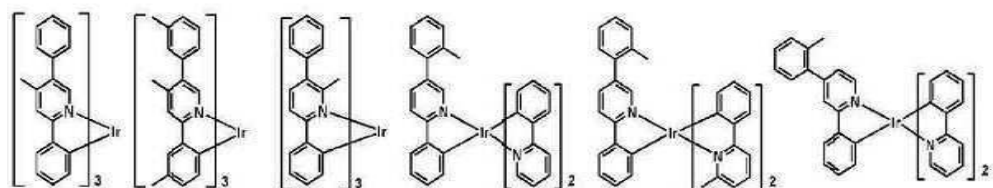
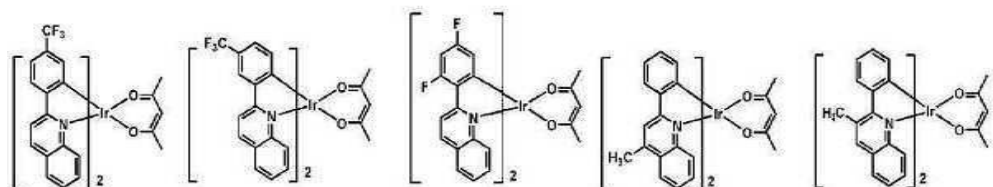
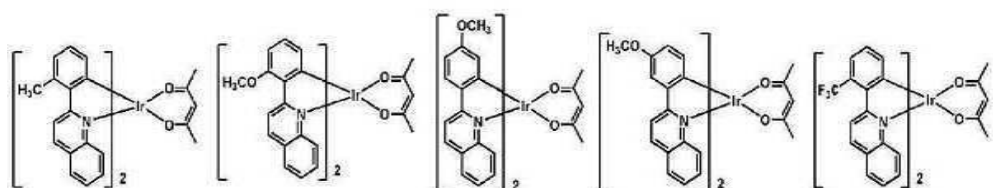
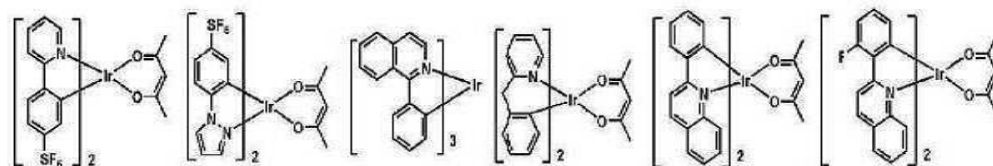
[0176] 일 예로서, 상기 [일반식 A-1]으로 표시되는 도펀트는 하기 화합물 중에서 선택된 어느 하나일 수 있다.



[0177]

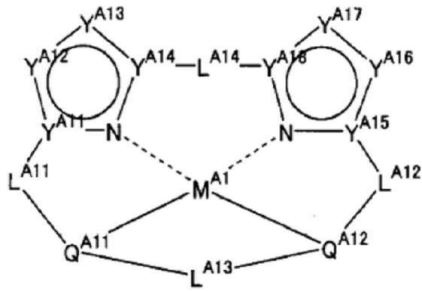


[0178]



[0179]

[0183] [일반식 B-1]

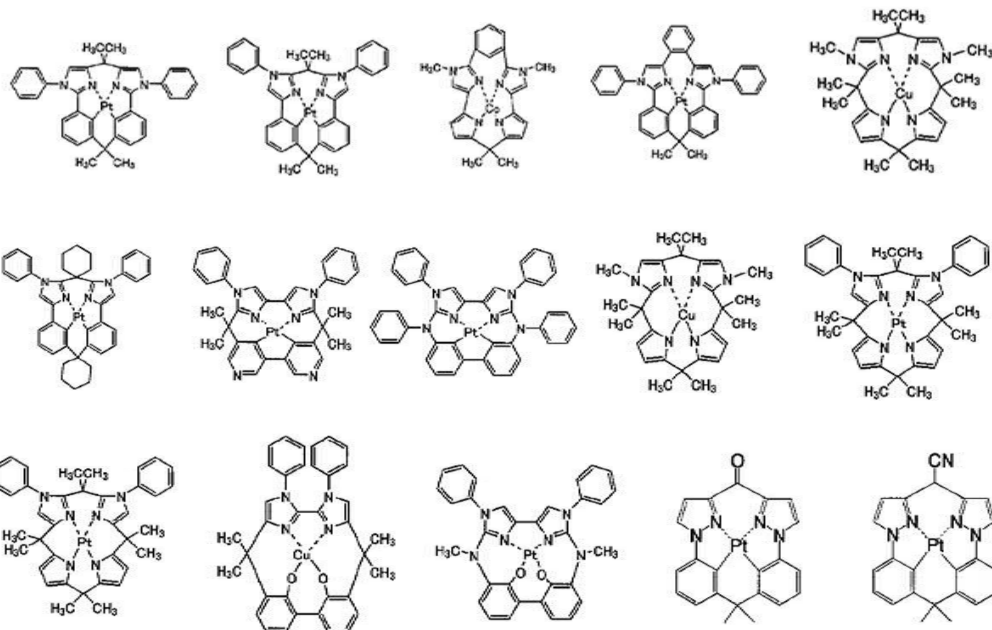


[0184]

[0185] 상기 [일반식 B-1]에서,

[0186] 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 무치환의 탄소 원자, 치환 또는 무치환의 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.

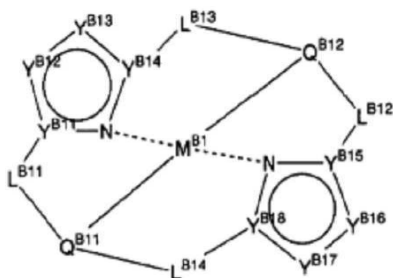
[0187] 상기 [일반식 B-1]으로 표시되는 화합물의 예시적인 구조는 아래와 같으나, 이에 제한되지 않는다.



[0188]

[0189]

[0190] [일반식 C-1]

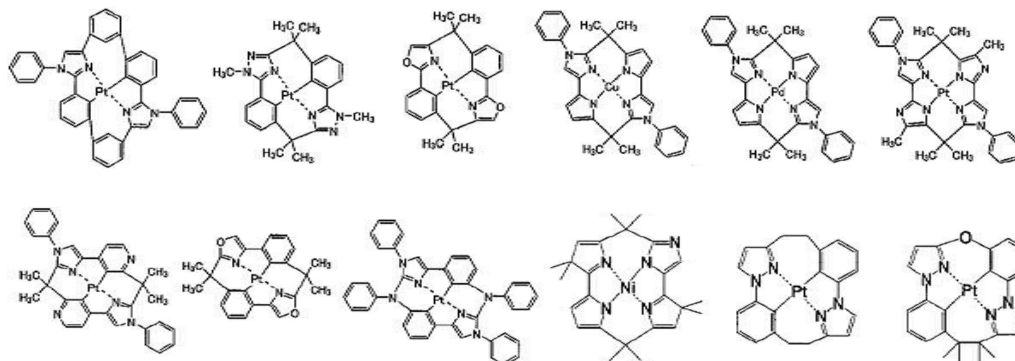


[0191]

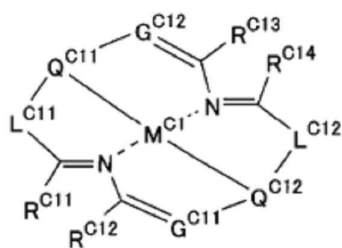
[0192] 상기 [일반식 C-1]에서,

[0193] 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 무치환의 탄소 원자, 치환 또는 무치환의 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.

[0194] 상기 [일반식 C-1]으로 표시되는 화합물의 예시적인 구조는 아래와 같으나, 이에 제한되지 않는다.



[0195] [일반식 D-1]

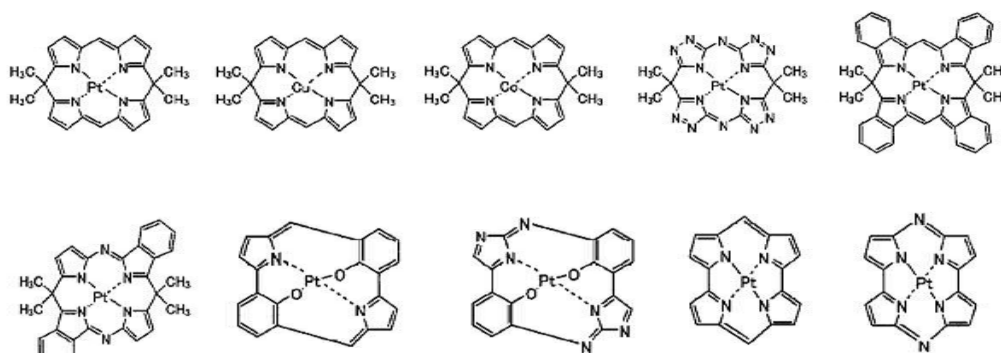


[0197]

[0198] 상기 [일반식 D-1]에서,

[0199] 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 무치환의 탄소 원자를 나타내며, L^{C11} , L^{C12} 는 연결기를 나타내며, Q^{C11} , Q^{C12} 는 M^{C1} 에 결합하는 원자를 함유하는 부분 구조를 나타낸다.

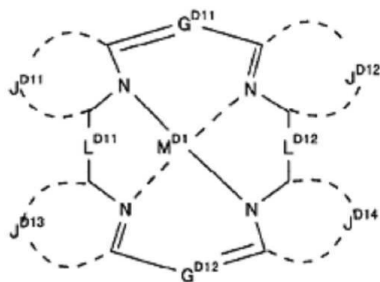
[0200] 상기 [일반식 D-1]으로 표시되는 화합물의 예시적인 구조는 아래와 같으나, 이에 제한되지 않는다.



[0201]

[0202]

[0203] [일반식 E-1]

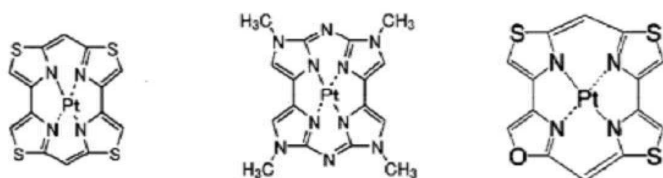


[0204]

[0205] 상기 [일반식 E-1]에서,

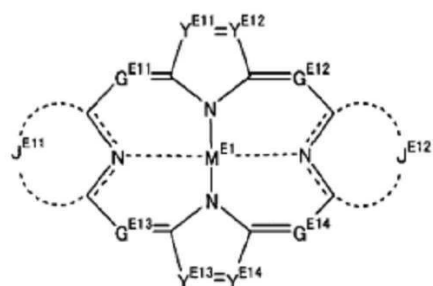
[0206] M^{D1} 은 [일반식 A-1]에서 정의한 바와 동일한 금속 이온을 나타내며, G^{D11} , G^{D12} 는 각각 독립적으로 질소 원자, 치환 또는 무치환의 탄소 원자를 나타내며, J^{D11} , J^{D12} , J^{D13} 및 J^{D14} 는 각각 독립에 5 원 고리를 형성하는데도 필요한 원자군을 나타내며, L^{D11} , L^{D12} 는 연결기를 나타낸다.

[0207] 상기 [일반식 E-1]으로 표시되는 화합물의 예시적인 구조는 아래와 같으나, 이에 제한되지 않는다.



[0208]

[0209] [일반식 F-1]

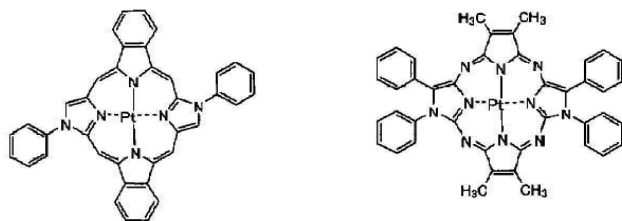


[0210]

[0211] 상기 [일반식 F-1]에서,

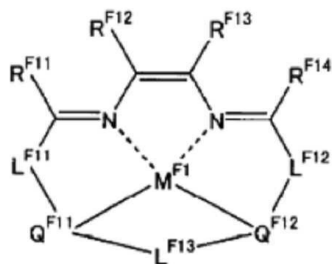
[0212] M^{E1} 은 [일반식 A-1]에서 정의한 바와 동일한 금속 이온을 나타내며, J^{E11} , J^{E12} 는 각각 독립적으로 5 원 고리를 형성하는데도 필요한 원자군을 나타내며, G^{E11} , G^{E12} , G^{E13} 및 G^{E14} 는 각각 독립적으로 질소 원자, 치환 또는 무치환의 탄소 원자를 나타내며, Y^{E11} , Y^{E12} , Y^{E13} 및 Y^{E14} 는 각각 독립적으로 질소 원자, 치환 또는 무치환의 탄소원자를 나타낸다.

[0213] 상기 [일반식 F-1]으로 표시되는 화합물의 예시적인 구조는 아래와 같으나, 이에 제한되지 않는다.



[0214]

[0215] [일반식 G-1]



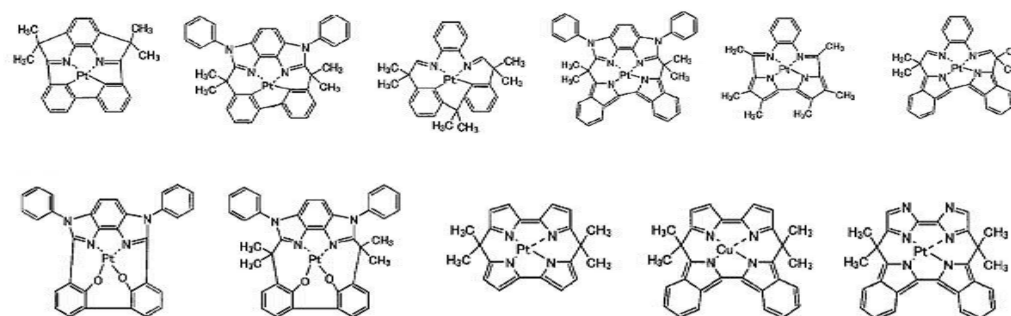
[0216]

[0217] 상기 [일반식 G-1]에서,

[0218] M^{F1} 은 [일반식 A-1]에서 정의한 바와 동일한 금속 이온을 나타낸다.

[0219] L^{F11} , L^{F12} 및 L^{F13} 은 연결기를 나타내며, R^{F11} , R^{F12} , R^{F13} 및 R^{F14} 는 치환기를 나타내고, R^{F11} 과 R^{F12} , R^{F12} 와 R^{F13} , R^{F13} 과 R^{F14} 는 서로 연결되어 고리를 형성할 수 있고, 이때 R^{F1} 과 R^{F12} , R^{F13} 과 R^{F14} 가 형성하는 고리는 5 원환이다. 또한 Q^{F11} , Q^{F12} 는 M^{F1} 에 결합하는 원자를 함유하는 부분 구조를 나타낸다.

[0220] 상기 [일반식 G-1]으로 표시되는 화합물의 예시적인 구조는 아래와 같으나, 이에 제한되지 않는다.

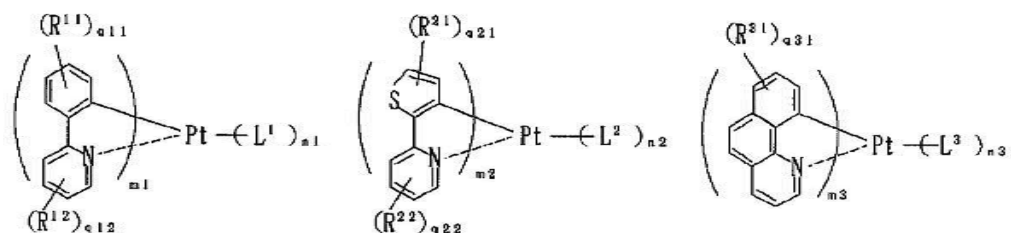


[0221]

[0222] [일반식 H-1]

[일반식 H-2]

[일반식 H-3]



[0223]

[0224] 상기 [일반식 H-1]에서,

[0225] 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.

[0226] 또한, q_{11} , q_{12} 가 2 내지 4인 경우, 복수 개의 R_{11} 및 R_{12} 는 각각 동일하거나 상이할 수 있다.

[0227] L^1 은 백금에 결합하는 리간드로서, 오르토 메탈(ortho metal)화 백금 착체를 형성할수 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.

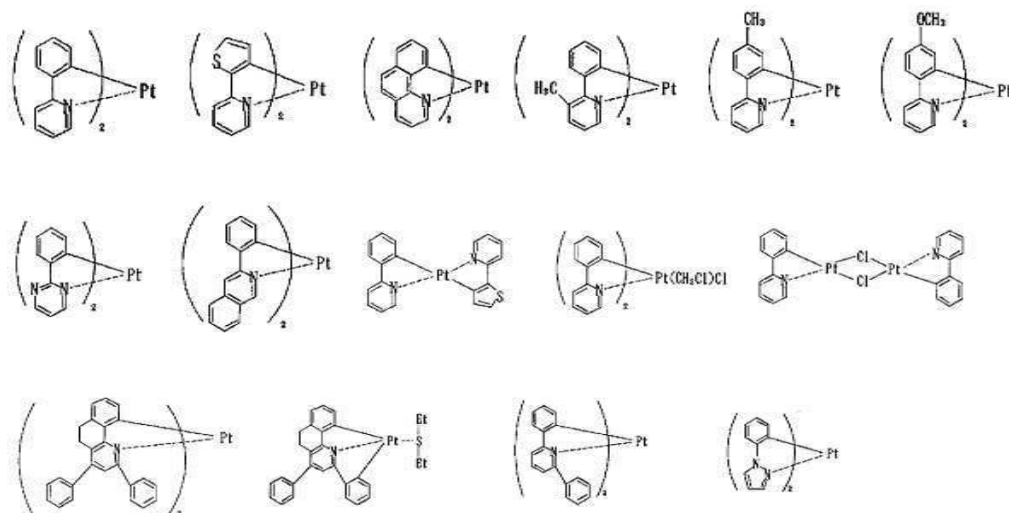
[0228] n^1 은 0 내지 3의 정수이며, 바람직하게는 0이고, m^1 은 1 또는 2이고 바람직하게는 2이다.

[0229] 또한, 상기 n^1 , m^1 은 상기 일반식 H-1로 나타나는 금속 착체가 중성 착체가 되도록 하는 것이 바람직하다.

[0230] 상기 일반식 H-2에서, R^{21} , R^{22} , n^2 , m^2 , q^{22} , L^2 는 각각 상기 R^{11} , R^{12} , n^1 , m^1 , q^{12} , L^1 과 동일하고, q^{21} 은 0 내지 2의 정수이며, 0이 바람직하다.

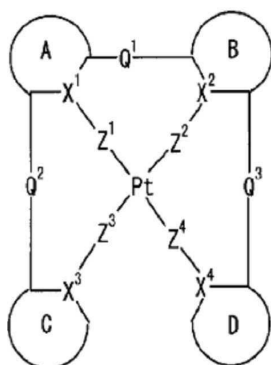
[0231] 상기 일반식 H-3에서, R^{31} , n^3 , m^3 , L^3 은 각각 상기 R^{11} , n^1 , m^1 , L^1 과 동일하고, q^{31} 은 0 내지 8의 정수를 나타내고, 0 내지 2가 바람직하고, 0이 보다 바람직하다.

[0232] 상기 일반식 H-1 내지 H-3의 구체적인 화합물의 예는 다음과 같으나, 이에 한정되는 것은 아니다.



[0233]

[0234] [일반식 I-1]



[0235]

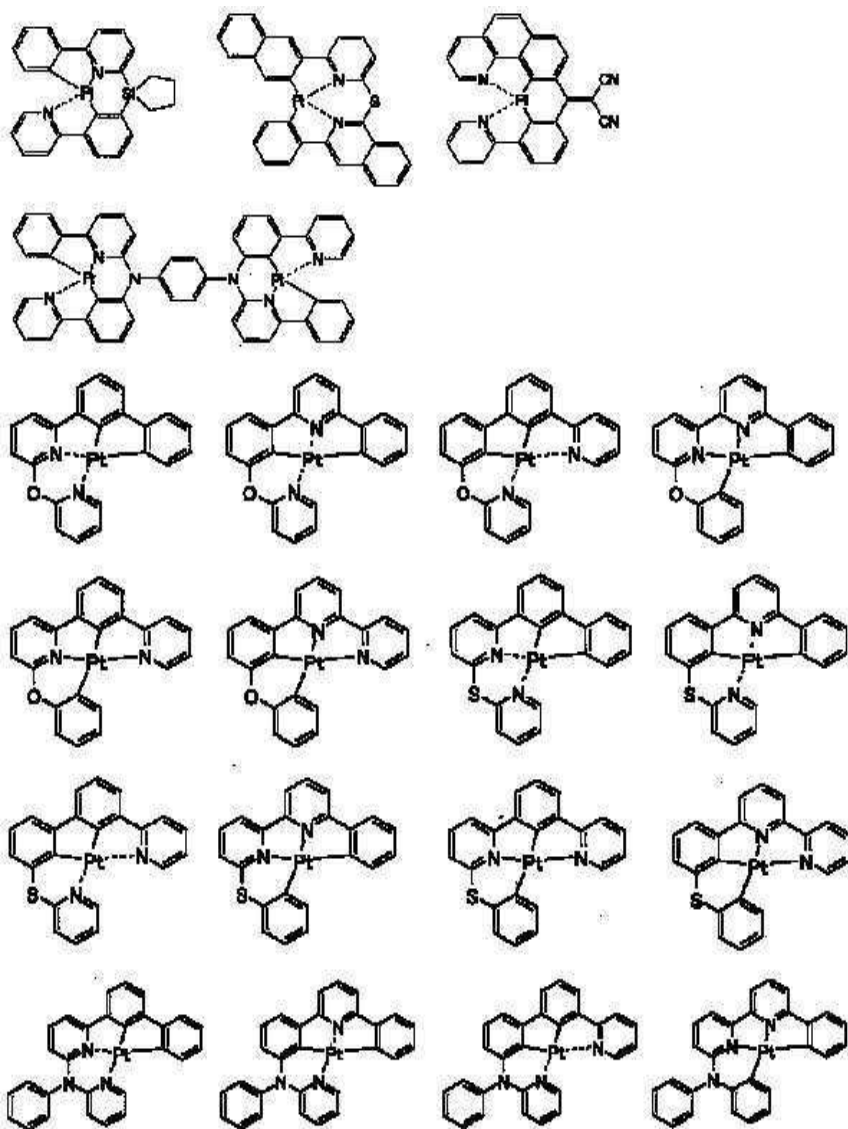
[0236] 상기 [일반식 I-1]에서,

[0237] 고리 A, 고리 B, 고리 C 및 고리 D는 상기 고리 A 내지 고리 D중의 어느 2개의 고리는 치환기를 가질 수 있는 질소 함유 헤테로고리를 나타내고, 나머지 2개의 환은 고리는 치환기를 가질 수 있는 아릴고리 또는 헤테로아릴

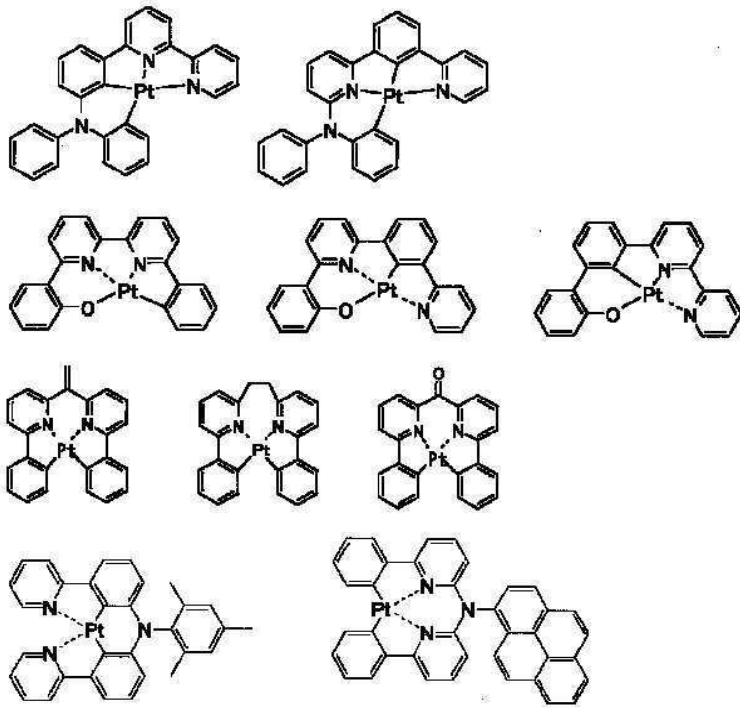
고리를 나타내고, 나타내며, 고리 A와 고리 B, 고리 A와 고리 C 및/또는 고리 B와 고리 D로 축합환을 형성할 수 있다. X^1 , X^2 , X^3 및 X^4 는 이 중의 어느 2개가 백금 원자에 배위결합하는 질소원자를 나타내고, 나머지 2개는 탄소원자 또는 질소원자를 나타낸다. Q^1 , Q^2 및 Q^3 은 각각 독립적으로 2가의 원자(단) 또는 결합을 나타내지만, Q^1 , Q^2 및 Q^3 이 동시에 결합을 나타내지는 않는다. Z^1 , Z^2 , Z^3 및 Z^4 는 어느 2개가 배위결합을 나타내고, 나머지 2개는 공유결합, 산소원자 또는 황원자를 나타낸다.

[0238]

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



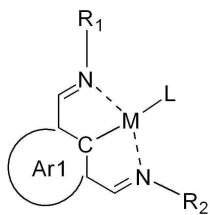
[0239]



[0240]

[0241]

[일반식 J-1]



[0242]

[0243]

상기 [일반식 J-1]에 있어서,

[0244]

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.

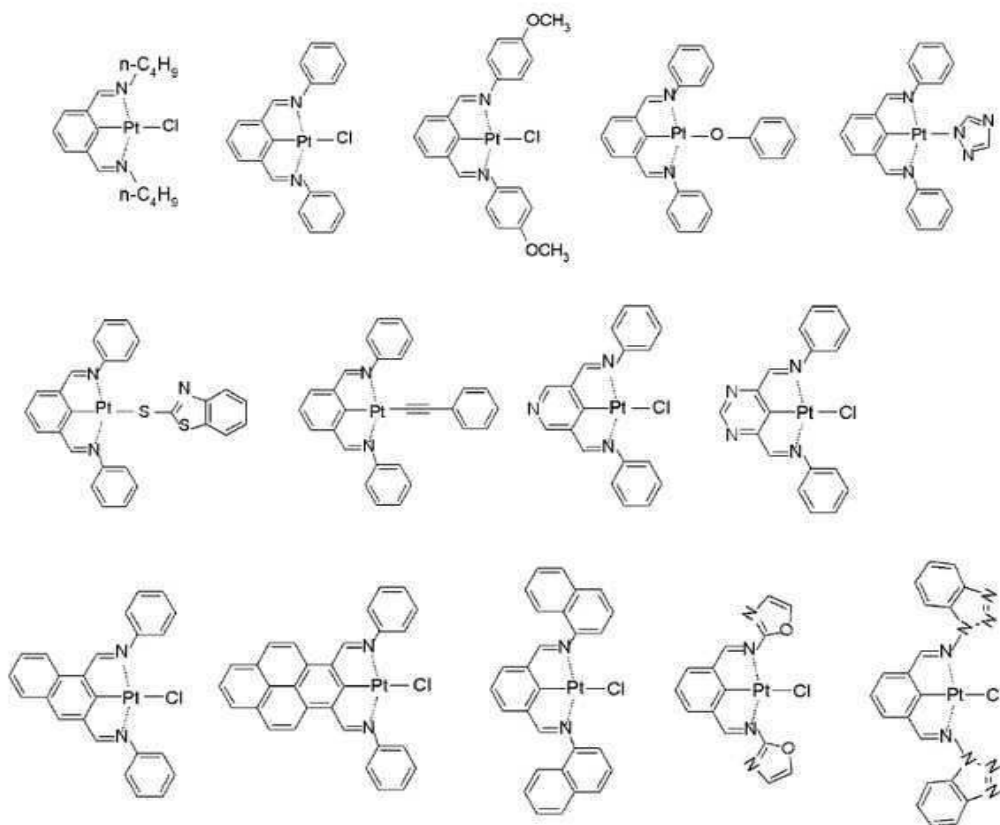
[0245]

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.

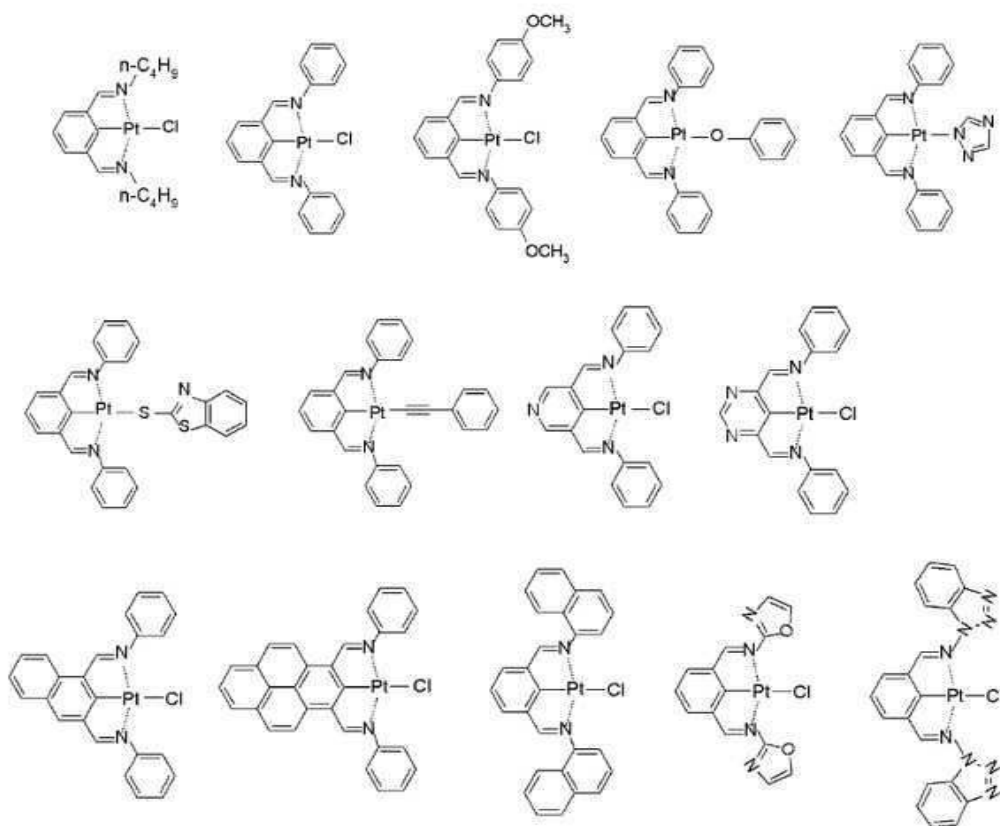
[0246]

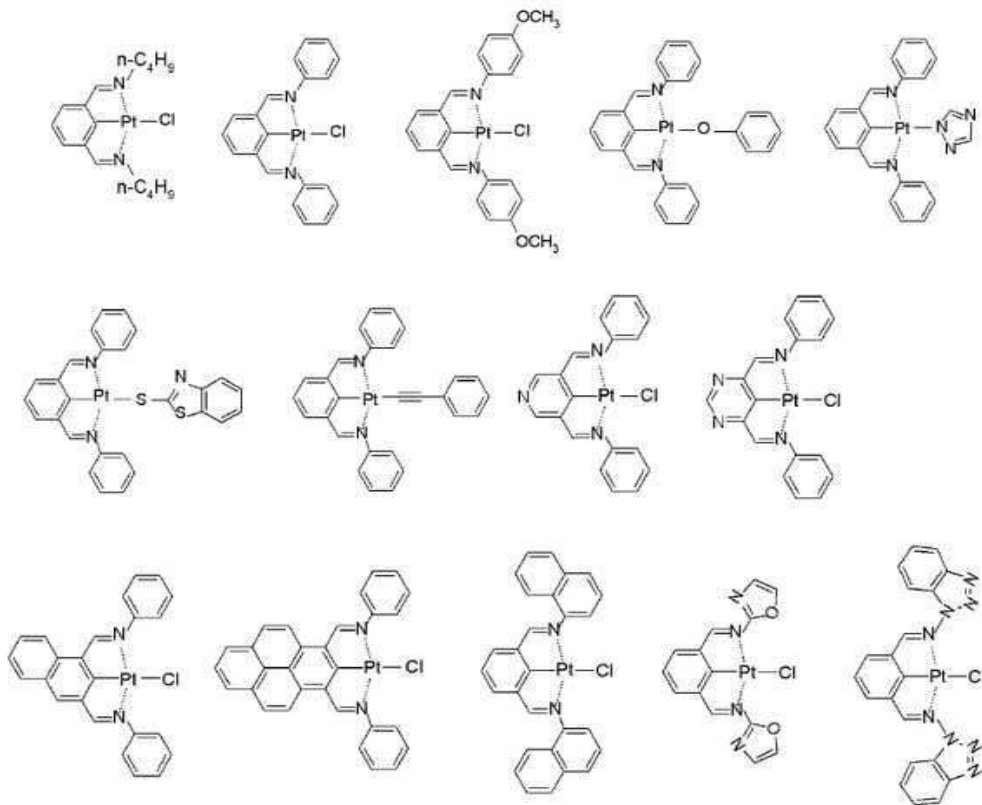
상기 [일반식J-1]에 있어서, 상기 M은 Pt인 것이 바람직하다. 또한, 상기 Ar1으로서는, 5원환, 6원환 및 이들의 축합환기부터 선택되는 것이 바람직하다.

[0247] 상기 [일반식 J-1]의 구체적인 화합물의 예는 다음과 같으나, 이에 한정되는 것은 아니다.



[0248]





[0249] 또한, 상기 발광층은 상기 도판트와 호스트 이외에도 다양한 호스트와 다양한 도펀트 물질을 추가로 포함할 수 있다.

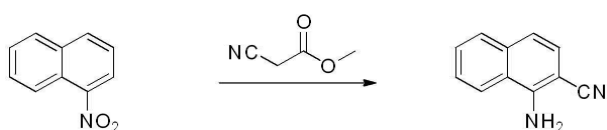
[0250] 또한, 상기 정공주입층, 정공수송층, 전자저지층, 발광층, 정공저지층, 전자수송층 및 전자주입층으로부터 선택된 하나 이상의 층은 단분자 증착방식 또는 용액공정에 의하여 형성될 수 있으며, 여기서 상기 증착 방식은 상기 각각의 층을 형성하기 위한 재료로 사용되는 물질을 진공 또는 저압상태에서 가열 등을 통해 증발시켜 박막을 형성하는 방법을 의미하고, 상기 용액공정은 상기 각각의 층을 형성하기 위한 재료로 사용되는 물질을 용매와 혼합하고 이를 잉크젯 인쇄, 물투루 코팅, 스크린 인쇄, 스프레이 코팅, 딥 코팅, 스핀 코팅 등과 같은 방법을 통하여 박막을 형성하는 방법을 의미한다.

[0251] 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.

[0252] 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.

[0253] [합성예 1] 화합물 1의 합성

[0254] [반응식 1-1] [중간체 1-a]의 합성

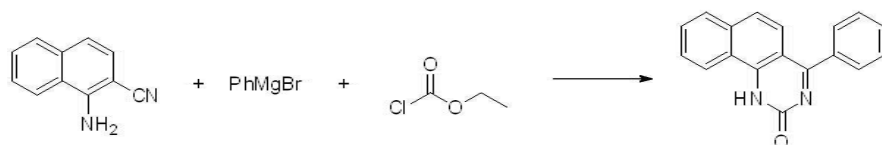


[0255] [중간체 1-a]

[0256]

[0257] 1-니트로나프탈렌 (97 g, 0.56 mol), 메틸 시아노아세테이트 (166.5 g, 1.68 mol), 시안화칼륨 (40.1 g, 0.62 mol), 수산화칼륨 (62.9 g, 1.12 mol)을 넣고 교반하였다. 다음 디메틸포름아마이드 970 mL를 넣고 60 ℃에서 밤새 교반하였다. 상온에서 감압농축하여 용매를 제거한 뒤 10% 수산화나트륨수용액 500 mL을 넣고 약 1시간 동안 환류시켰다. 에틸 아세테이트로 추출한 뒤 컬럼 크로마토그래피로 분리한 후 톨루엔과 헵탄으로 재결정하여 [중간체 1-a] 50.8 g (수율 54%)을 얻었다.

[0258] [반응식 1-2] [중간체 1-b]의 합성



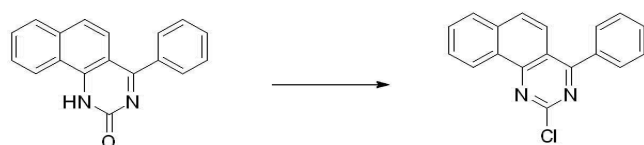
[0259]

[0260]

[중간체 1-b]

[0261] 상기 [반응식 1-1]에서 얻은 [중간체 1-a] (25.0 g, 149 mmol)를 테트라하이드로퓨란 200 mL에 넣고 교반하였다. 페닐 마그네슘브로마이드 (3.0 M in Et₂O) (87.4 mL, 297 mmol)를 적하하고 0 ℃에서 약 1시간 동안 환류시켰다. 에틸 클로로포메이트 (19.4 g, 179 mmol)를 적하한 후 약 1시간 정도 환류시켰다. 암모늄클로라이드수용액을 약산성이 될 때까지 투입하고 물과 헵탄으로 씻어주어 [중간체 1-b] 32.4 g (수율 80%)을 얻었다.

[0262] [반응식 1-3] [중간체 1-c]의 합성



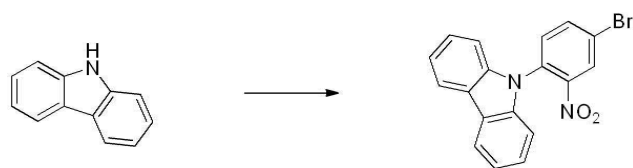
[0263]

[0264]

[중간체 1-c]

[0265] 상기 [반응식 1-2]에서 얻은 [중간체 1-b] (30 g, 110 mmol)를 옥시염화인 약 80 mL에 넣고 밤새 환류시켰다. 온도를 -20 ℃로 냉각한 후 증류수를 약 400 mL를 천천히 넣었다. 물, 메탄올, 헵탄으로 씻어주고 톨루엔과 헵탄으로 재결정하여 [중간체 1-c] 14.1 g (수율 44%)을 얻었다.

[0266] [반응식 1-4] [중간체 1-d]의 합성



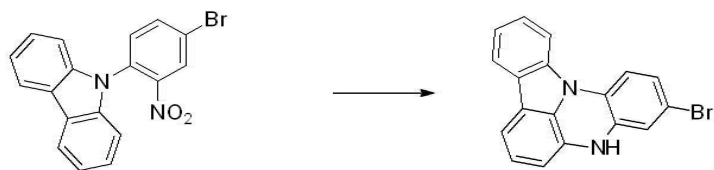
[0267]

[0268]

[중간체 1-d]

[0269] 카바졸 (13.6 g, 81.3 mmol), 2,5-디브로모니트로벤젠 (45.6 g, 162.5 mmol), 구리분말 (10.3 g, 162.5 mmol), 18-크라운-6 (4.3 g, 16.3 mmol), 탄산칼륨 (33.7 g, 243.9 mmol)에 1,2-디클로로벤젠 200 mL를 가한 후, 180 ℃에서 1일 동안 환류시켰다. 고온필터 후 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 [중간체 1-d] 25.4 g (수율 85%)를 얻었다.

[0270] [반응식 1-5] [중간체 1-e]의 합성

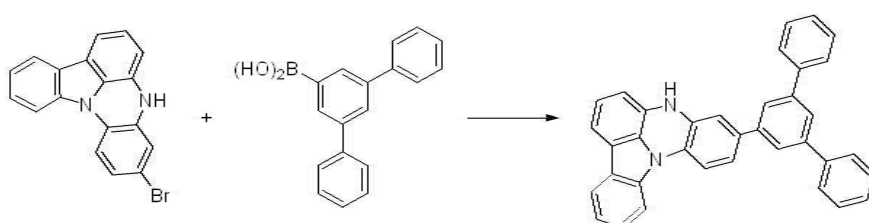


[0271]

[0272] [중간체 1-e]

[0273] 상기 [반응식 1-4]에서 합성한 [중간체 1-d] (16.5 g, 54.5 mmol)을 1,2-다이클로로벤젠 200 mL에 넣고 트리ethyl포스파이트 250 mL를 넣고 150 °C에서 12 시간 동안 환류시켰다. 상온으로 냉각하고 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 [중간체 1-e] 18.3 g (수율 53%)를 얻었다.

[0274] [반응식 1-6] [중간체 1-f]의 합성

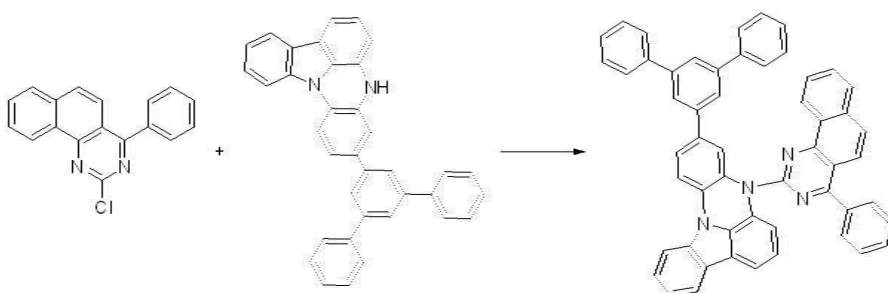


[0275]

[0276] [중간체 1-f]

[0277] 상기 [반응식 1-5]에서 합성한 [중간체 1-e] (10.7 g, 32 mmol), 3,5-디페닐페닐보론산 (10.7 g, 39 mmol), 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐 (0.7 g, 0.64 mmol), 탄산칼륨 (8.9 g, 64 mmol)에 1,4-다이옥산 80 mL, 톨루엔 80mL, 증류수 30mL를 넣고 밤새 환류시켰다. 에틸아세테이트로 추출하고 디클로로메탄과 아세톤으로 재결정하여 [중간체 1-f] 11.6 g (수율 75%)을 얻었다.

[0278] [반응식 1-7] [화합물 1]의 합성



[0279]

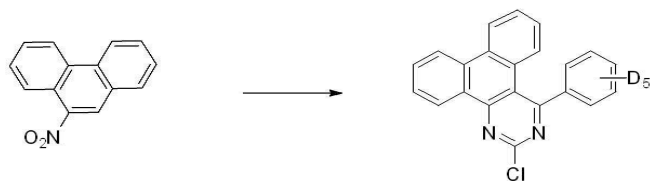
[0280] [화합물 1]

[0281] 60% 소듐하이드라이드 (1.0 g, 26 mmol)와 디메틸포름아마이드 20 mL를 투입하고 약 30분간 교반하였다. [반응식 1-6]에서 얻은 [중간체 1-f] (10.7 g, 22 mmol)와 디메틸포름아마이드 100 mL를 적하한 후 약 1시간 정도 더 교반하였다. 상기 [반응식 1-3]에서 합성한 [중간체 1-c] (7.6 g, 26.2 mmol)와 디메틸포름아마이드 100 mL를 투입하고 밤새 교반하였다. 증류수 600 mL를 넣어서 생긴 고체를 여과하였다. 톨루엔으로 재결정하여 [화합물 1] 9.7 g (수율 60%)을 얻었다.

[0282] MS (MALDI-TOF) : m/z 738.28 [M⁺]

[0283] [합성예 2] 화합물 2의 합성

[0284] [반응식 2-1] [중간체 2-a]의 합성

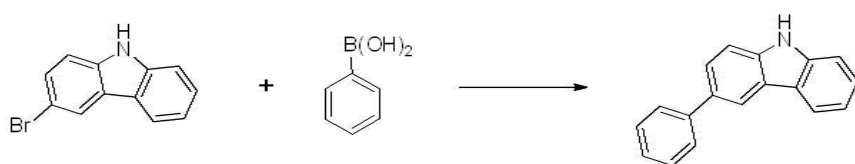


[0285]

[0286] [중간체 2-a]

[0287] 상기 [반응식 1-1]에서 사용한 1-니트로나프탈렌 대신 9-니트로페난트렌을 사용하고, [반응식 1-2]에서 사용한 페닐 마그네슘브로마이드 대신 펜타듀테레오 페닐 마그네슘브로마이드를 사용하여 [반응식 1-1] 내지 [반응식 1-3]과 동일한 방법으로 [중간체 2-a] (수율 56%)을 얻었다.

[0288] [반응식 2-2] [중간체 2-b]의 합성



[0289]

[0290] [중간체 2-b]

[0291] 상기 [반응식 1-6]에서 사용한 [중간체 1-e] 대신 3-브로모-9H-카바졸을 사용하고, 3,5-디페닐페닐보론산 대신 펜타듀테레오페닐보론산을 사용하여 동일한 방법으로 [중간체 2-b] (수율 80%)를 얻었다.

[0292] [반응식 2-3] [중간체 2-c]의 합성

[0293] 상기 [반응식 1-4]에서 사용한 카바졸 대신 상기 [반응식 2-2]에서 합성한 [중간체 2-b]를 사용하고, 2,5-디브로모니트로벤젠 대신 상기 [반응식 1-5]에서 합성한 [중간체 1-e]를 사용하여 동일한 방법으로 [중간체 2-c] (수율 70%)를 얻었다.

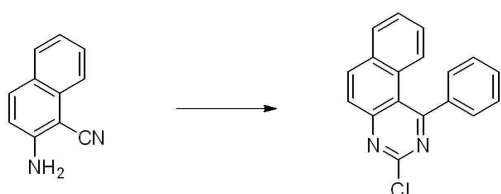
[0294] [반응식 2-4] [화합물 2]의 합성

[0295] 상기 [반응식 1-7]에서 사용한 [중간체 1-f] 대신 상기 [반응식 2-3]에서 합성한 [중간체 2-c]를 사용하고, [중간체 1-c] 대신 상기 [반응식 2-1]에서 합성한 [중간체 2-a]를 사용하여 동일한 방법으로 [화합물 2] (수율 53%)를 얻었다.

[0296] MS (MALDI-TOF) : m/z 806.32 [M⁺]

[0297] [합성예 3] 화합물 3의 합성

[0298] [반응식 3-1] [중간체 3-a]의 합성



[0299]

[0300] [중간체 3-a]

[0301] 상기 [반응식 1-1]에서 사용한 1-니트로나프탈렌 대신 2-니트로나프탈렌을 사용하여 상기 [반응식 1-1] 내지

[반응식 1-3]과 동일한 방법으로 [중간체 3-a] (수율 44%)를 얻었다.

[0302] [반응식 3-2] [중간체 3-b]의 합성

[0303] 상기 [반응식 1-6]에서 사용한 [중간체 1-e] 대신 상기 [반응식 3-1]에서 합성한 [중간체 3-a]를 사용하고, 3,5-디페닐페닐보론산 대신 1-브로모나프탈렌-4-보론산을 사용하여 동일한 방법으로 [중간체 3-b] (수율 79%)를 얻었다.

[0304] [반응식 3-3] [중간체 3-c]의 합성

[0305] 상기 [반응식 1-4]에서 사용한 2,5-디브로모니트로벤젠 대신 2-브로모-1-니트로벤젠을 사용하여 상기 [반응식 1-4] 내지 [반응식 1-5]와 동일한 방법으로 [중간체 3-c] (수율 55%)를 얻었다.

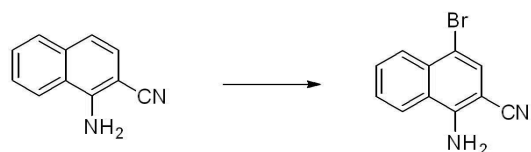
[0306] [반응식 3-4] [화합물 3]의 합성

[0307] 상기 [반응식 1-7]에서 사용한 [중간체 1-f] 대신 상기 [반응식 3-3]에서 합성한 [중간체 3-c]를 사용하고, [중간체 1-c] 대신 상기 [반응식 3-2]에서 합성한 [중간체 3-b]를 사용하여 동일한 방법으로 [화합물 3] (수율 55%)를 얻었다.

[0308] MS (MALDI-TOF) : m/z 636.23 [M^+]

[0309] [합성예 4] 화합물 4의 합성

[0310] [반응식 4-1] [중간체 4-a]의 합성

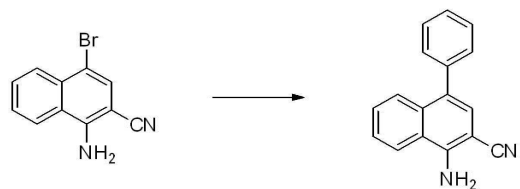


[0311]

[0312] [중간체 4-a]

[0313] 상기 [반응식 1-1]에서 합성한 [중간체 1-a] (18.5 g, 0.11 mol)를 디메틸포름아마이드 200 mL에 녹인 후 0 °C에서 교반시켰다. 엔-브로모숙신이미드 (20.1 g, 0.11 mol)을 디메틸포름아마이드 100 mL에 녹여서 1시간 동안 천천히 적가하였다. 상온에서 12 시간 동안 교반시켰다. 과량의 증류수를 여과시킨 후 메탄올로 씻어주고 톨루엔과 메탄올로 재결정하여 [중간체 4-a] 12.5 g (수율 46%)을 얻었다.

[0314] [반응식 4-2] [중간체 4-b]의 합성

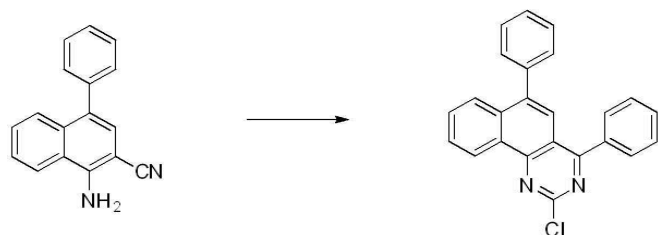


[0315]

[0316] [중간체 4-b]

[0317] 상기 [반응식 1-6]에서 사용한 [중간체 1-e] 대신 상기 [반응식 4-1]에서 합성한 [중간체 4-a]를 사용하고, 3,5-디페닐페닐보론산 대신 페닐보론산을 사용하여 동일한 방법으로 [중간체 4-b] (수율 78%)을 얻었다.

[0318] [반응식 4-3] [중간체 4-c]의 합성



[0319]

[0320] [중간체 4-c]

[0321] 상기 [반응식 1-2]에서 사용한 [중간체 1-a] 대신 상기 [반응식 4-2]에서 합성한 [중간체 4-b]를 사용하여 상기 [반응식 1-2] 내지 [반응식 1-3]과 동일한 방법으로 [중간체 4-c] (수율 45%)을 얻었다.

[0322] [반응식 4-4] [중간체 4-d]의 합성

[0323] 상기 [반응식 1-6]에서 사용한 [중간체 1-e] 대신 상기 [반응식 4-3]에서 합성한 [중간체 4-c]를 사용하고, 3,5-디페닐페닐보론산 대신 3,5-디브로모벤젠보론산을 사용하여 동일한 방법으로 [중간체 4-d] (수율 78%)를 얻었다.

[0324] [반응식 4-5] [중간체 4-e]의 합성

[0325] 상기 [반응식 1-6]에서 사용한 [중간체 1-e] 대신 상기 [반응식 4-4]에서 합성한 [중간체 4-d]를 사용하고, 3,5-디페닐페닐보론산 대신 페닐보론산을 사용하여 동일한 방법으로 [중간체 4-e] (수율 55%)를 얻었다.

[0326] [반응식 4-6] [중간체 4-f]의 합성

[0327] 상기 [반응식 1-6]에서 사용한 3,5-디페닐페닐보론산 대신 2-나프탈렌보론산을 사용하여 동일한 방법으로 [중간체 4-f] (수율 62%)를 얻었다.

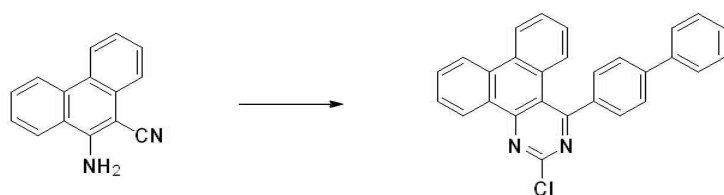
[0328] [반응식 4-7] [화합물 4]의 합성

[0329] 상기 [반응식 1-7]에서 사용한 [중간체 1-f] 대신 상기 [반응식 4-6]에서 합성한 [중간체 4-f]를 사용하고, [중간체 1-c] 대신 상기 [반응식 4-5]에서 합성한 [중간체 4-e]를 사용하여 동일한 방법으로 [화합물 4] (수율 50%)를 얻었다.

[0330] MS (MALDI-TOF) 864.33 m/z [M^+]

[0331] [합성예 5] 화합물 5의 합성

[0332] [반응식 5-1] [중간체 5-a]의 합성



[0333]

[0334] [중간체 5-a]

[0335] 상기 [반응식 1-1]에서 사용한 1-니트로나프탈렌 대신 9-니트로페난트렌을 사용하고, 상기 [반응식 1-2]에서 사용한 페닐 마그네슘브로마이드 대신 4-바이페닐 마그네슘브로마이드를 사용하여 상기 [반응식 1-1] 내지 [반응

식 1-3]과 동일한 방법으로 [중간체 5-a] (수율 43%)를 얻었다.

[0336] [반응식 5-2] [중간체 5-b]의 합성



[0338] [중간체 5-b]

[0339] 4-브로모-9,9-디메틸-9-플루오렌 (7.2 g, 26.5 mmol)을 테트라하이드로퓨란 500 mL에 녹인 후 온도를 -78 °C로 낮춘 후 1.6 M 노르말-부틸리튬 (18.2 mL, 29.1 mmol)을 천천히 적가한 다음 약 1시간 동안 교반시켰다. 트리메틸보레이트 (4.1 g, 39.7 mmol)를 천천히 적가한 후 상온에서 약 3시간 동안 교반시켰다. 1 M 염산 수용액 14 mL를 적하한 후 30분 동안 교반시켰다. 에틸 아세테이트로 추출하고 디클로로메탄과 헥산으로 재결정하여 [중간체 5-b] 4.6 g (수율 73%)을 얻었다.

[0340] [반응식 5-3] [중간체 5-c]의 합성

[0341] 상기 [반응식 1-6]에서 사용한 3,5-디페닐페닐보론산 대신 상기 [반응식 5-2]에서 합성한 [중간체 5-b]를 사용하여 동일한 방법으로 [중간체 5-c] (수율 66%)을 얻었다.

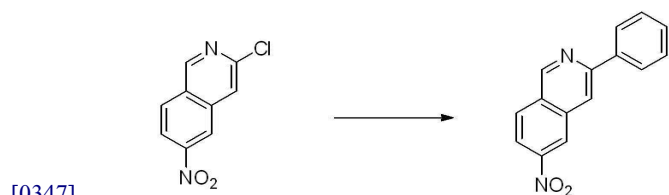
[0342] [반응식 5-4] [반응식 5]의 합성

[0343] 상기 [반응식 1-7]에서 사용한 [중간체 1-f] 대신 상기 [반응식 5-3]에서 합성한 [중간체 5-c]를 사용하고, [중간체 1-c] 대신 상기 [반응식 5-1]에서 합성한 [중간체 5-a]를 사용하여 동일한 방법으로 [화합물 5] (수율 62%)를 얻었다.

[0344] MS (MALDI-TOF) 828.33 m/z [M⁺]

[0345] [합성예 6] 화합물 6의 합성

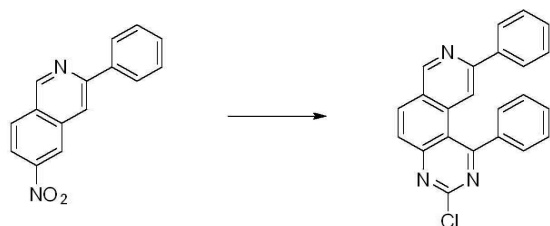
[0346] [반응식 6-1] [중간체 6-a]의 합성



[0348] [중간체 6-a]

[0349] 상기 [반응식 1-6]에서 사용한 [중간체 1-e] 대신 3-클로로-6-니트로아이소퀴놀린을 사용하고, 3,5-디페닐페닐보론산 대신 페닐 보론산을 사용하여 동일한 방법으로 [중간체 6-a] (수율 82%)를 얻었다.

[0350] [반응식 6-2] [중간체 6-b]의 합성



[0351]

[0352] [중간체 6-b]

[0353] 상기 [반응식 1-1]에서 사용한 1-니트로나프탈렌 대신 상기 [반응식 6-1]에서 합성한 [중간체 6-a]를 사용하여 상기 [반응식 1-1] 내지 [반응식 1-3]과 동일한 방법으로 [중간체 6-b] (수율 44%)를 얻었다.

[0354] [반응식 6-3] [중간체 6-c]의 합성



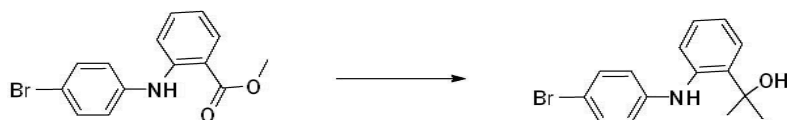
[0355]

[0356]

[중간체 6-c]

[0357] 메틸-2-아미노벤조에이트 (87 g, 0.58 mol), 1-브로모-4-아이오도벤젠 (135.1 g, 0.48 mol), 팔라듐 아세테이트 (1.3 g, 0.006 mol), 잔트포스 (10 g, 0.02 mol), 세슘 카보네이트 (217.5 g, 0.67 mol)에 톨루엔 2500 mL를 넣고 약 6 시간 동안 환류시켰다. 에틸 아세테이트로 추출한 후 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 [중간체 6-c] 110 g (수율 75%)을 얻었다.

[0358] [반응식 6-4] [중간체 6-d]의 합성



[0359]

[0360]

[중간체 6-d]

[0361] 상기 [반응식 6-3]에서 얻은 [중간체 6-c] (110 g, 0.36 mol)를 디아이소프로필에터 1650 mL에 넣고 교반하였다. 메틸 마그네슘브로마이드 419 mL를 천천히 적가한 후 50 °C에서 12 시간 동안 교반시켰다. 에틸 아세테이트로 추출한 뒤 디클로로 메탄과 헥산으로 재결정하여 [중간체 6-d] 108 g (수율 68%)을 얻었다.

[0362] [반응식 6-5] [중간체 6-e]의 합성



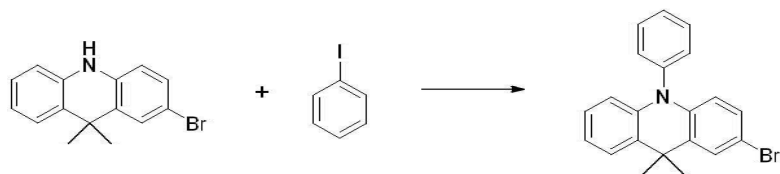
[0363]

[0364]

[중간체 6-e]

[0365] 상기 [반응식 6-4]에서 얻은 [중간체 6-d] (108 g, 0.36 mol)과 인산 400 mL을 넣고 6 시간 동안 교반하였다. 반응이 종료되면 과량의 증류수를 넣고 교반시킨 후 여과시켜 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 [중간체 6-e] 75 g (수율 75%)을 얻었다.

[0366] [반응식 6-6] [중간체 6-f]의 합성



[0367]

[0368] [중간체 6-f]

[0369] 상기 [반응식 1-7]에서 사용한 [중간체 1-f] 대신 상기 [반응식 6-5]에서 합성한 [중간체 6-e]를 사용하고, [중간체 1-c] 대신 아이오도벤젠을 사용하여 동일한 방법으로 [중간체 6-f] (수율 84%)를 얻었다.

[0370] [반응식 6-7] [중간체 6-g]의 합성

[0371] 상기 [반응식 5-2]에서 사용한 4-브로모-9,9-디메틸-9-플루오렌 대신 상기 [반응식 6-6]에서 합성한 [중간체 6-f]를 사용하여 동일한 방법으로 [중간체 6-g] (수율 70%)를 얻었다.

[0372] [반응식 6-8] [중간체 6-h]의 합성

[0373] 상기 [반응식 1-6]에서 사용한 [중간체 1-e] 대신 [반응식 1-5]에서 합성한 [중간체 1-e]를 사용하고, 3,5-디페닐페닐보론산 대신 [반응식 6-7]에서 합성한 [중간체 6-g]를 사용하여 동일한 방법으로 [중간체 6-h] (수율 66%)를 얻었다.

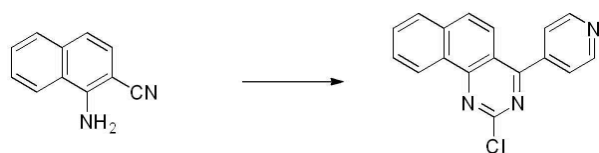
[0374] [반응식 6-9] [화합물 6]의 합성

[0375] 상기 [반응식 1-7]에서 사용한 [중간체 1-f] 대신 상기 [반응식 6-8]에서 합성한 [중간체 6-h]를 사용하고, [중간체 1-c] 대신 상기 [반응식 6-2]에서 합성한 [중간체 6-b]를 사용하여 동일한 방법으로 [화합물 6] (수율 55%)을 얻었다.

[0376] MS (MALDI-TOF) 870.35 m/z [M⁺]

[0377] [합성예 7] 화합물 7의 합성

[0378] [반응식 7-1] [중간체 7-a]의 합성



[0379]

[0380] [중간체 7-a]

[0381] 상기 [반응식 1-2]에서 사용한 페닐 마그네슘브로마이드 대신 피리딘-4-일 마그네슘브로마이드를 사용하여 상기 [반응식 1-2] 내지 [반응식 1-3]과 동일한 방법으로 [중간체 7-a] (수율 46%)를 얻었다.

[0382] [반응식 7-2] [중간체 7-b]의 합성

[0383] 상기 [반응식 1-6]에서 사용한 [중간체 1-e] 대신 상기 [반응식 7-1]에서 합성한 [중간체 7-a]를 사용하고, 3,5-디페닐페닐보론산 대신 4-아이오도페닐보론산을 사용하여 동일한 방법으로 [중간체 7-b] (수율 75%)를 얻었다.

[0384] [반응식 7-3] [중간체 7-c]의 합성

[0385] 상기 [반응식 1-6]에서 사용한 [중간체 1-e] 대신 4-브로모-1-나프탈렌일보론산을 사용하고, 3,5-디페닐페닐보론산 대신 3-피리딜보론산을 사용하여 동일한 방법으로 [중간체 7-c] (수율 78%)를 얻었다.

[0386] [반응식 7-4] [중간체 7-d]의 합성

[0387] 상기 [반응식 1-6]에서 사용한 3,5-디페닐페닐보론산 대신 상기 [반응식 7-3]에서 합성한 [중간체 7-c]를 사용하여 동일한 방법으로 [중간체 7-d] (수율 62%)를 얻었다.

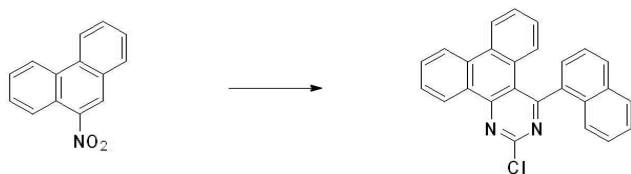
[0388] [반응식 7-5] [화합물 7]의 합성

[0389] 상기 [반응식 1-7]에서 사용한 [중간체 1-f] 대신 상기 [반응식 7-4]에서 합성한 [중간체 7-d]를 사용하고, [중간체 1-c] 대신 상기 [반응식 7-2]에서 합성한 [중간체 7-b]를 사용하여 동일한 방법으로 [화합물 7] (수율 60%)을 얻었다.

[0390] MS (MALDI-TOF) 790.28 m/z [M^+]

[0391] [합성예 8] 화합물 8의 합성

[0392] [반응식 8-1] [중간체 8-a]의 합성



[0393]

[0394] [중간체 8-a]

[0395] 상기 [반응식 1-1]에서 사용한 1-니트로나프탈렌 대신 9-니트로페난트렌을 사용하고, 상기 [반응식 1-2]에서 사용한 페닐 마그네슘브로마이드 대신 1-나프틸마그네슘브로마이드를 사용하여 상기 [반응식 1-1] 내지 [반응식 1-3]과 동일한 방법으로 [중간체 8-a] (수율 44%)를 얻었다.

[0396] [반응식 8-2] [중간체 8-b]의 합성

[0397] 상기 [반응식 4-1]에서 사용한 [중간체 1-a] 대신 3-아자카바졸을 사용하여 동일한 방법으로 [중간체 8-b] (수율 86%)를 얻었다.

[0398] [반응식 8-3] [중간체 8-c]의 합성

[0399] 상기 [반응식 1-7]에서 사용한 [중간체 1-f] 대신 상기 [반응식 8-2]에서 합성한 [중간체 8-b]를 사용하고, [중간체 1-c] 대신 아이오도벤젠을 사용하여 동일한 방법으로 [중간체 8-c] (수율 82%)를 얻었다.

[0400] [반응식 8-4] [중간체 8-d]의 합성

[0401] 상기 [반응식 5-2]에서 사용한 4-브로모-9,9-디메틸-9-플루오렌 대신 상기 [반응식 8-3]에서 합성한 [중간체 8-c]를 사용하여 동일한 방법으로 [중간체 8-d] (수율 77%)를 얻었다.

[0402] [반응식 8-5] [중간체 8-e]의 합성

[0403] 상기 [반응식 1-6]에서 사용한 3,5-디페닐페닐보론산 대신 상기 [반응식 8-4]에서 합성한 [중간체 8-d]를 사용하여 동일한 방법으로 [중간체 8-e] (수율 62%)를 얻었다.

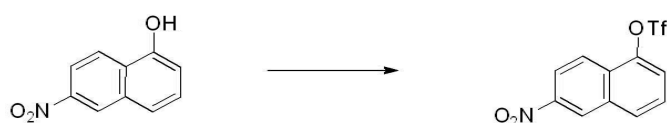
[0404] [반응식 8-6] [화합물 8]의 합성

[0405] 상기 [반응식 1-7]에서 사용한 [중간체 1-f] 대신 상기 [반응식 8-5]에서 합성한 [중간체 8-e]를 사용하고, [중간체 1-c] 대신 상기 [반응식 8-1]에서 합성한 [중간체 8-a]를 사용하여 동일한 방법으로 [화합물 8] (수율 58%)을 얻었다.

[0406] MS (MALDI-TOF) 852.30 m/z [M^+]

[0407] [합성예 9] 화합물 9의 합성

[0408] [반응식 9-1] [중간체 9-a]의 합성

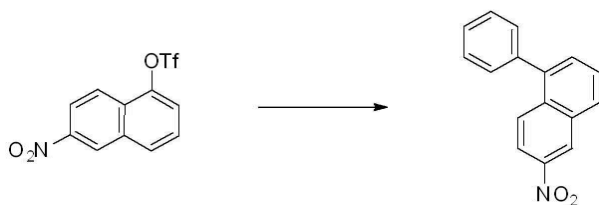


[0409]

[0410] [중간체 9-a]

[0411] 6-니트로-1-나프탈렌올 (26.5 g, 0.14 mol)을 디클로로 메탄 270 mL에 넣고 교반시켰다. 피리딘 (14 g, 0.18 mol)을 넣고 0 °C로 냉각시킨 후 트리플루오로메탄 설포닉산하이드라이드 (42.3 g, 0.15 mol)을 천천히 적가한 후 상온에서 약 1시간 동안 교반시켰다. 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 [중간체 9-a] 34.2 g (수율 76%)을 얻었다.

[0412] [반응식 9-2] [중간체 9-b]의 합성

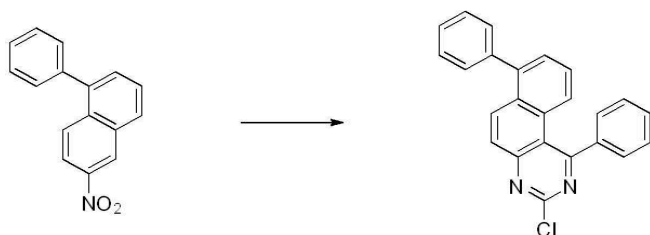


[0413]

[0414] [중간체 9-b]

[0415] 상기 [반응식 1-6]에서 사용한 [중간체 1-e] 대신 상기 [반응식 9-1]에서 합성한 [중간체 9-a]를 사용하고, 3,5-디페닐페닐보론산 대신 페닐 보론산을 사용하여 동일한 방법으로 [중간체 9-b] (수율 90%)를 얻었다.

[0416] [반응식 9-3] [중간체 9-c]의 합성



[0417]

[0418] [중간체 9-c]

[0419] 상기 [반응식 1-1]에서 사용한 1-니트로나프탈렌 대신 [반응식 9-2]에서 합성한 [중간체 9-b]를 사용하여 상기 [반응식 1-1] 내지 [반응식 1-3]과 동일한 방법으로 [중간체 9-c] (수율 43%)를 얻었다.

[0420] [반응식 9-4] [중간체 9-d]의 합성

[0421] 상기 [반응식 1-6]에서 사용한 3,5-디페닐페닐보론산 대신 4-(1-나프틸)페닐보론산을 사용하여 동일한 방법으로 [중간체 9-d] (수율 68%)를 얻었다.

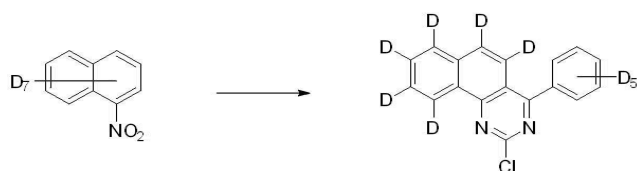
[0422] [반응식 9-5] [화합물 9]의 합성

[0423] 상기 [반응식 1-7]에서 사용한 [중간체 1-f] 대신 상기 [반응식 9-4]에서 합성한 [중간체 9-d]를 사용하고, [중간체 1-c] 대신 상기 [반응식 9-3]에서 합성한 [중간체 9-c]를 사용하여 동일한 방법으로 [화합물 9] (수율 63%)을 얻었다.

[0424] MS (MALDI-TOF) 788.29 m/z [M^+]

[0425] [합성예 10] 화합물 10의 합성

[0426] [반응식 10-1] [중간체 10-a]의 합성



[0427]

[0428] [중간체 10-a]

[0429] 상기 [반응식 1-1]에서 사용한 1-니트로나프탈렌 대신 헵타듀테레오 니트로나프탈렌을 사용하고, 상기 [반응식 1-2]에서 사용한 페닐 마그네슘브로마이드 대신 펜타듀테레오 페닐 마그네슘브로마이드를 사용하여 상기 [반응식 1-1] 내지 [반응식 1-3]과 동일한 방법으로 [중간체 10-a] (수율 45%)를 얻었다.

[0430] [반응식 10-2] [중간체 10-b]의 합성

[0431] 상기 [반응식 1-6]에서 3,5-디페닐페닐보론산 대신 펜타듀테레오 페닐보론산을 사용하여 동일한 방법으로 [중간체 10-b] (수율 75%)를 얻었다.

[0432] [반응식 10-3] [화합물 10]의 합성

[0433] 상기 [반응식 1-7]에서 사용한 [중간체 1-f] 대신 상기 [반응식 10-2]에서 합성한 [중간체 10-b]를 사용하고, [중간체 1-c] 대신 상기 [반응식 10-1]에서 합성한 [중간체 10-a]를 사용하여 동일한 방법으로 [화합물 10] (수율 65%)을 얻었다.

[0434] MS (MALDI-TOF) 602.32 m/z [M^+]

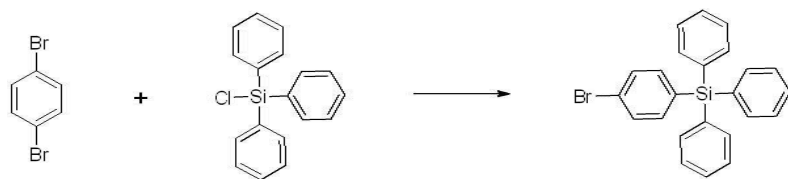
[0435] [합성예 11] 화합물 11의 합성

[0436] [반응식 11-1] [중간체 11-a]의 합성

[0437] 상기 [반응식 1-6]에서 사용한 [중간체 1-e] 대신 상기 [반응식 3-1]에서 합성한 [중간체 3-a]를 사용하고, 3,5-디페닐페닐보론산 대신 6-클로로-2-나프틸보론산을 사용하여 동일한 방법으로 [중간체 11-a] (수율 70%)를 얻었다.

- [0438] 반응식 11-2] [중간체 11-b]의 합성
- [0439] 상기 [반응식 1-4]에서 사용한 2,5-디브로모니트로벤젠 대신 2,4-디브로모니트로벤젠을 사용하여 상기 [반응식 1-4] 내지 [반응식 1-5]와 동일한 방법으로 [중간체 11-b] (수율 54%)를 얻었다.
- [0440] [반응식 11-3] [중간체 11-c]의 합성
- [0441] 상기 [반응식 1-6]에서 3,5-디페닐페닐보론산 대신 4-페닐피리딘-2-보론산을 사용하여 동일한 방법으로 [중간체 11-c] (수율 70%)를 얻었다.
- [0442] [반응식 11-4] [화합물 11]의 합성
- [0443] 상기 [반응식 1-7]에서 사용한 [중간체 1-f] 대신 상기 [반응식 11-3]에서 합성한 [중간체 11-c]를 사용하고, [중간체 1-c] 대신 상기 [반응식 11-1]에서 합성한 [중간체 11-a]를 사용하여 동일한 방법으로 [화합물 11] (수율 60%)을 얻었다.
- [0444] MS (MALDI-TOF) 789.29 m/z [M^+]
- [0445] [합성예 12] 화합물 12의 합성
- [0446] [반응식 12-1] [중간체 12-a]의 합성
- [0447] 상기 [반응식 1-6]에서 사용한 [중간체 1-e] 대신 상기 [반응식 1-3]에서 합성한 [중간체 1-c]를 사용하고, 3,5-디페닐페닐보론산 대신 4-브로모바이페닐-4'-보론산을 사용하여 동일한 방법으로 [중간체 12-a] (수율 77%)를 얻었다.
- [0448] [반응식 12-2] [중간체 12-b]의 합성
- [0449] 상기 [반응식 1-6]에서 사용한 [중간체 1-e] 대신 4-클로로-2-플루오로페닐보론산을 사용하고, 3,5-디페닐페닐보론산 대신 2-나프탈렌보론산을 사용하여 동일한 방법으로 [중간체 12-b] (수율 70%)를 얻었다.
- [0450] [반응식 12-3] [중간체 12-c]의 합성
- [0451] 상기 [반응식 1-6]에서 사용한 [중간체 1-e] 대신 상기 [반응식 11-2]에서 합성한 [중간체 11-b]를 사용하고, 3,5-디페닐페닐보론산 대신 상기 [반응식 12-2]에서 합성한 [중간체 12-b]를 사용하여 동일한 방법으로 [중간체 12-c] (수율 65%)를 얻었다.
- [0452] [반응식 12-4] [화합물 12]의 합성
- [0453] 상기 [반응식 1-7]에서 사용한 [중간체 1-f] 대신 상기 [반응식 12-3]에서 합성한 [중간체 12-c]를 사용하고, [중간체 1-c] 대신 상기 [반응식 12-1]에서 합성한 [중간체 12-a]를 사용하여 동일한 방법으로 [화합물 12] (수율 61%)을 얻었다.
- [0454] MS (MALDI-TOF) 882.32 m/z [M^+]
- [0455] [합성예 13] 화합물 13의 합성

[0456] [반응식 13-1] [중간체 13-a]의 합성

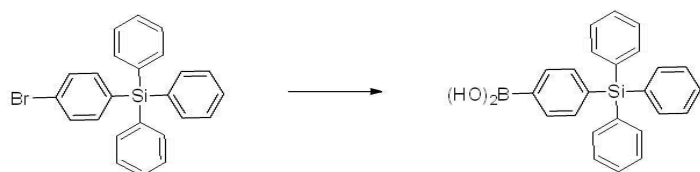


[0457]

[0458] [중간체 13-a]

[0459] 1,4-다이브로모벤젠 (15 g, 63.58 mmol)을 테트라하이드로퓨란 300 mL에 넣고 -78 °C에서 1.6 M 노르말-부틸리튬 (26.7 mL, 66.76 mmol)를 천천히 적가한 후 1 시간 동안 교반시켰다. 클로로트리페닐실란 20.6 mL을 테트라하이드로퓨란 70 mL에 녹여 첨가한 후 상온에서 12 시간 동안 교반시켰다. 에틸 아세테이트로 추출하고 에틸 아세테이트와 메탄올로 재결정하여 [중간체 13-a] 17.5 g (수율 66%)을 얻었다.

[0460] [반응식 13-2] [중간체 13-b]의 합성



[0461]

[0462] [중간체 13-b]

[0463] 상기 [반응식 5-2]에서 사용한 4-브로모-9,9-디메틸-9-플루오렌 대신 상기 [반응식 13-1]에서 합성한 [중간체 13-a]를 사용하여 동일한 방법으로 [중간체 13-b] (수율 70%)를 얻었다.

[0464] [반응식 13-3] [중간체 13-c]의 합성

[0465] 상기 [반응식 1-6]에서 사용한 [중간체 1-e] 대신 상기 [반응식 11-2]에서 합성한 [중간체 11-b]를 사용하고, 3,5-디페닐페닐보론산 대신 상기 [반응식 13-2]에서 합성한 [중간체 13-b]를 사용하여 동일한 방법으로 [중간체 13-c] (수율 70%)를 얻었다.

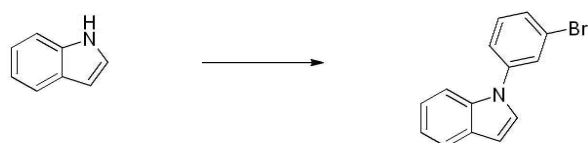
[0466] [반응식 13-4] [화합물 13]의 합성

[0467] 상기 [반응식 1-7]에서 사용한 [중간체 1-f] 대신 상기 [반응식 13-3]에서 합성한 [중간체 13-c]를 사용하고, [중간체 1-c] 대신 상기 [반응식 2-1]에서 합성한 [중간체 2-a]를 사용하여 동일한 방법으로 [화합물 13] (수율 62%)을 얻었다.

[0468] MS (MALDI-TOF) 899.35 m/z [M⁺]

[0469] [합성예 14] 화합물 14의 합성

[0470] [반응식 14-1] [중간체 14-a]의 합성



[0471]

[0472] [중간체 14-a]

[0473] 인돌 (50 g, 0.43 mol), 1-브로모-3-아이오도벤젠 (181.1 g, 0.64 mol), 구리분말 (63.5 g, 0.85 mol), 18-크

라운-6 (22.6 g, 0.83 mol), 탄산칼륨 (176.9 g, 1.29 mol)을 1,2-디클로로벤젠 500 mL에 넣고 180 °C에서 하루 동안 환류시켰다. 고온필터 후 컬럼 크로마토그래피로 분리하여 [중간체 14-a] 48 g (수율 41%)을 얻었다.

[0474] [반응식 14-2] [중간체 14-b]의 합성



[0475]

[0476] [중간체 14-b]

[0477] 상기 [반응식 5-2]에서 사용한 4-브로모-9,9-디메틸-9-플루오렌 대신 상기 [반응식 14-1]에서 합성한 [중간체 14-a]를 사용하여 동일한 방법으로 [중간체 14-b] (수율 76%)를 얻었다.

[0478] [반응식 14-3] [중간체 14-c]의 합성

[0479] 상기 [반응식 1-6]에서 사용한 [중간체 1-e] 대신 상기 [반응식 11-2]에서 합성한 [중간체 11-b]를 사용하고, 3,5-디페닐페닐보론산 대신 상기 [반응식 14-2]에서 합성한 [중간체 14-b]를 사용하여 동일한 방법으로 [중간체 14-c] (수율 67%)를 얻었다.

[0480] [반응식 14-4] [화합물 14]의 합성

[0481] 상기 [반응식 1-7]에서 사용한 [중간체 1-f] 대신 상기 [반응식 14-3]에서 합성한 [중간체 14-c]를 사용하고, [중간체 1-c] 대신 상기 [반응식 7-1]에서 합성한 [중간체 7-a]를 사용하여 동일한 방법으로 [화합물 14] (수율 63%)를 얻었다.

[0482] MS (MALDI-TOF) 702.25 m/z [M⁺]

[0483] [합성예 15] 화합물 15의 합성

[0484] [반응식 15-1] [중간체 15-a]의 합성

[0485] 상기 [반응식 1-6]에서 사용한 [중간체 1-e] 대신 상기 [반응식 1-3]에서 합성한 [중간체 1-c]를 사용하고, 3,5-디페닐페닐보론산 대신 5-클로로피리딘-2-보론산을 사용하여 동일한 방법으로 [중간체 15-a] (수율 72%)를 얻었다.

[0486] [반응식 15-2] [중간체 15-b]의 합성

[0487] 상기 [반응식 1-6]에서 사용한 [중간체 1-e] 대신 3-브로모-9H-카바졸을 사용하고, 3,5-디페닐페닐보론산 대신 페닐보론산을 사용하여 동일한 방법으로 [중간체 15-b] (수율 82%)를 얻었다.

[0488] [반응식 15-3] [중간체 15-c]의 합성

[0489] 상기 [반응식 4-1]에서 사용한 [중간체 1-a] 대신 상기 [반응식 15-2]에서 합성한 [중간체 15-b]를 사용하여 동일한 방법으로 [중간체 15-c] (수율 89%)를 얻었다.

[0490] [반응식 15-4] [중간체 15-d]의 합성

[0491] 상기 [반응식 1-6]에서 사용한 [중간체 1-e] 대신 상기 [반응식 15-3]에서 합성한 [중간체 15-c]를 사용하고,

3,5-디페닐페닐보론산 대신 1-나프탈렌보론산을 사용하여 동일한 방법으로 [중간체 15-d] (수율 75%)를 얻었다.

[0492] [반응식 15-5] [중간체 15-e]의 합성

[0493] 상기 [반응식 1-7]에서 사용한 [중간체 1-f] 대신 상기 [반응식 15-4]에서 합성한 [중간체 15-d]를 사용하고, [중간체 1-c] 대신 상기 [반응식 11-2]에서 합성한 [중간체 11-b]를 사용하여 동일한 방법으로 [중간체 15-e] (수율 66%)을 얻었다.

[0494] [반응식 15-6] [화합물 15]의 합성

[0495] 상기 [반응식 1-7]에서 사용한 [중간체 1-f] 대신 상기 [반응식 15-5]에서 합성한 [중간체 15-e]를 사용하고, [중간체 1-c] 대신 상기 [반응식 15-1]에서 합성한 [중간체 15-a]를 사용하여 동일한 방법으로 [화합물 15] (수율 50%)을 얻었다.

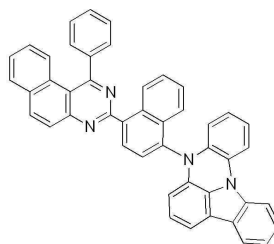
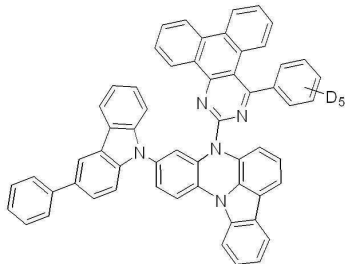
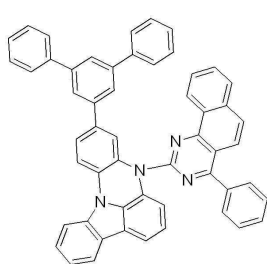
[0496] MS (MALDI-TOF) 954.35 m/z [M⁺]

[0497] 이하, 상기 본 발명의 합성예 1 내지 15에 따라 합성된 [화합물 1] 내지 [화합물 15]로 표시되는 유기발광 화합물의 구조를 도시하였다.

[0498] [화합물 1]

[화학식 2]

[화학식 3]

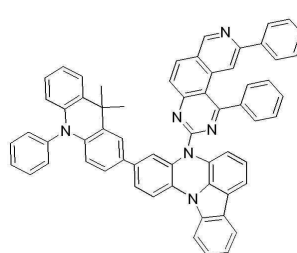
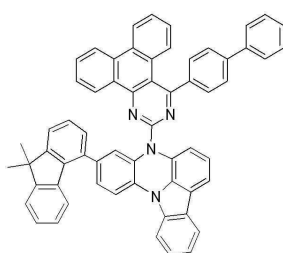
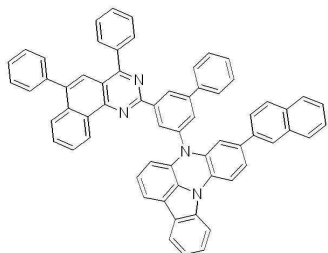


[0499]

[0500] [화합물 4]

[화학식 5]

[화학식 6]

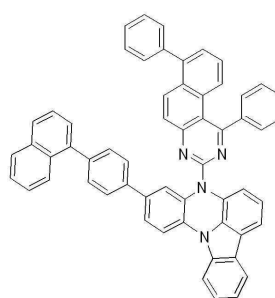
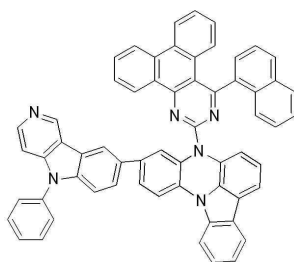
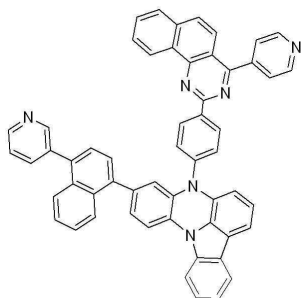


[0501]

[0502] [화합물 7]

[화학식 8]

[화학식 9]

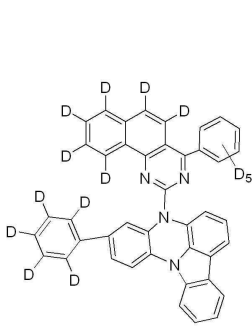


[0503]

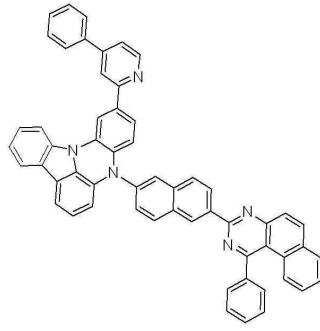
[0504] [화합물 10]

[화학식 11]

[화학식 12]



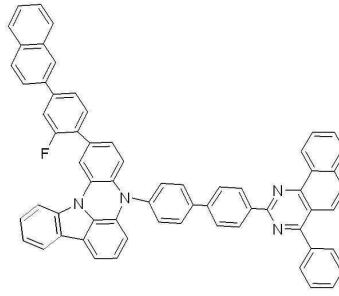
[0505]



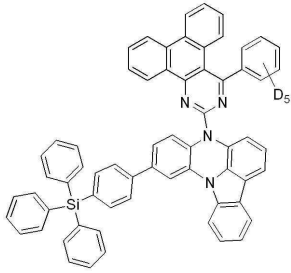
[0506]

[화합물 13]

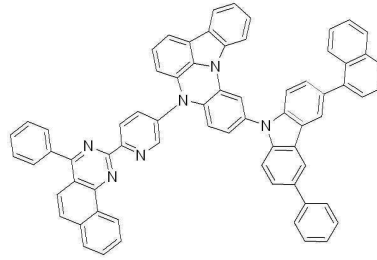
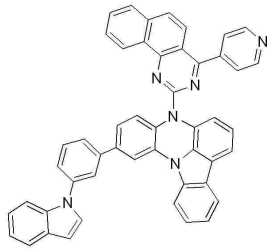
[화학식 14]



[화학식 15]



[0507]



[0508]

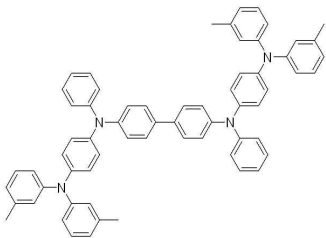
[실시예 1 내지 5] 유기발광다이오드의 제조

[0509]

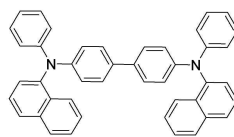
ITO 글래스의 발광 면적이 $2\text{ mm} \times 2\text{ mm}$ 크기가 되도록 패터닝한 후 세정하였다. 기판을 진공 챔버에 장착한 후 베이스 압력이 1×10^{-6} torr가 되도록 한 후 유기물을 상기 ITO위에 DNTPD ($700\text{ \AA}$), α -NPB ($300\text{ \AA}$), 본 발명에 의해 제조된 화합물 1 내지 5 + $(\text{piq})_2\text{Ir}(\text{acac})$ (10%) ($300\text{ \AA}$), Alq_3 ($350\text{ \AA}$), LiF ($5\text{ \AA}$), Al ($1,000\text{ \AA}$)의 순서로 성막하였으며, 0.4 mA 에서 측정을 하였다.

[0510]

상기 DNTPD, α -NPB, $(\text{piq})_2\text{Ir}(\text{acac})$, Alq_3 구조는 다음과 같다.



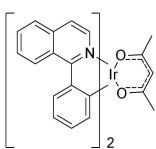
[0511]



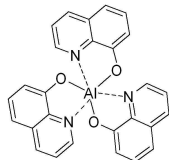
[0512]

[DNTPD]

[α -NPB]



[0513]



[0514]

$[(\text{piq})_2\text{Ir}(\text{acac})]$

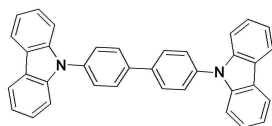
$[\text{Alq}_3]$

[0515]

[비교예 1]

[0516]

비교예 1을 위한 유기발광다이오드 소자는 상기 실시예 1 내지 5의 소자구조에서 발명에 의해 제조된 화합물 대신 일반적으로 인광호스트 물질로 많이 사용되고 있는 CBP를 사용하여 실시예 1과 동일하게 제작하였으며 상기 CBP의 구조는 아래와 같다.



[0517]

[0518]

[CBP]

[0519]

상기 실시예 1 내지 5 및 비교예 1에 따라 제조된 유기전계발광소자에 대하여, 전압, 휘도, 색 좌표 및 수명을 측정하고 그 결과를 하기 [표 1]에 나타내었다.

표 1

[0520]

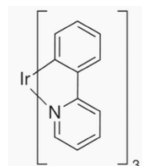
구분	호스트	도판트	전압(V)	휘도 (Cd/m ²)	CIE _x	CIE _y
실시예1	화합물 1	(piq) ₂ Ir(acac)	3.9	870	0.670	0.329
실시예2	화합물 2	(piq) ₂ Ir(acac)	4.0	895	0.671	0.329
실시예3	화합물 3	(piq) ₂ Ir(acac)	3.9	888	0.671	0.328
실시예4	화합물 4	(piq) ₂ Ir(acac)	4.1	906	0.672	0.329
실시예5	화합물 5	(piq) ₂ Ir(acac)	4.0	822	0.672	0.328
비교예 1	CBP	(piq) ₂ Ir(acac)	7.9	350	0.667	0.324

[0521]

[실시예 6 내지 11] 유기발광다이오드의 제조

[0522]

실시예 6 내지 11을 위한 유기발광다이오드 소자는 상기 실시예 1 내지 5의 소자구조에서 발광층에 [화합물 7], [화합물 9], [화합물 10] 내지 [화합물 12], [화합물 15]를 사용하였으며, [(piq)₂Ir(acac)] 대신 [Ir(ppy)₃]을 사용하여 동일하게 제작하였으며, [Ir(ppy)₃]의 구조는 아래와 같다.



[0523]

[0524]

[Ir(ppy)₃]

[0525]

[비교예 2]

[0526]

비교예 2를 위한 유기발광다이오드 소자는 비교예 1의 소자구조에서 발광층에 [(piq)₂Ir(acac)] 대신 [Ir(ppy)₃]을 사용하여 비교예 1과 동일하게 제작하였다.

[0527]

상기 실시예 6 내지 11 및 비교예 2에 따라 제조된 유기전계발광소자에 대하여, 전압, 휘도, 색 좌표 및 수명을 측정하고 그 결과를 하기 [표 2]에 나타내었다.

표 2

[0528]

구분	호스트	도판트	전압(V)	휘도 (Cd/m ²)	CIE _x	CIE _y
실시예6	화합물 7	Ir(ppy) ₃	3.9	905	0.327	0.626
실시예7	화합물 9	Ir(ppy) ₃	4.0	923	0.329	0.625
실시예8	화합물 10	Ir(ppy) ₃	3.9	917	0.330	0.627
실시예9	화합물 11	Ir(ppy) ₃	4.1	920	0.331	0.623

실시예10	화합물 12	Ir(ppy)_3	4.0	931	0.327	0.625
실시예11	화합물 15	Ir(ppy)_3	3.9	909	0.328	0.622
비교예 2	CBP	Ir(ppy)_3	7.5	401	0.29	0.622

[0529] 상기 [표 1] 및 [표 2]에서 보는 바와 같이 본 발명에 의하여 확보된 유기화합물은 인광 발광성 호스트 재료로 많이 쓰이는 호스트물질 중 CBP에 비하여 훨씬 낮은 구동전압과 휘도를 가진다.

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	KR1020140141970A	公开(公告)日	2014-12-11
申请号	KR1020130063400	申请日	2013-06-03
[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	SHIM SO YOUNG 심소영 YU SE JIN 유세진 LEE SANG HAE 이상해		
发明人	심소영 유세진 이상해		
IPC分类号	C09K11/06 C07D487/04 H01L51/50		
CPC分类号	H01L51/0072 H01L51/0059 H01L51/0062 C07D487/04 H01L51/5016 H01L51/5024		
外部链接	Espacenet		

摘要(译)

本发明涉及由化学式I至化学式III表示的有机发光化合物和包含该化合物的有机电致发光器件。包含根据本发明的有机发光化合物的有机电致发光器件具有改进的功率效率，因为可以同时实现低电压操作，同时显示出优异的亮度和发光效率.COPYRIGHT KIPO 2015

80
70
60
50
40
30
20
10