



(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 공개특허공보(A)

(11) 공개번호 10-2017-0127357
(43) 공개일자 2017년11월21일

- | | |
|---|--|
| <p>(51) 국제특허분류(Int. Cl.)
 <i>C09K 11/06</i> (2006.01) <i>C07D 209/82</i> (2006.01)
 <i>C07D 307/91</i> (2006.01) <i>C07D 333/76</i> (2006.01)
 <i>H01L 51/00</i> (2006.01) <i>H01L 51/50</i> (2006.01)</p> <p>(52) CPC특허분류
 <i>C09K 11/06</i> (2013.01)
 <i>C07D 209/82</i> (2013.01)</p> <p>(21) 출원번호 10-2017-0049656(분할)
 (22) 출원일자 2017년04월18일
 심사청구일자 2017년07월06일
 (62) 원출원 특허 10-2017-0026720
 원출원일자 2017년02월28일
 (30) 우선권주장
 1020160057404 2016년05월11일 대한민국(KR)</p> | <p>(71) 출원인
 에스케이케미칼주식회사
 경기도 성남시 분당구 판교로 310 (삼평동)</p> <p>(72) 발명자
 장유미
 경기도 광주시 송정로 69 나산아파트 102동 1504호
 박정호
 경기도 성남시 분당구 동판교로 275 풍성신미주아파트 121동 504호
 (뒷면에 계속)</p> <p>(74) 대리인
 이수열</p> |
|---|--|

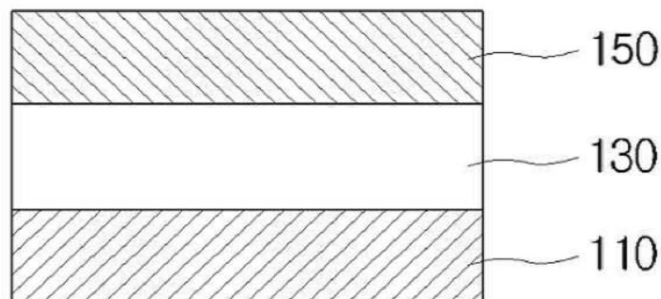
전체 청구항 수 : 총 8 항

(54) 발명의 명칭 유기전계발광소자용 화합물 및 그를 포함하는 유기전계발광소자

(57) 요약

본 발명은 유기전계발광소자용 화합물 및 그를 포함하는 유기전계발광소자를 제공한다. 이에 의하여 열 안정성이 높으며, 발광 효율 및 수명이 개선된 정공 수송성을 갖는 유기전계발광소자용 화합물을 제공할 수 있다. 또한, 본 발명의 유기전계발광소자용 화합물을 발광층과 접촉하는 정공 수송층 물질로 적용하였을 경우, 삼중항 에너지를 높여 유기전계발광소자의 효율을 향상시킬 수 있으며 수명을 개선할 수 있다.

대표도 - 도1



(52) CPC특허분류

C07D 307/91 (2013.01)

C07D 333/76 (2013.01)

H01L 51/0073 (2013.01)

H01L 51/0074 (2013.01)

H01L 51/5056 (2013.01)

H01L 51/5072 (2013.01)

H01L 51/5096 (2013.01)

C09K 2211/1088 (2013.01)

C09K 2211/1092 (2013.01)

(72) 발명자

강주식

경기도 화성시 동탄반석로 232 신일유토빌아파트
131-2403

양남철

서울특별시 서초구 바우피로 91 우성아파트
110-507

박재균

서울특별시 관악구 인현12길 46-1 은천아파트 202
동 306호

이송

서울특별시 강남구 광평로47길 17 신동아아파트
708동 1202호

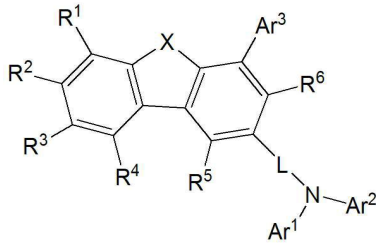
명세서

청구범위

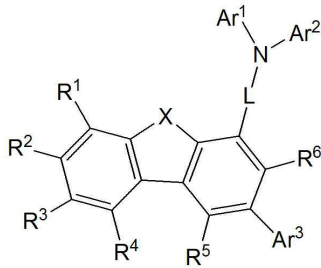
청구항 1

하기 구조식 2 및 구조식 3 중 어느 하나로 표시되는 유기전계발광소자용 화합물.

[구조식 2]



[구조식 3]



상기 구조식 2 및 구조식 3에서,

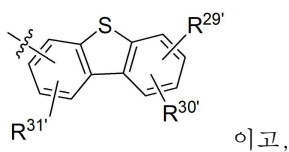
R^1 내지 R^6 은 서로 같거나 다르고, R^1 내지 R^6 은 각각 독립적으로 수소원자, 중수소원자, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴기이고,

L은 원자가결합, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬렌기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬렌기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로시클로알킬렌기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아틸렌기, 또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아틸렌기이고,

X는 산소원자 또는 황원자이고,

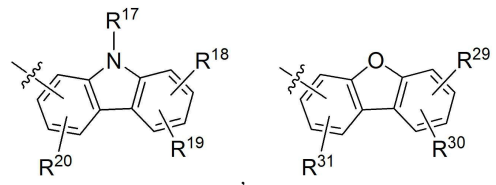
Ar^1 및 Ar^2 는 서로 같거나 다르고, Ar^1 및 Ar^2 는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴기이고,

Ar^3 은 서로 같거나 다르고, Ar^3 은 각각 독립적으로,



이고,

R^{17} 은 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴기이고,



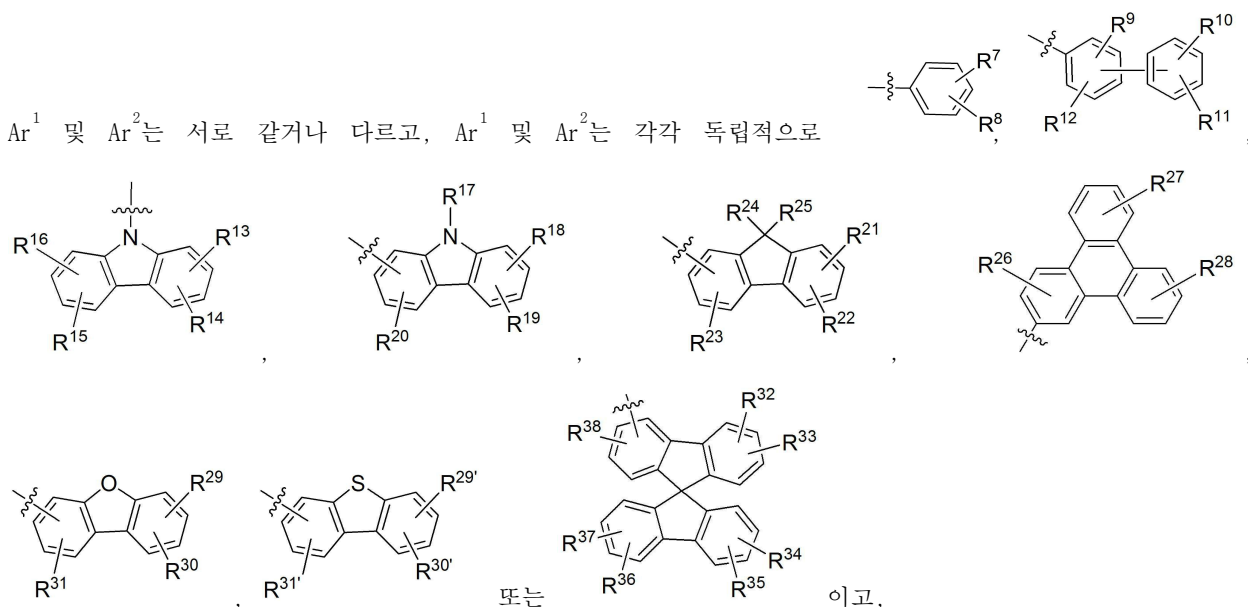
, 또는

R^{18} 내지 R^{20} , R^{29} 내지 R^{31} , 및 $R^{29'}$ 내지 $R^{31'}$ 는 서로 같거나 다르고, R^{18} 내지 R^{20} 은, R^{29} 내지 R^{31} , 및 $R^{29'}$ 내지 $R^{31'}$ 는 각각 독립적으로 수소원자, 중수소원자, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 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 것인 유기전계발광소자용 화합물.

청구항 2

제1항에 있어서,

Ar^1 및 Ar^2 는 서로 같거나 다르고, Ar^1 및 Ar^2 는 각각 독립적으로



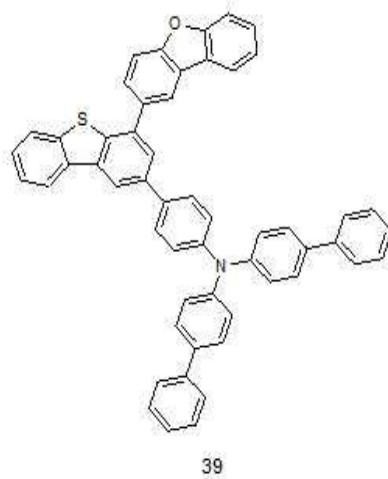
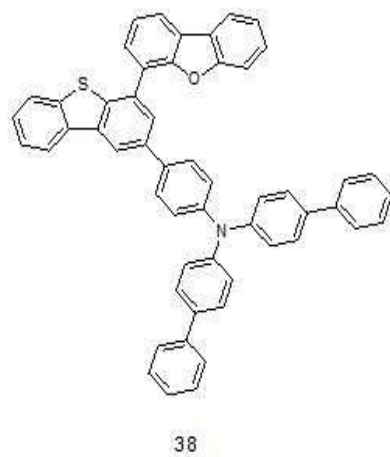
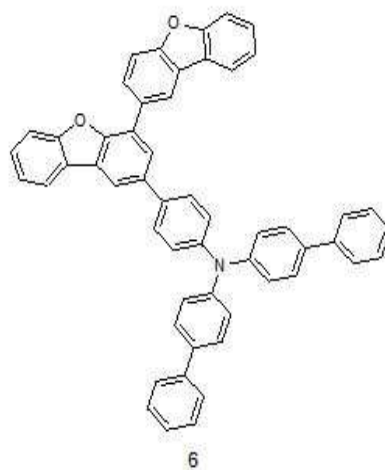
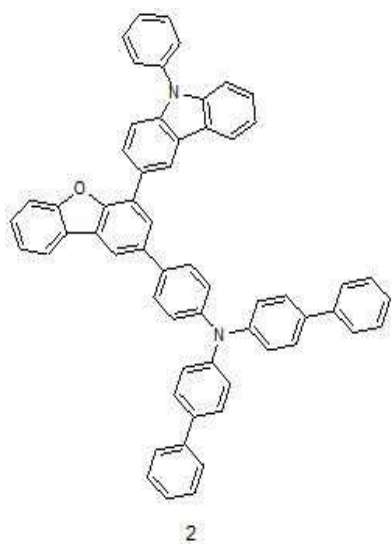
R^7 내지 R^{16} , R^{18} 내지 R^{38} , 및 $R^{29'}$ 내지 $R^{31'}$ 는 서로 같거나 다르고 R^7 내지 R^{16} , R^{18} 내지 R^{38} , 및 $R^{29'}$ 내지 $R^{31'}$ 는 각각 독립적으로 수소원자, 중수소원자, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴기이고,

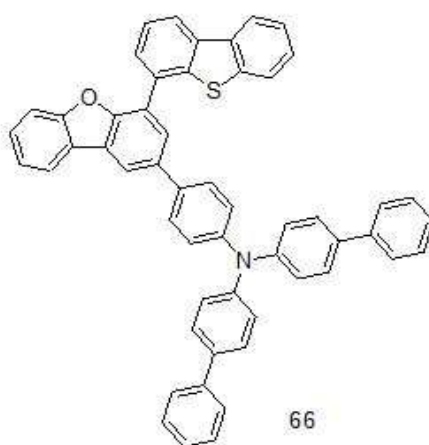
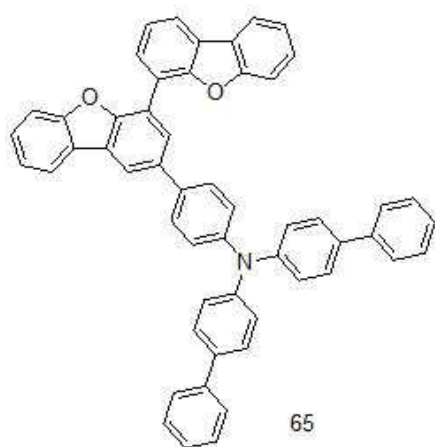
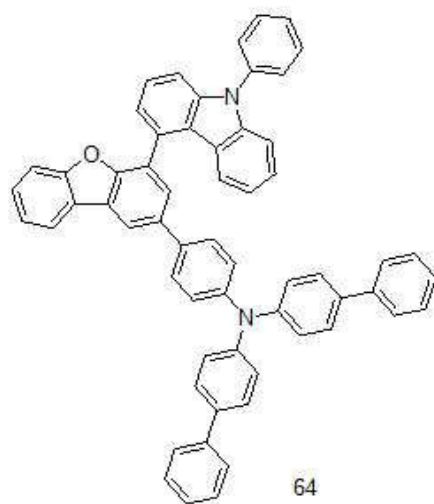
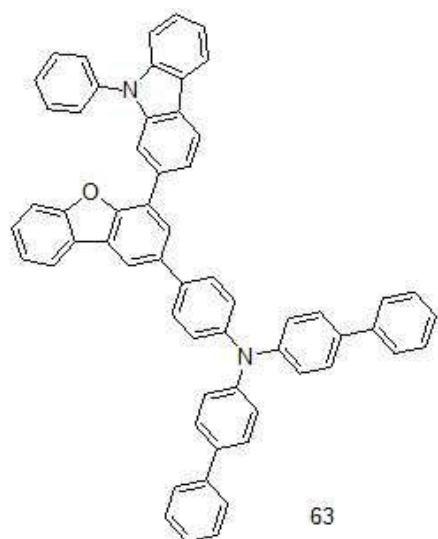
R^{17} 은 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴기인 것을 특징으로 하는 유기전계발광소자용 화합물.

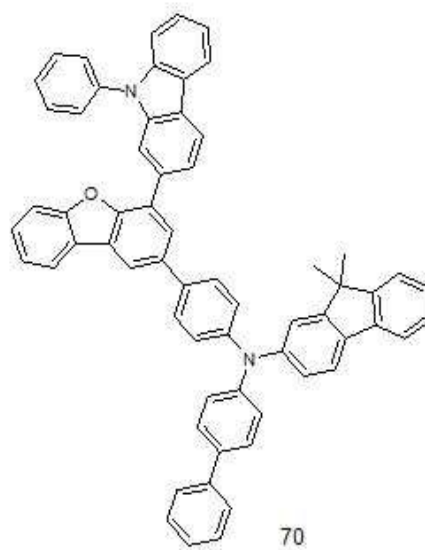
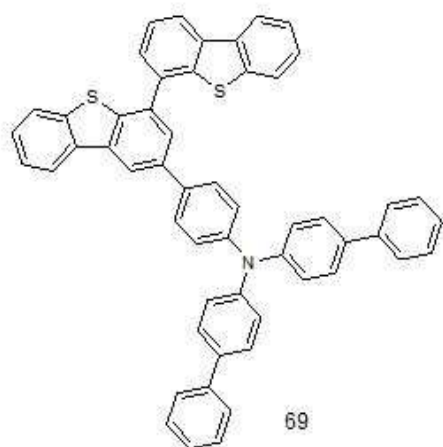
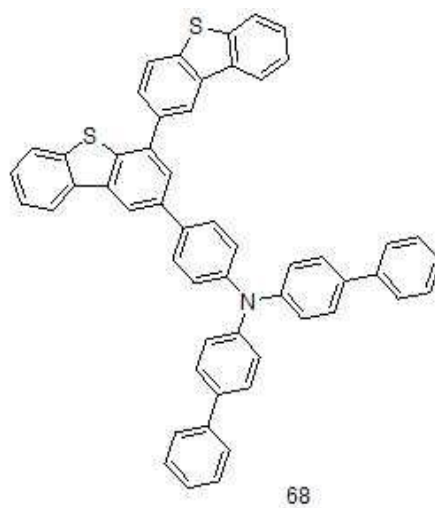
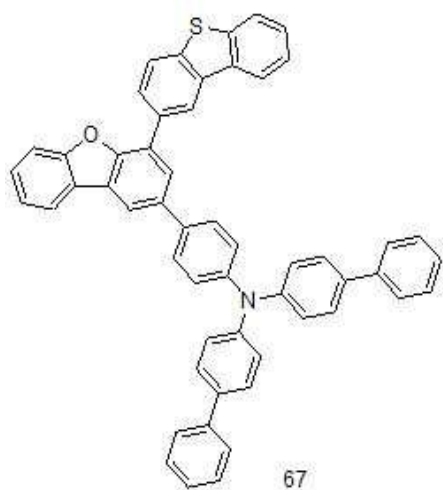
청구항 3

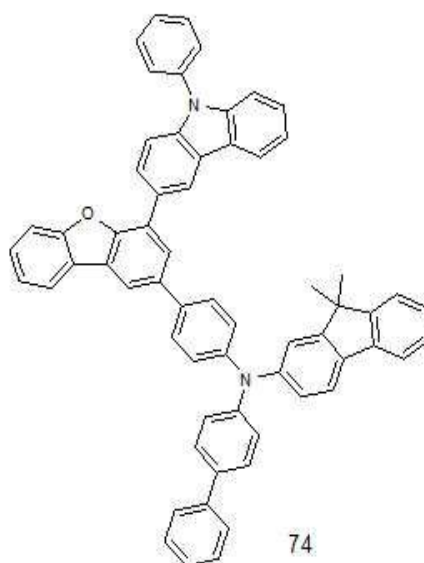
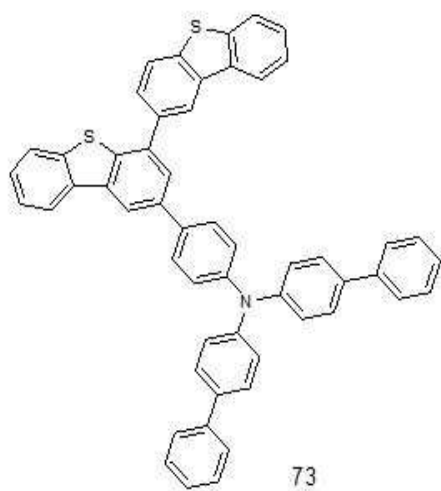
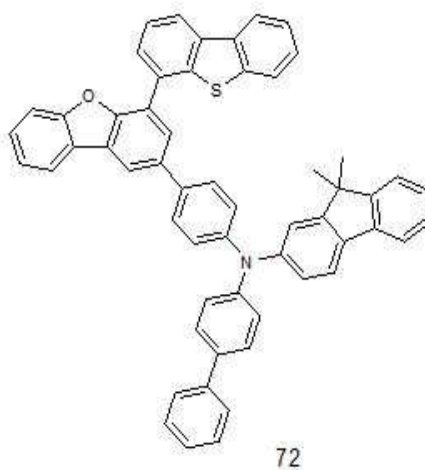
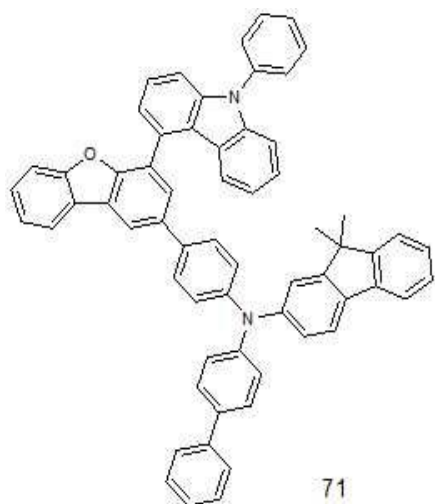
제1항에 있어서,

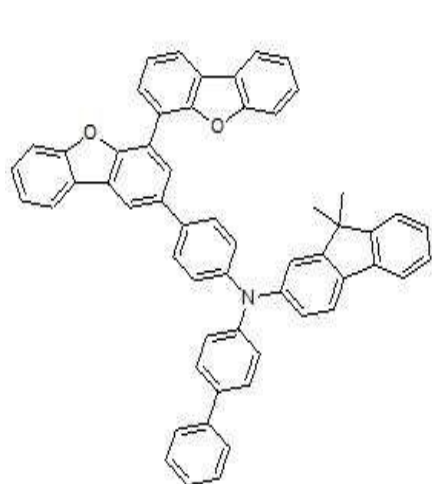
상기 유기전계발광소자용 화합물은 하기 화학식으로 표시되는 화합물 중에서 선택된 어느 하나인 것을 특징으로 하는 유기전계발광소자용 화합물.



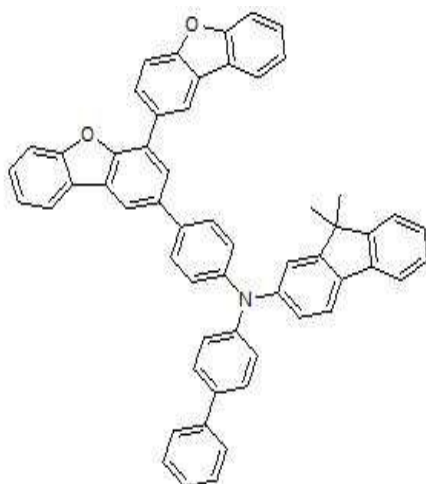




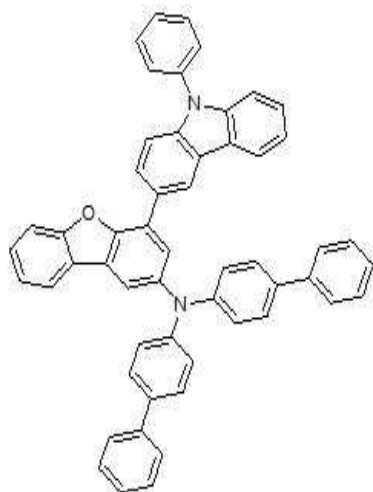




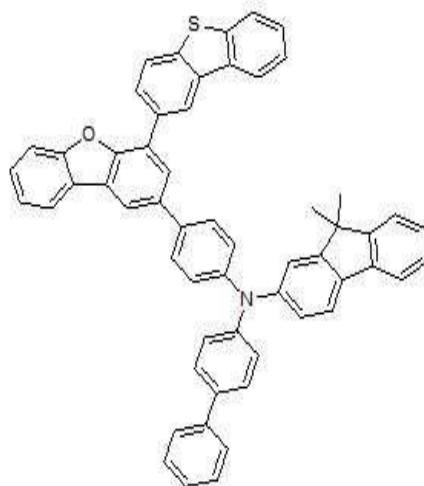
75



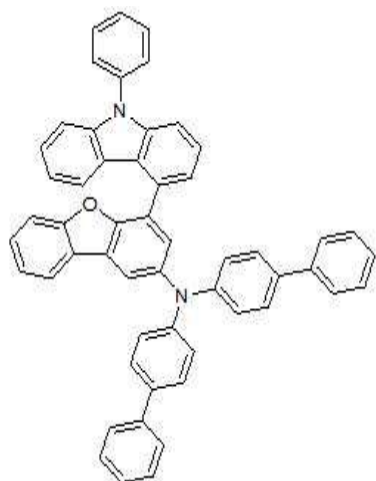
76



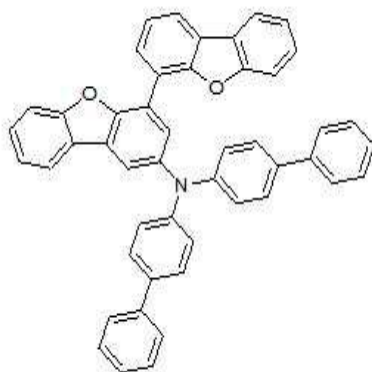
77



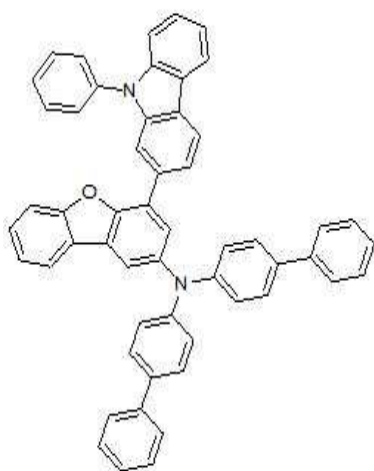
78



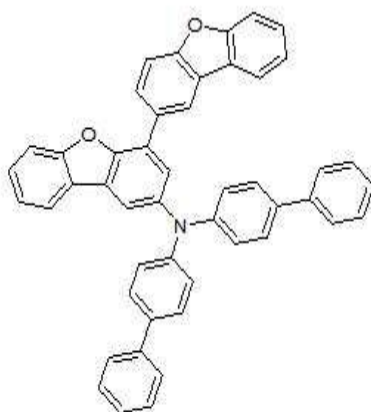
79



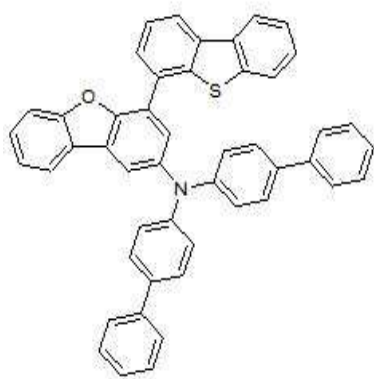
80



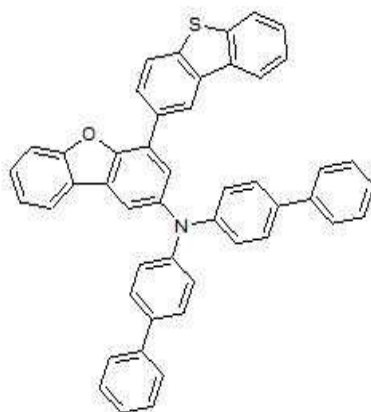
81



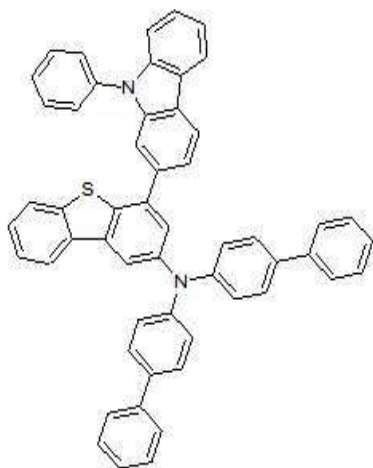
82



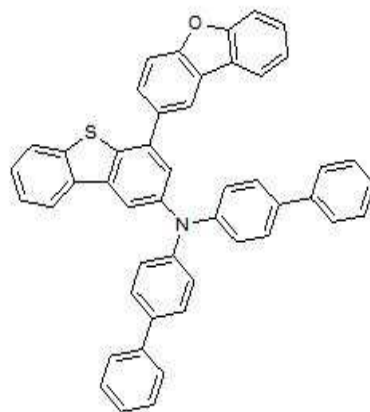
83



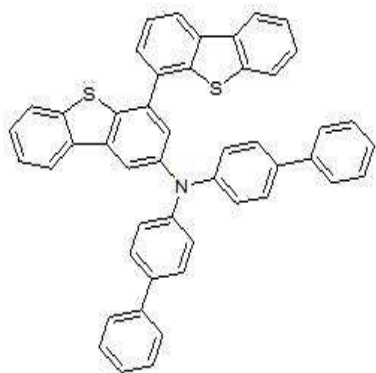
84



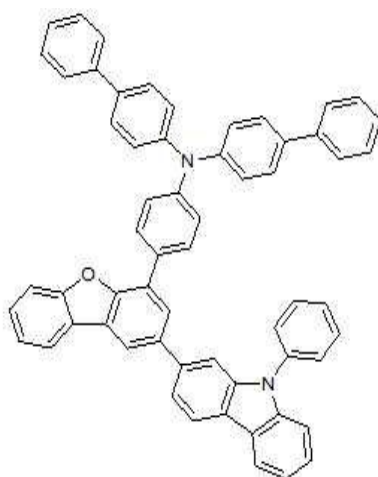
85



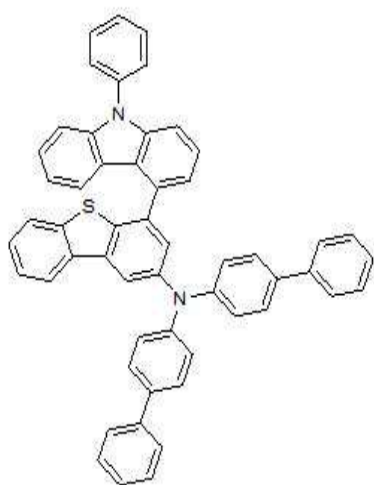
86



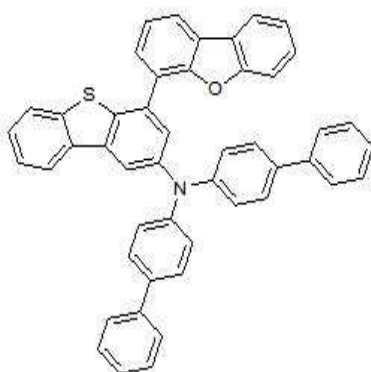
87



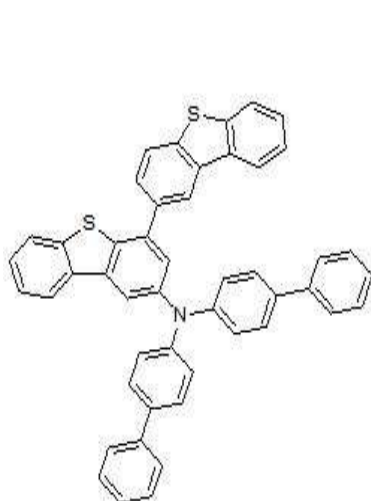
88



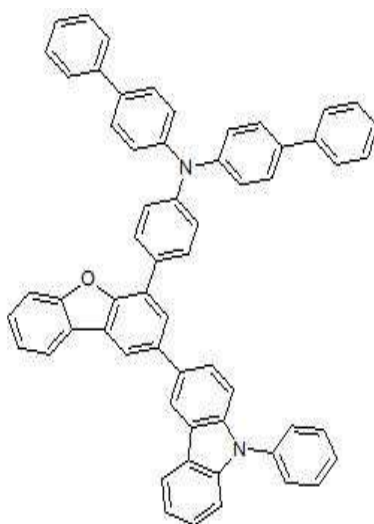
89



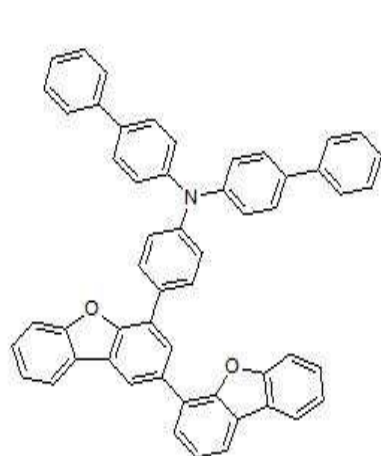
90



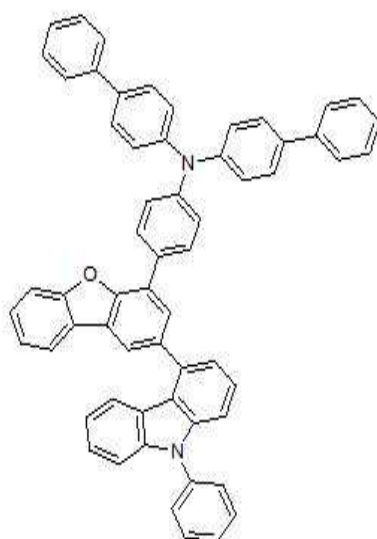
91



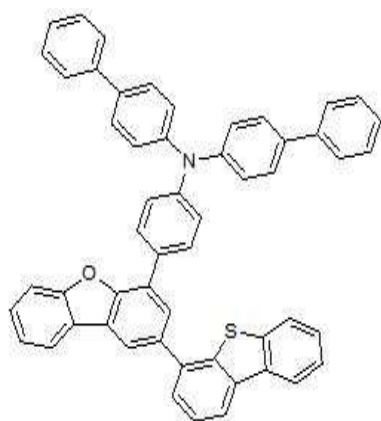
92



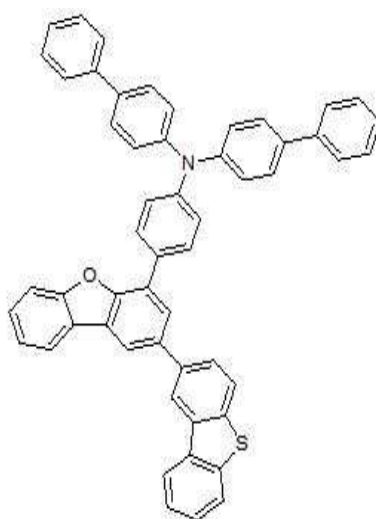
93



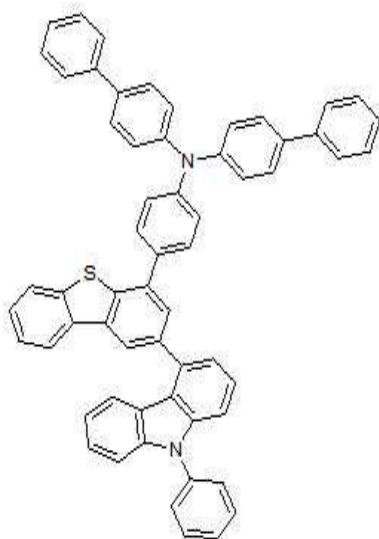
94



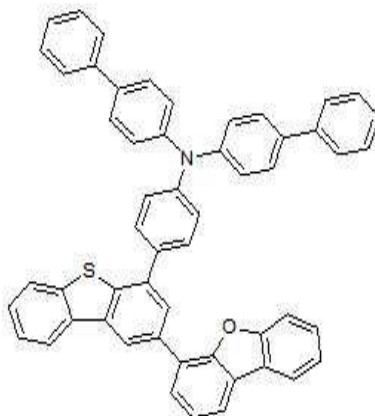
95



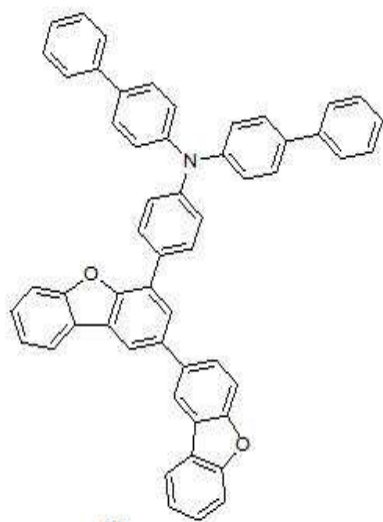
96



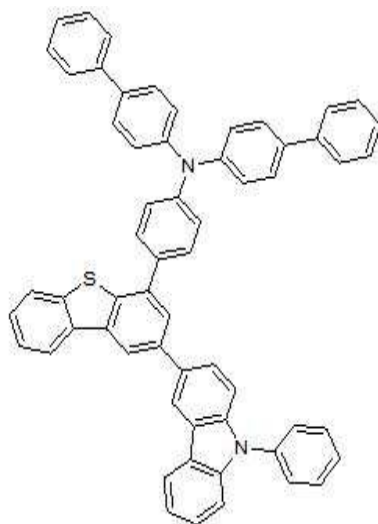
97



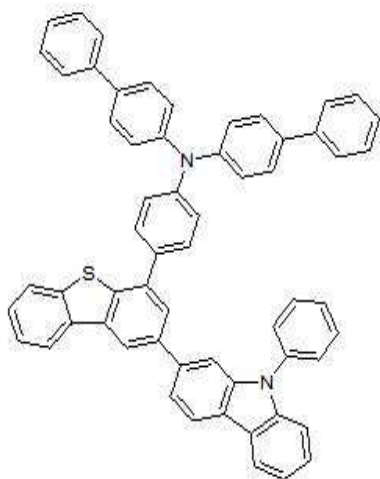
98



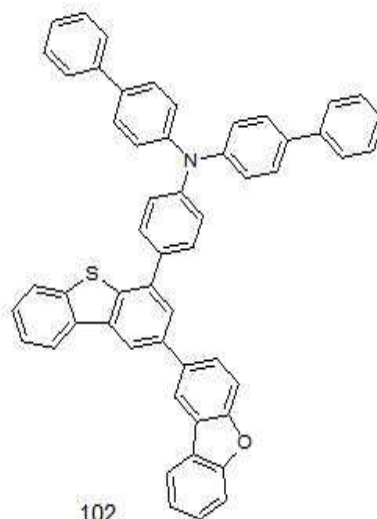
99



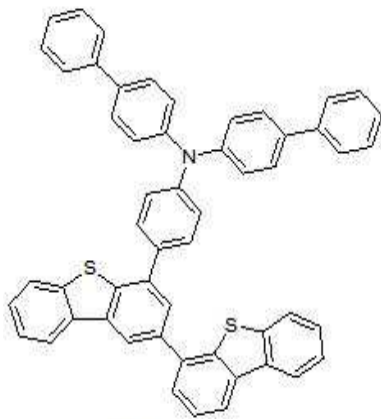
100



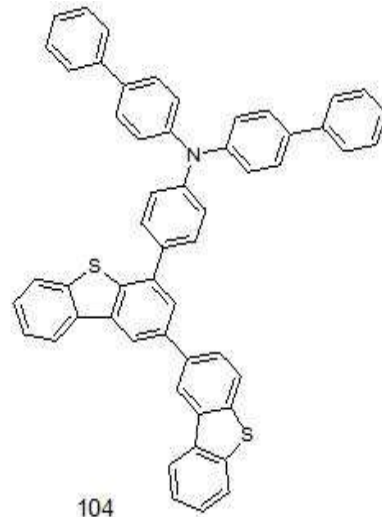
101



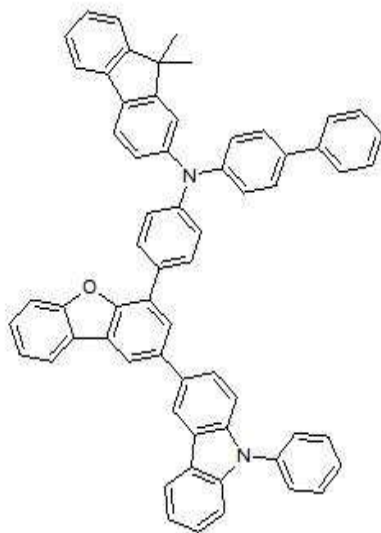
102



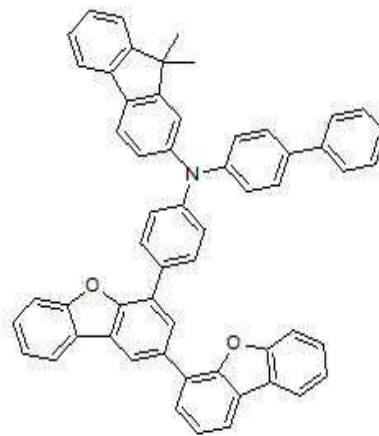
103



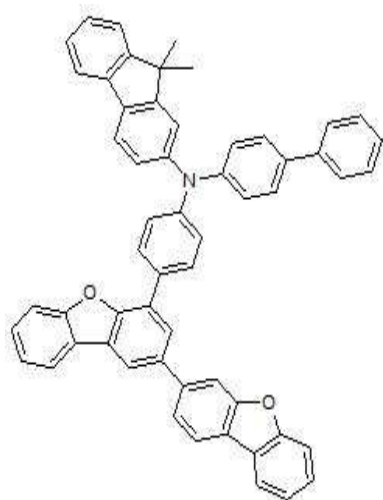
104



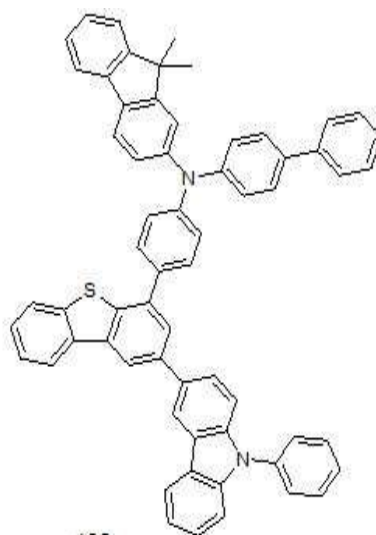
105



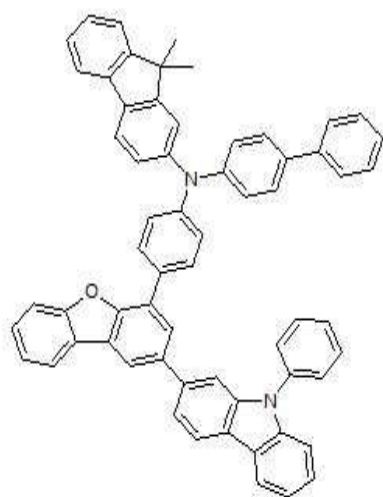
106



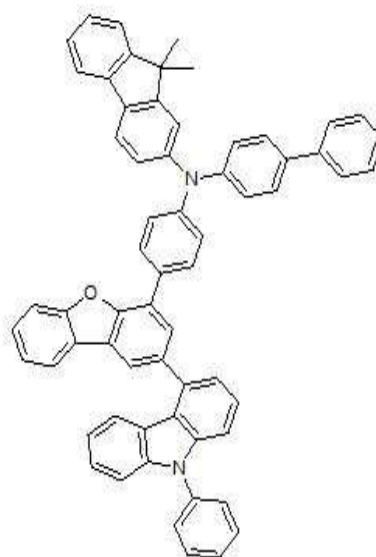
107



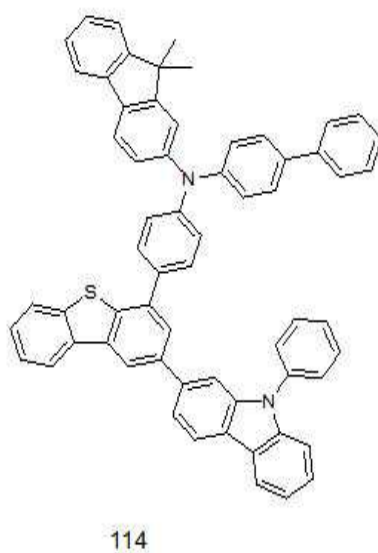
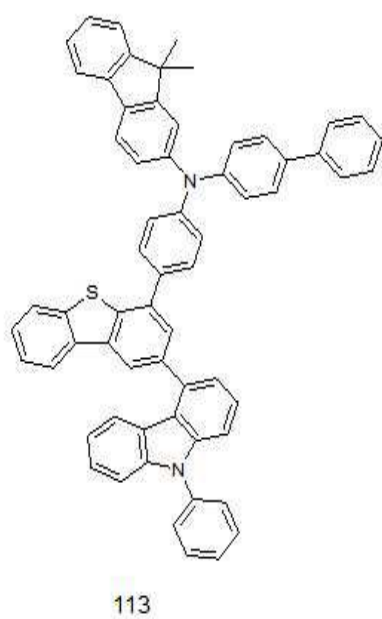
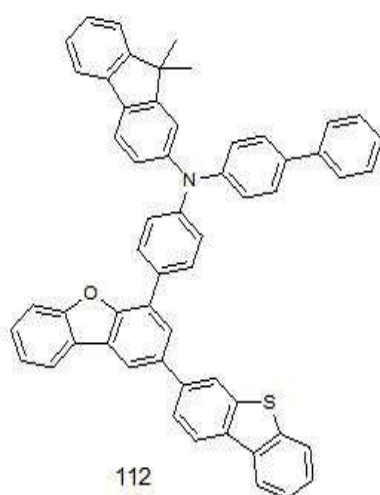
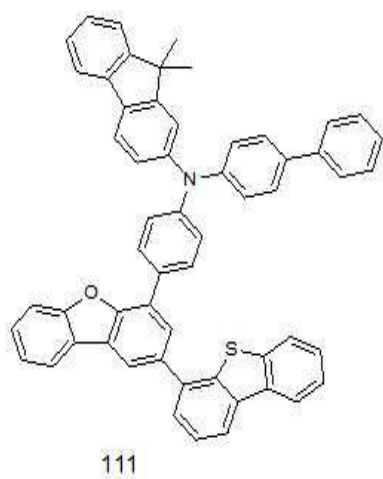
108

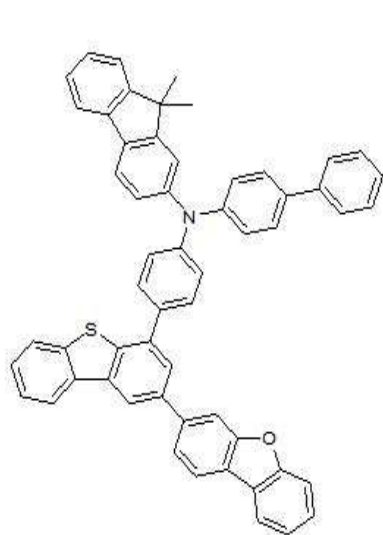


109

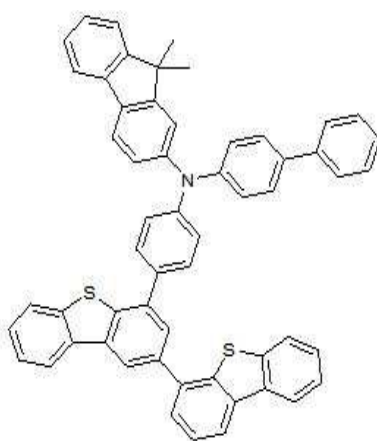


110

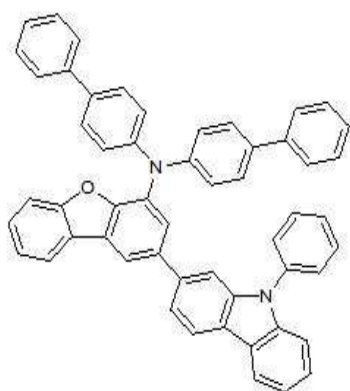




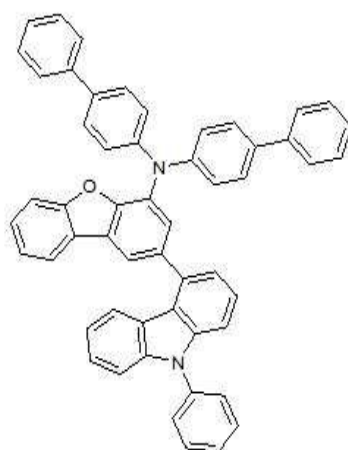
115



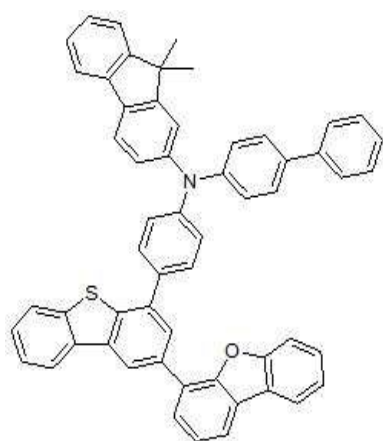
116



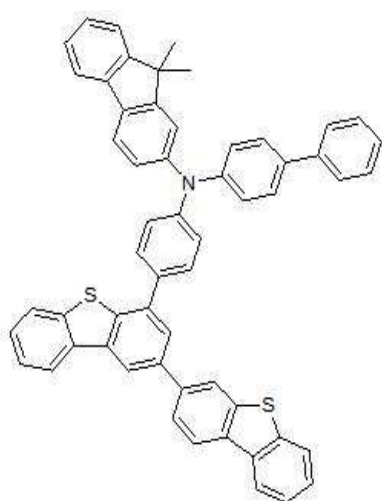
117



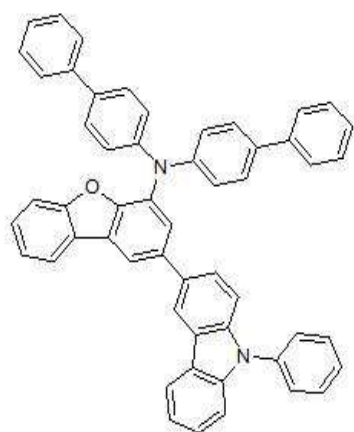
118



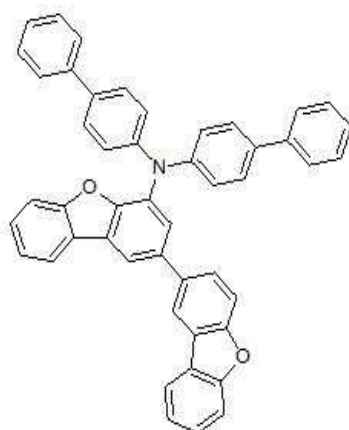
119



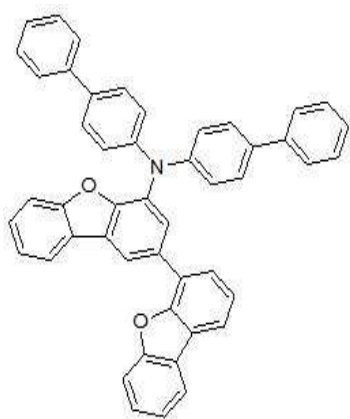
120



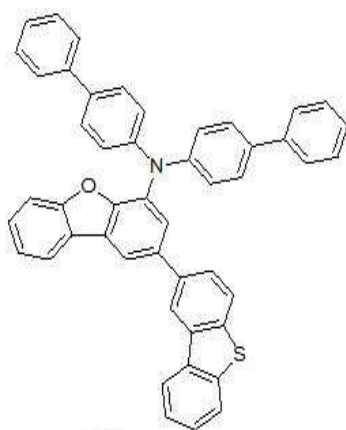
121



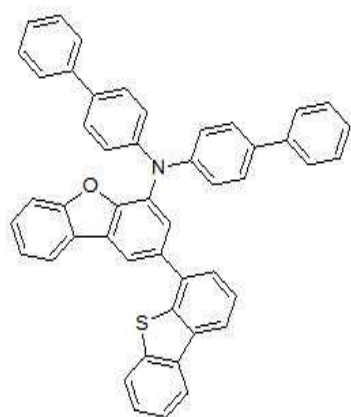
122



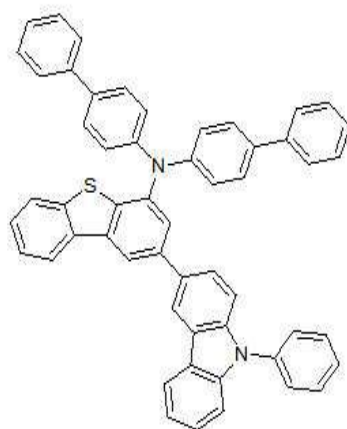
123



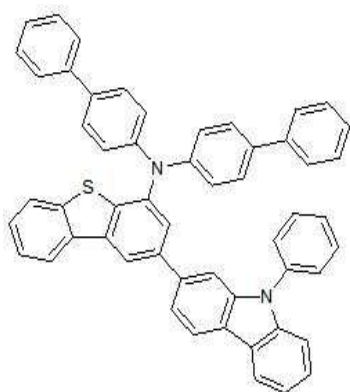
124



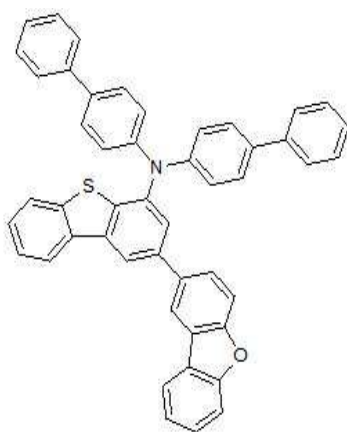
125



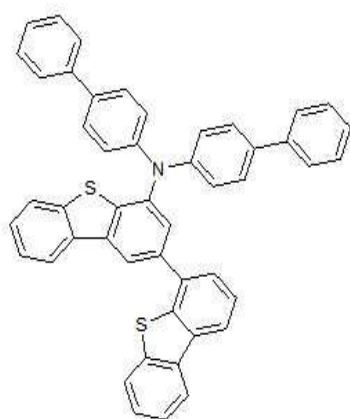
126



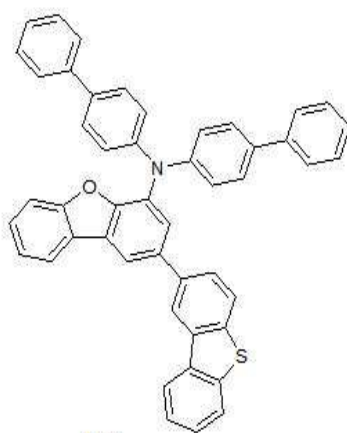
127



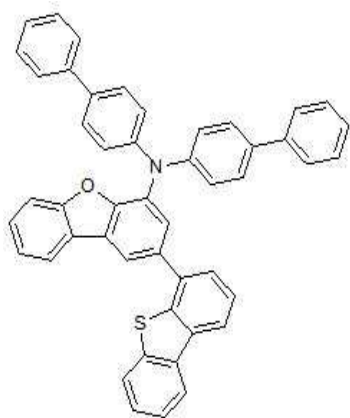
128



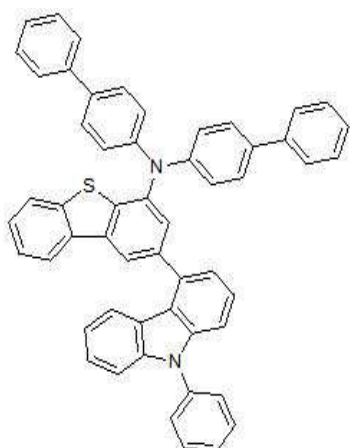
129



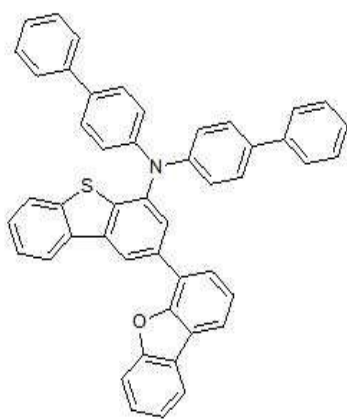
130



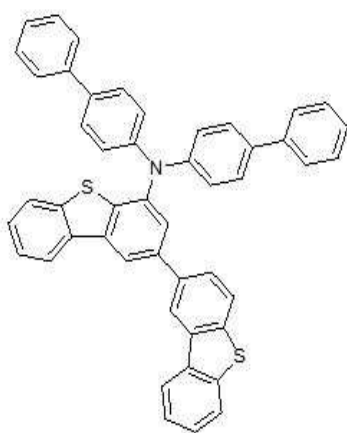
131



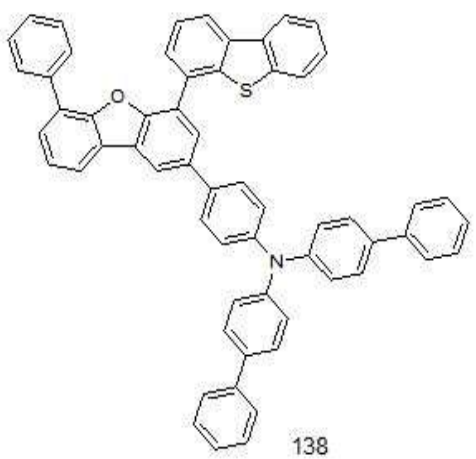
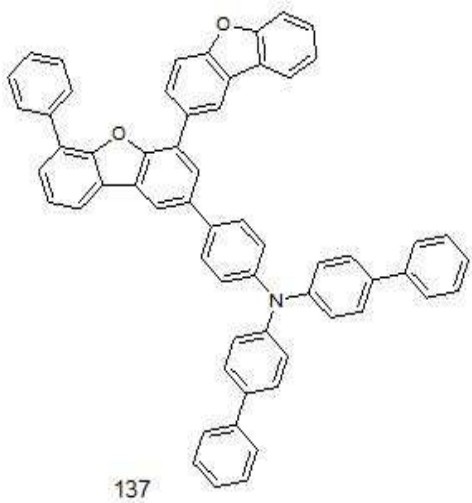
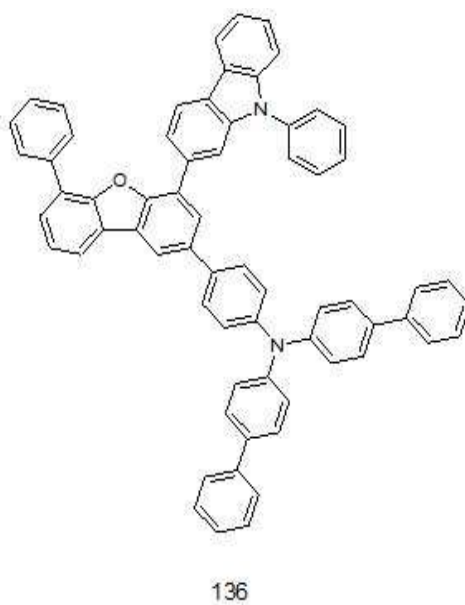
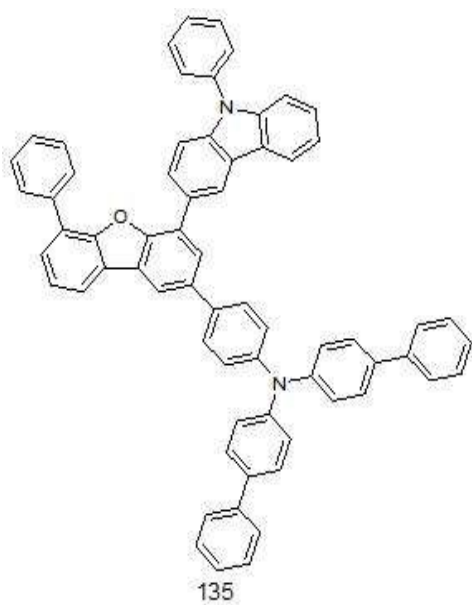
132

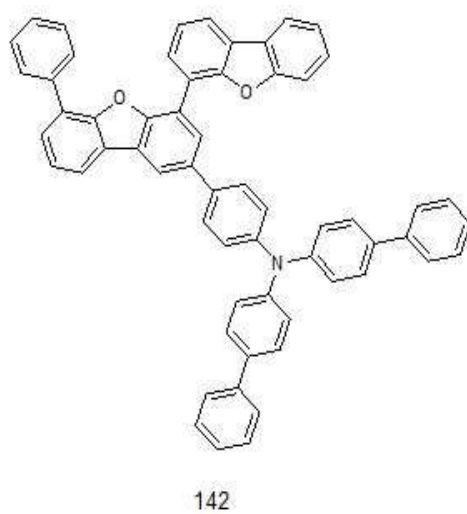
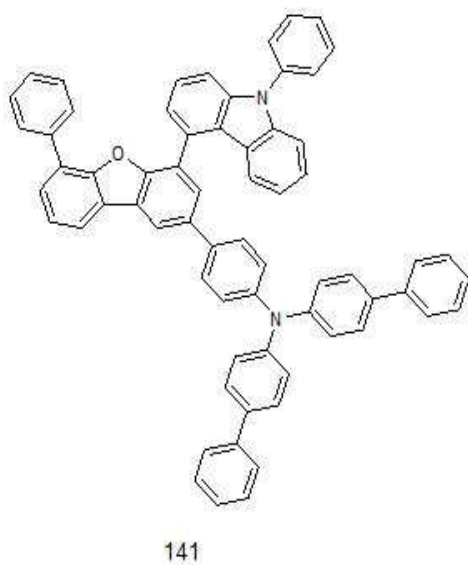
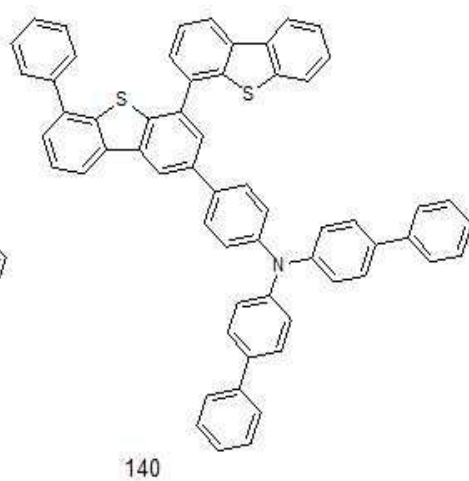
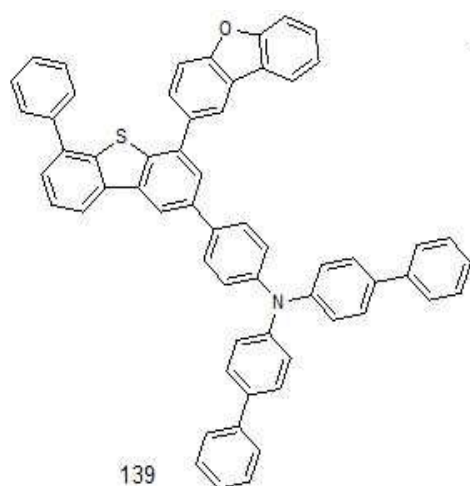


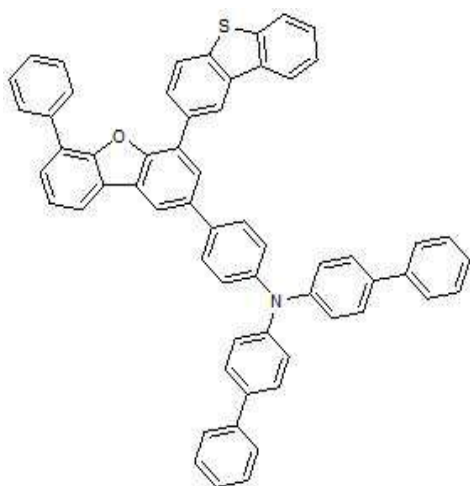
133



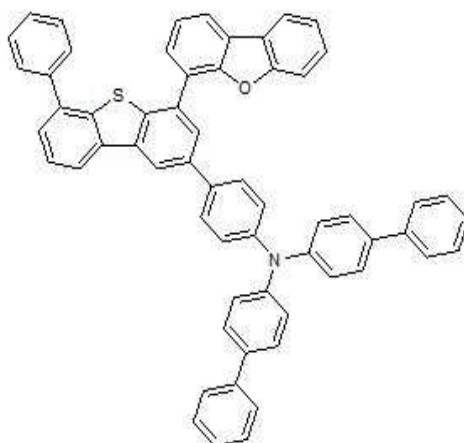
134



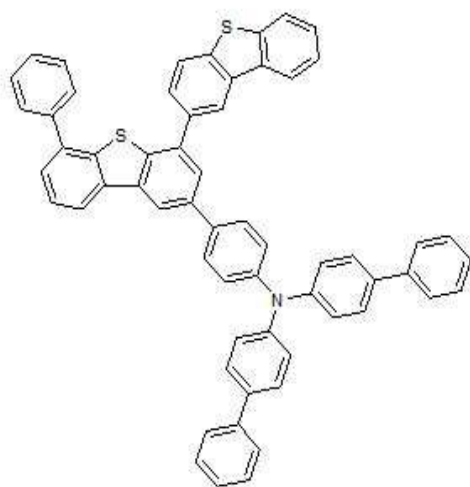




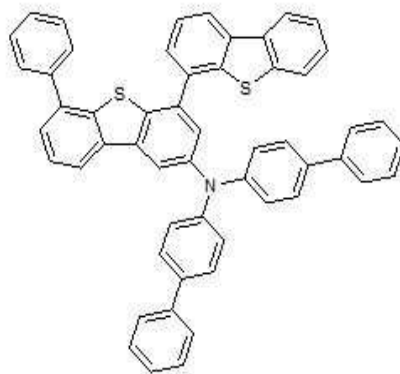
143



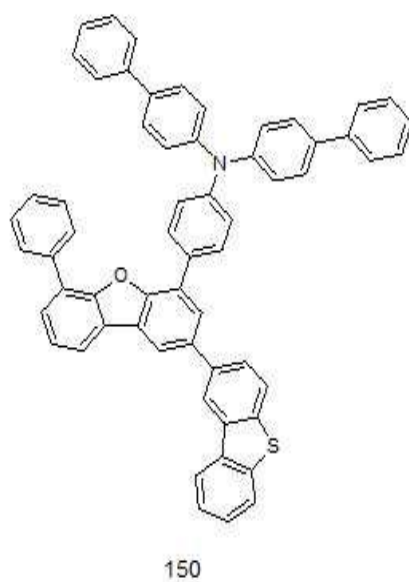
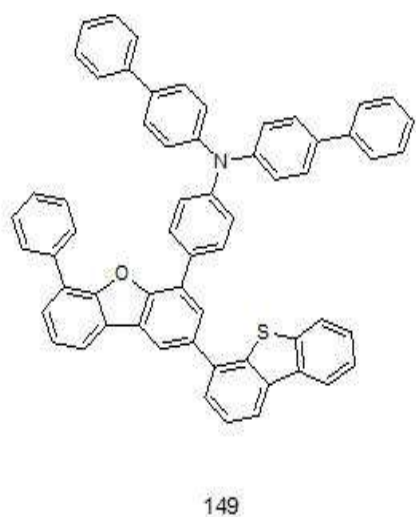
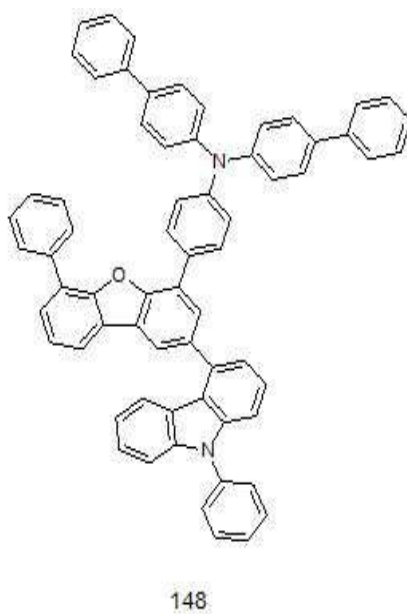
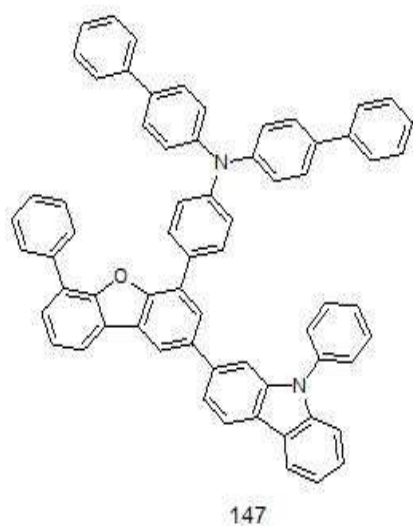
144

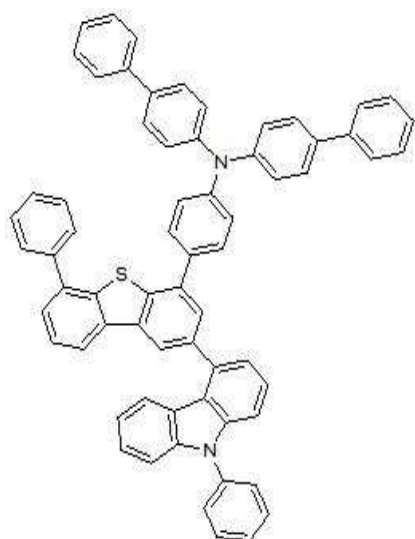


145

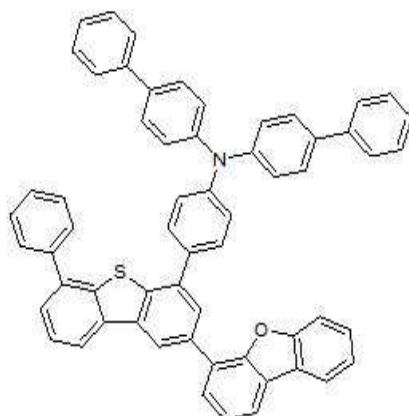


146

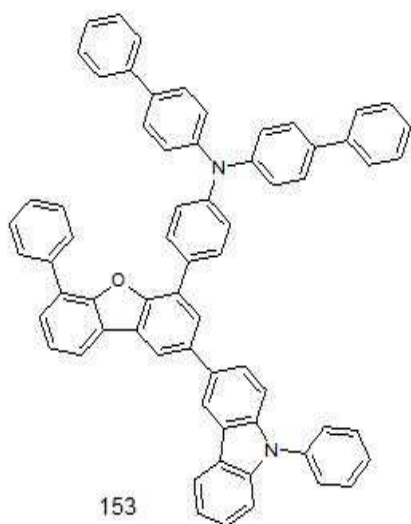




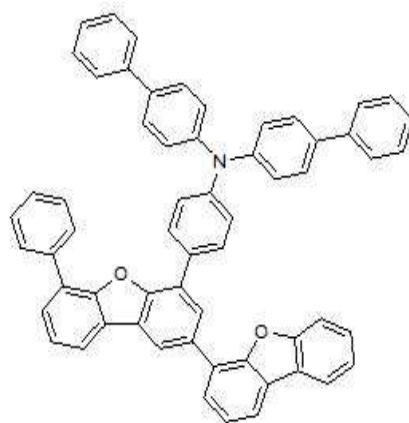
151



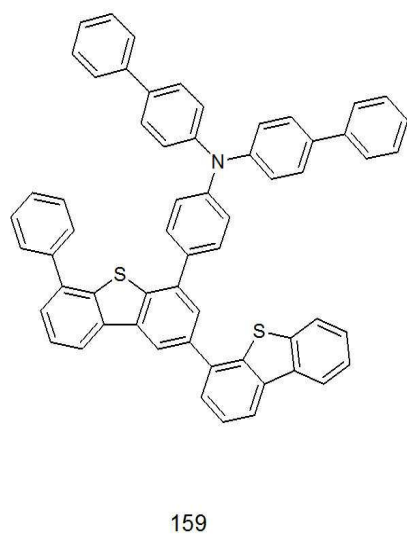
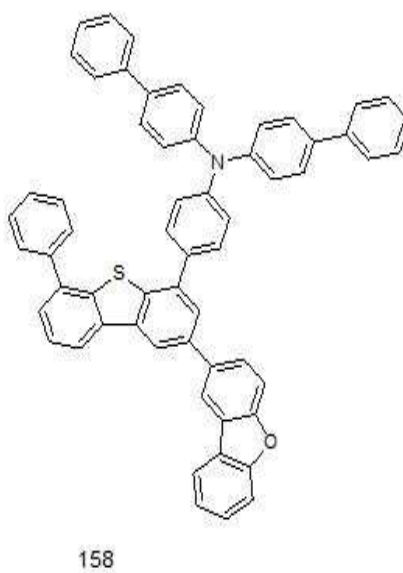
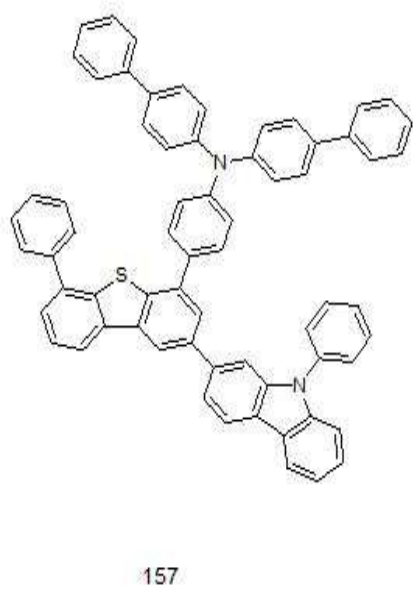
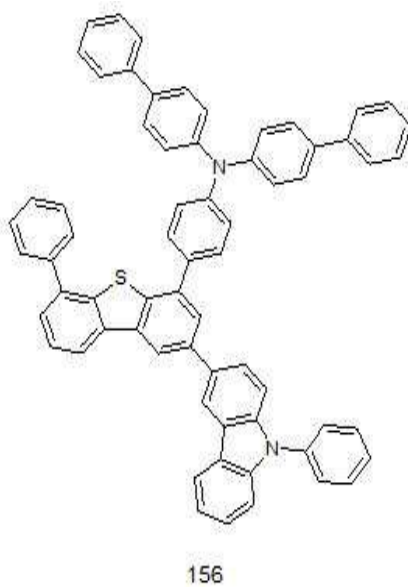
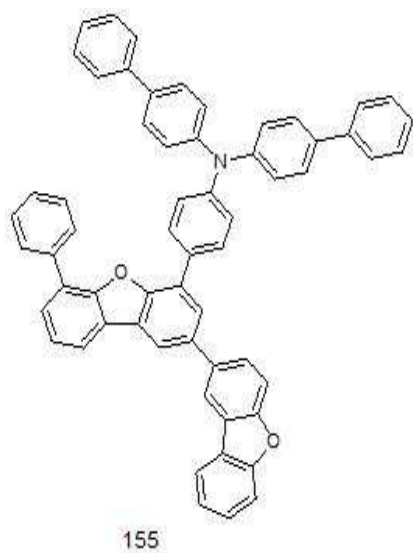
152



153



154



청구항 4

제1항에 따른 유기전계발광소자용 화합물을 포함하는 유기전계발광소자.

청구항 5

제1전극, 제2전극 및 상기 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 6

제5항에 있어서,

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

청구항 7

제5항에 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 유기전계발광소자.

청구항 8

제6항에 있어서,

상기 발광층은 호스트와 도펀트를 포함하는 것을 특징으로 하는 유기전계발광소자.

발명의 설명

기술 분야

[0001] 본 발명은 유기전계발광소자용 화합물 및 그를 포함하는 유기전계발광소자에 관한 것으로, 보다 상세하게는 발광 효율 및 수명이 우수한 아민계 유기전계발광소자용 화합물 및 그를 포함하는 유기전계발광소자에 관한 것이다.

배경 기술

[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 발광재료, 정공수송층 물질, 또는 전자수송층 물질 등의 구조에 따라 양자효율이 크게 영향을 받으며, 열안정성이 떨어질 경우 고온 또는 구동온도에 서 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 구

극적으로 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 목적은 상기 문제점을 해결하기 위한 것으로, 열 안정성이 높으며, 발광 효율 및 수명이 개선된 정공 수송성을 갖는 유기전계발광소자용 화합물을 제공하는 데 있다.

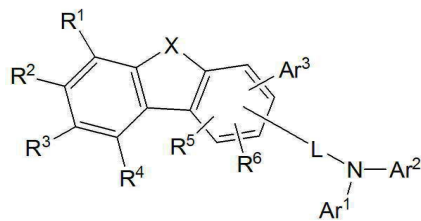
[0008] 또한, 본 발명의 유기전계발광소자용 화합물을 발광층과 접촉하는 정공 수송층 물질로 적용하였을 경우, 삼중항 에너지를 높여 유기전계발광소자의 효율을 향상시킬 수 있으며 수명을 개선할 수 있다.

[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 1로 표시되는 유기전계발광소자용 화합물이 제공될 수 있다.

[0011] [구조식 1]



[0012]

[0013] 구조식 1에서,

[0014] R^1 내지 R^6 은 서로 같거나 다르고, R^1 내지 R^6 은 각각 독립적으로 수소원자, 중수소원자, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 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,

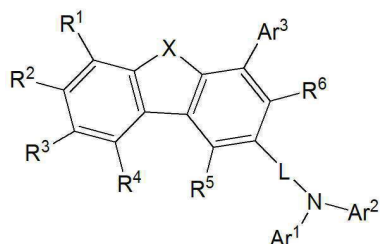
[0015] L은 원자가결합, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬렌기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬렌기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로시클로알킬렌기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴렌기, 또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴렌기이고,

[0016] X는 산소원자 또는 황원자이고,

[0017] Ar^1 내지 Ar^3 은 서로 같거나 다르고, Ar^1 내지 Ar^3 은 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴기일 수 있다.

[0018] 바람직하게는, 상기 구조식 1로 표시되는 화합물은 하기 구조식 2로 표시되는 화합물일 수 있다.

[0019] [구조식 2]



[0020]

[0021] 구조식 2에서,

[0022] R^1 내지 R^6 은 서로 같거나 다르고, R^1 내지 R^6 은 각각 독립적으로 수소원자, 중수소원자, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 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,

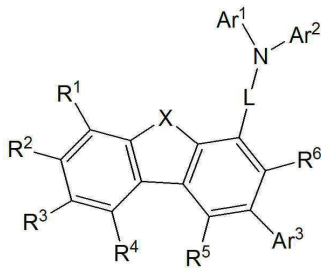
[0023] L은 원자가결합, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬렌기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬렌기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로시클로알킬렌기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아틸렌기, 또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아틸렌기이고,

[0024] X는 산소원자 또는 황원자이고,

[0025] Ar^1 내지 Ar^3 은 서로 같거나 다르고, Ar^1 내지 Ar^3 은 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴기일 수 있다.

[0026] 바람직하게는, 상기 구조식 1로 표시되는 화합물은 하기 구조식 3으로 표시되는 화합물일 수 있다.

[0027] [구조식 3]



[0028]

[0029] 구조식 2 및 3에서,

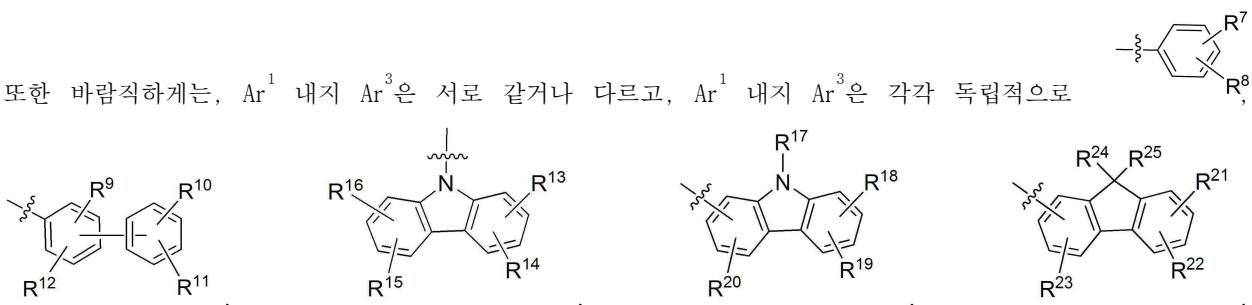
[0030] R^1 내지 R^6 은 서로 같거나 다르고, R^1 내지 R^6 은 각각 독립적으로 수소원자, 중수소원자, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴기이고,

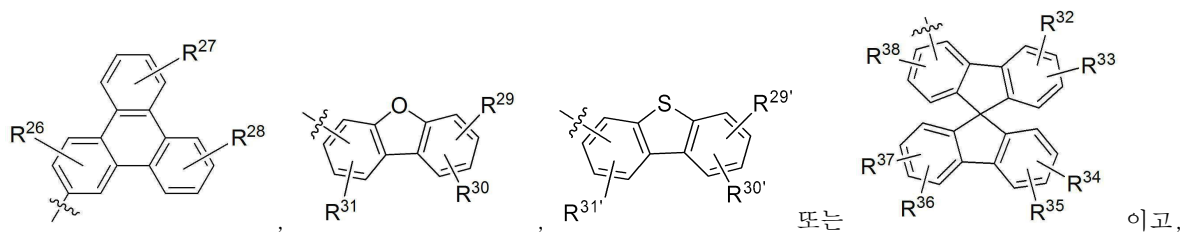
[0031] L은 원자가결합, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬렌기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬렌기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로시클로알킬렌기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아틸렌기, 또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아틸렌기이고,

[0032] X는 산소원자 또는 황원자이고,

[0033] Ar^1 내지 Ar^3 은 서로 같거나 다르고, Ar^1 내지 Ar^3 은 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴기일 수 있다.

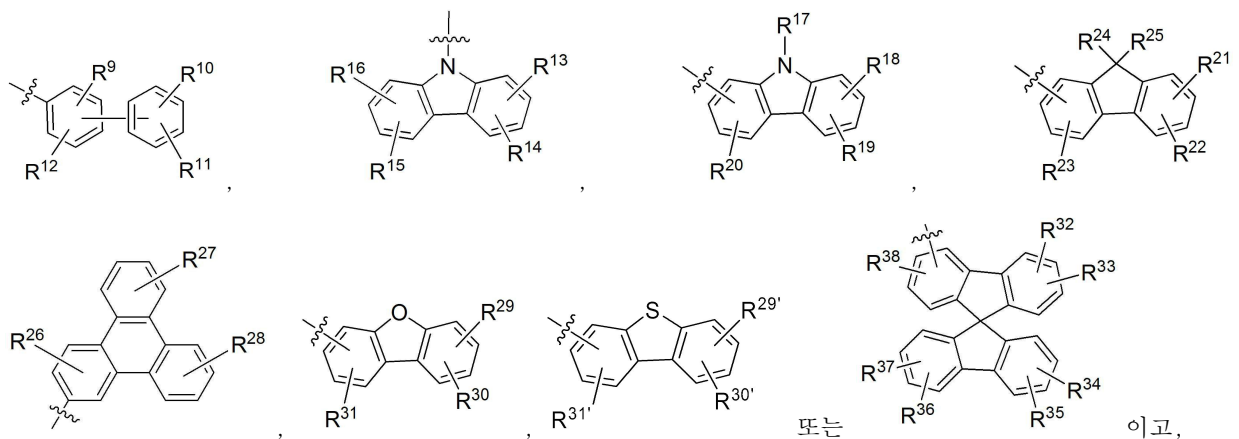
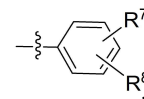
[0034] 또한 바람직하게는, Ar^1 내지 Ar^3 은 서로 같거나 다르고, Ar^1 내지 Ar^3 은 각각 독립적으로





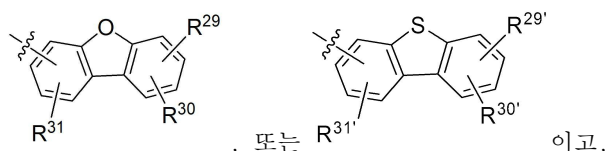
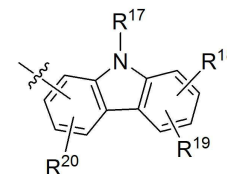
[0035]

보다 바람직하게는 Ar^1 및 Ar^2 는 서로 같거나 다르고, Ar^1 및 Ar^2 은 각각 독립적으로



[0036]

보다 바람직하게는 Ar^3 은 서로 같거나 다르고, Ar^3 은 각각 독립적으로,



[0037]

R^7 내지 R^{38} 은 및 $R^{29'}$ 내지 $R^{31'}$ 는 서로 같거나 다르고, R^7 내지 R^{38} 및 $R^{29'}$ 내지 $R^{31'}$ 는 각각 독립적으로 수소원자, 중수소원자, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 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.

[0038]

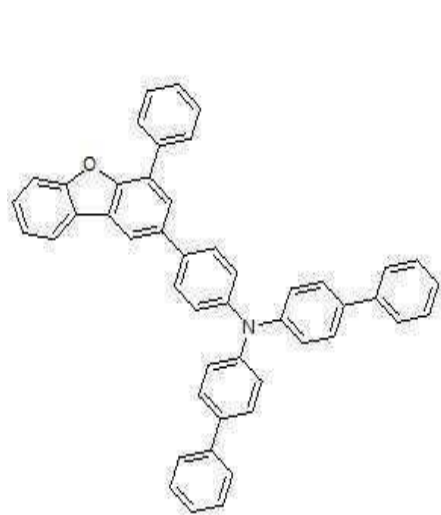
바람직하게는 R^7 내지 R^{16} , R^{18} 내지 R^{38} , 및 $R^{29'}$ 내지 $R^{31'}$ 는 서로 같거나 다르고 R^7 내지 R^{16} , R^{18} 내지 R^{38} , 및 $R^{29'}$ 내지 $R^{31'}$ 는 각각 독립적으로 수소원자, 중수소원자, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴기이고,

[0039]

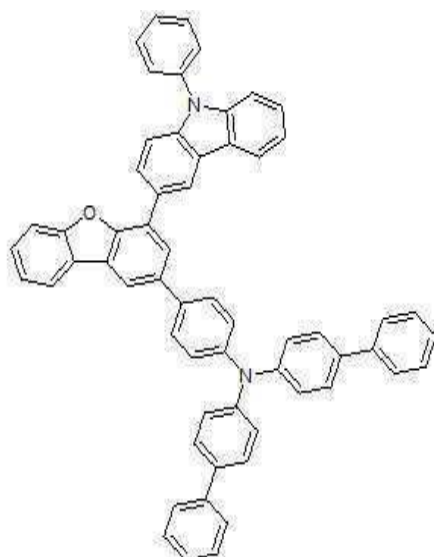
바람직하게는 R^{17} 은 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴기일 수 있다.

[0040]

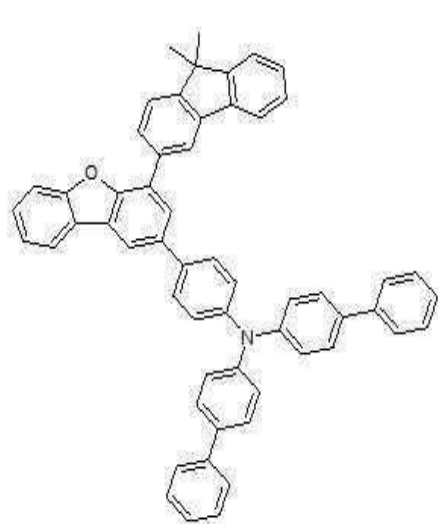
상기 유기전계발광소자용 화합물은 하기 화학식으로 표시되는 화합물 1 내지 159 중에서 선택된 어느 하나, 바람직하게는 하기 화학식으로 표시되는 화합물 2, 6, 38, 39 및 63 내지 159 중 선택된 어느 하나일 수 있으나 여기에 한정되지 않는다.



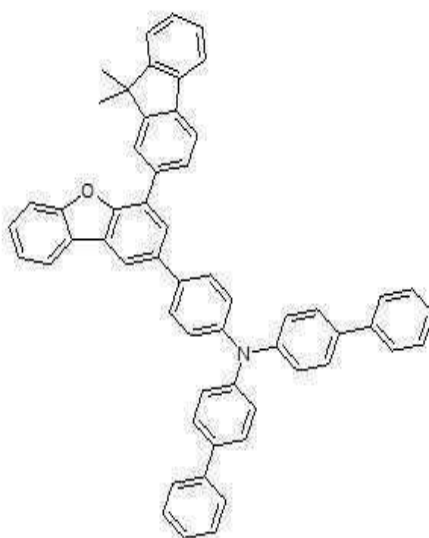
1



2

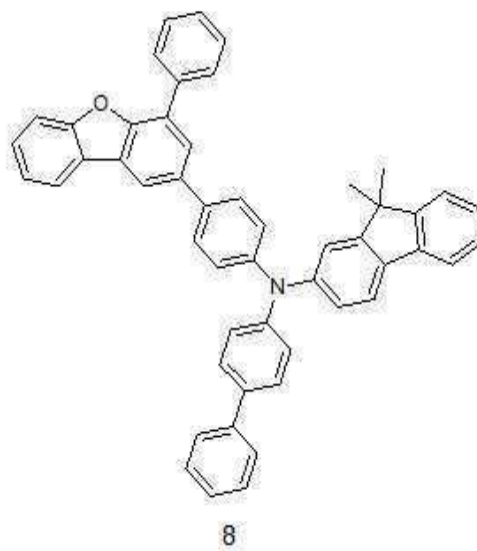
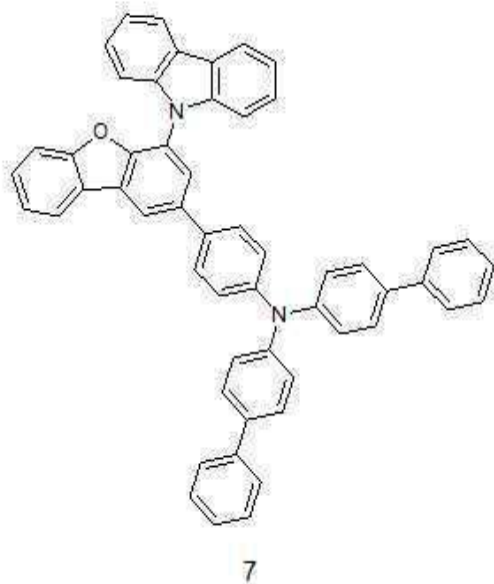
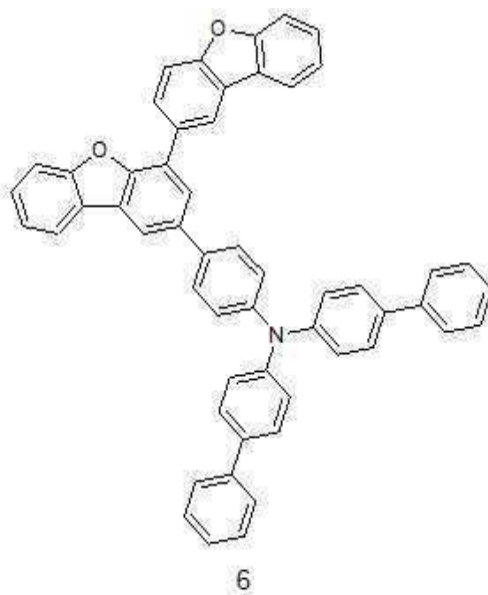
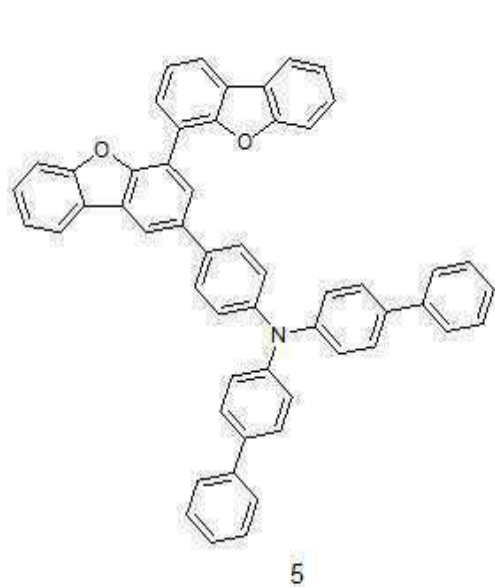


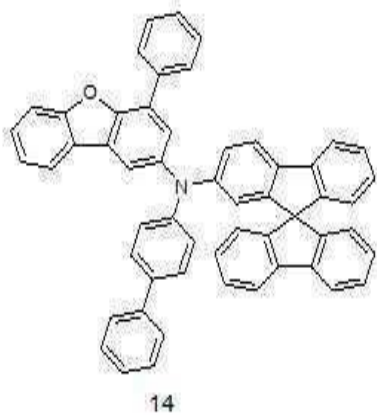
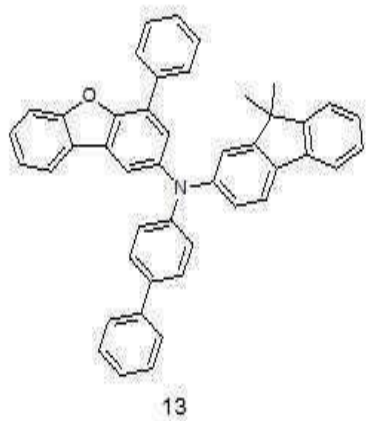
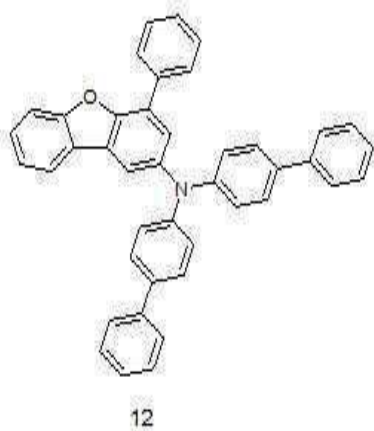
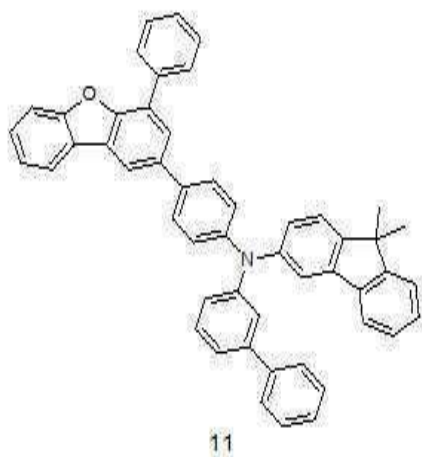
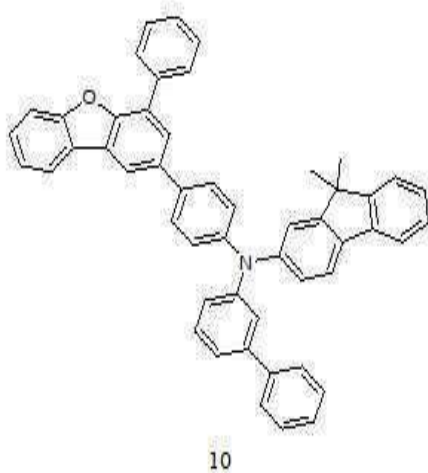
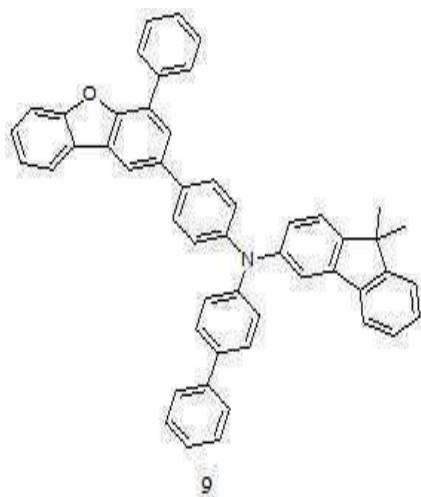
3

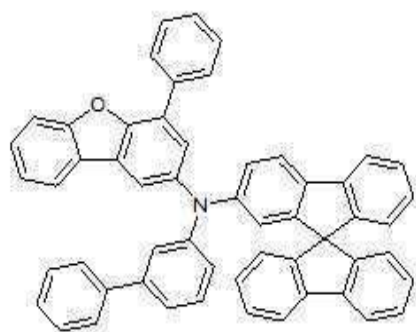


4

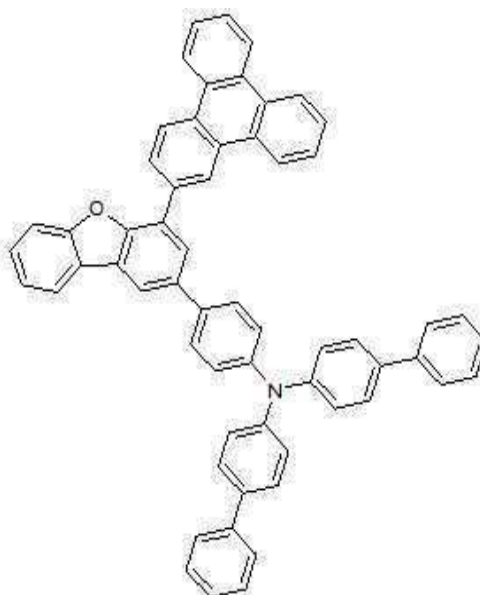
[0041]



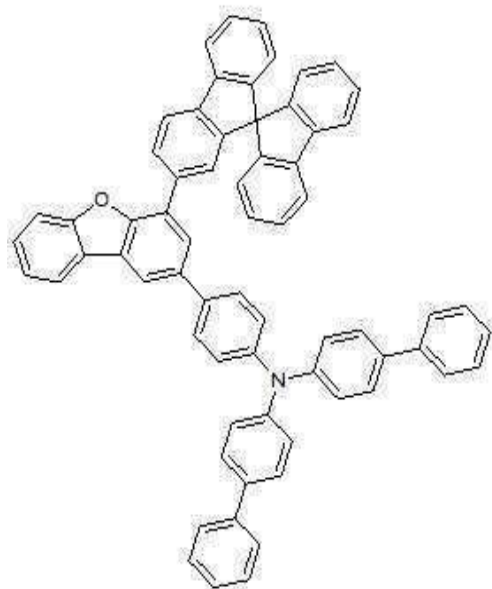




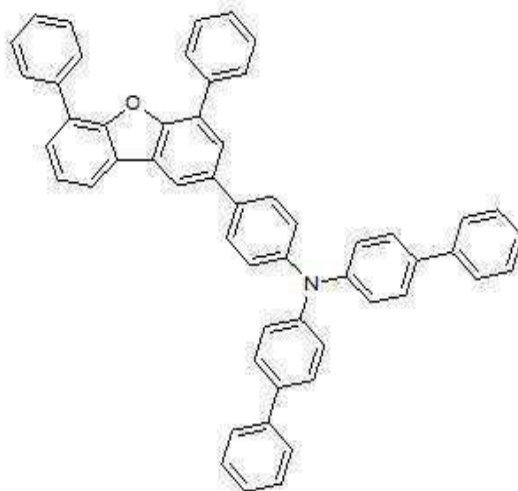
15



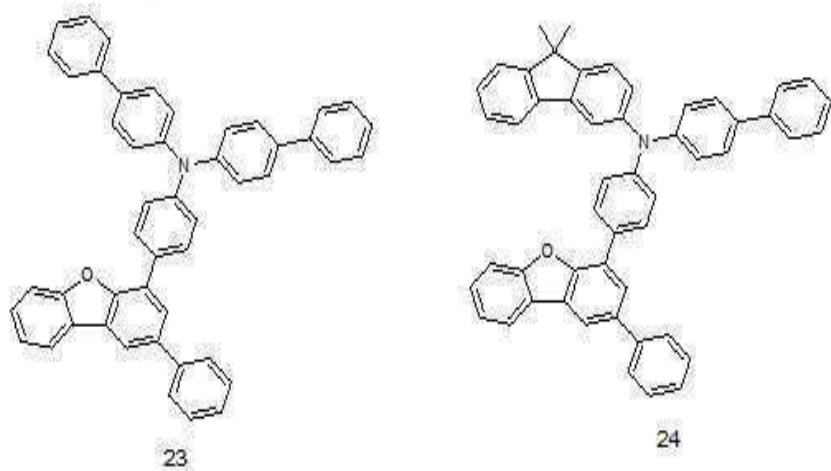
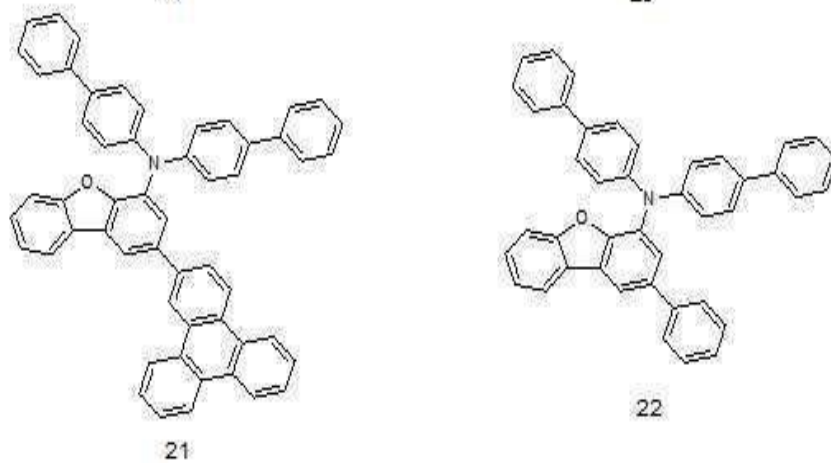
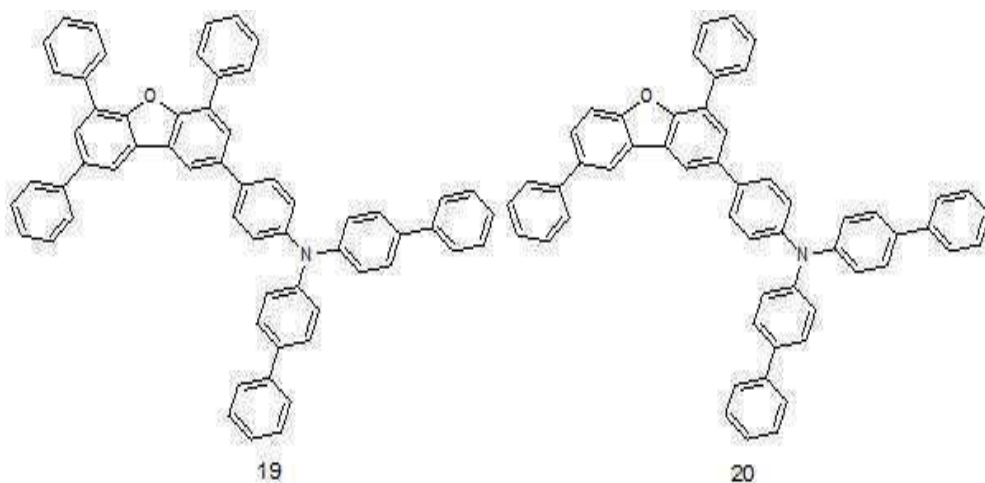
16



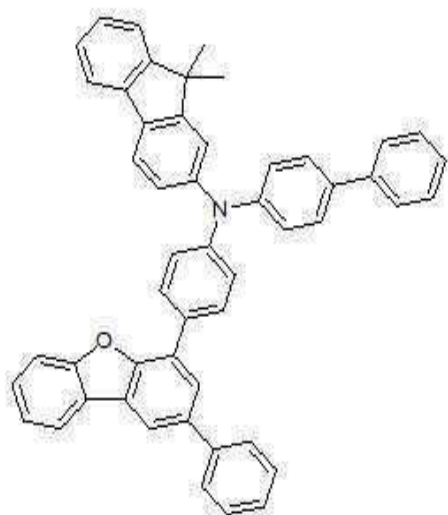
17



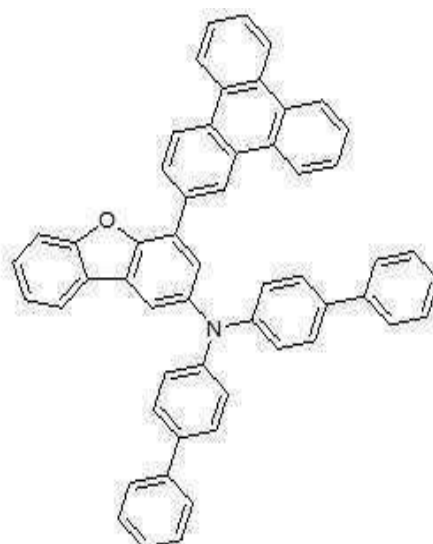
18



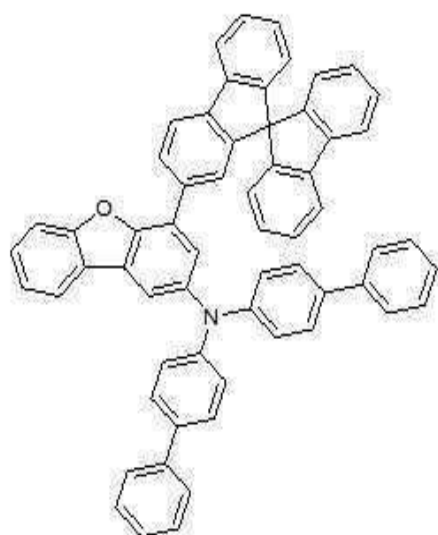
[0042]



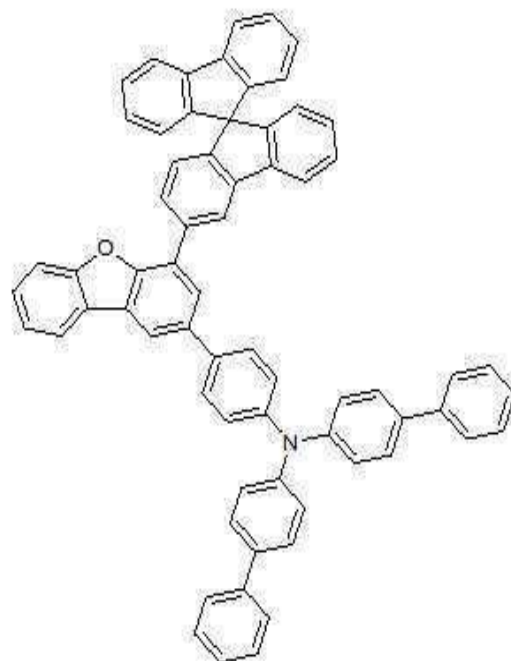
25



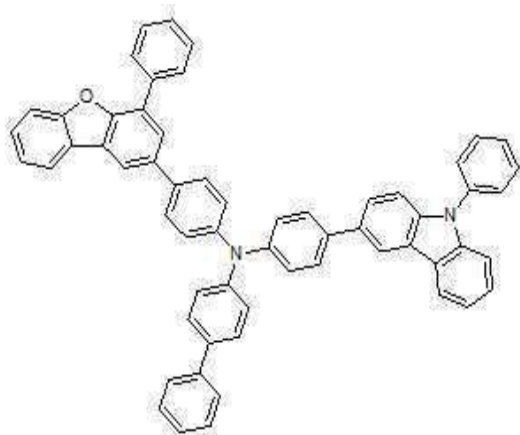
26



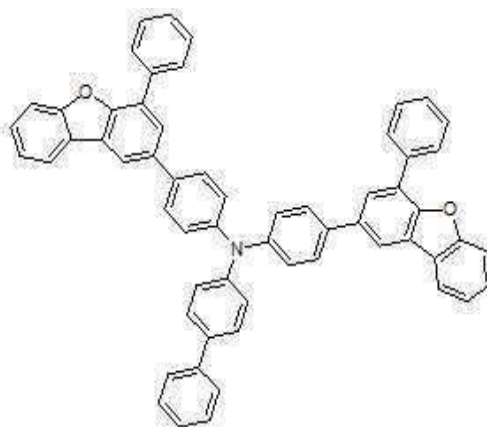
27



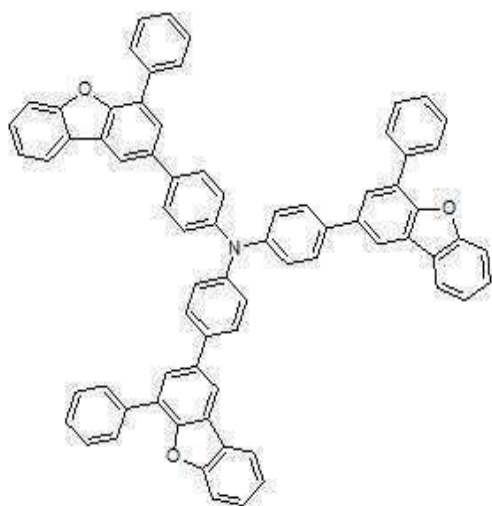
28



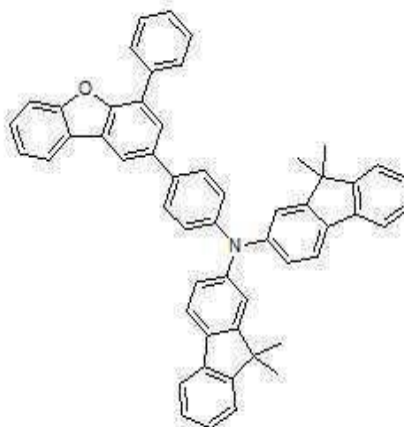
29



30

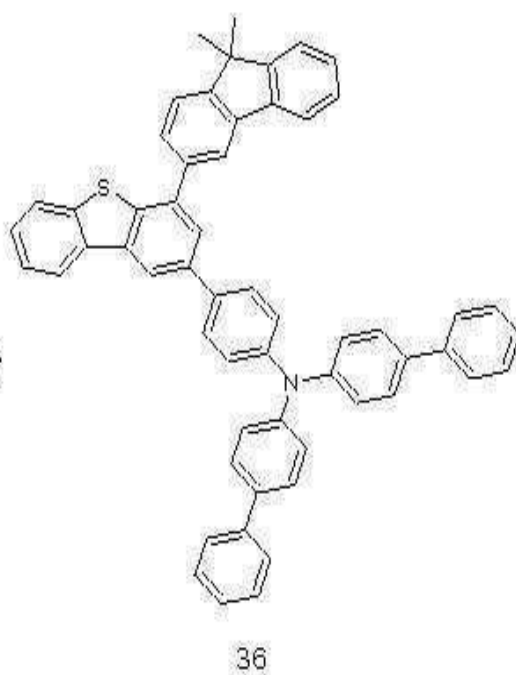
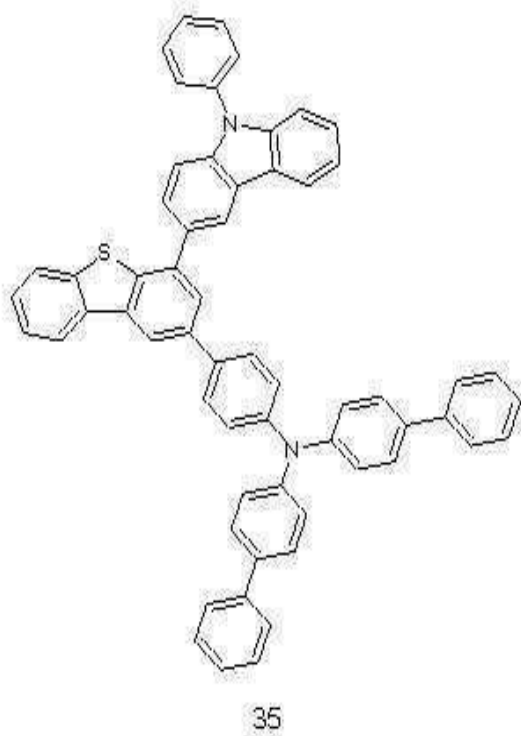
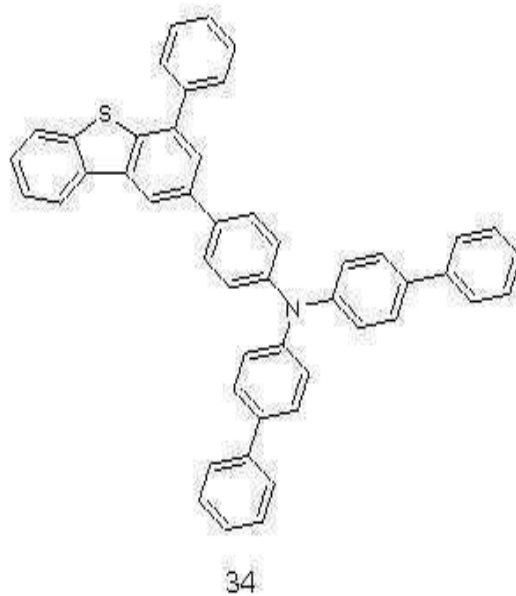
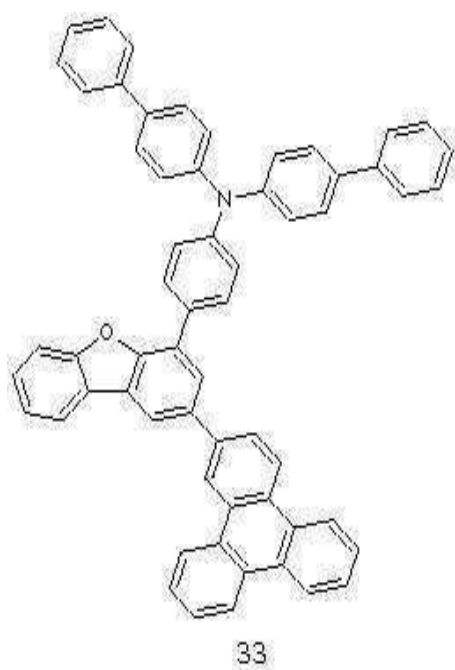


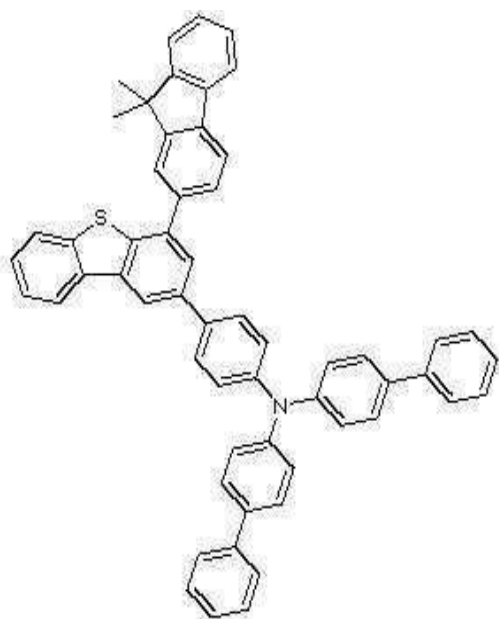
31



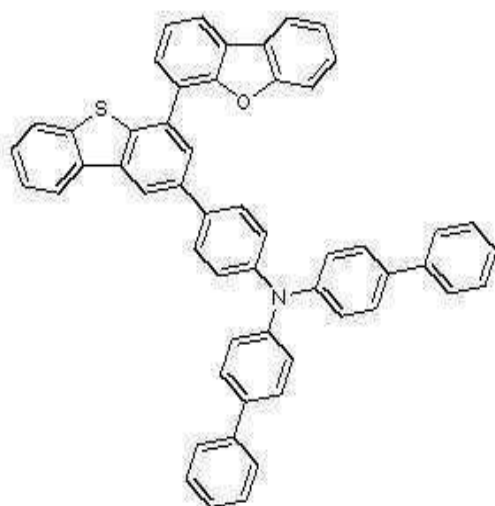
32

[0043]

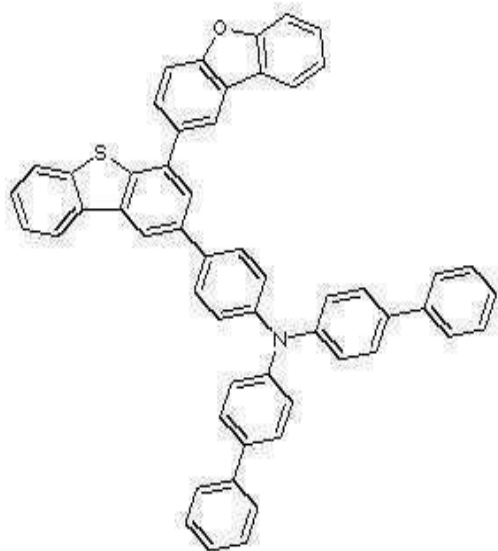




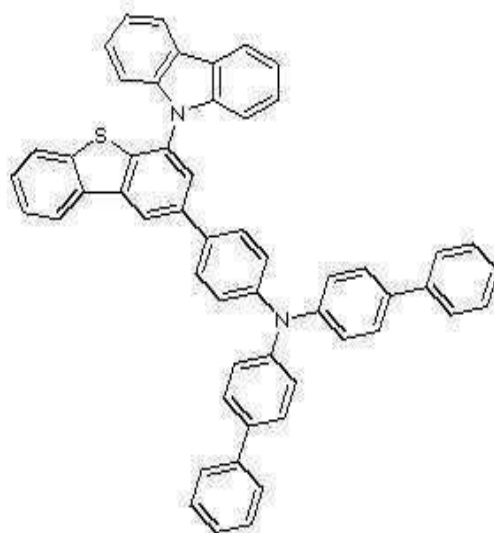
37



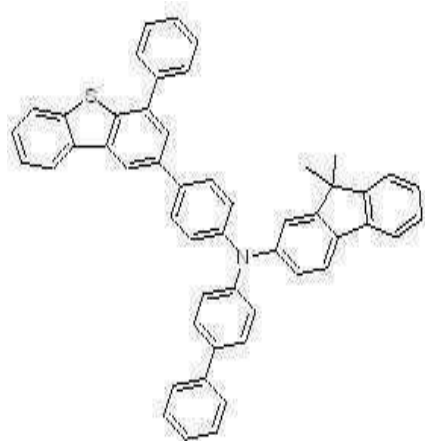
38



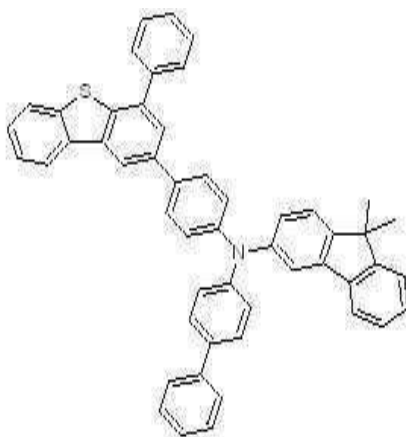
39



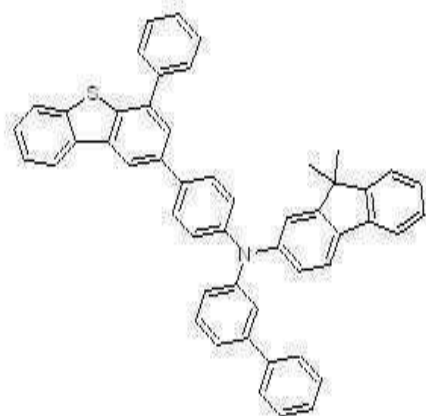
40



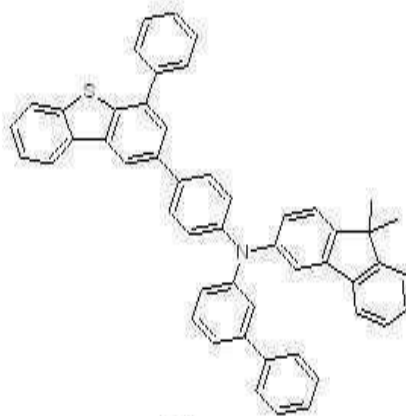
41



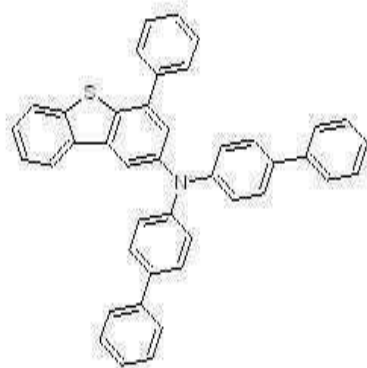
42



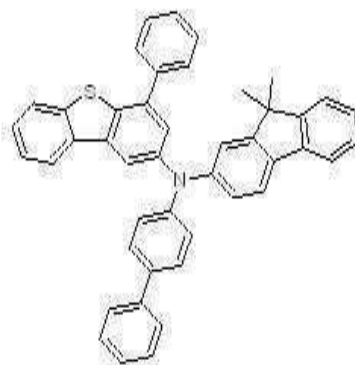
43



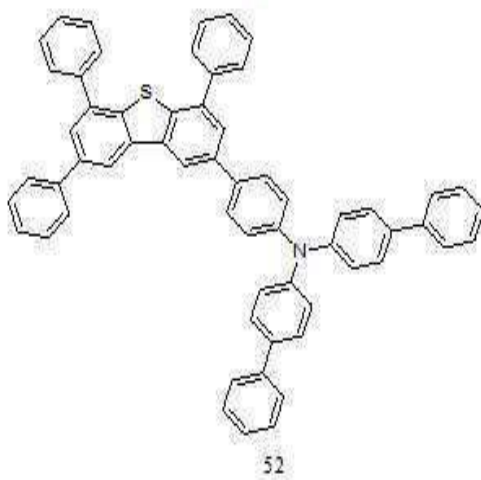
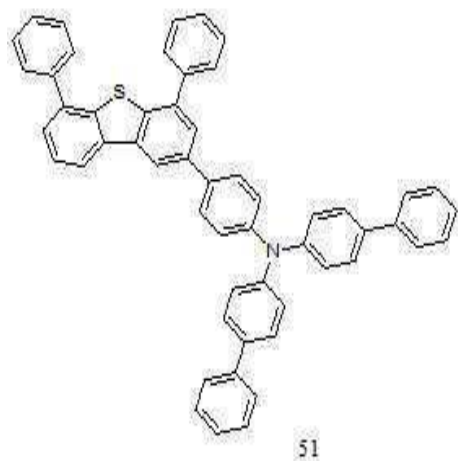
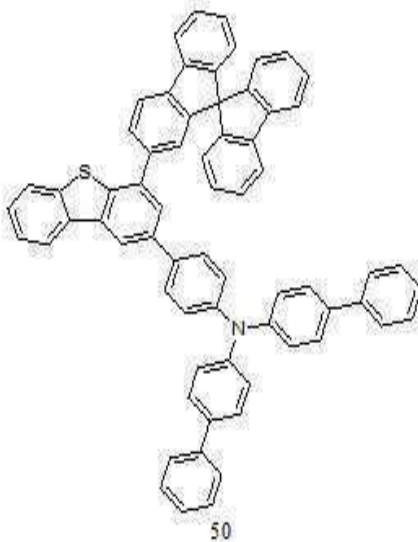
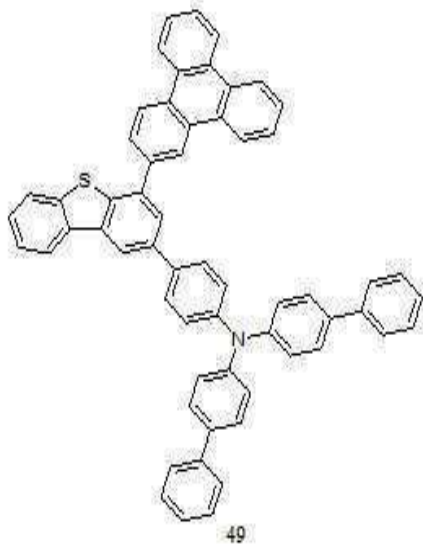
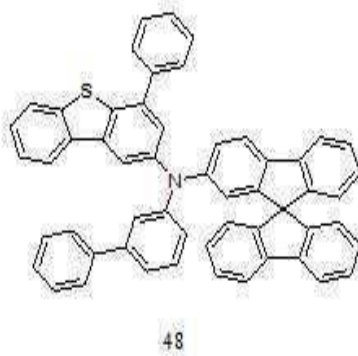
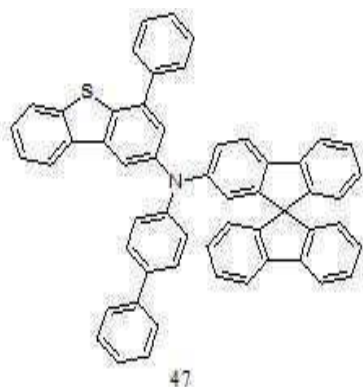
44



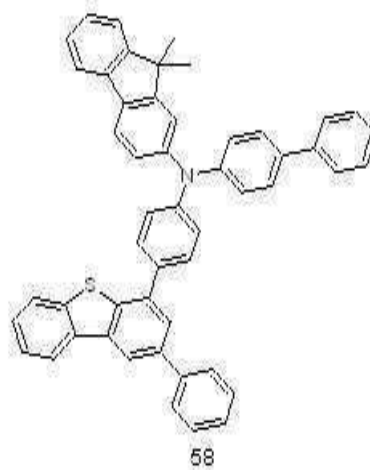
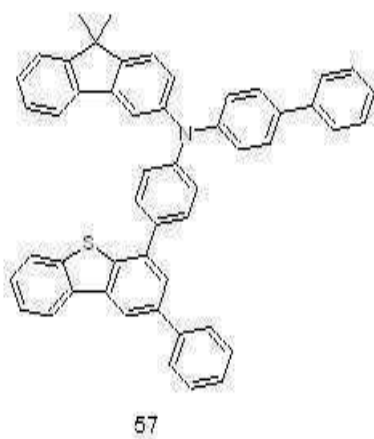
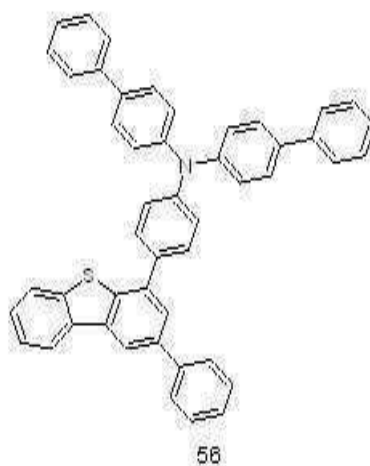
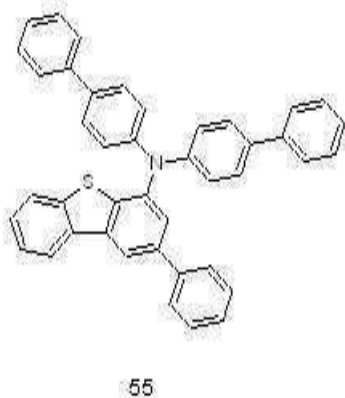
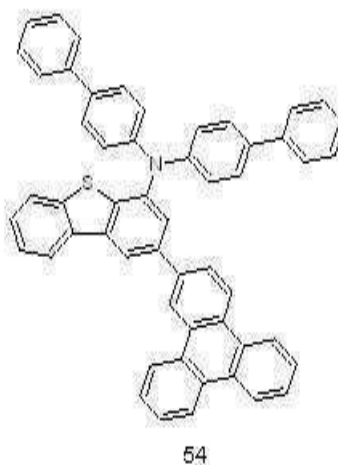
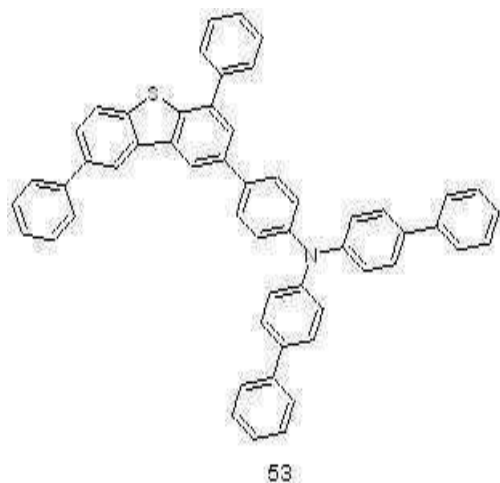
45



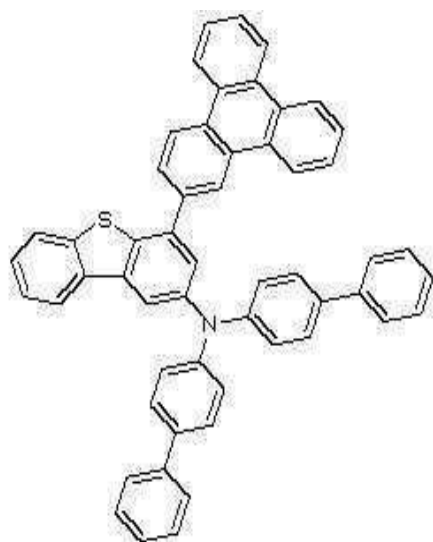
46



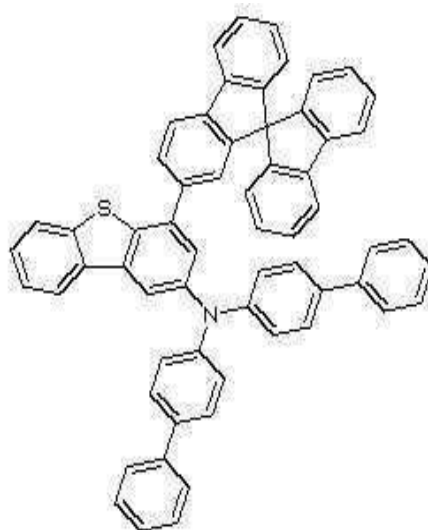
[0044]



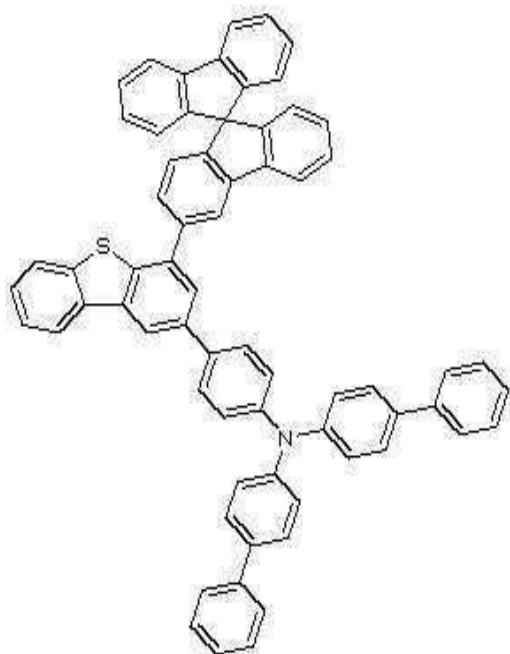
[0045]



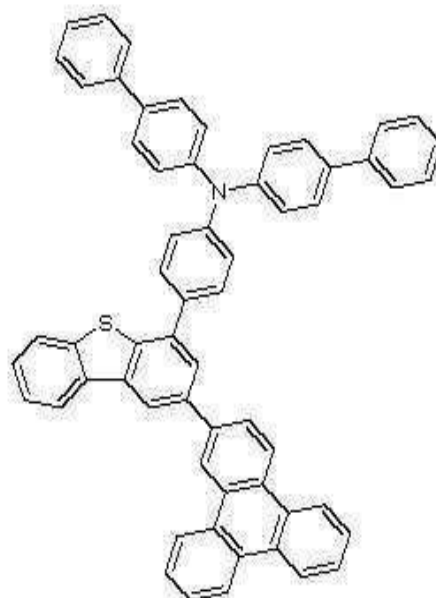
59



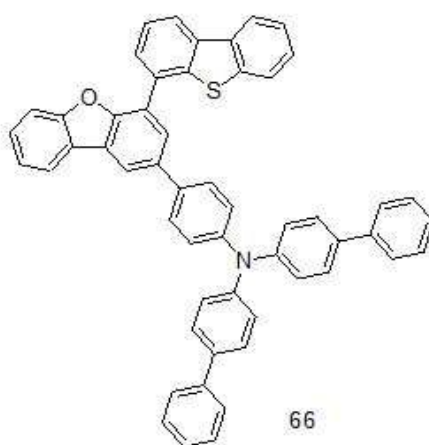
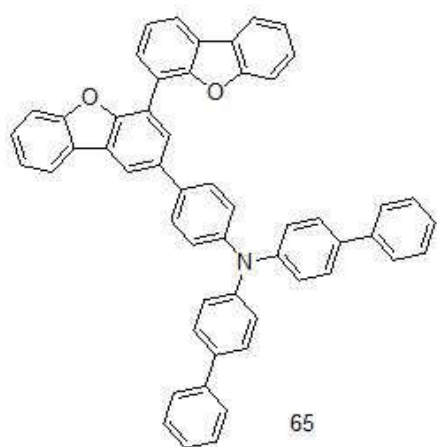
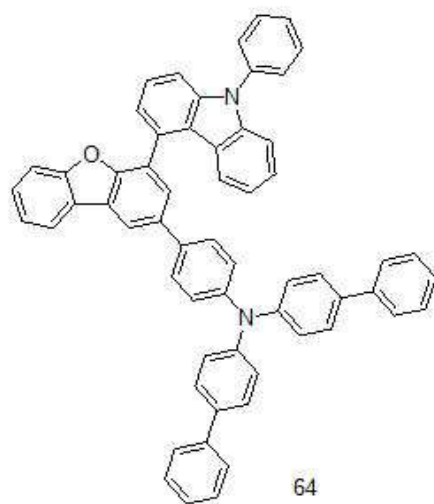
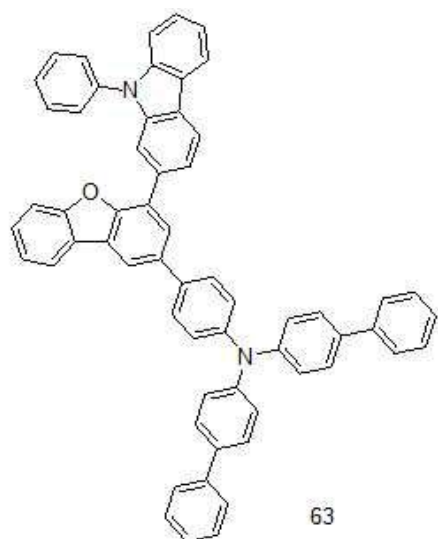
60



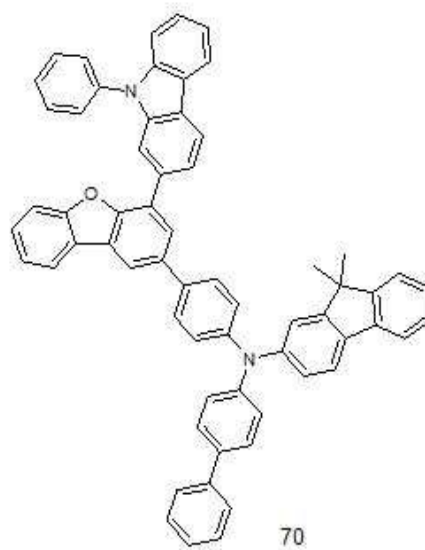
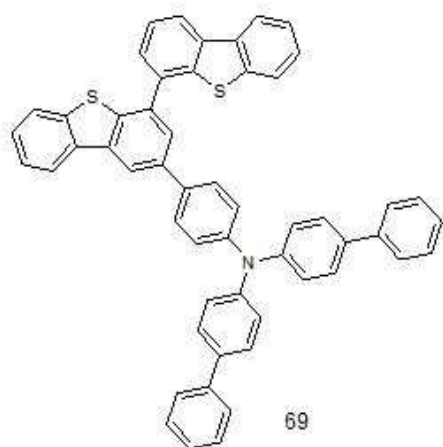
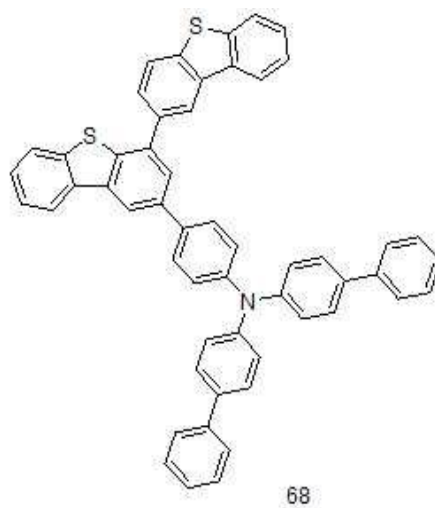
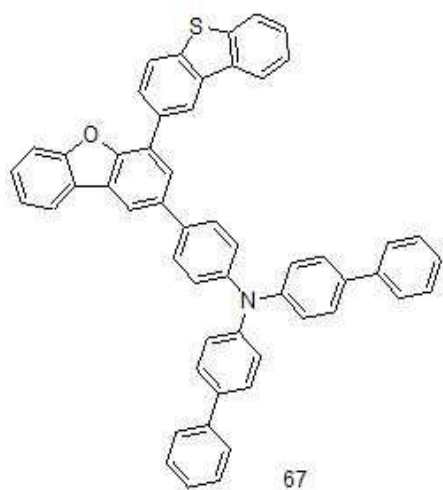
61



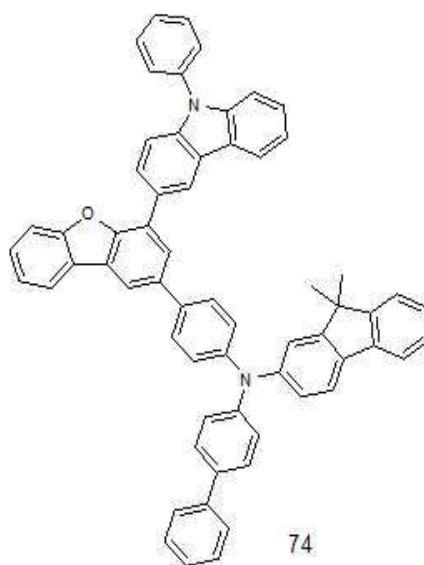
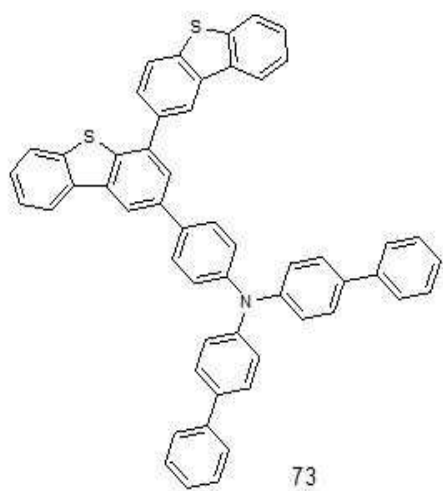
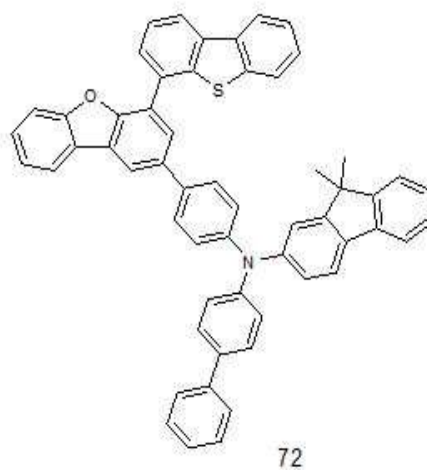
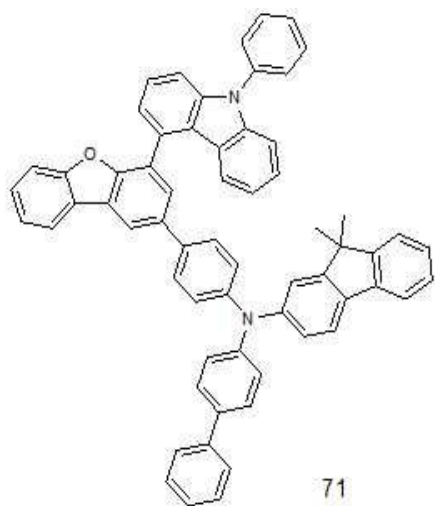
62



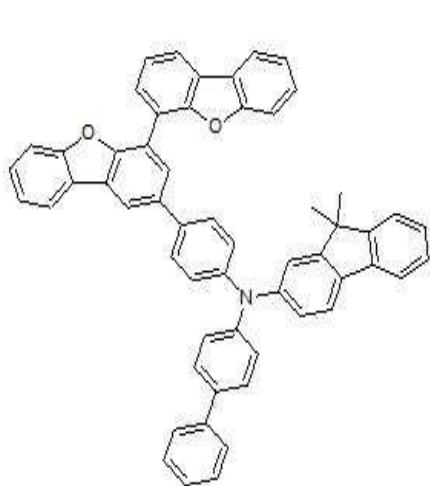
[0046]



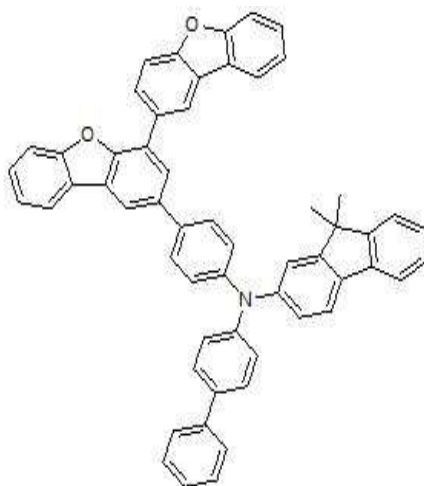
[0047]



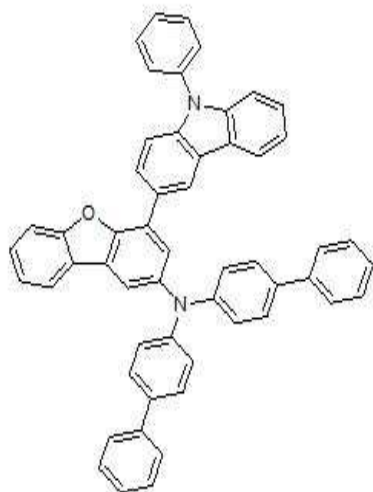
[0048]



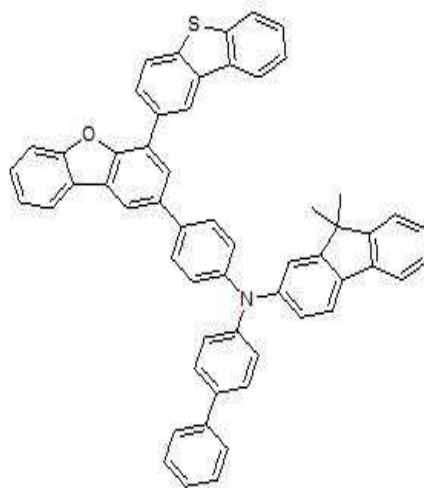
75



76

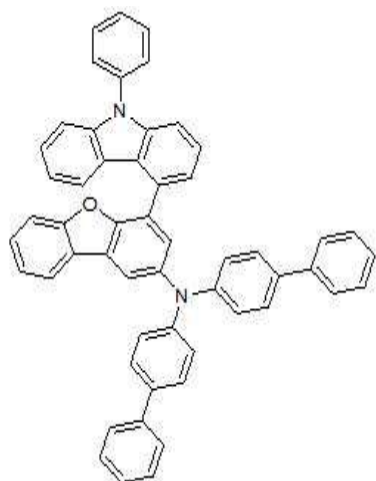


77

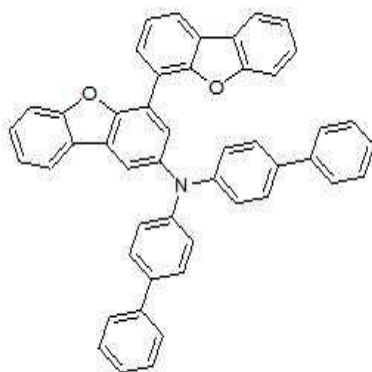


78

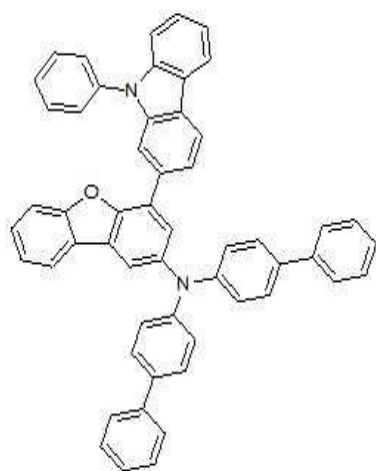
[0049]



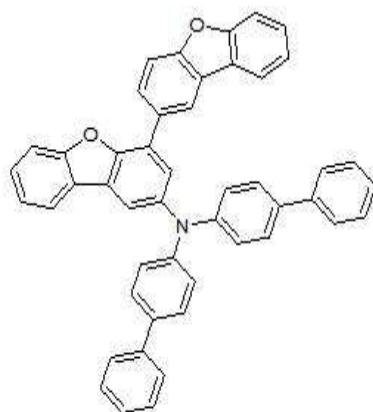
79



80

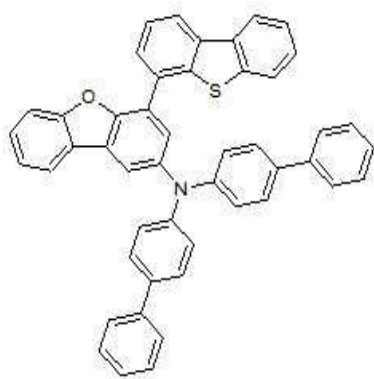


81

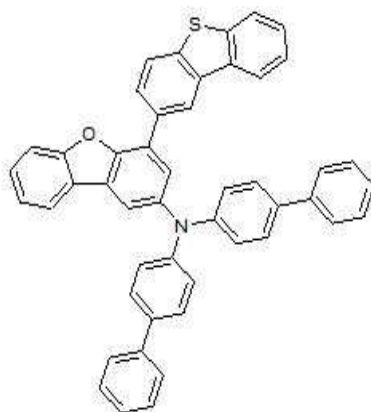


82

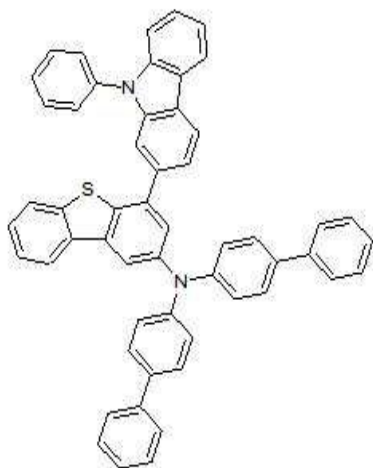
[0050]



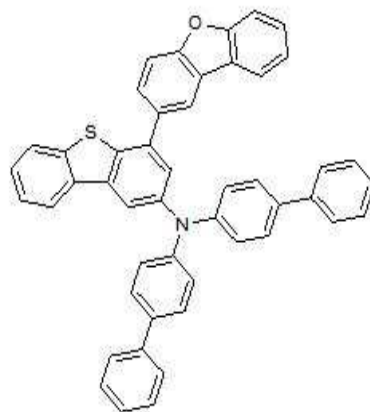
83



84

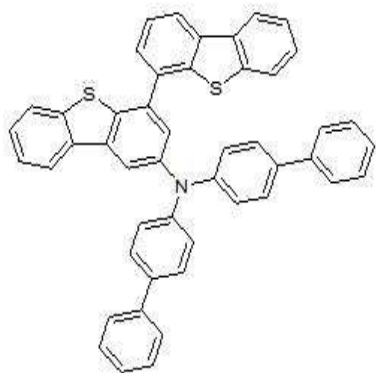


85

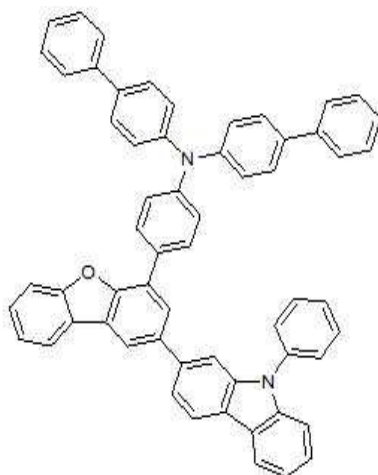


86

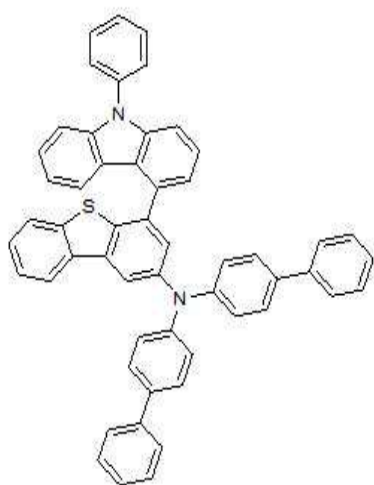
[0051]



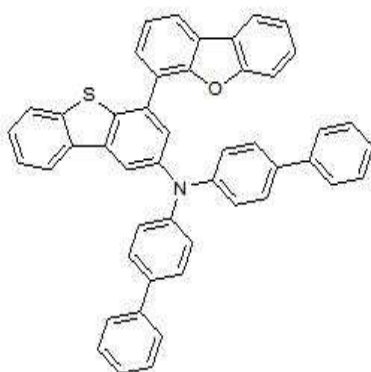
87



88

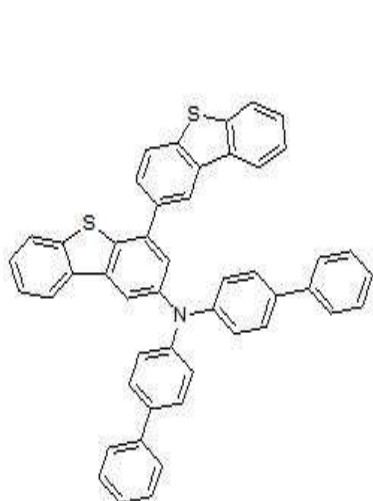


89

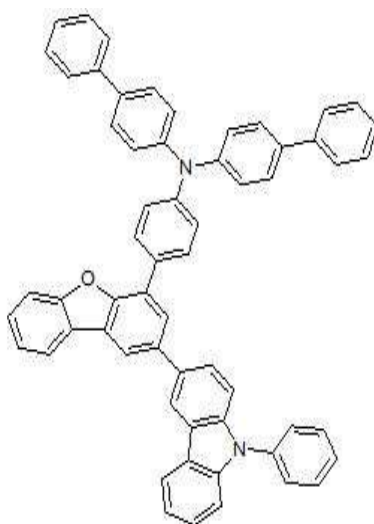


90

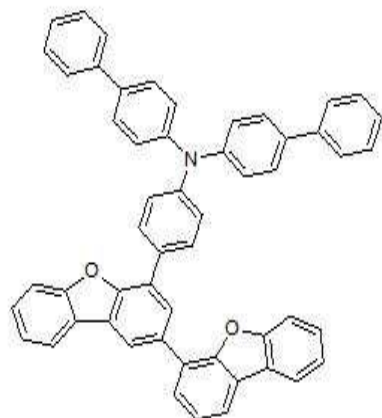
[0052]



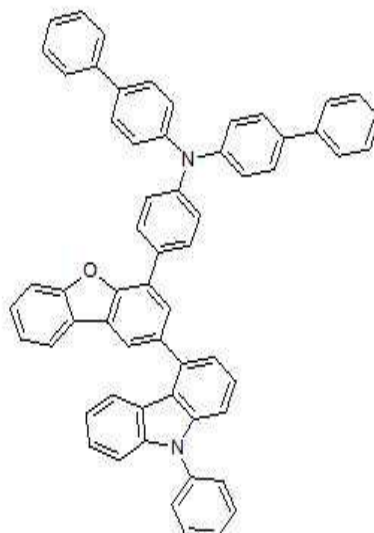
91



92

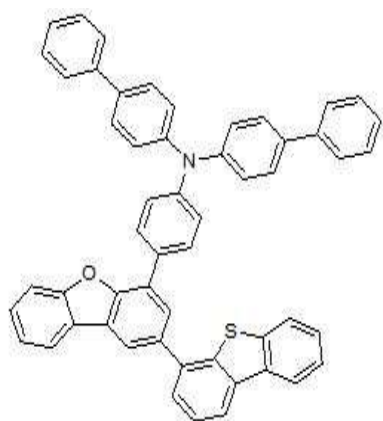


93

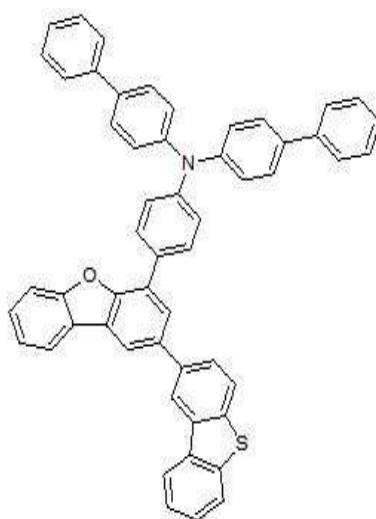


94

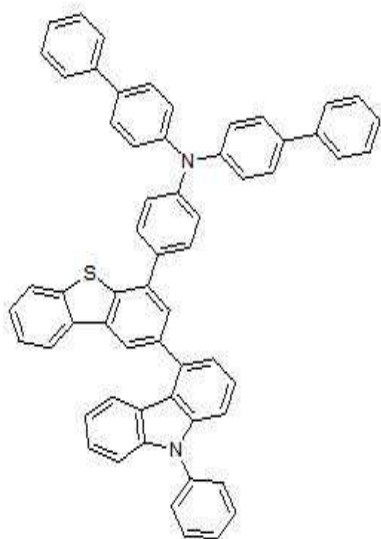
[0053]



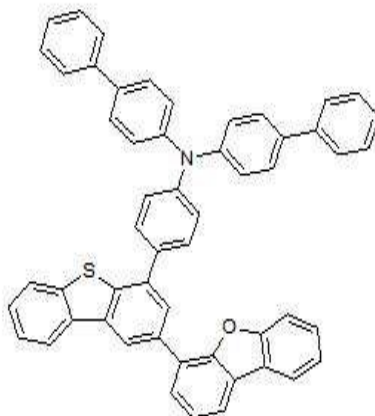
95



96

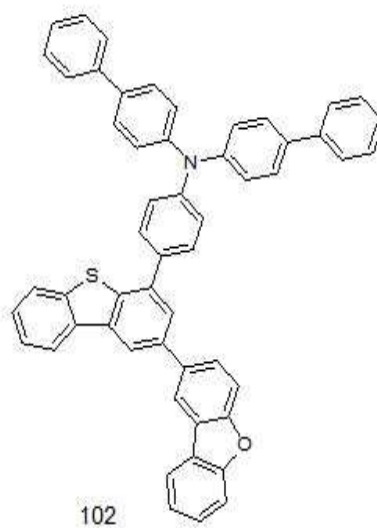
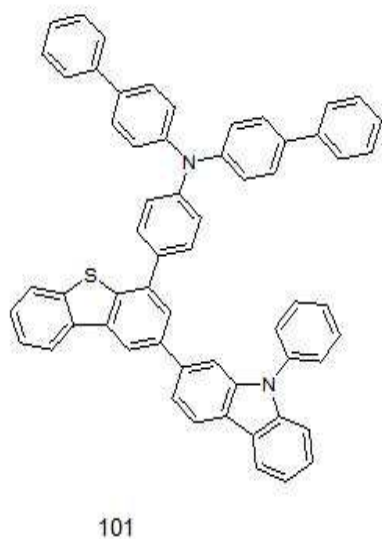
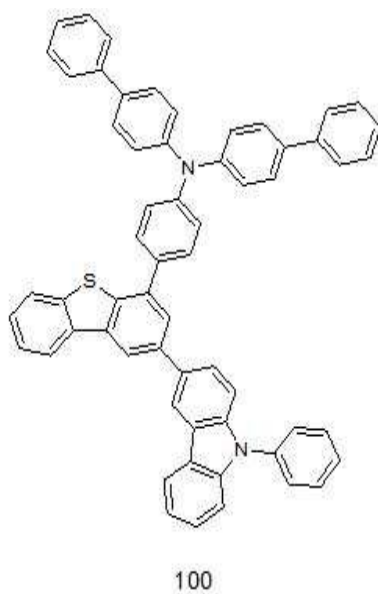
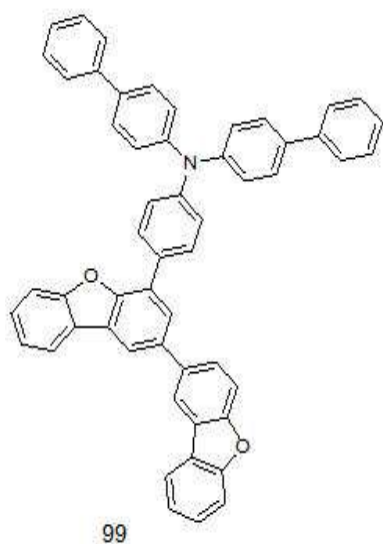


97

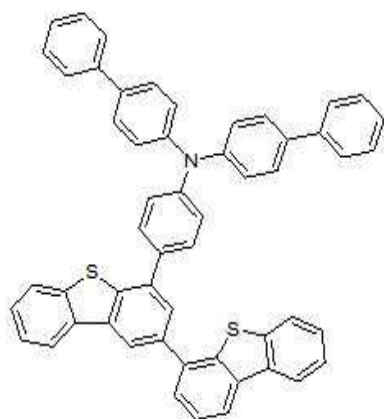


98

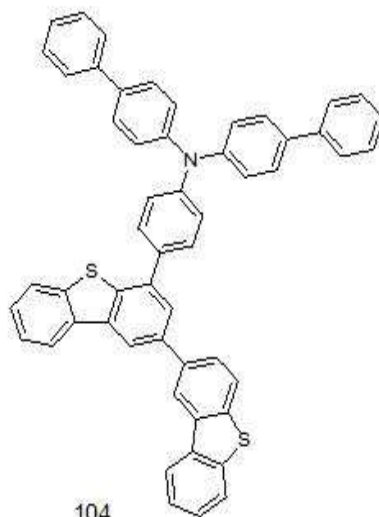
[0054]



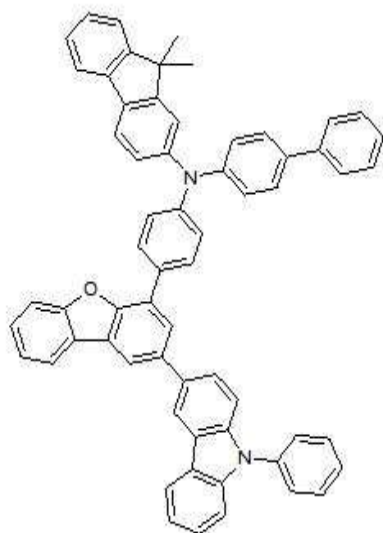
[0055]



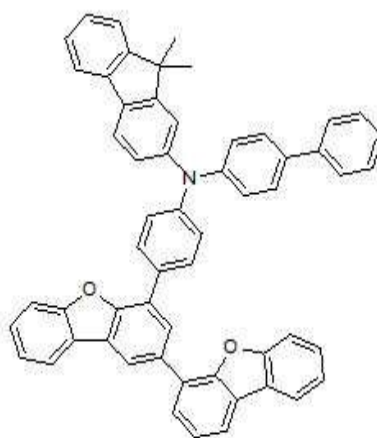
103



104

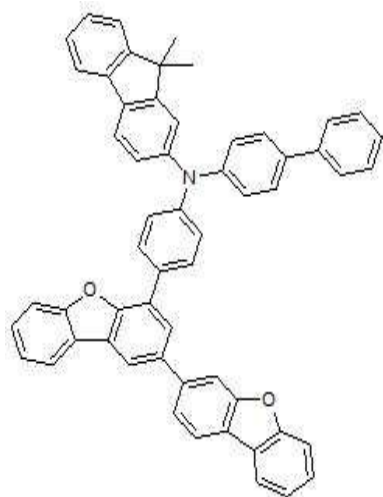


105

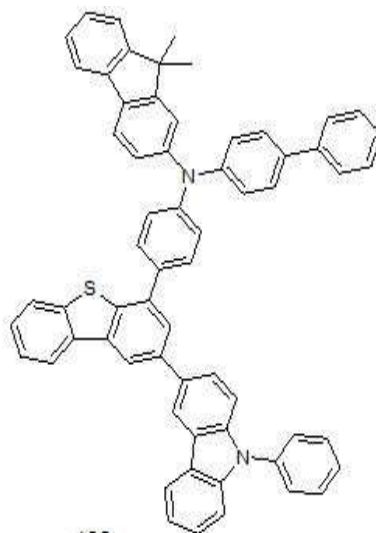


106

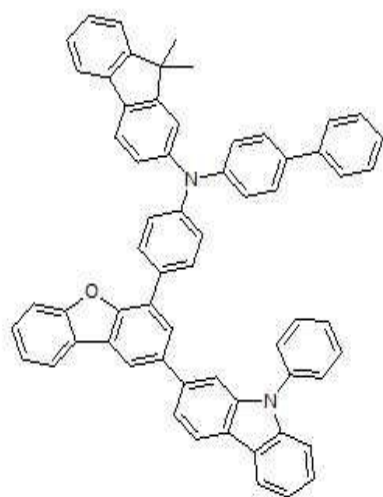
[0056]



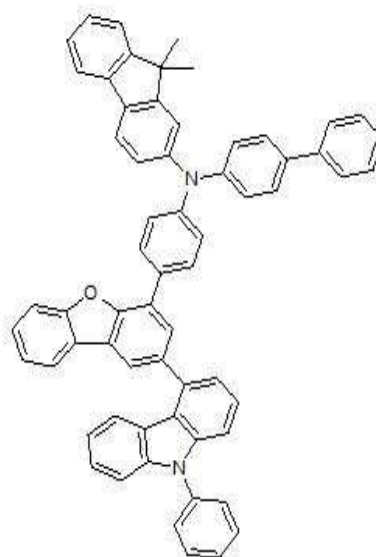
107



108

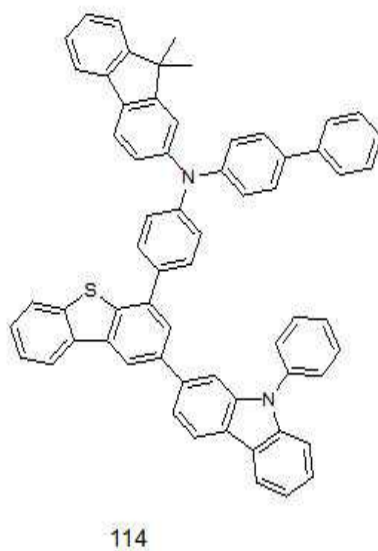
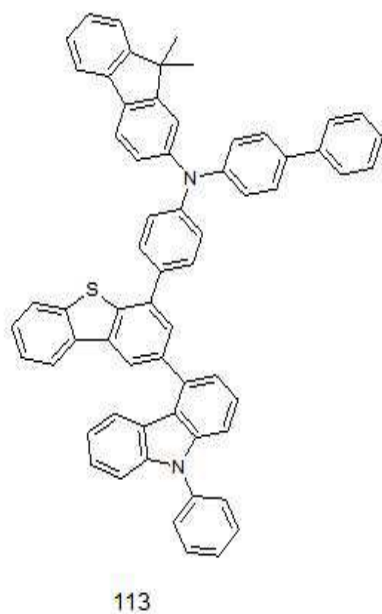
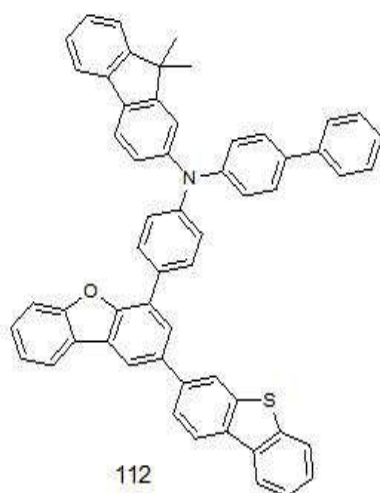
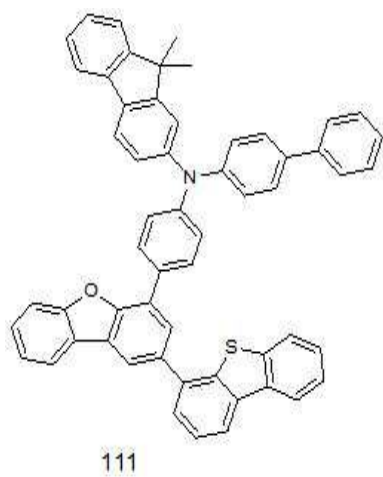


109

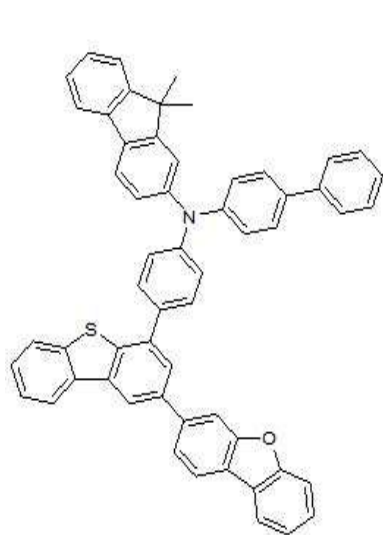


110

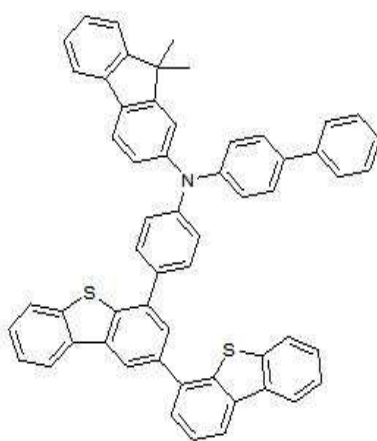
[0057]



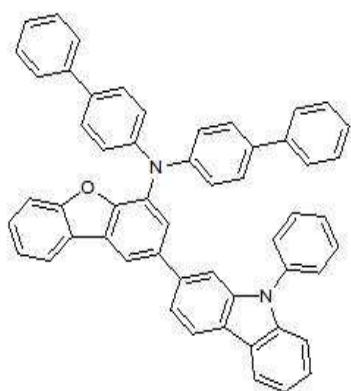
[0058]



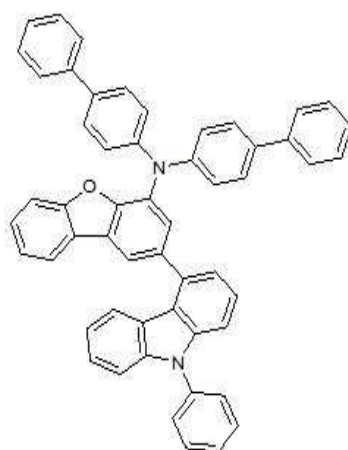
115



116

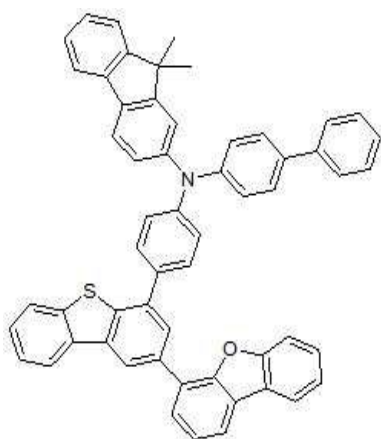


117

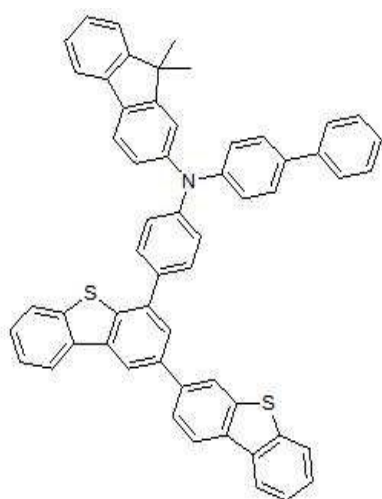


118

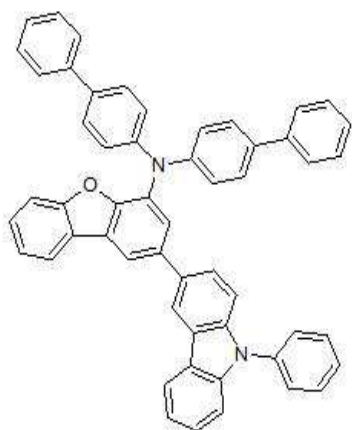
[0059]



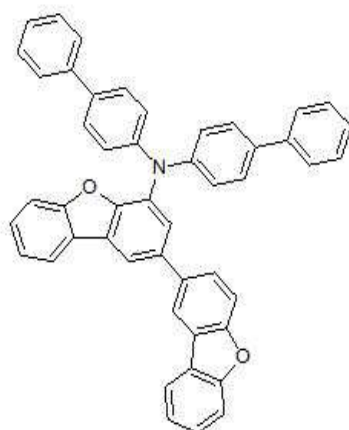
119



120

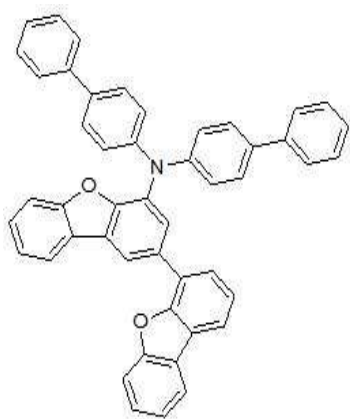


121

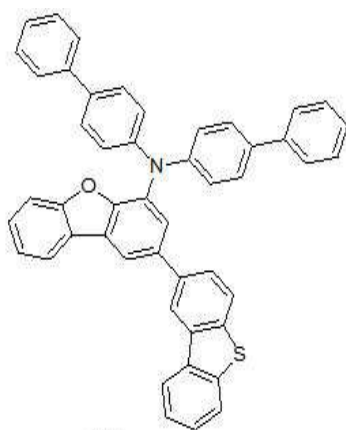


122

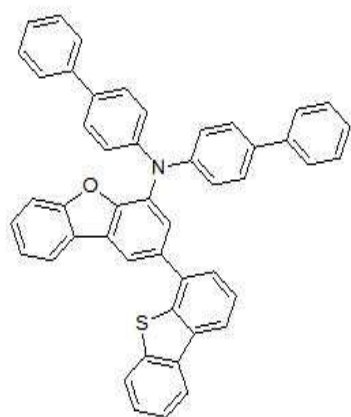
[0060]



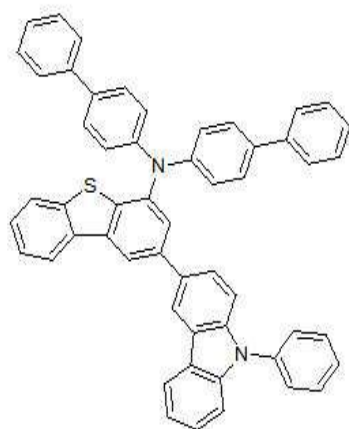
123



124

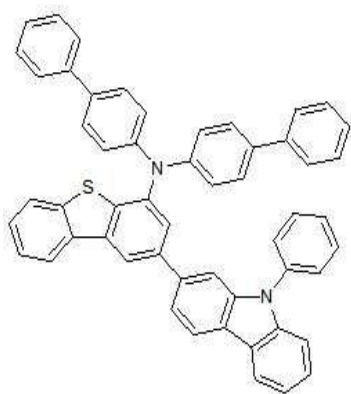


125

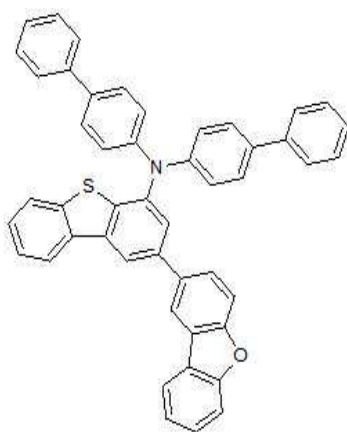


126

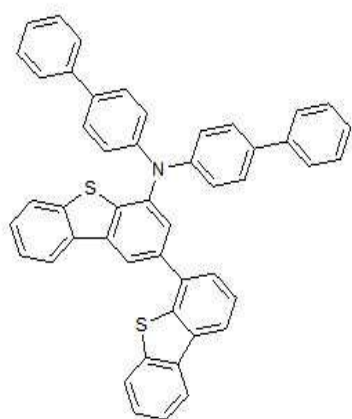
[0061]



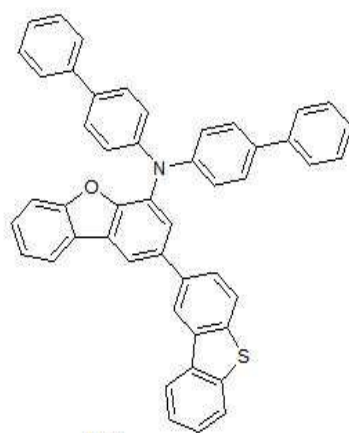
127



128

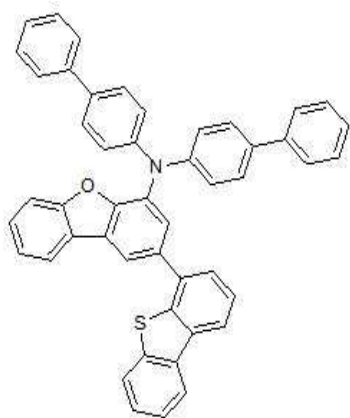


129

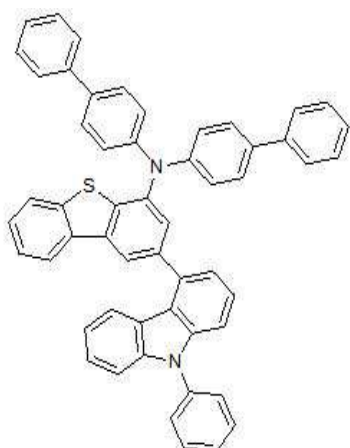


130

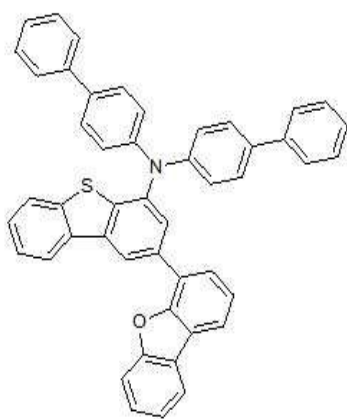
[0062]



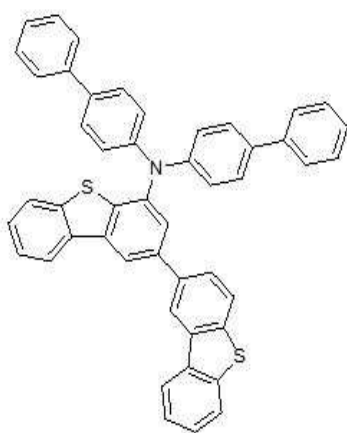
131



132

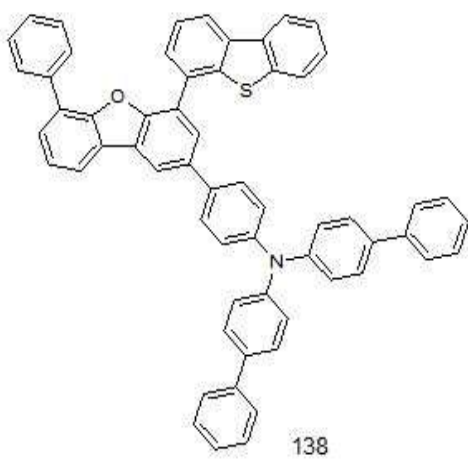
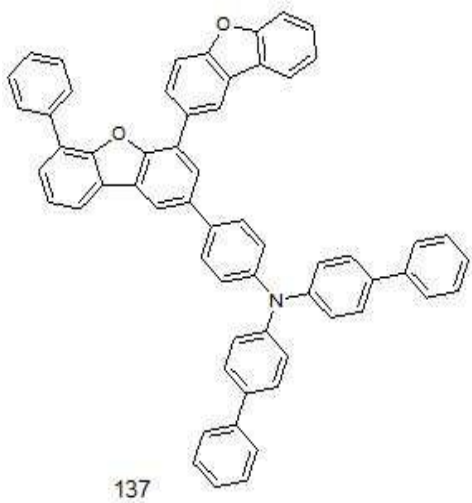
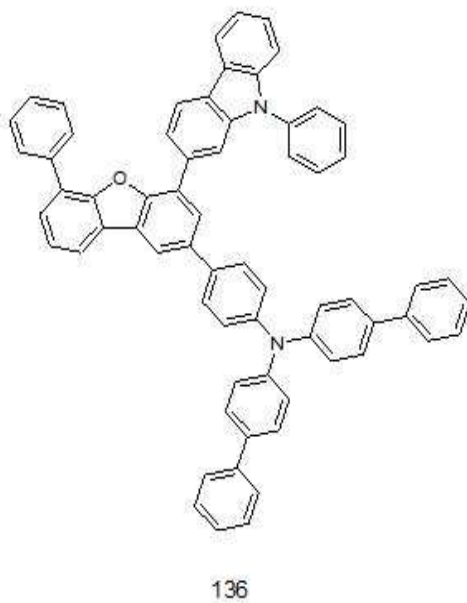
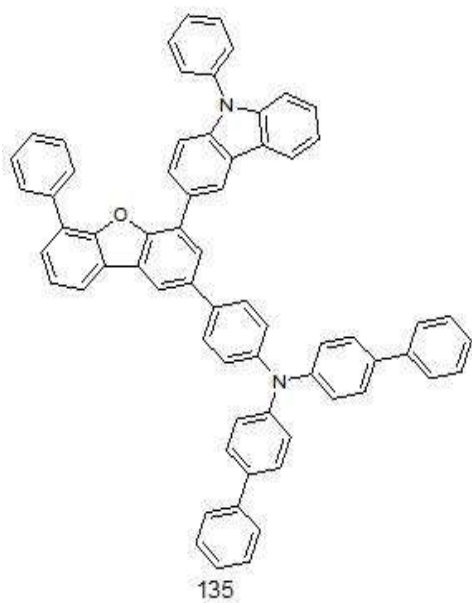


133

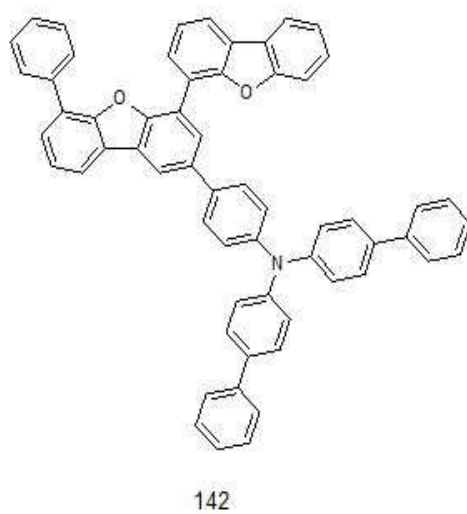
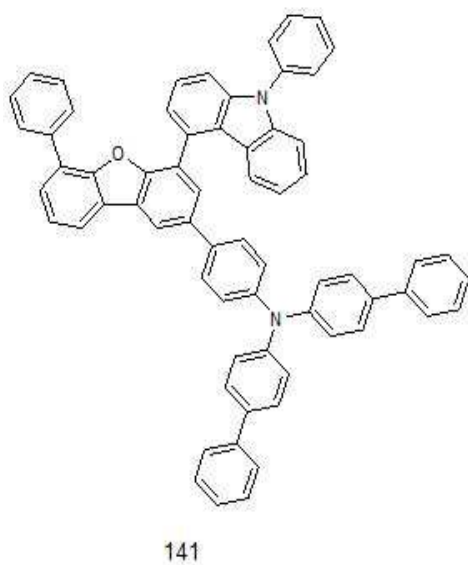
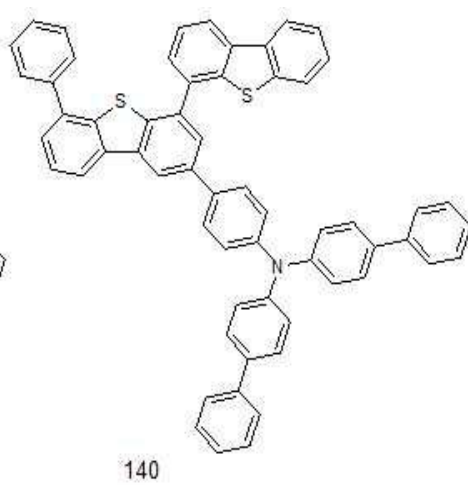
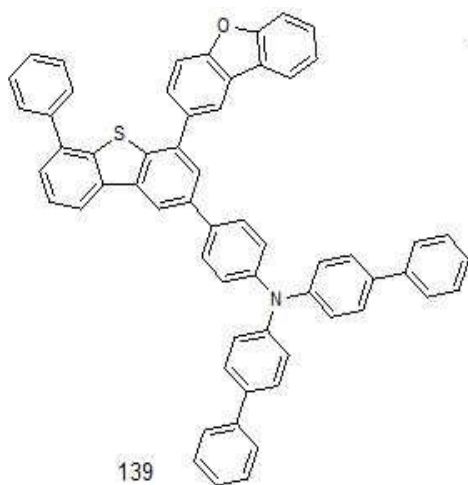


134

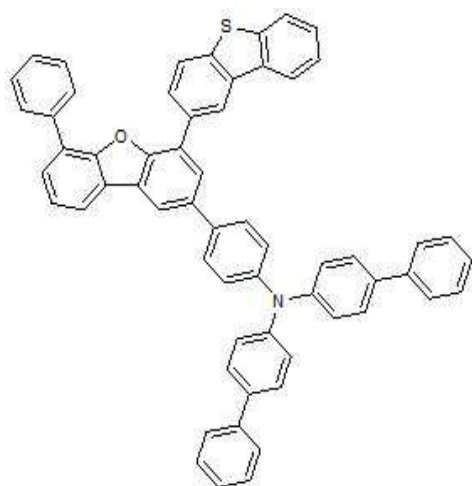
[0063]



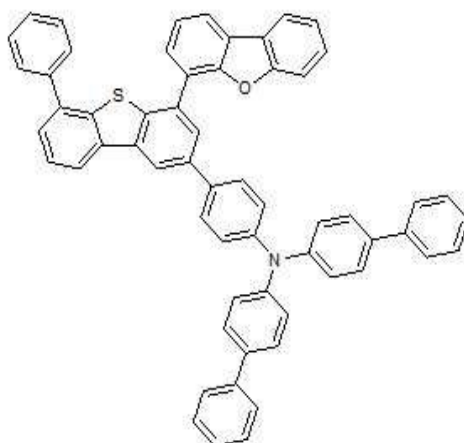
[0064]



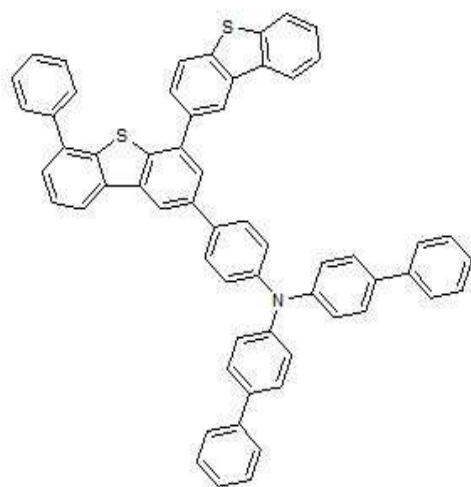
[0065]



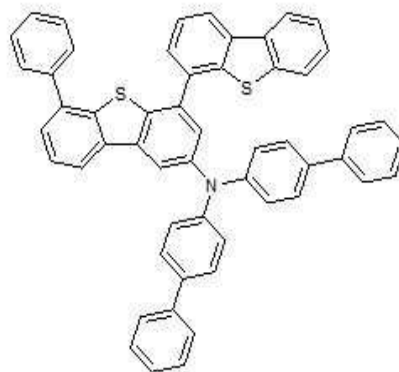
143



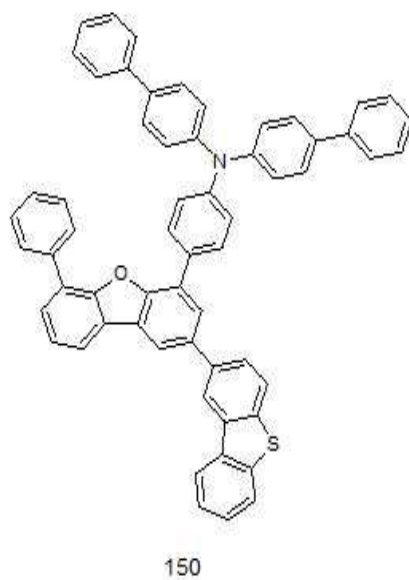
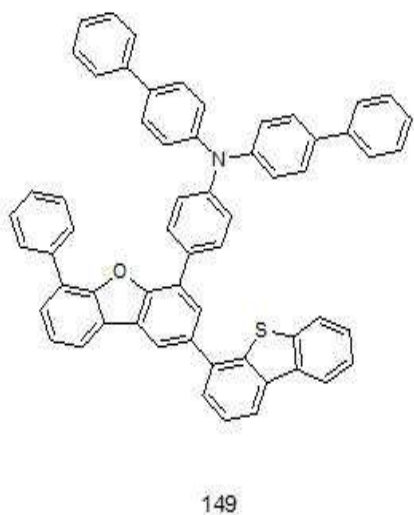
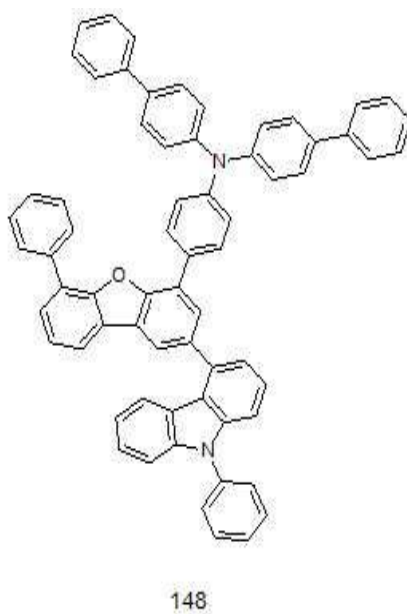
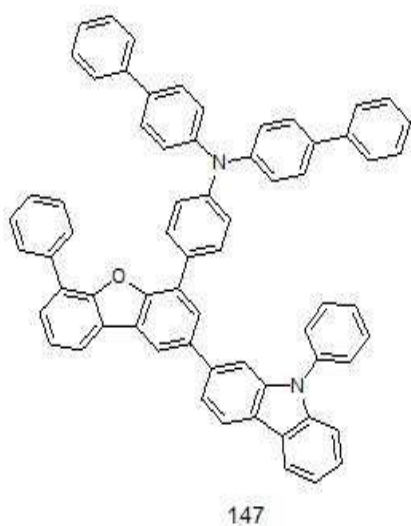
144



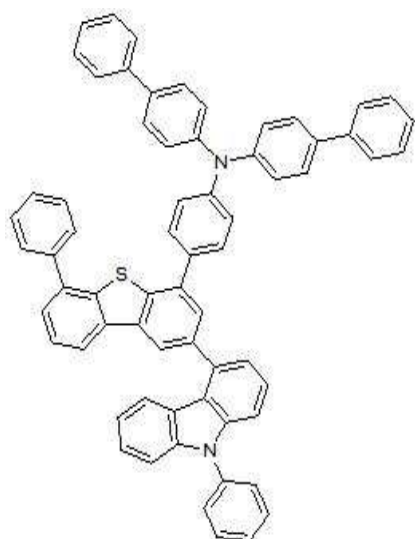
145



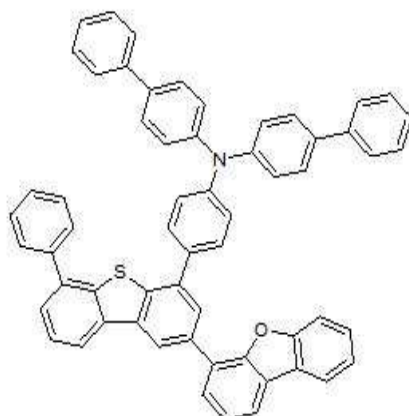
146



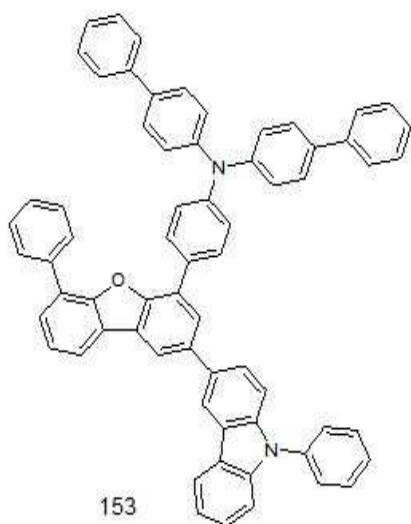
[0066]



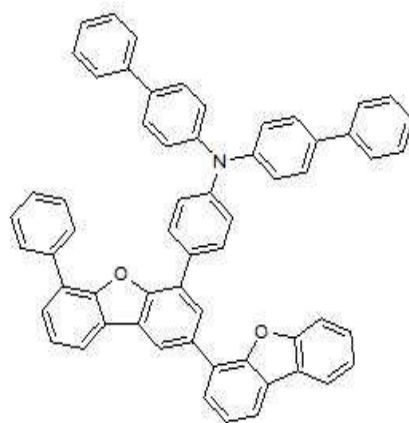
151



152

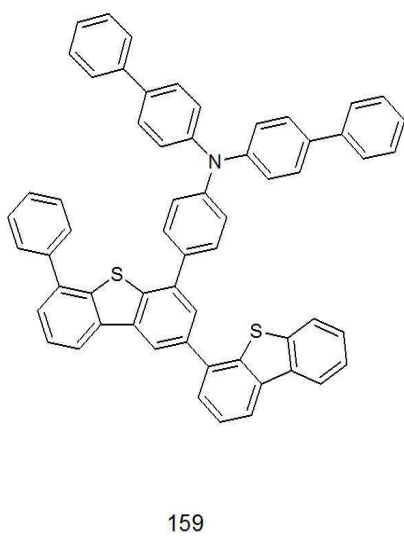
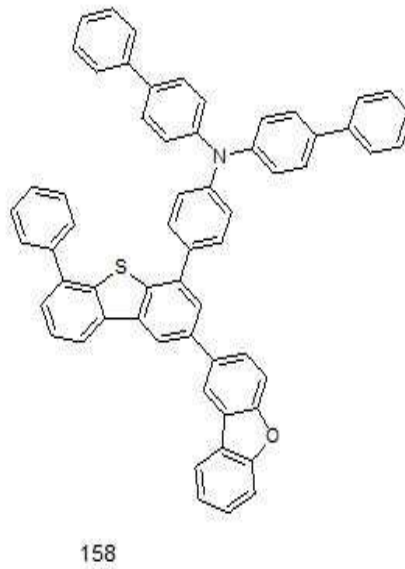
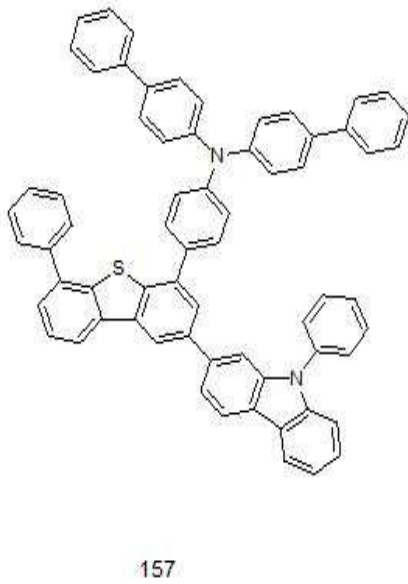
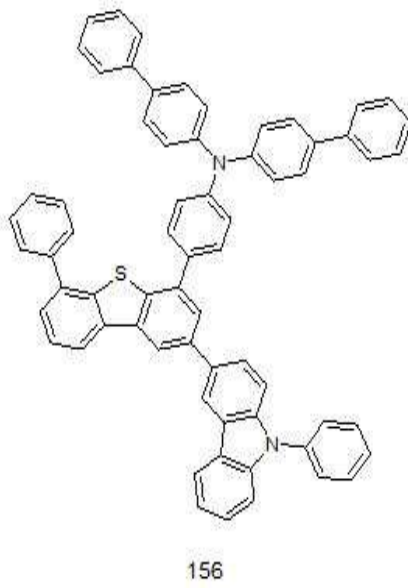
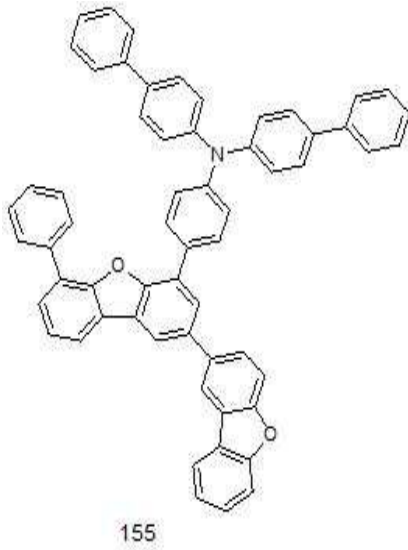


153



154

[0067]



[0068]

[0069]

[0070]

본 발명의 다른 측면에 따르면, 상기 유기전계발광소자용 화합물을 포함하는 유기전계발광소자가 제공될 수 있

다.

- [0071] 본 발명의 또 다른 측면에 따르면, 제1전극, 제2전극 및 상기 제1전극과 제2전극 사이에 단수 또는 복수의 유기물층을 포함하는 유기전계발광소자에 있어서, 상기 단수 또는 복수의 유기물층 중에서 선택된 1종 이상의 유기물층은 상기 유기전계발광소자용 화합물을 포함하는 것을 특징으로 하는 유기전계발광소자가 제공될 수 있다.
- [0072] 상기 단수 또는 복수의 유기물층은 발광층을 포함할 수 있다.
- [0073] 상기 복수의 유기물층은 발광층을 포함하고, 상기 복수의 유기물층은 전자주입층, 전자수송층, 정공차단층, 전자차단층, 정공수송층 및 정공주입층 중에서 선택된 1종 이상을 추가로 포함할 수 있다.
- [0074] 상기 발광층은 호스트와 도펀트를 포함할 수 있다.

발명의 효과

- [0075] 본 발명은 열 안정성이 높으며, 발광 효율 및 수명이 개선된 정공 수송층을 갖는 유기전계발광소자용 화합물을 제공할 수 있다.
- [0076] 또한, 본 발명의 유기전계발광소자용 화합물을 발광층과 접촉하는 정공 수송층 물질로 적용하였을 경우, 삼중항 에너지를 높여 유기전계발광소자의 효율을 향상시킬 수 있으며 수명을 개선할 수 있다.

도면의 간단한 설명

- [0077] 도 1은 본 발명의 일 실시예에 따른 유기전계발광소자의 단면을 나타낸 단면도이다.
- 도 2는 본 발명의 다른 일 실시예에 따른 유기전계발광소자의 단면을 나타낸 단면도이다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

- [0078] 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.
- [0079] 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.
- [0080] 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.
- [0081] 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.
- [0083] 본 명세서에서 "원자가결합"이란 별도의 정의가 없는 한, 단일결합, 이중결합 또는 삼중결합을 의미한다.
- [0084] 상기 "치환된"이란 적어도 하나의 수소원자가 중수소, C1 내지 C30 알킬기, C3 내지 C30 시클로알킬기, C2 내지 C30 헤테로시클로알킬기, C1 내지 C30 할로젠화알킬기, C6 내지 C30 아릴기, C1 내지 C30 헤테로아릴기, C1 내지 C30 알콕시기, C2 내지 C30 알케닐기, C2 내지 C30 알키닐기, C6 내지 C30 아릴옥시기, 실릴옥시기(-OSiH₃), -OSiR¹H₂(R¹은 C1 내지 C30 알킬기 또는 C6 내지 C30 아릴기), -OSiR¹R²H(R¹ 및 R²는 각각 독립적으로 C1 내지 C30 알킬기 또는 C6 내지 C30 아릴기), -OSiR¹R²R³, (R¹, R², 및 R³는 각각 독립적으로 C1 내지 C30 알킬기 또는 C6 내지 C30 아릴기), C1 내지 C30 아실기, C2 내지 C30 아실옥시기, C2 내지 C30 헤테로아릴옥시기, C1 내지

C30 술폰닐기, C1 내지 C30 알킬티올기, C6 내지 C30 아릴티올기, C1 내지 C30 헤테로시클로티올기, C1 내지 C30 인산아마이드기, 실릴기($-\text{SiH}_3$), $-\text{SiR}^1\text{H}_2$ (R^1 은 C1 내지 C30 알킬기 또는 C6 내지 C30 아릴기), $-\text{SiR}^1\text{R}^2\text{H}$ (R^1 및 R^2 는 각각 독립적으로 C1 내지 C30 알킬기 또는 C6 내지 C30 아릴기), $-\text{SiR}^1\text{R}^2\text{R}^3$, (R^1 , R^2 , 및 R^3 는 각각 독립적으로 C1 내지 C30 알킬기 또는 C6 내지 C30 아릴기), 아민기-NRR'(여기에서, R 및 R'은 각각 독립적으로, 수소 원자, C1 내지 C30 알킬기, 및 C6 내지 C30 아릴기로 이루어진 군에서 선택되는 치환기임), 카르복실기, 할로젠기, 시아노기, 니트로기, 아조기, 및 하이드록시기로 이루어진 군에서 선택되는 치환기로 치환된 것을 의미한다.

[0085] 또한 상기 치환기 중 인접한 두 개의 치환기가 융합되어 포화 또는 불포화 고리를 형성할 수도 있다.

[0086] 또한, 상기 "치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기" 또는 "치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 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.

[0087] 또한, 상기 "치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 융합된 아릴기" 등에서 상기 융합된 아릴기의 탄소수 범위는 상기 치환기가 치환된 부분을 고려하지 않고 비치환된 것으로 보았을 때 융합되어 부가적으로 새롭게 형성된 아릴 부분을 구성하는 전체 탄소수를 의미하는 것이다.

[0088] 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.

[0089] 본 명세서에서 "이들의 조합"이란 별도의 정의가 없는 한, 둘 이상의 치환기가 연결기로 결합되어 있거나, 둘 이상의 치환기가 축합하여 결합되어 있는 것을 의미한다.

[0090] 본 명세서에서 "수소"란 별도의 정의가 없는 한, 일중수소, 이중수소, 또는 삼중수소를 의미한다.

[0091] 본 명세서에서 "알킬(alkyl)기"란 별도의 정의가 없는 한, 지방족 탄화수소기를 의미한다.

[0092] 알킬기는 어떠한 이중결합이나 삼중결합을 포함하고 있지 않은 "포화 알킬(saturated alkyl)기"일 수 있다.

[0093] 알킬기는 적어도 하나의 이중결합 또는 삼중결합을 포함하고 있는 "불포화 알킬(unsaturated alkyl)기"일 수도 있다.

[0094] "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. 포화이든 불포화이든 간에 알킬기는 분지형, 직쇄형 또는 환형일 수 있다.

[0095] 알킬기는 C1 내지 C30 알킬기일 수 있다. 보다 구체적으로 C1 내지 C20 알킬기, C1 내지 C10 알킬기 또는 C1 내지 C6 알킬기일 수도 있다.

[0096] 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.

[0097] 구체적인 예를 들어 상기 알킬기는 메틸기, 에틸기, 프로필기, 이소프로필기, 부틸기, 이소부틸기, t-부틸기, 펜틸기, 헥실기, 에테닐기, 프로페닐기, 부테닐기, 시클로프로필기, 시클로부틸기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기 등을 의미한다.

[0098] "아민기"는 아미노기, 아릴아민기, 알킬아민기, 아릴알킬아민기, 또는 알킬아릴아민기를 포함하고, -NRR'로 표현될 수 있고, 여기에서 R 및 R'은 각각 독립적으로, 수소 원자, C1 내지 C30 알킬기, 및 C6 내지 C30 아릴기로 이루어진 군에서 선택되는 치환기이다.

[0099] "시클로알킬(cycloalkyl)기"는 모노시클릭 또는 융합고리 폴리시클릭(즉, 탄소원자들의 인접한 쌍들을 나뉘 가지는 고리) 작용기를 포함한다.

[0100] "헤테로시클로알킬(heterocycloalkyl)기"는 시클로알킬기 내에 N, O, S 및 P로 이루어진 군에서 선택되는 헤테로 원자를 1 내지 4개 함유하고, 나머지는 탄소인 것을 의미한다. 상기 헤테로시클로알킬기가 융합된 고리(fused ring)인 경우, 융합된 고리 중 적어도 하나의 고리가 상기 헤테로 원자를 1 내지 4개 포함할 수 있다.

[0101] "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.

[0102] "아릴(aryl)기"는 모노시클릭 또는 융합 고리 폴리시클릭(즉, 탄소원자들의 인접한 쌍들을 나눠 가지는 고리) 작용기를 포함한다.

[0103] "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 융합된 고리(fused ring)인 경우, 융합된 고리 중 적어도 하나의 고리가 상기 헤테로 원자를 1 내지 4개 포함할 수 있다.

[0104] 아릴기 및 헤테로아릴기에서 고리의 원자수는 탄소수 및 비탄소원자수의 합이다.

[0105] "알킬아릴기" 또는 "아릴알킬기"와 같이 조합하여 사용할 때, 상기에 든 각각의 알킬 및 아릴의 용어는 상기 나타낸 의미와 내용을 가진다.

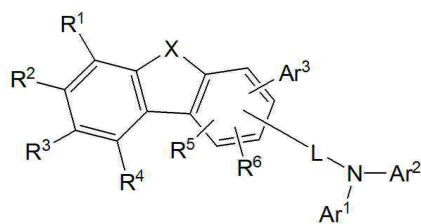
[0106] "아릴알킬기"이란 용어는 벤질과 같은 아릴 치환된 알킬 라디칼을 의미하며 알킬기에 포함된다.

[0107] "알킬아릴기"이란 용어는 알킬 치환된 아릴 라디칼을 의미하며 아릴기에 포함된다.

[0109] 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.

[0110] 본 발명의 하나의 측면에 따르면, 하기 구조식 1로 표시되는 유기전계발광소자용 화합물이 제공될 수 있다.

[0111] [구조식 1]



[0112]

[0113] 구조식 1에서,

[0114] R¹ 내지 R⁶은 서로 같거나 다르고, R¹ 내지 R⁶은 각각 독립적으로 수소원자, 중수소원자, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 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,

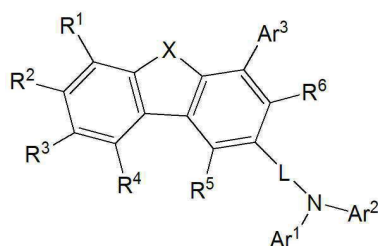
[0115] L은 원자가결합, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬렌기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬렌기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로시클로알킬렌기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴렌기, 또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴렌기이고,

[0116] X는 산소원자 또는 황원자이고,

[0117] Ar¹ 내지 Ar³은 서로 같거나 다르고, Ar¹ 내지 Ar³은 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴기일 수 있다.

[0118] 바람직하게는, 상기 구조식 1로 표시되는 화합물은 하기 구조식 2로 표시되는 화합물일 수 있다.

[0119] [구조식 2]



[0120]

[0121] 구조식 2에서,

[0122] R^1 내지 R^6 은 서로 같거나 다르고, R^1 내지 R^6 은 각각 독립적으로 수소원자, 중수소원자, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 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,

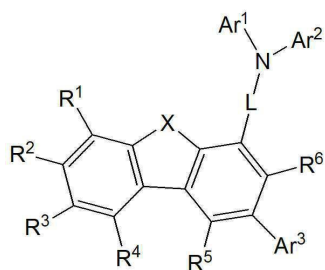
[0123] L은 원자가결합, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬렌기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬렌기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로시클로알킬렌기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아틸렌기, 또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아틸렌기이고,

[0124] X는 산소원자 또는 황원자이고,

[0125] Ar^1 내지 Ar^3 은 서로 같거나 다르고, Ar^1 내지 Ar^3 은 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴기일 수 있다.

[0126] 바람직하게는, 상기 구조식 1로 표시되는 화합물은 하기 구조식 3으로 표시되는 화합물일 수 있다.

[0127] [구조식 3]



[0128]

[0129] 구조식 3에서,

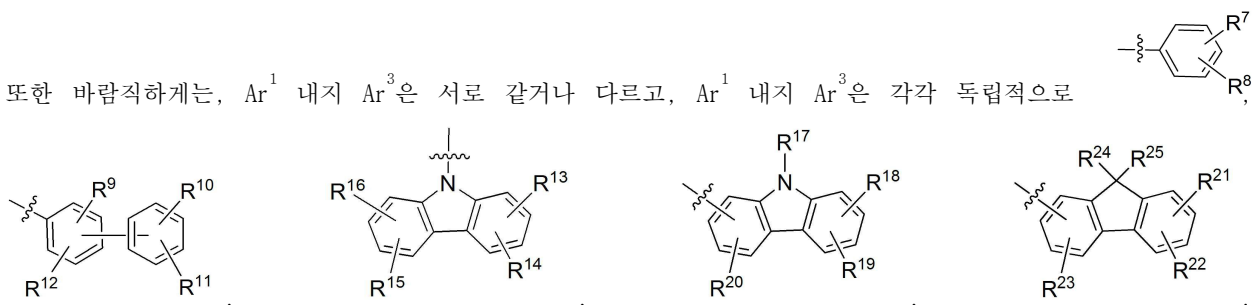
[0130] R^1 내지 R^6 은 서로 같거나 다르고, R^1 내지 R^6 은 각각 독립적으로 수소원자, 중수소원자, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴기이고,

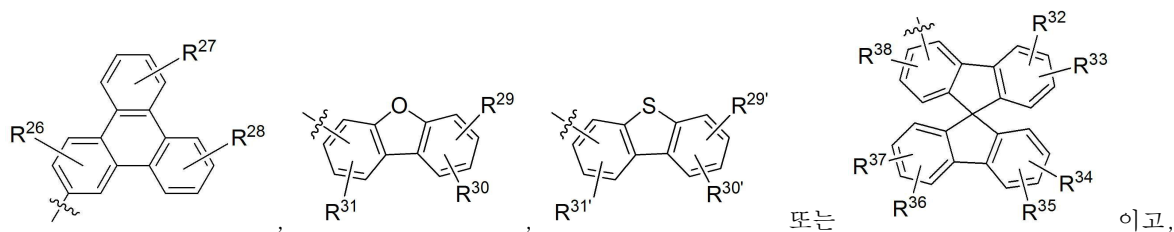
[0131] L은 원자가결합, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬렌기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 시클로알킬렌기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로시클로알킬렌기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아틸렌기, 또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아틸렌기이고,

[0132] X는 산소원자 또는 황원자이고,

[0133] Ar^1 내지 Ar^3 은 서로 같거나 다르고, Ar^1 내지 Ar^3 은 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴기일 수 있다.

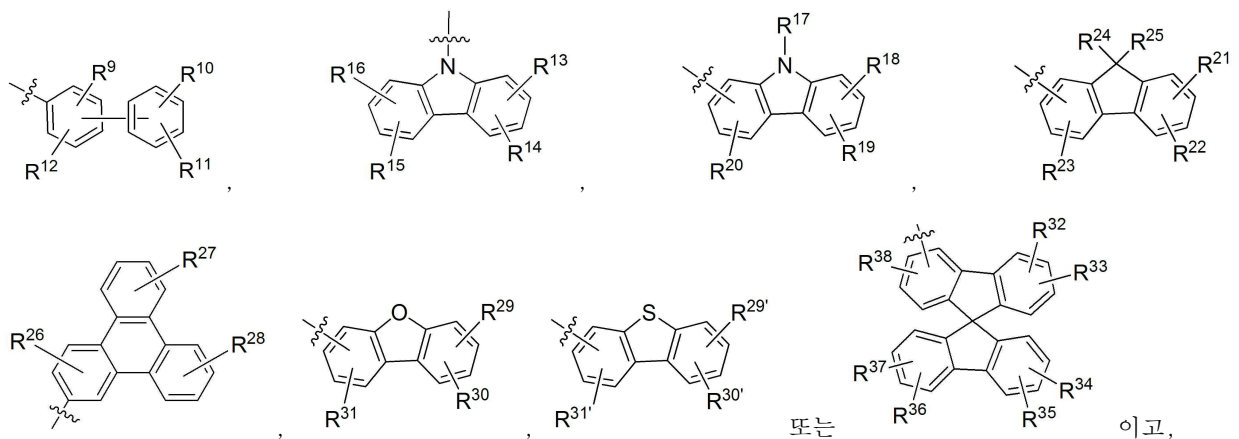
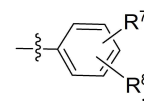
[0134] 또한 바람직하게는, Ar^1 내지 Ar^3 은 서로 같거나 다르고, Ar^1 내지 Ar^3 은 각각 독립적으로





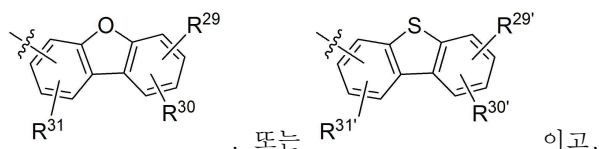
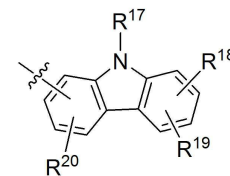
[0135]

보다 바람직하게는 Ar^1 및 Ar^2 는 서로 같거나 다르고, Ar^1 내지 Ar^2 은 각각 독립적으로



[0136]

보다 바람직하게는 Ar^3 은 서로 같거나 다르고, Ar^3 은 각각 독립적으로,



[0138]

R^7 내지 R^{38} 은 및 $R^{29'}$ 내지 $R^{31'}$ 는 서로 같거나 다르고, R^7 내지 R^{38} 및 $R^{29'}$ 내지 $R^{31'}$ 는 각각 독립적으로 수소원자, 중수소원자, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 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]

바람직하게는 R^7 내지 R^{16} , R^{18} 내지 R^{38} , 및 $R^{29'}$ 내지 $R^{31'}$ 는 서로 같거나 다르고 R^7 내지 R^{16} , R^{18} 내지 R^{38} , 및 $R^{29'}$ 내지 $R^{31'}$ 는 각각 독립적으로 수소원자, 중수소원자, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 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,

[0140]

바람직하게는 R^{17} 은 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 헤테로아릴기일 수 있다.

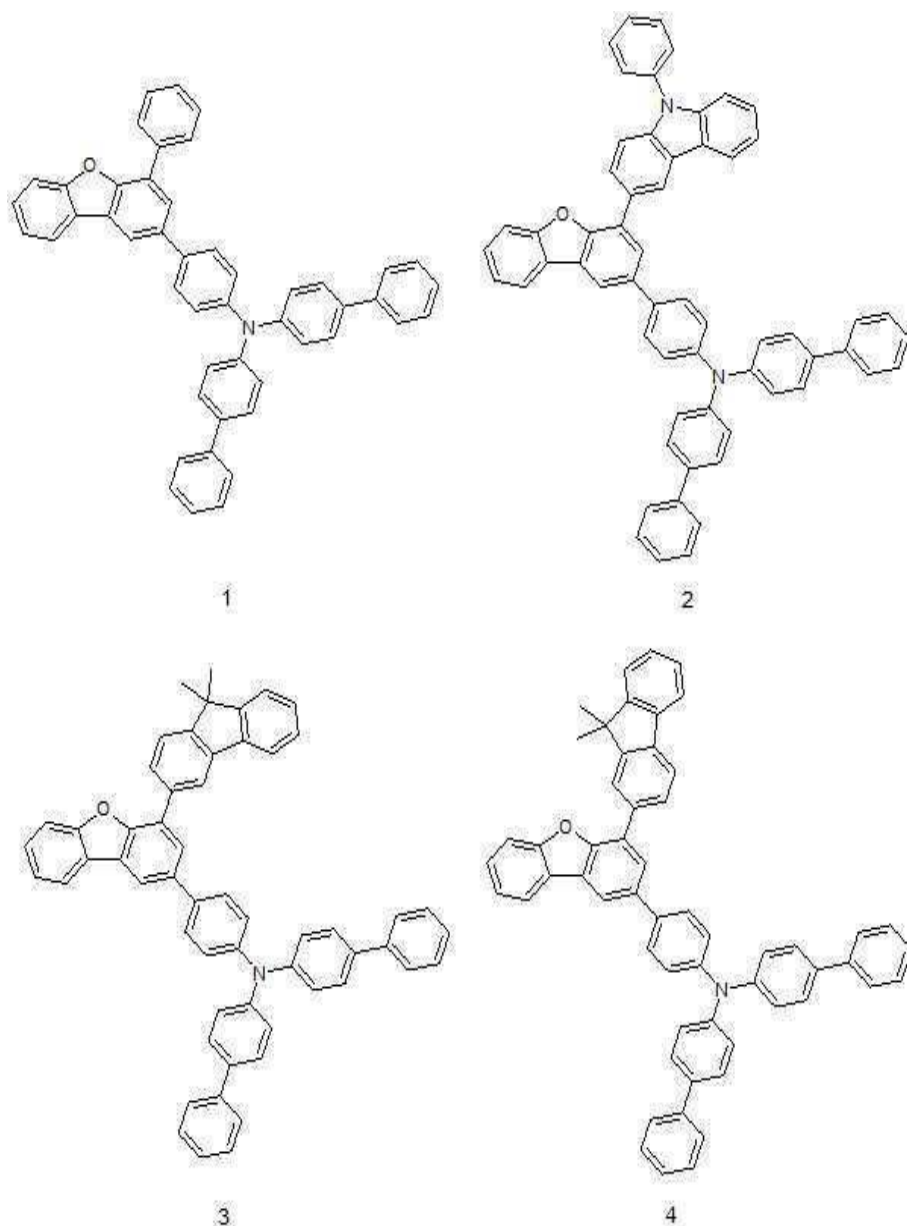
[0141]

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

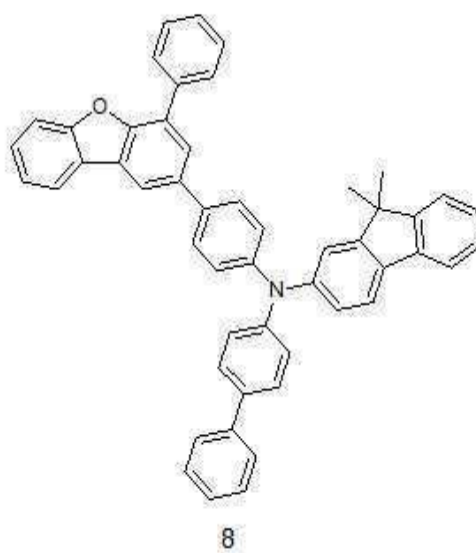
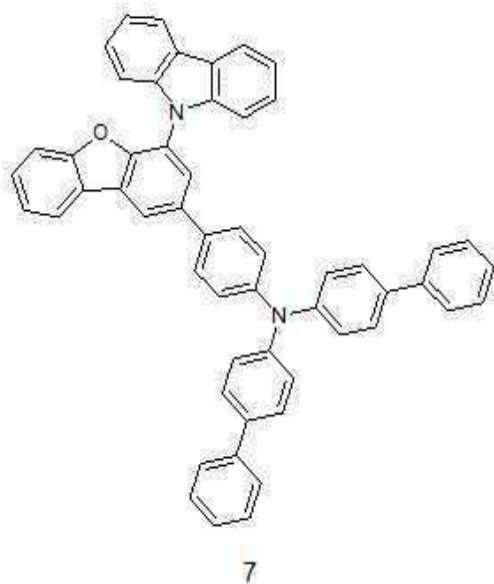
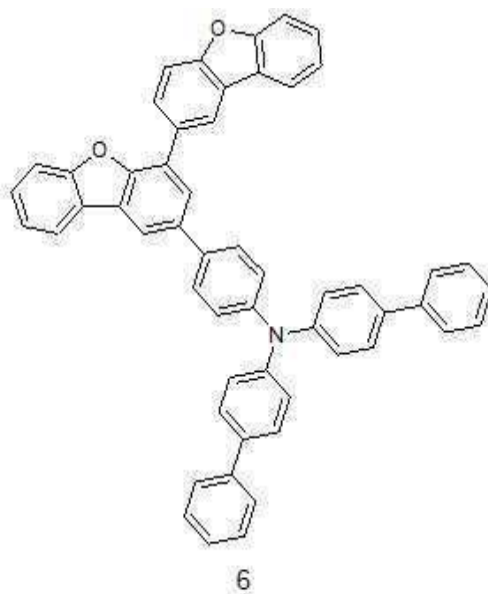
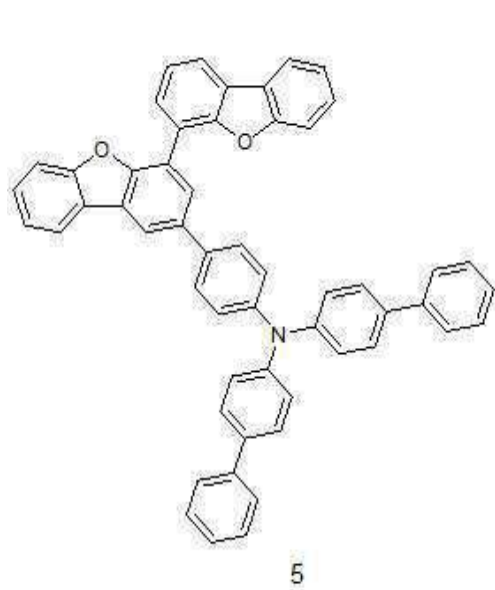
된 페노티아지닐기, 치환 또는 비치환된 페나지닐기, 치환 또는 비치환된 카바졸릴기, 치환 또는 비치환된 디벤조싸이오페닐기, 치환 또는 비치환된 이미다졸릴기, 치환 또는 비치환된 트리아졸릴기, 치환 또는 비치환된 테트라졸릴기, 치환 또는 비치환된 옥사다리아졸릴기, 치환 또는 비치환된 옥사트리아졸릴기, 치환 또는 비치환된 싸이아트리아졸릴기, 치환 또는 비치환된 벤조트리아졸릴기, 치환 또는 비치환된 피라지닐기, 치환 또는 비치환된 피리다지닐기, 치환 또는 비치환된 퓨리닐기, 치환 또는 비치환된 퀴놀리닐기, 치환 또는 비치환된 이소퀴놀리닐기, 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 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, 또는 치환 또는 비치환된 디벤조싸이오페닐기일 수 있다.

[0142]

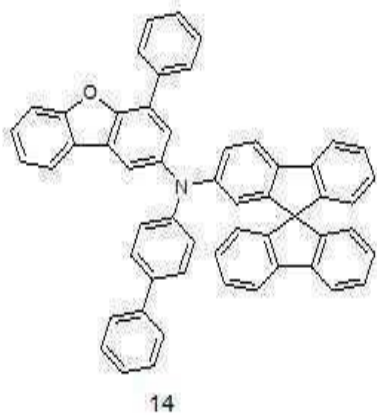
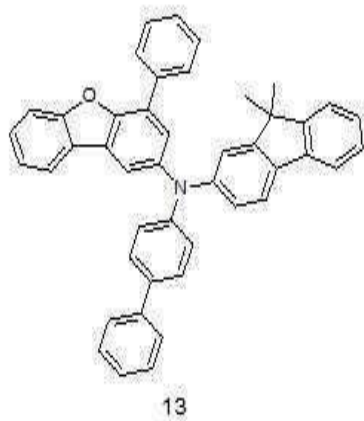
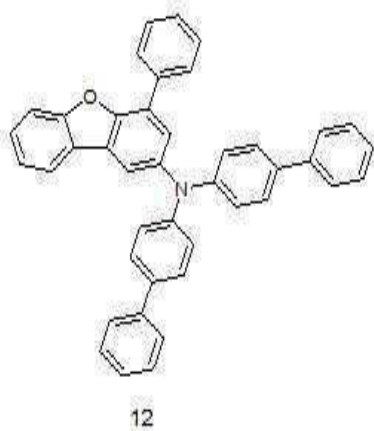
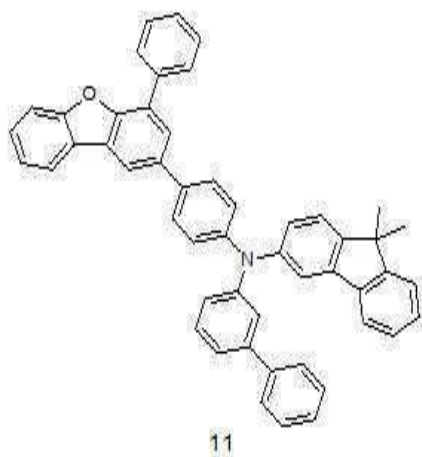
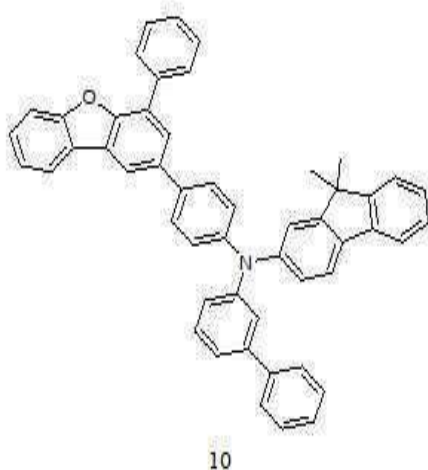
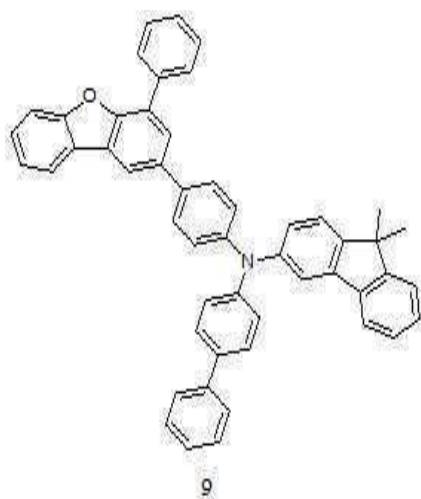
상기 유기전계발광소자용 화합물은 하기 화학식으로 표시되는 화합물 1 내지 62 중에서 선택된 어느 하나일 수 있으나, 여기에 한정되지 않는다.

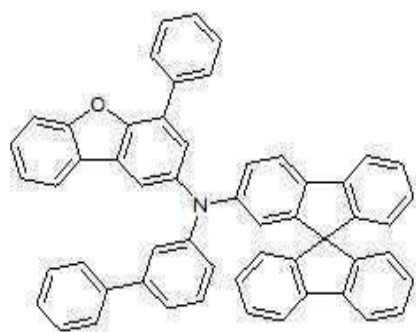


[0143]

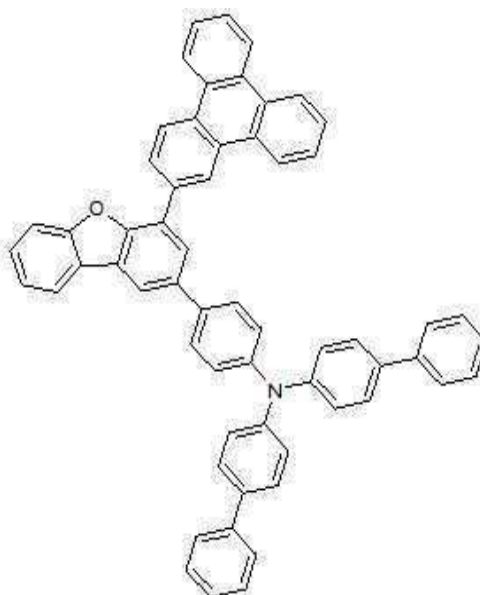


[0144]

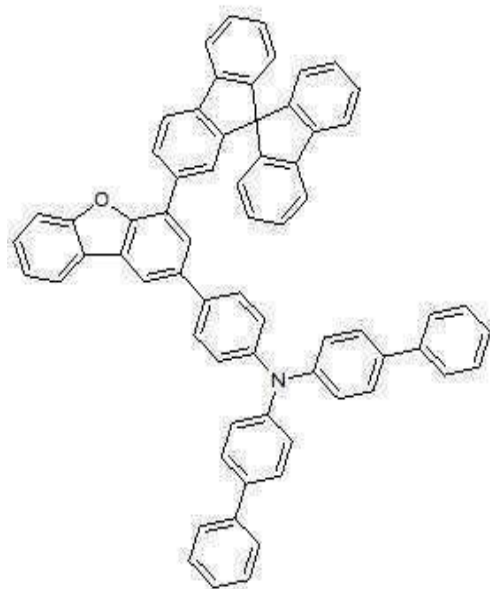




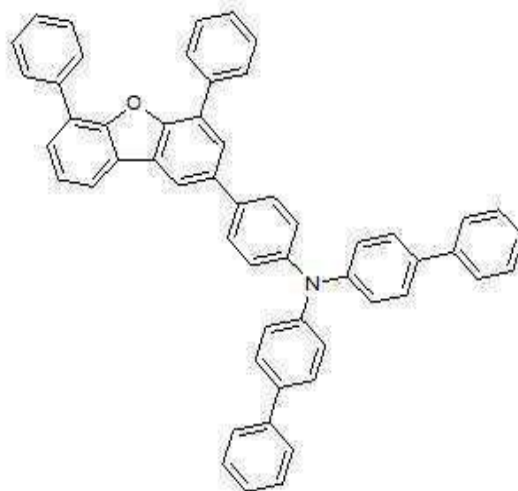
15



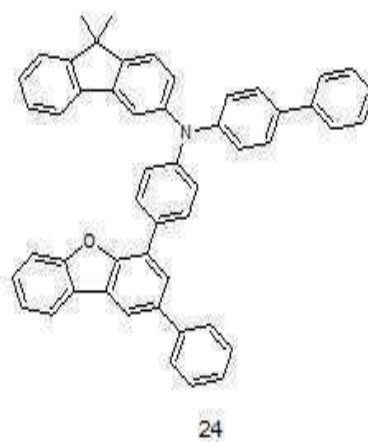
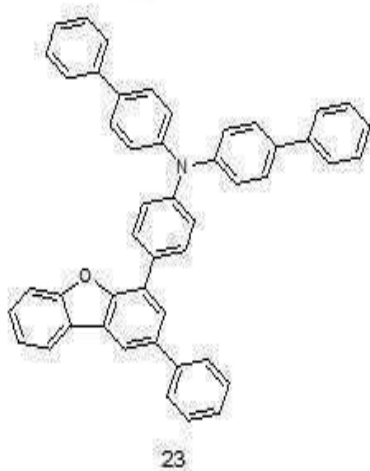
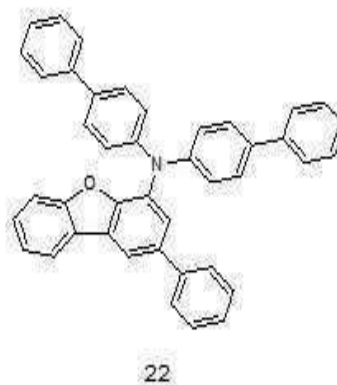
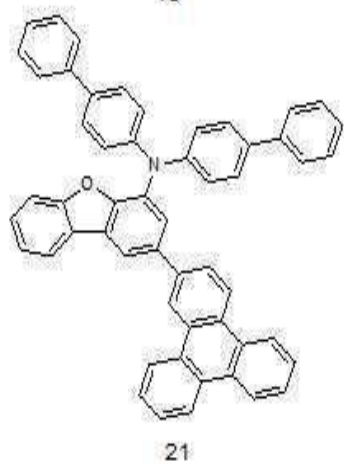
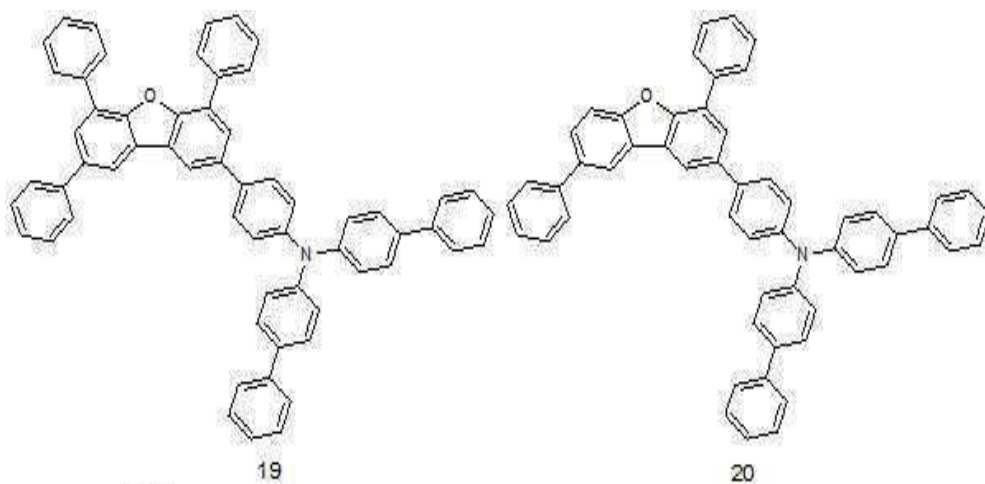
16

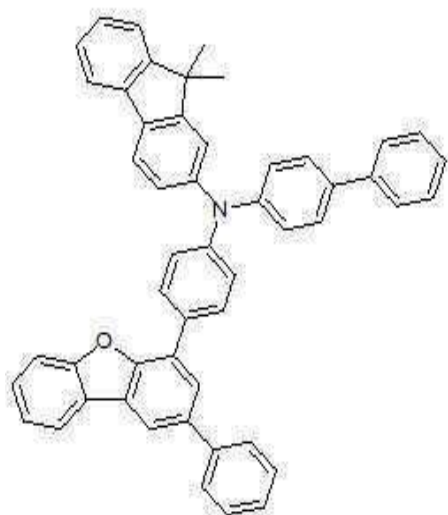


17

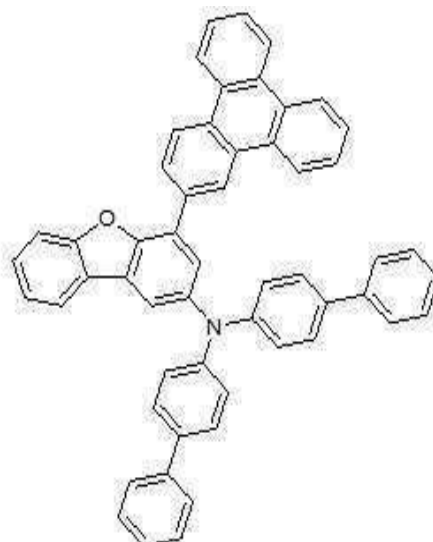


18

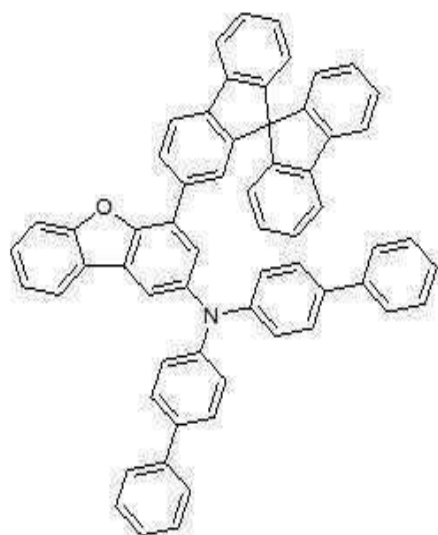




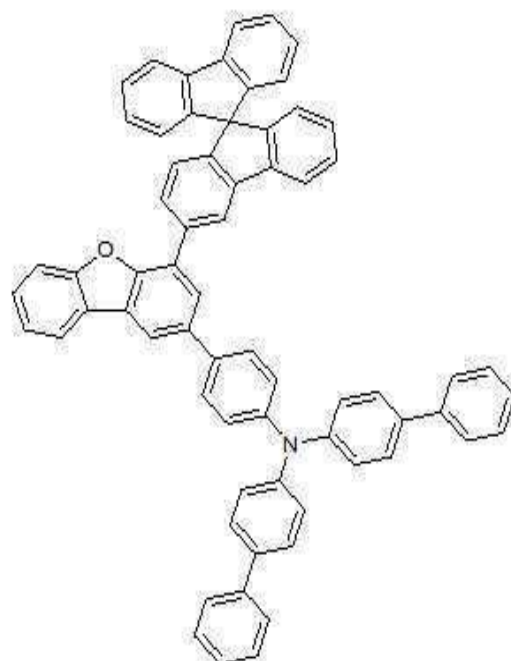
25



26

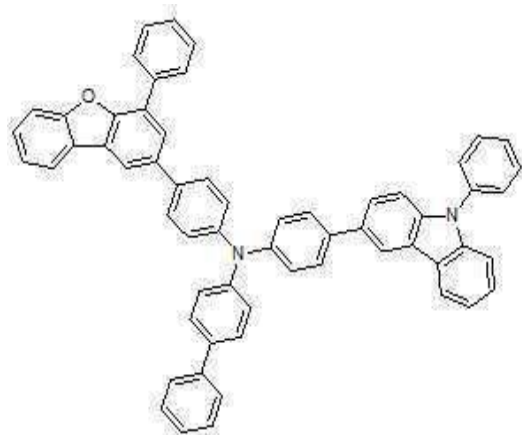


27

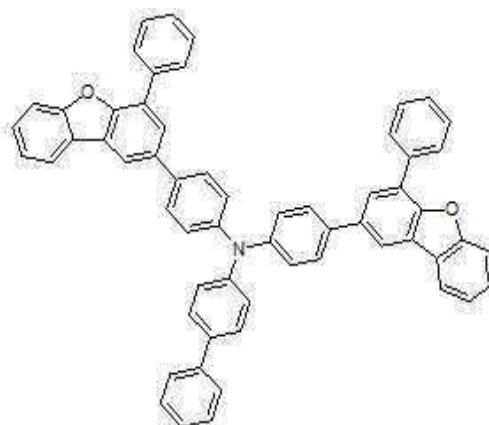


28

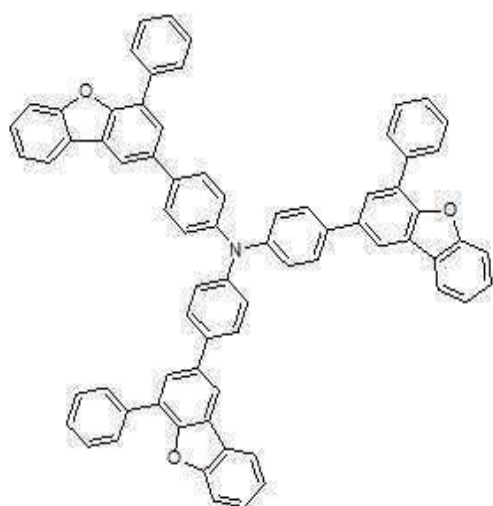
[0145]



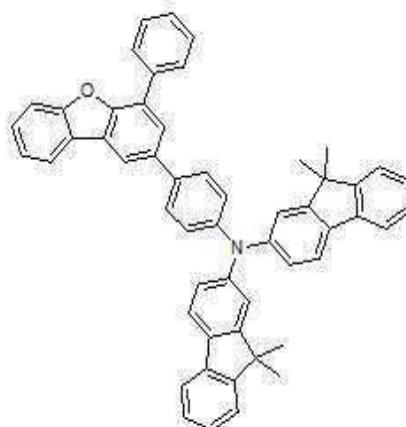
29



30

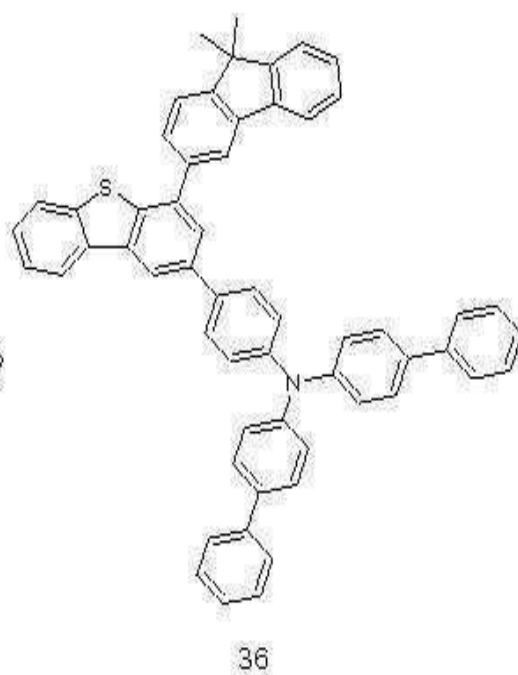
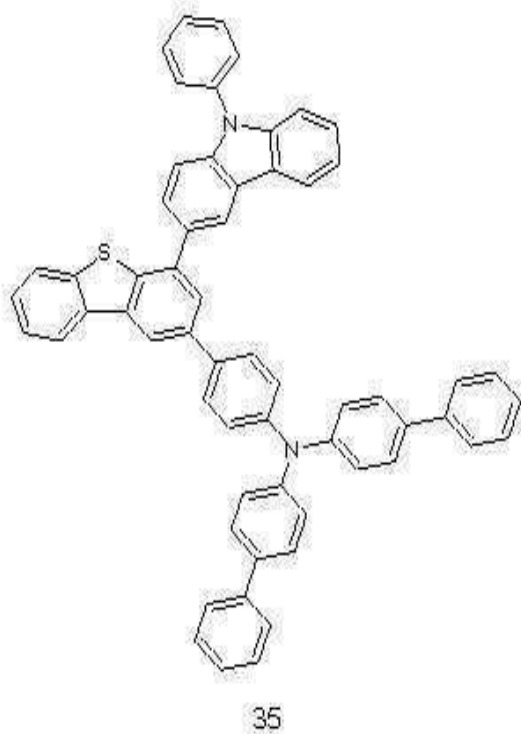
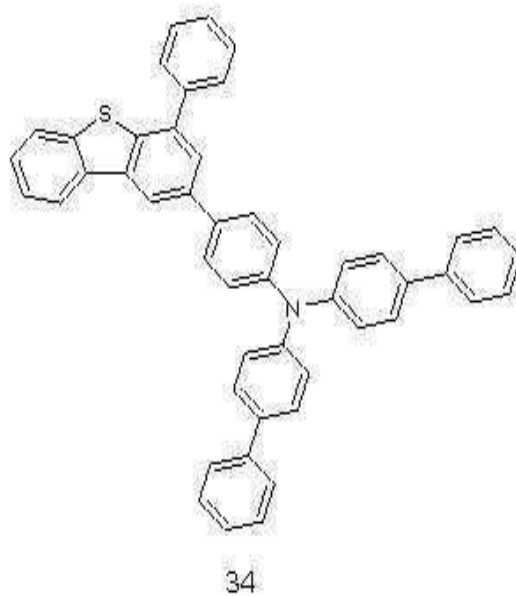
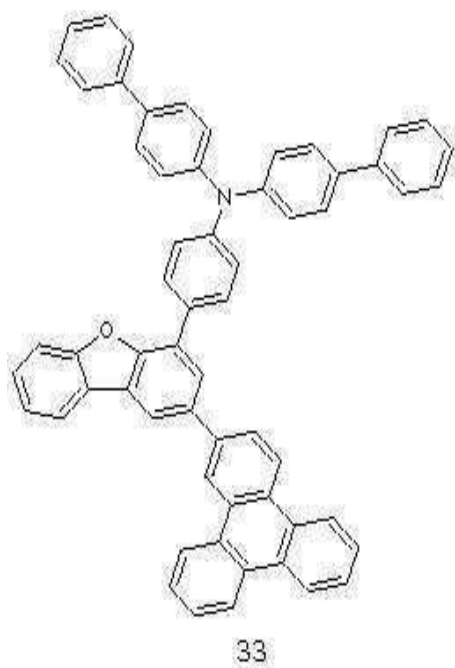


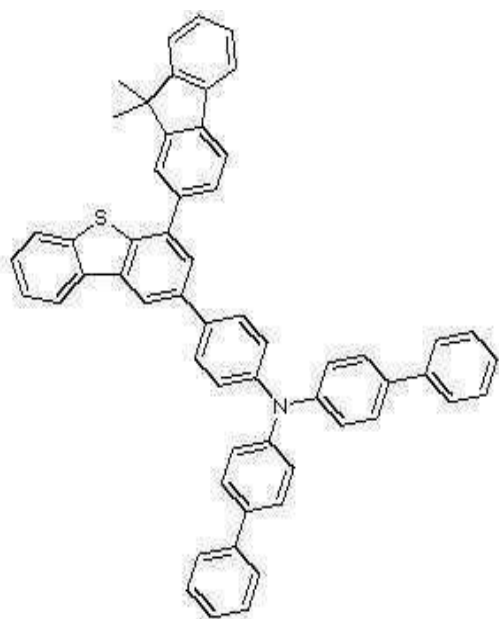
31



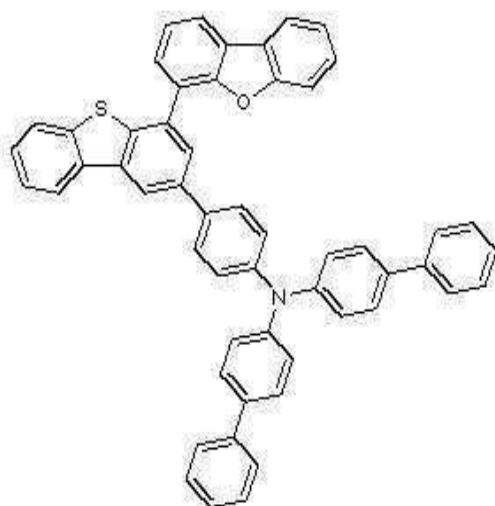
32

[0146]

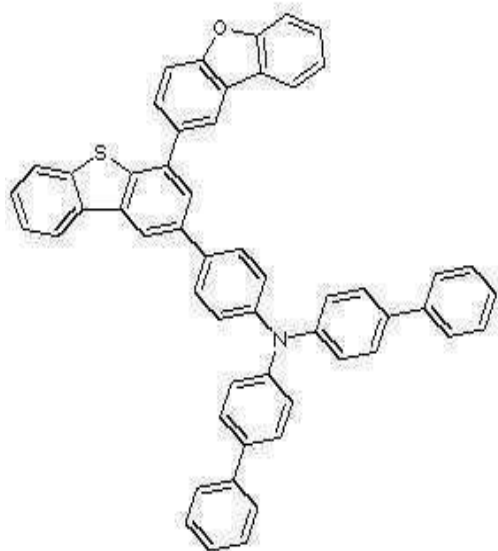




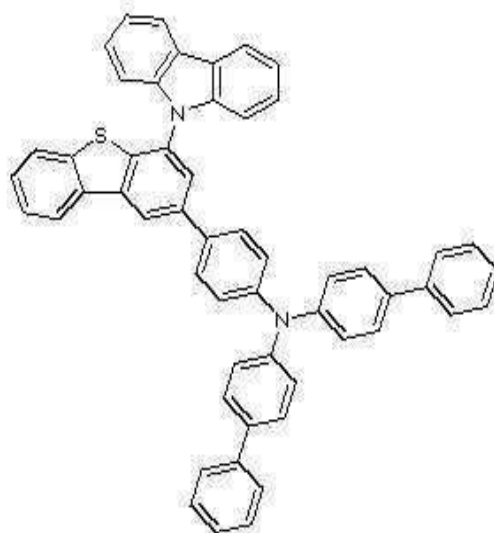
37



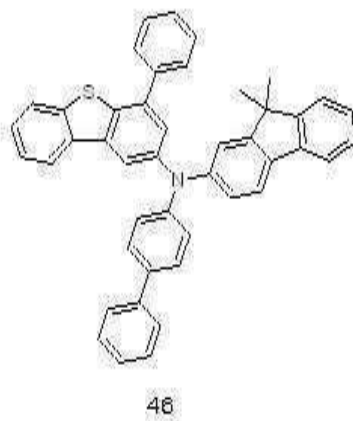
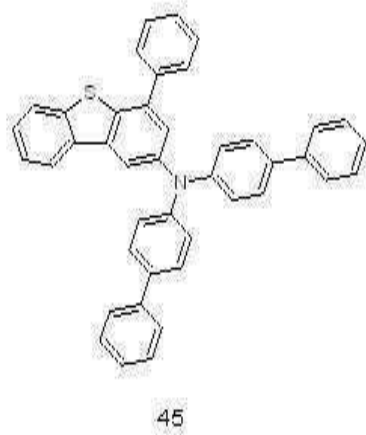
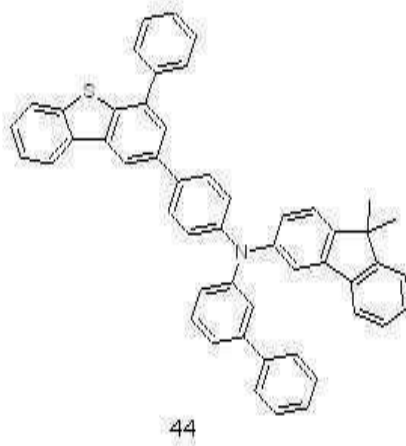
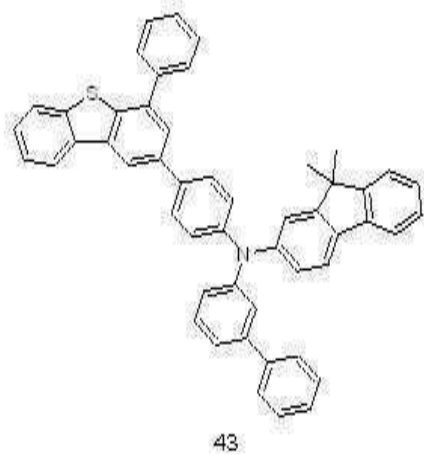
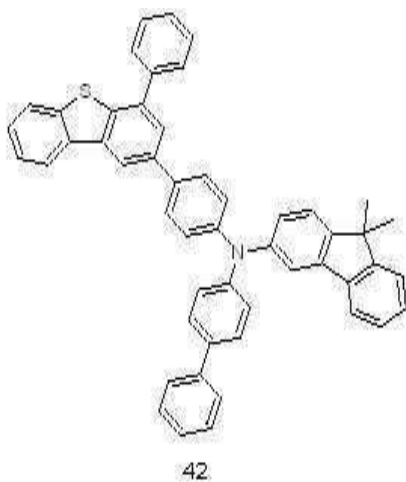
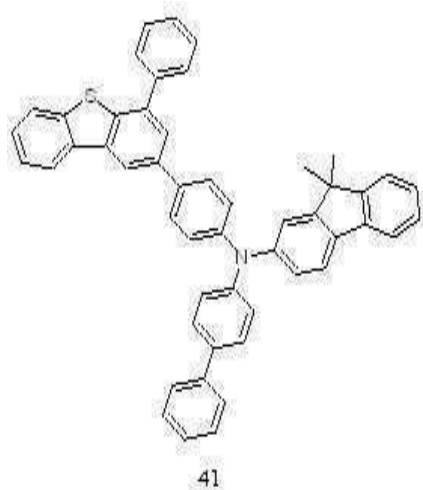
38

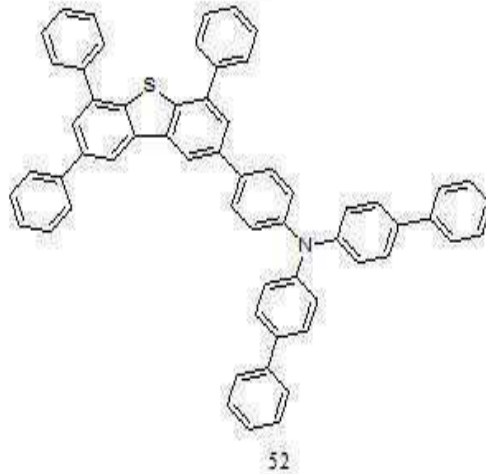
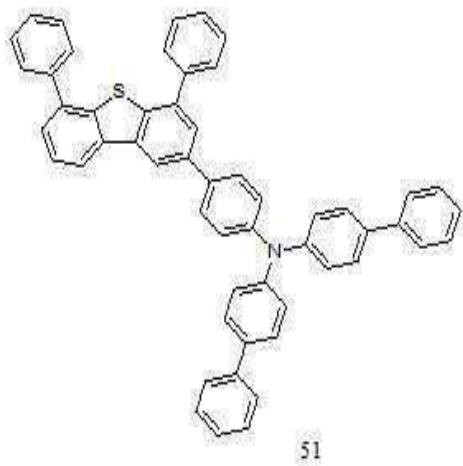
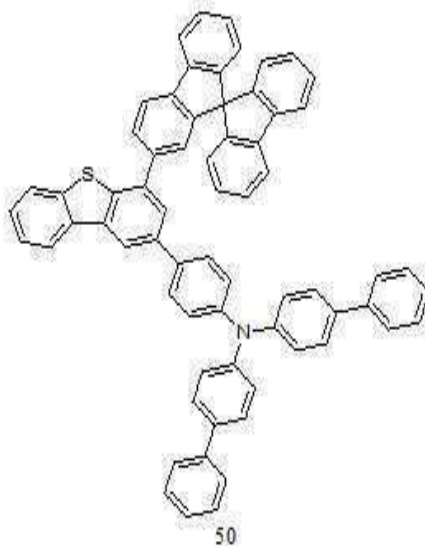
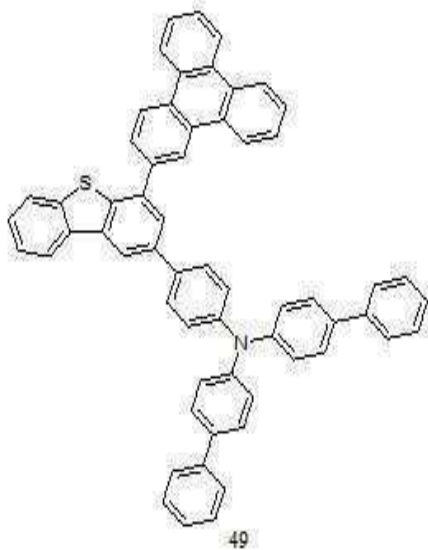
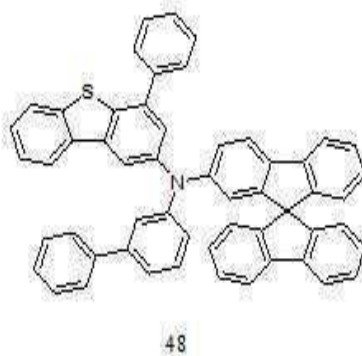
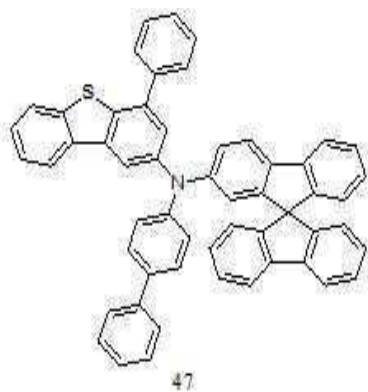


39

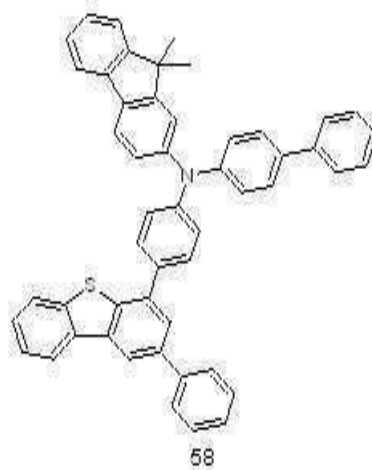
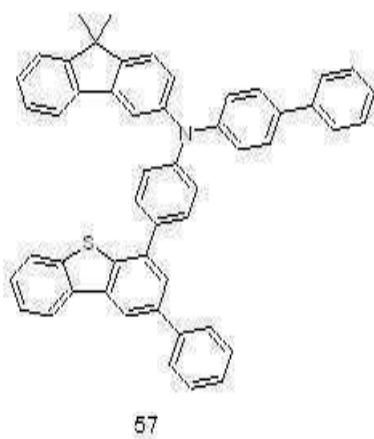
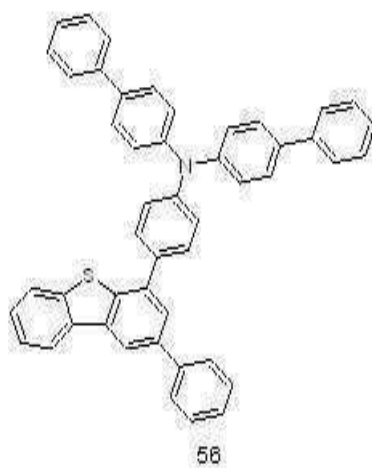
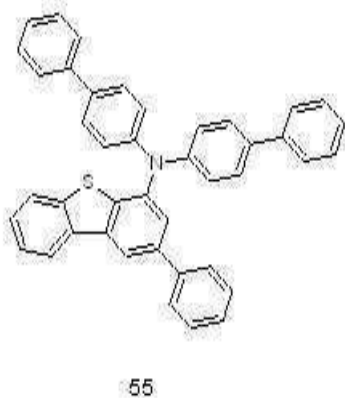
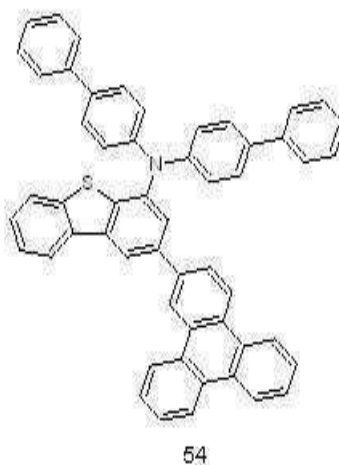
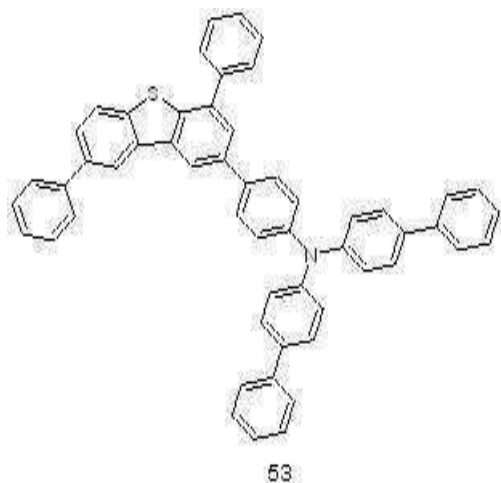


40

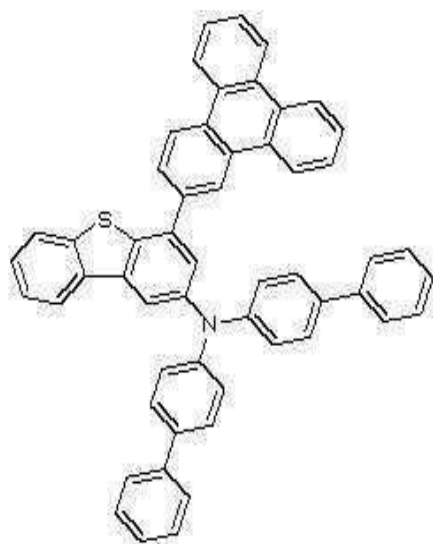




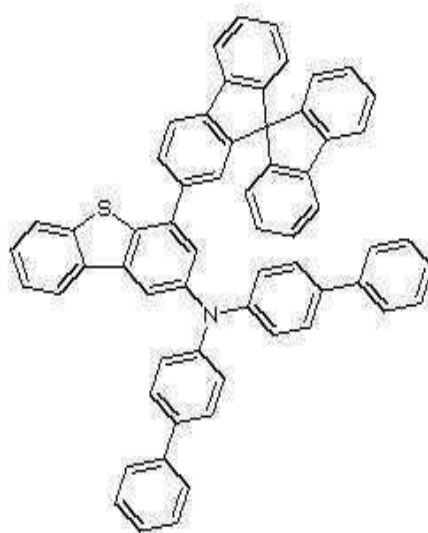
[0147]



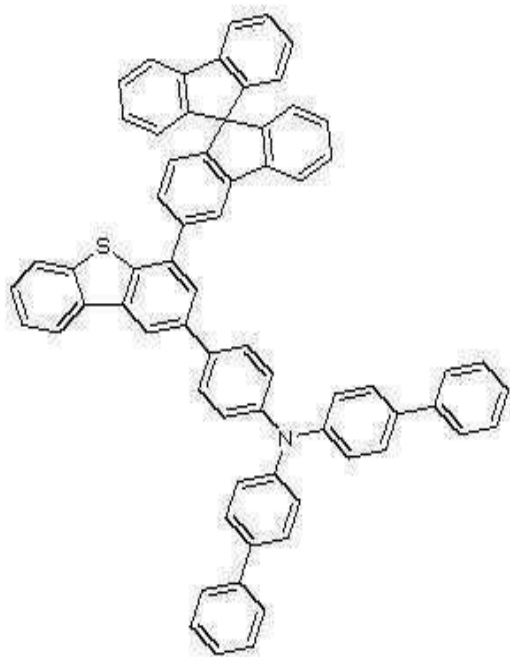
[0148]



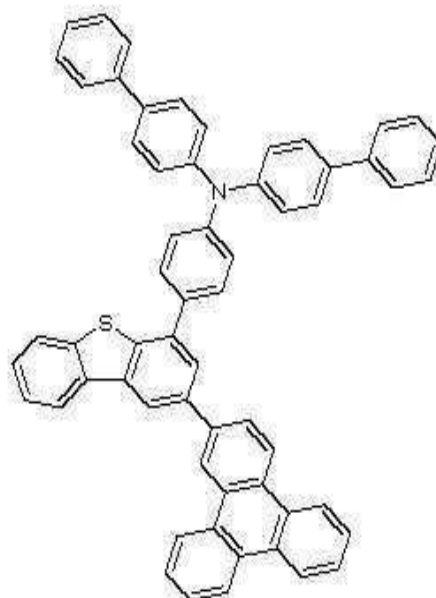
59



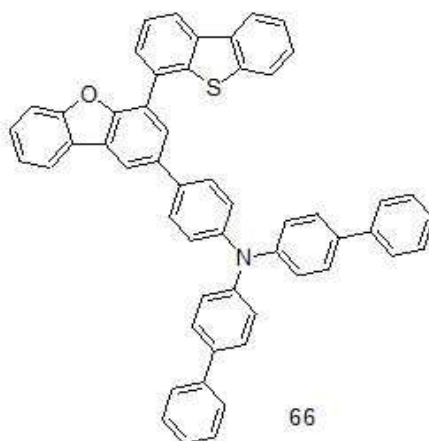
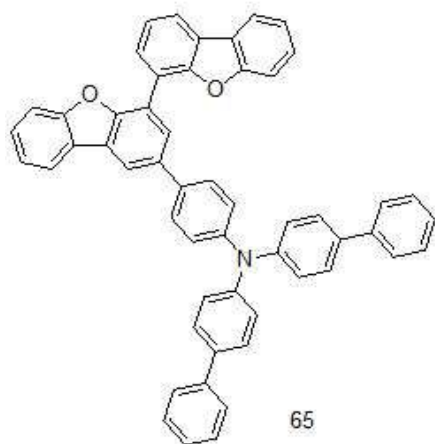
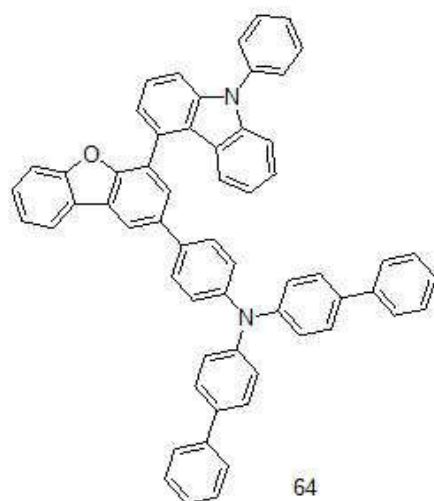
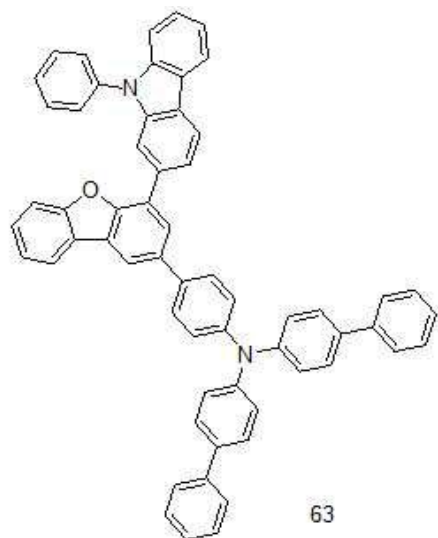
60



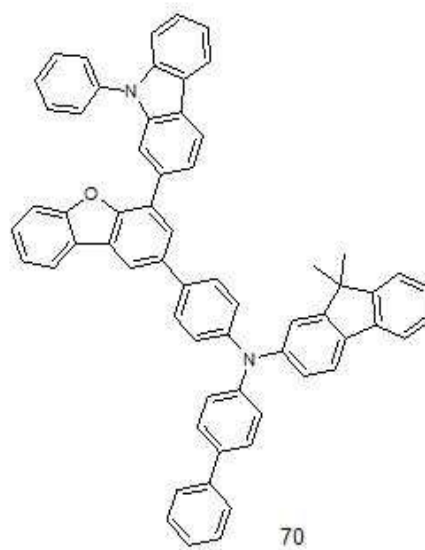
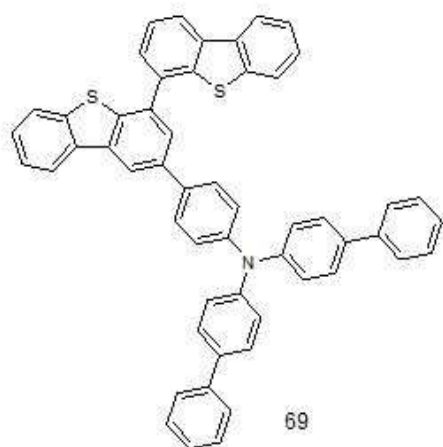
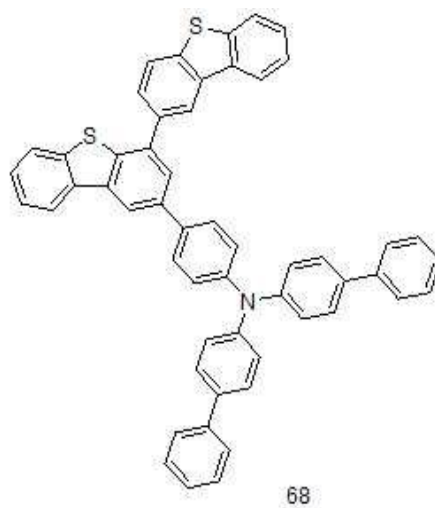
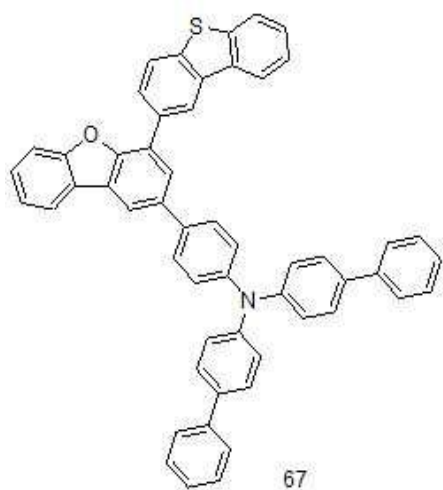
61



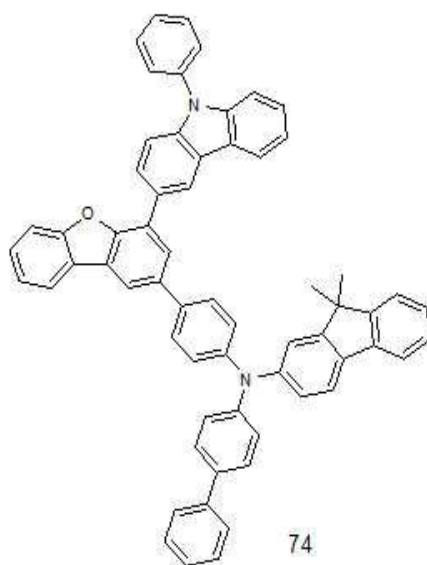
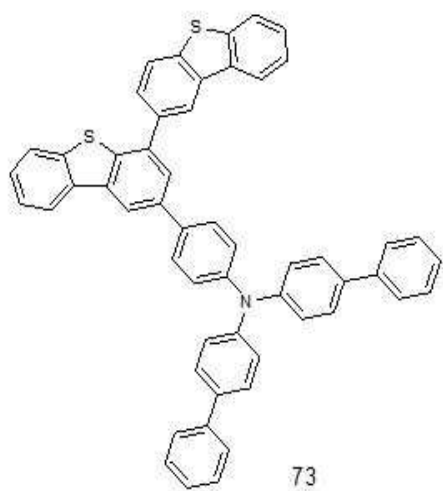
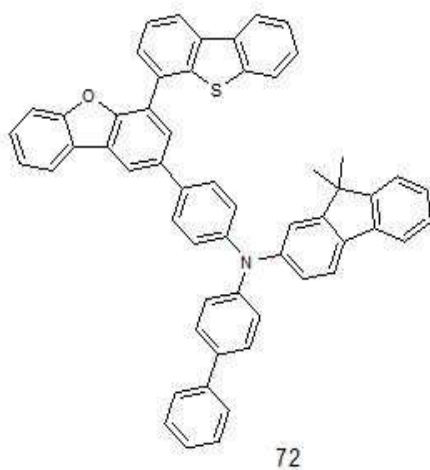
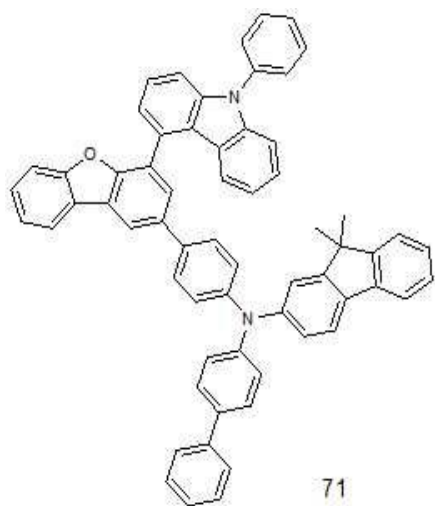
62



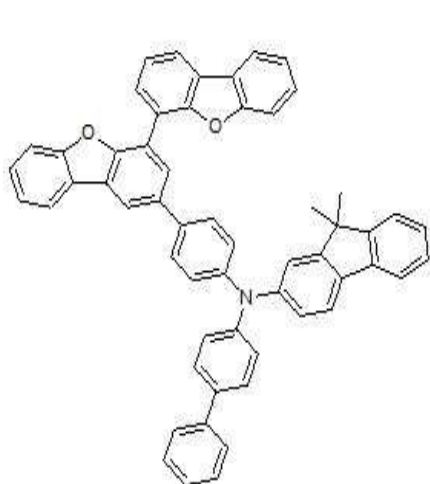
[0156]



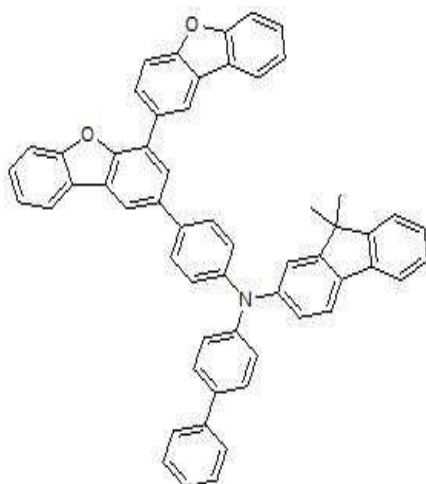
[0157]



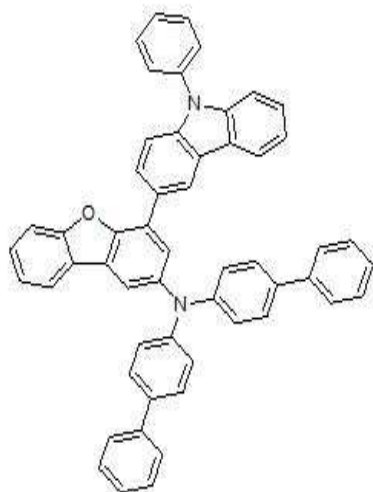
[0158]



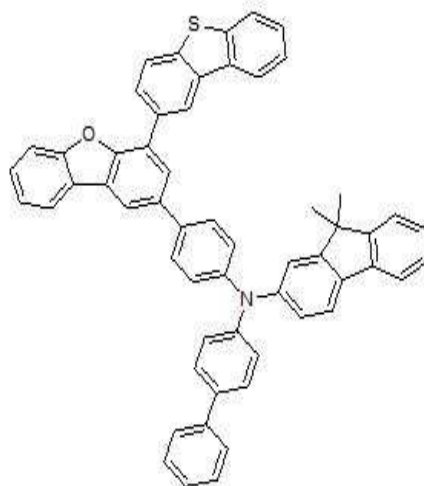
75



76

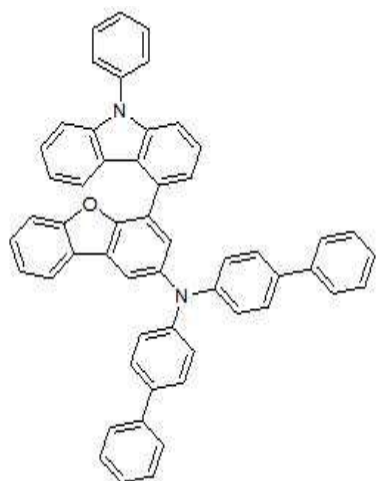


77

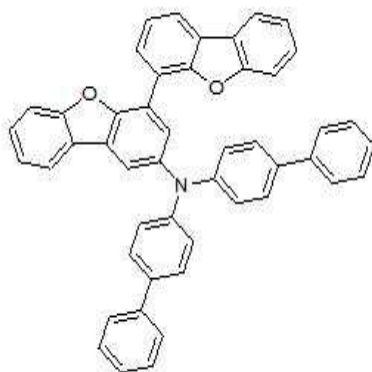


78

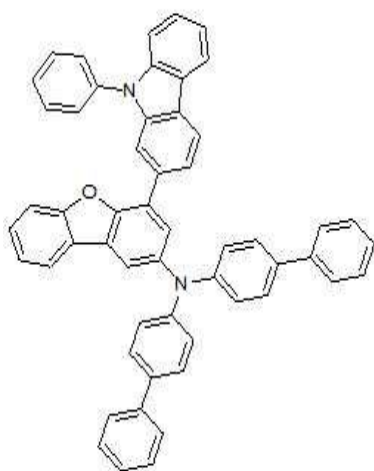
[0159]



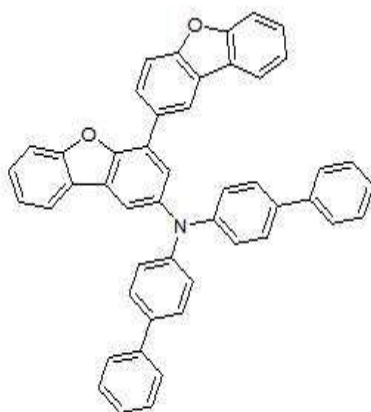
79



80

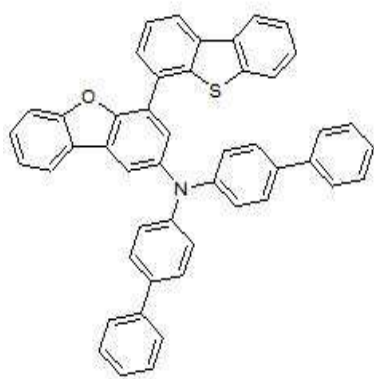


81

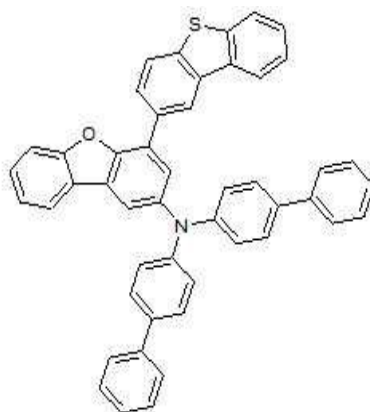


82

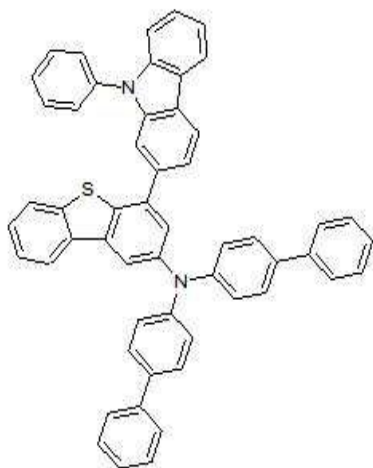
[0160]



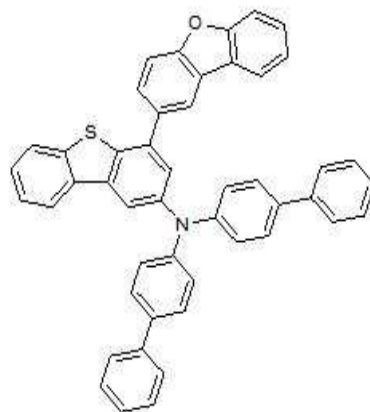
83



84

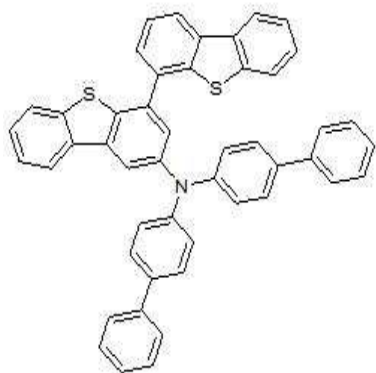


85

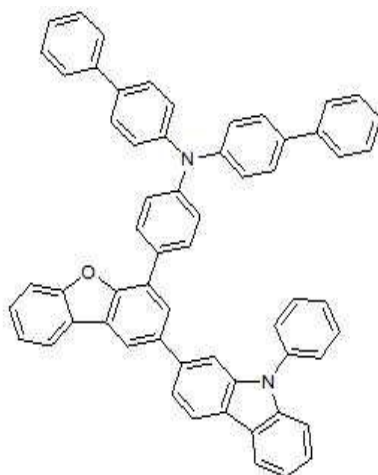


86

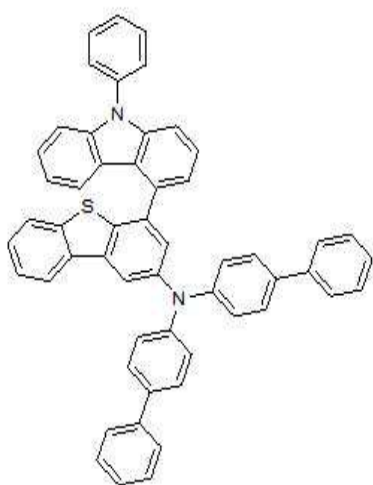
[0161]



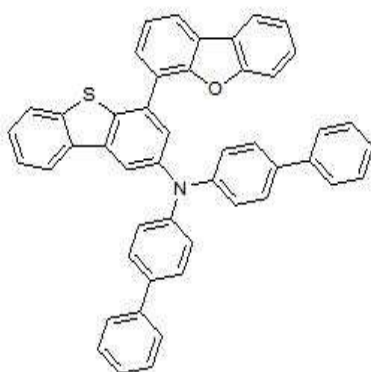
87



88

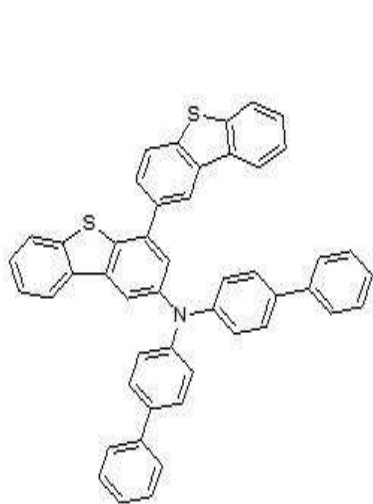


89

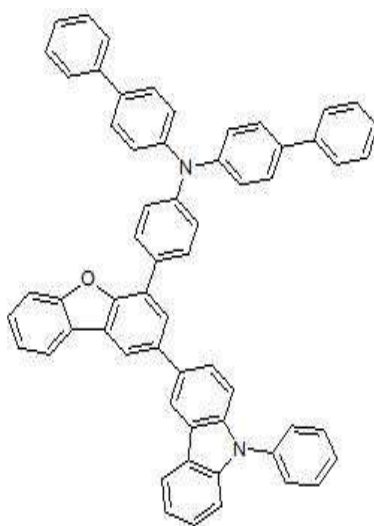


90

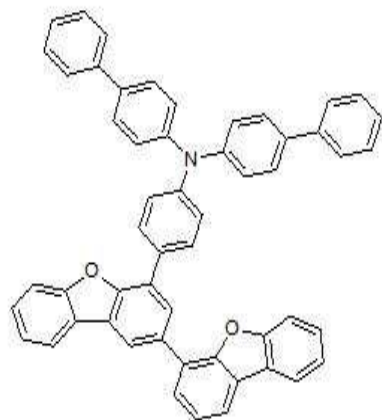
[0162]



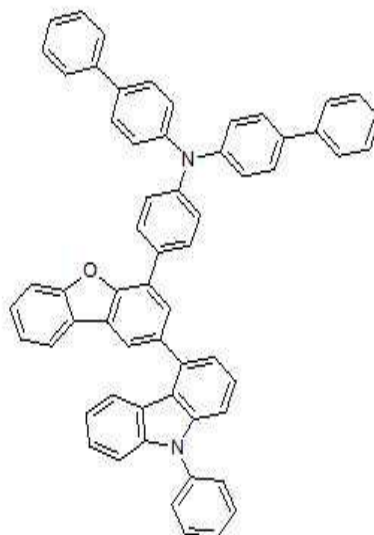
91



92

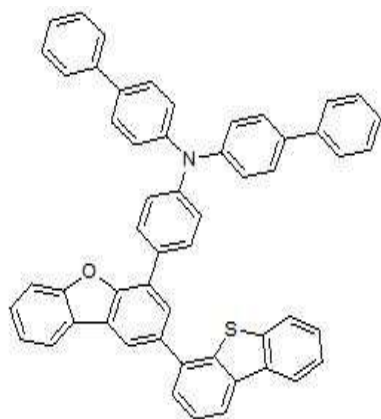


93

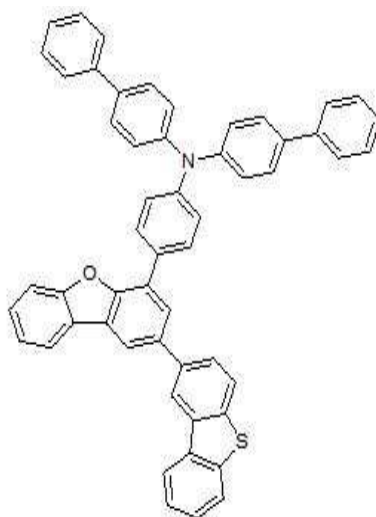


94

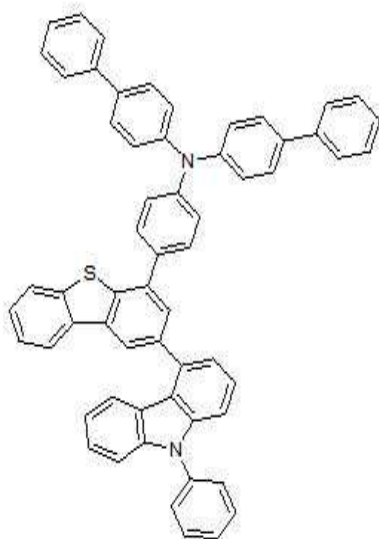
[0163]



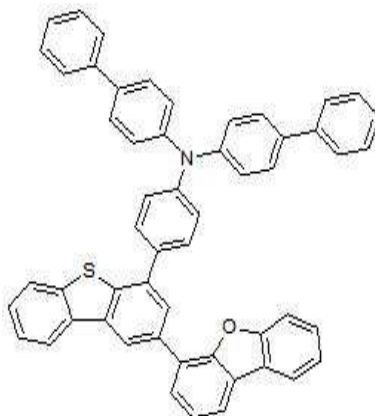
95



96

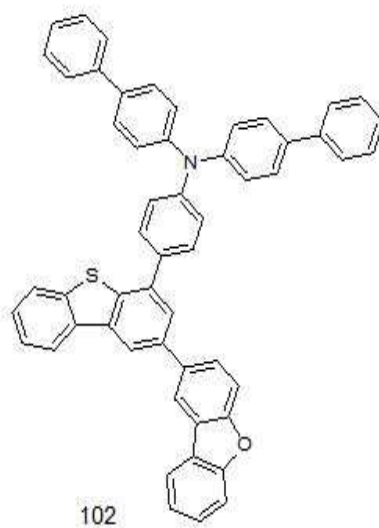
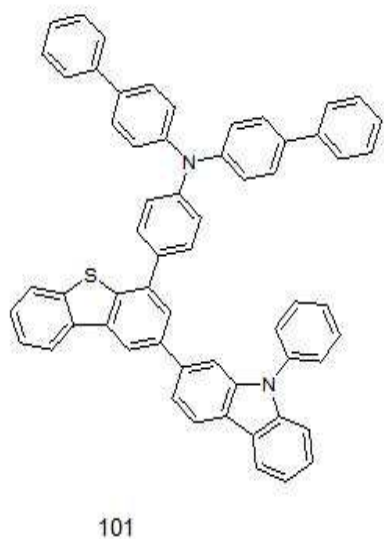
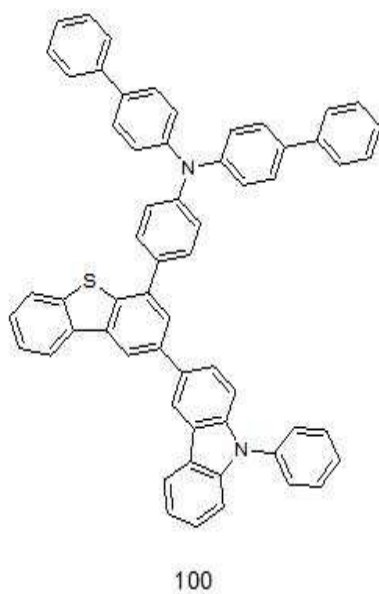
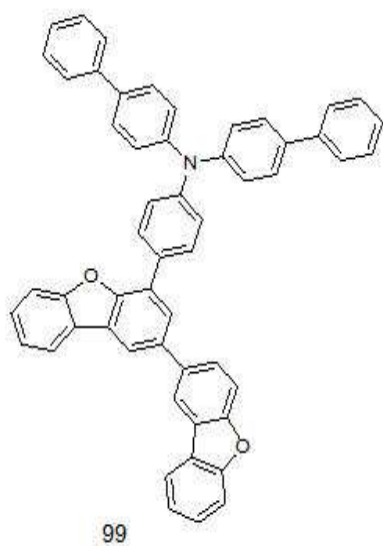


97

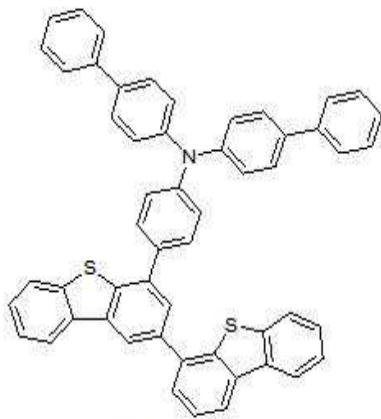


98

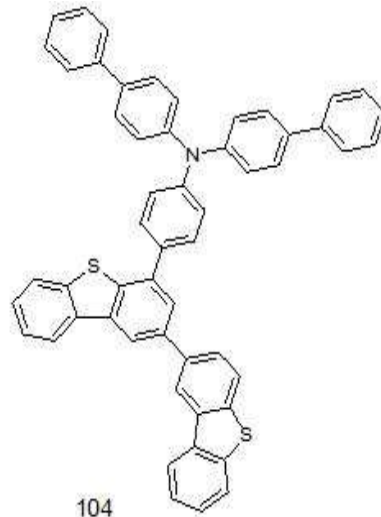
[0164]



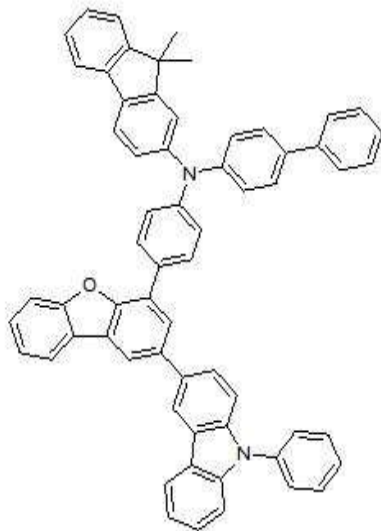
[0165]



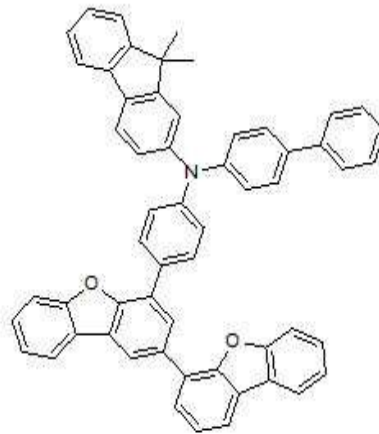
103



104

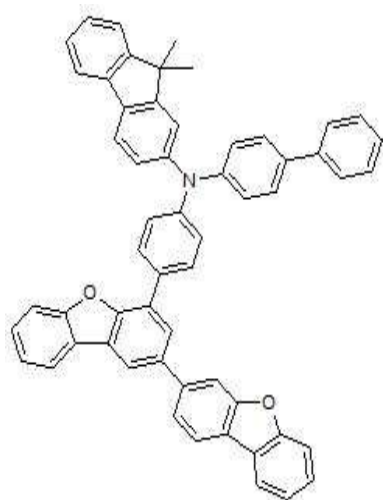


105

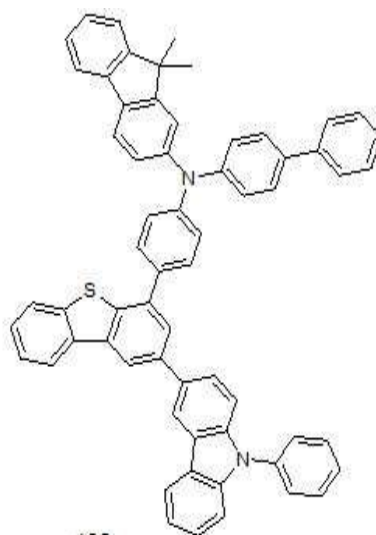


106

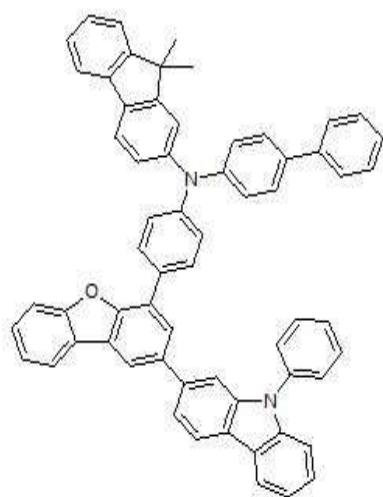
[0166]



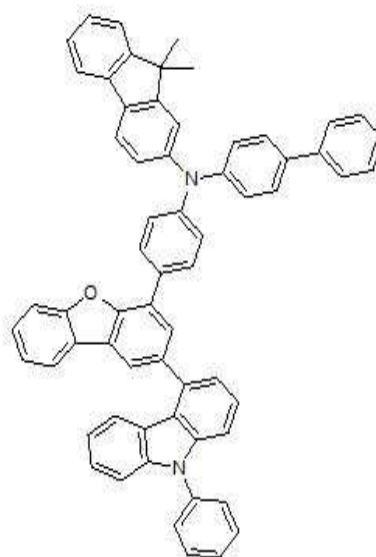
107



108

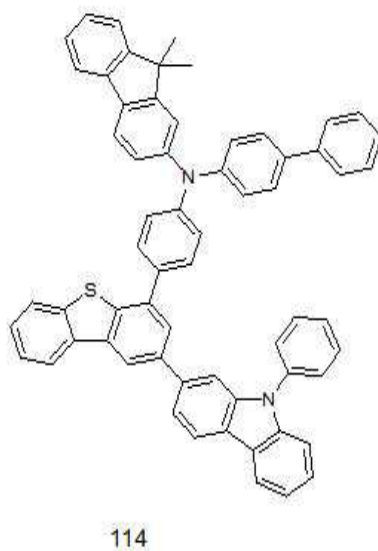
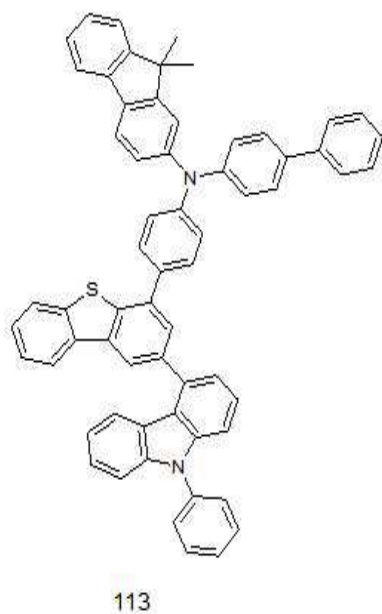
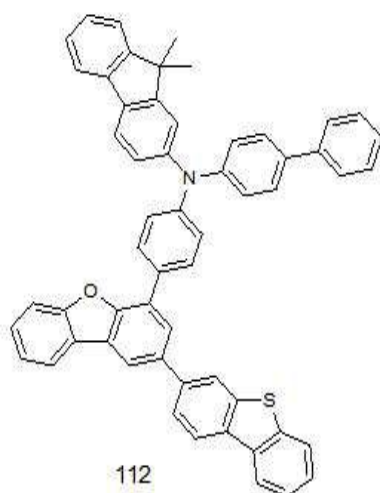
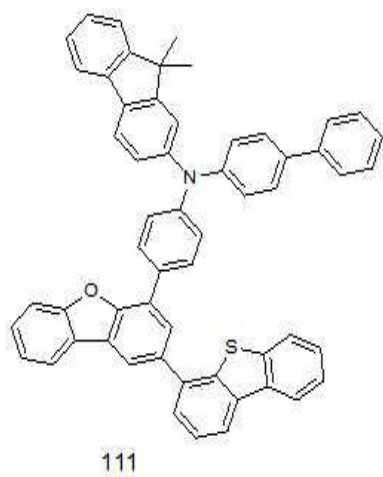


109

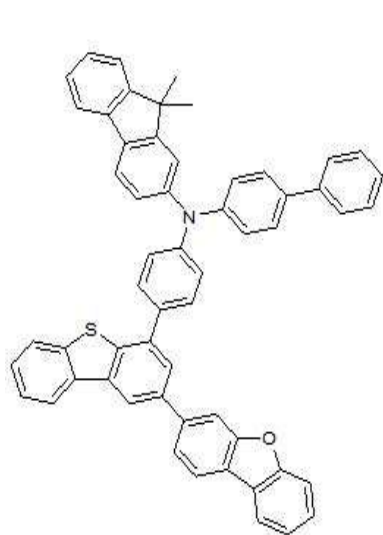


110

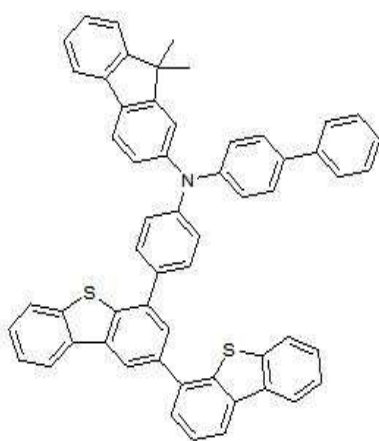
[0167]



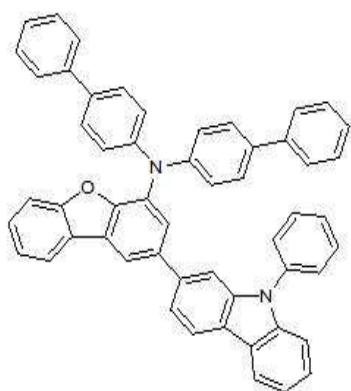
[0168]



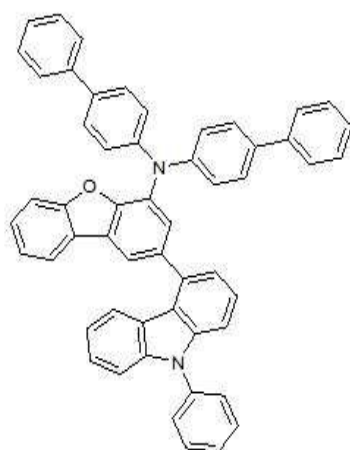
115



116

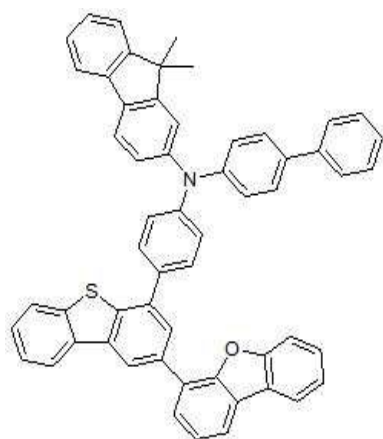


117

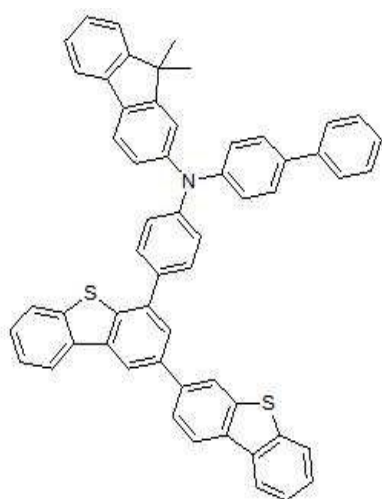


118

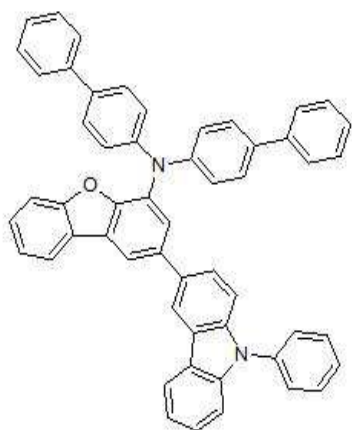
[0169]



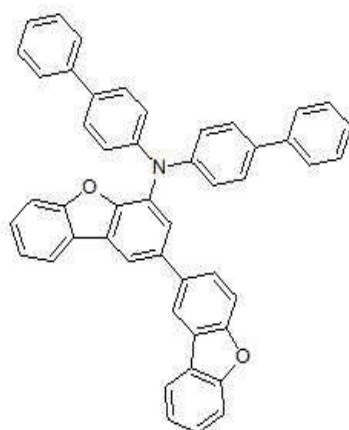
119



120

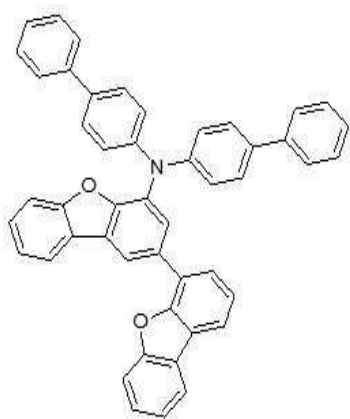


121

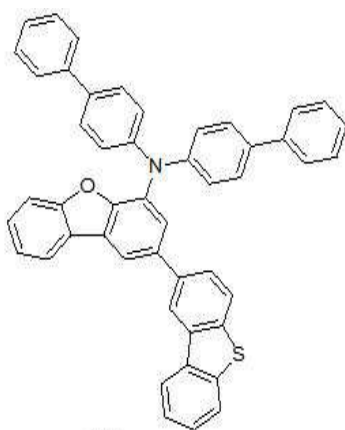


122

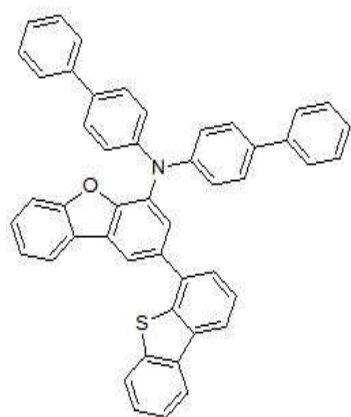
[0170]



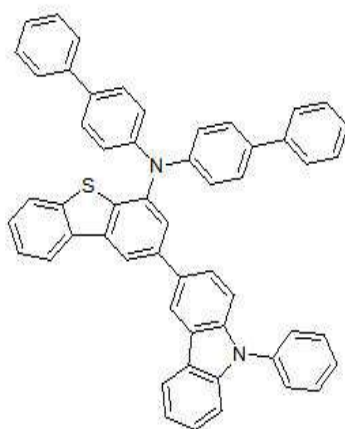
123



124

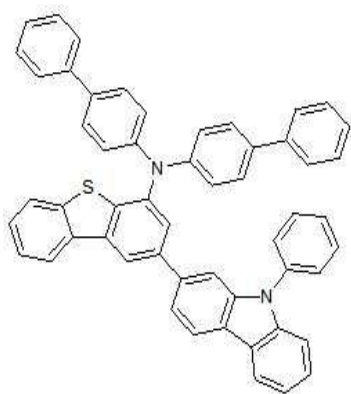


125

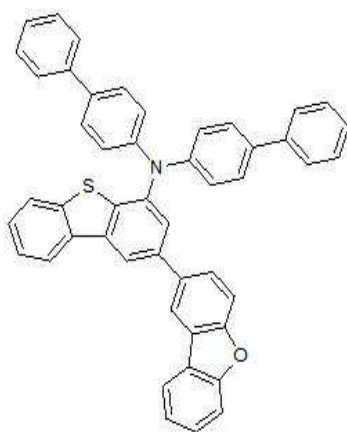


126

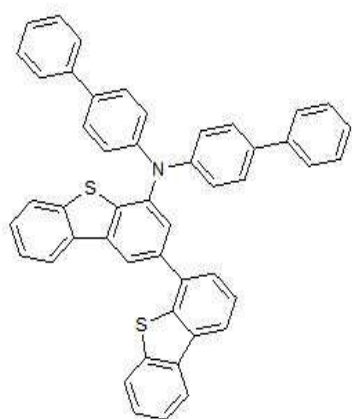
[0171]



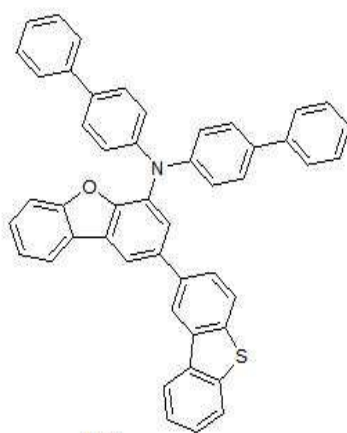
127



128

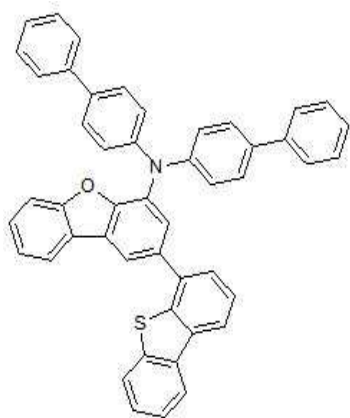


129

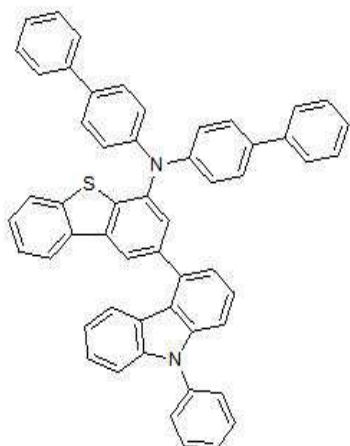


130

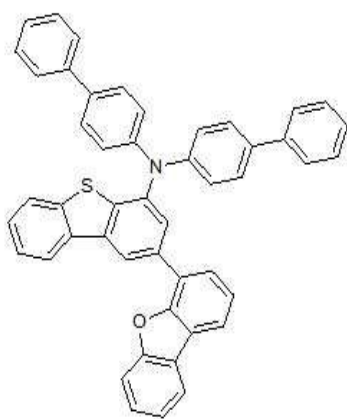
[0172]



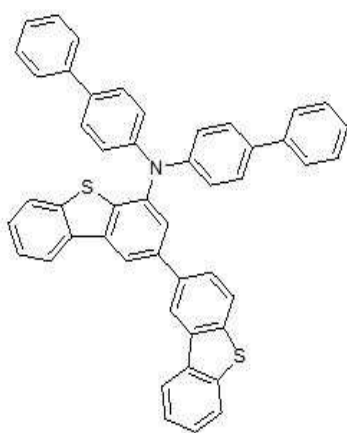
131



132

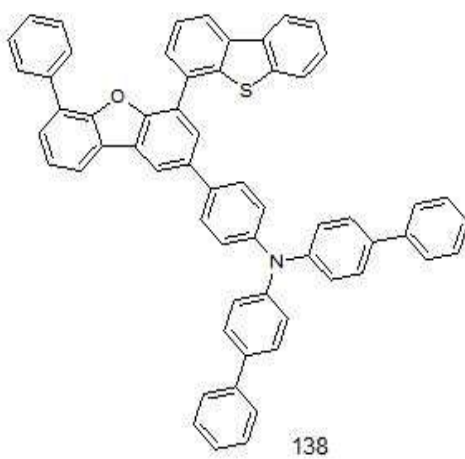
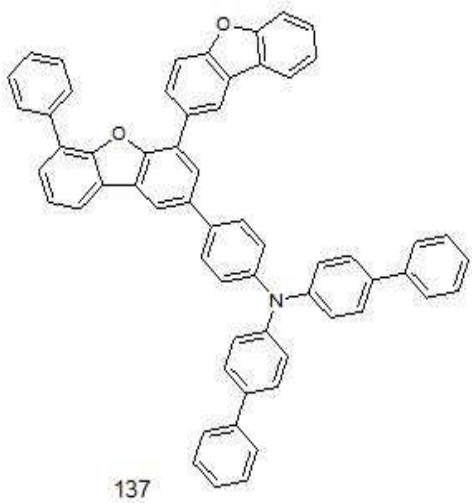
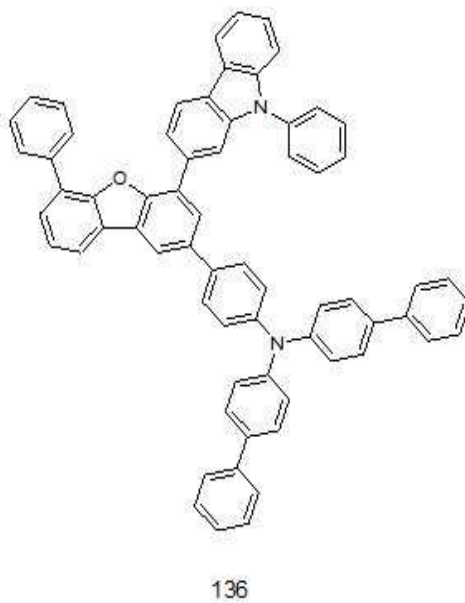
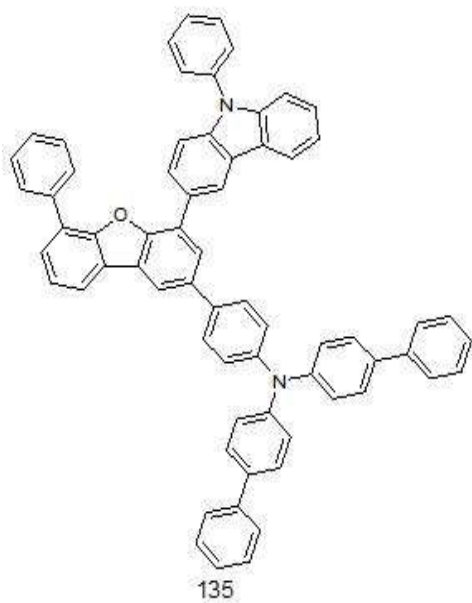


133

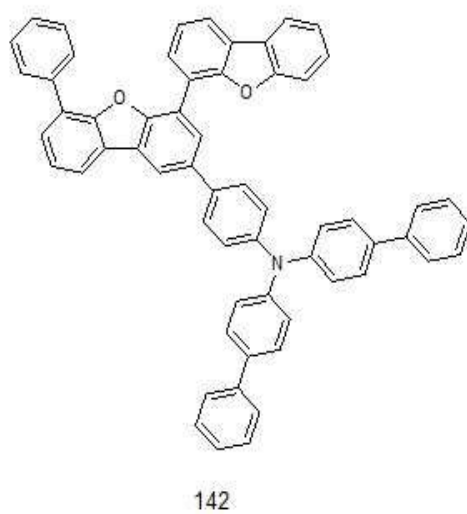
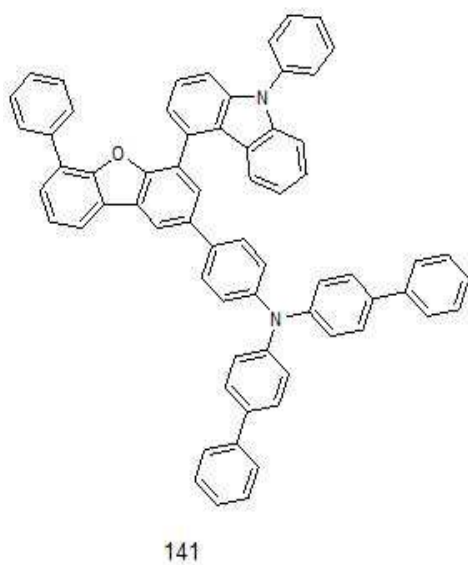
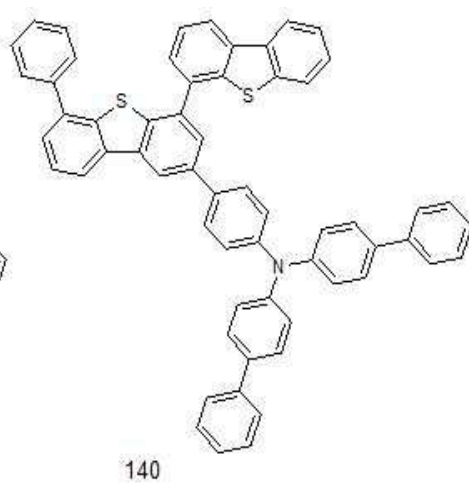
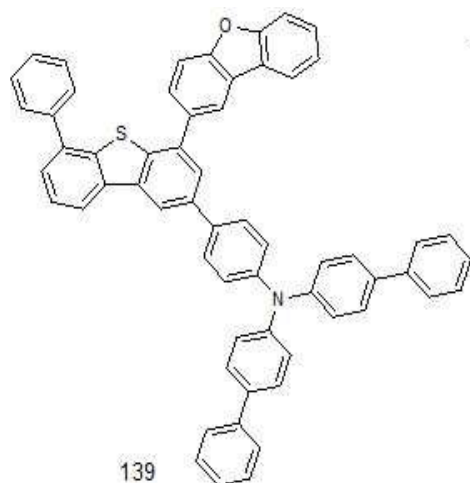


134

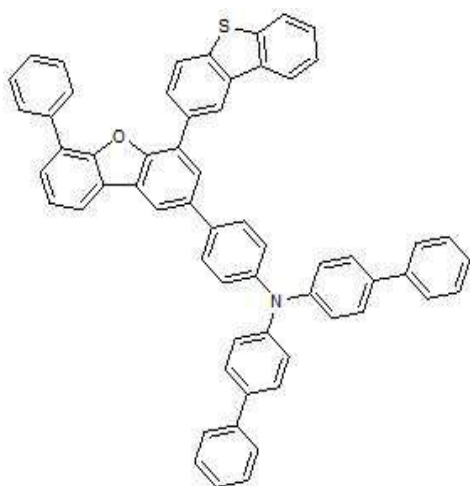
[0173]



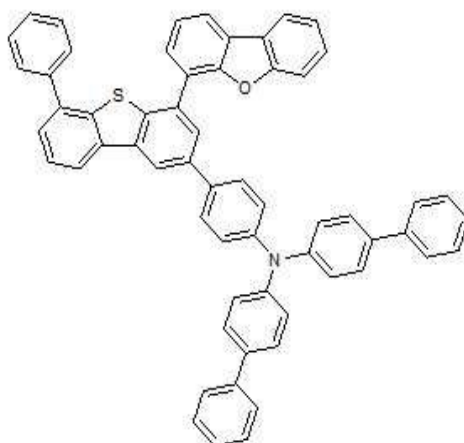
[0174]



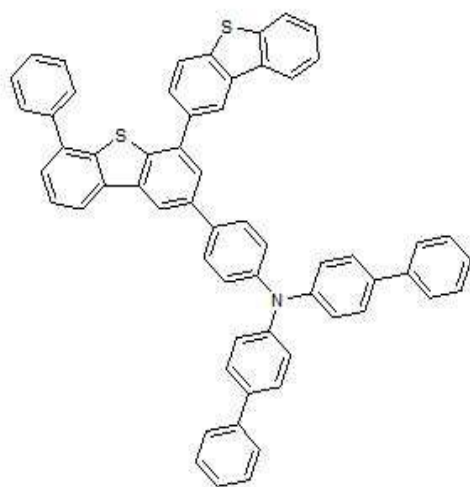
[0175]



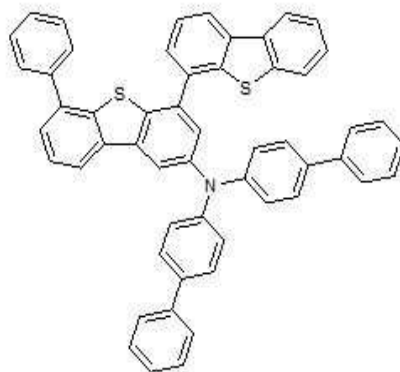
143



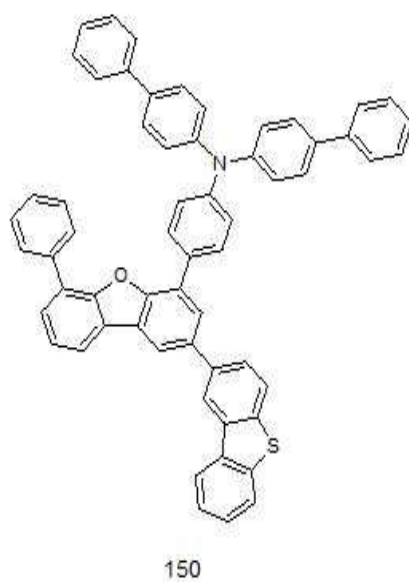
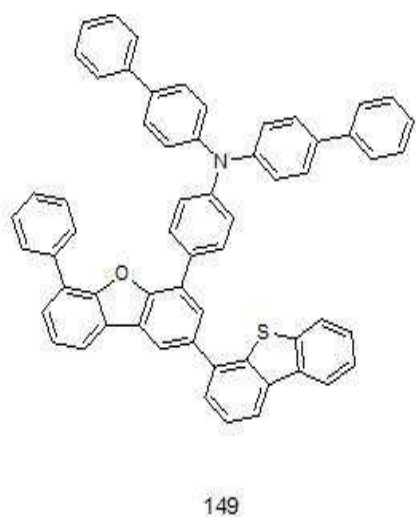
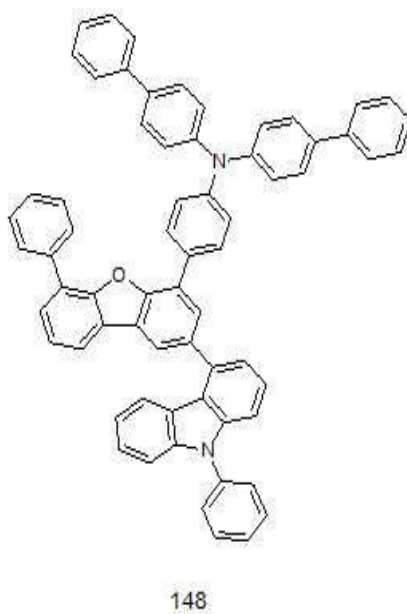
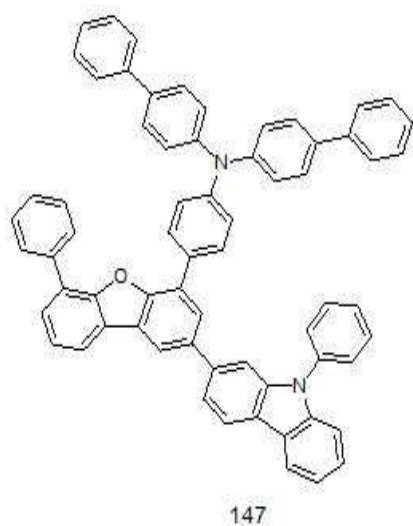
144



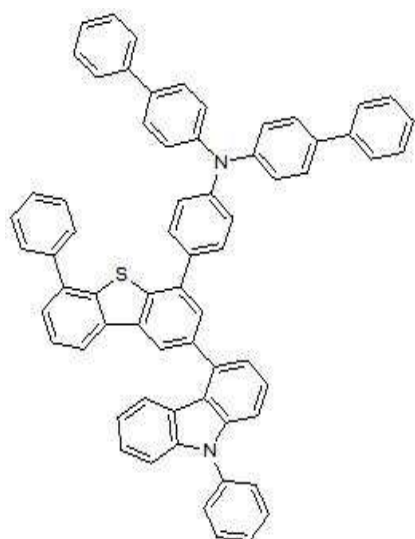
145



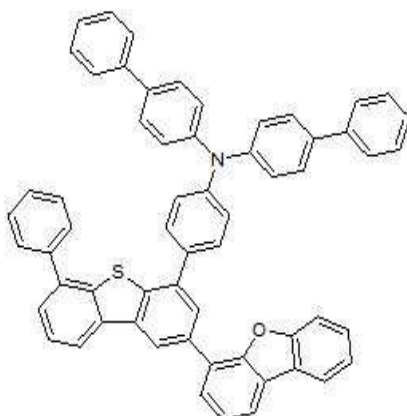
146



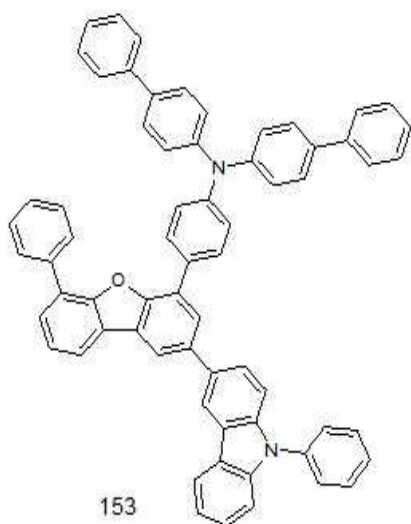
[0176]



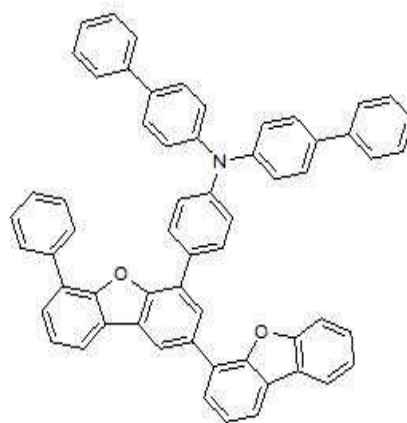
151



152

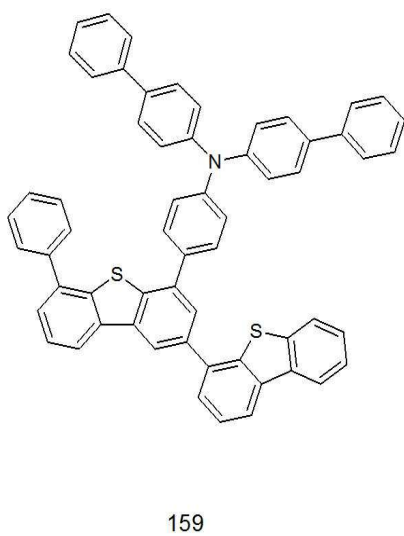
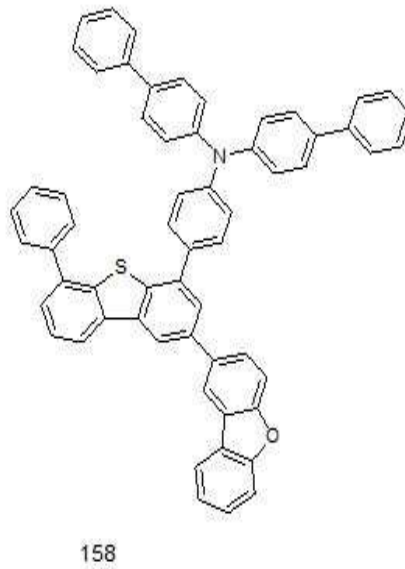
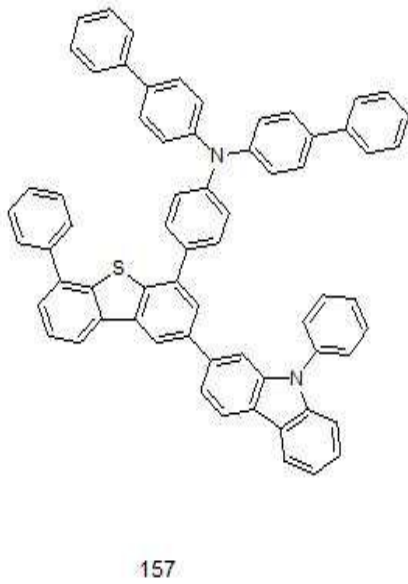
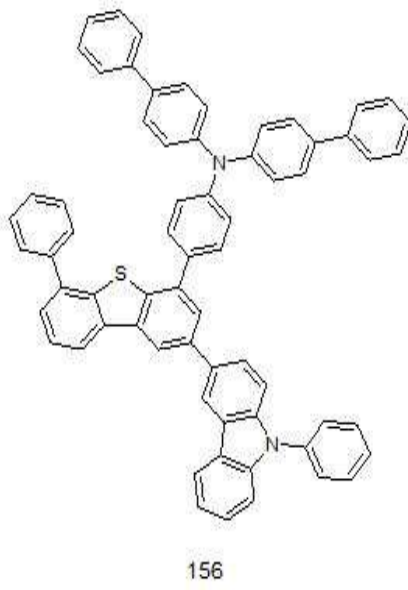
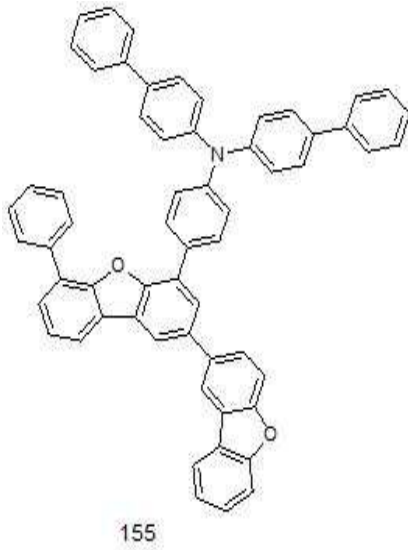


153



154

[0177]



도 1 및 2를 참고하면, 본 발명의 실시예에 따른 유기전계발광소자용 화합물을 포함하는 유기전계발광소자(1)가

제공될 수 있다.

- [0181] 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.
- [0182] 여기서, 상기 단수 또는 복수의 유기물층(130)은 발광층(134)을 포함할 수 있다.
- [0183] 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.
- [0184] 상기 발광층(134)은 호스트와 도펀트를 포함할 수 있다.
- [0185] 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.
- [0186] 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.
- [0187] 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/AIO₂, 알루미늄/리튬, 마그네슘/은 또는 마그네슘/인듐 등도 사용될 수 있다. 음극필름의 두께는 10 내지 200nm 가 바람직하다.
- [0188] 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.
- [0189] 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.
- [0190] 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, 엔아민스티벤계 유도체, 방향족 삼급아민과 스티릴 아민 화합물의 유도체, 및 폴리실란 등을 들 수 있다.
- [0191] 전자 수송 물질로서 diphenylphosphine oxide-4-(triphenylsilyl)phenyl (TSP01), Alq₃, 2,5-디아릴 실롤 유도체(PyPySPyPy), 퍼플루오리네이티드 화합물(PF-6P), Octasubstituted cyclooctatetraene 화합물(COTs)을 들 수 있다.
- [0192] 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.
- [0193] 발광재료로서 예를 들면 촉광 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(Alq_3), 안트라센, 페난트렌, 피렌, 크리센, 페릴렌, 코로넨, 루브렌 및 퀴나크리돈과 같은 폴리아로마틱 화합물, 쿼터페닐과 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, 스틸벤 유도체, 스피로 화합물, 옥사디아졸 화합물 등을 들 수 있다.

[0194] 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.

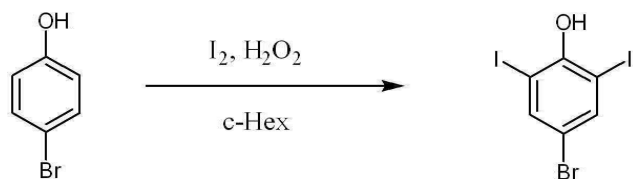
[0195] 본 발명의 따른 유기전계발광소자용 화합물은 진공 증착법에 의하여 형성될 수 있으므로, 박막 형성 공정이 간편하고, 핀홀(pin hole)이 거의 없는 균질한 박막으로 용이하게 얻을 수 있는 장점이 있다.

[0197] [실시예]

[0198] 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.

[0199]

[0200] 제조예 1: 중간체(1) 4-브로모-2,6-다이오도벤젠의 합성

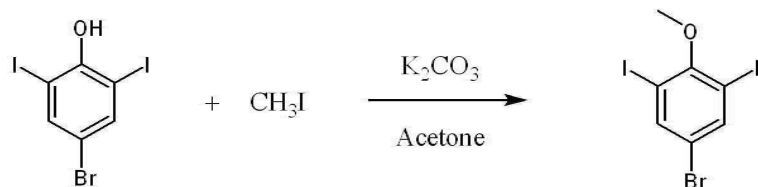


[0201]

[0202] 1L 둥근 바닥 3구 플라스크에 4-브로모페놀 45.5g, 요오드 100g, 34.5% 과산화수소수 77.7g, 시클로헥산 800mL를 넣고 50℃에서 12시간 교반하였다. 반응 완료 후, 소듐티오설파이트 포화용액과 에틸아세테이트로 충분히 분리 후 에틸아세테이트를 감압증류 하여 중간체(1) 106g을 얻었다.(수율 95%)

[0203] MS (ESI) : $[M+H]^+$ 425

[0205] 제조예 2: 중간체(2) 4-브로모-2,6-다이오도아니솔의 합성

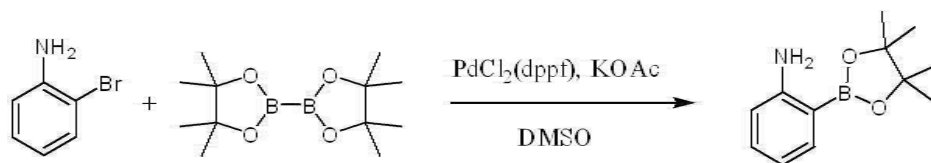


[0206]

[0207] 질소 분위기 하에서 1L 둥근 바닥 3구 플라스크에 중간체(1) 106g, 요오드화메탄 55.4g, 탄산칼륨 71.9g, 아세톤 800mL를 넣고, 환류 하에서 4시간 동안 교반한다. 반응액을 냉각 후 물과 디클로로메탄으로 충분히 분리한 다음 디클로로메탄층을 농축한다. 디클로로메탄과 *n*-헥산 혼합용매로 컬럼크로마토그래피를 실시하여 중간체(2) 64.6g을 얻었다.(수율 59%)

[0208] MS (ESI) : $[M+H]^+$ 439

[0210] 제조예 3: 중간체(3) 2-(4,4,5,5-테트라메틸-1,3,2-디옥사보론-2-일)아닐린의 합성

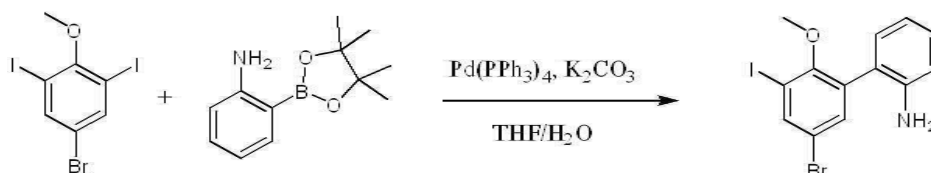


[0211]

[0212] 질소 분위기 하에서 1000mL 둥근 바닥 3구 플라스크에 2-브로모아닐린 39.3g, 비스(피나콜라토)디보론 69.7g, 1.0g, 아세트산칼륨 67.3g, DMSO 600mL를 넣고 85에서 12시간 동안 교반한다. 반응액을 냉각 후 물과 디클로로메탄으로 충분히 분리한 다음 디클로로메탄층을 농축한다. 디클로로메탄과 n-헥산 혼합용매로 컬럼크로마토그래피를 실시하여 중간체(3) 43.5g을 얻었다.(수율 87%)

[0213] MS (ESI) : $[M+H]^+$ 220

[0215] 제조예 4: 중간체(4) 5'-브로모-3'-아이오도-2'-메톡시-[1,1'-비페닐]-2-아민

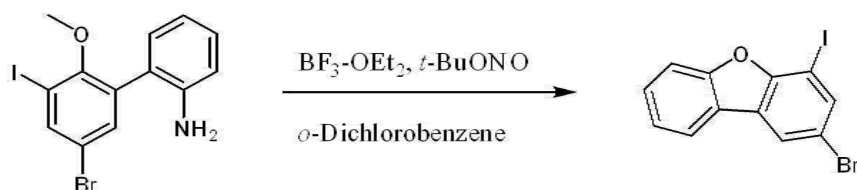


[0216]

[0217] 1000mL 둥근 바닥 3구 플라스크에 중간체(2) 55.9g, 중간체(3) 27.9g, 탄산칼륨 52.8g, THF 600ml, 물 200ml를 넣고 환류 하에서 48시간 교반하였다. 반응액을 냉각 후 물과 디클로로메탄으로 충분히 분리한 다음 디클로로메탄층을 농축한다. 디클로로메탄과 n-헥산 혼합용매로 컬럼크로마토그래피를 실시하여 중간체(4) 20.3g을 얻었다.(수율 39%)

[0218] MS (ESI) : $[M+H]^+$ 404

[0220] 제조예 5: 중간체(5) 2-브로모-4-아이오도디벤조퓨란의 합성

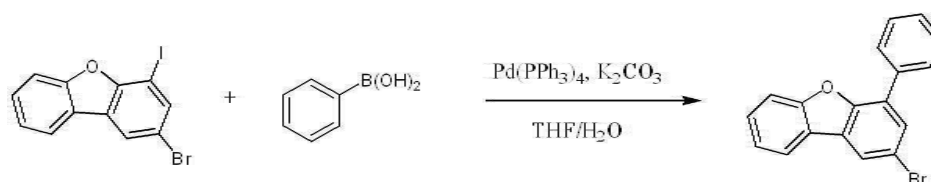


[0221]

[0222] 질소 분위기 하에서 250mL 둥근 바닥 3구 플라스크에 중간체(4) 20.0g, 보론트리플로라이드-디에틸에테르 10.5g, o-디클로로벤젠 100ml를 넣고 상온에서 1시간 교반한다. 반응액을 0℃ 이하로 냉각 후 부틸니트라이트 6.1g을 서서히 적가한 다음 0℃에서 1시간 교반한다. 적가 종료 후 105℃에서 12시간 교반 후 실리카겔 여과, 농축한 다음 n-헥산으로 컬럼크로마토그래피 실시하여 중간체(5) 17.0g을 얻었다. (수율 92%)

[0223] MS (ESI) : $[M+H]^+$ 373

[0225] 제조예 6: 중간체(6) 2-브로모-4-페닐디벤조퓨란의 합성

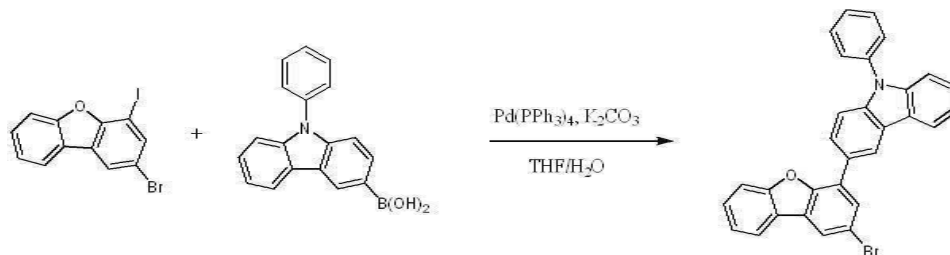


[0226]

[0227] 질소 분위기 하에서 500ml 둥근바닥 3구 플라스크에 중간체(5) 8.3g, 페닐 보론산 3.0g, 탄산 칼륨 9.2g, 테트라키스트리페닐포스핀팔라듐(0) 0.8g 및 테트라하이드로퓨란 180ml, 물 60ml를 넣고 48시간 동안 환류시켜 주었다. 반응액을 냉각한 후 디클로로메탄과 물로 추출하고, 추출된 용액을 농축하였다. 디클로로메탄과 n-헥산 혼합용매로 컬럼크로마토그래피를 실시한 용액을 농축하여 중간체(6) 4.2g을 얻었다. (수율 59%)

[0228] MS (ESI) : $[M+H]^+$ 323

[0230] 제조예 7: 중간체(7) 3-(2-브로모디벤조퓨란-4-일)-9-페닐-9H-카바졸의 합성

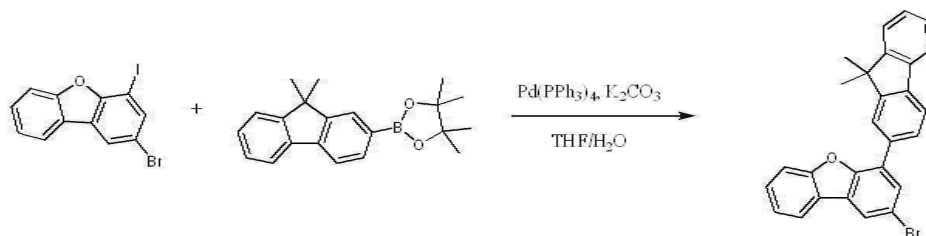


[0231]

[0232] 질소 분위기 하에서 100ml 둥근바닥 3구 플라스크에 중간체 (5) 1.6g, (3-(9H-카바졸-9-일)페닐)보론산 1.2g, 탄산 칼륨 1.8g, 테트라키스트리페닐포스핀팔라듐(0) 0.2g 및 테트라하이드로퓨란 45ml, 물 15ml를 넣고 18시간 동안 환류시켜 주었다. 반응액을 냉각한 후 디클로로메탄과 물로 추출하고, 추출된 용액을 농축하였다. 에틸아세테이트와 n-헥산 혼합용매로 컬럼크로마토그래피를 실시한 용액을 농축하여 중간체(7) 1.3g을 얻었다. (수율 61%)

[0233] MS (ESI) : $[M+H]^+$ 488

[0235] 제조예 8: 중간체(8) 2-브로모-4-(9,9-디메틸-9H-플루오렌-2-일)디벤조퓨란의 합성

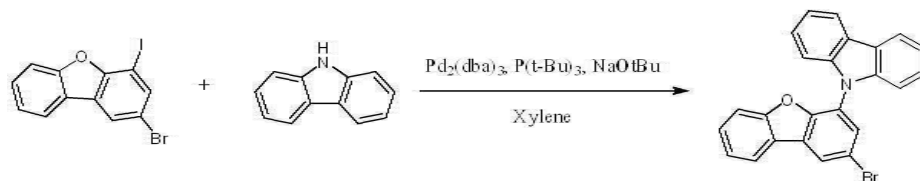


[0236]

[0237] 질소 분위기 하에서 100ml 둥근바닥 3구 플라스크에 중간체 (5) 2.0g, 2-(9,9-디메틸-9H-플루오렌-2-일)-4,4,5,5-테트라메틸-1,3,2-디옥사보레인 1.7g, 탄산 칼륨 2.2g, 테트라키스트리페닐포스핀팔라듐(0) 0.2g 및 테트라하이드로퓨란 45ml, 물 15ml를 넣고 48시간 동안 환류시켜 주었다. 반응액을 냉각한 후 디클로로메탄과 물로 추출하고, 추출된 용액을 농축하였다. 디클로로메탄과 n-헥산 혼합용매로 컬럼크로마토그래피를 실시한 용액을 농축하여 중간체(8) 1.5g을 얻었다. (수율 63%)

[0238] MS (ESI) : $[M+H]^+$ 440

[0240] 제조예 9: 중간체(9) 9-(2-브로모디벤조퓨란-4-일)-9H-카바졸의 합성



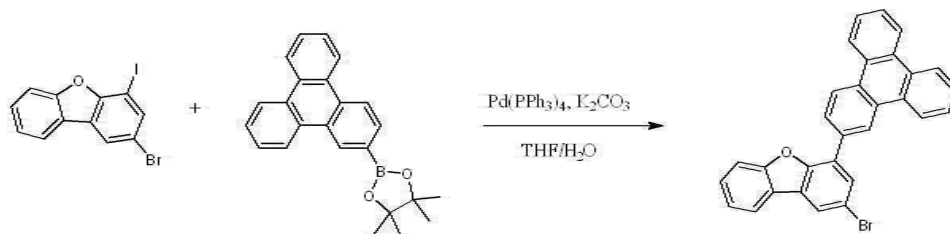
[0241]

[0242] 질소 분위기 하에서 100ml 둥근바닥 3구 플라스크에 중간체(5) 2.0g, 9H-카바졸 1.0g, 트리스디벤질리딘디팔라

듬 0.2g, 50% 트리스(tert-부틸)포스핀 0.4g, 소듐 t-부톡사이드 2.0g 및 자일렌 30ml를 넣고 48시간 동안 환류시켜 주었다. 반응액을 냉각한 후 디클로로메탄과 물로 추출하고, 추출된 용액을 농축하였다. 에틸아세테이트와 n-헥산 혼합용매로 컬럼크로마토그래피를 실시한 용액을 농축하여 중간체(9) 0.8g을 얻었다. (수율 36%)

MS (ESI) : $[M+H]^+$ 412

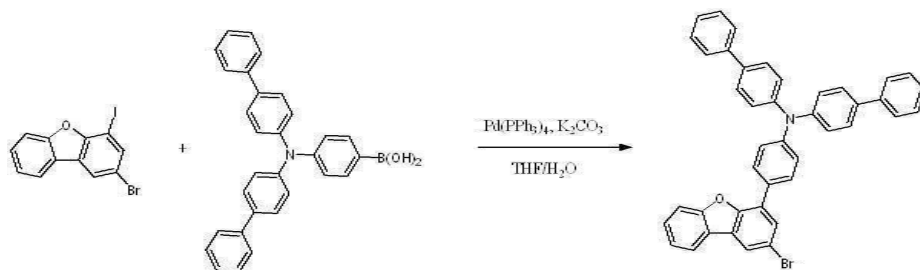
제조예 10: 중간체(10) 9-(2-브로모디벤조퓨란-4-일)-9H-카바졸의 합성



질소 분위기 하에서 100ml 둥근바닥 3구 플라스크에 중간체(5) 2.0g, 4,4,5,5-테트라메틸-2-(트리페닐렌-2-일)-1,3,2-디옥사보레인 1.9g, 탄산 칼륨 2.2g, 테트라키스트리페닐포스핀팔라듐(0) 0.2g 및 테트라하이드로퓨란 45ml, 물 15ml를 넣고 48시간 동안 환류시켜 주었다. 반응액을 냉각한 후 디클로로메탄과 물로 추출하고, 추출된 용액을 농축하였다. 에틸아세테이트와 n-헥산 혼합용매로 컬럼크로마토그래피를 실시한 용액을 농축하여 중간체(10) 1.4g을 얻었다. (수율 55%)

MS (ESI) : $[M+H]^+$ 473

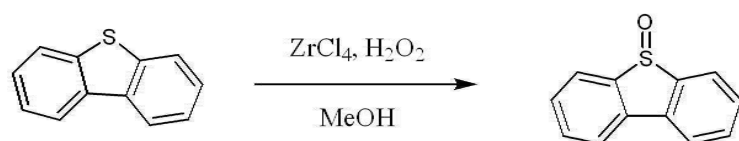
제조예 11: 중간체(11) N-([1,1'-비페닐]-4-일)-N-(4-(2-브로모디벤조퓨란-4-일)페닐)-[1,1'-비페닐]-4-아민의 합성



질소 분위기 하에서 100ml 둥근바닥 3구 플라스크에 중간체(5) 1.8g, (4-(디([1,1'-비페닐]-4-일)아미노)페닐)보론산 2.1g, 탄산 칼륨 2.0g, 테트라키스트리페닐포스핀팔라듐(0) 0.2g 및 테트라하이드로퓨란 45ml, 물 15ml를 넣고 18시간 동안 환류시켜 주었다. 반응액을 냉각한 후 디클로로메탄과 물로 추출하고, 추출된 용액을 농축하였다. 디클로로메탄과 n-헥산 혼합용매로 컬럼크로마토그래피를 실시한 용액을 농축하여 중간체(11) 1.9g을 얻었다. (수율 63%)

MS (ESI) : $[M+H]^+$ 642

제조예 12: 중간체(12) 디벤조티오펜-5-옥사이드의 합성

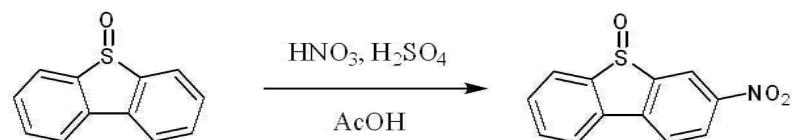


질소 분위기 하에서 2000mL 둥근 바닥 3구 플라스크에 디벤조티오펜 36.8g, 34.5% 과산화수소수 138g, 메탄올 1500ml를 넣고, 0℃로 유지한다. 반응액에 염화지르코늄(IV) 93.2g을 나누어 서서히 투입한 다음 상온에서 2시

간 교반한다. 반응 종료 후 실리카겔 여과, 농축한 다음 디클로로메탄으로 컬럼크로마토그래피 실시하여 중간체 (12) 17.5g을 얻었다. (수율 44%)

[0258] MS (ESI) : $[M+H]^+$ 201

[0260] 제조예 13: 중간체(13) 3-니트로벤조티오펜-5-옥사이드의 합성

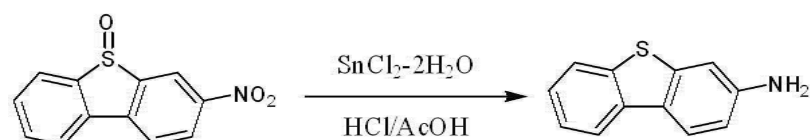


[0261]

[0262] 질소 분위기 하에서 500mL 둥근 바닥 3구 플라스크에 중간체(11) 16.8g, 아세트산 58.8g, 황산 199g을 넣고, 0℃로 유지한다. 반응액에 70% 질산용액 18g을 서서히 적가한 다음 5℃ 이하에서 1시간 교반한다. 반응 종료 후 물을 투입하여 결정을 생성한 다음 필터하여 중간체(13) 18.0g을 얻었다. (수율 87%)

[0263] MS (ESI) : $[M+H]^+$ 246

[0265] 제조예 14: 중간체(14) 디벤조티오펜-3-아민의 합성

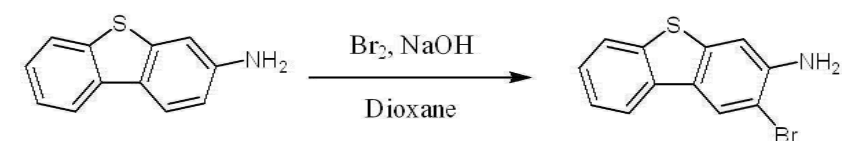


[0266]

[0267] 질소 분위기 하에서 500mL 둥근 바닥 3구 플라스크에 중간체(12) 18.0g, 아세트산 180g, 35% 염화주석(II)수화물 108g을 넣고 상온에서 교반한다. 반응액에 35% 염산 120ml를 서서히 적가한 다음 상온에서 24시간 교반한다. 반응 종료 후 수산화나트륨 용액과 에틸아세테이트로 추출하고, 추출된 용액을 농축하여 중간체(14) 12.6g을 얻었다. (수율 86%)

[0268] MS (ESI) : $[M+H]^+$ 200

[0270] 제조예 15: 중간체(15) 2-브로모디벤조티오펜-3-아민의 합성

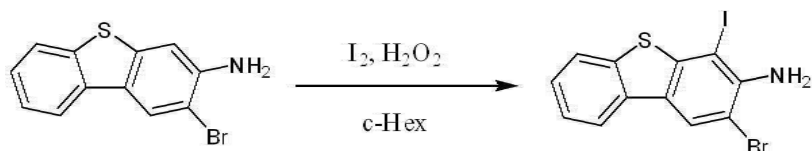


[0271]

[0272] 질소 분위기 하에서 250mL 둥근 바닥 3구 플라스크에 중간체(13) 12.0g, 2N 수산화나트륨 용액 23ml, Dioxane 175ml를 넣고 0℃에서 브롬 7.3g을 서서히 적가한다. 적가 종료 후 상온에서 24시간 교반한 다음 디클로로메탄과 물로 추출하고, 추출된 용액을 농축한다. 농축한 다음 에틸아세테이트와 n-헥산 혼합용매로 컬럼크로마토그래피 실시하여 중간체(15) 6.2g을 얻었다. (수율 37%)

[0273] MS (ESI) : $[M+H]^+$ 278

[0275] 제조예 16: 중간체(16) 2-브로모-4-아이오도디벤조티오펜-3-아민의 합성

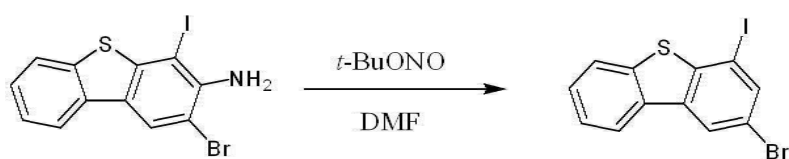


[0276]

[0277] 100ml 둥근 바닥 3구 플라스크에 중간체(14) 5.6g, 요오드 5.1g, 34.5% 과산화수소수 2.0g, 시클로헥산 50mL를 넣고 50℃에서 24시간 교반하였다. 반응 완료 후, 소듐티오설파이트 포화용액과 에틸아세테이트로 충분히 후 에틸아세테이트층을 감압증류 하여 중간체(16) 6.5g을 얻었다. (수율 81%)

[0278] MS (ESI) : $[M+H]^+$ 404

[0280] 제조예 17: 중간체(17) 2-브로모-4-아이오도디벤조티오펜의 합성

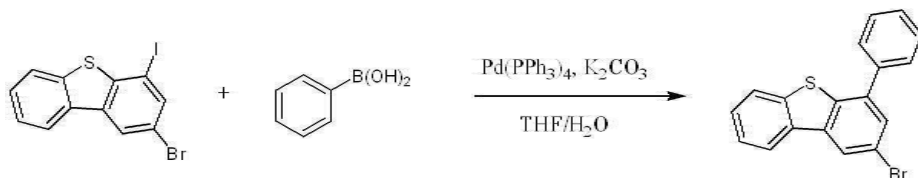


[0281]

[0282] 250ml 둥근 바닥 3구 플라스크에 t-부틸니트라이트 3.8g을 DMF 52ml에 넣고 50℃를 유지한다. 여기에 중간체(15) 6.0g과 DMF 52ml를 적가한 다음 50℃에서 48시간 교반한다. 반응용액을 냉각하여 디클로로메탄과 물로 추출하고, 추출된 용액을 농축한다. 농축한 다음 n-헥산으로 컬럼크로마토그래피 실시하여 중간체(16) 2.2g을 얻었다. (수율 38%)

[0283] MS (ESI) : $[M+H]^+$ 389

[0285] 제조예 18: 중간체(18) 2-브로모-4-페닐디벤조티오펜의 합성

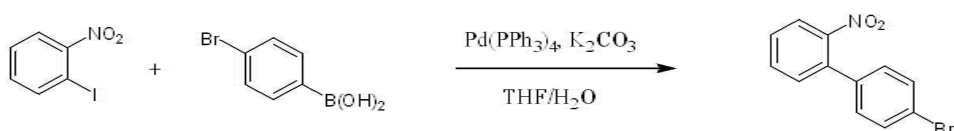


[0286]

[0287] 질소 분위기 하에서 100ml 둥근바닥 3구 플라스크에 중간체(16) 2.2g, 페닐 보론산 0.7g, 탄산 칼륨 2.3g, 테트라키스트리페닐포스핀팔라듐(0) 0.2g 및 테트라하이드로퓨란 50ml, 물 17ml를 넣고 48시간 동안 환류시켜 주었다. 반응용액을 냉각한 후 디클로로메탄과 물로 추출하고, 추출된 용액을 농축하였다. 디클로로메탄과 n-헥산 혼합용매로 컬럼크로마토그래피를 실시한 용액을 농축하여 중간체(18) 1.0g을 얻었다. (수율 52%)

[0288] MS (ESI) : $[M+H]^+$ 339

[0289] 제조예 19: 중간체(19) 4-브로모-2'-니트로-1,1'-바이페닐의 합성



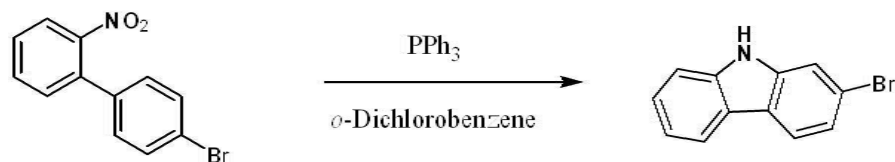
[0290]

[0291] 질소 분위기 하에서 250mL 둥근 바닥 3구 플라스크에 2-아이오도-1-니트로벤젠 10.0g, 4-브로모페닐보론산 8.1g, 탄산 칼륨 16.7g, 테트라키스트리페닐포스핀팔라듐(0) 1.4g 및 테트라하이드로퓨란 180ml, 물 60ml를 넣고 12시간 동안 환류시켜 주었다. 반응용액을 냉각한 후 디클로로메탄과 물로 추출하고, 추출된 용액을 농축하였다. 디클로로메탄과 n-헥산 혼합용매로 컬럼크로마토그래피를 실시한 용액을 농축하여 중간체(19) 10.5g을 얻었다.

다. (수율 94%)

[0292] MS (ESI) : $[M+H]^+$ 278

[0294] 제조예 20: 중간체(20) 2-브로모-9H-카바졸의 합성

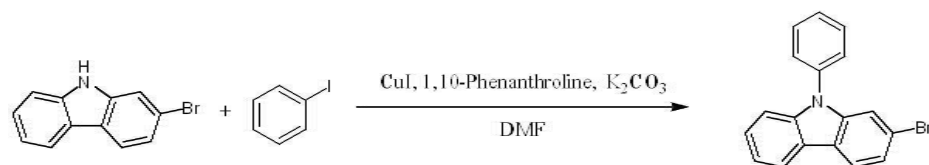


[0295]

[0296] 질소 분위기 하에서 250mL 둥근 바닥 3구 플라스크에 중간체(19) 10.5g, 트리페닐포스핀 24.8g 및 *o*-디클로로벤젠 230ml를 넣고 180℃에서 18시간 동안 교반하였다. 반응액을 농축 후 디클로로메탄과 *n*-헥산 혼합용매로 컬럼 크로마토그래피를 실시하여 중간체(20) 4.2g을 얻었다. (수율 45%)

[0297] MS (ESI) : $[M+H]^+$ 246

[0299] 제조예 21: 중간체(21) 2-브로모-9-페닐-9H-카바졸의 합성

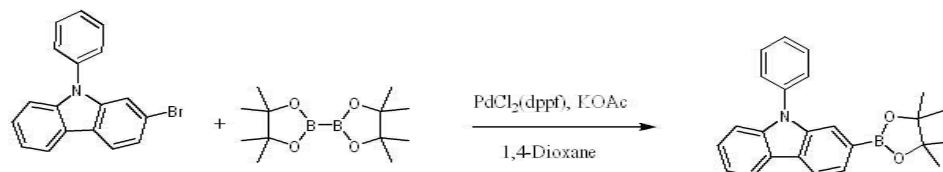


[0300]

[0301] 질소 분위기 하에서 100mL 둥근 바닥 3구 플라스크에 중간체(20) 4.2g, 아이오도벤젠 5.2g, 요오드화구리 0.3g, 1,10-페난트롤린 0.3g, 탄산 칼륨 7.1g 및 디메틸포름아마이드 50ml를 넣고 80℃에서 24시간 반응시켰다. 반응액을 냉각한 후 디클로로메탄과 물로 추출하고, 추출된 용액을 농축하였다. 디클로로메탄과 *n*-헥산 혼합용매로 컬럼크로마토그래피를 실시한 용액을 농축하여 중간체(21) 4.8g을 얻었다. (수율 81%)

[0302] MS (ESI) : $[M+H]^+$ 322

[0304] 제조예 22: 중간체(22) 9-페닐-2-(4,4,5,5-테트라메틸-1,3,2-디옥사보로란-2-일)-9H-카바졸의 합성

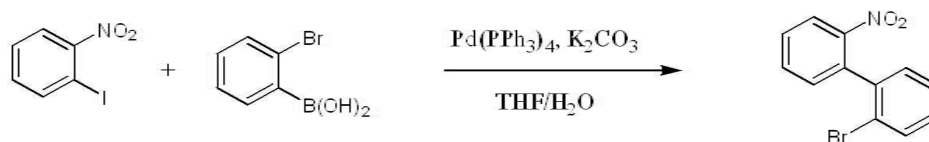


[0305]

[0306] 질소 분위기 하에서 100mL 둥근 바닥 3구 플라스크에 중간체(21) 2.0g, 비스(피나콜라토)디보론 2.4g, 아세트산 칼륨 1.8g, 1,4-디옥산 60mL를 넣고 100에서 12시간 동안 교반한다. 반응액을 냉각 후 물과 디클로로메탄으로 충분히 분리한 다음 디클로로메탄층을 농축한다. 디클로로메탄과 *n*-헥산 혼합용매로 컬럼크로마토그래피를 실시하여 중간체(22) 1.5g을 얻었다. (수율 63%)

[0307] MS (ESI) : $[M+H]^+$ 369

[0309] 제조예 23: 중간체(23) 2-브로모-2'-니트로-1,1'-바이페닐의 합성

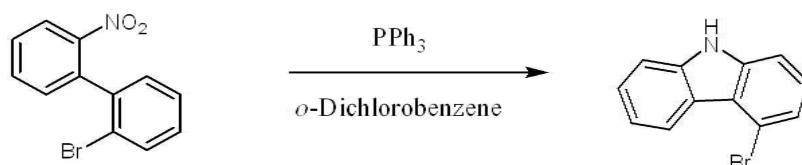


[0310]

[0311] 질소 분위기 하에서 250mL 둥근 바닥 3구 플라스크에 2-아이오도-1-니트로벤젠 7.0g, 2-브로모페닐보론산 5.6g, 탄산 칼륨 5.9g, 테트라키스트리페닐포스핀팔라듐(0) 0.5g 및 테트라하이드로퓨란 120ml, 물 40ml를 넣고 24시간 동안 환류시켜 주었다. 반응액을 냉각한 후 디클로로메탄과 물로 추출하고, 추출된 용액을 농축하였다. 디클로로메탄과 n-헥산 혼합용매로 컬럼크로마토그래피를 실시한 용액을 농축하여 중간체(23) 7.2g을 얻었다. (수율 92%)

[0312] MS (ESI) : $[M+H]^+$ 278

[0314] 제조예 24: 중간체(24) 4-브로모-9H-카바졸의 합성

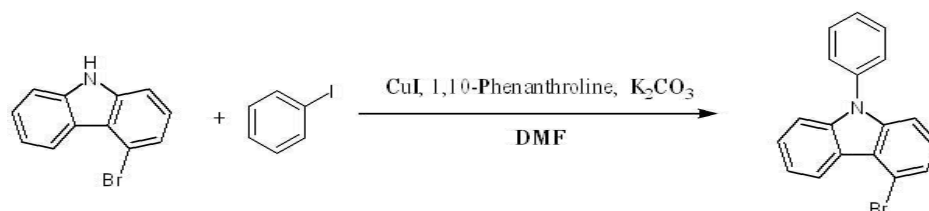


[0315]

[0316] 질소 분위기 하에서 250mL 둥근 바닥 3구 플라스크에 중간체(22) 7.2g, 트리페닐포스핀 6.8g 및 o-디클로로벤젠 160ml를 넣고 180℃에서 18시간 동안 교반하였다. 반응액을 농축 후 디클로로메탄과 n-헥산 혼합용매로 컬럼크로마토그래피를 실시하여 중간체(24) 2.6g을 얻었다. (수율 86%)

[0317] MS (ESI) : $[M+H]^+$ 246

[0319] 제조예 25: 중간체(25) 4-브로모-9-페닐-9H-카바졸의 합성

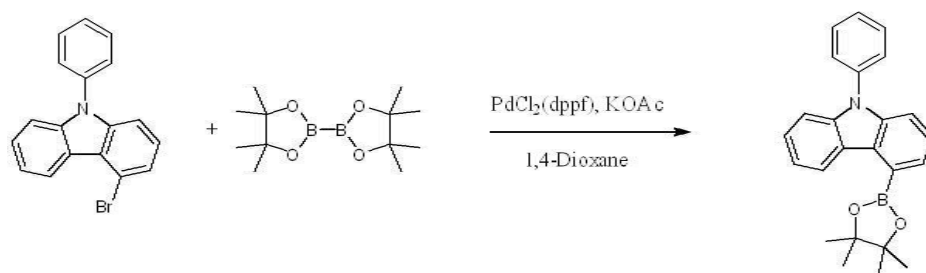


[0320]

[0321] 질소 분위기 하에서 100mL 둥근 바닥 3구 플라스크에 중간체(24) 2.6g, 아이오도벤젠 2.6g, 요오드화구리 0.2g, 1,10-페난트롤린 0.2g, 탄산 칼륨 4.4g 및 디메틸포름아마이드 30ml를 넣고 80℃에서 24시간 반응시켰다. 반응액을 냉각한 후 디클로로메탄과 물로 추출하고, 추출된 용액을 농축하였다. 디클로로메탄과 n-헥산 혼합용매로 컬럼크로마토그래피를 실시한 용액을 농축하여 중간체(25) 2.7g을 얻었다. (수율 81%)

[0322] MS (ESI) : $[M+H]^+$ 322

[0324] 제조예 26: 중간체(26) 9-페닐-4-(4,4,5,5-테트라메틸-1,3,2-디옥사보로란-2-일)-9H-카바졸의 합성



[0326]

[0327]

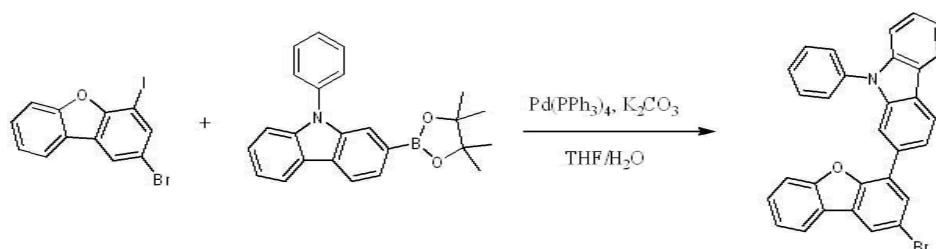
질소 분위기 하에서 100mL 둥근 바닥 3구 플라스크에 중간체(26) 2.6g, 비스(피나콜라토)디보론 3.1g, 아세트산 칼륨 2.2g, 1,4-디옥산 80mL를 넣고 100에서 12시간 동안 교반한다. 반응액을 냉각 후 물과 디클로로메탄으로 층분리한 다음 디클로로메탄층을 농축한다. 디클로로메탄과 n-헥산 혼합용매로 컬럼크로마토그래피를 실시하여 중간체(26) 1.8g을 얻었다. (수율 59%)

[0328]

MS (ESI) : $[M+H]^+$ 369

[0330]

제조예 27: 중간체(27) 2-(2-브로모디벤조퓨란-4-일)-9-페닐-9H-카바졸의 합성



[0331]

[0332]

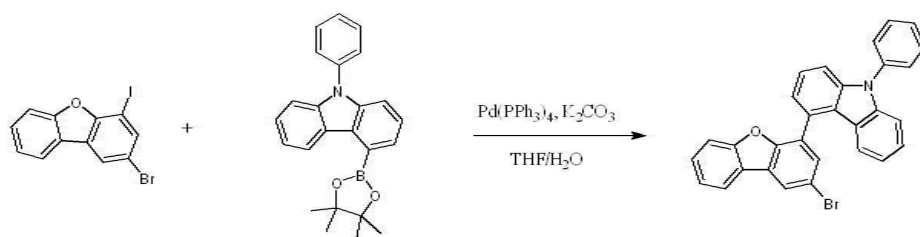
질소 분위기 하에서 100ml 둥근바닥 3구 플라스크에 중간체 (5) 1.5g, 중간체(22) 1.5g, 탄산 칼륨 1.6g, 테트라키스트리페닐포스핀팔라듐(0) 0.2g 및 테트라하이드로퓨란 45ml, 물 15ml를 넣고 18시간 동안 환류시켜 주었다. 반응액을 냉각한 후 디클로로메탄과 물로 추출하고, 추출된 용액을 농축하였다. 디클로로메탄과 n-헥산 혼합용매로 컬럼크로마토그래피를 실시한 용액을 농축하여 중간체(27) 1.3g을 얻었다. (수율 69%)

[0333]

MS (ESI) : $[M+H]^+$ 488

[0335]

제조예 28: 중간체(28) 4-(2-브로모디벤조퓨란-4-일)-9-페닐-9H-카바졸의 합성



[0336]

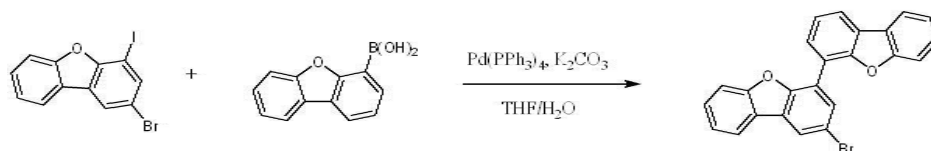
[0337]

질소 분위기 하에서 100ml 둥근바닥 3구 플라스크에 중간체(5) 0.8g, 중간체(26) 19g, 탄산 칼륨 1.0g, 테트라키스트리페닐포스핀팔라듐(0) 0.1g 및 테트라하이드로퓨란 30ml, 물 10ml를 넣고 18시간 동안 환류시켜 주었다. 반응액을 냉각한 후 디클로로메탄과 물로 추출하고, 추출된 용액을 농축하였다. 디클로로메탄과 n-헥산 혼합용매로 컬럼크로마토그래피를 실시한 용액을 농축하여 중간체(28) 0.9g을 얻었다. (수율 88%)

[0338]

MS (ESI) : $[M+H]^+$ 488

[0340] 제조예 29: 중간체(29) 2-브로모-4,4'-바이디벤조퓨란의 합성

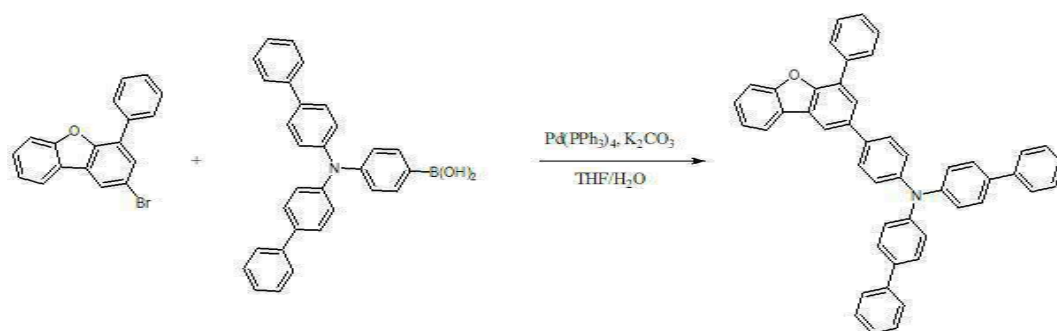


[0341]

[0342] 질소 분위기 하에서 100ml 둥근바닥 3구 플라스크에 중간체 (5) 2.0g, 4-디벤조퓨란보론산 1.1g, 탄산 칼륨 2.2g, 테트라키스트리페닐포스핀팔라듐(0) 0.2g 및 테트라하이드로퓨란 45ml, 물 15ml를 넣고 18시간 동안 환류시켜 주었다. 반응액을 냉각한 후 디클로로메탄과 물로 추출하고, 추출된 용액을 농축하였다. 디클로로메탄과 n-헥산 혼합용매로 컬럼크로마토그래피를 실시한 용액을 농축하여 중간체(29) 1.2g을 얻었다. (수율 54%)

[0343] MS (ESI) : $[M+H]^+$ 413

[0346] 실시예 1: 화합물(1)의 합성



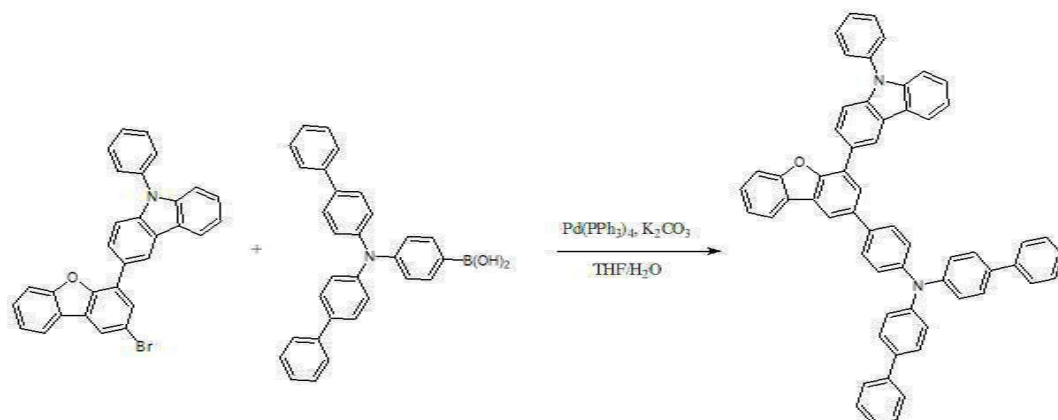
[0347]

[0348] 질소 분위기 하에서 100ml 둥근바닥 3구 플라스크에 중간체(6) 1.3g, (4-(디([1,1'-비페닐]-4-일)아미노)페닐)보론산 1.9g, 탄산 칼륨 1.6g, 테트라키스트리페닐포스핀팔라듐(0) 0.1g 및 테트라하이드로퓨란 36ml, 물 12ml를 넣고 12시간 동안 환류시켜 주었다. 반응액을 냉각한 후 디클로로메탄과 물로 추출하고, 추출된 용액을 농축하였다. 디클로로메탄과 n-헥산 혼합용매로 컬럼크로마토그래피를 실시한 용액을 농축하여 화합물(1) 2.2g을 얻었다. (수율 86%)

[0349] MS (ESI) : $[M+H]^+$ 640

[0350] ^1H NMR(600MHz, CDCl_3): δ 8.13 (s, 1H), 8.03 (d, 1H), 7.97 (d, 2H), 7.83 (s, 1H), 7.66 (d, 2H) 7.62-7.60 (m, 5H), 7.57-7.54 (m, 6H), 7.50-7.43 (m, 6H), 7.38 (t, 1H), 7.33-7.25 (m, 8H)

[0352] 실시예 2: 화합물(2)의 합성



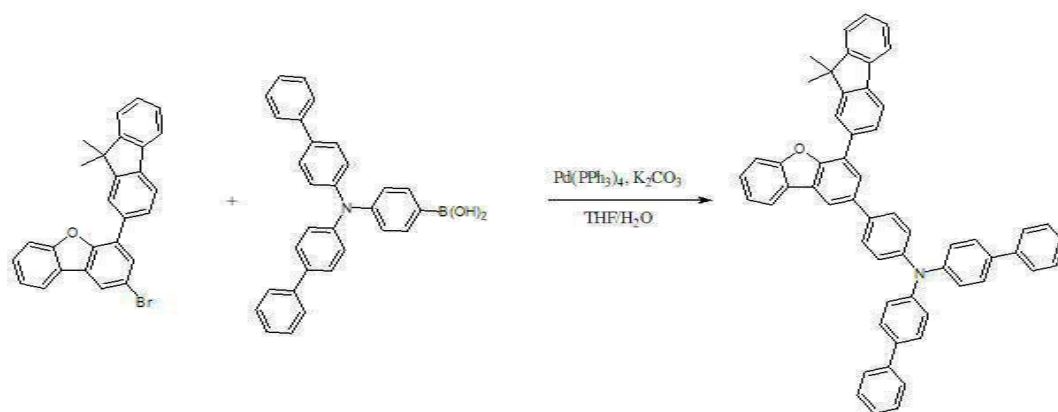
[0353]

[0354] 질소 분위기 하에서 100ml 둥근바닥 3구 플라스크에 중간체(7) 1.3g, (4-(디([1,1'-비페닐]-4-일)아미노)페닐)보론산 1.4g, 탄산 칼륨 1.1g, 테트라키스트리페닐포스핀팔라듐(0) 0.1g 및 테트라하이드로퓨란 30ml, 물 10ml를 넣고 12시간 동안 환류시켜 주었다. 반응액을 냉각한 후 디클로로메탄과 물로 추출하고, 추출된 용액을 농축하였다. 디클로로메탄과 n-헥산 혼합용매로 컬럼크로마토그래피를 실시한 용액을 농축하여 화합물(2) 1.5g을 얻었다. (수율 71%)

[0355] MS (ESI) : $[\text{M}+\text{H}]^+$ 805

[0356] ^1H NMR(600MHz, CDCl_3): δ 8.70 (s, 1H), 8.26 (d, 1H), 8.12 (s, 1H), 8.06-8.02 (m, 2H), 7.95 (s, 1H), 7.71 (d, 2H) 7.65-7.58 (m, 10H), 7.55 (d, 4H), 7.52-7.42 (m, 8H), 7.39 (t, 1H), 7.35-7.31 (m, 5H), 7.28 (d, 4H)

[0358] 실시예 3: 화합물(4)의 합성



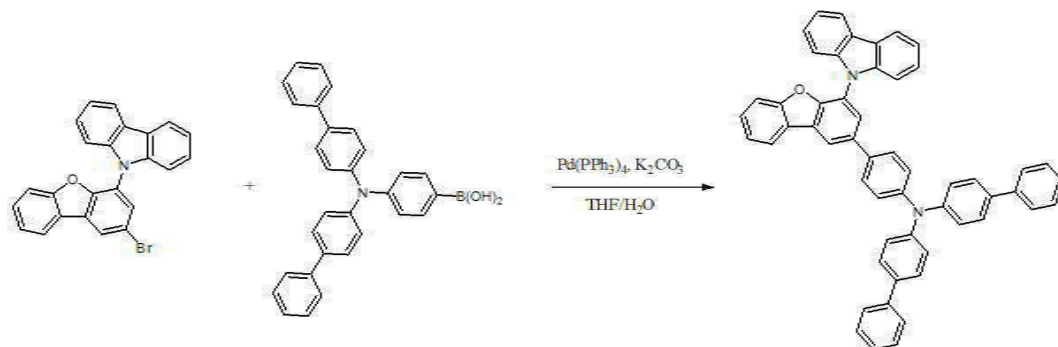
[0359]

[0360] 질소 분위기 하에서 100ml 둥근바닥 3구 플라스크에 중간체(8) 1.3g, (4-(디([1,1'-비페닐]-4-일)아미노)페닐)보론산 1.9g, 탄산 칼륨 1.6g, 테트라키스트리페닐포스핀팔라듐(0) 0.1g 및 테트라하이드로퓨란 30ml, 물 10ml를 넣고 12시간 동안 환류시켜 주었다. 반응액을 냉각한 후 디클로로메탄과 물로 추출하고, 추출된 용액을 농축하였다. 디클로로메탄과 n-헥산 혼합용매로 컬럼크로마토그래피를 실시한 용액을 농축하여 화합물(4) 2.0g을 얻었다. (수율 89%)

[0361] MS (ESI) : $[\text{M}+\text{H}]^+$ 756

[0362] ^1H NMR(600MHz, CDCl_3): δ 8.13 (s, 1H), 8.04 (d, 1H), 7.98 (d, 2H), 7.91 (d, 1H), 7.88 (s, 1H), 7.81 (d, 1H), 7.69 (d, 2H) 7.64-7.60 (m, 5H), 7.55 (d, 4H), 7.51-7.42 (m, 6H), 7.40-7.31 (m, 7H), 7.28 (d, 4H), 1.60 (s, 6H)

[0365] *실시예 4: 화합물(7)의 합성



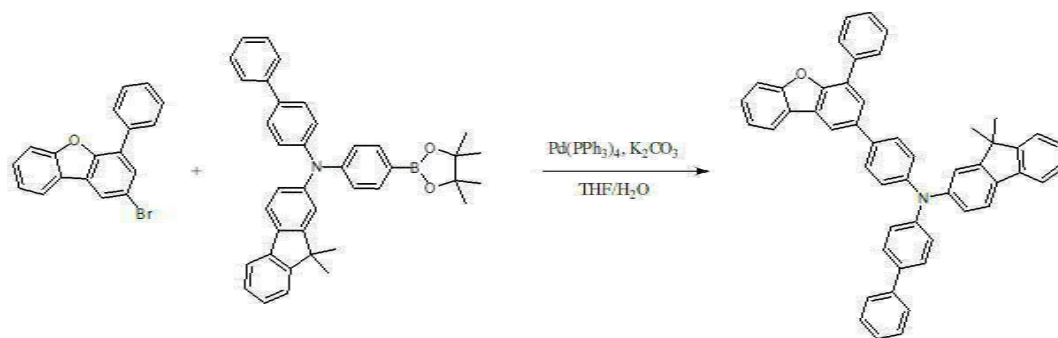
[0366]

[0367] 질소 분위기 하에서 100ml 둥근바닥 3구 플라스크에 중간체(9) 1.0g, (4-(디([1,1'-비페닐]-4-일)아미노)페닐)보론산 1.2g, 탄산 칼륨 1.0g, 테트라키스트리페닐포스핀팔라듐(0) 0.1g 및 테트라하이드로퓨란 30ml, 물 10ml를 넣고 12시간 동안 환류시켜 주었다. 반응액을 냉각한 후 디클로로메탄과 물로 추출하고, 추출된 용액을 농축하였다. 디클로로메탄과 n-헥산 혼합용매로 컬럼크로마토그래피를 실시한 용액을 농축하여 화합물(6) 0.8g을 얻었다. (수율 44%)

[0368] MS (ESI) : $[M+H]^+$ 729

[0369] ^1H NMR(600MHz, CDCl_3): δ 8.27 (s, 1H), 8.21 (d, 1H), 8.09 (d, 2H), 7.89 (s, 1H), 7.64 (d, 2H), 7.60 (d, 4H), 7.53 (d, 4H), 7.47-7.40 (m, 9H), 7.34-7.31 (m, 12H)

[0371] 실시예 5: 화합물(8)의 합성



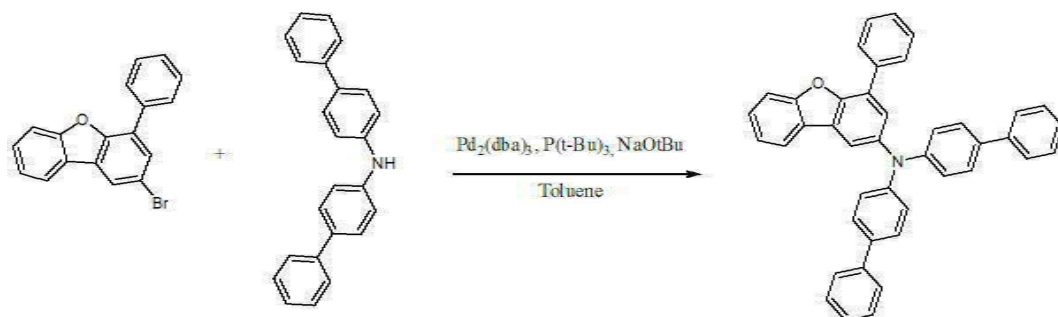
[0372]

[0373] 질소 분위기 하에서 100ml 둥근바닥 3구 플라스크에 중간체(7W6) 0.9g, (4-(디([1,1'-비페닐]-4-일)아미노)페닐)보론산 1.6g, 탄산 칼륨 1.6g, 테트라키스트리페닐포스핀팔라듐(0) 0.1g 및 테트라하이드로퓨란 30ml, 물 10ml를 넣고 12시간 동안 환류시켜 주었다. 반응액을 냉각한 후 디클로로메탄과 물로 추출하고, 추출된 용액을 농축하였다. 디클로로메탄과 n-헥산 혼합용매로 컬럼크로마토그래피를 실시한 용액을 농축하여 화합물(3) 1.5g을 얻었다. (수율 75%)

[0374] MS (ESI) : $[M+H]^+$ 680

[0375] ^1H NMR(600MHz, CDCl_3): δ 8.13 (s, 1H), 8.03 (d, 1H), 7.97 (d, 2H), 7.83 (s, 1H), 7.67-7.61 (m, 7H), 7.57-7.53 (m, 4H), 7.50-7.37 (m, 6H), 7.37-7.25 (m, 8H), 7.15 (s, 1H), 1.49 (s, 6H)

[0377] 실시예 6: 화합물(12)의 합성



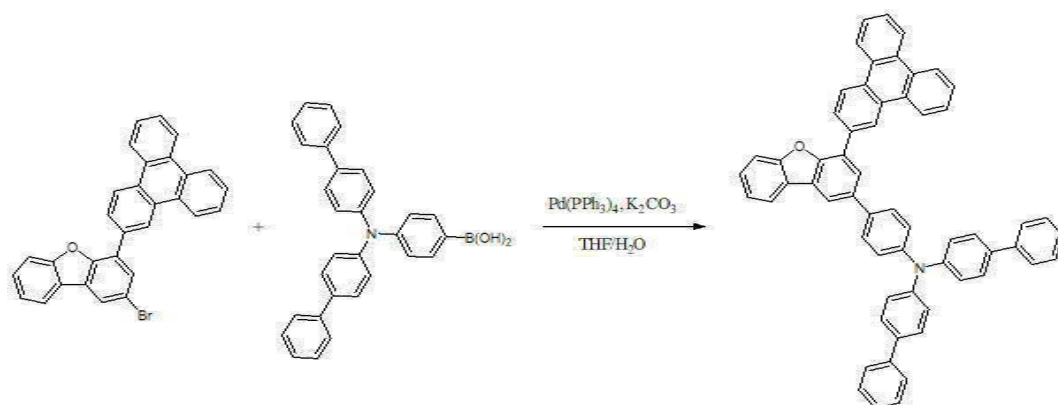
[0378]

[0379] 질소 분위기 하에서 100mL 둥근 바닥 3구 플라스크에 중간체(6) 1.4g, 디([1,1'-비페닐-4-일)아민 1.6g, 트리스(디벤질리딘아세톤)디팔라듐(0) 0.1g, 15% 트리스(t-부틸)포스핀 0.1g, t-부톡시 나트륨 0.8g, 톨루엔 25ml를 넣고, 100℃로 12시간 교반한다. 반응액을 냉각 후 실리카겔 여과, 농축한 다음 디클로로메탄과 n-헥산 혼합용매로 컬럼크로마토그래피 실시하여 화합물(1) 2.0g을 얻었다. (수율 81%)

[0380] ^1H NMR(600MHz, CDCl_3): δ 7.87 (dd, 2H), 7.77 (s, 1H), 7.61-7.59 (m, 5H), 7.53-7.49 (m, 8H), 7.47-7.39 (m, 7H), 7.32 (dd, 2H), 7.26 (d, 4H)

[0381] MS (ESI) : $[\text{M}+\text{H}]^+$ 564

[0383] 실시예 7: 화합물(16)의 합성



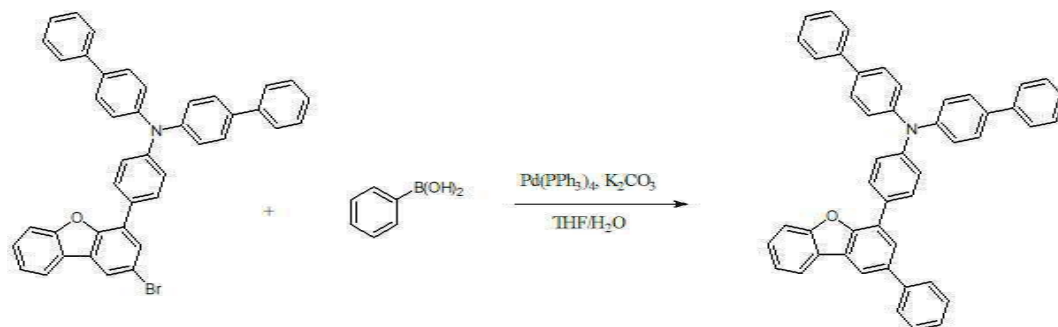
[0384]

[0385] 질소 분위기 하에서 100ml 둥근바닥 3구 플라스크에 중간체(10) 1.4g, (4-(디([1,1'-비페닐]-4-일)아미노)페닐)보론산 1.3g, 탄산 칼륨 1.5g, 테트라키스트리페닐포스핀팔라듐(0) 0.1g 및 테트라하이드로퓨란 30ml, 물 10ml를 넣고 12시간 동안 환류시켜 주었다. 반응액을 냉각한 후 디클로로메탄과 물로 추출하고, 추출된 용액을 농축하였다. 디클로로메탄과 n-헥산 혼합용매로 컬럼크로마토그래피를 실시한 용액을 농축하여 화합물(16) 1.7g을 얻었다. (수율 72%)

[0386] MS (ESI) : $[\text{M}+\text{H}]^+$ 790

[0387] ^1H NMR(600MHz, CDCl_3): δ 9.25 (s, 1H), 8.84-8.80 (m, 2H), 8.75-8.69 (m, 3H), 8.29 (d, 1H), 8.20 (s, 1H), 8.08 (d, 1H), 8.03 (s, 1H), 7.72-7.67 (m, 7H), 7.61 (d, 4H), 7.56-7.50 (m, 5H), 7.45-7.40 (m, 5H), 7.33-7.22 (m, 8H)

[0389] 실시예 8: 화합물(23)의 합성



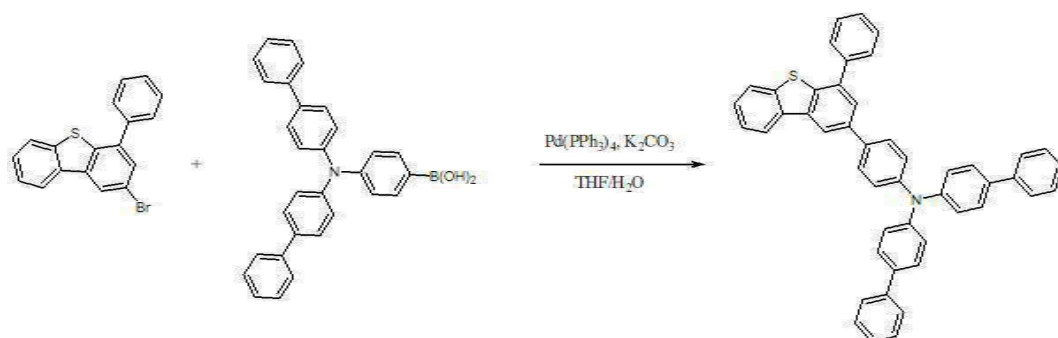
[0390]

[0391] 질소 분위기 하에서 100ml 둥근바닥 3구 플라스크에 중간체(11) 1.3g, 페닐 보론산 0.3g, 탄산 칼륨 0.8g, 테트라키스트리페닐포스핀팔라듐(0) 0.1g 및 테트라하이드로퓨란 25ml, 물 8ml를 넣고 12시간 동안 환류시켜 주었다. 반응액을 냉각한 후 디클로로메탄과 물로 추출하고, 추출된 용액을 농축하였다. 디클로로메탄과 n-헥산 혼합용매로 컬럼크로마토그래피를 실시한 용액을 농축하여 화합물(23) 1.2g을 얻었다. (수율 95%)

[0392] MS (ESI) : $[M+H]^+$ 640

[0393] ^1H NMR(600MHz, CDCl_3): δ 8.33 (s, 1H), 8.26-8.24 (m, 1H), 7.87-7.86 (m, 1H), 7.78-7.75 (m, 3H), 7.73 (d, 2H), 7.61 (d, 4H), 7.57 (d, 4H), 7.52-7.48 (m, 4H), 7.45-7.39 (m, 5H), 7.34-7.30 (m, 8H)

[0395] 실시예 9: 화합물(34)의 합성



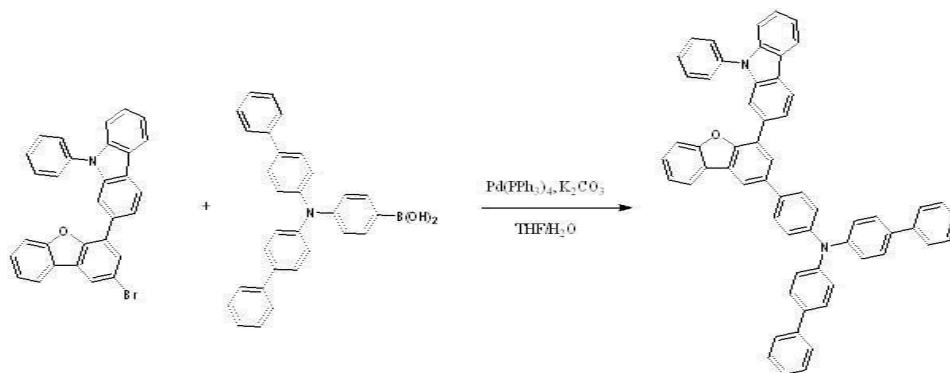
[0396]

[0397] 질소 분위기 하에서 100ml 둥근바닥 3구 플라스크에 중간체(18) 1.0g, (4-(디([1,1'-비페닐]-4-일)아미노)페닐)보론산 1.4g, 탄산 칼륨 1.2g, 테트라키스트리페닐포스핀팔라듐(0) 0.1g 및 테트라하이드로퓨란 30ml, 물 10ml를 넣고 12시간 동안 환류시켜 주었다. 반응액을 냉각한 후 디클로로메탄과 물로 추출하고, 추출된 용액을 농축하였다. 디클로로메탄과 n-헥산 혼합용매로 컬럼크로마토그래피를 실시한 용액을 농축하여 화합물(34) 1.0g을 얻었다. (수율 52%)

[0398] MS (ESI) : $[M+H]^+$ 656

[0399] ^1H NMR(600MHz, CDCl_3): δ 8.19 (s, 2H), 7.71-7.68 (m, 4H), 7.64-7.60 (m, 8H), 7.54 (d, 4H), 7.48 (t, 2H), 7.43 (t, 4H), 7.37 (t, 1H), 7.33-7.25 (m, 8H)

[0400] 실시예 10: 화합물(63)의 합성



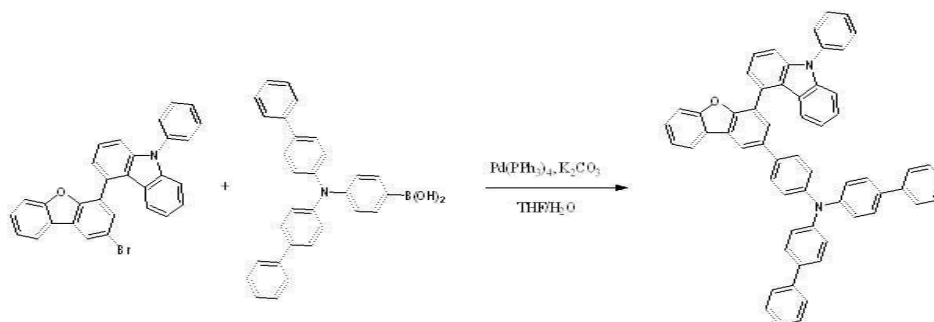
[0401]

[0402] 질소 분위기 하에서 100ml 둥근바닥 3구 플라스크에 중간체(27) 1.0g, (4-(디([1,1'-비페닐]-4-일)아미노)페닐)보론산 1.1g, 탄산 칼륨 0.9g, 테트라키스트리페닐포스핀팔라듐(0) 0.1g 및 테트라하이드로퓨란 30ml, 물 10ml를 넣고 12시간 동안 환류시켜 주었다. 반응액을 냉각한 후 디클로로메탄과 물로 추출하고, 추출된 용액을 농축하였다. 디클로로메탄과 n-헥산 혼합용매로 컬럼크로마토그래피를 실시한 용액을 농축하여 화합물(63) 0.9g을 얻었다. (수율 88%)

[0403] MS (ESI) : $[\text{M}+\text{H}]^+$ 805

[0404] ^1H NMR(600MHz, CDCl_3): δ 8.31 (d, 1H), 8.21 (d, 1H), 8.11 (s, 1H), 8.03 (d, 1H), 7.98 (s, 1H), 7.88 (d, 1H), 7.85 (s, 1H), 7.67-7.55 (m, 11H), 7.54 (d, 2H), 7.48-7.42 (m, 8H), 7.37 (t, 1H), 7.33-7.25 (m, 8H)

[0406] 실시예 11: 화합물(64)의 합성



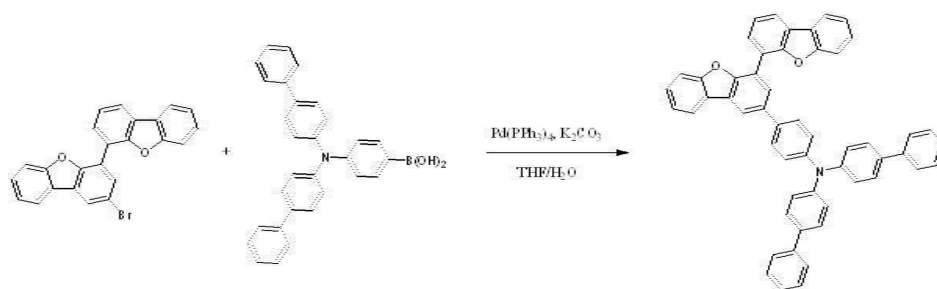
[0407]

[0408] 질소 분위기 하에서 100ml 둥근바닥 3구 플라스크에 중간체(28) 0.9g, (4-(디([1,1'-비페닐]-4-일)아미노)페닐)보론산 1.0g, 탄산 칼륨 0.8g, 테트라키스트리페닐포스핀팔라듐(0) 0.1g 및 테트라하이드로퓨란 30ml, 물 10ml를 넣고 12시간 동안 환류시켜 주었다. 반응액을 냉각한 후 디클로로메탄과 물로 추출하고, 추출된 용액을 농축하였다. 디클로로메탄과 n-헥산 혼합용매로 컬럼크로마토그래피를 실시한 용액을 농축하여 화합물(64) 0.9g을 얻었다. (수율 60%)

[0409] MS (ESI) : $[\text{M}+\text{H}]^+$ 805

[0410] ^1H NMR(600MHz, CDCl_3): δ 8.30 (s, 1H), 8.10 (d, 1H), 7.96 (s, 1H), 7.69 (d, 2H), 7.64-7.58 (m, 8H), 7.55-7.49 (m, 7H), 7.44-7.35 (m, 9H), 7.32-7.25 (m, 10H), 6.88 (t, 1H)

[0412] 실시예 12: 화합물(65)의 합성



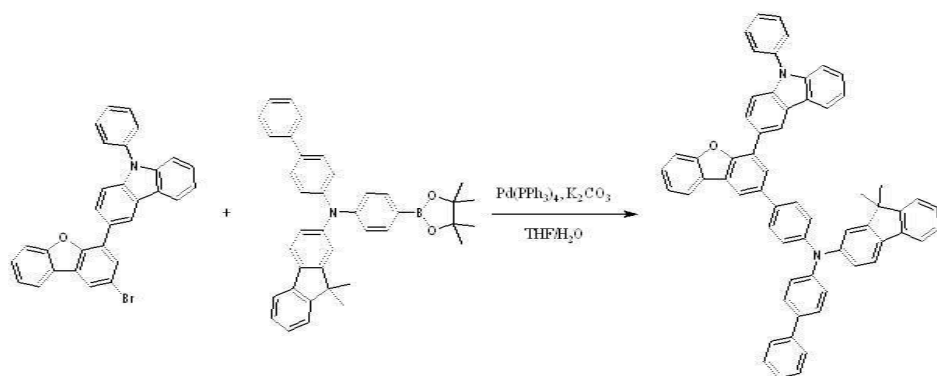
[0413]

[0414] 질소 분위기 하에서 100ml 둥근바닥 3구 플라스크에 중간체(29) 1.1g, (4-(디([1,1'-비페닐]-4-일)아미노)페닐)보론산 1.2g, 탄산 칼륨 1.1g, 테트라키스트리페닐포스핀팔라듐(0) 0.1g 및 테트라하이드로퓨란 30ml, 물 10ml를 넣고 12시간 동안 환류시켜 주었다. 반응액을 냉각한 후 디클로로메탄과 물로 추출하고, 추출된 용액을 농축하였다. 디클로로메탄과 n-헥산 혼합용매로 컬럼크로마토그래피를 실시한 용액을 농축하여 화합물(65) 0.9g을 얻었다. (수율 46%)

[0415] MS (ESI) : $[M+H]^+$ 730

[0416] 1H NMR(600MHz, $CDCl_3$): δ 8.22 (s, 1H), 8.19 (s, 1H), 8.07-8.03 (m, 3H), 8.00 (d, 1H), 7.71 (d, 2H), 7.60 (d, 2H), 7.57-7.53 (m, 7H), 7.49-7.27 (m, 16H)

[0418] 실시예 13: 화합물(74)의 합성



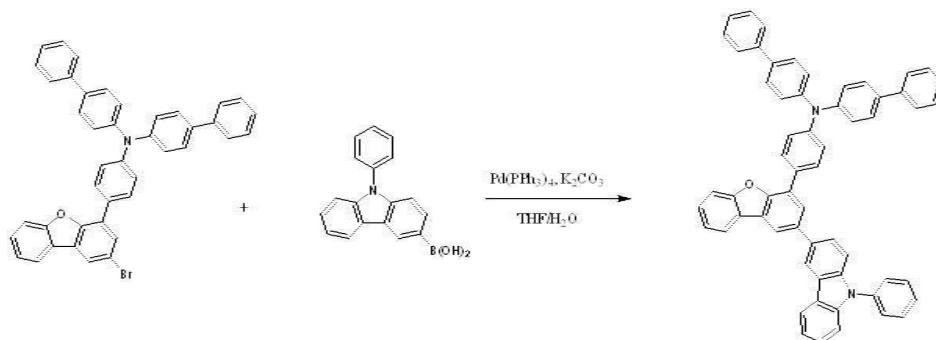
[0419]

[0420] 질소 분위기 하에서 100ml 둥근바닥 3구 플라스크에 중간체(7) 1.2g, N-([1,1'-바이페닐]-4-일)-9,9-디메틸-N-(4-(4,4,5,5-테트라메틸-1,3,2-디옥사보로란-2-일)페닐)-9H-플루오렌-2-아민 1.4g, 탄산 칼륨 1.1g, 테트라키스트리페닐포스핀팔라듐(0) 0.1g 및 테트라하이드로퓨란 40ml, 물 13ml를 넣고 12시간 동안 환류시켜 주었다. 반응액을 냉각한 후 디클로로메탄과 물로 추출하고, 추출된 용액을 농축하였다. 디클로로메탄과 n-헥산 혼합용매로 컬럼크로마토그래피를 실시한 용액을 농축하여 화합물(74) 1.4g을 얻었다. (수율 66%)

[0421] 1H NMR(600MHz, $CDCl_3$): δ 8.70 (s, 1H), 8.26 (d, 1H), 8.15 (s, 1H), 8.06-8.02 (m 2H), 7.95 (s, 1H), 7.71-7.25 (m, 32H), 1.47 (s, 6H)

[0422] MS (ESI) : $[M+H]^+$ 858

[0424] 실시예 14: 화합물(92)의 합성



[0425]

[0426] 질소 분위기 하에서 100ml 둥근바닥 3구 플라스크에 중간체(11) 1.6g, ((3-(9H-카바졸-9-일)페닐)보론산 0.7g, 탄산 칼륨 1.0g, 테트라키스트리페닐포스핀팔라듐(0) 0.1g 및 테트라하이드로퓨란 45ml, 물 15ml를 넣고 12시간 동안 환류시켜 주었다. 반응액을 냉각한 후 디클로로메탄과 물로 추출하고, 추출된 용액을 농축하였다. 디클로로메탄과 n-헥산 혼합용매로 컬럼크로마토그래피를 실시한 용액을 농축하여 화합물(92) 1.5g을 얻었다. (수율 75%)

[0427] MS (ESI) : $[M+H]^+$ 805

[0428] ^1H NMR(600MHz, CDCl_3): δ 8.51 (s, 1H), 8.24 (d, 1H), 8.20 (s, 1H), 8.08 (d, 1H), 7.97-7.95 (m, 3H), 7.78 (d, 1H), 7.64-7.61 (m, 9H), 7.56 (d, 4H) 7.53-7.48 (m, 3H), 7.45-7.31 (m, 16H)

[0429] 소자실시예 1. 화합물 1을 2차 정공 수송층으로 포함하는 유기전계발광소자 제조

[0430] 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.

[0431] 이와 같이 준비된 ITO 투명 전극을 양극으로 사용하여 ITO 기판 상에 화합물HIL 및 화합물 IL을 각각 50nm 및 5nm의 두께로 진공증착하여 정공 주입층을 형성하였다. 이어서 1차 정공 수송층으로서 화합물 HTL을 20nm 두께로 진공 증착하고, 1차 정공 수송층 상부에 2차 정공 수송층으로서 화합물 1을 20nm 두께로 형성하였다. 상기 2차 정공 수송층 상부에 1:1의 비율로 화합물 GH-1과 GH-2를 호스트로 사용하고 도판트로 화합물 GD를 10 부피%로 도핑하여 진공증착하여 발광층을 형성하였다.

[0432] 그 후, 상기 발광층 상부에 전자수송층으로서 화합물 ETL을 30nm 두께로 형성하였다. 상기 전자수송층 상부에 Liq [lithium quinolate] 1.5nm와 Al 100nm를 순차적으로 진공 증착하여 음극을 형성함으로써 유기전계발광소자를 제조하였다.

[0433] 소자실시예 2. 화합물 2를 2차 정공 수송층으로 포함하는 유기전계발광소자 제조

[0434] 화합물 1 대신에 화합물 2를 사용한 점을 제외하고는 소자실시예 1과 동일한 방법으로 유기전계발광소자를 제조하였다.

[0435] 소자실시예 3. 화합물 4를 2차 정공 수송층으로 포함하는 유기전계발광소자 제조

[0436] 화합물 1 대신에 화합물 4를 사용한 점을 제외하고는 소자실시예 1과 동일한 방법으로 유기전계발광소자를 제조하였다.

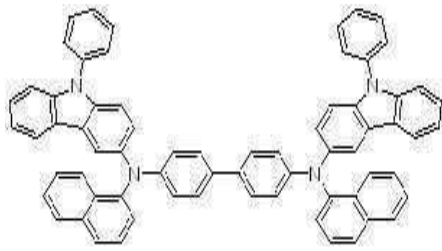
[0437] 소자실시예 4. 화합물 8을 2차 정공 수송층으로 포함하는 유기전계발광소자 제조

[0438] 화합물 1 대신에 화합물 8을 사용한 점을 제외하고는 소자실시예 1과 동일한 방법으로 유기전계발광소자를 제조하였다.

[0439] 소자실시예 5. 화합물 16을 2차 정공 수송층으로 포함하는 유기전계발광소자 제조

[0440] 화합물 1 대신에 화합물 16을 사용한 점을 제외하고는 소자실시예 1과 동일한 방법으로 유기전계발광소자를 제조하였다.

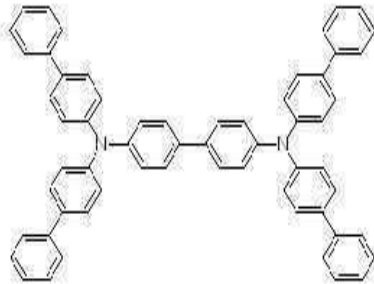
- [0441] 소자실시예 6. 화합물 23을 2차 정공 수송층으로 포함하는 유기전계발광소자 제조
- [0442] 화합물 1 대신에 화합물 23을 사용한 점을 제외하고는 소자실시예 1과 동일한 방법으로 유기전계발광소자를 제조하였다.
- [0443] 소자실시예 7. 화합물 63을 2차 정공 수송층으로 포함하는 유기전계발광소자 제조
- [0444] 화합물 1 대신에 화합물 63을 사용한 점을 제외하고는 소자실시예 1과 동일한 방법으로 유기전계발광소자를 제조하였다.
- [0445] 소자실시예 8. 화합물 64를 2차 정공 수송층으로 포함하는 유기전계발광소자 제조
- [0446] 화합물 1 대신에 화합물 64를 사용한 점을 제외하고는 소자실시예 1과 동일한 방법으로 유기전계발광소자를 제조하였다.
- [0447] 소자실시예 9. 화합물 65를 2차 정공 수송층으로 포함하는 유기전계발광소자 제조
- [0448] 화합물 1 대신에 화합물 65를 사용한 점을 제외하고는 소자실시예 1과 동일한 방법으로 유기전계발광소자를 제조하였다.
- [0449] 소자실시예 10. 화합물 74를 2차 정공 수송층으로 포함하는 유기전계발광소자 제조
- [0450] 화합물 1 대신에 화합물 74를 사용한 점을 제외하고는 소자실시예 1과 동일한 방법으로 유기전계발광소자를 제조하였다.
- [0451] 소자실시예 11. 화합물 92를 2차 정공 수송층으로 포함하는 유기전계발광소자 제조
- [0452] 화합물 1 대신에 화합물 92를 사용한 점을 제외하고는 소자실시예 1과 동일한 방법으로 유기전계발광소자를 제조하였다.
- [0453] 소자비교예 1. NPB를 2차 정공 수송층으로 포함하는 유기전계발광소자 제조
- [0454] 화합물 1 대신에 NPB를 사용한 점을 제외하고는 소자실시예 1과 동일한 방법으로 유기전계발광소자를 제조하였다.
- [0456] 상기 소자실시예 및 소자비교예에서 사용한 화합물 HIL, IL, HTL, NPB, GH-1, GH-2, GD 및 ETL의 구조식은 아래와 같다.



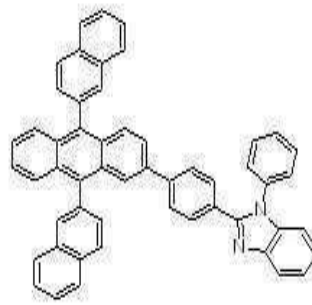
HIL



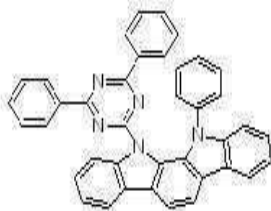
IL



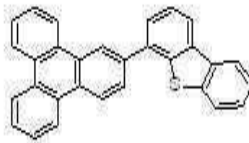
HTL



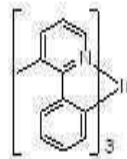
ETL



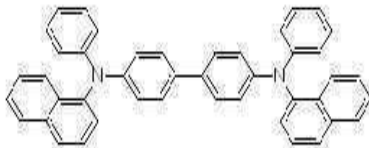
GH-1



GH-2



GD



NPB

[0457]

[0459] 유기전계발광소자의 특성 분석

[0460] 이하, 소자실시에 1 내지 6 및 소자비교예 1에 따라 제조된 유기전계발광소자를 전류밀도 10 mA/cm^2 기준의 발광효율과 초기 휘도 4500 cd/m^2 의 정전류로 구동시켜 휘도가 3% 감소되는 수명 시간의 결과를 하기 표 1에 나타내었다.

표 1

[0461]

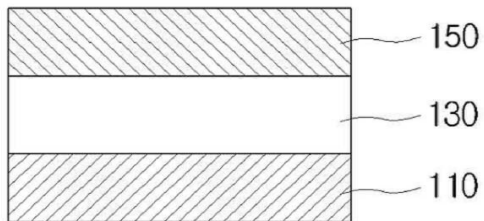
구분	2차 정공 수송층 재료	휘도 효율 (cd/A)	수명 시간 (hr)
소자실시예 1	화합물 1	47.9	58
소자실시예 2	화합물 2	46.0	47
소자실시예 3	화합물 4	45.4	67

소자실시예 4	화합물 8	45.3	52
소자실시예 5	화합물 16	45.6	50
소자실시예 6	화합물 23	44.7	53
소자실시예 7	화합물 63	47.5	34
소자실시예 8	화합물 64	46.9	29
소자실시예 9	화합물 65	45.9	101
소자실시예 10	화합물 74	44.8	80
소자실시예 11	화합물 92	44.0	45
소자비교예 1	NPB	25.7	38

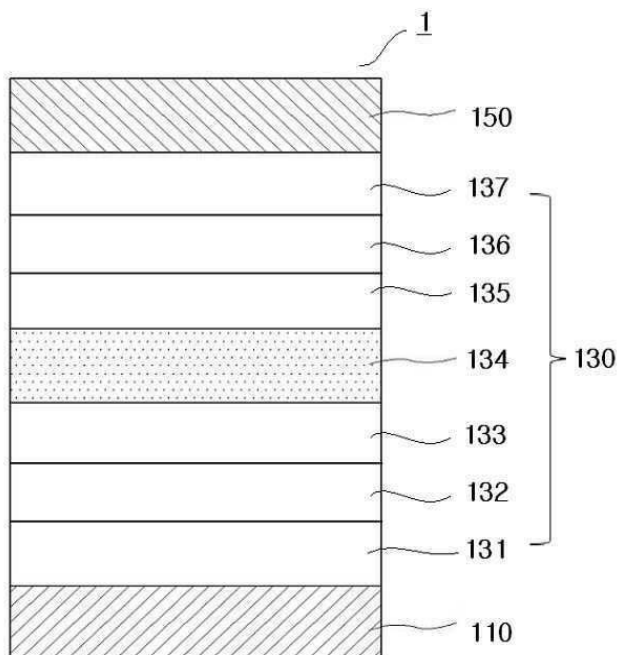
[0462] 표 1에 따르면, 본 발명에 의한 화합물1, 2, 4, 8, 16, 23, 63 내지 65, 74 및 92를 정공수송층으로 유기전계발광소자에 사용한 결과, 모두가 종래의 물질인 NPB 대비 우수한 휘도 효율과 수명 특성을 보이는 것을 확인할 수 있었다.

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	KR1020170127357A	公开(公告)日	2017-11-21
申请号	KR1020170049656	申请日	2017-04-18
[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		
[标]发明人	CHANG YU MI 장유미 PARK JEONG HO 박정호 KANG JU SIK 강주식 YANG NAM CHOUL 양남철 PARK JAE KYUN 박재균 LEE SONG 이송		
发明人	장유미 박정호 강주식 양남철 박재균 이송		
IPC分类号	C09K11/06 C07D209/82 C07D307/91 C07D333/76 H01L51/00 H01L51/50		
代理人(译)	Yisuyeol		
优先权	1020160057404 2016-05-11 KR		
外部链接	Espacenet		

摘要(译)

本发明提供用于有机电致发光器件的化合物和包含其的有机电致发光器件。因此，热稳定性高，并且可以提供具有提高发光效率和寿命的空穴传输的有机电致发光器件用化合物。此外，当将本发明的有机电致发光器件用化合物应用于与发光层接触的空穴传输层材料同时增强三重态能量并提高有机电致发光器件的效率时，可以提高寿命。

