



(19) 대한민국특허청(KR)

(12) 등록특허공보(B1)

(45) 공고일자 2015년07월20일

(11) 등록번호 10-1537005

(24) 등록일자 2015년07월09일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)
 C09K 11/06 (2006.01) H01L 51/50 (2006.01)
 (21) 출원번호 10-2012-0109449
 (22) 출원일자 2012년09월28일
 심사청구일자 2013년11월14일
 (65) 공개번호 10-2014-0042554
 (43) 공개일자 2014년04월07일
 (56) 선행기술조사문헌
 JP2009267257 A
 JP2011178742 A

(73) 특허권자
 제일모직 주식회사
 경상북도 구미시 구미대로 58 (공단동)
 (72) 발명자
 류동완
 경기 용인시 수지구 신봉1로 110, 502동 1203호
 (신봉동, LG빌리지5차아파트)
 이남현
 경기 의왕시 고산로 56, (고천동, 제일모직)
 (뒷면에 계속)
 (74) 대리인
 팬코리아특허법인

전체 청구항 수 : 총 15 항

심사관 : 정현아

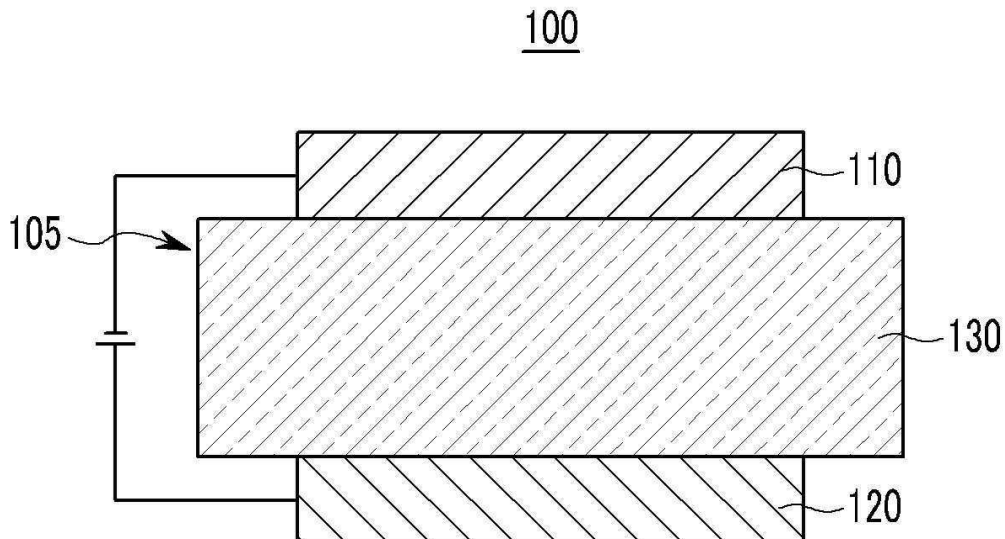
(54) 발명의 명칭 유기광전자소자용 화합물, 이를 포함하는 유기발광소자 및 상기 유기발광소자를 포함하는 표시장치

(57) 요약

유기광전자소자용 화합물, 이를 포함하는 유기발광소자 및 상기 유기발광소자를 포함하는 표시장치에 관한 것으로, 하기 화학식 1 및 2의 조합으로 표시되는 유기광전자소자용 화합물을 제공하여, 우수한 전기화학적 및 열적 안정성으로 수명 특성이 우수하고, 낮은 구동전압에서도 높은 발광효율을 가지는 유기발광소자를 제조할 수

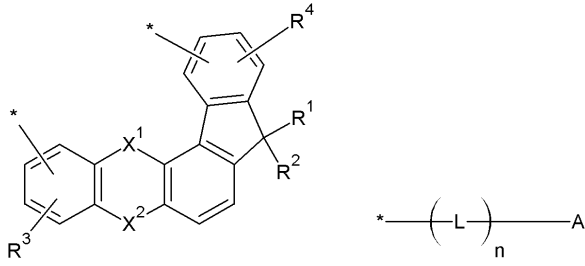
(뒷면에 계속)

대표도 - 도1



있다.

[화학식 1] [화학식 2]



(72) 발명자

이한일

경기 의왕시 고산로 56, (고천동, 제일모직)

정성현

경기 군포시 산본천로 119-9, 1101동 1212호 (산본동, 주공11단지아파트)

조영경

경기 의왕시 고산로 56, (고천동, 제일모직)

채미영

경기 의왕시 고산로 56, (고천동, 제일모직)

허달호

경기 수원시 팔달구 팔달로165번길 27, 102동 401호 (화서동, 미성하이즈빌)

홍진석

경기 의왕시 고산로 56, (고천동, 제일모직)

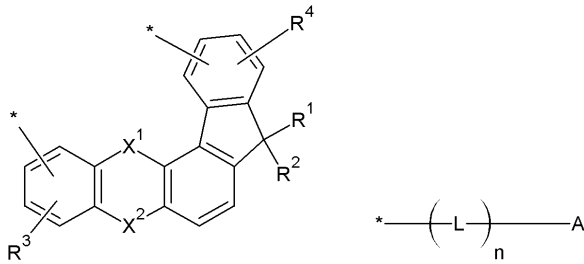
명세서

청구범위

청구항 1

하기 화학식 1 및 2의 조합으로 표시되는 유기광전자소자용 화합물:

[화학식 1] [화학식 2]



상기 화학식 1 및 2에서,

X^1 및 X^2 은 독립적으로, $-O-$, $-S-$, $-CR^aR^b-$, 또는 $-SiR^aR^b-$ 이며, 상기 R^a 및 R^b 는 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C10 알킬기, 또는 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기이고,

R^1 내지 R^4 는 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C10 알킬기, 또는 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기이고,

A는 $-N(L^1R')(L^2R'')$ 이며, 상기 R' 및 R'' 는 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기 또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴기이고,

L은 단일결합, 또는 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴렌기이며,

L^1 및 L^2 는 독립적으로 단일결합, 또는 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴렌기이고,

n, m 및 o는 독립적으로 0 내지 3의 정수 중 어느 하나이고,

화학식 2의 *는 화학식 1의 두 개의 * 중 어느 하나의 결합 위치를 나타내고,

여기서 "치환"이란 치환기 또는 화합물 중의 적어도 하나의 수소가 중수소, 할로젠기, 히드록시기, 아미노기, C1 내지 C30 아민기, 니트로기, C3 내지 C40 실릴기, C1 내지 C30 알킬기, C1 내지 C10 알킬실릴기, C3 내지 C30 시클로알킬기, C6 내지 C30 아릴기, C1 내지 C20 알콕시기, 플루오로기, C1 내지 C10 트리플루오로알킬기 또는 시아노기로 치환된 것을 의미한다.

청구항 2

삭제

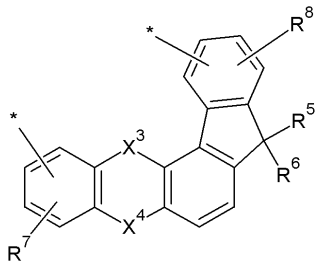
청구항 3

제1항에 있어서,

상기 A는 $-N(L^1R')(L^2R'')$ 이고,

상기 R' 또는 R'' 중 어느 하나는 하기 화학식 3으로 표시되는 치환기인 것인 유기광전자소자용 화합물:

[화학식 3]



상기 화학식 3에서,

X^3 및 X^4 은 독립적으로, $-O-$, $-S-$, $-CR^aR^b-$, 또는 $-SiR^aR^b-$ 이며, 상기 R^a 및 R^b 는 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C10 알킬기, 또는 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기이고,

R^5 내지 R^6 는 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C10 알킬기, 또는 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기이고,

상기 화학식 3의 두 개의 * 중 어느 하나는 상기 $-N(L^1R^1)(L^2R^2)$ 에서 L^1 또는 L^2 와의 결합을 나타내고,

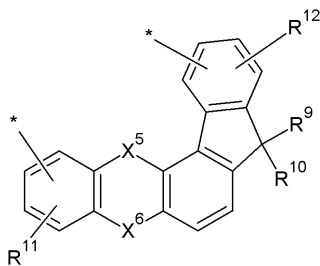
여기서 "치환"이란 치환기 또는 화합물 중의 적어도 하나의 수소가 중수소, 할로젠기, 히드록시기, 아미노기, C1 내지 C30 아민기, 니트로기, C3 내지 C40 실릴기, C1 내지 C30 알킬기, C1 내지 C10 알킬실릴기, C3 내지 C30 시클로알킬기, C6 내지 C30 아릴기, C1 내지 C20 알콕시기, 플루오로기, C1 내지 C10 트리플루오로알킬기 또는 시아노기로 치환된 것을 의미한다.

청구항 4

제3항에 있어서,

상기 R'는 상기 화학식 3으로 표시되는 치환기이고, 상기 R''는 하기 화학식 4로 표시되는 치환기인 것인 유기 광전자소자용 화합물:

[화학식 4]



상기 화학식 4에서,

X^5 및 X^6 은 독립적으로, $-O-$, $-S-$, $-CR^aR^b-$, 또는 $-SiR^aR^b-$ 이며, 상기 R^a 및 R^b 는 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C10 알킬기, 또는 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기이고,

R^9 내지 R^{10} 는 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C10 알킬기, 또는 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기이고,

상기 화학식 4의 두 개의 * 중 어느 하나는 상기 $-N(L^1R^1)(L^2R^2)$ 에서 L^1 또는 L^2 와의 결합을 나타내고,

여기서 "치환"이란 치환기 또는 화합물 중의 적어도 하나의 수소가 중수소, 할로젠기, 히드록시기, 아미노기, C1 내지 C30 아민기, 니트로기, C3 내지 C40 실릴기, C1 내지 C30 알킬기, C1 내지 C10 알킬실릴기, C3 내지

C30 시클로알킬기, C6 내지 C30 아릴기, C1 내지 C20 알콕시기, 플루오로기, C1 내지 C10 트리플루오로알킬기 또는 시아노기로 치환된 것을 의미한다.

청구항 5

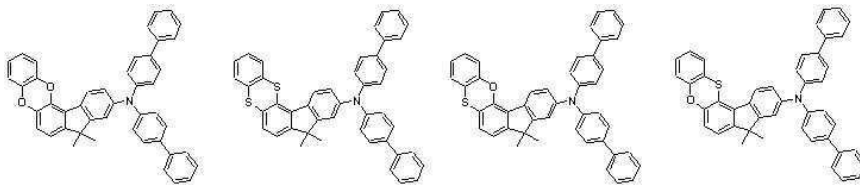
삭제

청구항 6

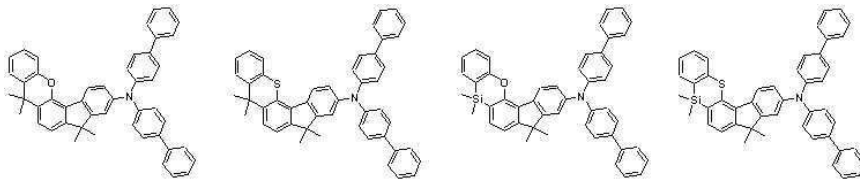
제1항에 있어서,

상기 유기광전자소자용 화합물은 하기 화학식 A-1 내지 A-83, A-164 내지 A-171, 및 A-180 내지 A-183 중 어느 하나로 표시되는 것인 유기광전자소자용 화합물.

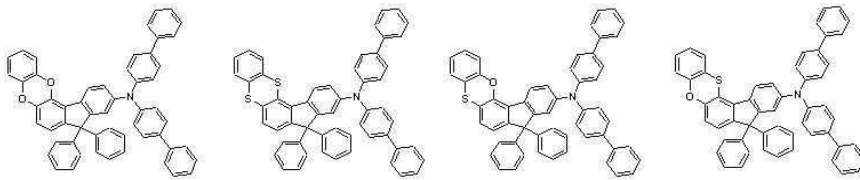
[A-1] [A-2] [A-3] [A-4]



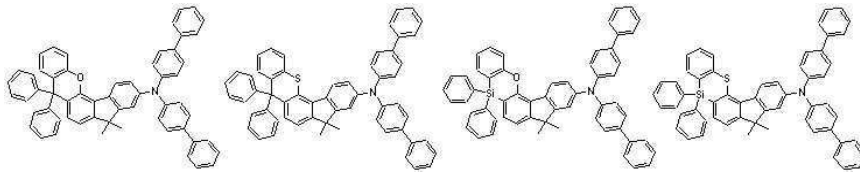
[A-5] [A-6] [A-7] [A-8]



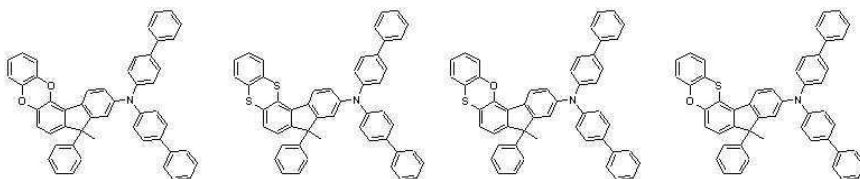
[A-9] [A-10] [A-11] [A-12]



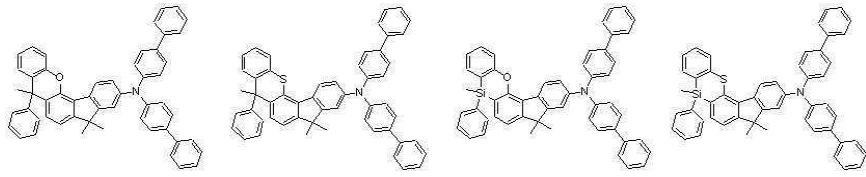
[A-13] [A-14] [A-15] [A-16]



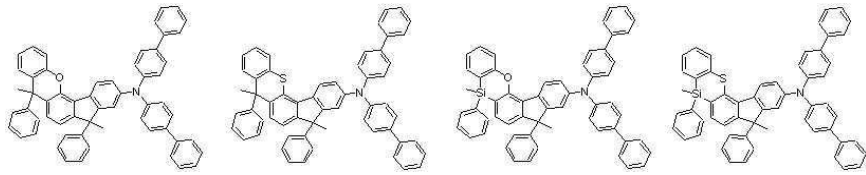
[A-17] [A-18] [A-19] [A-20]



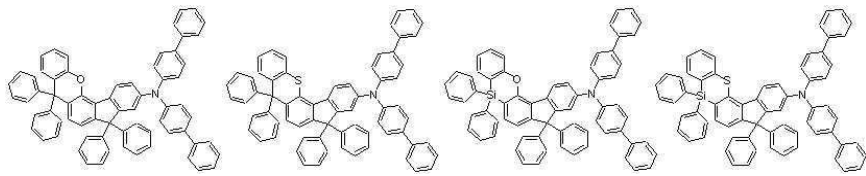
[A-21] [A-22] [A-23] [A-24]



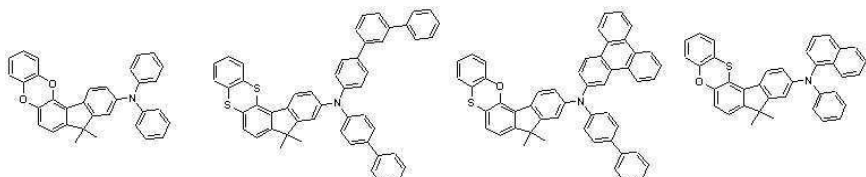
[A-25] [A-26] [A-27] [A-28]



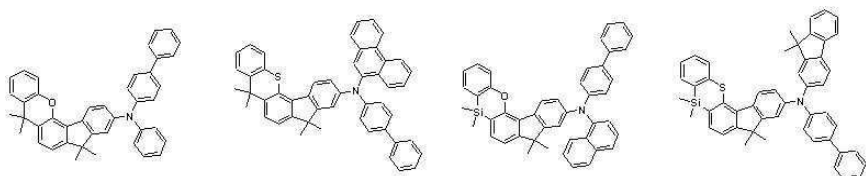
[A-29] [A-30] [A-31] [A-32]



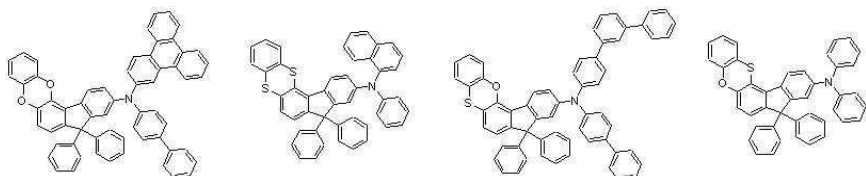
[A-33] [A-34] [A-35] [A-36]



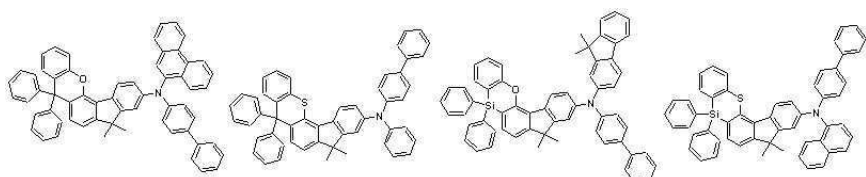
[A-37] [A-38] [A-39] [A-40]



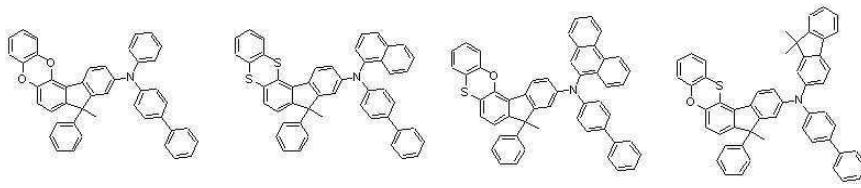
[A-41] [A-42] [A-43] [A-44]



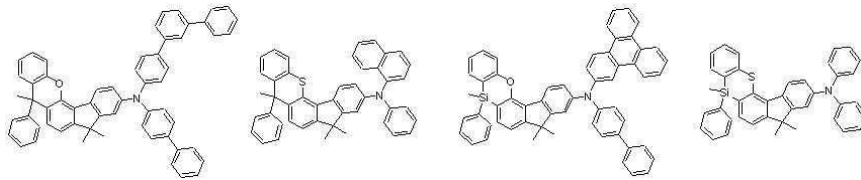
[A-45] [A-46] [A-47] [A-48]



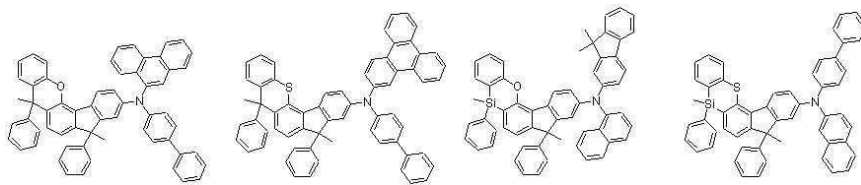
[A-49] [A-50] [A-51] [A-52]



[A-53] [A-54] [A-55] [A-56]



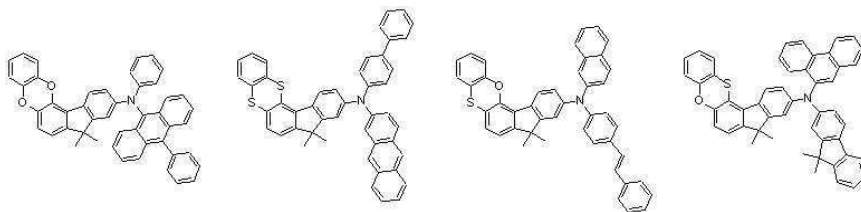
[A-57] [A-58] [A-59] [A-60]



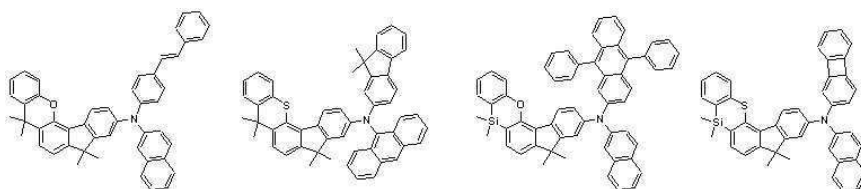
[A-61] [A-62] [A-63] [A-64]



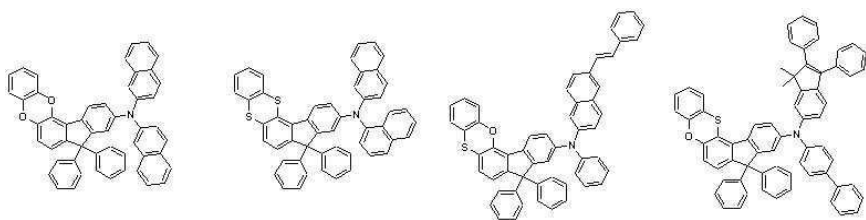
[A-65] [A-66] [A-67] [A-68]



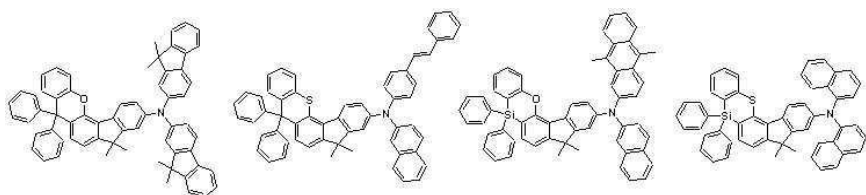
[A-69] [A-70] [A-71] [A-72]



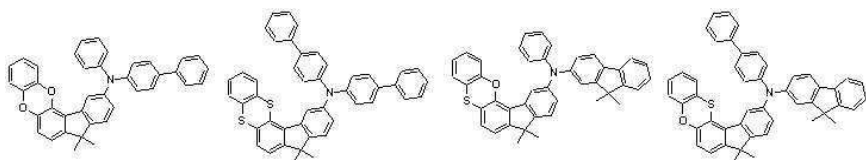
[A-73] [A-74] [A-78] [A-79]



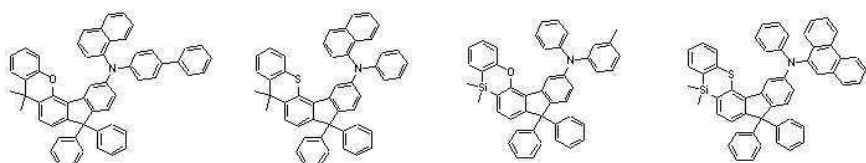
[A-80] [A-81] [A-82] [A-83]



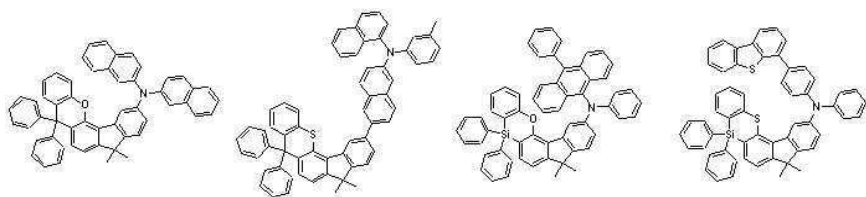
[A-164] [A-165] [A-166] [A-167]



[A-168] [A-169] [A-170] [A-171]



[A-180] [A-181] [A-182] [A-183]

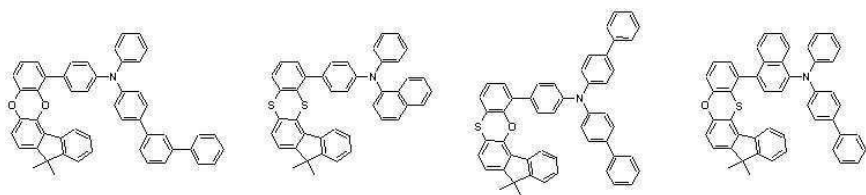


청구항 7

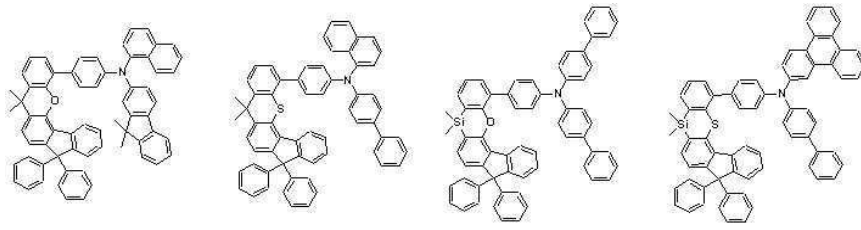
제1항에 있어서,

상기 유기광전자소자용 화합물은 하기 화학식 B-1 내지 B-48 중 어느 하나로 표시되는 것인 유기광전자소자용 화합물.

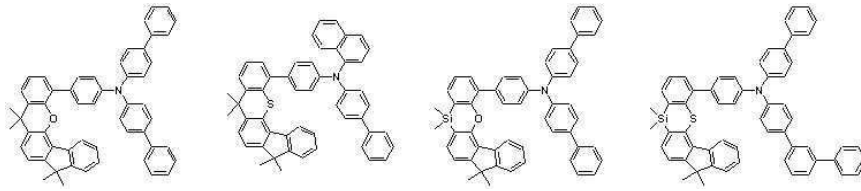
[B-1] [B-2] [B-3] [B-4]



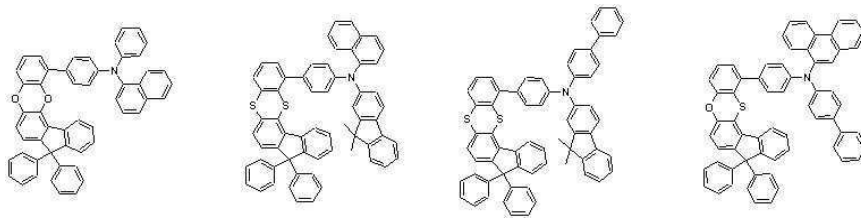
[B-5] [B-6] [B-7] [B-8]



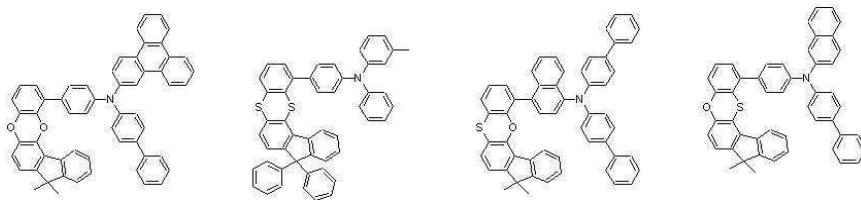
[B-9] [B-10] [B-11] [B-12]



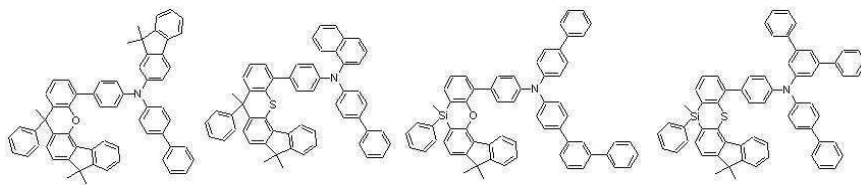
[B-13] [B-14] [B-15] [B-16]



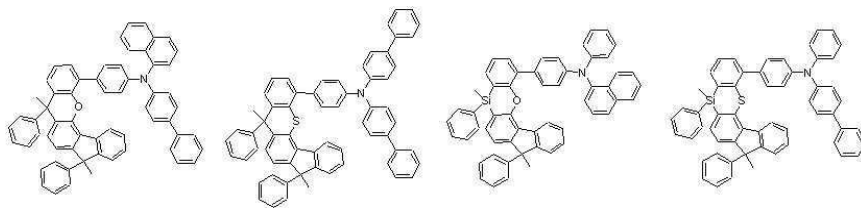
[B-17] [B-18] [B-19] [B-20]



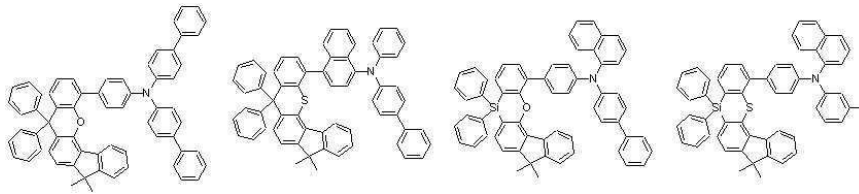
[B-21] [B-22] [B-23] [B-24]



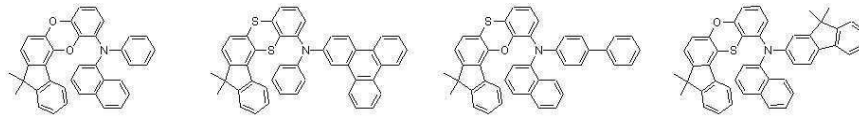
[B-25] [B-26] [B-27] [B-28]



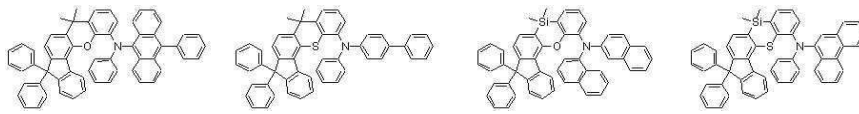
[B-29] [B-30] [B-31] [B-32]



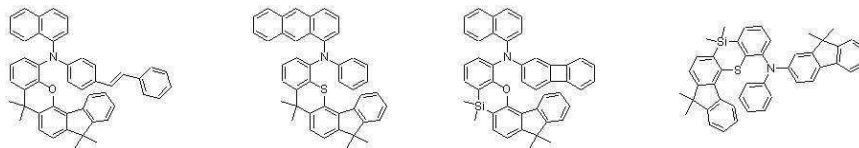
[B-33] [B-34] [B-35] [B-36]



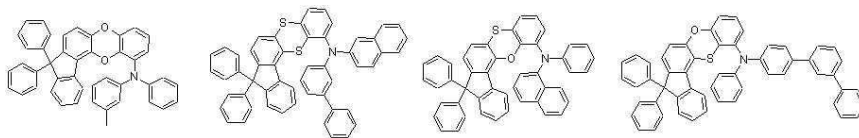
[B-37] [B-38] [B-39] [B-40]



[B-41] [B-42] [B-43] [B-44]



[B-45] [B-46] [B-47] [B-48]

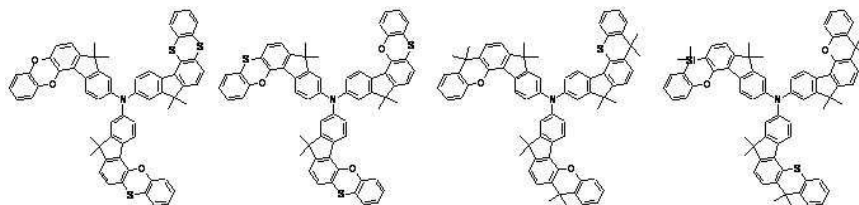


청구항 8

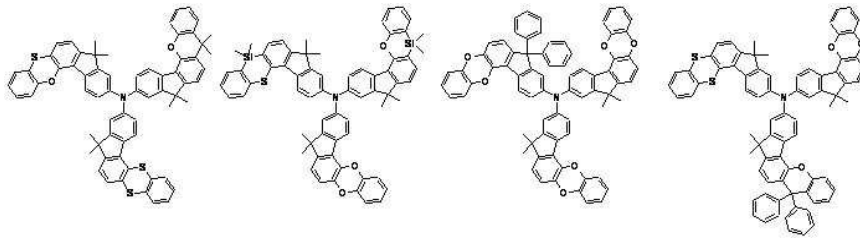
제1항에 있어서,

상기 유기광전자소자용 화합물은 하기 화학식 C-1 내지 C-32 중 어느 하나로 표시되는 것인 유기광전자소자용 화합물.

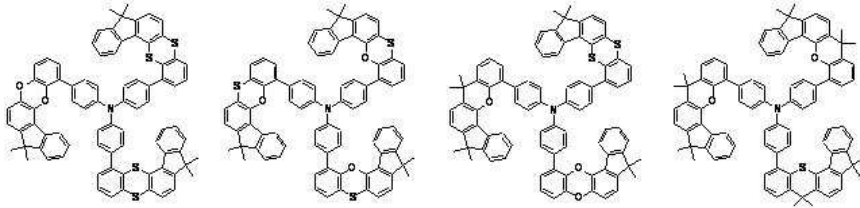
[C-1] [C-2] [C-3] [C-4]



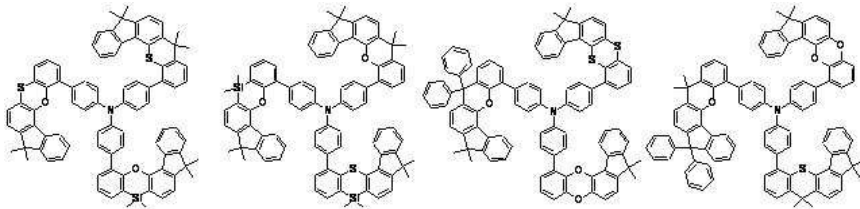
[C-5] [C-6] [C-7] [C-8]



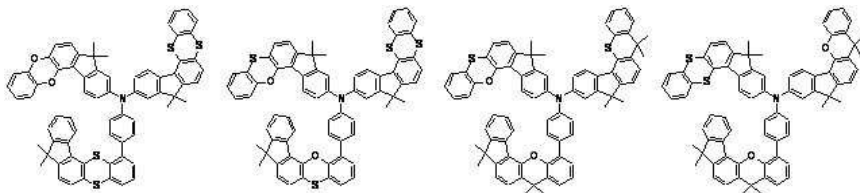
[C-9] [C-10] [C-11] [C-12]



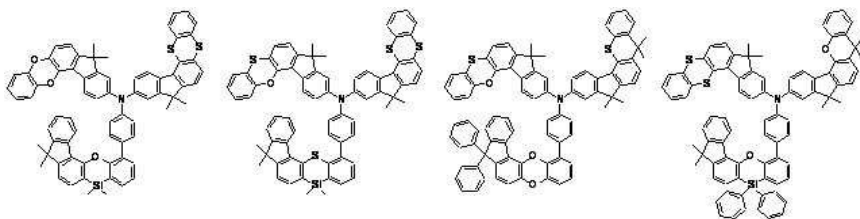
[C-13] [C-14] [C-15] [C-16]



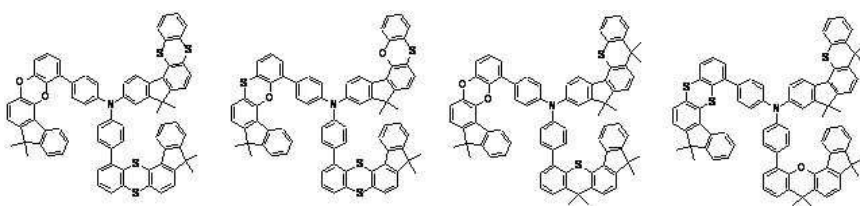
[C-17] [C-18] [C-19] [C-20]



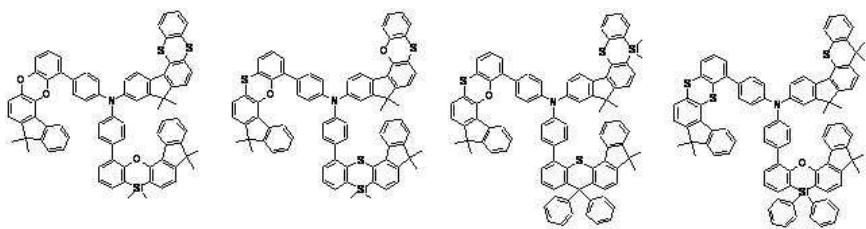
[C-21] [C-22] [C-23] [C-24]



[C-25] [C-26] [C-27] [C-28]



[C-29] [C-30] [C-31] [C-32]

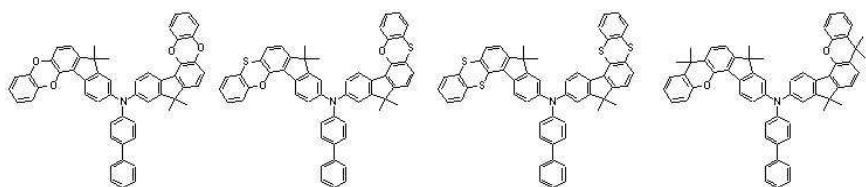


청구항 9

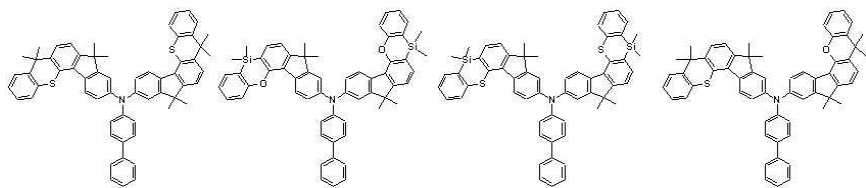
제1항에 있어서,

상기 유기광전자소자용 화합물은 하기 화학식 D-1 내지 D-64 중 어느 하나로 표시되는 것인 유기광전자소자용 화합물.

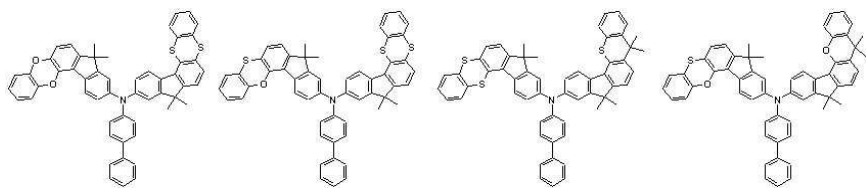
[D-1] [D-2] [D-3] [D-4]



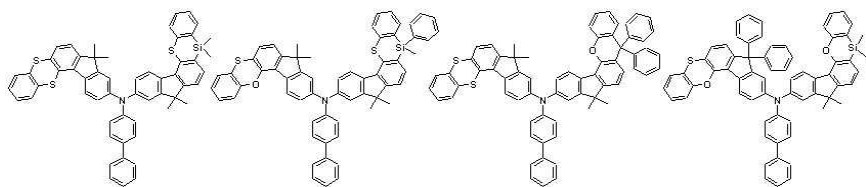
[D-5] [D-6] [D-7] [D-8]



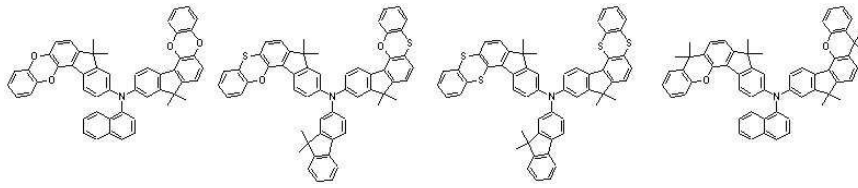
[D-9] [D-10] [D-11] [D-12]



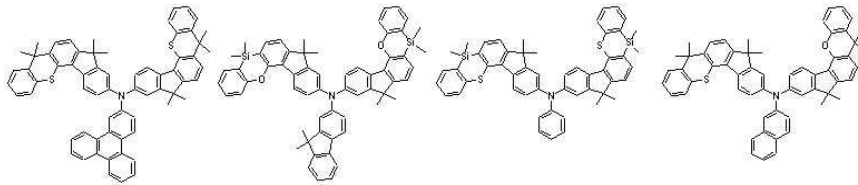
[D-13] [D-14] [D-15] [D-16]



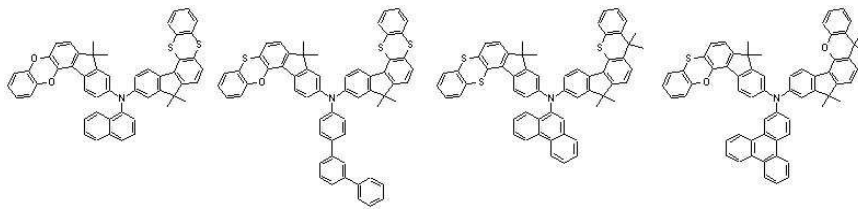
[D-17] [D-18] [D-19] [D-20]



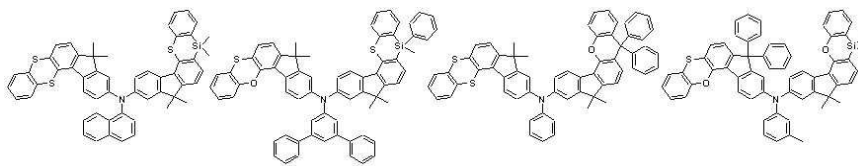
[D-21] [D-22] [D-23] [D-24]



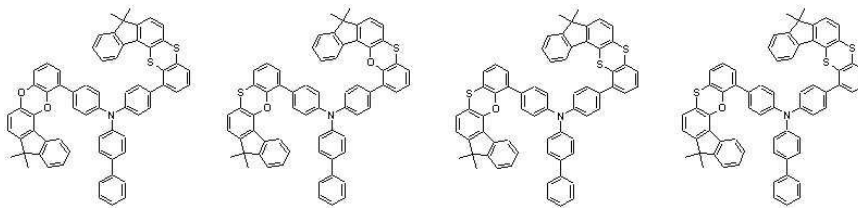
[D-25] [D-26] [D-27] [D-28]



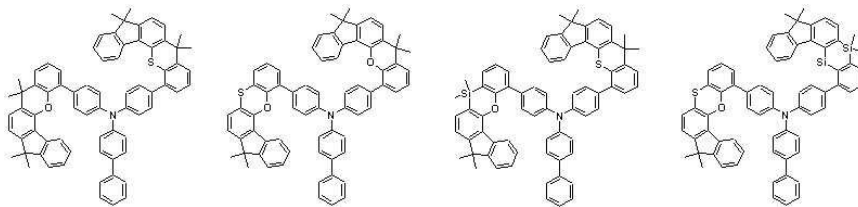
[D-29] [D-30] [D-31] [D-32]



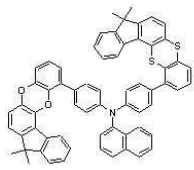
[D-33] [D-34] [D-35] [D-36]



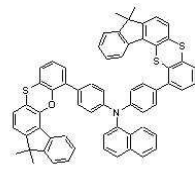
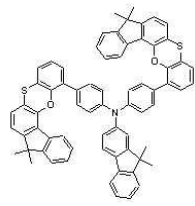
[D-37] [D-38] [D-39] [D-40]



[D-41] [D-42]



[D-43] [D-44]

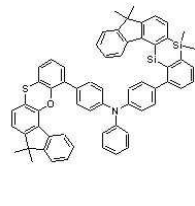
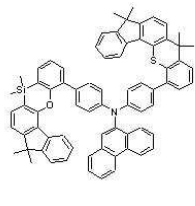
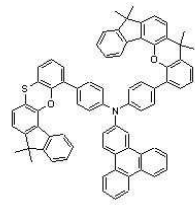
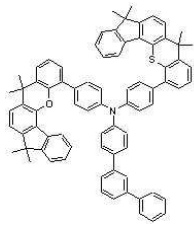


[D-45]

[D-46]

[D-47]

[D-48]

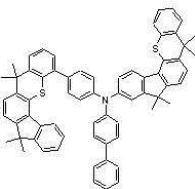
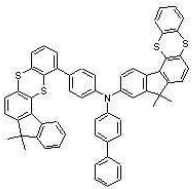
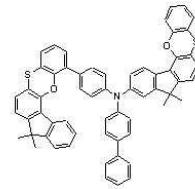
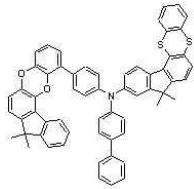


[D-49]

[D-50]

[D-51]

[D-52]

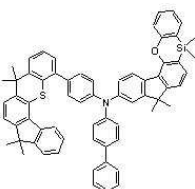
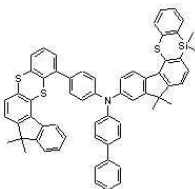
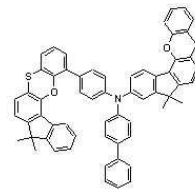
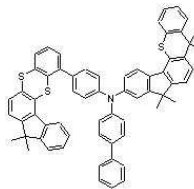


[D-53]

[D-54]

[D-55]

[D-56]

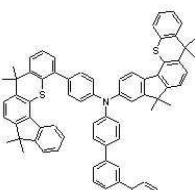
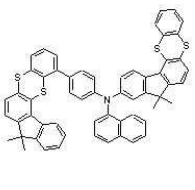
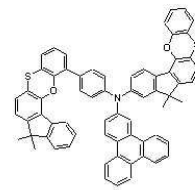
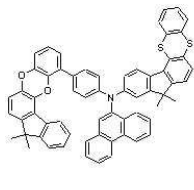


[D-57]

[D-58]

[D-59]

[D-60]

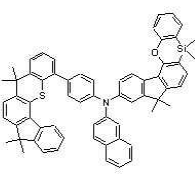
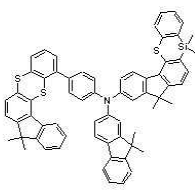
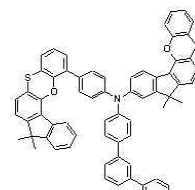
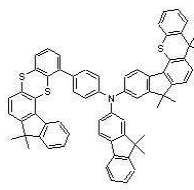


[D-61]

[D-62]

[D-63]

[D-64]



청구항 10

삭제

청구항 11

제1항에 있어서,

상기 유기광전자소자용 화합물은 3중항 여기에너지(T1) 2.0eV 이상인 것인 유기광전자소자용 화합물.

청구항 12

제1항에 있어서,

상기 유기광전자소자는, 유기광전자, 유기발광소자, 유기태양전지, 유기트랜지스터, 유기 감광체 드럼 및 유기메모리소자로 이루어진 군에서 선택되는 것인 유기광전자소자용 화합물.

청구항 13

양극, 음극 및 상기 양극과 음극 사이에 개재되는 적어도 한 층 이상의 유기박막층을 포함하는 유기발광소자에 있어서,

상기 유기박막층 중 적어도 어느 한 층은 상기 제1항에 따른 유기광전자소자용 화합물을 포함하는 것인 유기발광소자.

청구항 14

제13항에 있어서,

상기 유기박막층은 발광층, 정공수송층, 정공주입층, 전자수송층, 전자주입층, 정공차단층 및 이들의 조합으로 이루어진 군에서 선택되는 것인 유기발광소자.

청구항 15

제14항에 있어서,

상기 유기광전자소자용 화합물은 정공수송층 또는 정공주입층 내에 포함되는 것인 유기발광소자.

청구항 16

제14항에 있어서,

상기 유기광전자소자용 화합물은 발광층 내에 포함되는 것인 유기발광소자.

청구항 17

제14항에 있어서,

상기 유기광전자소자용 화합물은 발광층 내에 인광 또는 형광 호스트 재료로서 사용되는 것인 유기발광소자.

청구항 18

제13항의 유기발광소자를 포함하는 표시장치.

발명의 설명

기술 분야

[0001] 수명, 효율, 전기화학적 안정성 및 열적 안정성이 우수한 유기광전자소자를 제공할 수 있는 유기광전자소자용 화합물, 이를 포함하는 유기발광소자 및 상기 유기발광소자를 포함하는 표시장치에 관한 것이다.

[0002]

배경 기술

[0003] 유기광전자소자(organic optoelectric device)라 함은 정공 또는 전자를 이용한 전극과 유기물 사이에서의 전하 교류를 필요로 하는 소자를 의미한다.

[0004] 유기광전자소자는 동작 원리에 따라 하기와 같이 크게 두 가지로 나눌 수 있다. 첫째는 외부의 광원으로부터 소자로 유입된 광자에 의하여 유기물층에서 엑시톤(exciton)이 형성되고 이 엑시톤이 전자와 정공으로 분리되고, 이 전자와 정공이 각각 다른 전극으로 전달되어 전류원(전압원)으로 사용되는 형태의 전자소자이다.

[0005] 둘째는 2 개 이상의 전극에 전압 또는 전류를 가하여 전극과 계면을 이루는 유기물 반도체에 정공 또는 전자를 주입하고, 주입된 전자와 정공에 의하여 동작하는 형태의 전자소자이다.

[0006] 유기광전자소자의 예로는 유기광전소자, 유기발광소자, 유기태양전지, 유기감광체 드럼(organic photoconductor drum), 유기트랜지스터 등이 있으며, 이들은 모두 소자의 구동을 위하여 정공의 주입 또는 수송 물질, 전자의 주입 또는 수송 물질, 또는 발광 물질을 필요로 한다.

[0007] 특히, 유기발광소자(organic light emitting diode, OLED)는 최근 평판 디스플레이(flat panel display)의 수요가 증가함에 따라 주목받고 있다. 일반적으로 유기 발광 현상이란 유기 물질을 이용하여 전기에너지를 빛에너지로 전환시켜주는 현상을 말한다.

[0008] 이러한 유기발광소자는 유기발광재료에 전류를 가하여 전기에너지를 빛으로 전환시키는 소자로서 통상 양극(anode)과 음극(cathode) 사이에 기능성 유기물 층이 삽입된 구조로 이루어져 있다. 여기서 유기물층은 유기발광소자의 효율과 안정성을 높이기 위하여 각기 다른 물질로 구성된 다층의 구조로 이루어진 경우가 많으며, 예컨대 정공주입층, 정공수송층, 발광층, 전자수송층, 전자주입층 등으로 이루어질 수 있다.

[0009] 이러한 유기발광소자의 구조에서 두 전극 사이에 전압을 걸어주게 되면 양극에서는 정공(hole)이, 음극에서는 전자(electron)가 유기물층에 주입되게 되고, 주입된 정공과 전자가 만나 재결합(recombination)에 의해 에너지가 높은 여기자를 형성하게 된다. 이때 형성된 여기자가 다시 바닥상태(ground state)로 이동하면서 특정한 파장을 갖는 빛이 발생하게 된다.

[0010] 최근에는, 형광 발광물질뿐 아니라 인광 발광물질도 유기발광소자의 발광물질로 사용될 수 있음이 알려졌으며, 이러한 인광 발광은 바닥상태(ground state)에서 여기상태(excited state)로 전자가 전이한 후, 계간 전이(intersystem crossing)를 통해 단일항 여기자가 삼중항 여기자로 비발광 전이된 다음, 삼중항 여기자가 바닥상태로 전이하면서 발광하는 메카니즘으로 이루어진다.

[0011] 상기한 바와 같이 유기발광소자에서 유기물층으로 사용되는 재료는 기능에 따라, 발광 재료와 전하 수송 재료, 예컨대 정공주입 재료, 정공수송 재료, 전자수송 재료, 전자주입 재료 등으로 분류될 수 있다.

[0012] 또한, 발광 재료는 발광색에 따라 청색, 녹색, 적색 발광재료와 보다 나은 천연색을 구현하기 위해 필요한 노란색 및 주황색 발광 재료로 구분될 수 있다.

[0013] 한편, 발광 재료로서 하나의 물질만 사용하는 경우 분자간 상호 작용에 의하여 최대 발광 파장이 장파장으로 이동하고 색순도가 떨어지거나 발광 감쇄 효과로 소자의 효율이 감소되는 문제가 발생하므로, 색순도의 증가와 에너지 전이를 통한 발광 효율과 안정성을 증가시키기 위하여 발광 재료로서 호스트/도판트 계를 사용할 수 있다.

[0014] 유기발광소자가 전술한 우수한 특징들을 충분히 발휘하기 위해서는 소자 내 유기물층을 이루는 물질, 예컨대 정공주입 물질, 정공수송 물질, 발광 물질, 전자수송 물질, 전자주입 물질, 발광 재료 중 호스트 및/또는 도판트 등이 안정하고 효율적인 재료에 의하여 뒷받침되는 것이 선행되어야 하며, 아직까지 안정하고 효율적인 유기발광소자용 유기물층 재료의 개발이 충분히 이루어지지 않은 상태이며, 따라서 새로운 재료의 개발이 계속 요구되고 있다. 이와 같은 재료 개발의 필요성은 전술한 다른 유기광전자소자에서도 마찬가지이다.

[0015] 또한, 저분자 유기발광소자는 진공 증착법에 의해 박막의 형태로 소자를 제조하므로 효율 및 수명성능이 좋으며, 고분자 유기 발광 소자는 잉크젯(Inkjet) 또는 스핀코팅(spin coating)법을 사용하여 초기 투자비가 적고 대면적화가 유리한 장점이 있다.

[0016] 저분자 유기발광소자 및 고분자 유기발광소자는 모두 자체발광, 고속응답, 광시야각, 초박형, 고화질, 내구성, 넓은 구동온도범위 등의 장점을 가지고 있어 차세대 디스플레이로 주목을 받고 있다. 특히 기존의 LCD(liquid crystal display)와 비교하여 자체발광형으로서 어두운 곳이나 외부의 빛이 들어와도 시안성이 좋으며, 백라이트가 필요 없어 LCD의 1/3수준으로 두께 및 무게를 줄일 수 있다.

[0017] 또한, 응답속도가 LCD에 비해 1000배 이상 빠른 마이크로 초 단위여서 잔상이 없는 완벽한 동영상 구현할 수 있다. 따라서, 최근 본격적인 멀티미디어 시대에 맞춰 최적의 디스플레이로 각광받을 것으로 기대되며, 이러한 장점을 바탕으로 1980년대 후반 최초 개발 이후 효율 80배, 수명 100배 이상에 이르는 급격한 기술발전을 이루어 왔고, 최근에는 40인치 유기발광소자 패널이 발표되는 등 대형화가 급속히 진행되고 있다.

[0018] 대형화를 위해서는 발광 효율의 증대 및 소자의 수명 향상이 수반되어야 한다. 이때, 소자의 발광 효율은 발광층 내의 정공과 전자의 결합이 원활히 이루어져야 한다. 그러나, 일반적으로 유기물의 전자 이동도는 정공 이동도에 비해 느리므로, 발광층 내의 정공과 전자의 결합이 효율적으로 이루어지기 위해서는, 효율적인 전자 수송층을 사용하여 음극으로부터의 전자 주입 및 이동도를 높이는 동시에, 정공의 이동을 차단할 수 있어야 한다.

[0019] 또한, 수명 향상을 위해서는 소자의 구동시 발생하는 줄열(Joule heat)로 인해 재료가 결정화되는 것을 방지하여야 한다. 따라서, 전자의 주입 및 이동성이 우수하며, 전기화학적 안정성이 높은 유기 화합물에 대한 개발이 필요하다.

[0020]

발명의 내용

해결하려는 과제

[0021] 정공 주입 및 수송 역할 또는 전자 주입 및 수송역할을 할 수 있고, 적절한 도펀트와 함께 발광 호스트로서의 역할을 할 수 있는 유기광전자소자용 화합물을 제공한다.

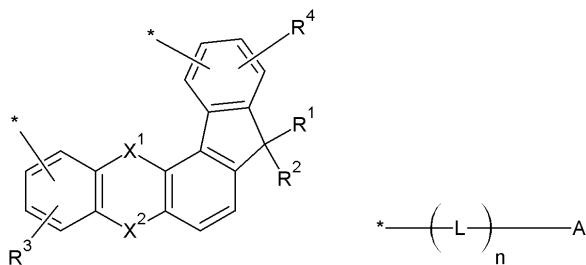
[0022] 수명, 효율, 구동전압, 전기화학적 안정성 및 열적 안정성이 우수한 유기발광소자 및 이를 포함하는 표시장치를 제공하고자 한다.

[0023]

과제의 해결 수단

[0024] 본 발명의 일 구현예에서는, 하기 화학식 1 및 2의 조합으로 표시되는 유기광전자소자용 화합물을 제공한다.

[0025] [화학식 1] [화학식 2]



[0026]

[0027] 상기 화학식 1 및 2에서, X¹ 및 X²는 독립적으로, -O-, -S-, -S(O)₂-, -CR^aR^b-, -SiR^aR^b- 또는 -GeR^aR^b-이며, 상기 R^a 및 R^b는 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C10 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기 또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴기이고, R¹ 내지 R⁴는 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C10 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기 또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴기이고, A는 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아

릴기 또는 $-N(L^1R')(L^2R'')$ 이며, 상기 R' 및 R''는 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C10 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기 또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴기이고, L은 $-SiR^aR^b-$, 단일결합, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C10 알케닐렌기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C10 알키닐렌기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴렌기 또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴렌기이며, 상기 R' 및 R''는 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C10 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기 또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴기이고, L^1 및 L^2 는 독립적으로 단일결합, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C10 알케닐렌기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C10 알키닐렌기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴렌기 또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴렌기이고, n, m 및 o는 독립적으로 0 내지 3의 정수 중 어느 하나이고, 화학식 2의 *는 화학식 1의 두 개의 * 중 어느 하나의 결합 위치를 나타낸다.

[0028]

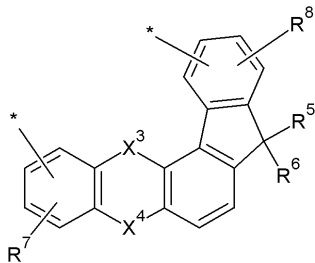
상기 A는 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기 또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴기일 수 있다.

[0029]

상기 A는 $-N(L^1R')(L^2R'')$ 이고, 상기 R' 또는 R'' 중 어느 하나는 하기 화학식 3으로 표시되는 치환기일 수 있다.

[0030]

[화학식 3]



[0031]

[0032]

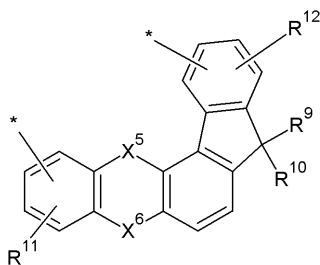
상기 화학식 3에서, X^3 및 X^4 은 독립적으로, $-O-$, $-S-$, $-S(O)_2-$, $-CR^aR^b-$, $-SiR^aR^b-$ 또는 $-GeR^aR^b-$ 이며, 상기 R^a 및 R^b 는 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C10 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기 또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴기이고, R^5 내지 R^8 는 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C10 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기 또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴기이고, 상기 화학식 3의 두 개의 * 중 어느 하나는 상기 $-N(L^1R')(L^2R'')$ 에서 L^1 또는 L^2 와의 결합을 나타낸다.

[0033]

상기 R'는 상기 화학식 3으로 표시되는 치환기이고, 상기 R''는 하기 화학식 4로 표시되는 치환기일 수 있다.

[0034]

[화학식 4]



[0035]

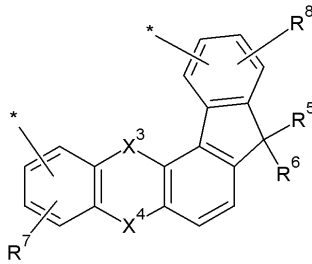
[0036]

상기 화학식 4에서, X^5 및 X^6 은 독립적으로, $-O-$, $-S-$, $-S(O)_2-$, $-CR^aR^b-$, $-SiR^aR^b-$ 또는 $-GeR^aR^b-$ 이며, 상기 R^a 및 R^b 는 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C10 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기 또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴기이고, R^9 내지 R^{12} 는 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C10 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기 또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴기이고, 상기 화학식 4의 두 개의 * 중 어느 하나는 상기 $-N(L^1R')(L^2R'')$ 에서 L^1 또는 L^2 와의 결합을

나타낸다.

[0037] 상기 A는 하기 화학식 3으로 표시되는 치환기일 수 있다.

[0038] [화학식 3]

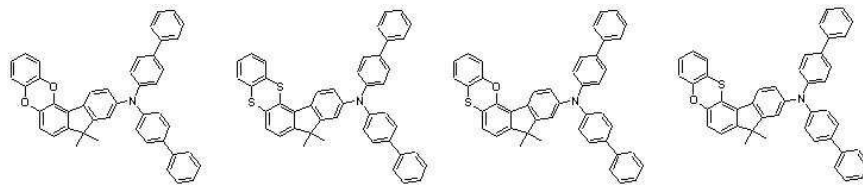


[0039]

[0040] 상기 화학식 3에서, X³ 및 X⁴는 독립적으로, -O-, -S-, -S(O)₂-, -CR^aR^b-, -SiR^aR^b- 또는 -GeR^aR^b-이며, 상기 R^a 및 R^b는 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C10 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기 또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴기이고, R⁵ 내지 R⁸는 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C10 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기 또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴기이고, 상기 화학식 3의 두 개의 * 중 어느 하나는 화학식 2의 L과의 결합을 나타낸다.

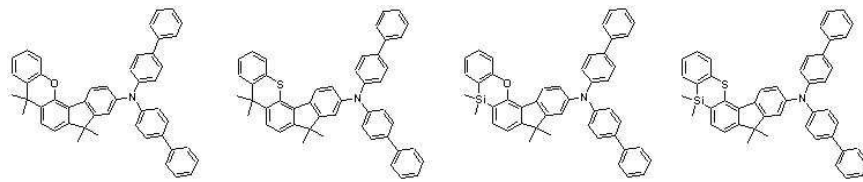
[0041] 상기 유기광전자소자용 화합물은 하기 화학식 A-1 내지 A-183 중 어느 하나로 표시될 수 있다.

[0042] [A-1] [A-2] [A-3] [A-4]



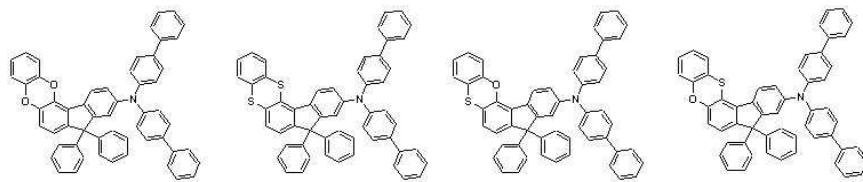
[0043]

[0044] [A-5] [A-6] [A-7] [A-8]



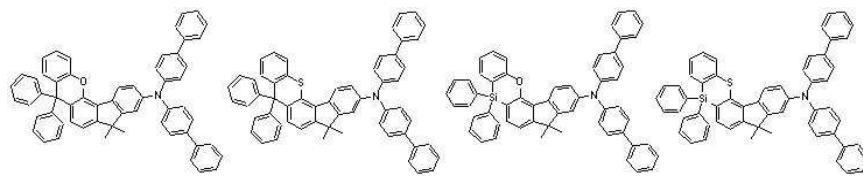
[0045]

[0046] [A-9] [A-10] [A-11] [A-12]



[0047]

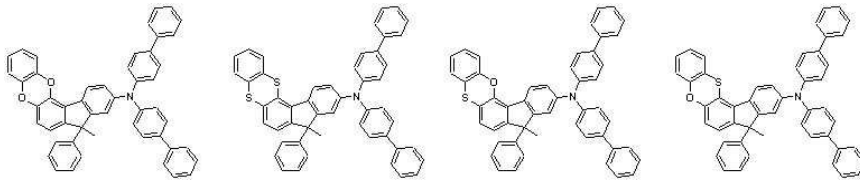
[0048] [A-13] [A-14] [A-15] [A-16]



[0049]

[0050]

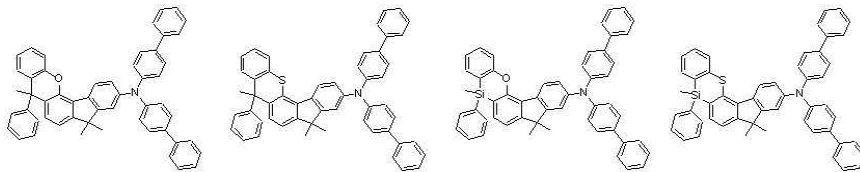
[A-17] [A-18] [A-19] [A-20]



[0051]

[0052]

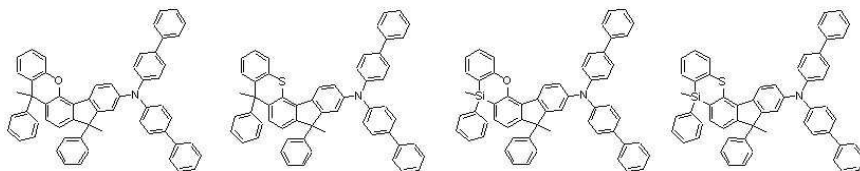
[A-21] [A-22] [A-23] [A-24]



[0053]

[0054]

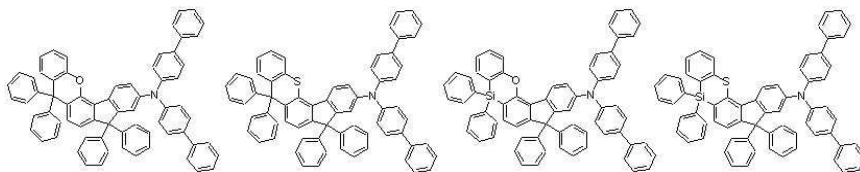
[A-25] [A-26] [A-27] [A-28]



[0055]

[0056]

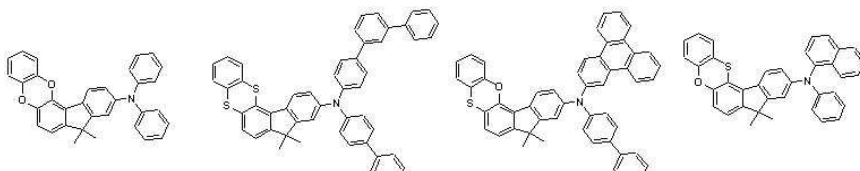
[A-29] [A-30] [A-31] [A-32]



[0057]

[0058]

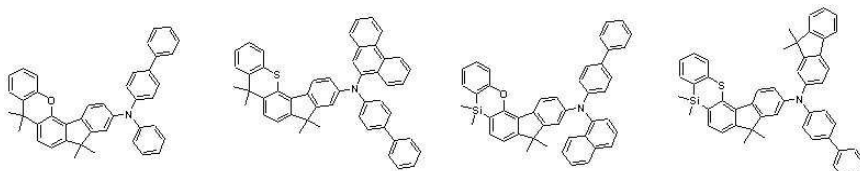
[A-33] [A-34] [A-35] [A-36]



[0059]

[0060]

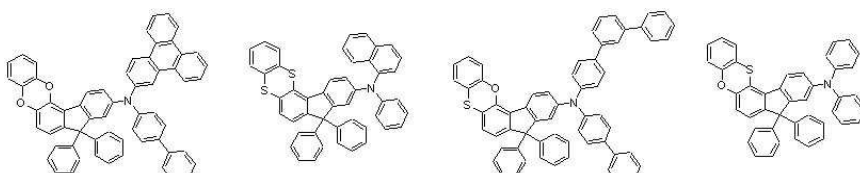
[A-37] [A-38] [A-39] [A-40]



[0061]

[0062]

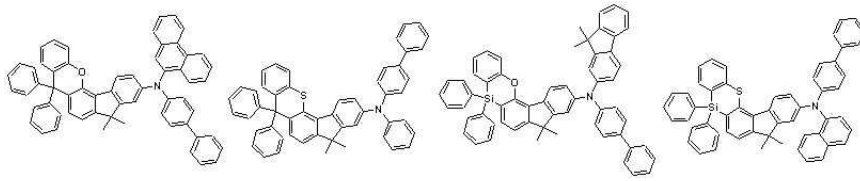
[A-41] [A-42] [A-43] [A-44]



[0063]

[0064]

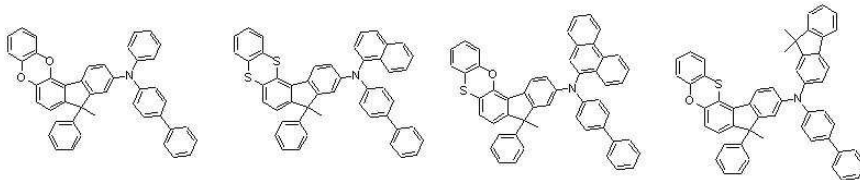
[A-45] [A-46] [A-47] [A-48]



[0065]

[0066]

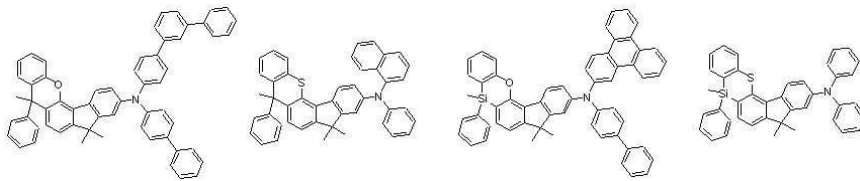
[A-49] [A-50] [A-51] [A-52]



[0067]

[0068]

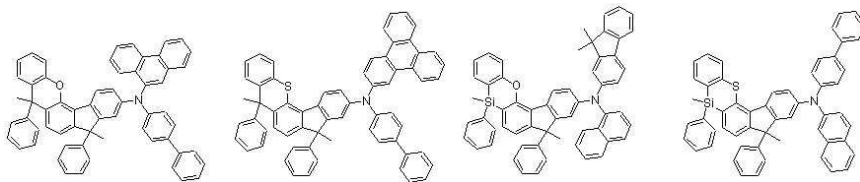
[A-53] [A-54] [A-55] [A-56]



[0069]

[0070]

[A-57] [A-58] [A-59] [A-60]



[0071]

[0072]

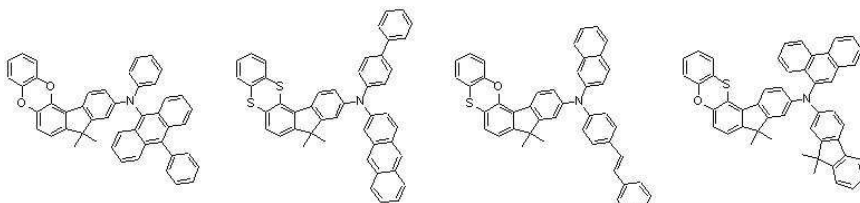
[A-61] [A-62] [A-63] [A-64]



[0073]

[0074]

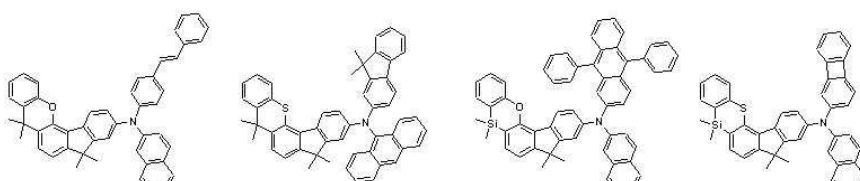
[A-65] [A-66] [A-67] [A-68]



[0075]

[0076]

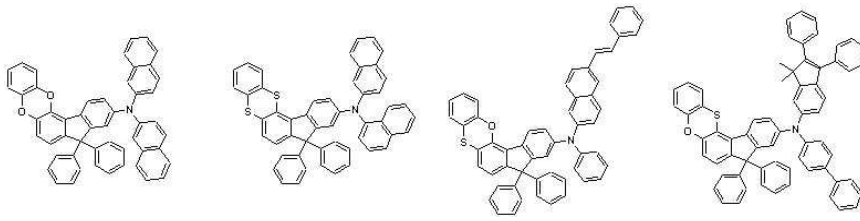
[A-69] [A-70] [A-71] [A-72]



[0077]

[0078]

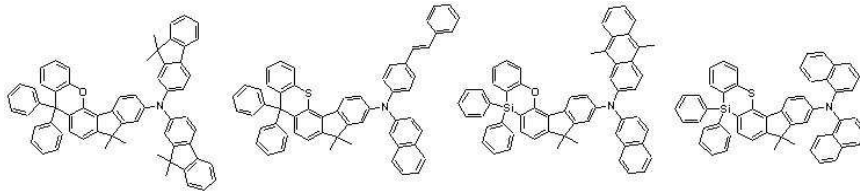
[A-73] [A-74] [A-78] [A-79]



[0079]

[0080]

[A-80] [A-81] [A-82] [A-83]



[0081]

[0082]

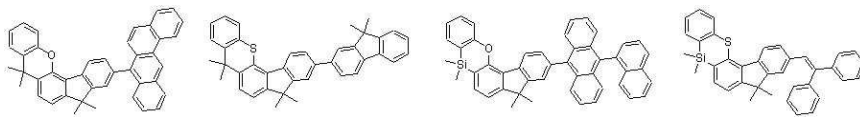
[A-84] [A-85] [A-86] [A-87]



[0083]

[0084]

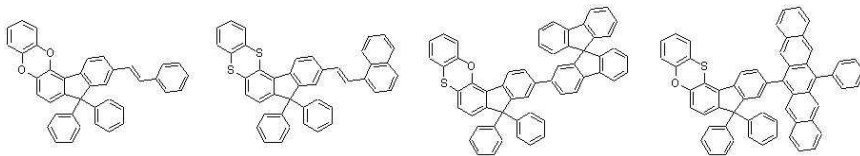
[A-88] [A-89] [A-90] [A-91]



[0085]

[0086]

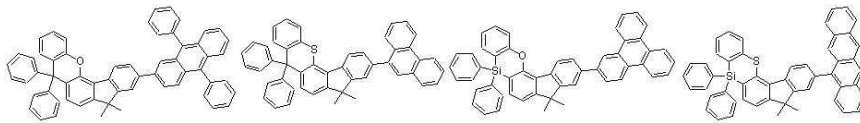
[A-92] [A-93] [A-94] [A-95]



[0087]

[0088]

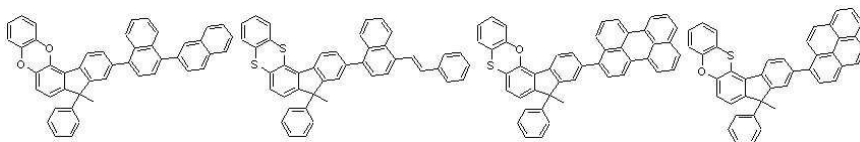
[A-96] [A-97] [A-98] [A-99]



[0089]

[0090]

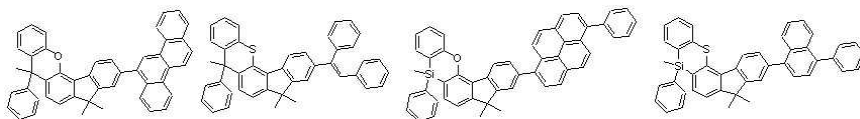
[A-100] [A-101] [A-102] [A-103]



[0091]

[0092]

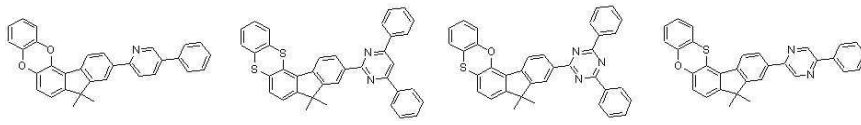
[A-104] [A-105] [A-106] [A-107]



[0093]

[0094]

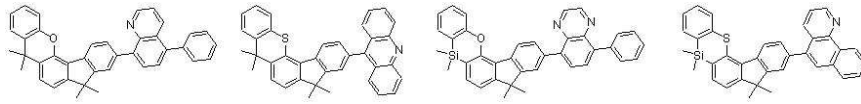
[A-108] [A-109] [A-110] [A-111]



[0095]

[0096]

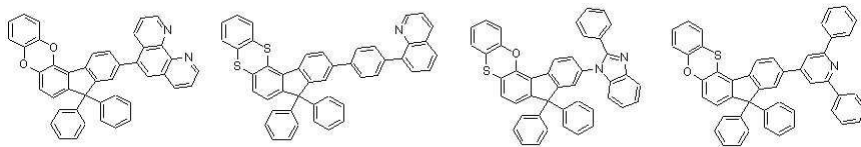
[A-112] [A-113] [A-114] [A-115]



[0097]

[0098]

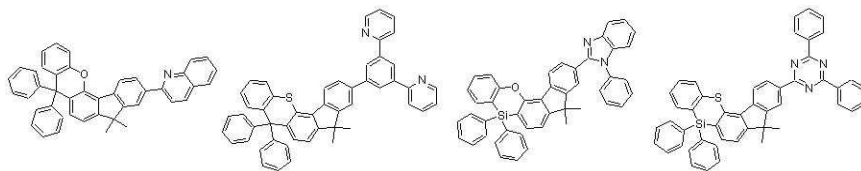
[A-116] [A-117] [A-118] [A-119]



[0099]

[0100]

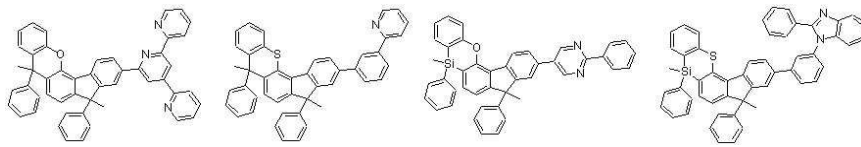
[A-120] [A-121] [A-122] [A-123]



[0101]

[0102]

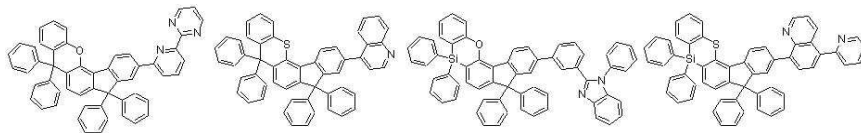
[A-124] [A-125] [A-126] [A-127]



[0103]

[0104]

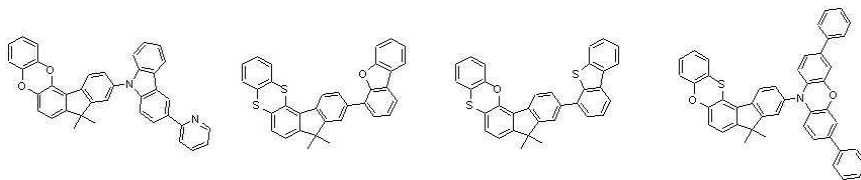
[A-128] [A-129] [A-130] [A-131]



[0105]

[0106]

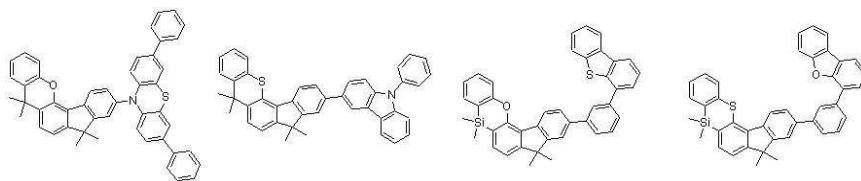
[A-132] [A-133] [A-134] [A-135]



[0107]

[0108]

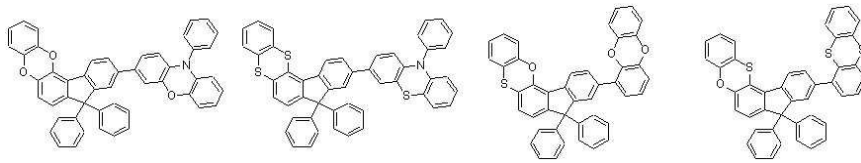
[A-136] [A-137] [A-138] [A-139]



[0109]

[0110]

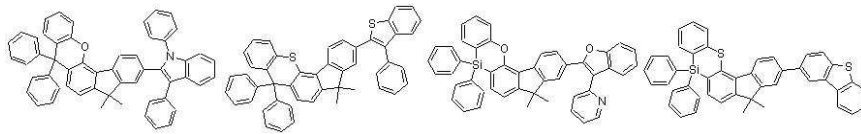
[A-140] [A-141] [A-142] [A-143]



[0111]

[0112]

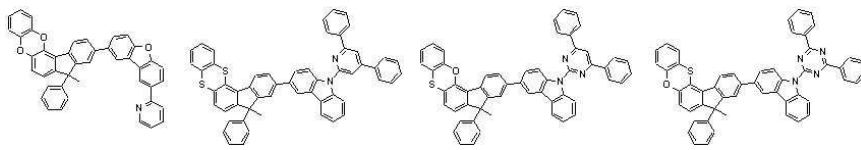
[A-144] [A-145] [A-146] [A-147]



[0113]

[0114]

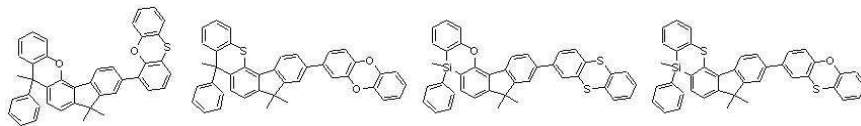
[A-148] [A-149] [A-150] [A-151]



[0115]

[0116]

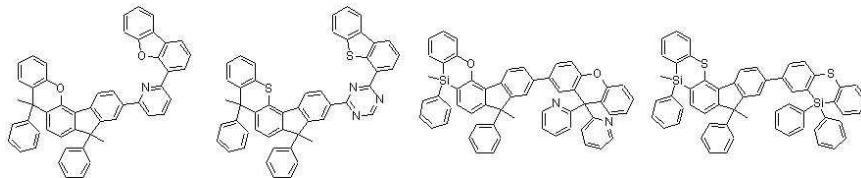
[A-152] [A-153] [A-154] [A-155]



[0117]

[0118]

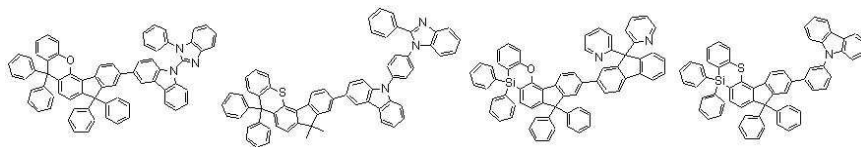
[A-156] [A-157] [A-158] [A-159]



[0119]

[0120]

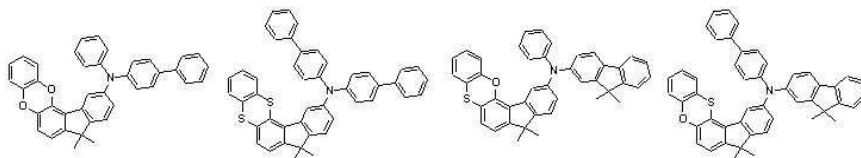
[A-160] [A-161] [A-162] [A-163]



[0121]

[0122]

[A-164] [A-165] [A-166] [A-167]



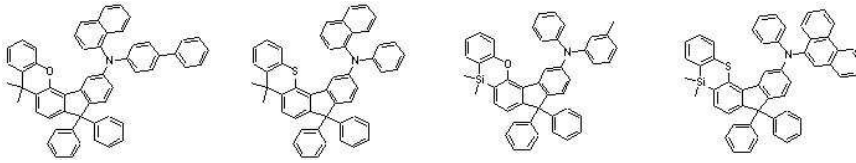
[0123]

[0124]

[0125]

[0126]

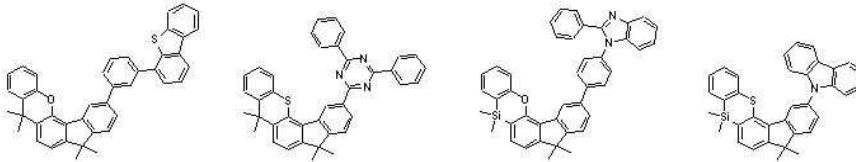
[A-168] [A-169] [A-170] [A-171]



[0127]

[0128]

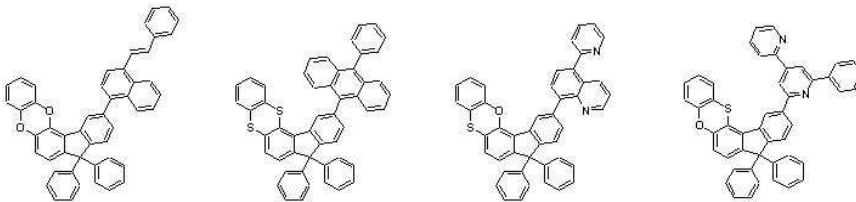
[A-172] [A-173] [A-174] [A-175]



[0129]

[0130]

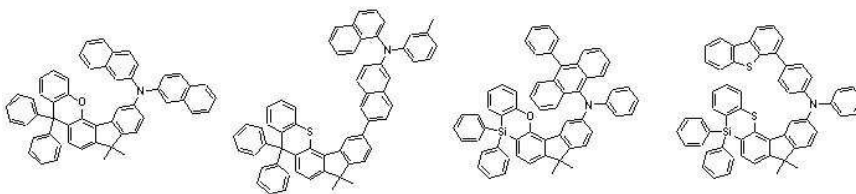
[A-176] [A-177] [A-178] [A-179]



[0131]

[0132]

[A-180] [A-181] [A-182] [A-183]



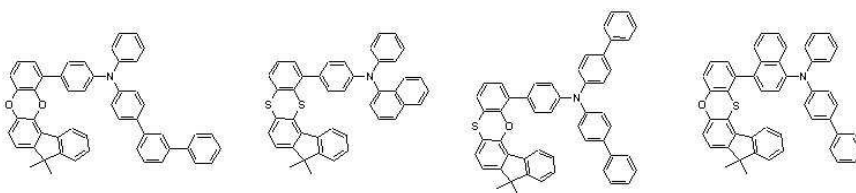
[0133]

[0134]

상기 유기광전자소자용 화합물은 하기 화학식 B-1 내지 B-88 중 어느 하나로 표시될 수 있다.

[0135]

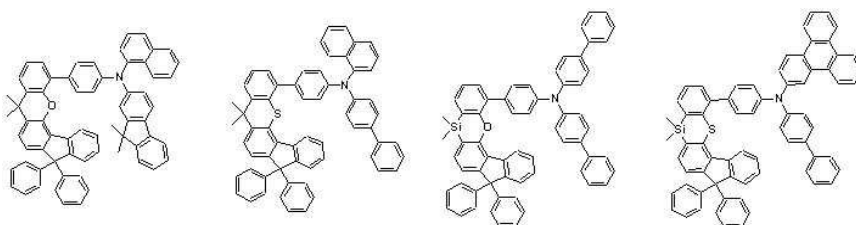
[B-1] [B-2] [B-3] [B-4]



[0136]

[0137]

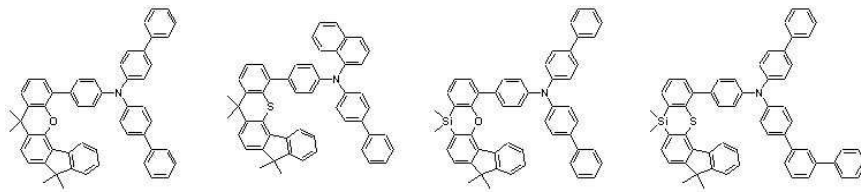
[B-5] [B-6] [B-7] [B-8]



[0138]

[0139]

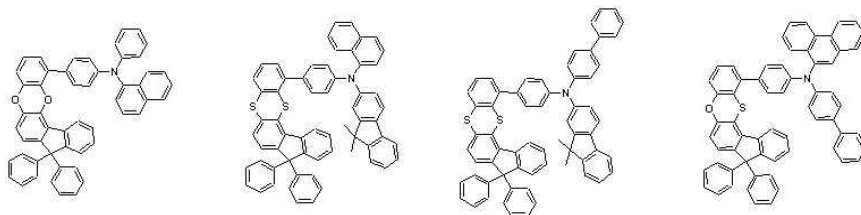
[B-9] [B-10] [B-11] [B-12]



[0140]

[0141]

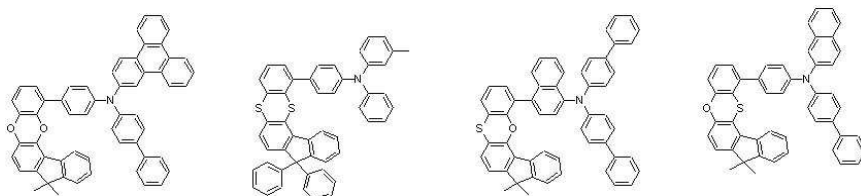
[B-13] [B-14] [B-15] [B-16]



[0142]

[0143]

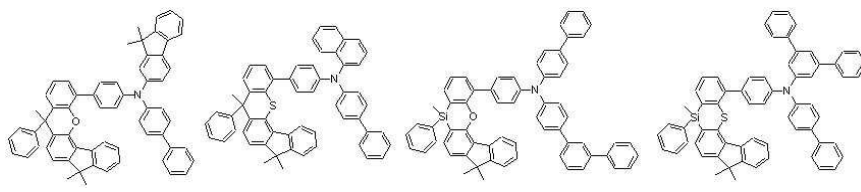
[B-17] [B-18] [B-19] [B-20]



[0144]

[0145]

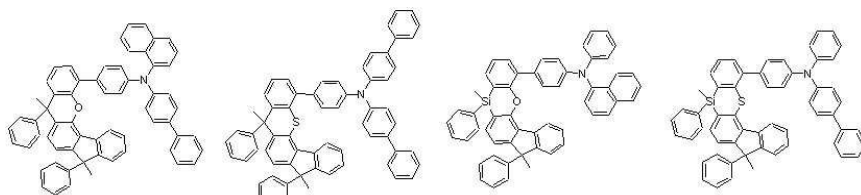
[B-21] [B-22] [B-23] [B-24]



[0146]

[0147]

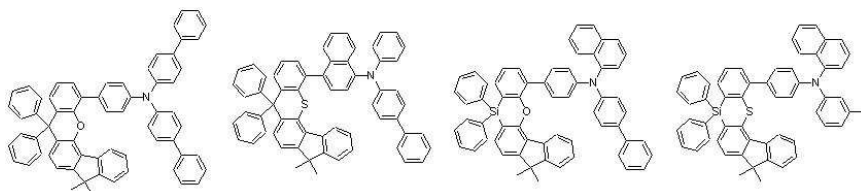
[B-25] [B-26] [B-27] [B-28]



[0148]

[0149]

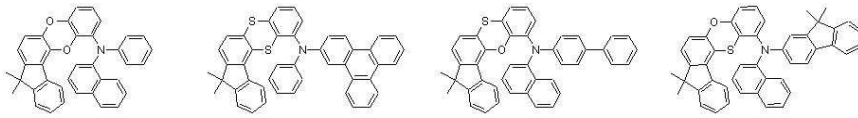
[B-29] [B-30] [B-31] [B-32]



[0150]

[0151]

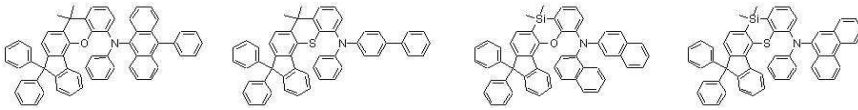
[B-33] [B-34] [B-35] [B-36]



[0152]

[0153]

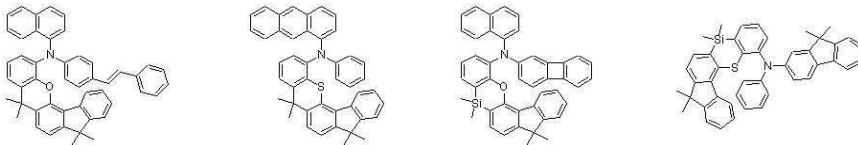
[B-37] [B-38] [B-39] [B-40]



[0154]

[0155]

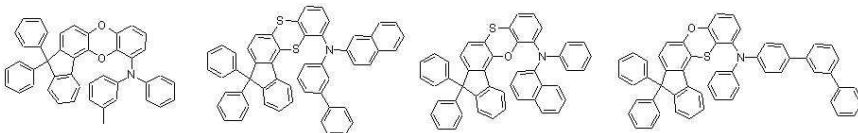
[B-41] [B-42] [B-43] [B-44]



[0156]

[0157]

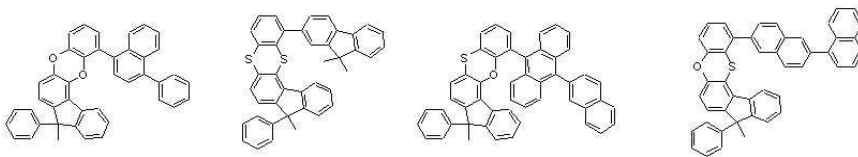
[B-45] [B-46] [B-47] [B-48]



[0158]

[0159]

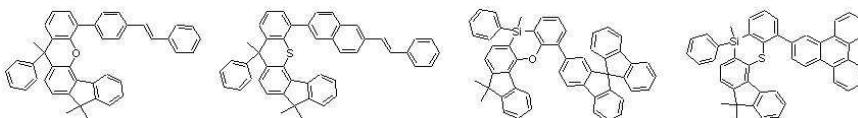
[B-49] [B-50] [B-51] [B-52]



[0160]

[0161]

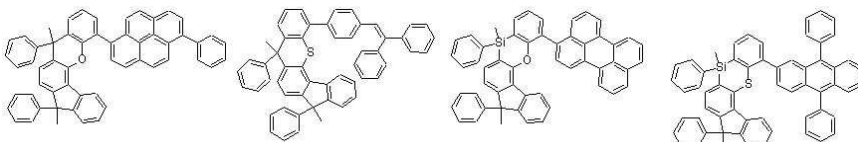
[B-53] [B-54] [B-55] [B-56]



[0162]

[0163]

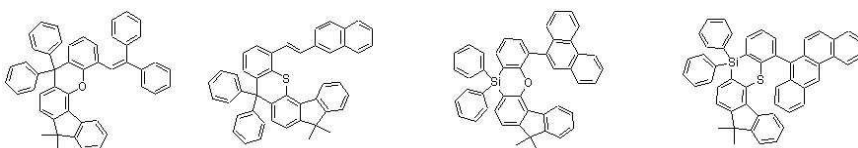
[B-57] [B-58] [B-59] [B-60]



[0164]

[0165]

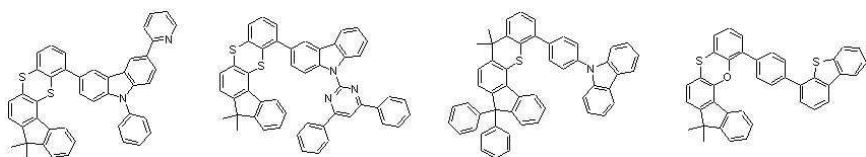
[B-61] [B-62] [B-63] [B-64]



[0166]

[0167]

[B-65] [B-66] [B-67] [B-68]



[0168]

[0169]

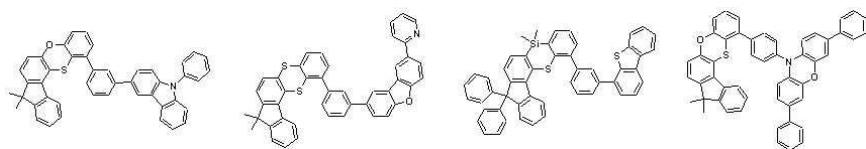
[B-69] [B-70] [B-71] [B-72]



[0170]

[0171]

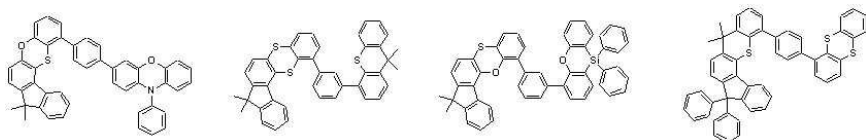
[B-73] [B-74] [B-75] [B-76]



[0172]

[0173]

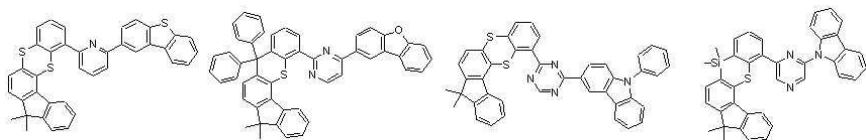
[B-77] [B-78] [B-79] [B-80]



[0174]

[0175]

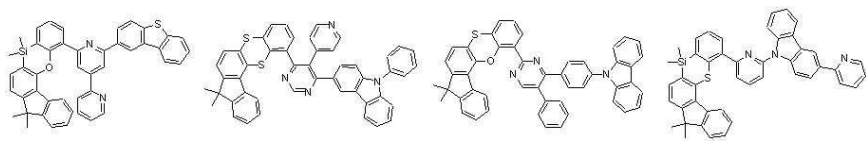
[B-81] [B-82] [B-83] [B-84]



[0176]

[0177]

[B-85] [B-86] [B-87] [B-88]



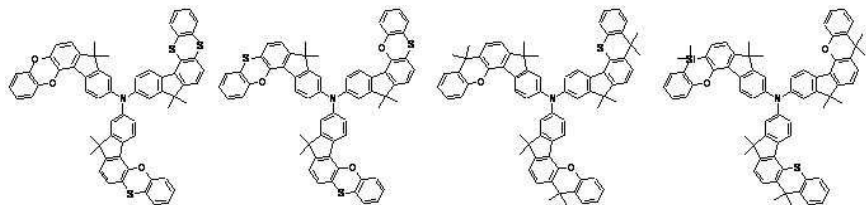
[0178]

[0179]

상기 유기광전자소자용 화합물은 하기 화학식 C-1 내지 C-32 중 어느 하나로 표시될 수 있다.

[0180]

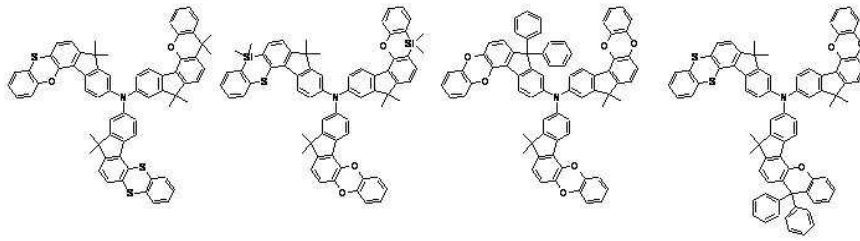
[C-1] [C-2] [C-3] [C-4]



[0181]

[0182]

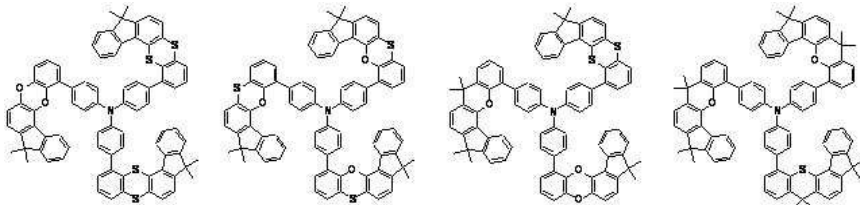
[C-5] [C-6] [C-7] [C-8]



[0183]

[0184]

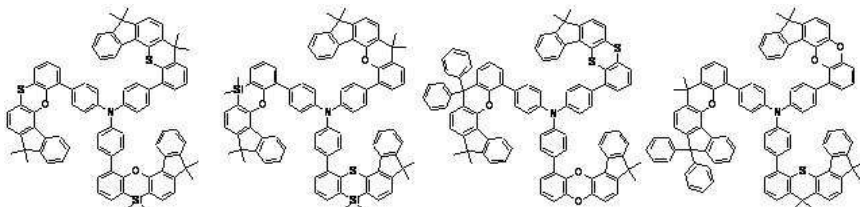
[C-9] [C-10] [C-11] [C-12]



[0185]

[0186]

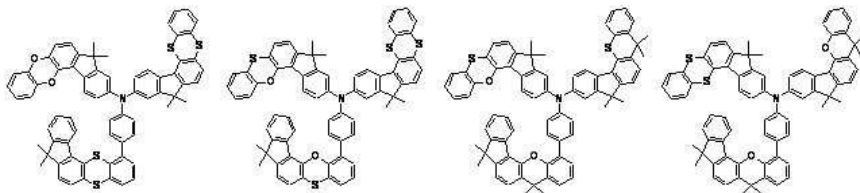
[C-13] [C-14] [C-15] [C-16]



[0187]

[0188]

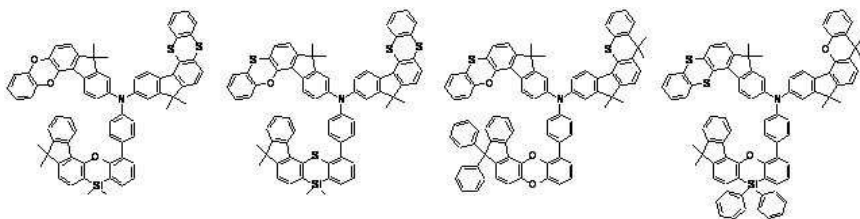
[C-17] [C-18] [C-19] [C-20]



[0189]

[0190]

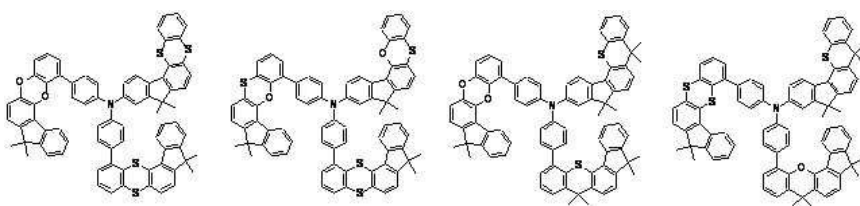
[C-21] [C-22] [C-23] [C-24]



[0191]

[0192]

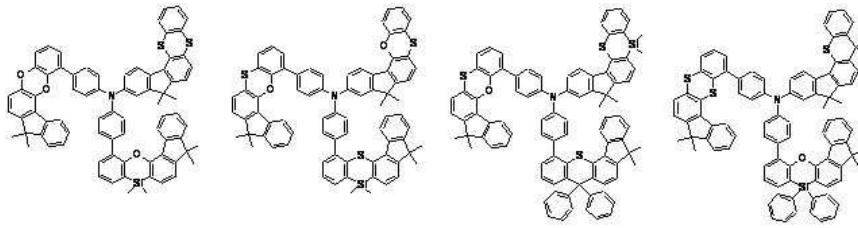
[C-25] [C-26] [C-27] [C-28]



[0193]

[0194]

[C-29] [C-30] [C-31] [C-32]



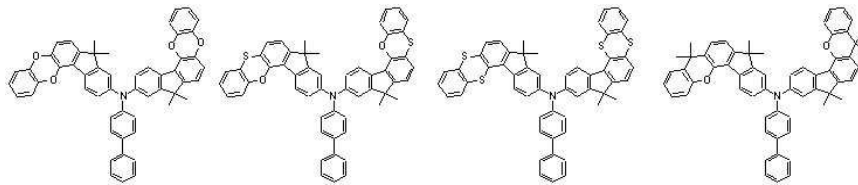
[0195]

[0196]

상기 유기광전자소자용 화합물은 하기 화학식 D-1 내지 D-64 중 어느 하나로 표시될 수 있다.

[0197]

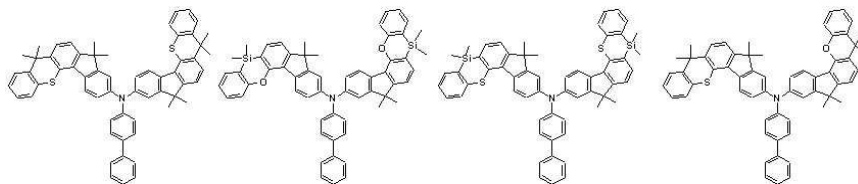
[D-1] [D-2] [D-3] [D-4]



[0198]

[0199]

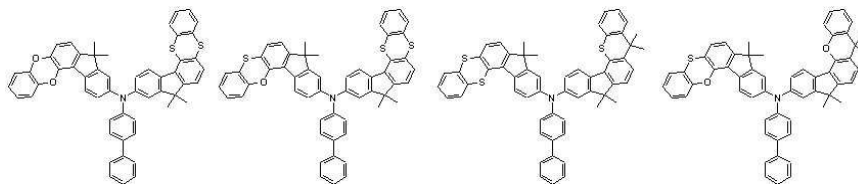
[D-5] [D-6] [D-7] [D-8]



[0200]

[0201]

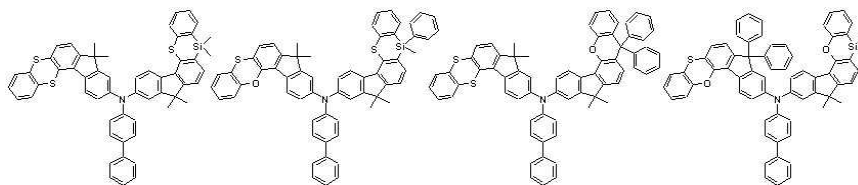
[D-9] [D-10] [D-11] [D-12]



[0202]

[0203]

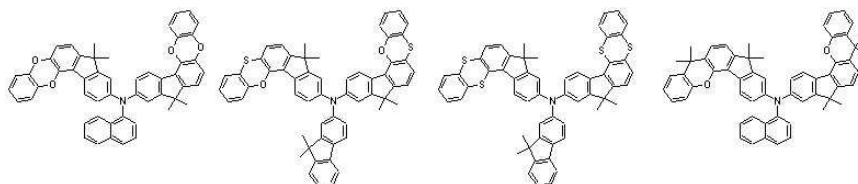
[D-13] [D-14] [D-15] [D-16]



[0204]

[0205]

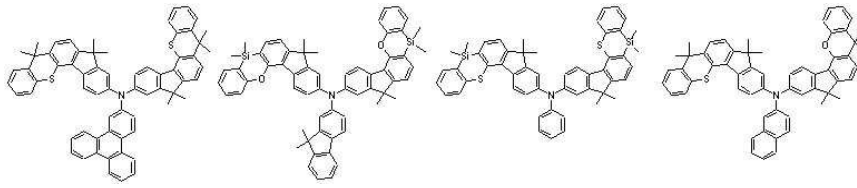
[D-17] [D-18] [D-19] [D-20]



[0206]

[0207]

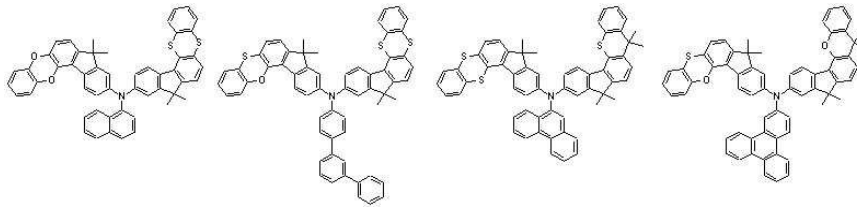
[D-21] [D-22] [D-23] [D-24]



[0208]

[0209]

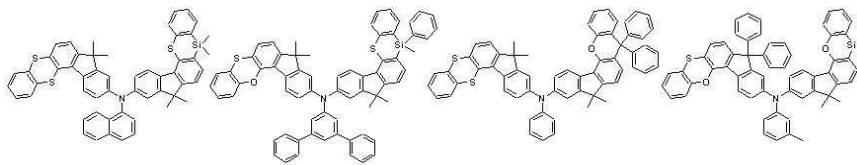
[D-25] [D-26] [D-27] [D-28]



[0210]

[0211]

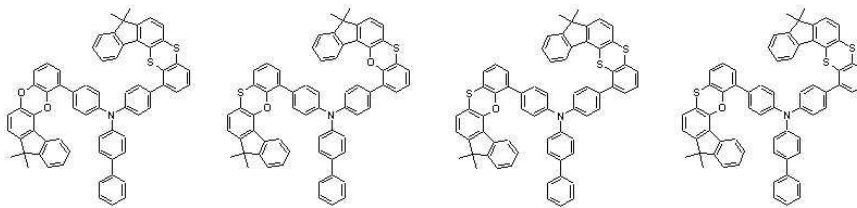
[D-29] [D-30] [D-31] [D-32]



[0212]

[0213]

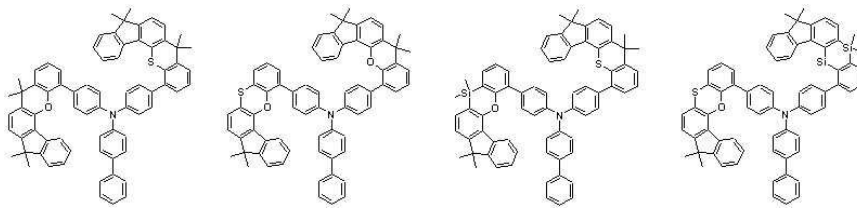
[D-33] [D-34] [D-35] [D-36]



[0214]

[0215]

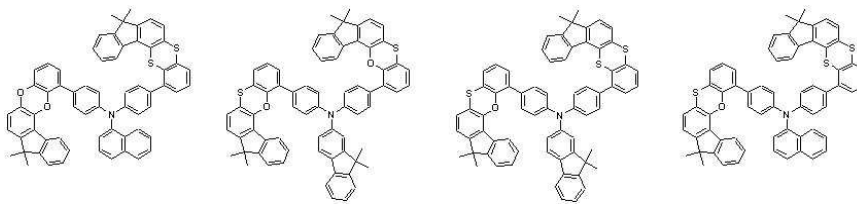
[D-37] [D-38] [D-39] [D-40]



[0216]

[0217]

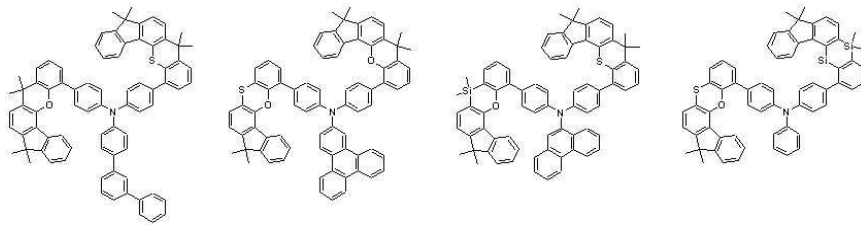
[D-41] [D-42] [D-43] [D-44]



[0218]

[0219]

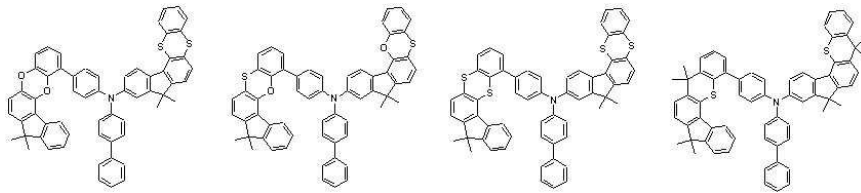
[D-45] [D-46] [D-47] [D-48]



[0220]

[0221]

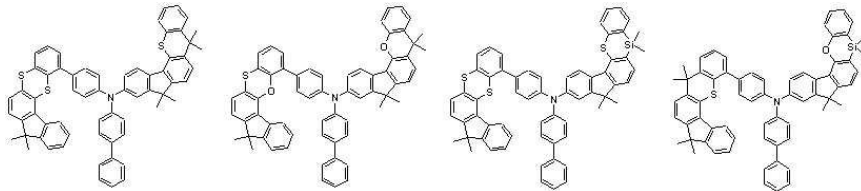
[D-49] [D-50] [D-51] [D-52]



[0222]

[0223]

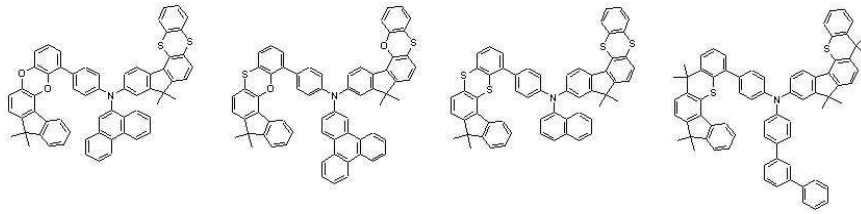
[D-53] [D-54] [D-55] [D-56]



[0224]

[0225]

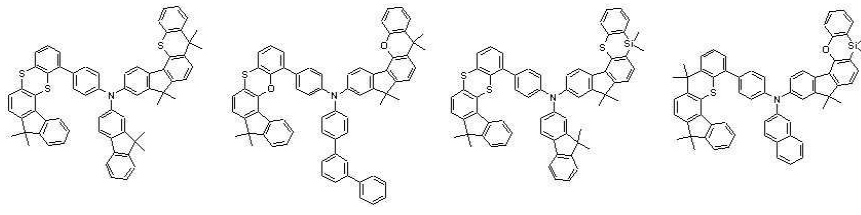
[D-57] [D-58] [D-59] [D-60]



[0226]

[0227]

[D-61] [D-62] [D-63] [D-64]



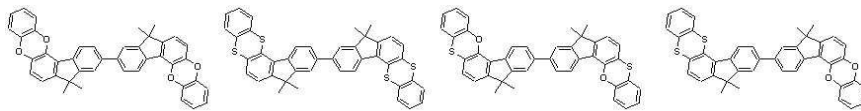
[0228]

[0229]

상기 유기광전자소자용 화합물은 하기 화학식 E-1 내지 E-192 중 어느 하나로 표시될 수 있다.

[0230]

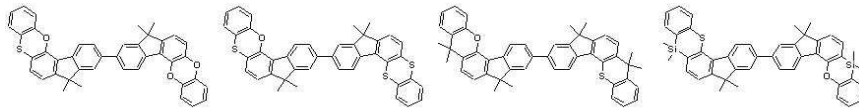
[E-1] [E-2] [E-3] [E-4]



[0231]

[0232]

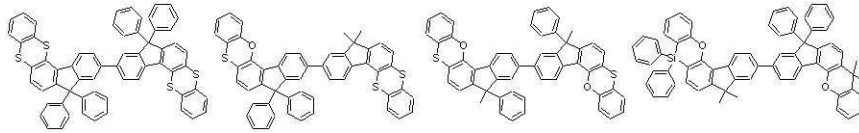
[E-5] [E-6] [E-7] [E-8]



[0233]

[0234]

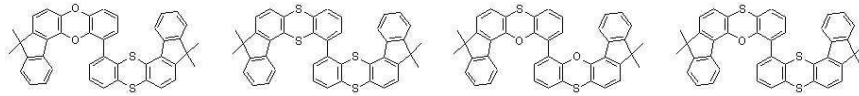
[E-9] [E-10] [E-11] [E-12]



[0235]

[0236]

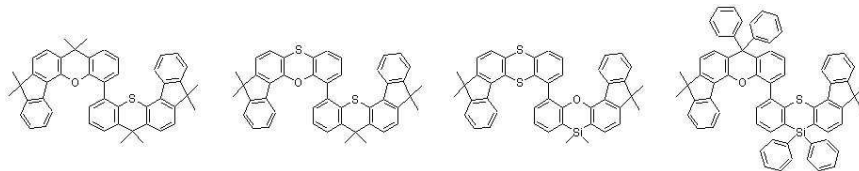
[E-13] [E-14] [E-15] [E-16]



[0237]

[0238]

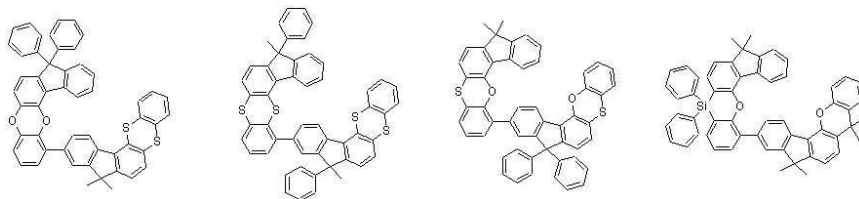
[E-17] [E-18] [E-19] [E-20]



[0239]

[0240]

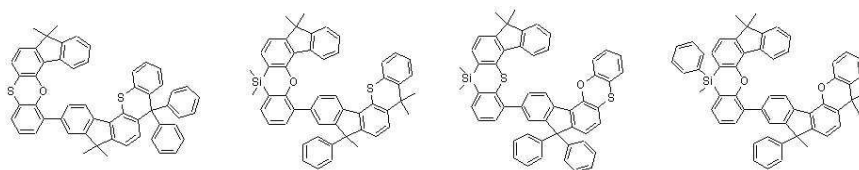
[E-21] [E-22] [E-23] [E-24]



[0241]

[0242]

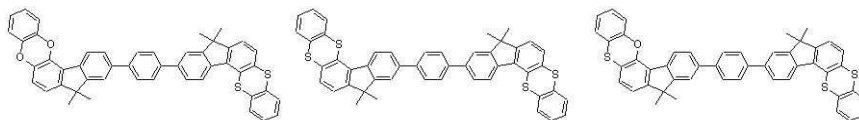
[E-25] [E-26] [E-27] [E-28]



[0243]

[0244]

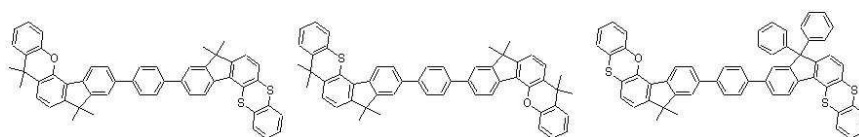
[E-29] [E-30] [E-31]



[0245]

[0246]

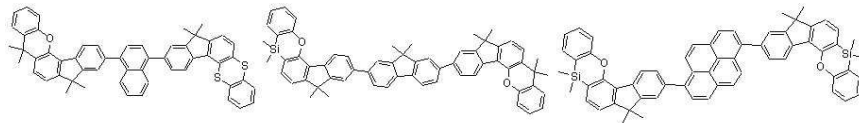
[E-32] [E-33] [E-34]



[0247]

[0248]

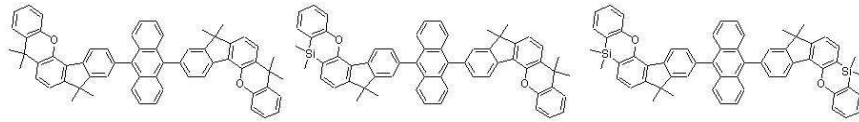
[E-35] [E-36] [E-37]



[0249]

[0250]

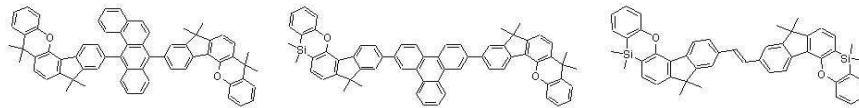
[E-38] [E-39] [E-40]



[0251]

[0252]

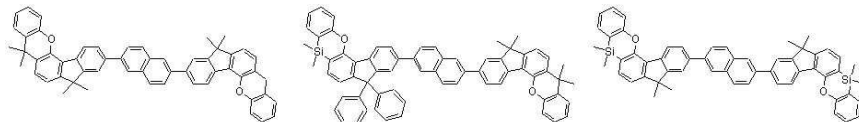
[E-41] [E-42] [E-43]



[0253]

[0254]

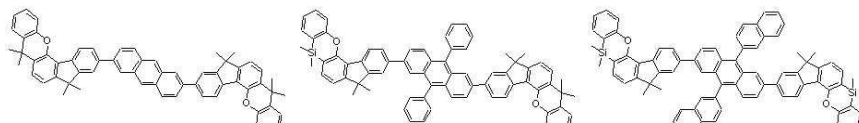
[E-44] [E-45] [E-46]



[0255]

[0256]

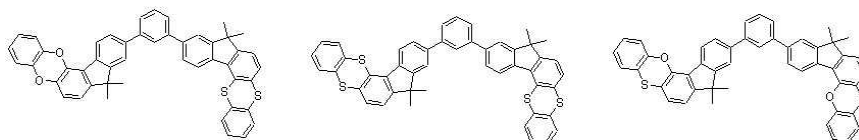
[E-47] [E-48] [E-49]



[0257]

[0258]

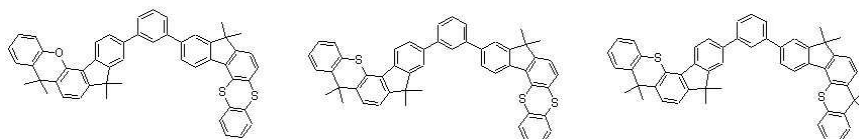
[E-50] [E-51] [E-52]



[0259]

[0260]

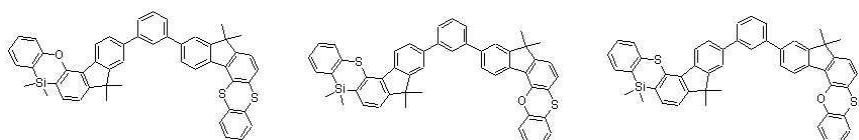
[E-53] [E-54] [E-55]



[0261]

[0262]

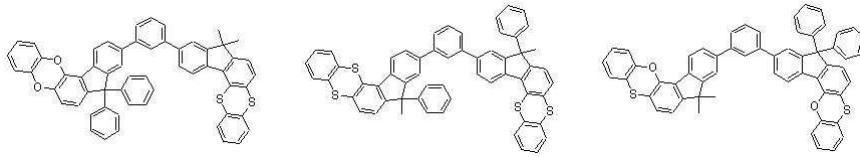
[E-56] [E-57] [E-58]



[0263]

[0264]

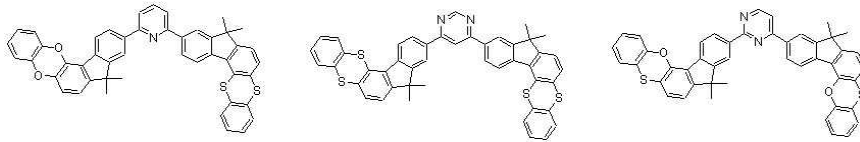
[E-59] [E-60] [E-61]



[0265]

[0266]

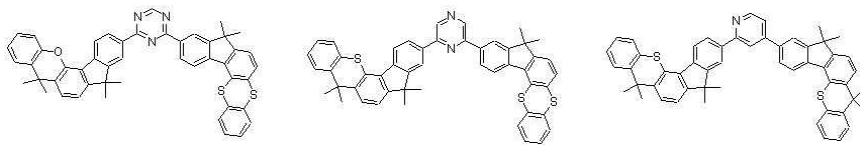
[E-62] [E-63] [E-64]



[0267]

[0268]

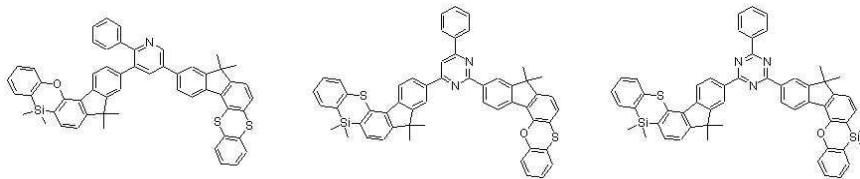
[E-65] [E-66] [E-67]



[0269]

[0270]

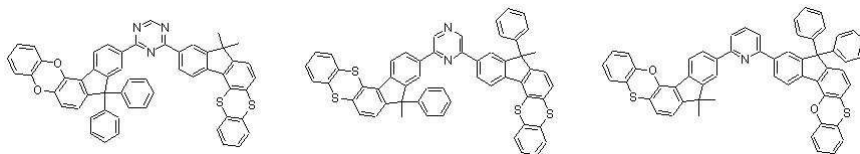
[E-68] [E-69] [E-70]



[0271]

[0272]

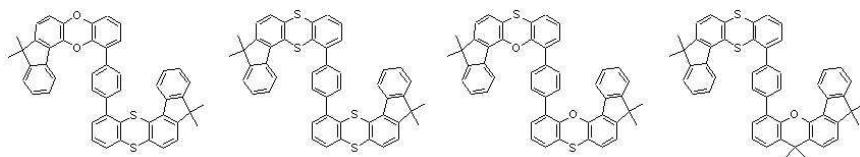
[E-71] [E-72] [E-73]



[0273]

[0274]

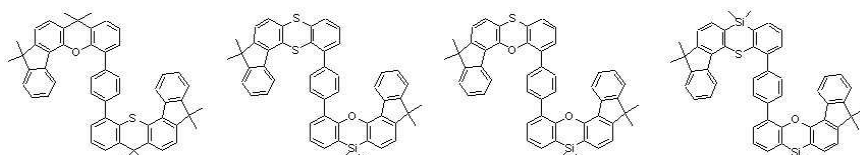
[E-74] [E-75] [E-76] [E-77]



[0275]

[0276]

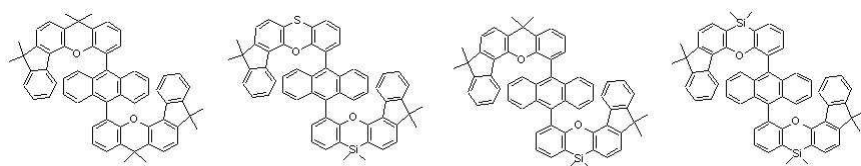
[E-78] [E-79] [E-80] [E-81]



[0277]

[0278]

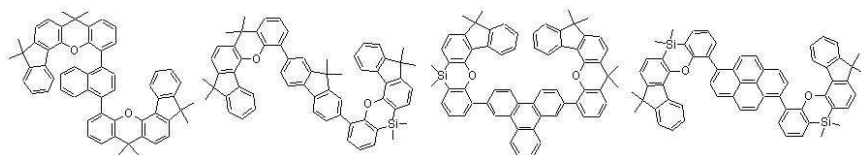
[E-82] [E-83] [E-84] [E-85]



[0279]

[0280]

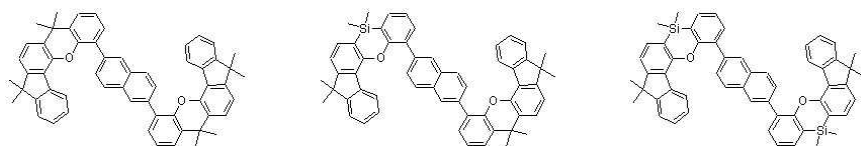
[E-86] [E-87] [E-88] [E-89]



[0281]

[0282]

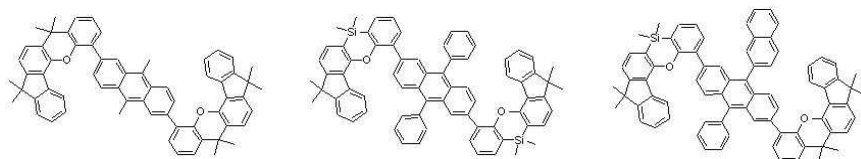
[E-90] [E-91] [E-92]



[0283]

[0284]

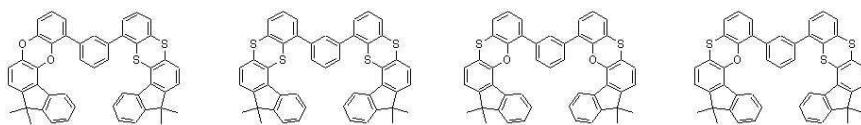
[E-93] [E-94] [E-95]



[0285]

[0286]

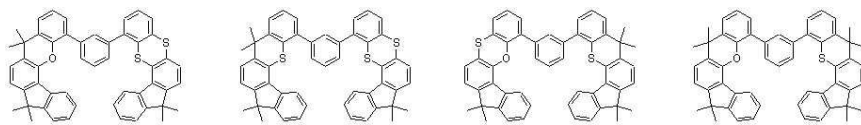
[E-96] [E-97] [E-98] [E-99]



[0287]

[0288]

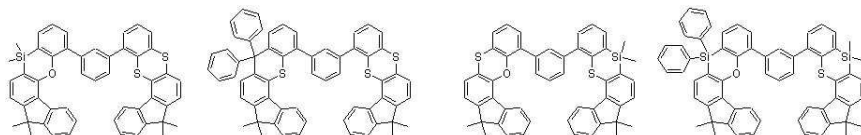
[E-100] [E-101] [E-102] [E-103]



[0289]

[0290]

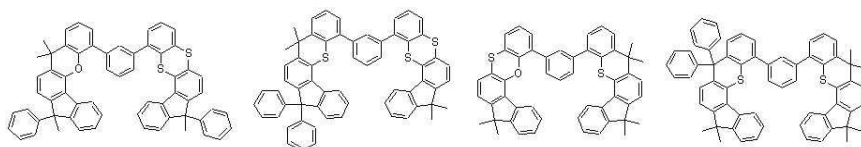
[E-104] [E-105] [E-106] [E-107]



[0291]

[0292]

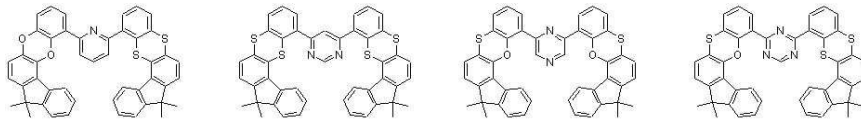
[E-108] [E-109] [E-110] [E-111]



[0293]

[0294]

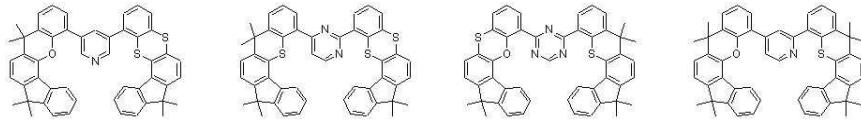
[E-112] [E-113] [E-114] [E-115]



[0295]

[0296]

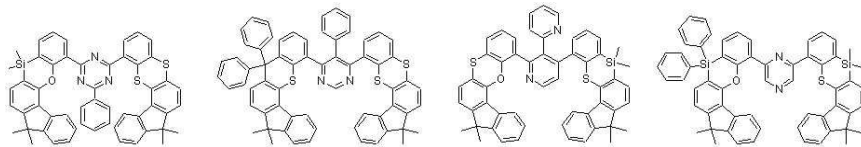
[E-116] [E-117] [E-118] [E-119]



[0297]

[0298]

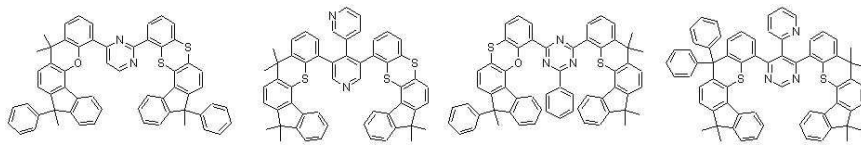
[E-120] [E-121] [E-122] [E-123]



[0299]

[0300]

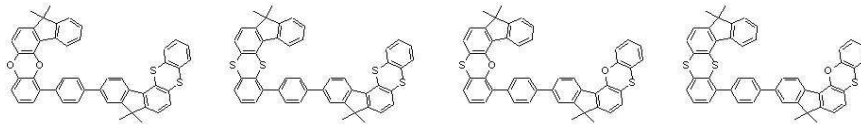
[E-124] [E-125] [E-126] [E-127]



[0301]

[0302]

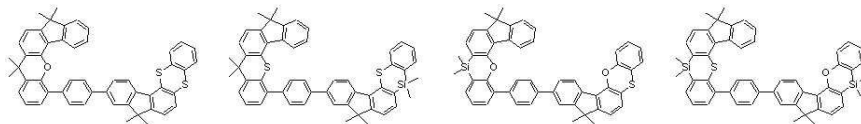
[E-128] [E-129] [E-130] [E-131]



[0303]

[0304]

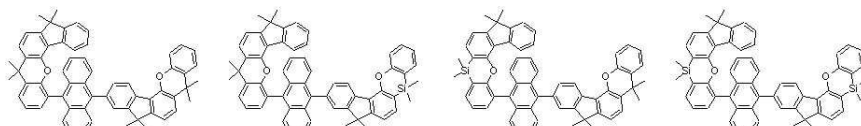
[E-132] [E-133] [E-134] [E-135]



[0305]

[0306]

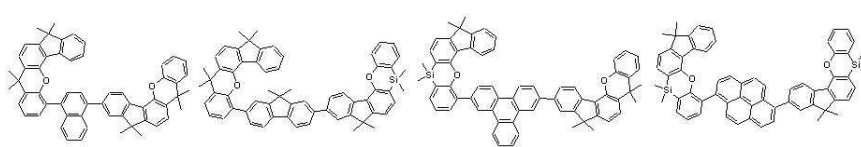
[E-136] [E-137] [E-138] [E-139]



[0307]

[0308]

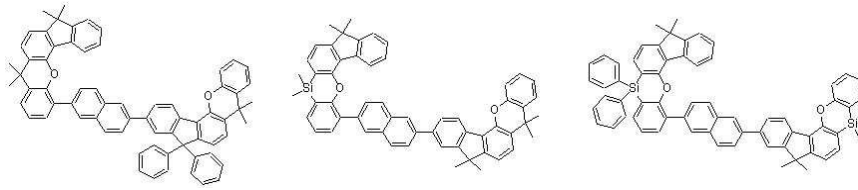
[E-140] [E-141] [E-142] [E-143]



[0309]

[0310]

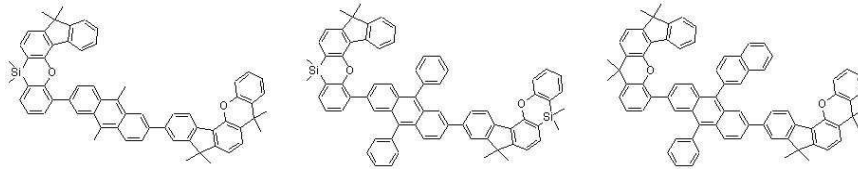
[E-144] [E-145] [E-146]



[0311]

[0312]

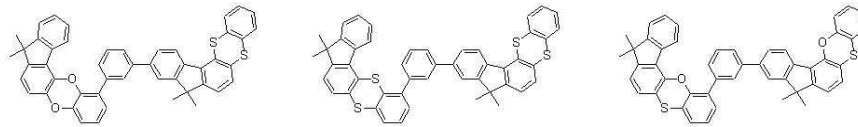
[E-147] [E-148] [E-149]



[0313]

[0314]

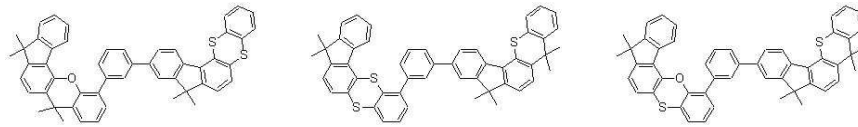
[E-150] [E-151] [E-152]



[0315]

[0316]

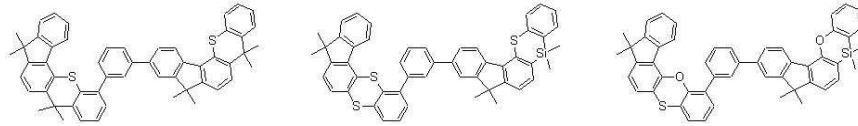
[E-153] [E-154] [E-155]



[0317]

[0318]

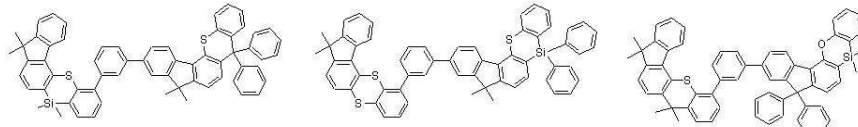
[E-156] [E-157] [E-158]



[0319]

[0320]

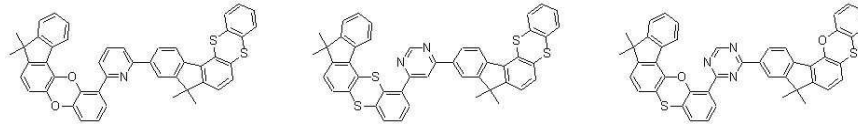
[E-159] [E-160] [E-161]



[0321]

[0322]

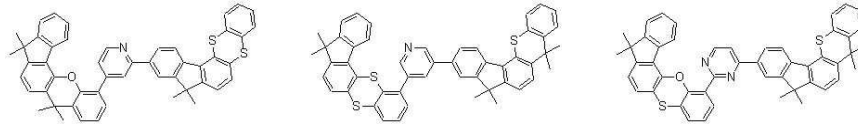
[E-162] [E-163] [E-164]



[0323]

[0324]

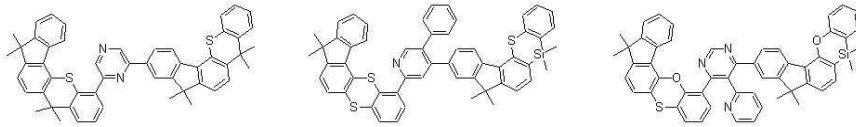
[E-165] [E-166] [E-167]



[0325]

[0326]

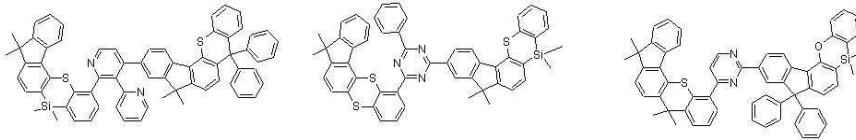
[E-168] [E-169] [E-170]



[0327]

[0328]

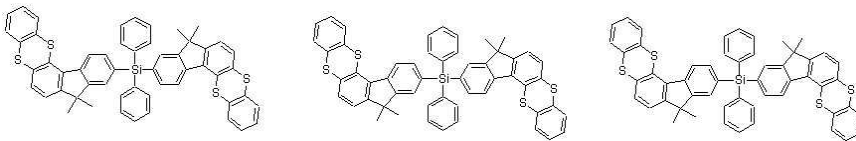
[E-171] [E-172] [E-173]



[0329]

[0330]

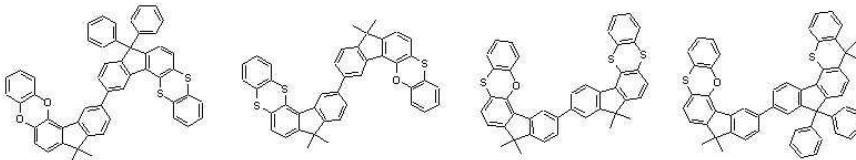
[E-174] [E-175] [E-176]



[0331]

[0332]

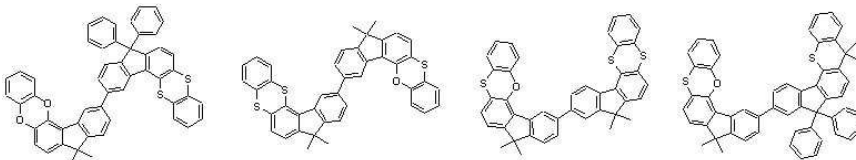
[E-177] [E-178] [E-179] [E-180]



[0333]

[0334]

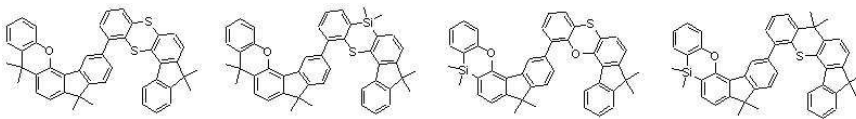
[E-181] [E-182] [E-183] [E-184]



[0335]

[0336]

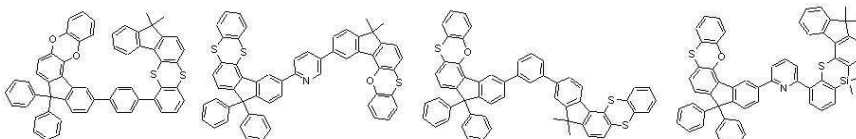
[E-185] [E-186] [E-187] [E-188]



[0337]

[0338]

[E-189] [E-190] [E-191] [E-192]



[0339]

[0340]

[0341]

상기 유기광전자소자용 화합물은 3중항 여기에너지(T1) 2.0eV 이상일 수 있다.

[0342]

상기 유기광전자소자는, 유기광전소자, 유기발광소자, 유기태양전지, 유기트랜지스터, 유기 감광체 드럼 및 유기메모리소자로 이루어진 군에서 선택될 수 있다.

[0343]

본 발명의 또 다른 일 구현예에서는, 양극, 음극 및 상기 양극과 음극 사이에 게재되는 적어도 한 층 이상의 유

기박막층을 포함하는 유기발광소자에 있어서, 상기 유기박막층 중 적어도 어느 한 층은 전술한 유기광전자소자용 화합물을 포함하는 것인 유기발광소자를 제공한다.

- [0344] 상기 유기박막층은 발광층, 정공수송층, 정공주입층, 전자수송층, 전자주입층, 정공차단층 및 이들의 조합으로 이루어진 군에서 선택될 수 있다.
- [0345] 상기 유기광전자소자용 화합물은 정공수송층 또는 정공주입층 내에 포함될 수 있다.
- [0346] 상기 유기광전자소자용 화합물은 발광층 내에 포함될 수 있다.
- [0347] 상기 유기광전자소자용 화합물은 발광층 내에 인광 또는 형광 호스트 재료로서 사용될 수 있다.
- [0348] 본 발명의 또 다른 일 구현예에서는, 전술한 유기발광소자를 포함하는 표시장치를 제공한다.
- [0349]

발명의 효과

- [0350] 높은 정공 또는 전자 수송성, 막 안정성 열적 안정성 및 높은 3중항 여기에너지를 가지는 화합물을 제공할 수 있다.
- [0351] 이러한 화합물은 발광층의 정공 주입/수송 재료, 호스트 재료, 또는 전자 주입/수송 재료로 이용될 수 있다. 이를 이용한 유기광전자소자는 우수한 전기화학적 및 열적 안정성을 가지게 되어 수명 특성이 우수하고, 낮은 구동전압에서도 높은 발광효율을 가질 수 있다.
- [0352]

도면의 간단한 설명

- [0353] 도 1 내지 도 5는 본 발명의 일 구현예에 따른 유기광전자소자용 화합물을 이용하여 제조될 수 있는 유기발광소자에 대한 다양한 구현예들을 나타내는 단면도이다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

- [0354] 이하, 본 발명의 구현예를 상세히 설명하기로 한다. 다만, 이는 예시로서 제시되는 것으로, 이에 의해 본 발명이 제한되지는 않으며 본 발명은 후술할 청구범위의 범주에 의해 정의될 뿐이다.
- [0355] 본 명세서에서 "치환"이란 별도의 정의가 없는 한, 치환기 또는 화합물 중의 적어도 하나의 수소가 중수소, 할로젠기, 히드록시기, 아미노기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 아민기, 니트로기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C40 실릴기, C1 내지 C30 알킬기, C1 내지 C10 알킬실릴기, C3 내지 C30 시클로알킬기, C6 내지 C30 아릴기, C1 내지 C20 알콕시기, 플루오로기, 트리플루오로메틸기 등의 C1 내지 C10 트리플루오로알킬기 또는 시아노기로 치환된 것을 의미한다.
- [0356] 또한 상기 치환된 할로젠기, 히드록시기, 아미노기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 아민기, 니트로기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C40 실릴기, C1 내지 C30 알킬기, C1 내지 C10 알킬실릴기, C3 내지 C30 시클로알킬기, C6 내지 C30 아릴기, C1 내지 C20 알콕시기, 플루오로기, 트리플루오로메틸기 등의 C1 내지 C10 트리플루오로알킬기 또는 시아노기 중 인접한 두 개의 치환기가 융합되어 고리를 형성할 수도 있다.
- [0357] 본 명세서에서 "헤테로"란 별도의 정의가 없는 한, 하나의 작용기 내에 N, O, S 및 P로 이루어진 군에서 선택되는 헤테로 원자를 1 내지 3개 함유하고, 나머지는 탄소인 것을 의미한다.
- [0358] 본 명세서에서 "이들의 조합"이란 별도의 정의가 없는 한, 둘 이상의 치환기가 연결기로 결합되어 있거나, 둘 이상의 치환기가 축합하여 결합되어 있는 것을 의미한다.
- [0359] 본 명세서에서 "알킬(alkyl)기"이란 별도의 정의가 없는 한, 지방족 탄화수소기를 의미한다. 알킬기는 어떠한 이중결합이나 삼중결합을 포함하고 있지 않은 "포화 알킬(saturated alkyl)기"일 수 있다.
- [0360] 알킬기는 적어도 하나의 이중결합 또는 삼중결합을 포함하고 있는 "불포화 알킬(unsaturated alkyl)기"일 수도 있다.

[0361] "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.

[0362] 알킬기는 C1 내지 C20인 알킬기일 수 있다. 보다 구체적으로 알킬기는 C1 내지 C10 알킬기 또는 C1 내지 C6 알킬기일 수도 있다.

[0363] 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.

[0364] 구체적인 예를 들어 상기 알킬기는 메틸기, 에틸기, 프로필기, 이소프로필기, 부틸기, 이소부틸기, t-부틸기, 펜틸기, 헥실기, 에테닐기, 프로페닐기, 부테닐기, 시클로프로필기, 시클로부틸기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기 등을 의미한다.

[0365] "방향족기"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.

[0366] "아릴(aryl)기"는 모노시클릭 또는 융합 고리 폴리시클릭(즉, 탄소원자들의 인접한 쌍들을 나눠 가지는 고리) 작용기를 포함한다.

[0367] "헤테로아릴(heteroaryl)기"는 아릴기 내에 N, O, S 및 P로 이루어진 군에서 선택되는 헤테로 원자를 1 내지 3 개 함유하고, 나머지는 탄소인 것을 의미한다. 상기 헤테로아릴기가 융합고리인 경우, 각각의 고리마다 상기 헤테로 원자를 1 내지 3개 포함할 수 있다.

[0368] 본 명세서에서 카바졸계 유도체라함은 치환 또는 비치환된 카바졸릴기의 질소원자가 질소가 아닌 헤테로 원자 또는 탄소로 치환된 구조를 의미한다. 구체적인 예를 들어, 디벤조퓨란(디벤조퓨라닐기), 디벤조티오펜(디벤조티오펜닐기), 플루오렌(플루오레닐기) 등 이다.

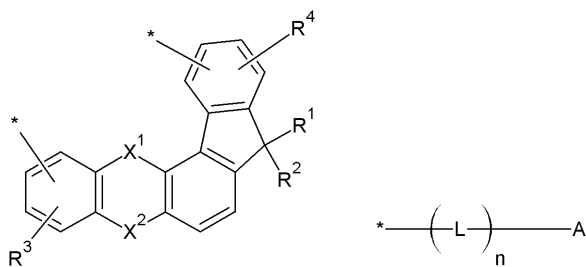
[0369] 본 명세서에서, 정공 특성이란, HOMO 준위를 따라 전도 특성을 가져 양극에서 형성된 정공의 발광층으로의 주입 및 발광층에서의 이동을 용이하게 하는 특성을 의미한다.

[0370] 또한 전자 특성이란, LUMO 준위를 따라 전도 특성을 가져 음극에서 형성된 전자의 발광층으로의 주입 및 발광층에서의 이동을 용이하게 하는 특성을 의미한다.

[0371]

[0372] 본 발명의 일 구현예에 따른 유기광전자소자용 화합물은 하기 화학식 1 및 2의 조합으로 표시되는 코어 구조를 가질 수 있다.

[0373] [화학식 1] [화학식 2]



[0374]

[0375] 상기 화학식 1 및 2에서, X¹ 및 X²은 독립적으로, -O-, -S-, -S(O)₂-, -CR^aR^b-, -SiR^aR^b- 또는 -GeR^aR^b-이며, 상기 R^a 및 R^b는 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C10 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기 또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴기이고, R¹ 내지 R⁴는 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C10 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기 또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴기이고, A는 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴기 또는 -N(L¹R')(L²R'')이며, 상기 R' 및 R''는 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C10 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기 또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴기이고, L은

-SiR'R"-, 단일결합, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C10 알케닐렌기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C10 알킬렌기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴렌기 또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴렌기이며, 상기 R' 및 R"는 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C10 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기 또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴기이고, L¹ 및 L²는 독립적으로 단일결합, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C10 알케닐렌기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C10 알킬렌기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴렌기 또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴렌기이고, n, m 및 o는 독립적으로 0 내지 3의 정수 중 어느 하나이고, 화학식 2의 *는 화학식 1의 두 개의 * 중 어느 하나의 결합 위치를 나타낸다.

[0376] 상기 코어 구조는 유기광전자소자의 발광 재료, 정공주입재료 또는 정공수송재료로 이용될 수 있다. 특히 정공주입재료 또는 정공수송재료에 적합할 수 있다.

[0377] 또한, 상기 유기광전자소자용 화합물은 코어 부분과 코어 부분에 치환된 치환기에 다양한 또 다른 치환기를 도입함으로써 다양한 에너지 밴드 갭을 갖는 화합물이 될 수 있다.

[0378] 상기 화합물의 치환기에 따라 적절한 에너지 준위를 가지는 화합물을 유기광전자소자에 사용함으로써, 정공전달 능력 또는 전자전달 능력이 강화되어 효율 및 구동전압 면에서 우수한 효과를 가지고, 전기화학적 및 열적 안정성이 뛰어나 유기광전자소자 구동시 수명 특성을 향상시킬 수 있다.

[0379] 상기 A가 연결기 L을 사이에 두고 상기 화학식 1과 결합되는 경우, 전하의 이동도가 높아질 수 있으며, 이로 인해 소자의 구동전압이 저하되는 효과가 있다.

[0380] 또한, 상기 L, L¹ 및 L²를 선택적으로 조절하여 화합물 전체의 공액(conjugation) 길이를 결정할 수 있으며, 이로 부터 화합물의 밴드갭을 변화시킬 수 있어 발광물질로 사용할 경우 발광 파장을 조절할 수 있다. 또한, 상기 유기광전자소자용 화합물을 전하 수송층으로 사용할 경우 HOMO, LUMO 준위를 조절하여 전하 주입 및 수송 특성을 변화시키는 효과를 얻을 수 있다.

[0381] 상기 L, L¹ 및 L²의 구체적인 예로는 스틸벤일기, 페닐기, 나프틸기, 페난트릴기, 나프타세닐기, 피레닐기, 바이페닐일기, p-터페닐기, m-터페닐기, 크리세닐기, 트리페닐레닐기, 페릴레닐기, 플루오레닐기, 인데닐기, 퓨라닐기, 티오펜일기, 피롤릴기, 피라졸릴기, 이미다졸일기, 트리아졸일기, 옥사졸일기, 티아졸일기, 옥사디아졸일기, 티아디아졸일기, 피리딜기, 피리미디닐기, 피라지닐기, 트리아지닐기, 벤조퓨라닐기, 벤조티오펜일기, 벤즈이미다졸일기, 인돌일기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기, 퀴나졸리닐기, 퀴녹살리닐기, 나프티리디닐기, 벤즈옥사진일기, 벤즈티아진일기, 아크리디닐기, 페나진일기, 페노티아진일기 및 페녹사진일기, 디벤조-p-디옥신일기, 티안트레닐기, 페녹사티이닐기, 잔테닐기, 티오잔테닐기, 페녹사실리닐기, 페노티아실리닐기, 카바졸릴기, 디벤조티오펜일기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조실릴기 등이며, 상기 언급된 L, L¹ 및 L²은 치환 또는 비치환될 수 있다.

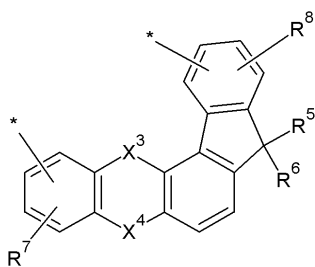
[0382] 상기 화합물은 입체 장해성을 가지기 때문에 분자 사이의 상호작용이 작아 결정화가 억제될 수 있다. 이로 인해 소자를 제조하는 수율을 향상시킬 수 있다. 또한, 제조된 소자의 수명 특성이 개선될 수 있다.

[0383] 또한, 상기 화합물은 비교적 분자량이 크기 때문에, 화합물의 증착시의 분해를 억제할 수 있다.

[0384] 보다 구체적으로, 상기 A는 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기 또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴기일 수 있다. 이러한 경우, 공액길이가 적절이 조절될 경우 형광 또는 인광 발광 메커니즘을 이용한 발광층 호스트로 사용할 수 있다.

[0385] 보다 구체적으로 상기 A는 -N(L¹ R')(L² R")이고, 상기 R' 또는 R" 중 어느 하나는 하기 화학식 3으로 표시되는 치환기일 수 있다.

[0386] [화학식 3]



[0387]

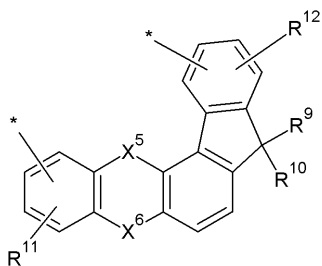
[0388] 상기 화학식 3에서, X³ 및 X⁴은 독립적으로, -O-, -S-, -S(O)₂-, -CR^aR^b-, -SiR^aR^b- 또는 -GeR^aR^b-이며, 상기 R^a 및 R^b는 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C10 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기 또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴기이고, R⁵ 내지 R⁸는 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C10 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기 또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴기이고, 상기 화학식 3의 두 개의 * 중 어느 하나는 상기 -N(L¹R')(L²R'')에서 L¹ 또는 L²와의 결합을 나타낸다.

[0389] 상기 A가 -N(L¹R')(L²R'')이고, 상기 R' 또는 R'' 중 어느 하나는 하기 화학식 3으로 표시되는 치환기를 가지는 화합물의 경우, 아민의 세 개의 치환기 중 두 개의 치환기가 상기 화학식 1 또는 3으로 표시되는 치환기인 경우이다.

[0390] 이러한 경우, 상기 화합물을 정공수송층 또는 정공주입층으로 사용할 수 있다.

[0391] 보다 구체적으로, 상상기 R'는 상기 화학식 3으로 표시되는 치환기이고, 상기 R''는 하기 화학식 4로 표시되는 치환기일 수 있다.

[0392] [화학식 4]



[0393]

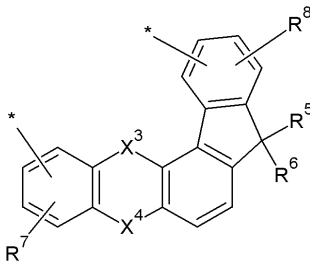
[0394] 상기 화학식 4에서, X⁵ 및 X⁶은 독립적으로, -O-, -S-, -S(O)₂-, -CR^aR^b-, -SiR^aR^b- 또는 -GeR^aR^b-이며, 상기 R^a 및 R^b는 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C10 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기 또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴기이고, R⁹ 내지 R¹²는 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C10 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기 또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴기이고, 상기 화학식 4의 두 개의 * 중 어느 하나는 상기 -N(L¹R')(L²R'')에서 L¹ 또는 L²와의 결합을 나타낸다.

[0395] 상기 A가 -N(L¹R')(L²R'')이고, 상기 R'는 상기 화학식 3으로 표시되는 치환기이고, 상기 R''는 하기 화학식 4로 표시되는 치환기인 화합물의 경우, 아민의 세 개의 치환기가 상기 화학식 1, 3 및 4로 표시되는 치환기인 화합물이다.

[0396] 이러한 경우, 상기 화합물을 정공수송층 또는 정공주입층으로 사용할 수 있다.

[0397] 보다 구체적으로, 상기 A는 하기 화학식 3으로 표시되는 치환기일 수 있다.

[0398] [화학식 3]



[0399]

[0400] 상기 화학식 3에서, X³ 및 X⁴는 독립적으로, -O-, -S-, -S(O)₂-, -CR^aR^b-, -SiR^aR^b- 또는 -GeR^aR^b-이며, 상기 R^a 및 R^b는 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C10 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기 또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴기이고, R⁵ 내지 R⁸는 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C10 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기 또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴기이고, 상기 화학식 3의 두 개의 * 중 어느 하나는 화학식 2의 L과의 결합을 나타낸다.

[0401] 이러한 경우, 선택적으로 연결기인 L을 사이에 두고 상기 화학식 1과 상기 화학식 3이 결합하는 구조를 가지게 된다. 이러한 경우, 분자 구조를 보다 입체적으로 변화시켜 분자간 중첩에 의한 결정화를 방지할 수 있다. 또한, 상기 화합물에 적절한 헤테로 방향족 치환기가 도입될 경우 분자내 극성 분포에 변화를 주어 인광 발광층 호스트로 사용 시 효율을 증가시킬 수 있다.

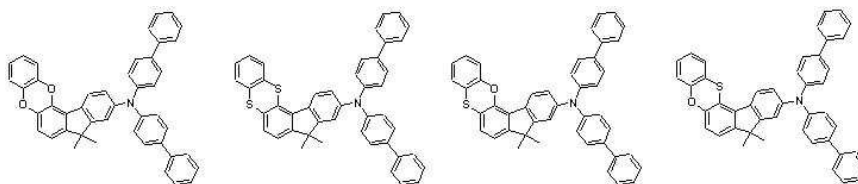
[0402] 상기 R¹ 내지 R¹²는 독립적으로 치환 또는 비치환된 페닐기, 치환 또는 비치환된 나프틸기, 치환 또는 비치환된 안트라세닐기, 치환 또는 비치환된 페난트릴기, 치환 또는 비치환된 나프타세닐기, 치환 또는 비치환된 피레닐기, 치환 또는 비치환된 바이페닐기, 치환 또는 비치환된 p-터페닐기, 치환 또는 비치환된 m-터페닐기, 치환 또는 비치환된 크리세닐기, 치환 또는 비치환된 트리페닐레닐기, 치환 또는 비치환된 페틸레닐기, 치환 또는 비치환된 인데닐기, 치환 또는 비치환된 퓨라닐기, 치환 또는 비치환된 티오펜기, 치환 또는 비치환된 피롤릴기, 치환 또는 비치환된 피라졸릴기, 치환 또는 비치환된 이미다졸릴기, 치환 또는 비치환된 트리아졸릴기, 치환 또는 비치환된 옥사졸릴기, 치환 또는 비치환된 티아졸릴기, 치환 또는 비치환된 옥사디아졸릴기, 치환 또는 비치환된 티아디아졸릴기, 치환 또는 비치환된 피리딘기, 치환 또는 비치환된 피리미딘기, 치환 또는 비치환된 피라지닐기, 치환 또는 비치환된 트리아지닐기, 치환 또는 비치환된 벤조퓨라닐기, 치환 또는 비치환된 벤조티오펜기, 치환 또는 비치환된 벤조이미다졸릴기, 치환 또는 비치환된 인돌기, 치환 또는 비치환된 퀴놀리닐기, 치환 또는 비치환된 이소퀴놀리닐기, 치환 또는 비치환된 퀴나졸리닐기, 치환 또는 비치환된 퀴놀살리닐기, 치환 또는 비치환된 나프티리디닐기, 치환 또는 비치환된 벤즈옥사진기, 치환 또는 비치환된 벤즈티아진기, 치환 또는 비치환된 아크리디닐기, 치환 또는 비치환된 페나진기, 치환 또는 비치환된 페노티아진기, 치환 또는 비치환된 페녹사진기 또는 이들의 조합일 수 있으나, 이에 제한되지는 않는다.

[0403] 이는 상기 화학식 1 내지 4에 모두 적용될 수 있다.

[0404] 상기 치환기로 인해 상기 유기광전자소자용 화합물은 발광, 정공 또는 전자 특성; 막 안정성; 열적 안정성 및 높은 3중항 여기에너지(T1)를 가질 수 있다.

[0405] 보다 구체적으로, 상기 유기광전자소자용 화합물은 하기 화학식 A-1 내지 A-183 중 어느 하나로 표시될 수 있으나, 이에 제한되지는 않는다.

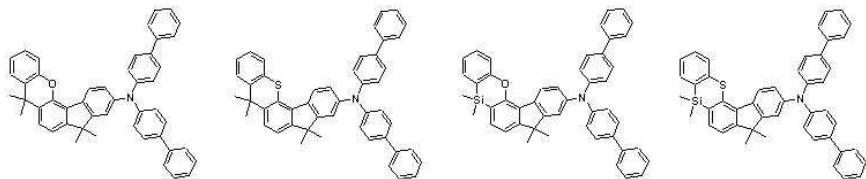
[0406] [A-1] [A-2] [A-3] [A-4]



[0407]

[0408]

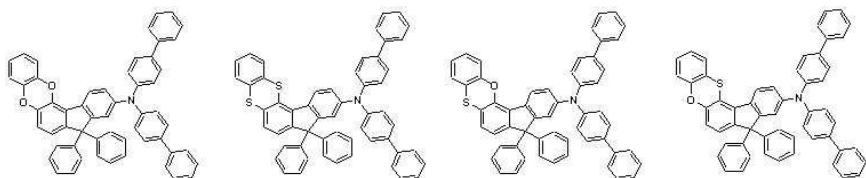
[A-5] [A-6] [A-7] [A-8]



[0409]

[0410]

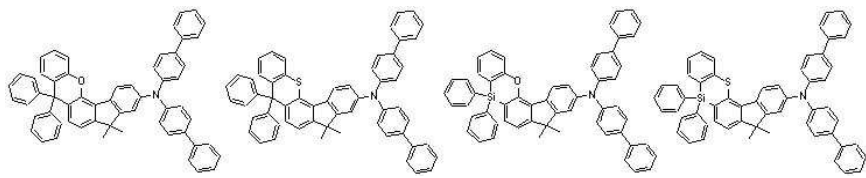
[A-9] [A-10] [A-11] [A-12]



[0411]

[0412]

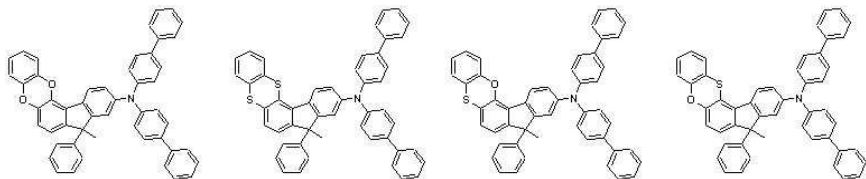
[A-13] [A-14] [A-15] [A-16]



[0413]

[0414]

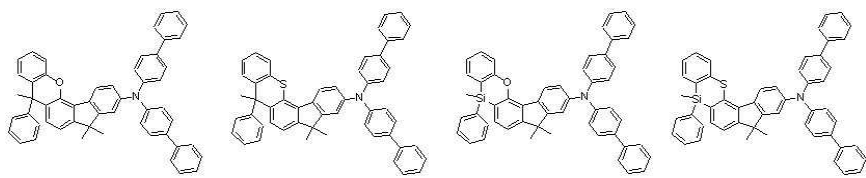
[A-17] [A-18] [A-19] [A-20]



[0415]

[0416]

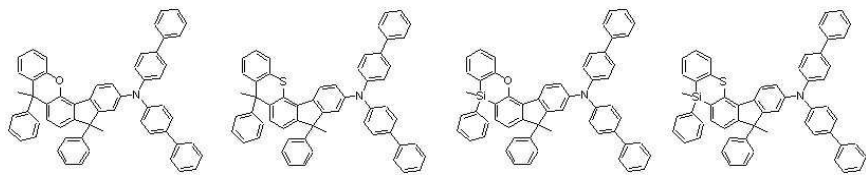
[A-21] [A-22] [A-23] [A-24]



[0417]

[0418]

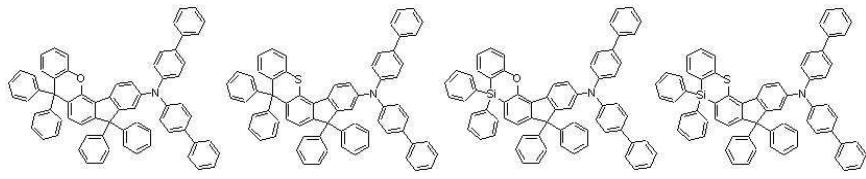
[A-25] [A-26] [A-27] [A-28]



[0419]

[0420]

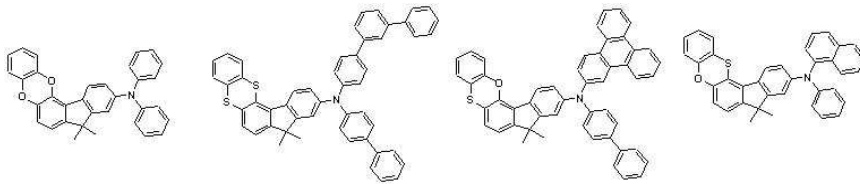
[A-29] [A-30] [A-31] [A-32]



[0421]

[0422]

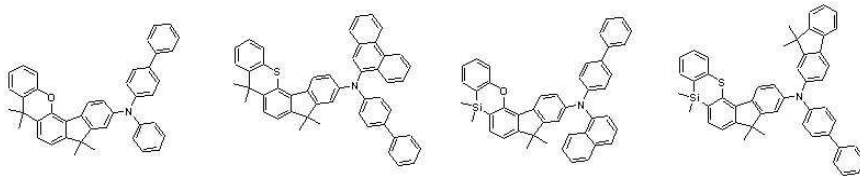
[A-33] [A-34] [A-35] [A-36]



[0423]

[0424]

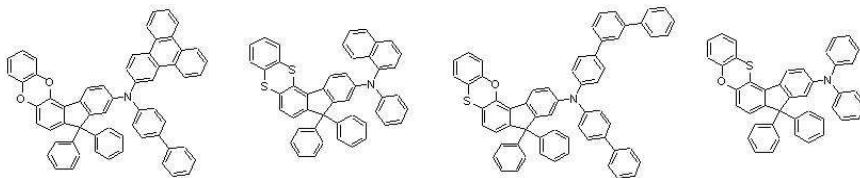
[A-37] [A-38] [A-39] [A-40]



[0425]

[0426]

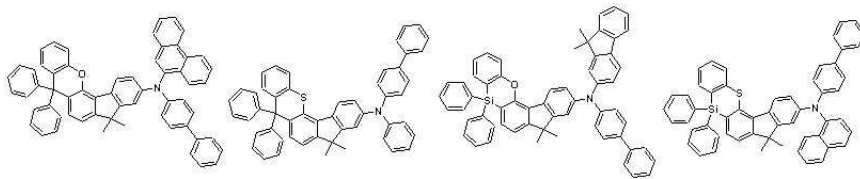
[A-41] [A-42] [A-43] [A-44]



[0427]

[0428]

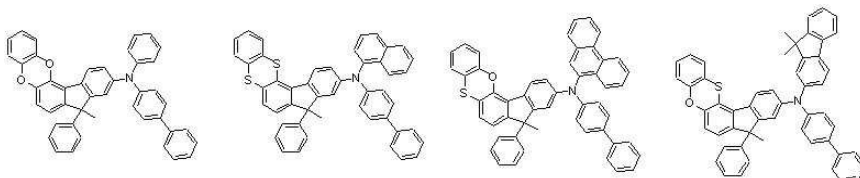
[A-45] [A-46] [A-47] [A-48]



[0429]

[0430]

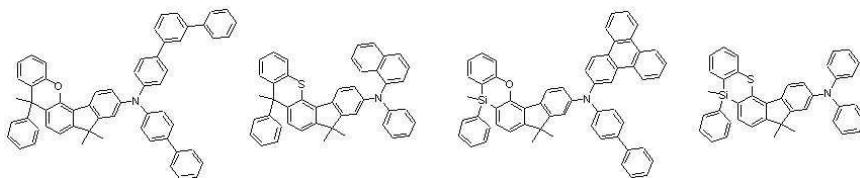
[A-49] [A-50] [A-51] [A-52]



[0431]

[0432]

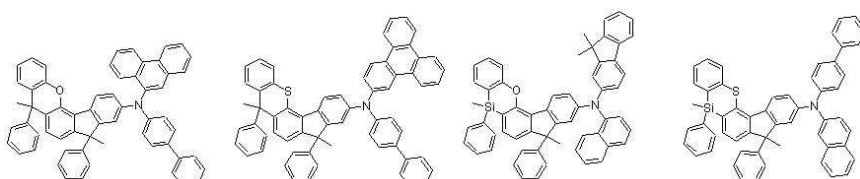
[A-53] [A-54] [A-55] [A-56]



[0433]

[0434]

[A-57] [A-58] [A-59] [A-60]



[0435]

[0436]

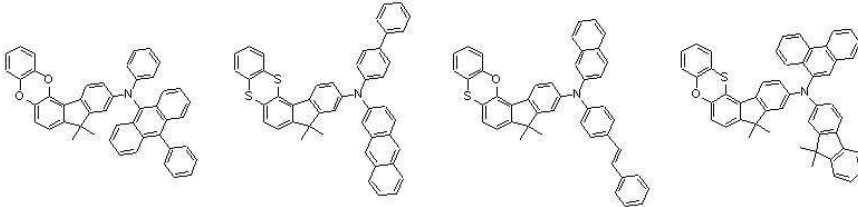
[A-61] [A-62] [A-63] [A-64]



[0437]

[0438]

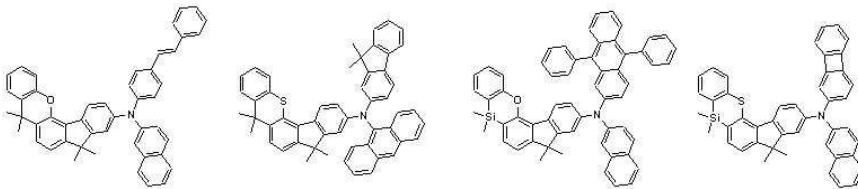
[A-65] [A-66] [A-67] [A-68]



[0439]

[0440]

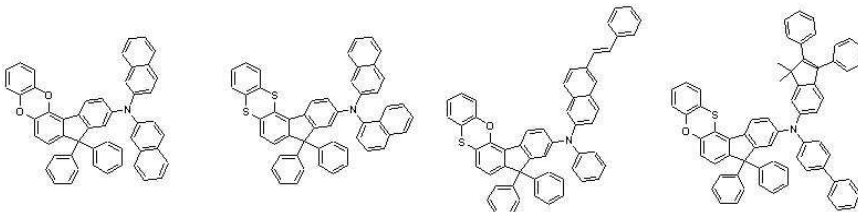
[A-69] [A-70] [A-71] [A-72]



[0441]

[0442]

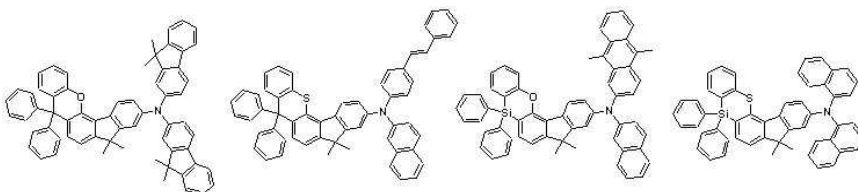
[A-73] [A-74] [A-78] [A-79]



[0443]

[0444]

[A-80] [A-81] [A-82] [A-83]



[0445]

[0446]

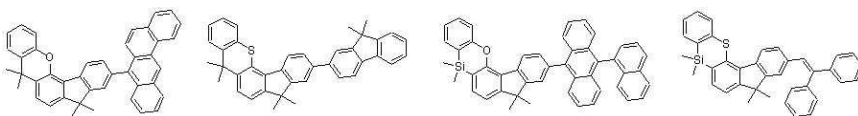
[A-84] [A-85] [A-86] [A-87]



[0447]

[0448]

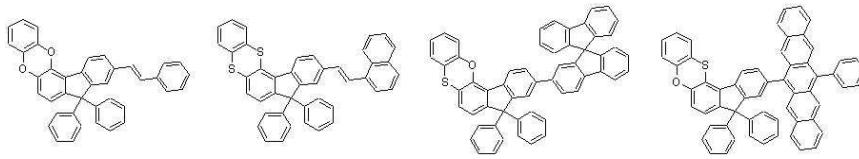
[A-88] [A-89] [A-90] [A-91]



[0449]

[0450]

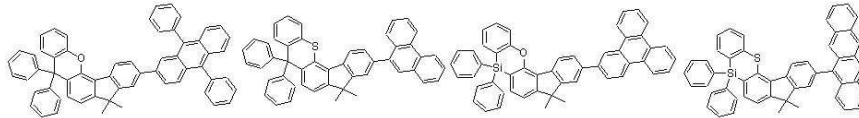
[A-92] [A-93] [A-94] [A-95]



[0451]

[0452]

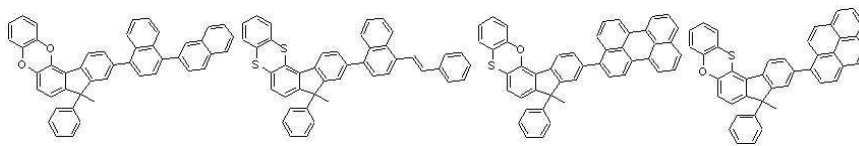
[A-96] [A-97] [A-98] [A-99]



[0453]

[0454]

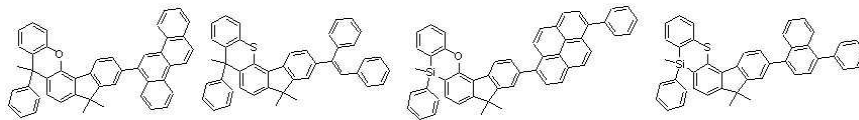
[A-100] [A-101] [A-102] [A-103]



[0455]

[0456]

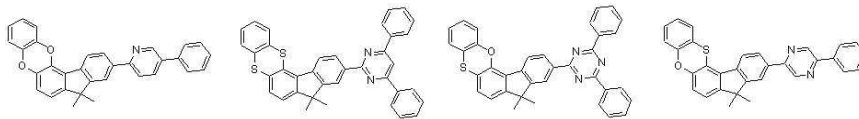
[A-104] [A-105] [A-106] [A-107]



[0457]

[0458]

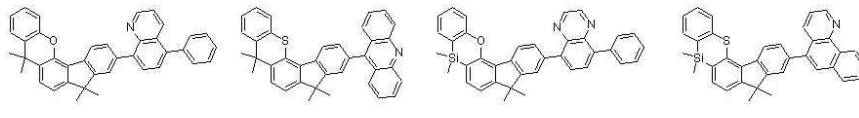
[A-108] [A-109] [A-110] [A-111]



[0459]

[0460]

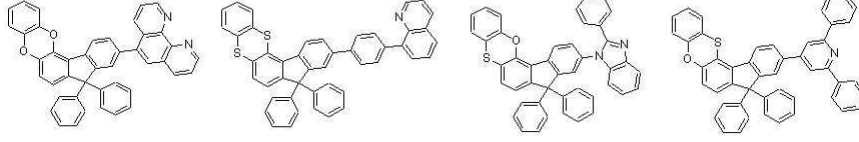
[A-112] [A-113] [A-114] [A-115]



[0461]

[0462]

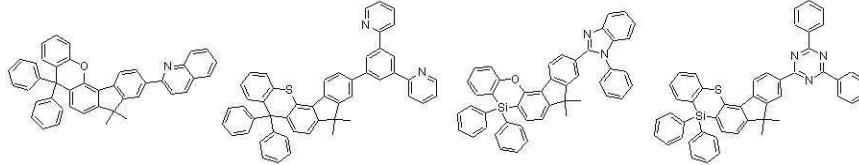
[A-116] [A-117] [A-118] [A-119]



[0463]

[0464]

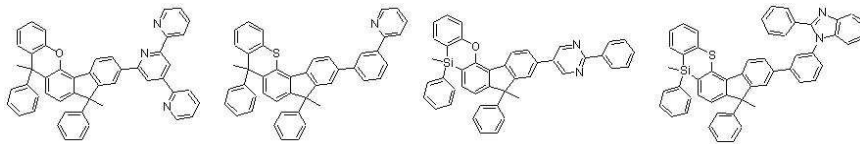
[A-120] [A-121] [A-122] [A-123]



[0465]

[0466]

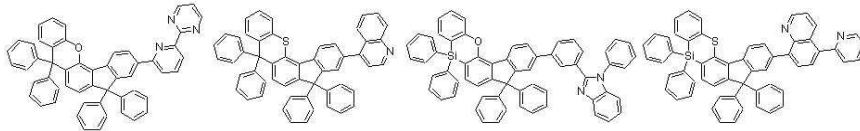
[A-124] [A-125] [A-126] [A-127]



[0467]

[0468]

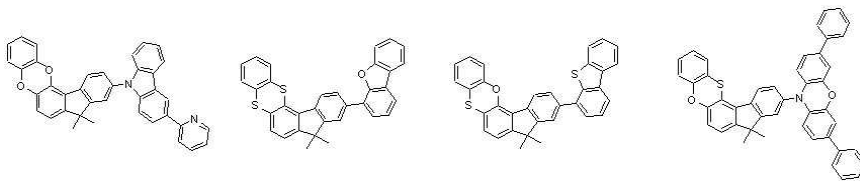
[A-128] [A-129] [A-130] [A-131]



[0469]

[0470]

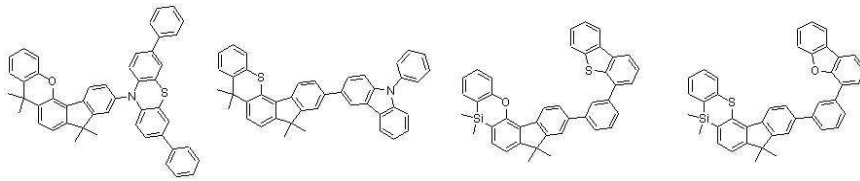
[A-132] [A-133] [A-134] [A-135]



[0471]

[0472]

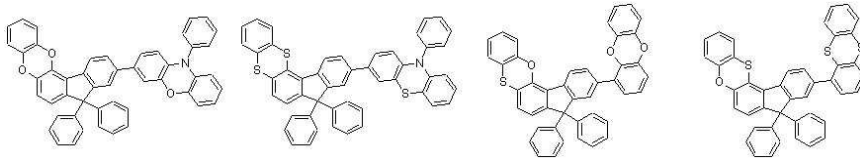
[A-136] [A-137] [A-138] [A-139]



[0473]

[0474]

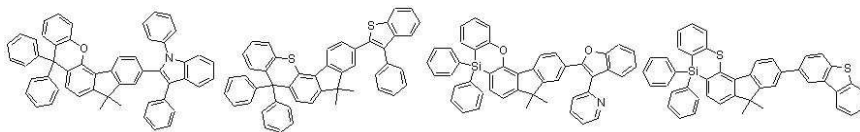
[A-140] [A-141] [A-142] [A-143]



[0475]

[0476]

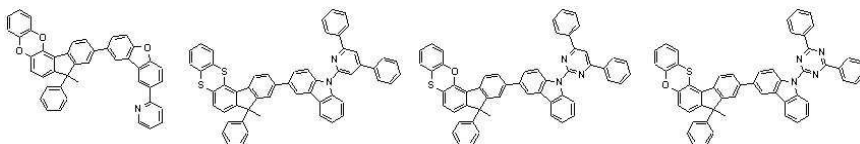
[A-144] [A-145] [A-146] [A-147]



[0477]

[0478]

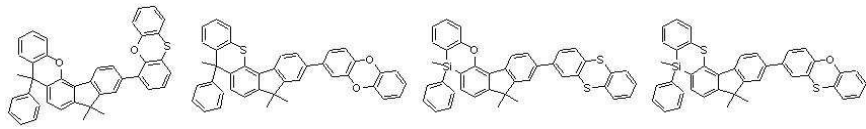
[A-148] [A-149] [A-150] [A-151]



[0479]

[0480]

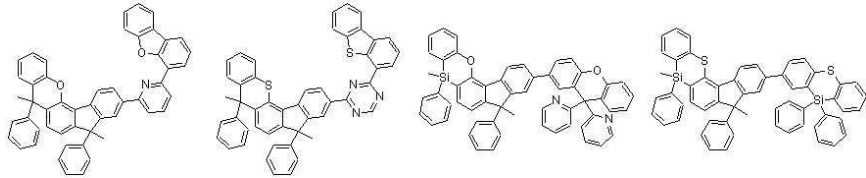
[A-152] [A-153] [A-154] [A-155]



[0481]

[0482]

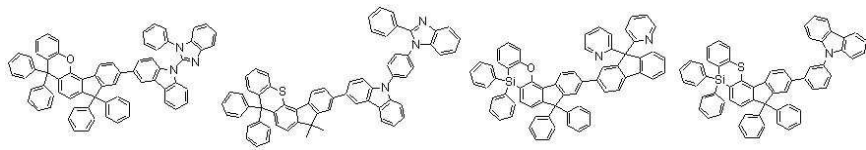
[A-156] [A-157] [A-158] [A-159]



[0483]

[0484]

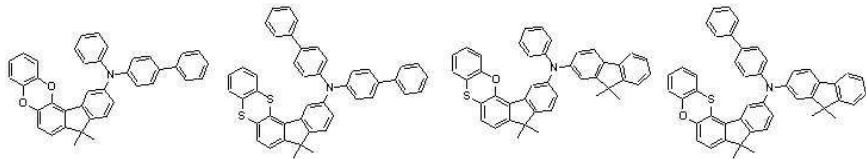
[A-160] [A-161] [A-162] [A-163]



[0485]

[0486]

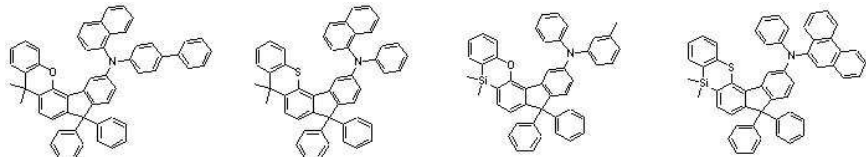
[A-164] [A-165] [A-166] [A-167]



[0487]

[0488]

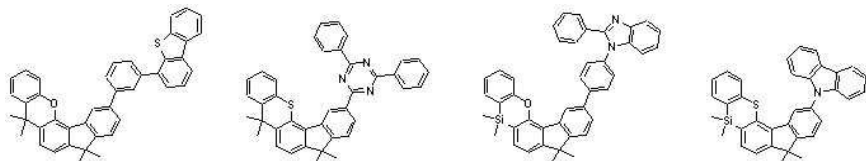
[A-168] [A-169] [A-170] [A-171]



[0489]

[0490]

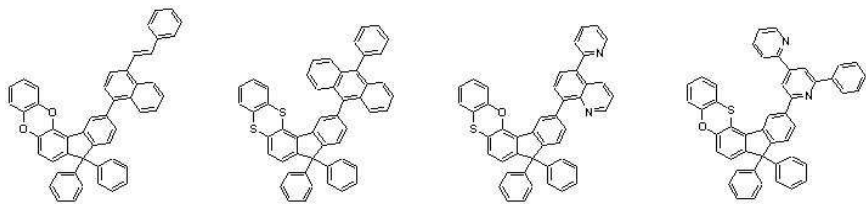
[A-172] [A-173] [A-174] [A-175]



[0491]

[0492]

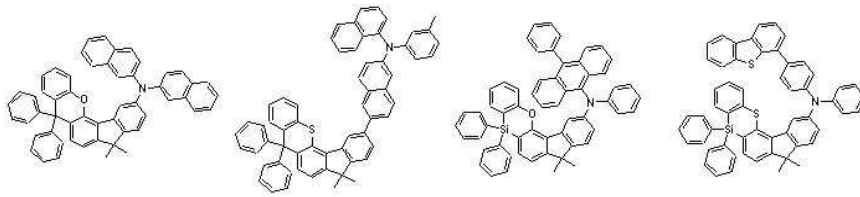
[A-176] [A-177] [A-178] [A-179]



[0493]

[0494]

[A-180] [A-181] [A-182] [A-183]



[0495]

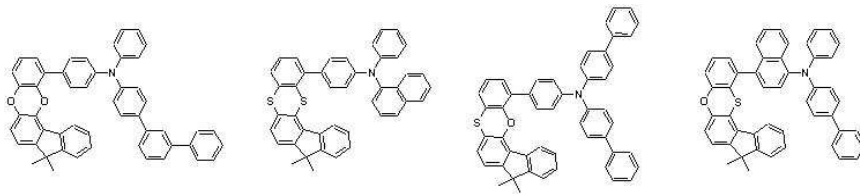
[0496]

[0497]

보다 구체적으로, 상기 유기광전자소자용 화합물은 하기 화학식 B-1 내지 B-8 중 어느 하나로 표시될 수 있다. 다만, 이에 제한되지는 않는다.

[0498]

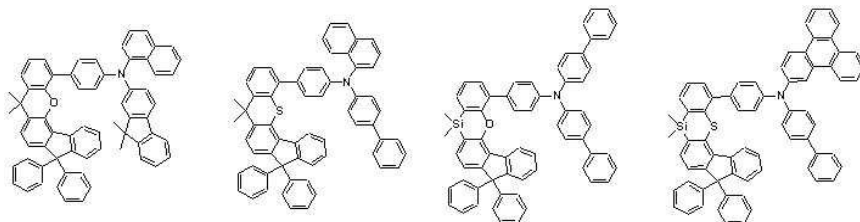
[B-1] [B-2] [B-3] [B-4]



[0499]

[0500]

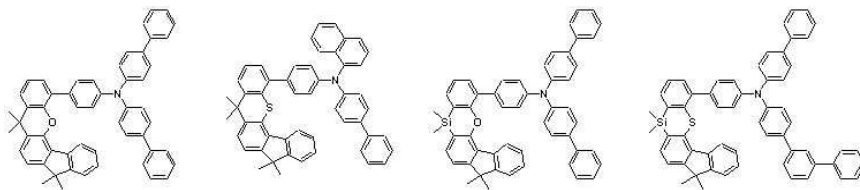
[B-5] [B-6] [B-7] [B-8]



[0501]

[0502]

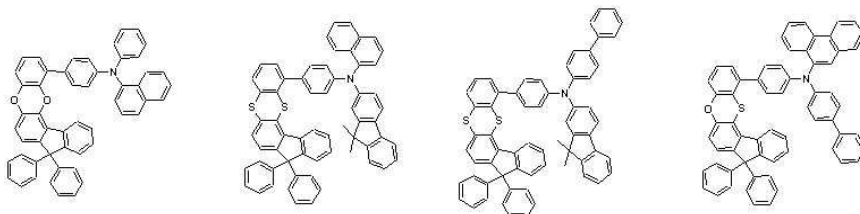
[B-9] [B-10] [B-11] [B-12]



[0503]

[0504]

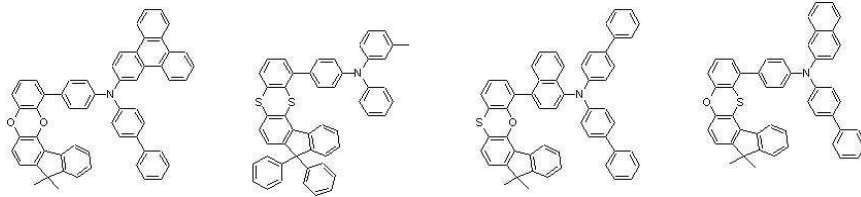
[B-13] [B-14] [B-15] [B-16]



[0505]

[0506]

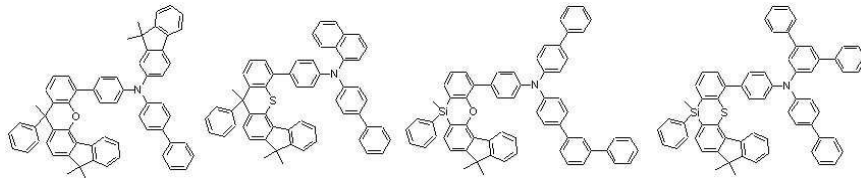
[B-17] [B-18] [B-19] [B-20]



[0507]

[0508]

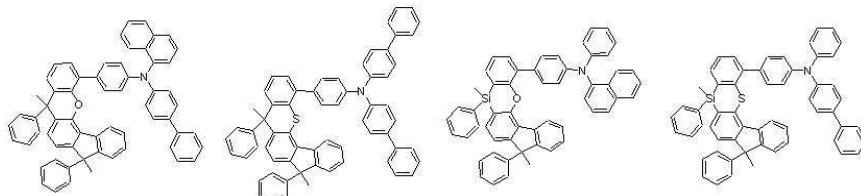
[B-21] [B-22] [B-23] [B-24]



[0509]

[0510]

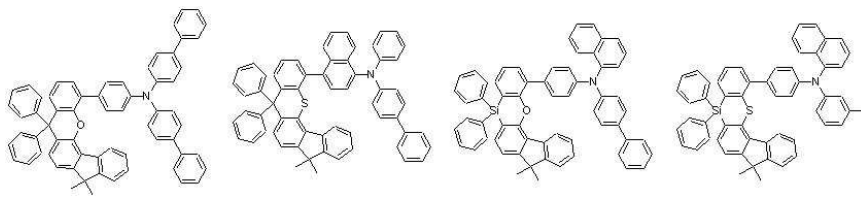
[B-25] [B-26] [B-27] [B-28]



[0511]

[0512]

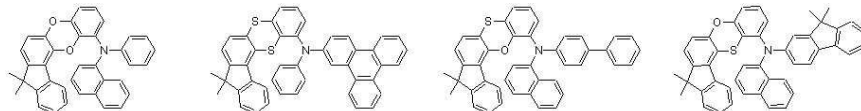
[B-29] [B-30] [B-31] [B-32]



[0513]

[0514]

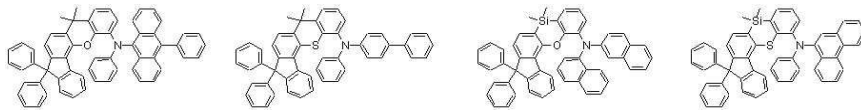
[B-33] [B-34] [B-35] [B-36]



[0515]

[0516]

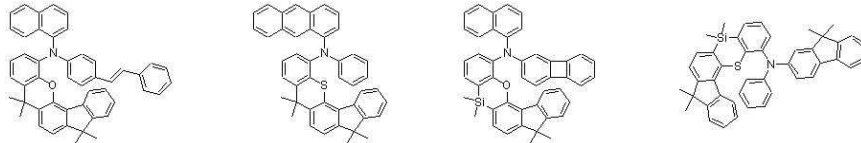
[B-37] [B-38] [B-39] [B-40]



[0517]

[0518]

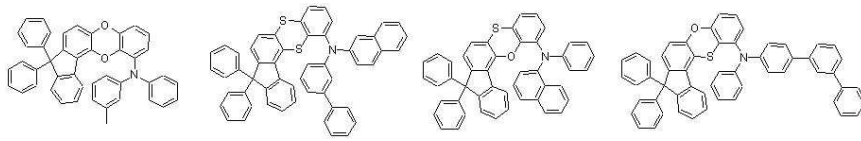
[B-41] [B-42] [B-43] [B-44]



[0519]

[0520]

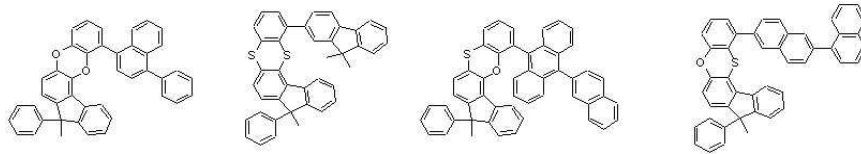
[B-45] [B-46] [B-47] [B-48]



[0521]

[0522]

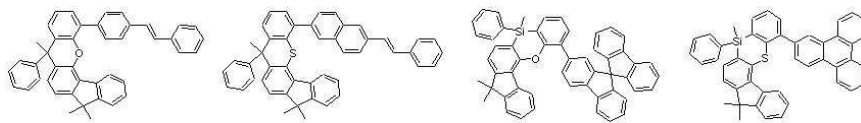
[B-49] [B-50] [B-51] [B-52]



[0523]

[0524]

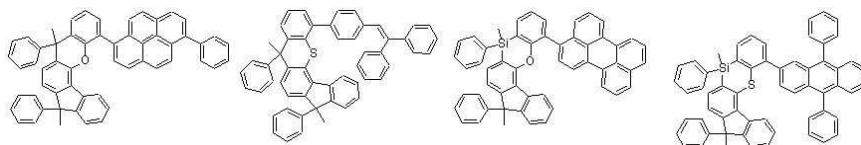
[B-53] [B-54] [B-55] [B-56]



[0525]

[0526]

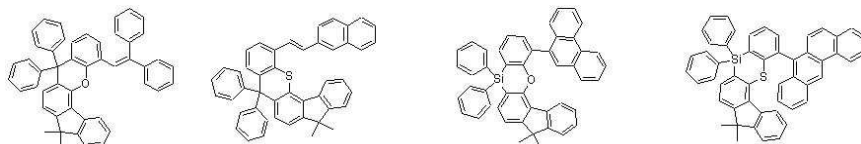
[B-57] [B-58] [B-59] [B-60]



[0527]

[0528]

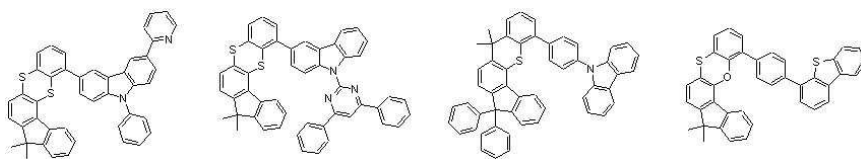
[B-61] [B-62] [B-63] [B-64]



[0529]

[0530]

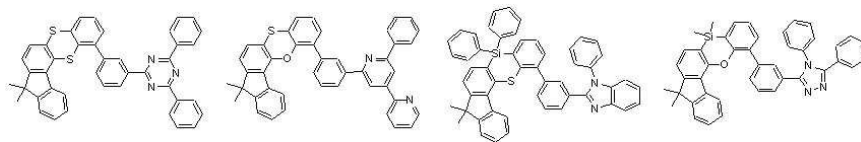
[B-65] [B-66] [B-67] [B-68]



[0531]

[0532]

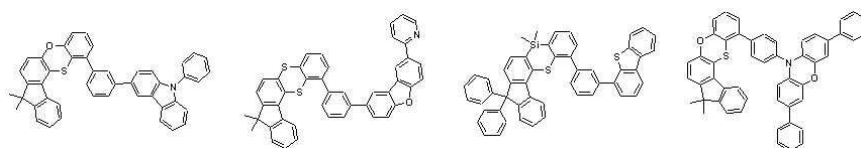
[B-69] [B-70] [B-71] [B-72]



[0533]

[0534]

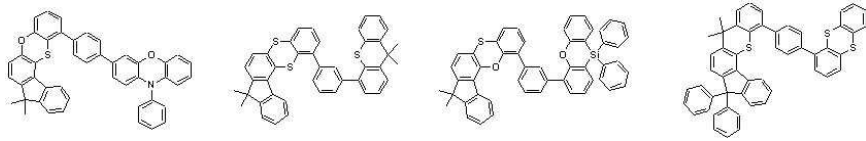
[B-73] [B-74] [B-75] [B-76]



[0535]

[0536]

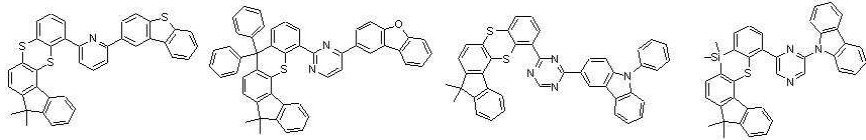
[B-77] [B-78] [B-79] [B-80]



[0537]

[0538]

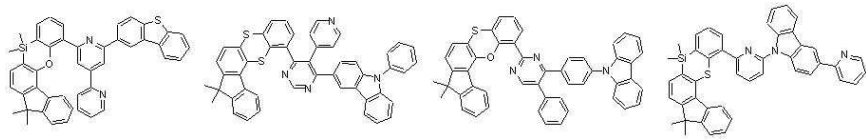
[B-81] [B-82] [B-83] [B-84]



[0539]

[0540]

[B-85] [B-86] [B-87] [B-88]



[0541]

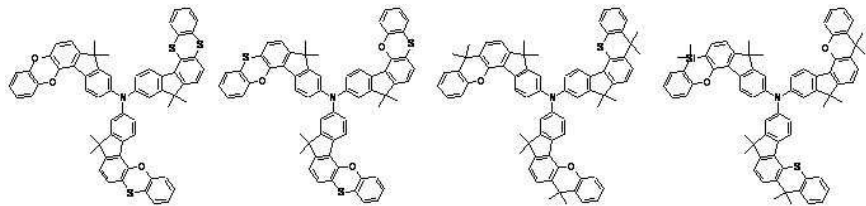
[0542]

[0543]

보다 구체적으로, 상기 유기광전자소자용 화합물은 하기 화학식 C-1 내지 C-32 중 어느 하나로 표시될 수 있다. 다만, 이에 제한되는 것은 아니다.

[0544]

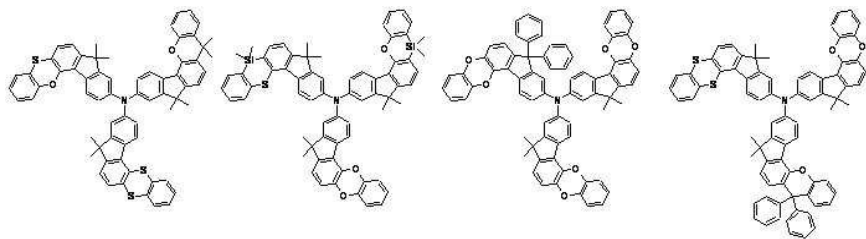
[C-1] [C-2] [C-3] [C-4]



[0545]

[0546]

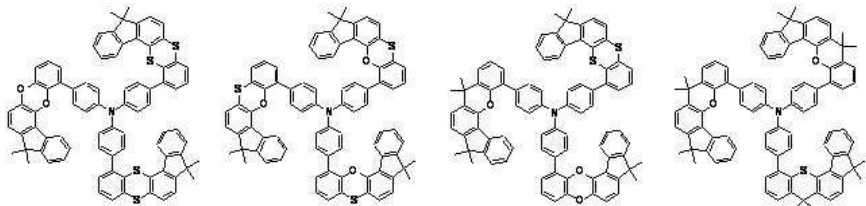
[C-5] [C-6] [C-7] [C-8]



[0547]

[0548]

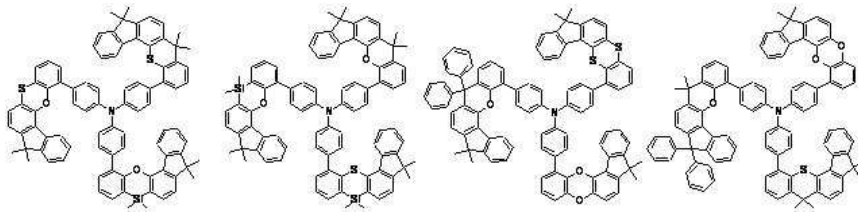
[C-9] [C-10] [C-11] [C-12]



[0549]

[0550]

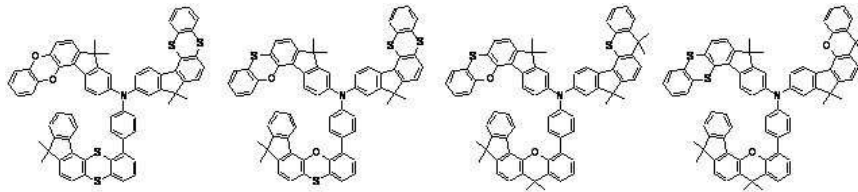
[C-13] [C-14] [C-15] [C-16]



[0551]

[0552]

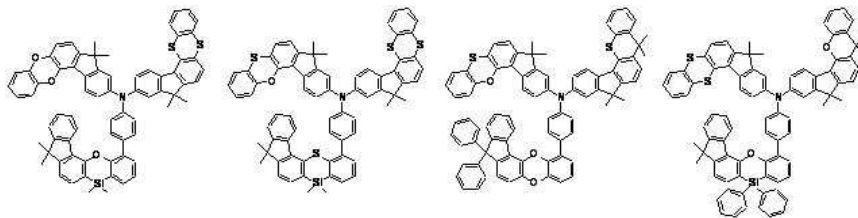
[C-17] [C-18] [C-19] [C-20]



[0553]

[0554]

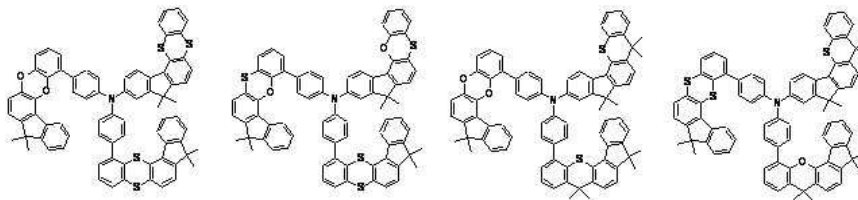
[C-21] [C-22] [C-23] [C-24]



[0555]

[0556]

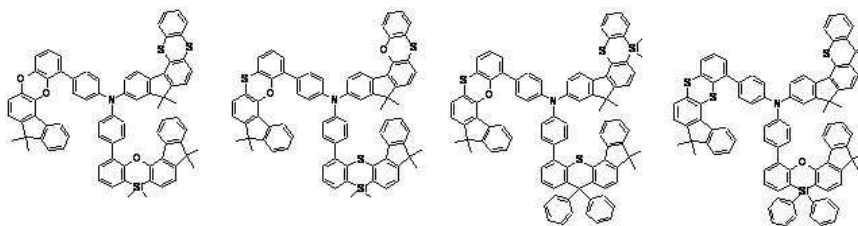
[C-25] [C-26] [C-27] [C-28]



[0557]

[0558]

[C-29] [C-30] [C-31] [C-32]



[0559]

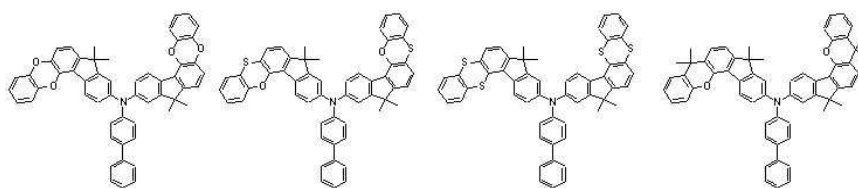
[0560]

[0561]

보다 구체적으로, 상기 유기광전자소자용 화합물은 하기 화학식 D-1 내지 D-64 중 어느 하나로 표시될 수 있다. 다만, 이에 제한되는 것은 아니다.

[0562]

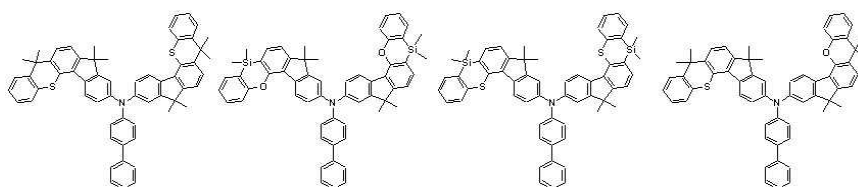
[D-1] [D-2] [D-3] [D-4]



[0563]

[0564]

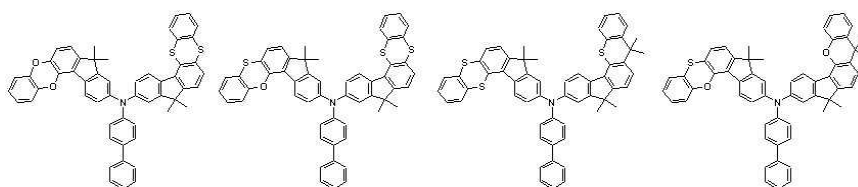
[D-5] [D-6] [D-7] [D-8]



[0565]

[0566]

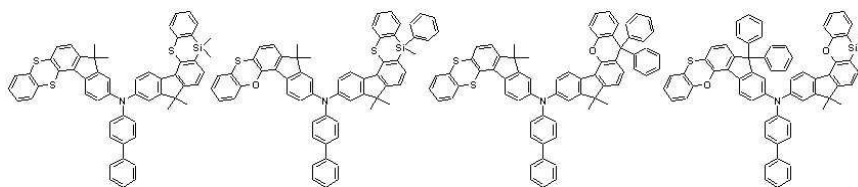
[D-9] [D-10] [D-11] [D-12]



[0567]

[0568]

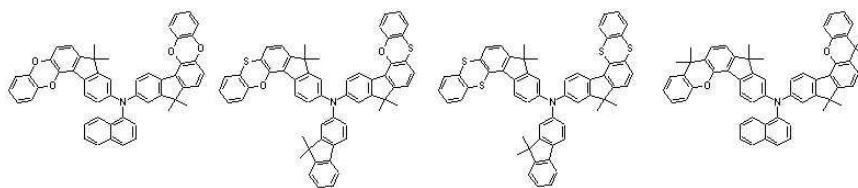
[D-13] [D-14] [D-15] [D-16]



[0569]

[0570]

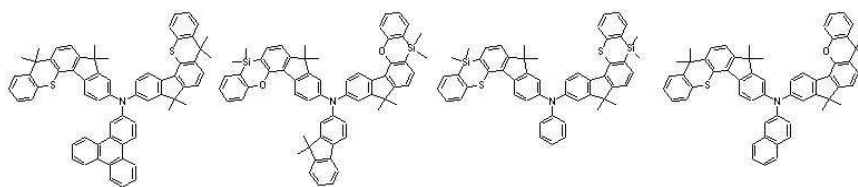
[D-17] [D-18] [D-19] [D-20]



[0571]

[0572]

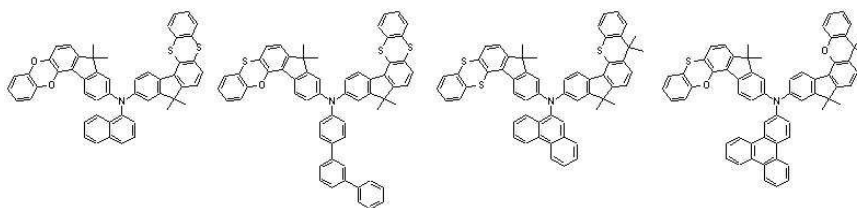
[D-21] [D-22] [D-23] [D-24]



[0573]

[0574]

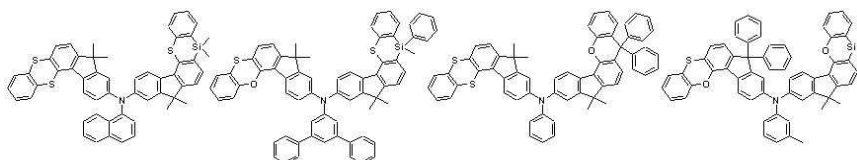
[D-25] [D-26] [D-27] [D-28]



[0575]

[0576]

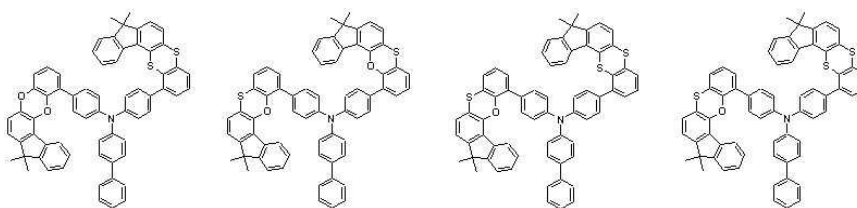
[D-29] [D-30] [D-31] [D-32]



[0577]

[0578]

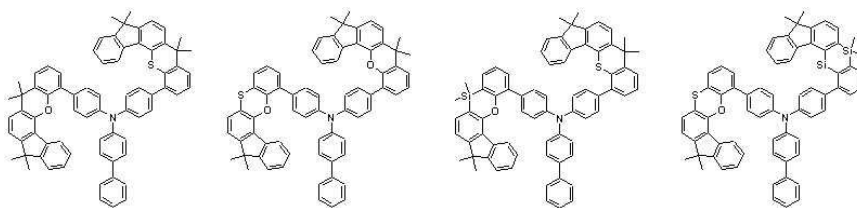
[D-33] [D-34] [D-35] [D-36]



[0579]

[0580]

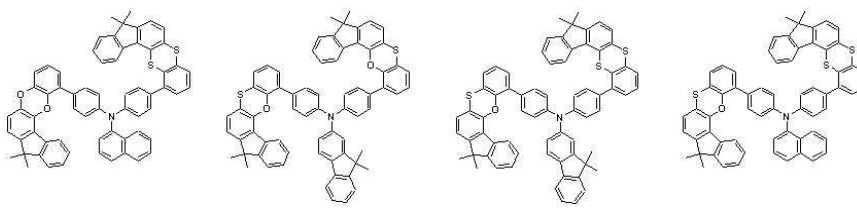
[D-37] [D-38] [D-39] [D-40]



[0581]

[0582]

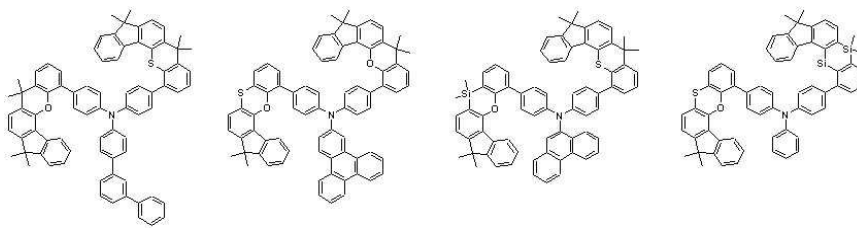
[D-41] [D-42] [D-43] [D-44]



[0583]

[0584]

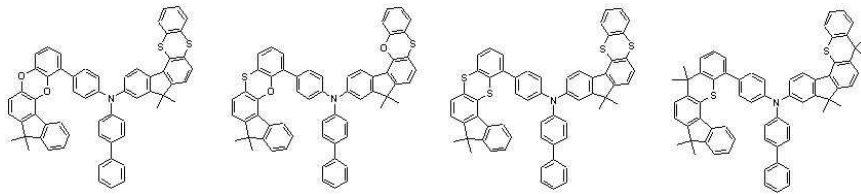
[D-45] [D-46] [D-47] [D-48]



[0585]

[0586]

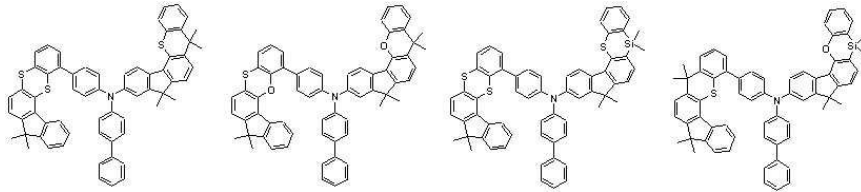
[D-49] [D-50] [D-51] [D-52]



[0587]

[0588]

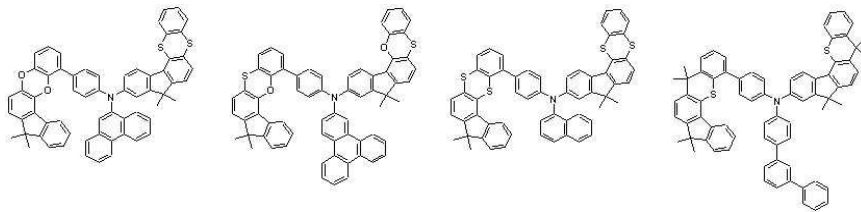
[D-53] [D-54] [D-55] [D-56]



[0589]

[0590]

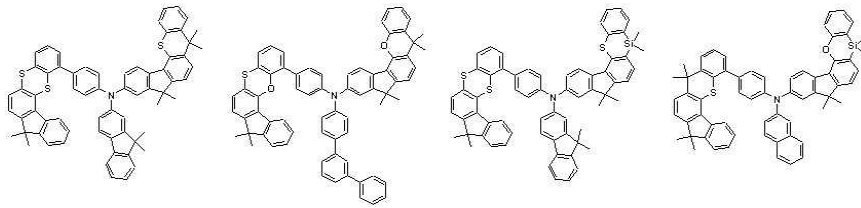
[D-57] [D-58] [D-59] [D-60]



[0591]

[0592]

[D-61] [D-62] [D-63] [D-64]



[0593]

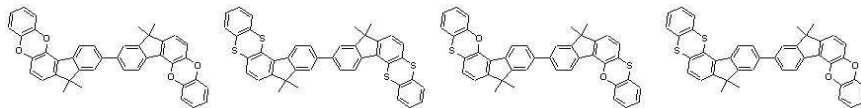
[0594]

[0595]

보다 구체적으로, 상기 유기광전자소자용 화합물은 하기 화학식 E-1 내지 E-192 중 어느 하나로 표시될 수 있다. 다만, 이에 제한되는 것은 아니다.

[0596]

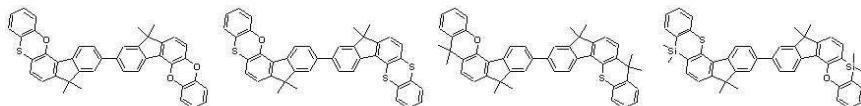
[E-1] [E-2] [E-3] [E-4]



[0597]

[0598]

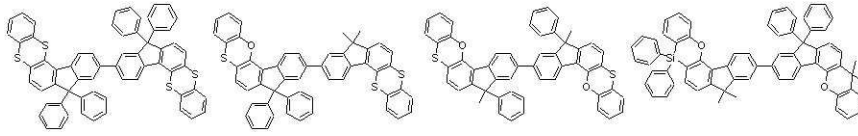
[E-5] [E-6] [E-7] [E-8]



[0599]

[0600]

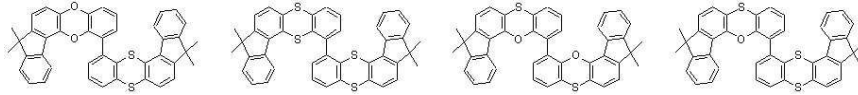
[E-9] [E-10] [E-11] [E-12]



[0601]

[0602]

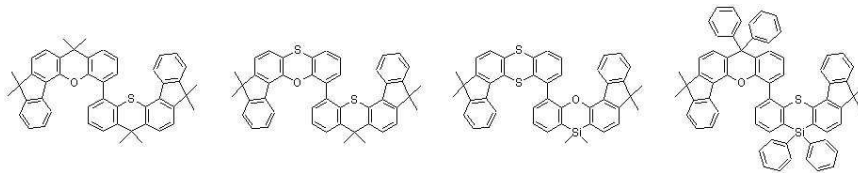
[E-13] [E-14] [E-15] [E-16]



[0603]

[0604]

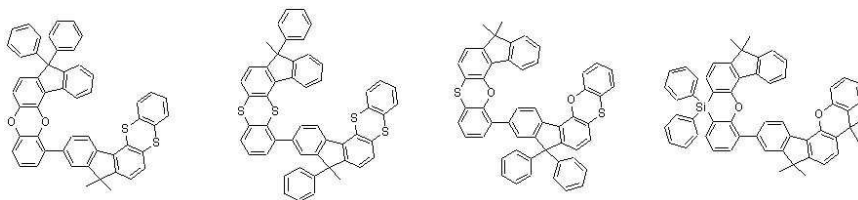
[E-17] [E-18] [E-19] [E-20]



[0605]

[0606]

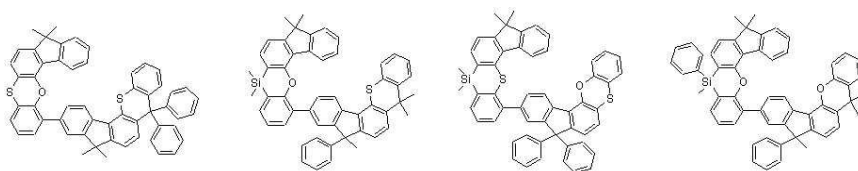
[E-21] [E-22] [E-23] [E-24]



[0607]

[0608]

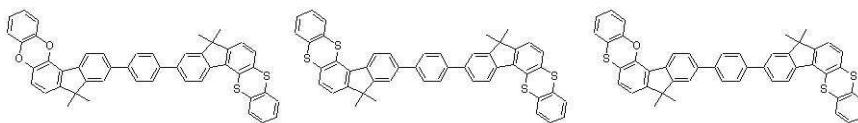
[E-25] [E-26] [E-27] [E-28]



[0609]

[0610]

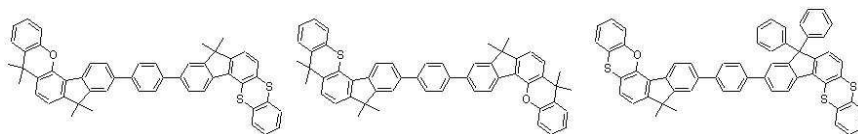
[E-29] [E-30] [E-31]



[0611]

[0612]

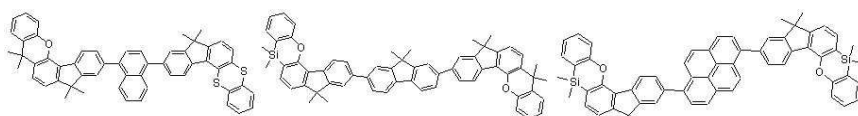
[E-32] [E-33] [E-34]



[0613]

[0614]

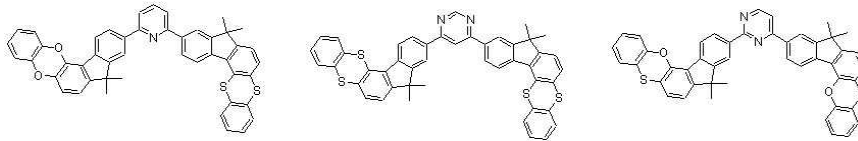
[E-35] [E-36] [E-37]



[0615]

[0632]

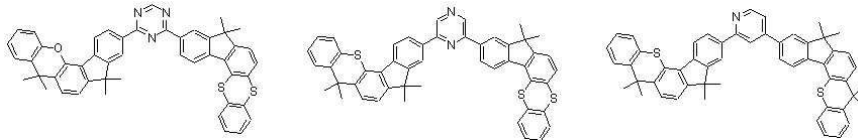
[E-62] [E-63] [E-64]



[0633]

[0634]

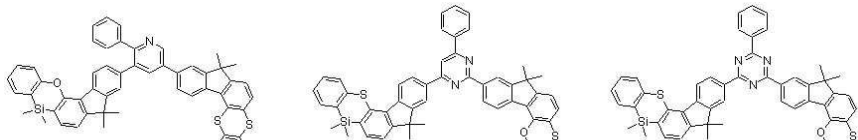
[E-65] [E-66] [E-67]



[0635]

[0636]

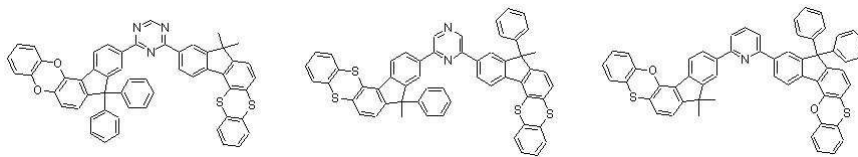
[E-68] [E-69] [E-70]



[0637]

[0638]

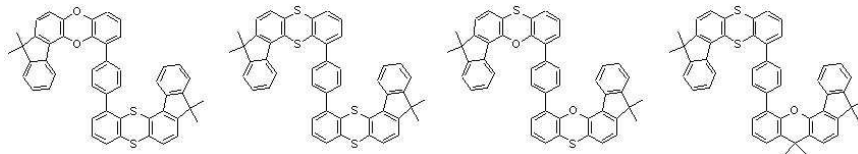
[E-71] [E-72] [E-73]



[0639]

[0640]

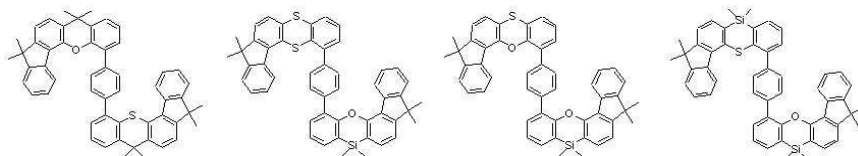
[E-74] [E-75] [E-76] [E-77]



[0641]

[0642]

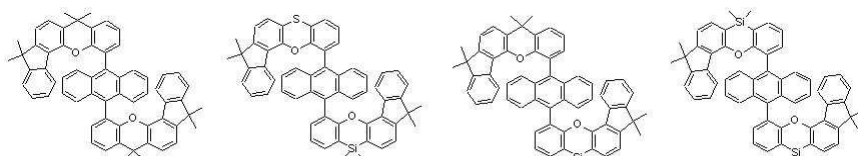
[E-78] [E-79] [E-80] [E-81]



[0643]

[0644]

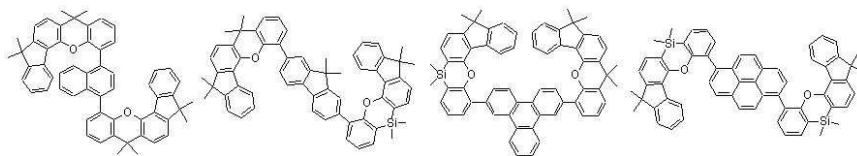
[E-82] [E-83] [E-84] [E-85]



[0645]

[0646]

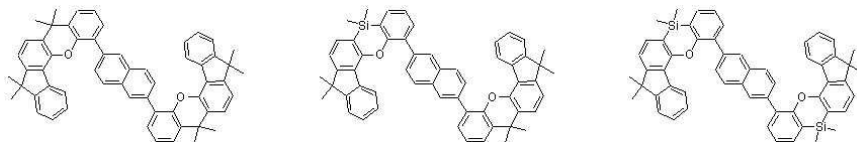
[E-86] [E-87] [E-88] [E-89]



[0647]

[0648]

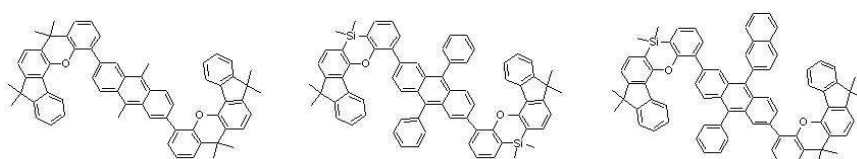
[E-90] [E-91] [E-92]



[0649]

[0650]

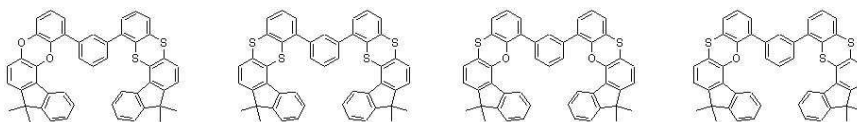
[E-93] [E-94] [E-95]



[0651]

[0652]

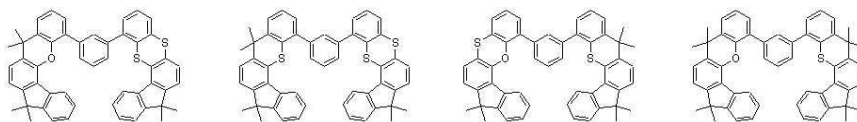
[E-96] [E-97] [E-98] [E-99]



[0653]

[0654]

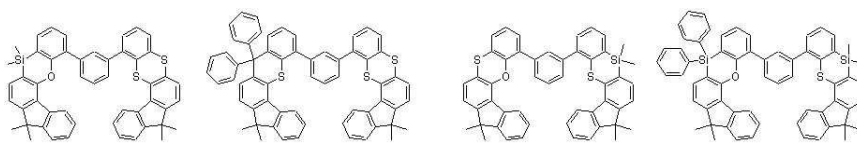
[E-100] [E-101] [E-102] [E-103]



[0655]

[0656]

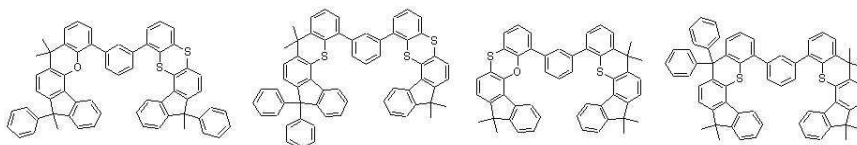
[E-104] [E-105] [E-106] [E-107]



[0657]

[0658]

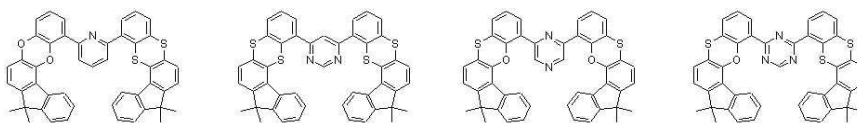
[E-108] [E-109] [E-110] [E-111]



[0659]

[0660]

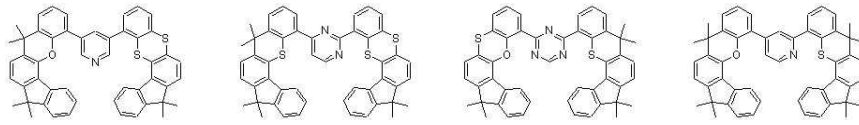
[E-112] [E-113] [E-114] [E-115]



[0661]

[0662]

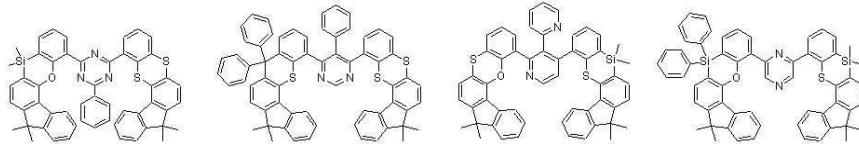
[E-116] [E-117] [E-118] [E-119]



[0663]

[0664]

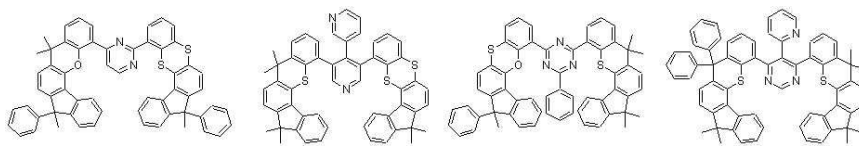
[E-120] [E-121] [E-122] [E-123]



[0665]

[0666]

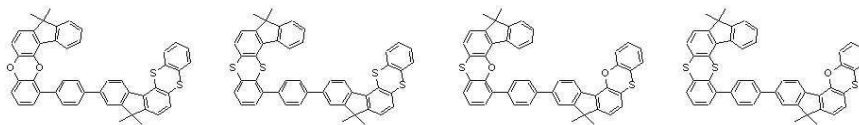
[E-124] [E-125] [E-126] [E-127]



[0667]

[0668]

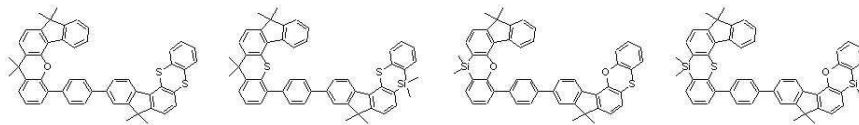
[E-128] [E-129] [E-130] [E-131]



[0669]

[0670]

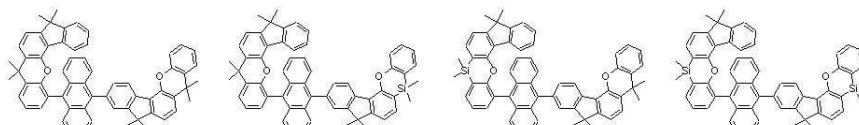
[E-132] [E-133] [E-134] [E-135]



[0671]

[0672]

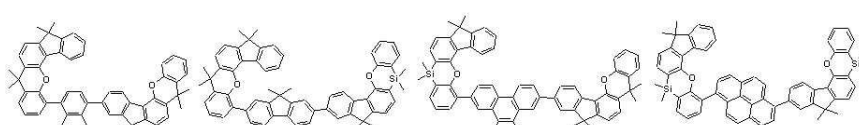
[E-136] [E-137] [E-138] [E-139]



[0673]

[0674]

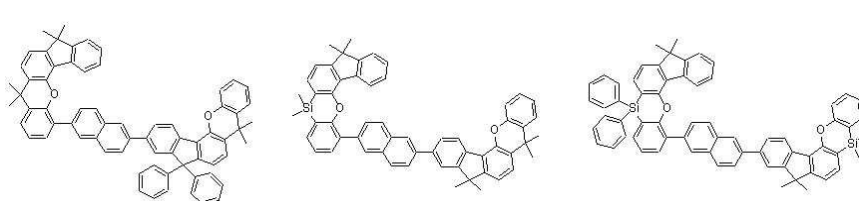
[E-140] [E-141] [E-142] [E-143]



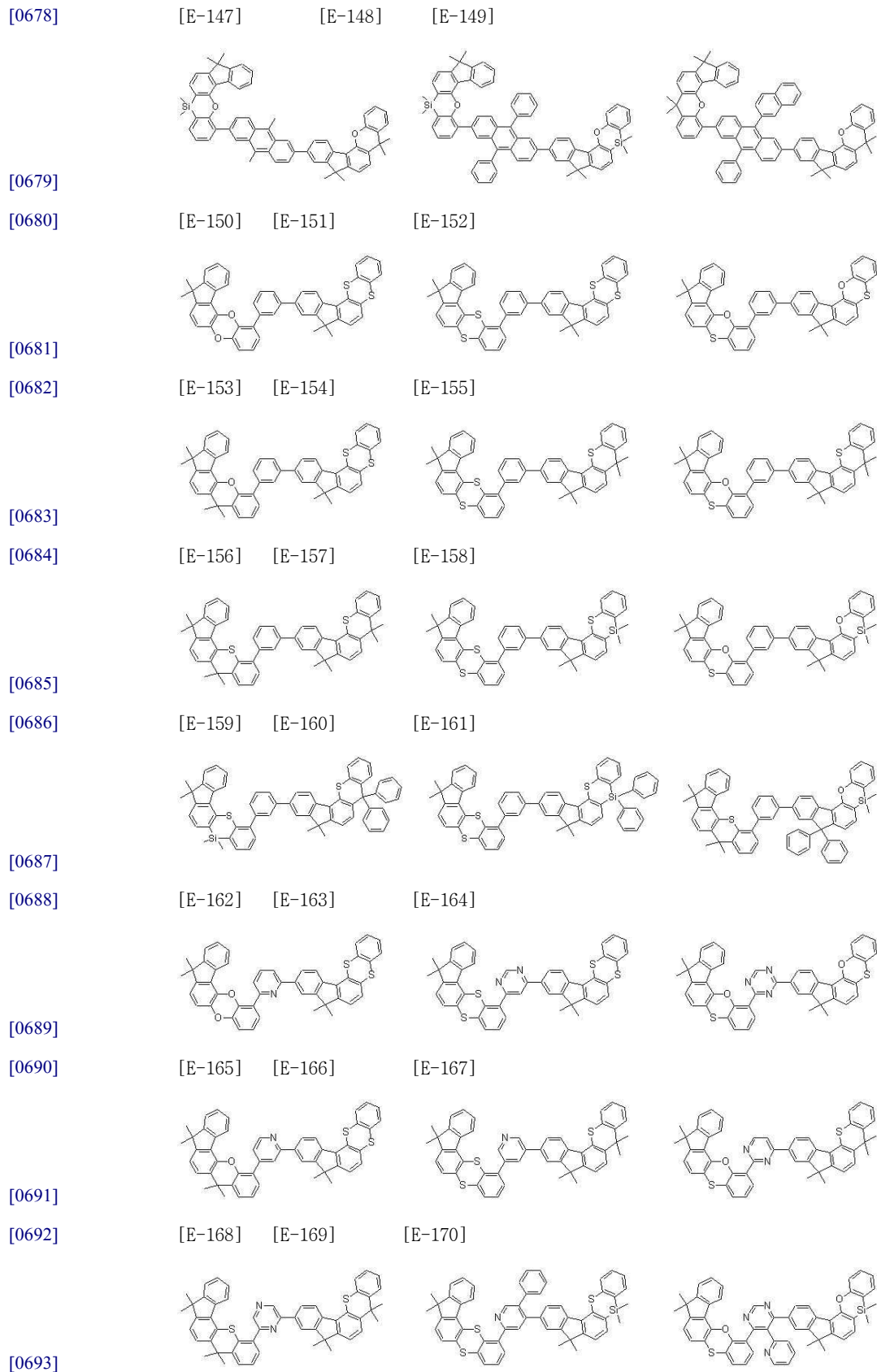
[0675]

[0676]

[E-144] [E-145] [E-146]

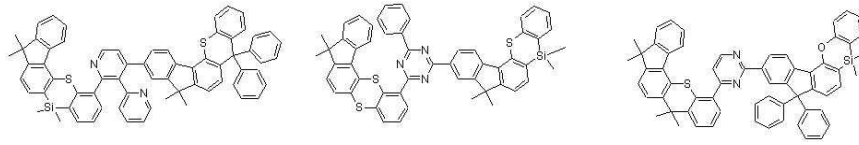


[0677]



[0694]

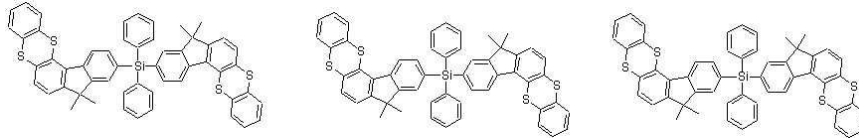
[E-171] [E-172] [E-173]



[0695]

[0696]

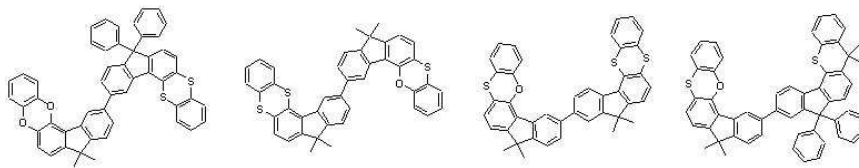
[E-174] [E-175] [E-176]



[0697]

[0698]

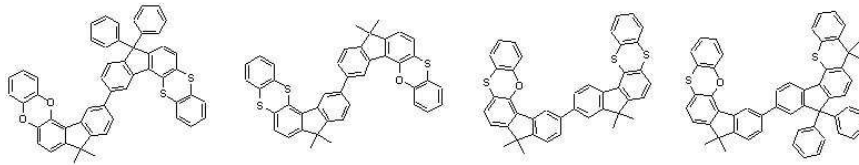
[E-177] [E-178] [E-179] [E-180]



[0699]

[0700]

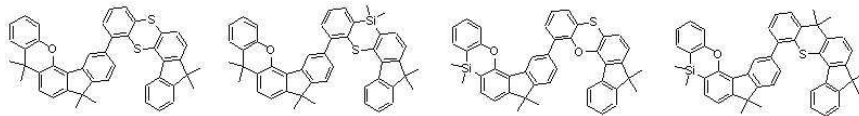
[E-181] [E-182] [E-183] [E-184]



[0701]

[0702]

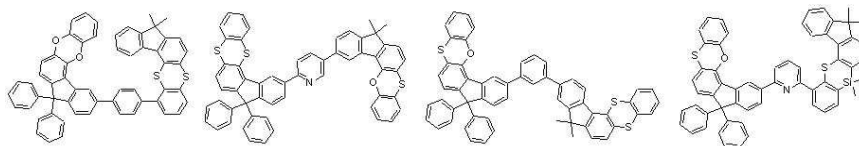
[E-185] [E-186] [E-187] [E-188]



[0703]

[0704]

[E-189] [E-190] [E-191] [E-192]



[0705]

[0706]

전술한 본 발명의 일 구현예에 따른 화합물이 전자특성, 정공특성 양쪽을 모두 요구하는 경우에는 상기 전자 특성을 가지는 작용기를 도입하는 것이 유기발광소자의 수명 향상 및 구동 전압 감소에 효과적이다.

[0707]

전술한 본 발명의 일 구현예에 따른 유기광전자소자용 화합물은 최대 발광 파장이 약 320 내지 500 nm 범위를 나타내고, 3중항 여기에너지(T1)가 2.0 eV 이상, 보다 구체적으로 2.0 내지 4.0 eV 범위인 것으로, 높은 3중항 여기 에너지를 가지는 호스트의 전하가 도판트에 잘 전달되어 도판트의 발광효율을 높일 수 있고, 재료의 호모(HOMO)와 루모(LUMO) 에너지 준위를 자유롭게 조절하여 구동전압을 낮출 수 있는 이점이 있기 때문에 호스트 재료 또는 전하수송재료로 매우 유용하게 사용될 수 있다.

[0708]

뿐만 아니라, 상기 유기광전자소자용 화합물은 광활성 및 전기적인 활성을 갖고 있으므로, 비선형 광학소재, 전극 재료, 변색재료, 광 스위치, 센서, 모듈, 웨이브 가이드, 유기 트랜지스터, 레이저, 광 흡수체, 유전체 및 분리막(membrane) 등의 재료로도 매우 유용하게 적용될 수 있다.

[0709]

상기와 같은 화합물을 포함하는 유기광전자소자용 화합물은 유리전이온도가 90℃ 이상이며, 열분해온도가 400℃

이상으로 열적 안정성이 우수하다. 이로 인해 고효율의 유기광전소자의 구현이 가능하다.

- [0710] 상기와 같은 화합물을 포함하는 유기광전소자용 화합물은 발광, 또는 전자 주입 및/또는 수송역할을 할 수 있으며, 적절한 도판트와 함께 발광 호스트로서의 역할도 할 수 있다. 즉, 상기 유기광전소자용 화합물은 인광 또는 형광의 호스트 재료, 청색의 발광도판트 재료, 또는 전자수송 재료로 사용될 수 있다.
- [0711] 본 발명의 일 구현예에 따른 유기광전소자용 화합물은 유기박막층에 사용되어 유기광전소자의 수명 특성, 효율 특성, 전기화학적 안정성 및 열적 안정성을 향상시키며, 구동전압을 낮출 수 있다.
- [0712] 이에 따라 본 발명의 일 구현예는 상기 유기광전소자용 화합물을 포함하는 유기광전소자를 제공한다. 이때, 상기 유기광전소자라 함은 유기광전소자, 유기발광소자, 유기 태양 전지, 유기 트랜지스터, 유기 감광체 드럼, 유기 메모리 소자 등을 의미한다. 특히, 유기 태양 전지의 경우에는 본 발명의 일 구현예에 따른 유기광전소자용 화합물이 전극이나 전극 버퍼층에 포함되어 양자 효율을 증가시키며, 유기 트랜지스터의 경우에는 게이트, 소스-드레인 전극 등에서 전극 물질로 사용될 수 있다.
- [0713] 이하에서는 유기발광소자에 대하여 구체적으로 설명한다.
- [0714] 본 발명의 다른 일 구현예는 양극, 음극 및 상기 양극과 음극 사이에 개재되는 적어도 한 층 이상의 유기박막층을 포함하는 유기발광소자에 있어서, 상기 유기박막층 중 적어도 어느 한 층은 본 발명의 일 구현예에 따른 유기광전소자용 화합물을 포함하는 유기발광소자를 제공한다.
- [0715] 상기 유기광전소자용 화합물을 포함할 수 있는 유기박막층으로는 발광층, 정공수송층, 정공주입층, 전자수송층, 전자주입층, 정공차단층 및 이들의 조합으로 이루어진 군에서 선택되는 층을 포함할 수 있는 바, 이 중에서 적어도 어느 하나의 층은 본 발명에 따른 유기광전소자용 화합물을 포함한다. 특히, 정공수송층 또는 정공주입층에 본 발명의 일 구현예에 따른 유기광전소자용 화합물을 포함할 수 있다. 또한, 상기 유기광전소자용 화합물이 발광층 내에 포함되는 경우 상기 유기광전소자용 화합물은 인광 또는 형광호스트로서 포함될 수 있고, 특히, 형광 청색 도판트 재료로서 포함될 수 있다.
- [0716] 도 1 내지 도 5는 본 발명의 일 구현예에 따른 유기광전소자용 화합물을 포함하는 유기발광소자의 단면도이다.
- [0717] 도 1 내지 도 5를 참조하면, 본 발명의 일 구현예에 따른 유기발광소자(100, 200, 300, 400 및 500)는 양극(120), 음극(110) 및 이 양극과 음극 사이에 개재된 적어도 1층의 유기박막층(105)을 포함하는 구조를 갖는다.
- [0718] 상기 양극(120)은 양극 물질을 포함하며, 이 양극 물질로는 통상 유기박막층으로 정공주입이 원활할 수 있도록 일함수가 큰 물질이 바람직하다. 상기 양극 물질의 구체적인 예로는 니켈, 백금, 바나듐, 크롬, 구리, 아연, 금과 같은 금속 또는 이들의 합금을 들 수 있고, 아연산화물, 인듐산화물, 인듐주석산화물(ITO), 인듐아연산화물(IZO)과 같은 금속 산화물을 들 수 있고, ZnO와 Al 또는 SnO₂와 Sb와 같은 금속과 산화물의 조합을 들 수 있고, 폴리(3-메틸티오펜), 폴리[3,4-(에틸렌-1,2-디옥시)티오펜](polyheptylenedioxythiophene: PEDT), 폴리피롤 및 폴리아닐린과 같은 전도성 고분자 등을 들 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다. 바람직하게는 상기 양극으로 ITO(indium tin oxide)를 포함하는 투명전극을 사용할 수 있다.
- [0719] 상기 음극(110)은 음극 물질을 포함하여, 이 음극 물질로는 통상 유기박막층으로 전자주입이 용이하도록 일함수가 작은 물질인 것이 바람직하다. 음극 물질의 구체적인 예로는 마그네슘, 칼슘, 나트륨, 칼륨, 타이타늄, 인듐, 이트륨, 리튬, 가돌리늄, 알루미늄, 은, 주석, 납, 세슘, 바륨 등과 같은 금속 또는 이들의 합금을 들 수 있고, LiF/Al, LiO₂/Al, LiF/Ca, LiF/Al 및 BaF₂/Ca와 같은 다층 구조 물질 등을 들 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다. 바람직하게는 상기 음극으로 알루미늄 등과 같은 금속전극을 사용할 수 있다.
- [0720] 먼저 도 1을 참조하면, 도 1은 유기박막층(105)으로서 발광층(130)만이 존재하는 유기발광소자(100)를 나타낸 것으로, 상기 유기박막층(105)은 발광층(130)만으로 존재할 수 있다.
- [0721] 도 2를 참조하면, 도 2는 유기박막층(105)으로서 전자수송층을 포함하는 발광층(230)과 정공수송층(140)이 존재하는 2층형 유기발광소자(200)를 나타낸 것으로, 도 2에 나타난 바와 같이, 유기박막층(105)은 발광층(230) 및 정공수송층(140)을 포함하는 2층형일 수 있다. 이 경우 발광층(230)은 전자수송층의 기능을 하며, 정공수송층(140)은 ITO와 같은 투명전극과의 접합성 및 정공수송성을 향상시키는 기능을 한다.
- [0722] 도 3을 참조하면, 도 3은 유기박막층(105)으로서 전자수송층(150), 발광층(130) 및 정공수송층(140)이 존재하는 3층형 유기발광소자(300)로서, 상기 유기박막층(105)에서 발광층(130)은 독립된 형태로 되어 있고, 전자수송성

이나 정공수송성이 우수한 막(전자수송층(150) 및 정공수송층(140))을 별도의 층으로 쌓은 형태를 나타내고 있다.

[0723] 도 4를 참조하면, 도 4는 유기박막층(105)으로서 전자주입층(160), 발광층(130), 정공수송층(140) 및 정공주입층(170)이 존재하는 4층형 유기발광소자(400)로서, 상기 정공주입층(170)은 양극으로 사용되는 ITO와의 접합성을 향상시킬 수 있다.

[0724] 도 5를 참조하면, 도 5는 유기박막층(105)으로서 전자주입층(160), 전자수송층(150), 발광층(130), 정공수송층(140) 및 정공주입층(170)과 같은 각기 다른 기능을 하는 5개의 층이 존재하는 5층형 유기발광소자(500)를 나타내고 있으며, 상기 유기발광소자(500)는 전자주입층(160)을 별도로 형성하여 저전압화에 효과적이다.

[0725] 상기 도 1 내지 도 5에서 상기 유기박막층(105)을 이루는 전자 수송층(150), 전자 주입층(160), 발광층(130, 230), 정공 수송층(140), 정공 주입층(170) 및 이들의 조합으로 이루어진 군에서 선택되는 어느 하나는 상기 유기광전자소자용 화합물을 포함한다. 이 때 상기 유기광전자소자용 화합물은 상기 전자 수송층(150) 또는 전자 주입층(160)을 포함하는 전자수송층(150)에 사용될 수 있으며, 그중에서도 전자수송층에 포함될 경우 정공 차단층(도시하지 않음)을 별도로 형성할 필요가 없어 보다 단순화된 구조의 유기발광소자를 제공할 수 있어 바람직하다.

[0726] 또한, 상기 유기광전자소자용 화합물이 발광층(130, 230) 내에 포함되는 경우 상기 유기광전자소자용 화합물은 인광 또는 형광호스트로서 포함될 수 있으며, 또는 형광 청색 도펀트로서 포함될 수 있다.

[0727] 상기에서 설명한 유기발광소자는, 기판에 양극을 형성한 후, 진공증착법(evaporation), 스퍼터링(sputtering), 플라즈마 도금 및 이온도금과 같은 건식성막법; 또는 스핀코팅(spin coating), 침지법(dipping), 유동코팅법(flow coating)과 같은 습식성막법 등으로 유기박막층을 형성한 후, 그 위에 음극을 형성하여 제조할 수 있다.

[0728] 본 발명의 또 다른 일 구현예에 따르면, 상기 유기발광소자를 포함하는 표시장치를 제공한다.

[0729] 이하에서는 본 발명의 구체적인 실시예들을 제시한다. 다만, 하기에 기재된 실시예들은 본 발명을 구체적으로 예시하거나 설명하기 위한 것에 불과하며, 이로서 본 발명이 제한되어서는 아니된다.

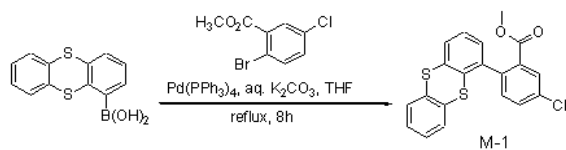
[0730]

[0731] **(유기광전자소자용 화합물의 제조)**

[0732] **중간체의 합성**

[0733] 중간체 M-1의 합성

[0734] [반응식 1]



[0735]

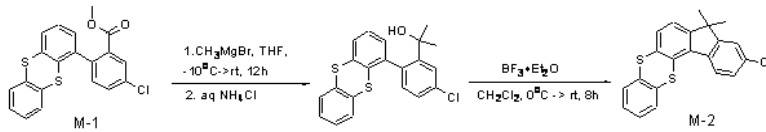
[0736] 티안스렌-1-보로닉 산(thianthrene-1-boronic acid) 20g(76.88mmol), 메틸-2-브로모-5-클로로벤조에이트 21.1g(84.57mmol) 및 테트라키스트리페닐포스핀팔라듐 0.89g(0.769mmol)을 플라스크에 넣고 질소 분위기 하에 테트라하이드로퓨란 257mL에 용해 시킨 후 포타슘 카보네이트 17g (115.3mmol)을 녹인 수용액 128ml를 첨가 시킨 후 8시간 동안 70°C에서 환류 교반 하였다. 반응 종료 후 에틸아세테이트로 추출 한 후 추출액을 마그네슘숯 페이트로 건조, 여과하고 여과액을 감압 농축하였다. 생성물을 n-헥산/에틸아세테이트(9:1 부피비)으로 실리카 겔 컬럼 크로마토 그래피로 정제하여 목적 화합물인 중간체 M-1을 26.9g(수율 91%)을 수득 하였다.

[0737] LC-Mass (이론치: 384.00g/mol, 측정치: M+1 = 385.11g/mol)

[0738]

[0739] 중간체 M-2의 합성

[0740] [반응식 2]



[0741]

[0742] 진공 하에서 가열 건조한 3구 둥근 바닥 플라스크에 질소 분위기 하에서 중간체 M-1 25g(64.95mmol)을 넣고 무수 테트라하이드로퓨란 325mL를 가하여 용해시킨 후 -10°C로 냉각 및 교반 하였다.

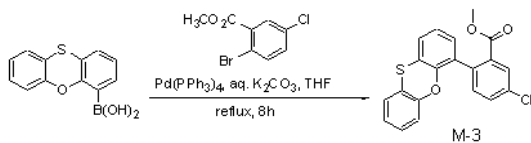
[0743] 여기에 3.0M 메틸마그네슘브로마이드 54mL(디에틸에테르 내, 162.4mmol)을 30분간 천천히 가한다. 반응액을 상온으로 승온하고 질소 분위기 하에 12시간 교반 하였다. 반응액을 0°C로 냉각한 후 여기에 암모늄클로라이드 10.4g (194.85mmol)을 증류수 100mL에 녹인 수용액을 천천히 가한다. 반응액을 증류수와 디에틸에테르로 추출하고 유기층 용액을 마그네슘설페이트로 건조, 여과하고 여과액을 감압 농축하였다. 건조된 잔사를 3구 둥근 바닥 플라스크에 넣은 후 질소분위기 하에서 무수 디클로로메탄 325mL를 가하여 용해시킨 후 0°C로 냉각 및 교반 하였다. 여기에 보르트리플루오라이드 디에틸 이서레이트 4mL (32.5mmol)을 10분간 천천히 가하고 실온으로 승온한 후 12시간 동안 교반한다. 반응이 종료되면 중탄산나트륨 수용액을 0°C에서 천천히 가한후 30분간 교반한다. 반응액을 디클로로메탄/증류수로 추출한 추출액을 마그네슘설페이트로 건조, 여과하고 여과액을 감압 농축하였다. 생성물을 n-헥산/디클로로메탄(9:1 부피비)으로 실리카 겔 컬럼 크로마토 그래피로 정제하여 목적 화합물인 중간체 M-2를 15.5g(수율 65%)을 수득 하였다.

[0744] LC-Mass (이론치: 366.03g/mol, 측정치: M+1 = 367.14g/mol)

[0745]

[0746] 중간체 M-3의 합성

[0747] [반응식 3]



[0748]

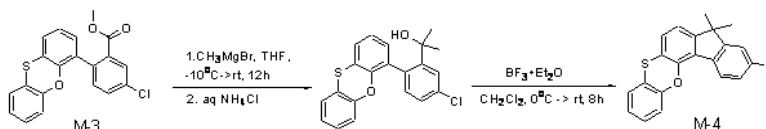
[0749] 4-페녹사티인일보론산(4-Phenoxathiinylboronic acid) 18.8g(76.88mmol), 메틸-2-브로모-5-클로로벤조에이트 21.1g(84.57mmol) 및 테트라키스트리페닐포스핀팔라듐 0.89g(0.769mmol)을 플라스크에 넣고 질소 분위기 하에 테트라하이드로퓨란 257mL에 용해 시킨 후 포타슘 카보네이트 17g (115.3mmol)을 녹인 수용액 128ml를 첨가 시킨 후 8시간 동안 70°C에서 환류 교반 하였다. 반응 종료 후 에틸아세테이트로 추출 한 후 추출액을 마그네슘설페이트로 건조, 여과하고 여과액을 감압 농축하였다. 생성물을 n-헥산/에틸아세테이트(9:1 부피비)으로 실리카 겔 컬럼 크로마토 그래피로 정제하여 목적 화합물인 중간체 M-3를 26.1g(수율 92%)을 수득 하였다.

[0750] LC-Mass (이론치: 368.03g/mol, 측정치: M+1 = 369.21g/mol)

[0751]

[0752] 중간체 M-4의 합성

[0753] [반응식 4]



[0754]

[0755] 진공 하에서 가열 건조한 3구 둥근 바닥 플라스크에 질소 분위기 하에서 중간체 M-3 24g(64.95mmol)을 넣고 무수 테트라하이드로퓨란 325mL를 가하여 용해시킨 후 -10°C로 냉각 및 교반 하였다.

[0756] 여기에 3.0M 메틸마그네슘브로마이드 54mL(디에틸에테르 내, 162.4mmol)을 30분간 천천히 가한다. 반응액을 상온으로 승온하고 질소 분위기 하에 12시간 교반 하였다. 반응액을 0°C로 냉각한 후 여기에 암모늄클로라이드

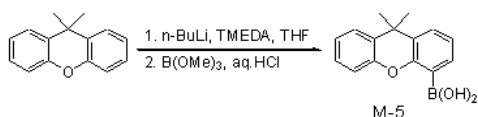
10.4g (194.85mmol)을 증류수 100mL에 녹인 수용액을 천천히 가한다. 반응액을 증류수와 디에틸에테르로 추출하고 유기층 용액을 마그네슘설페이트로 건조, 여과하고 여과액을 감압 농축하였다. 건조된 잔사를 3구 둥근 바닥 플라스크에 넣은 후 질소분위기 하에서 무수 디클로로메탄 325mL를 가하여 용해시킨 후 0°C로 냉각 및 교반 하였다. 여기에 보론트리플루오라이드 디에틸 이써레이트 4mL (32.5mmol)을 10분간 천천히 가하고 실온으로 승온한 후 12시간 동안 교반한다. 반응이 종료되면 중탄산나트륨 수용액을 0°C에서 천천히 가한후 30분간 교반한다. 반응액을 디클로로메탄/증류수로 추출한 추출액을 마그네슘설페이트로 건조, 여과하고 여과액을 감압 농축하였다. 생성물을 n-헥산/디클로로메탄(9:1 부피비)으로 실리카 겔 컬럼 크로마토 그래피로 정제하여 목적 화합물인 중간체 M-2를 15.5g(수율 68%)을 수득 하였다.

[0757] LC-Mass (이론치: 350.05g/mol, 측정치: M+1 = 351.18g/mol)

[0758]

[0759] 중간체 M-5의 합성

[0760] [반응식 5]



[0761]

[0762] 진공 하에서 가열 건조한 2구 둥근 바닥 플라스크에 질소 분위기 하에서 9,9-디메틸잔텐 30g(142.7mmol)을 넣고 무수 테트라하이드로퓨란 476mL를 가하여 용해시킨 후 -40°C로 냉각 및 교반하였다.

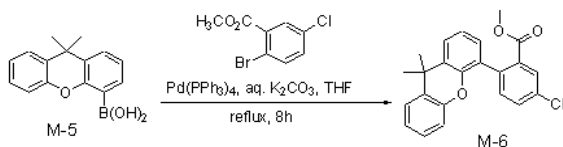
[0763] 여기에 2.5M n-부틸리튬 57mL(헥산 내, 142.7mmol)을 천천히 가한 후 N,N,N',N'-테트라메틸에틸렌디아민 16.5g(142.7mmol)을 가한다. 반응액을 상온으로 승온하고 질소 분위기 하에 8시간 교반 하였다. 반응액을 -78°C로 냉각한 후 여기에 무수 테트라하이드로퓨란 10mL에 녹인 트리메틸보레이트 10.9g(157mmol)을 천천히 가한 후 상온에서 8시간 교반 하였다. 반응액을 0°C로 냉각하고 여기에 2N HCl 수용액 234mL를 가하고 1시간 동안 상온에서 교반 하였다. 반응 종료 후 용액을 증류수와 디에틸에테르로 추출하고 유기층 용액을 마그네슘설페이트로 건조, 여과하고 여과액을 감압 농축하였다. 반응액을 아세톤에 녹인 후 n-헥산으로 재결정하여 목적화합물인 중간체 M-5를 흰색고체로 23.6g(수율 65%)을 수득하였다.

[0764] GC-Mass (이론치: 254.11g/mol, 측정치: M+1 = 255.42g/mol)

[0765]

[0766] 중간체 M-6의 합성

[0767] [반응식 6]



[0768]

[0769] 중간체 M-5 19.5g(76.88mmol), 메틸-2-브로모-5-클로로벤조에이트 21.1g(84.57mmol) 및 테트라키스트리페닐포스핀팔라듐 0.89g(0.769mmol)을 플라스크에 넣고 질소 분위기 하에 테트라하이드로퓨란 257mL에 용해 시킨 후 포타슘 카보네이트 17g (115.3mmol)을 녹인 수용액 128mL를 첨가 시킨 후 8시간 동안 70°C에서 환류 교반 하였다. 반응 종료 후 에틸아세테이트로 추출 한 후 추출액을 마그네슘설페이트로 건조, 여과하고 여과액을 감압 농축하였다. 생성물을 n-헥산/에틸아세테이트(9:1 부피비)으로 실리카 겔 컬럼 크로마토 그래피로 정제하여 목적 화합물인 중간체 M-6을 26.2g(수율 90%)을 수득 하였다.

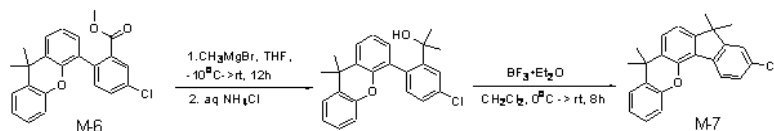
[0770] LC-Mass (이론치: 378.10g/mol, 측정치: M+1 = 379.31g/mol)

[0771]

[0772] 중간체 M-7의 합성

[0773]

[반응식 7]



[0774]

[0775]

진공 하에서 가열 건조한 3구 둥근 바닥 플라스크에 질소 분위기 하에서 중간체 M-6 24.6g(64.95mmol)을 넣고 무수 테트라하이드로퓨란 325mL를 가하여 용해시킨 후 -10°C로 냉각 및 교반 하였다.

[0776]

여기에 3.0M 메틸마그네슘브로마이드 54mL(디에틸에테르 내, 162.4mmol)을 30분간 천천히 가한다. 반응액을 상온으로 승온하고 질소 분위기 하에 12시간 교반 하였다. 반응액을 0°C로 냉각한 후 여기에 암모늄염화물 10.4g (194.85mmol)을 증류수 100mL에 녹인 수용액을 천천히 가한다. 반응액을 증류수와 디에틸에테르로 추출하고 유기층 용액을 마그네슘염화물로 건조, 여과하고 여과액을 감압 농축하였다. 건조된 잔사를 3구 둥근 바닥 플라스크에 넣은 후 질소분위기 하에서 무수 디클로로메탄 325mL를 가하여 용해시킨 후 0°C로 냉각 및 교반 하였다. 여기에 보른트리플루오라이드 디에틸 이서레이트 4mL (32.5mmol)을 10분간 천천히 가하고 실온으로 승온한 후 12시간 동안 교반한다. 반응이 종료되면 중탄산나트륨 수용액을 0°C에서 천천히 가한후 30분간 교반한다. 반응액을 디클로로메탄/증류수로 추출한 추출액을 마그네슘염화물로 건조, 여과하고 여과액을 감압 농축하였다. 생성물을 n-헥산/디클로로메탄(9:1 부피비)으로 실리카 겔 컬럼 크로마토 그래피로 정제하여 목적 화합물인 중간체 M-7을 15.7g(수율 67%)을 수득 하였다.

[0777]

LC-Mass (이론치: 360.13g/mol, 측정치: M+1 = 361.26g/mol)

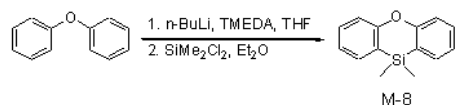
[0778]

[0779]

중간체 M-8의 합성

[0780]

[반응식 8]



[0781]

[0782]

진공 하에서 가열 건조한 2구 둥근 바닥 플라스크에 질소 분위기 하에서 디페닐에테르 60g(352.6mmol)을 넣고 무수 테트라하이드로퓨란 352mL를 가하여 용해시킨 후 0°C로 냉각 및 교반하였다.

[0783]

여기에 2.5M n-부틸리튬 310mL(헥산 내, 776mmol)을 천천히 가한 후 N,N,N',N'-테트라메틸에틸렌디아민 90.2g(776mmol)을 가한다. 반응액을 상온으로 승온하고 질소 분위기 하에 16시간 교반 하였다. 반응액을 0°C로 냉각한 후 여기에 무수 디에틸에테르 60mL에 녹인 디메틸디클로로실란 45.6g(352.6mmol)을 천천히 가한 후 상온에서 16시간 교반 하였다. 반응액을 0°C로 냉각하고 여기에 증류수 240mL를 가하고 30분간 상온에서 교반 하였다. 반응 종료 후 용액을 증류수와 디에틸에테르로 추출하고 유기층 용액을 마그네슘염화물로 건조, 여과하고 여과액을 감압 농축하였다. 생성물을 메탄올로 재결정하여 목적화합물인 중간체 M-8을 흰색 고체로 35.2g(수율 44%)을 수득하였다.

[0784]

GC-Mass (이론치: 226.08g/mol, 측정치: M+1 = 227.27g/mol)

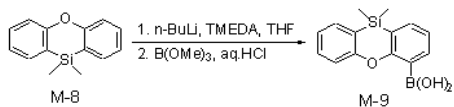
[0785]

[0786]

중간체 M-9의 합성

[0787]

[반응식 9]



[0788]

[0789]

진공 하에서 가열 건조한 2구 둥근 바닥 플라스크에 질소 분위기 하에서 중간체 M-8 32.3g(142.7mmol)을 넣고 무수 테트라하이드로퓨란 476mL를 가하여 용해시킨 후 -40°C로 냉각 및 교반하였다.

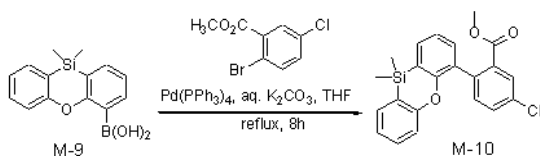
[0790] 여기에 2.5M n-부틸리튬 57mL(헥산 내, 142.7mmol)을 천천히 가한 후 N,N,N',N'-테트라메틸에틸렌디아민 16.5g(142.7mmol)을 가한다. 반응액을 상온으로 승온하고 질소 분위기 하에 8시간 교반 하였다. 반응액을 -78°C로 냉각한 후 여기에 무수 테트라하이드로퓨란 10mL에 녹인 트리메틸보레이트 10.9g(157mmol)을 천천히 가한 후 상온에서 8시간 교반 하였다. 반응액을 0°C로 냉각하고 여기에 2N HCl 수용액 234mL를 가하고 1시간 동안 상온에서 교반 하였다. 반응 종료 후 용액을 증류수와 디에틸에테르로 추출하고 유기층 용액을 마그네슘설페이트로 건조, 여과하고 여과액을 감압 농축하였다. 반응액을 아세톤에 녹인 후 n-헥산으로 재결정하여 목적화합물인 중간체 M-9를 흰색 고체로 22.7g(수율 59%)을 수득하였다.

[0791] GC-Mass (이론치: 270.09g/mol, 측정치: M+1 = 271.35g/mol)

[0792]

[0793] 중간체 M-10의 합성

[0794] [반응식 10]



[0795]

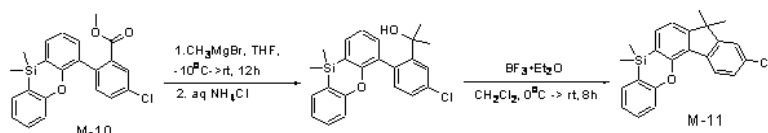
[0796] 중간체 M-9 20.8g(76.88mmol), 메틸-2-브로모-5-클로로벤조에이트 21.1g(84.57mmol) 및 테트라키스트리페닐포스핀팔라듐 0.89g(0.769mmol)을 플라스크에 넣고 질소 분위기 하에 테트라하이드로퓨란 257mL에 용해 시킨 후 포타슘 카보네이트 17g (115.3mmol)을 녹인 수용액 128mL를 첨가 시킨 후 8시간 동안 70°C에서 환류 교반 하였다. 반응 종료 후 에틸아세테이트로 추출 한 후 추출액을 마그네슘설페이트로 건조, 여과하고 여과액을 감압 농축하였다. 생성물을 n-헥산/에틸아세테이트(9:1 부피비)으로 실리카 겔 컬럼 크로마토 그래피로 정제하여 목적 화합물인 중간체 M-10을 27g(수율 89%)을 수득 하였다.

[0797] LC-Mass (이론치: 394.08g/mol, 측정치: M+1 = 395.29g/mol)

[0798]

[0799] 중간체 M-11의 합성

[0800] [반응식 11]



[0801]

[0802] 진공 하에서 가열 건조한 3구 둥근 바닥 플라스크에 질소 분위기 하에서 중간체 M-10 25.7g(64.95mmol)을 넣고 무수 테트라하이드로퓨란 325mL를 가하여 용해시킨 후 -10°C로 냉각 및 교반 하였다.

[0803] 여기에 3.0M 메틸마그네슘브로마이드 54mL(디에틸에테르 내, 162.4mmol)을 30분간 천천히 가한다. 반응액을 상온으로 승온하고 질소 분위기 하에 12시간 교반 하였다. 반응액을 0°C로 냉각한 후 여기에 암모늄클로라이드 10.4g (194.85mmol)을 증류수 100mL에 녹인 수용액을 천천히 가한다. 반응액을 증류수와 디에틸에테르로 추출하고 유기층 용액을 마그네슘설페이트로 건조, 여과하고 여과액을 감압 농축하였다. 건조된 잔사를 3구 둥근 바닥 플라스크에 넣은 후 질소분위기 하에서 무수 디클로로메탄 325mL를 가하여 용해시킨 후 0°C로 냉각 및 교반 하였다. 여기에 보른트리플루오라이드 디에틸 이써레이트 4mL (32.5mmol)을 10분간 천천히 가하고 실온으로 승온한 후 12시간 동안 교반한다. 반응이 종료되면 중탄산나트륨 수용액을 0°C에서 천천히 가한후 30분간 교반한다. 반응액을 디클로로메탄/증류수로 추출한 추출액을 마그네슘설페이트로 건조, 여과하고 여과액을 감압 농축하였다. 생성물을 n-헥산/디클로로메탄(9:1 부피비)으로 실리카 겔 컬럼 크로마토 그래피로 정제하여 목적 화합물인 중간체 M-11을 15.9g(수율 65%)을 수득 하였다.

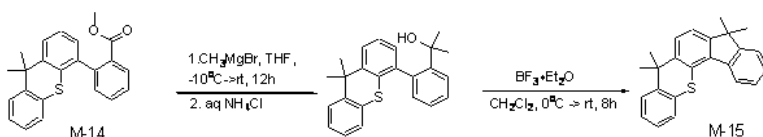
[0804] LC-Mass (이론치: 376.11g/mol, 측정치: M+1 = 377.25g/mol)

보네이트 17g (115.3mmol)을 녹인 수용액 128ml를 첨가 시킨 후 8시간 동안 70°C에서 환류 교반 하였다. 반응 종료 후 에틸아세테이트로 추출 한 후 추출액을 마그네슘설페이트로 건조, 여과하고 여과액을 감압 농축하였다. 생성물을 n-헥산/에틸아세테이트(9:1 부피비)으로 실리카 겔 컬럼 크로마토 그래피로 정제하여 목적 화합물인 중간체 M-14를 25.5g(수율 92%)을 수득 하였다.

[0825] LC-Mass (이론치: 360.12g/mol, 측정치: M+1 = 361.25g/mol)

[0826]
[0827]
[0828]
[0829] 중간체 M-15의 합성

[0830] [반응식 15]



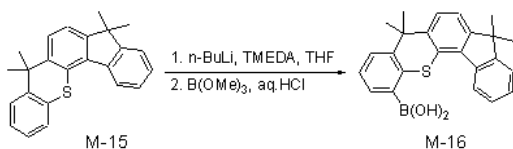
[0831]
[0832] 진공 하에서 가열 건조한 3구 둥근 바닥 플라스크에 질소 분위기 하에서 중간체 M-14 23.4g(64.95mmol)을 넣고 무수 테트라하이드로퓨란 325mL를 가하여 용해시킨 후 -10°C로 냉각 및 교반 하였다.

[0833] 여기에 3.0M 메틸마그네슘브로마이드 54mL(디에틸에테르 내, 162.4mmol)을 30분간 천천히 가한다. 반응액을 상온으로 승온하고 질소 분위기 하에 12시간 교반 하였다. 반응액을 0°C로 냉각한 후 여기에 암모늄클로라이드 10.4g (194.85mmol)을 증류수 100mL에 녹인 수용액을 천천히 가한다. 반응액을 증류수와 디에틸에테르로 추출하고 유기층 용액을 마그네슘설페이트로 건조, 여과하고 여과액을 감압 농축하였다. 건조된 잔사를 3구 둥근 바닥 플라스크에 넣은 후 질소분위기 하에서 무수 디클로로메탄 325mL를 가하여 용해시킨 후 0°C로 냉각 및 교반 하였다. 여기에 보론트리플루오라이드 디에틸 이써레이트 4mL (32.5mmol)을 10분간 천천히 가하고 실온으로 승온한 후 12시간 동안 교반한다. 반응이 종료되면 중탄산나트륨 수용액을 0°C에서 천천히 가한후 30분간 교반한다. 반응액을 디클로로메탄/증류수로 추출한 추출액을 마그네슘설페이트로 건조, 여과하고 여과액을 감압 농축하였다. 생성물을 n-헥산/디클로로메탄(9:1 부피비)으로 실리카 겔 컬럼 크로마토 그래피로 정제하여 목적 화합물인 중간체 M-15를 14.7g(수율 66%)을 수득 하였다.

[0834] LC-Mass (이론치: 342.14g/mol, 측정치: M+1 = 343.19g/mol)

[0835]
[0836] 중간체 M-16의 합성

[0837] [반응식 16]



[0838]
[0839] 진공 하에서 가열 건조한 2구 둥근 바닥 플라스크에 질소 분위기 하에서 중간체 M-15 24.5g(71.4mmol)을 넣고 무수 테트라하이드로퓨란 238mL를 가하여 용해시킨 후 -40°C로 냉각 및 교반하였다.

[0840] 여기에 2.5M n-부틸리튬 28.6mL(헥산 내, 71.4mmol)을 천천히 가한 후 N,N,N',N'-테트라메틸에틸렌디아민 8.3g(71.4mmol)을 가한다. 반응액을 상온으로 승온하고 질소 분위기 하에 8시간 교반 하였다. 반응액을 -78°C로 냉각한 후 여기에 무수 테트라하이드로퓨란 10mL에 녹인 트리메틸보레이트 8.9g(85.7mmol)을 천천히 가한 후 상온에서 8시간 교반 하였다. 반응액을 0°C로 냉각하고 여기에 2N HCl 수용액 117mL를 가하고 1시간 동안 상온에서 교반 하였다. 반응 종료 후 용액을 증류수와 디에틸에테르로 추출하고 유기층 용액을 마그네슘설페이트로 건조, 여과하고 여과액을 감압 농축하였다. 반응액을 아세톤에 녹인 후 n-헥산으로 재결정하여 목적화합물인 중간

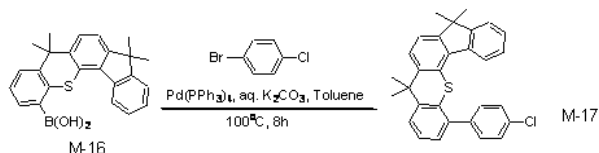
체 M-16을 흰색 고체로 17.9g(수율 65%)을 수득하였다.

[0841] GC-Mass (이론치: 386.15g/mol, 측정치: M+1 = 387.19g/mol)

[0842]

[0843] 중간체 M-17의 합성

[0844] [반응식 17]



[0845]

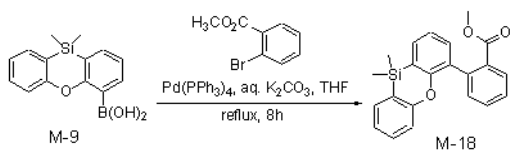
[0846] 중간체 M-16 18g(46.6mmol), 1-브로모-4-클로로벤젠 8.9g(46.6mmol) 및 테트라키스트리페닐포스핀팔라듐 0.54g(0.466mmol)을 플라스크에 넣고 질소 분위기 하에 톨루엔 233mL에 용해 시킨 후 포타슘 카보네이트 10.3g(69.9mmol)을 녹인 수용액 80ml를 첨가 시키고 8시간 동안 100°C에서 환류 교반 하였다. 반응 종료 후 에틸아세테이트로 추출 한 후 추출액을 마그네슘설페이트로 건조, 여과하고 여과액을 감압 농축하였다. 생성물을 n-헥산/디클로로메탄(9:1 부피비)으로 실리카 겔 컬럼 크로마토 그래피로 정제하여 목적 화합물인 중간체 M-17을 19.2g(수율 91%)을 수득 하였다.

[0847] LC-Mass (이론치: 452.14g/mol, 측정치: M+1 = 453.23g/mol)

[0848]

[0849] 중간체 M-18의 합성

[0850] [반응식 18]



[0851]

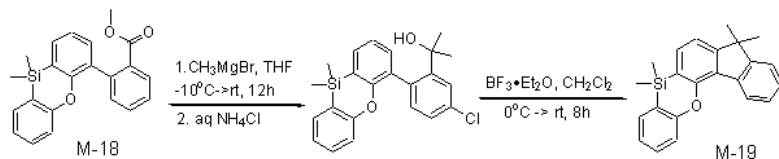
[0852] 중간체 M-9 20.8g(76.88mmol), 메틸-2-브로모벤조에이트 18.2g (84.57mmol) 및 테트라키스트리페닐포스핀팔라듐 0.89g(0.769mmol)을 플라스크에 넣고 질소 분위기 하에 테트라하이드로퓨란 257mL에 용해 시킨 후 포타슘 카보네이트 17g (115.3mmol)을 녹인 수용액 128ml를 첨가 시킨 후 8시간 동안 70°C에서 환류 교반 하였다. 반응 종료 후 에틸아세테이트로 추출 한 후 추출액을 마그네슘설페이트로 건조, 여과하고 여과액을 감압 농축하였다. 생성물을 n-헥산/에틸아세테이트(9:1 부피비)으로 실리카 겔 컬럼 크로마토 그래피로 정제하여 목적 화합물인 중간체 M-18을 24.9g(수율 90%)을 수득 하였다.

[0853] LC-Mass (이론치: 360.12g/mol, 측정치: M+1 = 361.33g/mol)

[0854]

[0855] 중간체 M-19의 합성

[0856] [반응식 19]



[0857]

[0858] 진공 하에서 가열 건조한 3구 둥근 바닥 플라스크에 질소 분위기 하에서 중간체 M-18 23.4g(64.95mmol)을 넣고 무수 테트라하이드로퓨란 325mL를 가하여 용해시킨 후 -10°C로 냉각 및 교반 하였다.

[0859] 여기에 3.0M 메틸마그네슘브로마이드 54mL(디에틸에테르 내, 162.4mmol)을 30분간 천천히 가한다. 반응액을 상

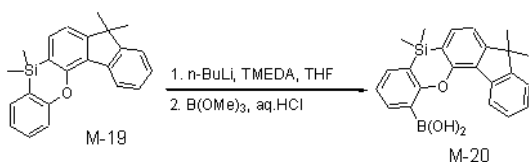
온으로 승온하고 질소 분위기 하에 12시간 교반 하였다. 반응액을 0℃로 냉각한 후 여기에 암모늄클로라이드 10.4g (194.85mmol)을 증류수 100mL에 녹인 수용액을 천천히 가한다. 반응액을 증류수와 디에틸에테르로 추출하고 유기층 용액을 마그네슘설페이트로 건조, 여과하고 여과액을 감압 농축하였다. 건조된 잔사를 3구 둥근 바닥 플라스크에 넣은 후 질소분위기 하에서 무수 디클로로메탄 325mL를 가하여 용해시킨 후 0℃로 냉각 및 교반 하였다. 여기에 보른트리플루오라이드 디에틸 이써레이트 4mL (32.5mmol)을 10분간 천천히 가하고 실온으로 승온한 후 12시간 동안 교반한다. 반응이 종료되면 중탄산나트륨 수용액을 0℃에서 천천히 가한후 30분간 교반한다. 반응액을 디클로로메탄/증류수로 추출한 추출액을 마그네슘설페이트로 건조, 여과하고 여과액을 감압 농축하였다. 생성물을 n-헥산/디클로로메탄(9:1 부피비)으로 실리카 겔 컬럼 크로마토 그래피로 정제하여 목적 화합물인 중간체 M-19를 15.1g(수율 68%)을 수득 하였다.

[0860] LC-Mass (이론치: 342.14g/mol, 측정치: M+1 = 343.22g/mol)

[0861]

[0862] 중간체 M-20의 합성

[0863] [반응식 20]



[0864]

[0865] 진공 하에서 가열 건조한 2구 둥근 바닥 플라스크에 질소 분위기 하에서 중간체 M-19 24.5g(71.4mmol)을 넣고 무수 테트라하이드로퓨란 238mL를 가하여 용해시킨 후 -40℃로 냉각 및 교반하였다.

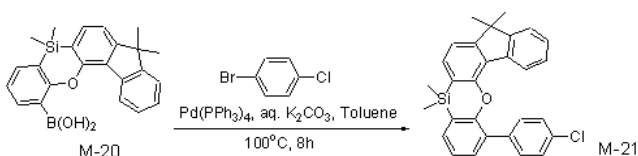
[0866] 여기에 2.5M n-부틸리튬 28.6mL(헥산 내, 71.4mmol)을 천천히 가한 후 N,N,N',N'-테트라메틸에틸렌디아민 8.3g(71.4mmol)을 가한다. 반응액을 상온으로 승온하고 질소 분위기 하에 8시간 교반 하였다. 반응액을 -78℃로 냉각한 후 여기에 무수 테트라하이드로퓨란 10mL에 녹인 트리메틸보레이트 8.9g(85.7mmol)을 천천히 가한 후 상온에서 8시간 교반 하였다. 반응액을 0℃로 냉각하고 여기에 2N HCl 수용액 117mL를 가하고 1시간 동안 상온에서 교반 하였다. 반응 종료 후 용액을 증류수와 디에틸에테르로 추출하고 유기층 용액을 마그네슘설페이트로 건조, 여과하고 여과액을 감압 농축하였다. 반응액을 아세톤에 녹인 후 n-헥산으로 재결정하여 목적화합물인 중간체 M-20을 흰색 고체로 18.5g(수율 67%)을 수득하였다.

[0867] GC-Mass (이론치: 386.15g/mol, 측정치: M+1 = 387.24g/mol)

[0868]

[0869] 중간체 M-21의 합성

[0870] [반응식 21]



[0871]

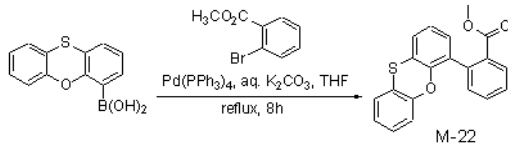
[0872] 중간체 M-20 18g(46.6mmol), 1-브로모-4-클로로벤젠 8.9g(46.6mmol) 및 테트라키스트리페닐포스핀팔라듐 0.54g(0.466mmol)을 플라스크에 넣고 질소 분위기 하에 톨루엔 233mL에 용해 시킨 후 포타슘 카보네이트 10.3g (69.9mmol)을 녹인 수용액 80ml를 첨가 시키고 8시간 동안 100℃에서 환류 교반 하였다. 반응 종료 후 에틸아세테이트로 추출 한 후 추출액을 마그네슘설페이트로 건조, 여과하고 여과액을 감압 농축하였다. 생성물을 n-헥산/디클로로메탄(9:1 부피비)으로 실리카 겔 컬럼 크로마토 그래피로 정제하여 목적 화합물인 중간체 M-21을 19.6g(수율 93%)을 수득 하였다.

[0873] LC-Mass (이론치: 452.14g/mol, 측정치: M+1 = 453.28g/mol)

[0874]

[0875] 중간체 M-22의 합성

[0876] [반응식 22]



[0877]

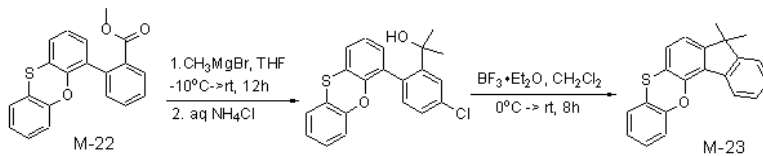
[0878] 4-페녹사티일보로닉 산(4-Phenoxathiinylboronic acid) 18.8g(76.88mmol), 메틸-2-브로모벤조에이트 18.2g (84.57mmol) 및 테트라키스트리페닐포스핀팔라듐 0.89g(0.769mmol)을 플라스크에 넣고 질소 분위기 하에 테트라하이드로퓨란 257mL에 용해 시킨 후 포타슘 카보네이트 17g (115.3mmol)을 녹인 수용액 128ml를 첨가 시킨 후 8 시간 동안 70°C에서 환류 교반 하였다. 반응 종료 후 에틸아세테이트로 추출 한 후 추출액을 마그네슘설페이트로 건조, 여과하고 여과액을 감압 농축하였다. 생성물을 n-헥산/에틸아세테이트(9:1 부피비)으로 실리카 겔 컬럼 크로마토 그래피로 정제하여 목적 화합물인 중간체 M-22를 23.4g(수율 91%)을 수득 하였다.

[0879] LC-Mass (이론치: 334.39g/mol, 측정치: M+1 = 335.28g/mol)

[0880]

[0881] 중간체 M-23의 합성

[0882] [반응식 23]



[0883]

[0884] 진공 하에서 가열 건조한 3구 둥근 바닥 플라스크에 질소 분위기 하에서 중간체 M-22 21.7g(64.95mmol)을 넣고 무수 테트라하이드로퓨란 325mL를 가하여 용해시킨 후 -10°C로 냉각 및 교반 하였다.

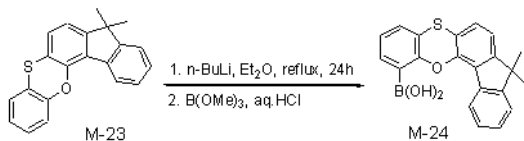
[0885] 여기에 3.0M 메틸마그네슘브로마이드 54mL(디에틸에테르 내, 162.4mmol) 을 30분간 천천히 가한다. 반응액을 상온으로 승온하고 질소 분위기 하에 12시간 교반 하였다. 반응액을 0°C로 냉각한 후 여기에 암모늄클로라이드 10.4g (194.85mmol)을 증류수 100mL에 녹인 수용액을 천천히 가한다. 반응액을 증류수와 디에틸에테르로 추출하고 유기층 용액을 마그네슘설페이트로 건조, 여과하고 여과액을 감압 농축하였다. 건조된 잔사를 3구 둥근 바닥 플라스크에 넣은 후 질소분위기 하에서 무수 디클로로메탄 325mL를 가하여 용해시킨 후 0°C로 냉각 및 교반 하였다. 여기에 보른트리플루오라이드 디에틸 이써레이트 4mL (32.5mmol)을 10분간 천천히 가하고 실온으로 승온 한 후 12시간 동안 교반한다. 반응이 종료되면 중탄산나트륨 수용액을 0°C에서 천천히 가한후 30분간 교반한다. 반응액을 디클로로메탄/증류수로 추출한 추출액을 마그네슘설페이트로 건조, 여과하고 여과액을 감압 농축하였다. 생성물을 n-헥산/디클로로메탄(9:1 부피비)으로 실리카 겔 컬럼 크로마토 그래피로 정제하여 목적 화합물인 중간체 M-23을 13.2g(수율 64%)을 수득 하였다.

[0886] LC-Mass (이론치: 316.42g/mol, 측정치: M+1 = 317.55g/mol)

[0887]

[0888] 중간체 M-24의 합성

[0889] [반응식 24]



[0890]

[0891] 진공 하에서 가열 건조한 2구 둥근 바닥 플라스크에 질소 분위기 하에서 중간체 M-23 13g(41.08mmol)을 넣고 무수 디에틸에테르 410mL를 가하여 용해시킨 후 0°C로 냉각 및 교반하였다.

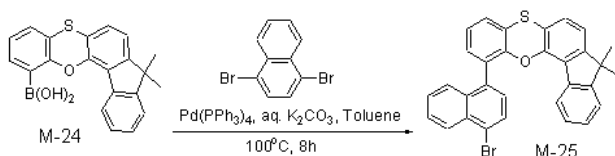
[0892] 여기에 2.5M n-부틸리튬 16.4mL(헥산 내, 41.08mmol)을 가한 후 반응액을 승온하여 질소 분위기 하에 24시간 동안 환류 교반 하였다. 반응액을 -40°C로 냉각한 후 여기에 무수 디에틸에테르 10mL에 녹인 트리메틸보레이트 4.7g(45.2mmol)을 천천히 가한 후 상온에서 12시간 교반 하였다. 반응액을 0°C로 냉각하고 여기에 2N HCl 수용액 68mL를 가하고 1시간 동안 상온에서 교반 하였다. 반응 종료 후 용액을 증류수와 디에틸에테르로 추출하고 유기층 용액을 마그네슘설페이트로 건조, 여과하고 여과액을 감압 농축하였다. 반응액을 아세톤에 녹인 후 n-헥산으로 재결정하여 목적화합물인 중간체 M-24를 흰색 고체로 7.7g(수율 52%)을 수득하였다.

[0893] GC-Mass (이론치: 360.10g/mol, 측정치: M+1 = 361.28g/mol)

[0894]

[0895] 중간체 M-25의 합성

[0896] [반응식 25]



[0897]

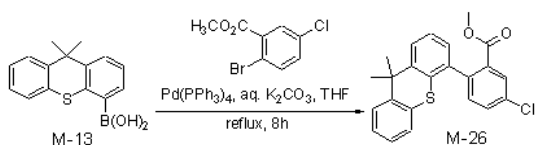
[0898] 중간체 M-24 7g(19.43mmol), 1,4-디브로모나프탈렌 8.3g(29.15mmol) 및 테트라키스트리페닐포스핀팔라듐 0.23g(0.194mmol)을 플라스크에 넣고 질소 분위기 하에 톨루엔 190mL에 용해 시킨 후 포타슘 카보네이트 4.3g(29.14mmol)을 녹인 수용액 60ml를 첨가 시키고 8시간 동안 100°C에서 환류 교반 하였다. 반응 종료 후 에틸아세테이트로 추출 한 후 추출액을 마그네슘설페이트로 건조, 여과하고 여과액을 감압 농축하였다. 생성물을 n-헥산/디클로로메탄(9:1 부피비)으로 실리카 겔 컬럼 크로마토 그래피로 정제하여 목적 화합물인 중간체 M-25을 7.9g(수율 78%)을 수득 하였다.

[0899] LC-Mass (이론치: 520.05g/mol, 측정치: M+1 = 521.16g/mol)

[0900]

[0901] 중간체 M-26의 합성

[0902] [반응식 26]



[0903]

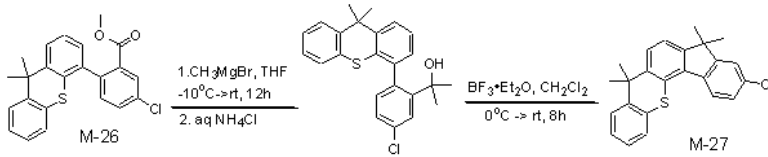
[0904] 중간체 M-13 20.8g(76.88mmol), 메틸-2-브로모-5-클로로벤조에이트 21.1g(84.57mmol) 및 테트라키스트리페닐포스핀팔라듐 0.89g(0.769mmol)을 플라스크에 넣고 질소 분위기 하에 테트라하이드로퓨란 257mL에 용해 시킨 후 포타슘 카보네이트 17g(115.3mmol)을 녹인 수용액 128ml를 첨가 시킨 후 8시간 동안 70°C에서 환류 교반 하였다. 반응 종료 후 에틸아세테이트로 추출 한 후 추출액을 마그네슘설페이트로 건조, 여과하고 여과액을 감압 농축하였다. 생성물을 n-헥산/에틸아세테이트(9:1 부피비)으로 실리카 겔 컬럼 크로마토 그래피로 정제하여 목적 화합물인 중간체 M-26을 27.3g(수율 90%)을 수득 하였다.

[0905] LC-Mass (이론치: 394.08g/mol, 측정치: M+1 = 395.16g/mol)

[0906]

[0907] 중간체 M-27의 합성

[0908] [반응식 27]



[0909]

[0910] 진공 하에서 가열 건조한 3구 둥근 바닥 플라스크에 질소 분위기 하에서 중간체 M-26 25.6g(64.95mmol)을 넣고 무수 테트라하이드로푸란 325mL를 가하여 용해시킨 후 -10°C로 냉각 및 교반 하였다.

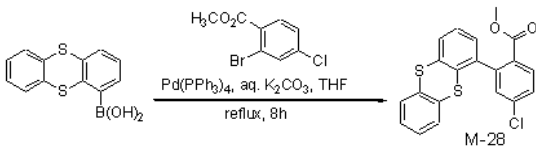
[0911] 여기에 3.0M 메틸마그네슘브로마이드 54mL(디에틸에테르 내, 162.4mmol)을 30분간 천천히 가한다. 반응액을 상온으로 승온하고 질소 분위기 하에 12시간 교반 하였다. 반응액을 0°C로 냉각한 후 여기에 암모늄클로라이드 10.4g(194.85mmol)을 증류수 100mL에 녹인 수용액을 천천히 가한다. 반응액을 증류수와 디에틸에테르로 추출하고 유기층 용액을 마그네슘설페이트로 건조, 여과하고 여과액을 감압 농축하였다. 건조된 잔사를 3구 둥근 바닥 플라스크에 넣은 후 질소분위기 하에서 무수 디클로로메탄 325mL를 가하여 용해시킨 후 0°C로 냉각 및 교반 하였다. 여기에 보른트리플루오라이드 디에틸 이서레이트 4mL(32.5mmol)을 10분간 천천히 가하고 실온으로 승온한 후 12시간 동안 교반한다. 반응이 종료되면 중탄산나트륨 수용액을 0°C에서 천천히 가한후 30분간 교반한다. 반응액을 디클로로메탄/증류수로 추출한 추출액을 마그네슘설페이트로 건조, 여과하고 여과액을 감압 농축하였다. 생성물을 n-헥산/디클로로메탄(9:1 부피비)으로 실리카 겔 컬럼 크로마토 그래피로 정제하여 목적 화합물인 중간체 M-27을 15.4g(수율 63%)을 수득 하였다.

[0912] LC-Mass (이론치: 376.11g/mol, 측정치: M+1 = 377.23g/mol)

[0913]

[0914] 중간체 M-28의 합성

[0915] [반응식 28]



[0916]

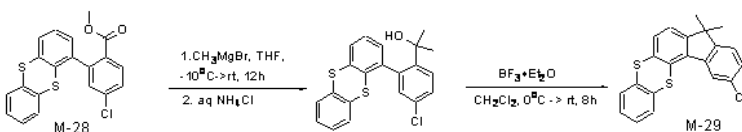
[0917] 티안스렌-1-보로닉 산(tianthrene-1-boronic acid) 20g(76.88mmol), 메틸-2-브로모-4-클로로벤조에이트 21.1g(84.57mmol) 및 테트라키스트리페닐포스핀팔라듐 0.89g(0.769mmol)을 플라스크에 넣고 질소 분위기 하에 테트라하이드로푸란 257mL에 용해 시킨 후 포타슘 카보네이트 17g(115.3mmol)을 녹인 수용액 128ml를 첨가 시킨 후 8시간 동안 70°C에서 환류 교반 하였다. 반응 종료 후 에틸아세테이트로 추출 한 후 추출액을 마그네슘설페이트로 건조, 여과하고 여과액을 감압 농축하였다. 생성물을 n-헥산/에틸아세테이트(9:1 부피비)으로 실리카 겔 컬럼 크로마토 그래피로 정제하여 목적 화합물인 중간체 M-28을 27.2g(수율 92%)을 수득 하였다.

[0918] LC-Mass (이론치: 384.00g/mol, 측정치: M+1 = 385.21g/mol)

[0919]

[0920] 중간체 M-29의 합성

[0921] [반응식 29]



[0922]

[0923] 진공 하에서 가열 건조한 3구 둥근 바닥 플라스크에 질소 분위기 하에서 중간체 M-28 25g(64.95mmol)을 넣고 무수 테트라하이드로푸란 325mL를 가하여 용해시킨 후 -10°C로 냉각 및 교반 하였다.

[0924] 여기에 3.0M 메틸마그네슘브로마이드 54mL(디에틸에테르 내, 162.4mmol)을 30분간 천천히 가한다. 반응액을 상

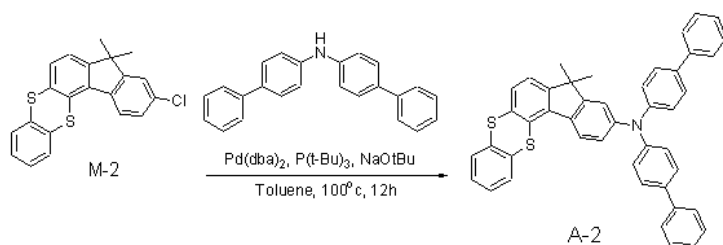
온으로 승온하고 질소 분위기 하에 12시간 교반 하였다. 반응액을 0℃로 냉각한 후 여기에 암모늄클로라이드 10.4g (194.85mmol)을 증류수 100mL에 녹인 수용액을 천천히 가한다. 반응액을 증류수와 디에틸에테르로 추출하고 유기층 용액을 마그네슘설페이트로 건조, 여과하고 여과액을 감압 농축하였다. 건조된 잔사를 3구 둥근 바닥 플라스크에 넣은 후 질소분위기 하에서 무수 디클로로메탄 325mL를 가하여 용해시킨 후 0℃로 냉각 및 교반 하였다. 여기에 보른트리플루오라이드 디에틸 이써레이트 4mL (32.5mmol)을 10분간 천천히 가하고 실온으로 승온한 후 12시간 동안 교반한다. 반응이 종료되면 중탄산나트륨 수용액을 0℃에서 천천히 가한후 30분간 교반한다. 반응액을 디클로로메탄/증류수로 추출한 추출액을 마그네슘설페이트로 건조, 여과하고 여과액을 감압 농축하였다. 생성물을 n-헥산/디클로로메탄(9:1 부피비)으로 실리카 겔 컬럼 크로마토 그래피로 정제하여 목적 화합물인 중간체 M-29를 16.7g(수율 70%)을 수득 하였다.

[0925] LC-Mass (이론치: 366.03g/mol, 측정치: M+1 = 367.14g/mol)

[0926]

[0927] **실시예 1: 화학식 A-2로 표시되는 화합물의 제조**

[0928] [반응식 28]



[0929]

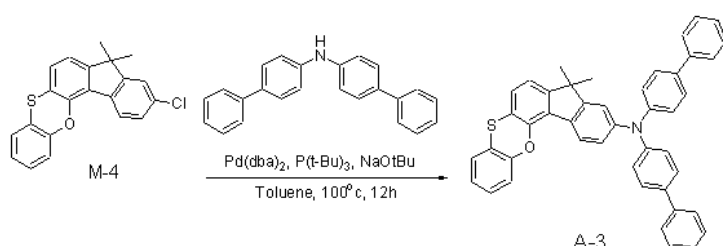
[0930] 중간체 M-2 11.2g(30.59mmol)와 비스-바이페닐-4-일-아민(bis-biphenyl-4-yl-amine) 9.8g(30.59mmol), 소듐 t-부톡사이드 3.8g(39.8mmol)를 둥근 바닥 플라스크에 넣고 톨루엔 200mL를 가한 후 트리-tert-부틸포스핀 0.19g(0.92mmol)과 Pd(dba)₂ 0.18g(0.31mmol)을 넣고 질소 분위기 하에서 12시간 동안 100℃에서 교반 시킨다. 반응 종료 후 톨루엔과 증류수로 추출 후 유기층을 마그네슘설페이트로 건조, 여과하고 여과액을 감압 농축하였다. 생성물을 n-헥산/디클로로메탄(7:3 부피비)으로 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 A-2를 18.1g(수율 91%)을 수득 하였다.

[0931] LC-Mass (이론치: 651.21g/mol, 측정치: M+1 = 652.32g/mol)

[0932]

[0933] **실시예 2: 화학식 A-3으로 표시되는 화합물의 제조**

[0934] [반응식 29]



[0935]

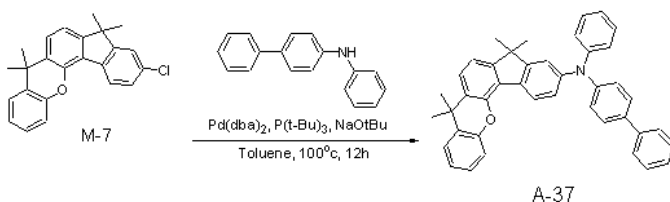
[0936] 중간체 M-4 10.7g(30.59mmol)와 비스-바이페닐-4-일-아민(bis-biphenyl-4-yl-amine) 9.8g(30.59mmol), 소듐 t-부톡사이드 3.8g(39.8mmol)를 둥근 바닥 플라스크에 넣고 톨루엔 200mL를 가한 후 트리-tert-부틸포스핀 0.19g(0.92mmol)과 Pd(dba)₂ 0.18g(0.31mmol)을 넣고 질소 분위기 하에서 12시간 동안 100℃에서 교반 시킨다. 반응 종료 후 톨루엔과 증류수로 추출 후 유기층을 마그네슘설페이트로 건조, 여과하고 여과액을 감압 농축하였다. 생성물을 n-헥산/디클로로메탄(7:3 부피비)으로 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 A-3를 18.1g(수율 93%)을 수득 하였다.

[0937] LC-Mass (이론치: 635.23g/mol, 측정치: M+1 = 636.51g/mol)

[0938]

[0939] **실시예 3: 화학식 A-37로 표시되는 화합물의 제조**

[0940] [반응식 30]



[0941]

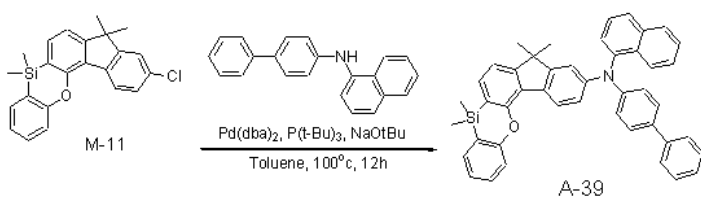
[0942] 중간체 M-7 11.04g(30.59mmol)과 바이페닐-4-일-페닐-아민(biphenyl-4-yl-phenyl-amine) 7.5g (30.59mmol), 소듐 t-부톡사이드 3.8g(39.8mmol)를 둥근 바닥 플라스크에 넣고 톨루엔 200mL를 가한 후 트리-tert-부틸포스핀 0.19g(0.92mmol)과 Pd(dba)₂ 0.18g(0.31mmol)을 넣고 질소 분위기 하에서 12시간 동안 100°C에서 교반 시킨다. 반응 종료 후 톨루엔과 증류수로 추출 후 유기층을 마그네슘설페이트로 건조, 여과하고 여과액을 감압 농축하였다. 생성물을 n-헥산/디클로로메탄(7:3 부피비)으로 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 A-37을 15.7g(수율 90%)을 수득 하였다.

[0943] LC-Mass (이론치: 569.27g/mol, 측정치: M+1 = 570.36g/mol)

[0944]

[0945] **실시예 4: 화학식 A-39로 표시되는 화합물의 제조**

[0946] [반응식 31]



[0947]

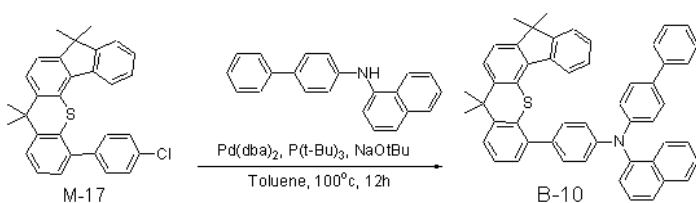
[0948] 중간체 M-11 11.5g(30.59mmol)과 바이페닐-4-일-나프탈렌-1-일-아민(biphenyl-4-yl-naphthalen-1-yl-amine) 9.0g (30.59mmol), 소듐 t-부톡사이드 3.8g(39.8mmol)를 둥근 바닥 플라스크에 넣고 톨루엔 200mL를 가한 후 트리-tert-부틸포스핀 0.19g(0.92mmol)과 Pd(dba)₂ 0.18g(0.31mmol)을 넣고 질소 분위기 하에서 12시간 동안 100°C에서 교반 시킨다. 반응 종료 후 톨루엔과 증류수로 추출 후 유기층을 마그네슘설페이트로 건조, 여과하고 여과액을 감압 농축하였다. 생성물을 n-헥산/디클로로메탄(7:3 부피비)으로 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 A-39를 17.9g(수율 92%)을 수득 하였다.

[0949] LC-Mass (이론치: 635.26g/mol, 측정치: M+1 = 636.31g/mol)

[0950]

[0951] **실시예 5: 화학식 B-10으로 표시되는 화합물의 제조**

[0952] [반응식 32]



[0953]

[0954]

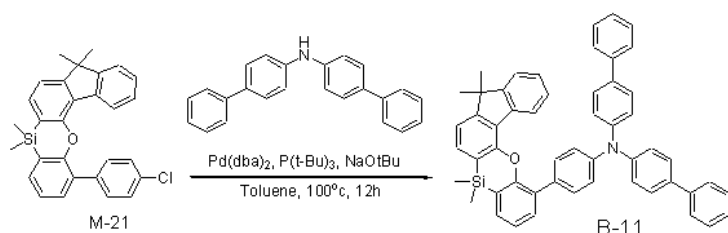
[0955] 중간체 M-17 13.9g(30.59mmol)과 바이페닐-4-일-나프탈렌-1-일-아민(biphenyl-4-yl-naphthalen-1-yl-amine) 9.0g (30.59mmol), 소듐 t-부톡사이드 3.8g(39.8mmol)를 둥근 바닥 플라스크에 넣고 톨루엔 200mL를 가한 후 트리-tert-부틸포스핀 0.19g(0.92mmol)과 Pd(dba)₂0.18g(0.31mmol)을 넣고 질소 분위기 하에서 12시간 동안 100°C에서 교반 시킨다. 반응 종료 후 톨루엔과 증류수로 추출 후 유기층을 마그네슘설페이트로 건조, 여과하고 여과액을 감압 농축하였다. 생성물을 n-헥산/디클로로메탄(7:3 부피비)으로 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 B-10를 19.4g(수율 89%)을 수득 하였다.

[0956] LC-Mass (이론치: 711.30g/mol, 측정치: M+1 = 712.28g/mol)

[0957]

[0958] **실시예 6: 화학식 B-11로 표시되는 화합물의 제조**

[0959] [반응식 33]



[0960]

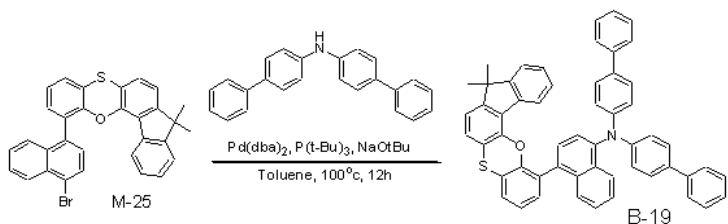
[0961] 중간체 M-21 13.9g(30.59mmol)와 비스-바이페닐-4-일-아민(bis-biphenyl-4-yl-amine) 9.8g(30.59mmol), 소듐 t-부톡사이드 3.8g(39.8mmol)를 둥근 바닥 플라스크에 넣고 톨루엔 200mL를 가한 후 트리-tert-부틸포스핀 0.19g(0.92mmol)과 Pd(dba)₂0.18g(0.31mmol)을 넣고 질소 분위기 하에서 12시간 동안 100°C에서 교반 시킨다. 반응 종료 후 톨루엔과 증류수로 추출 후 유기층을 마그네슘설페이트로 건조, 여과하고 여과액을 감압 농축하였다. 생성물을 n-헥산/디클로로메탄(7:3 부피비)으로 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 B-11을 20.3g(수율 90%)을 수득 하였다.

[0962] LC-Mass (이론치: 737.31g/mol, 측정치: M+1 = 738.28g/mol)

[0963]

[0964] **실시예 7: 화학식 B-19로 표시되는 화합물의 제조**

[0965] [반응식 34]



[0966]

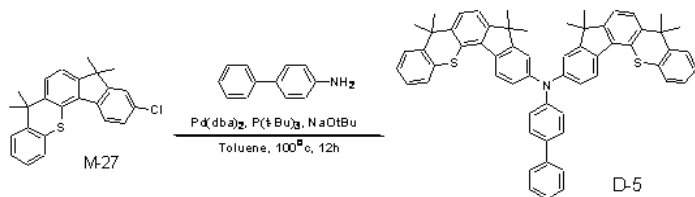
[0967] 중간체 M-25 16g(30.59mmol)와 비스-바이페닐-4-일-아민(bis-biphenyl-4-yl-amine) 9.8g(30.59mmol), 소듐 t-부톡사이드 3.8g(39.8mmol)를 둥근 바닥 플라스크에 넣고 톨루엔 200mL를 가한 후 트리-tert-부틸포스핀 0.19g(0.92mmol)과 Pd(dba)₂0.18g(0.31mmol)을 넣고 질소 분위기 하에서 12시간 동안 100°C에서 교반 시킨다. 반응 종료 후 톨루엔과 증류수로 추출 후 유기층을 마그네슘설페이트로 건조, 여과하고 여과액을 감압 농축하였다. 생성물을 n-헥산/디클로로메탄(7:3 부피비)으로 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 B-19를 20.5g(수율 88%)을 수득 하였다.

[0968] LC-Mass (이론치: 761.28g/mol, 측정치: M+1 = 762.31g/mol)

[0969]

실시예 8: 화학식 D-5로 표시되는 화합물의 제조

[반응식 35]

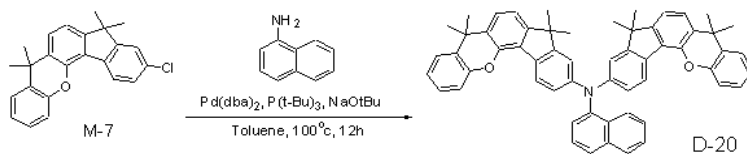


중간체 M-27 11.5g(30.59mmol)와 4-아미노비페닐 2.6g(15.3mmol), 소듐 t-부톡사이드 3.8g(39.8mmol)를 둥근 바닥 플라스크에 넣고 톨루엔 200mL를 가한 후 트리-tert-부틸포스핀 0.19g(0.92mmol)과 Pd(dba)₂0.18g(0.31mmol)을 넣고 질소 분위기 하에서 12시간 동안 100°C에서 교반 시킨다. 반응 종료 후 톨루엔과 증류수로 추출 후 유기층을 마그네슘설페이트로 건조, 여과하고 여과액을 감압 농축하였다. 생성물을 n-헥산/디클로로메탄(7:3 부피비)으로 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 D-5를 11.2g(수율 86%)을 수득 하였다.

LC-Mass (이론치: 849.35g/mol, 측정치: M+1 = 850.16g/mol)

실시예 9: 화학식 D-20로 표시되는 화합물의 제조

[반응식 36]

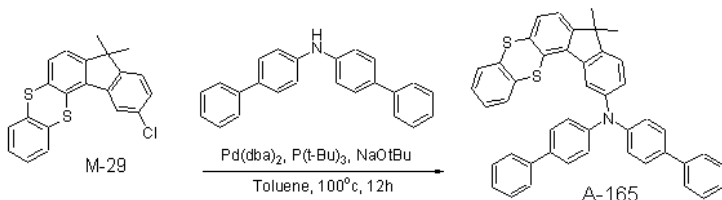


중간체 M-7 11.04g(30.59mmol)와 1-아미노나프탈렌 2.2g(15.3mmol), 소듐 t-부톡사이드 3.8g(39.8mmol)를 둥근 바닥 플라스크에 넣고 톨루엔 200mL를 가한 후 트리-tert-부틸포스핀 0.19g(0.92mmol)과 Pd(dba)₂0.18g(0.31mmol)을 넣고 질소 분위기 하에서 12시간 동안 100°C에서 교반 시킨다. 반응 종료 후 톨루엔과 증류수로 추출 후 유기층을 마그네슘설페이트로 건조, 여과하고 여과액을 감압 농축하였다. 생성물을 n-헥산/디클로로메탄(7:3 부피비)으로 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 D-20을 11g(수율 90%)을 수득 하였다.

LC-Mass (이론치: 791.38g/mol, 측정치: M+1 = 792.42g/mol)

실시예 10: 화학식 A-165로 표시되는 화합물의 제조

[반응식 37]



중간체 M-29 11.2g(30.59mmol)와 비스-바이페닐-4-일-아민(bis-biphenyl-4-yl-amine) 9.8g(30.59mmol), 소듐 t-부톡사이드 3.8g(39.8mmol)를 둥근 바닥 플라스크에 넣고 톨루엔 200mL를 가한 후 트리-tert-부틸포스핀 0.19g(0.92mmol)과 Pd(dba)₂0.18g(0.31mmol)을 넣고 질소 분위기 하에서 12시간 동안 100°C에서 교반 시킨다. 반응 종료 후 톨루엔과 증류수로 추출 후 유기층을 마그네슘설페이트로 건조, 여과하고 여과액을 감압 농축하였다. 생성물을 n-헥산/디클로로메탄(7:3 부피비)으로 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인

A-165를 18.5g(수율 93%)을 수득 하였다.

[0985] LC-Mass (이론치: 651.21g/mol, 측정치: M+1 = 652.32g/mol)

[0986] **(유기발광소자의 제조)**

[0987] **실시예 11**

[0988] ITO (Indium tin oxide)가 1500Å의 두께가 박막 코팅된 유리 기판을 증류수 초음파로 세척하였다. 증류수 세척이 끝나면 이소프로필 알코올, 아세톤, 메탄올 등의 용제로 초음파 세척을 하고 건조시킨 후 플라즈마 세정기로 이송 시킨 다음 산소 플라즈마를 이용하여 상기 기판을 5분간 세정 한 후 진공 증착기로 기판을 이송하였다. 이렇게 준비된 ITO 투명 전극을 양극으로 사용하여 ITO 기판 상부에 4,4'-bis[N-[4-{N,N-bis(3-methylphenyl)amino}-phenyl]-N-phenylamino]biphenyl (DNTPD)를 진공 증착하여 600Å 두께의 정공 주입층을 형성하였다. 이어서 실시예 1에서 제조된 화합물을 사용하여 진공 증착으로 300Å 두께의 정공 수송층을 형성하였다. 상기 정공 수송층 상부에 9,10-디-(2-나프틸)안트라센(9,10-di-(2-naphthyl)anthracene, ADN)을 호스트로 사용하고 도판트로 2,5,8,11-테트라(터셔리-부틸)페릴렌(2,5,8,11-tetra(tert-butyl)perylene, TBPe)를 3중량%로 도핑하여 진공 증착으로 250Å 두께의 발광층을 형성하였다.

[0989] 그 후 상기 발광층 상부에 Alq3를 진공 증착하여 250Å 두께의 전자수송층을 형성하였다. 상기 전자수송층 상부에 LiF 10Å과 Al 1000Å을 순차적으로 진공 증착하여 음극을 형성함으로써 유기발광소자를 제조하였다.

[0990] 상기 유기발광소자는 5층의 유기박막층을 가지는 구조로 되어 있으며, 구체적으로

[0991] Al(1000Å)/LiF(10Å)/Alq3(250Å)/EML[ADN:TBPe=97:3](250 Å)/HTL(300Å)/DNTPD (600Å)/ITO(1500Å)의 구조로 제작하였다.

[0992]

[0993] **실시예 12**

[0994] 상기 실시예 10에서, 실시예 1 대신 실시예 2를 사용한 점을 제외하고는 동일한 방법으로 유기발광소자를 제조하였다.

[0995]

[0996] **실시예 13**

[0997] 상기 실시예 10에서, 실시예 1 대신 실시예 3을 사용한 점을 제외하고는 동일한 방법으로 유기발광소자를 제조하였다.

[0998]

[0999] **실시예 14**

[1000] 상기 실시예 10에서, 실시예 1 대신 실시예 4를 사용한 점을 제외하고는 동일한 방법으로 유기발광소자를 제조하였다.

[1001]

[1002] **실시예 15**

[1003] 상기 실시예 10에서, 실시예 1 대신 실시예 5를 사용한 점을 제외하고는 동일한 방법으로 유기발광소자를 제조하였다.

[1004]

[1005] **실시예 16**

[1006] 상기 실시예 10에서, 실시예 1 대신 실시예 6을 사용한 점을 제외하고는 동일한 방법으로 유기발광소자를 제조하였다.

[1007]

[1008] **실시예 17**

[1009] 상기 실시예 10에서, 실시예 1 대신 실시예 7을 사용한 점을 제외하고는 동일한 방법으로 유기발광소자를 제조하였다.

[1010]

[1011] **실시예 18**

[1012] 상기 실시예 10에서, 실시예 1 대신 실시예 8을 사용한 점을 제외하고는 동일한 방법으로 유기발광소자를 제조하였다.

[1013]

[1014] **실시예 19**

[1015] 상기 실시예 10에서, 실시예 1 대신 실시예 9를 사용한 점을 제외하고는 동일한 방법으로 유기발광소자를 제조하였다.

[1016]

[1017] **비교예 1**

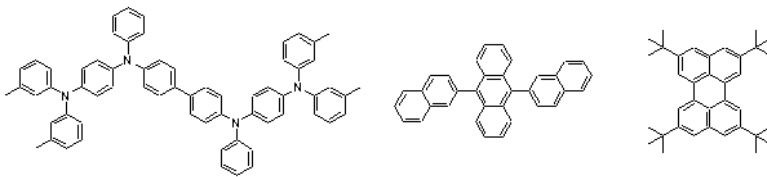
[1018] 상기 실시예 11에서, 실시예 1 대신 NPB를 사용한 점을 제외하고는 동일한 방법으로 유기발광소자를 제조하였다. 상기 NPB의 구조는 하기에 기재되어 있다.

[1019]

[1020] 상기 유기발광소자 제작에 사용된 DNTPD, ADN, TBPe, NPB, Alq3의 구조는 아래와 같다.

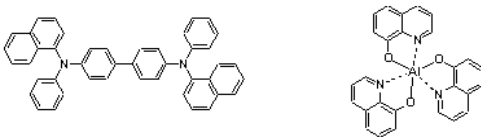
[1021]

[1022] [DNTPD] [ADN] [TBPe]



[1023]

[1024] [NPB] [Alq3]



[1025]

[1026]

[1027] **(유기발광소자의 성능 측정)**

[1028] 상기 실시예 11 내지 19과 비교예 1에서 제조된 각각의 유기발광소자에 대하여 전압에 따른 전류밀도 변화, 휘도 변화 및 발광효율을 측정하였다. 구체적인 측정방법은 하기와 같고, 그 결과는 하기 표 1에 나타내었다

[1029]

[1030] (1) 전압변화에 따른 전류밀도의 변화 측정

[1031] 제조된 유기발광소자에 대해, 전압을 0 V 부터 10 V까지 상승시키면서 전류-전압계(Keithley 2400)를 이용하여 단위소자에 흐르는 전류값을 측정하고, 측정된 전류값을 면적으로 나누어 결과를 얻었다.

[1032]

[1033] (2) 전압변화에 따른 휘도변화 측정

[1034] 제조된 유기발광소자에 대해, 전압을 0 V 부터 10 V까지 상승시키면서 휘도계(Minolta Cs-1000A)를 이용하여 그

때의 휘도를 측정하여 결과를 얻었다.

[1035]

[1036]

(3) 발광효율 측정

[1037]

상기(1) 및 (2)로부터 측정된 휘도와 전류밀도 및 전압을 이용하여 동일 전류밀도(10 mA/cm²)의 전류 효율(cd/A) 을 계산하였다.

[1038]

표 1

[1039]

소 자	정공 수송층에 사용한 화합물	전압(V)	색(EL color)	효율(cd/A)	반감 수명(h) at 1000cd/m ²
실시예 11	A-2	6.3	Blue	6.3	1,610
실시예 12	A-3	6.2	Blue	6.5	1,720
실시예 13	A-37	6.7	Blue	6.3	1,590
실시예 14	A-39	6.5	Blue	6.4	1,690
실시예 15	B-10	6.8	Blue	5.9	1,390
실시예 16	B-11	6.8	Blue	6.1	1,460
실시예 17	B-19	6.7	Blue	6.1	1,430
실시예 18	D-5	6.7	Blue	6.2	1,280
실시예 19	D-20	6.6	Blue	6.4	1,310
비교예 1	NPB	7.1	Blue	4.9	1,250

[1040]

전류밀도: 10mA/cm²

[1041]

[1042]

상기 표 1의 결과에 따르면 상기 실시예 11 내지 19은 유기발광소자용 정공수송층으로 사용될 때, 유기발광소자의 구동전압을 낮추고, 휘도와 효율을 향상시킴을 알 수 있다.

[1043]

또한, 상기 실시예 11 내지 실시예 19의 반감 수명은 상기 비교예 1 보다 크게 향상되었으며, 특히 상기 실시예 12의 반감수명은 1,720 시간(h)으로 비교예 1의 반감수명인 1,250 시간보다 약 37% 이상 향상된 것을 알 수 있다.

[1044]

실제 소자의 상업화 측면에서 소자의 수명은 제품화의 가장 큰 문제 중 하나임을 고려할 때 상기 실시예들의 결과는 소자를 제품화하여 상업화하기에 충분한 것으로 판단된다.

[1045]

[1046]

본 발명은 상기 실시예들에 한정되는 것이 아니라 서로 다른 다양한 형태로 제조될 수 있으며, 본 발명이 속하는 기술분야에서 통상의 지식을 가진 자는 본 발명의 기술적 사상이나 필수적인 특징을 변경하지 않고서 다른 구체적인 형태로 실시될 수 있다는 것을 이해할 수 있을 것이다. 그러므로 이상에서 기술한 실시예들은 모든 면에서 예시적인 것이며 한정적이 아닌 것으로 이해해야만 한다.

[1047]

[1048]

부호의 설명

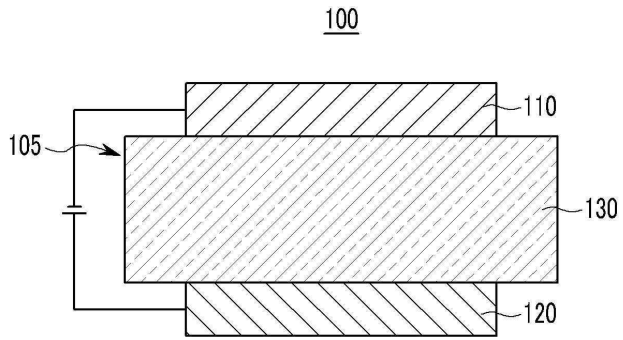
[1049]

- 100 : 유기발광소자 110 : 음극
- 120 : 양극 105 : 유기박막층
- 130 : 발광층 140 : 정공 수송층
- 150 : 전자수송층 160 : 전자주입층

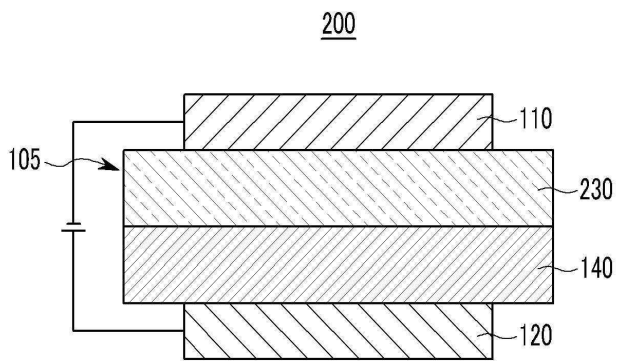
170 : 정공주입층 230 : 발광층 + 전자수송층

도면

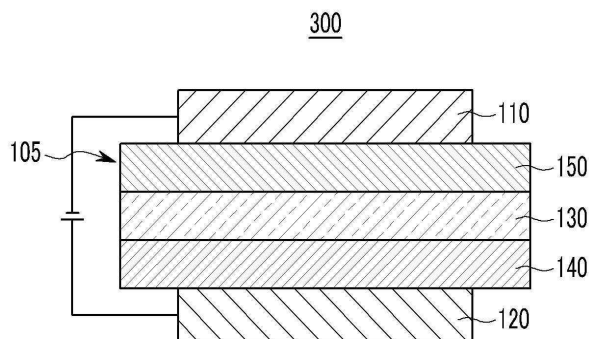
도면1



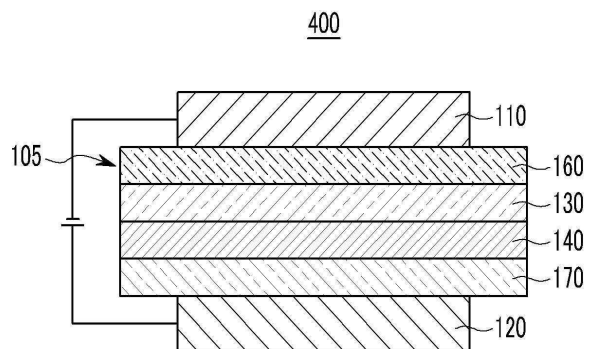
도면2



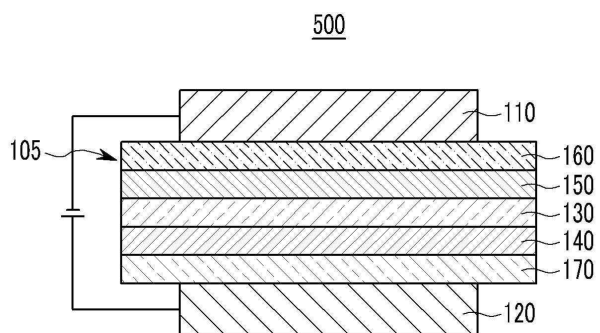
도면3



도면4



도면5



专利名称(译)	标题：用于有机光电子器件的化合物，包括其的有机发光器件，以及包含有机发光器件的表		
公开(公告)号	KR101537005B1	公开(公告)日	2015-07-20
申请号	KR1020120109449	申请日	2012-09-28
[标]申请(专利权)人(译)	第一毛织株式会社		
申请(专利权)人(译)	第一毛织有限公司		
当前申请(专利权)人(译)	第一毛织有限公司		
[标]发明人	RYU DONG WAN 류동완 LEE NAM HEON 이남헌 LEE HANILL 이한일 JUNG SUNG HYUN 정성현 JO YOUNGKYOUNG 조영경 CHAE MI YOUNG 채미영 HUH DAL HO 허달호 HONG JIN SEOK 홍진석		
发明人	류동완 이남헌 이한일 정성현 조영경 채미영 허달호 홍진석		
IPC分类号	C09K11/06 H01L51/50		
CPC分类号	H01L51/0074 C07D311/78 C07D319/24 C07D327/08 C07D335/12 C07D339/08 C07D405/04 C07D413/04 C07D417/04 C07F7/0816 C09K11/06 C09K2211/1007 C09K2211/1011 C09K2211/1014 C09K2211/1029 C09K2211/1044 C09K2211/1059 C09K2211/1088 C09K2211/1092 C09K2211/1096 H01L51/0055 H01L51/006 H01L51/0061 H01L51/0069 H01L51/0071 H01L51/0072 H01L51/0073 H01L51/0081 H01L51/0094 H01L51/5012 H01L51/5056 H01L51/5072 H01L51/5088 H01L51/5221 H01L2251/308 Y02E10/549		
其他公开文献	KR1020140042554A		
外部链接	Espacenet		

摘要(译)

本发明涉及用于有机光电子器件的化合物，包括该化合物的有机发光器件，以及包括该有机发光器件的显示器件。由此可以制造即使在低驱动电压下也由于稳定性和高发光效率而具有优异寿命特性的有机发光器件。 [化学式1] [式2]

100

