



(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 공개특허공보(A)

(11) 공개번호 10-2016-0078765
(43) 공개일자 2016년07월05일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)
C09K 11/06 (2006.01) C07D 209/82 (2006.01)
H01L 51/50 (2006.01)

(21) 출원번호 10-2014-0188908
(22) 출원일자 2014년12월24일
심사청구일자 없음

(71) 출원인
솔브레인 주식회사
경기도 성남시 분당구 판교로255번길 34 (삼평동)

(72) 발명자
박재교
경기도 용인시 기흥구 동백동 599
송용성
세종특별자치시 한솔동 누리로 27, 611동 2604호
(뒷면에 계속)

(74) 대리인
팬코리아특허법인

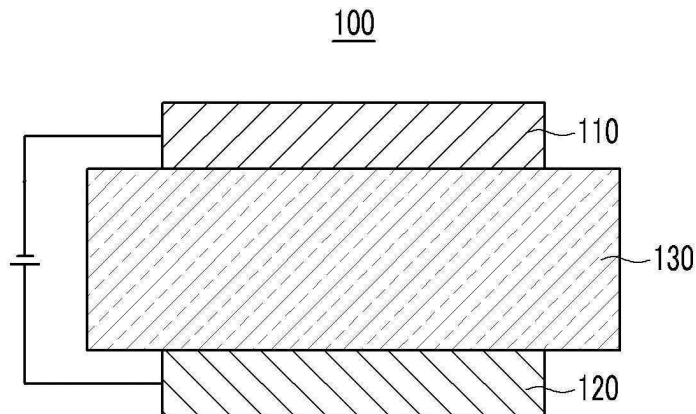
전체 청구항 수 : 총 14 항

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

(57) 요약

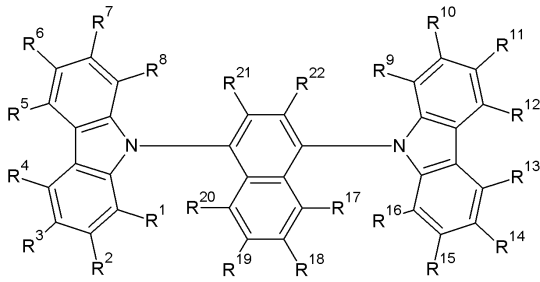
유기발광소자용 화합물, 이를 포함하는 유기발광소자 및 상기 유기발광소자를 포함하는 표시장치에 관한 것으로,
(뒷면에 계속)

대표도 - 도1



하기 화학식 1로 표시되는 유기발광소자용 화합물을 제공한다.

[화학식 1]



(상기 화학식 1에서, 각 치환기는 명세서에 정의된 바와 같다.)

(72) 발명자

김진희

경기도 용인시 기흥구 흥덕1로79번길 37, 502동
1402호 (영덕동, 흥덕마을5
단지호반베르디움아파트)

신환승

경기도 부천시 소사구 부광로36번길 37, 101동 40
4호 (괴안동, 트윈파크아파트)

김정선

경기도 용인시 기흥구 금화로12번길 13-6 (상갈동,
예은주택)

김현진

경기 용인시 기흥구 관곡로77번길 3-24, 102호 (구
갈동, 스톤빌)

장민정

경기도 용인시 기흥구 동백동 599

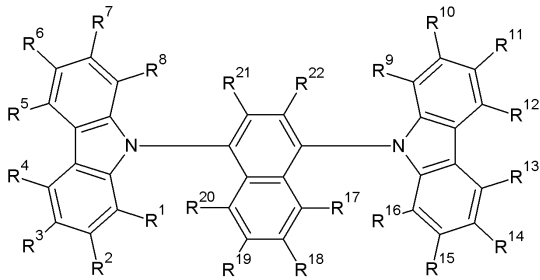
명세서

청구범위

청구항 1

하기 화학식 1로 표시되는 유기발광소자용 화합물:

[화학식 1]



상기 화학식 1에서,

R¹ 내지 R¹⁶은 각각 독립적으로 수소원자, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C20 아릴기 또는 치환 또는 비치환된 아민기이고,

R¹⁷ 내지 R²²는 각각 독립적으로 수소원자 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 알킬기이고,

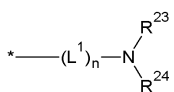
단, R¹ 내지 R⁴ 및 R⁹ 내지 R¹² 중 적어도 하나는 치환된 C6 내지 C20 아릴기 또는 치환 또는 비치환된 아민기이다.

청구항 2

제1항에서,

상기 R¹ 내지 R⁴ 및 R⁹ 내지 R¹² 중 적어도 하나는 하기 화학식 2로 표시되는 유기발광소자용 화합물:

[화학식 2]



상기 화학식 2에서,

R²³ 및 R²⁴는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 C6 내지 C20 아릴기 또는 치환 또는 비치환된 플루오레닐기이고,

L¹은 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 알킬렌기 또는 치환 또는 비치환된 C6 내지 C20 아릴렌기이고,

n은 0 또는 1의 정수이다.

청구항 3

제1항에서,

상기 R¹ 내지 R⁴ 중 적어도 하나는 치환된 C6 내지 C20 아릴기 또는 치환 또는 비치환된 아민기이고,

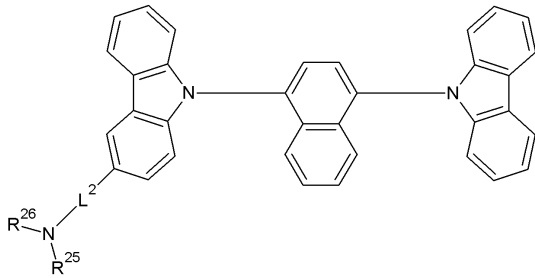
상기 R⁹ 내지 R¹² 중 적어도 하나는 치환된 C6 내지 C20 아릴기 또는 치환 또는 비치환된 아민기인 유기발광소자용 화합물.

청구항 4

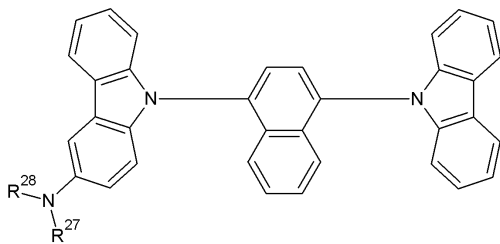
제1항에서,

상기 화학식 1로 표시되는 유기발광소자용 화합물은 하기 화학식 3 또는 화학식 4로 표시되는 유기발광소자용 화합물:

[화학식 3]



[화학식 4]



상기 화학식 3 및 화학식 4에서,

R²⁵ 내지 R²⁸은 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 C6 내지 C20 아릴기 또는 치환 또는 비치환된 플루오레닐기 이고,

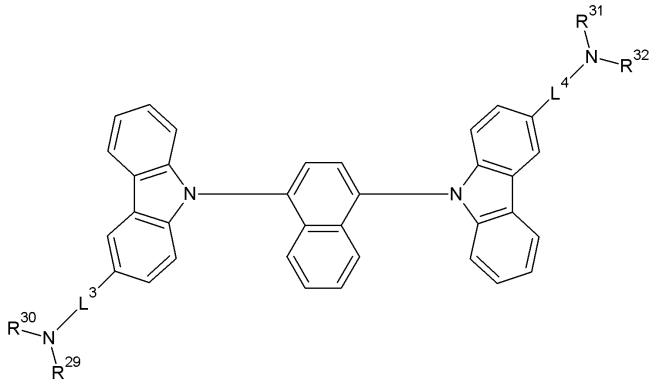
L²는 치환 또는 비치환된 C6 내지 C20 아릴렌기이다.

청구항 5

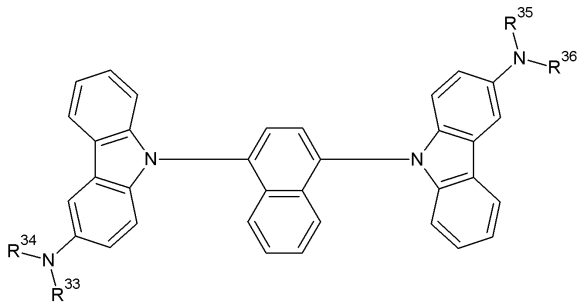
제1항에 있어서,

상기 화학식 1로 표시되는 유기발광소자용 화합물은 하기 화학식 5 또는 화학식 6으로 표시되는 유기발광소자용 화합물:

[화학식 5]



[화학식 6]



상기 화학식 5 및 화학식 6에서,

R^{29} 내지 R^{36} 은 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 C6 내지 C20 아릴기 또는 치환 또는 비치환된 플루오레닐기 이고,

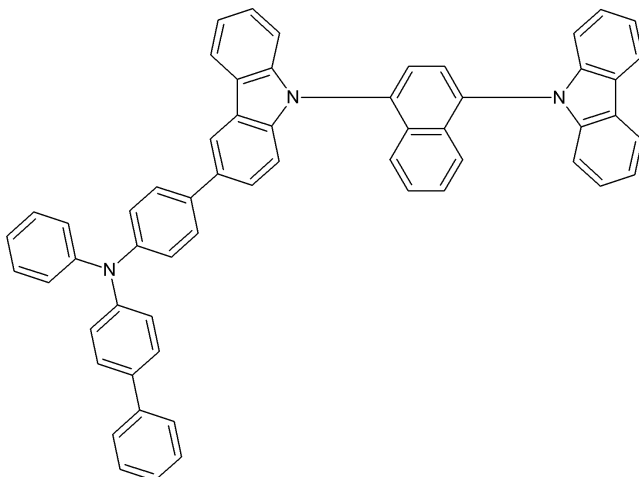
L^3 및 L^4 는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 C6 내지 C20 아릴렌기이다.

청구항 6

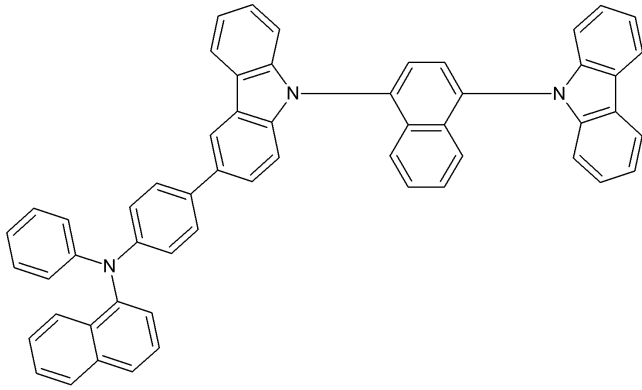
제1항에서,

상기 화학식 1로 표시되는 유기발광소자용 화합물은 하기 화학식 7 내지 화학식 10 중 어느 하나로 표시되는 유기발광소자용 화합물.

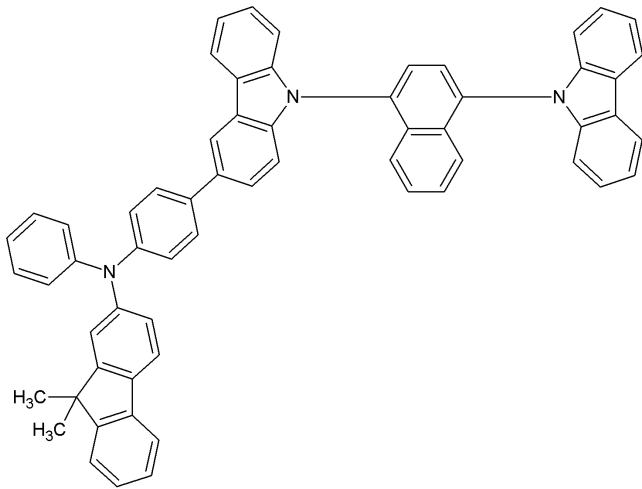
[화학식 7]



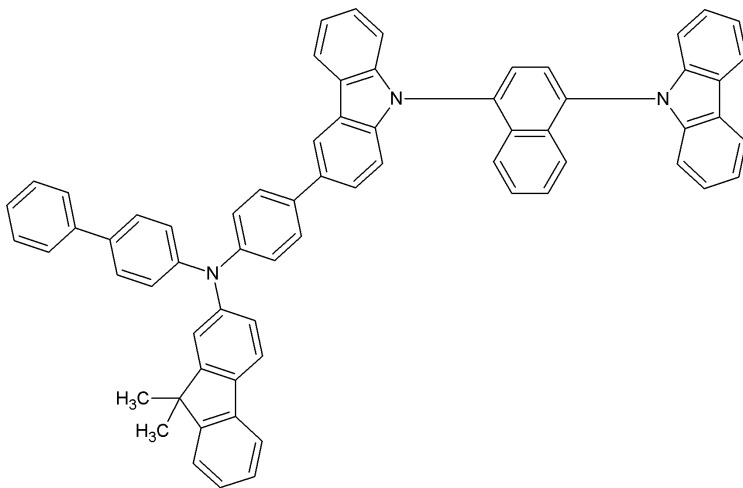
[화학식 8]



[화학식 9]



[화학식 10]

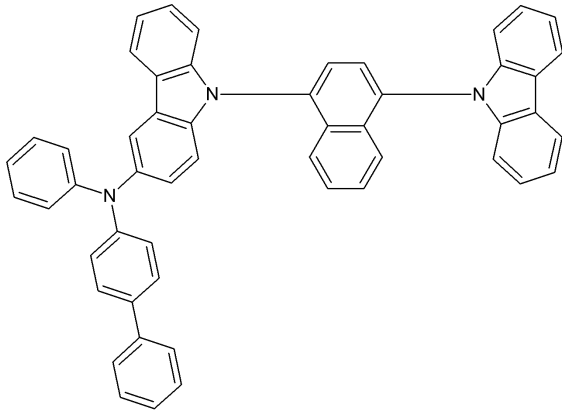


청구항 7

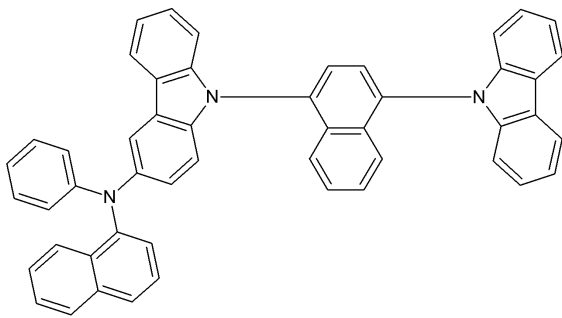
제1항에서,

상기 화학식 1로 표시되는 유기발광소자용 화합물은 하기 화학식 11 내지 화학식 14 중 어느 하나로 표시되는 유기발광소자용 화합물.

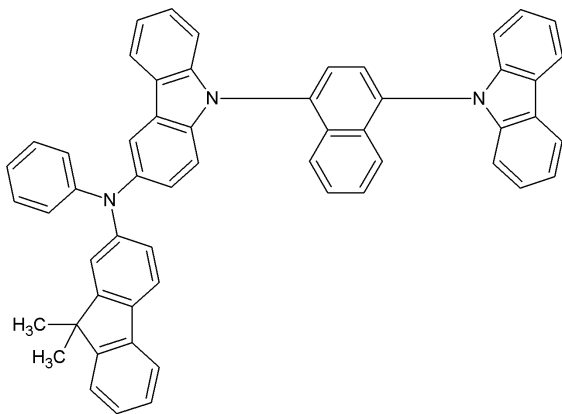
[화학식 11]



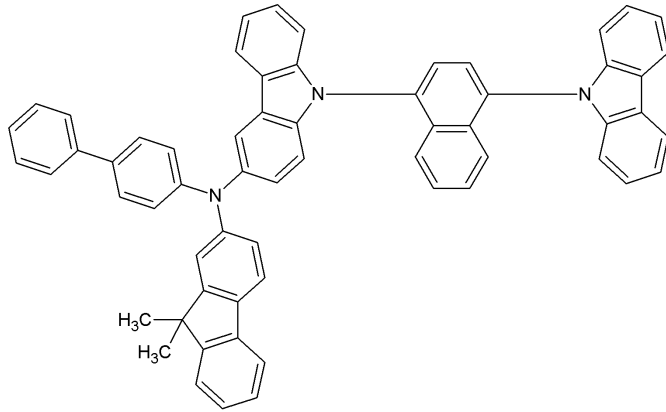
[화학식 12]



[화학식 13]



[화학식 14]

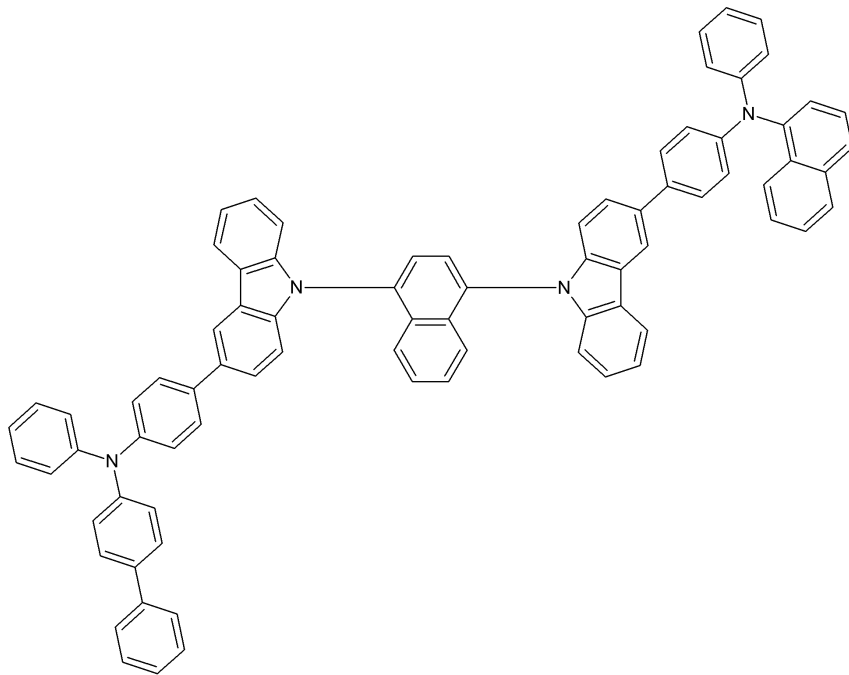


청구항 8

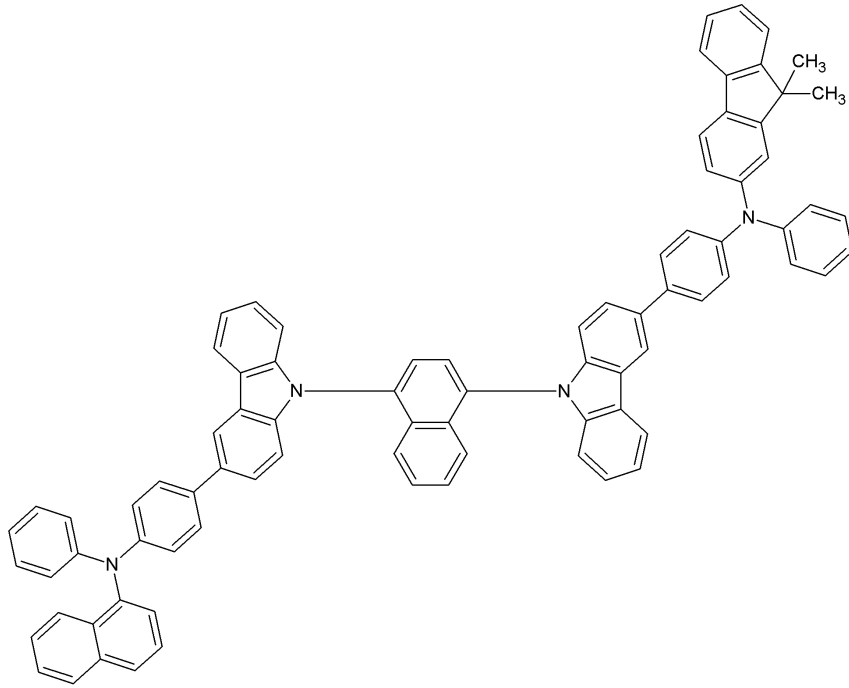
제1항에서,

상기 화학식 1로 표시되는 유기발광소자용 화합물은 하기 화학식 15 또는 화학식 16으로 표시되는 유기발광소자용 화합물.

[화학식 15]



[화학식 16]

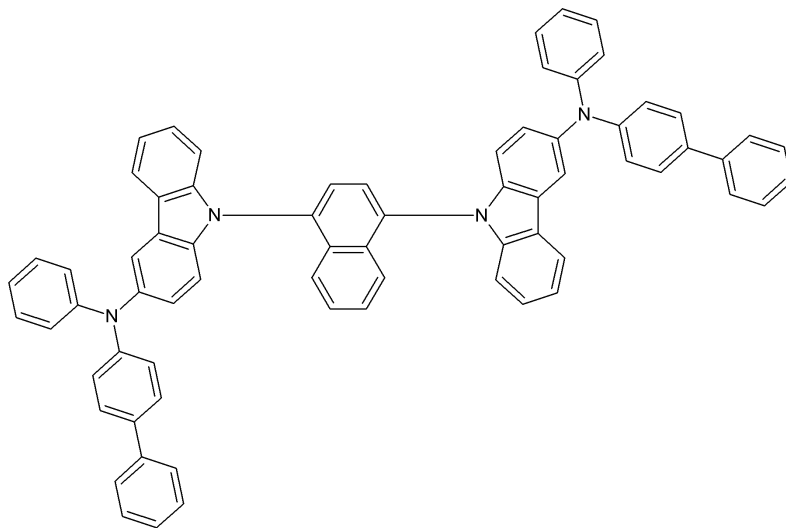


청구항 9

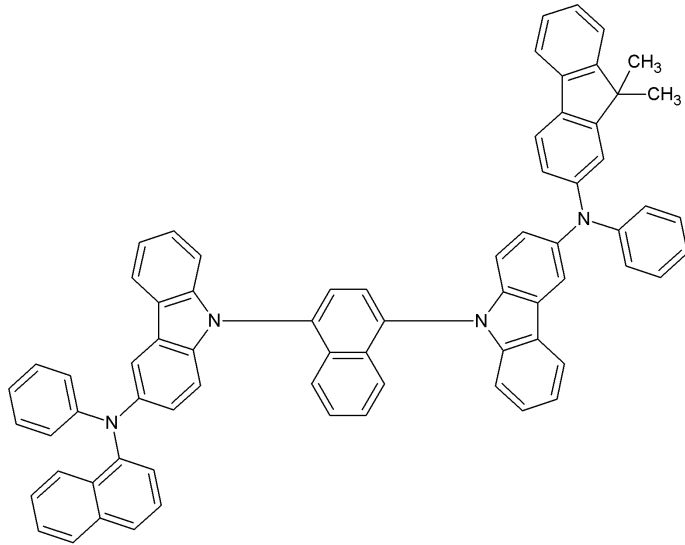
제1항에서,

상기 화학식 1로 표시되는 유기발광소자용 화합물은 하기 화학식 17 또는 화학식 18로 표시되는 유기발광소자용 화합물.

[화학식 17]



[화학식 18]



청구항 10

양극, 음극 및

상기 양극과 음극 사이에 개재되는 한 층 이상의 유기박막층을 포함하고,

상기 유기박막층 중 적어도 어느 한 층은 제1항 내지 제9항 중 어느 한 항에 따른 화합물을 포함하는 것인 유기 발광소자.

청구항 11

제10항에서,

상기 유기박막층은 전자 주입층, 전자 수송층, 정공 주입층, 정공 수송층 또는 발광층인 유기발광소자.

청구항 12

제10항에서,

상기 유기박막층은 정공 주입층 또는 정공 수송층인 유기발광소자.

청구항 13

제10항에서,

상기 유기박막층은 정공 수송층인 유기발광소자.

청구항 14

제10항의 유기발광소자를 포함하는 표시장치.

발명의 설명

기술분야

[0001] 화합물, 이를 포함하는 유기발광소자 및 상기 유기발광소자를 포함하는 표시장치에 관한 것이다.

배경기술

[0002] 유기광전자소자(organic optoelectric device)라 함은 정공 또는 전자를 이용한 전극과 유기물 사이에서의 전하 교류를 필요로 하는 소자를 의미한다.

[0003] 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.

[0004] 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.

[0005] 유기광전자소자의 예로는 유기 광전 소자, 유기발광소자, 유기태양전지, 유기감광체 드럼(organic photo conductor drum), 유기트랜지스터 등이 있으며, 이들은 모두 소자의 구동을 위하여 정공의 주입 또는 수송 물질, 전자의 주입 또는 수송 물질, 또는 발광 물질을 필요로 한다.

[0006] 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.

[0007] 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, 정공 수송층, 발광층, 전자 수송층, 전자주입층 등으로 이루어질 수 있다.

[0008] 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.

[0009] 최근에는, 형광 발광물질뿐 아니라 인광 발광물질도 유기발광소자의 발광물질로 사용될 수 있음이 알려졌으며, 이러한 인광 발광은 바닥상태에서 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.

[0010] 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.

[0011] 또한, 발광 재료는 발광색에 따라 청색, 녹색, 적색 발광재료와 보다 나은 천연색을 구현하기 위해 필요한 노란색 및 주황색 발광 재료로 구분될 수 있다.

[0012] 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.

[0013] 유기발광소자가 우수한 특성을 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.

[0014] 또한, 저분자 유기발광소자는 진공 증착법에 의해 박막의 형태로 소자를 제조하므로 효율 및 수명성능이 좋으며, 고분자 유기발광소자는 잉크젯(inkjet) 또는 스핀코팅(spin coating)법을 사용하여 초기 투자비가 적고

대면적화가 유리한 장점이 있다.

[0015] 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.

[0016] 또한, 응답속도가 LCD에 비해 1000배 이상 빠른 마이크로 초 단위여서 잔상이 없는 완벽한 동영상 구현을 할 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.

[0017] 대형화를 위해서는 발광 효율의 증대 및 소자의 수명 향상이 수반되어야 한다. 이를 위해 안정하고 효율적인 유기발광소자용 유기물층 재료, 특히 정공수송 물질의 개발이 필요하다.

발명의 내용

해결하려는 과제

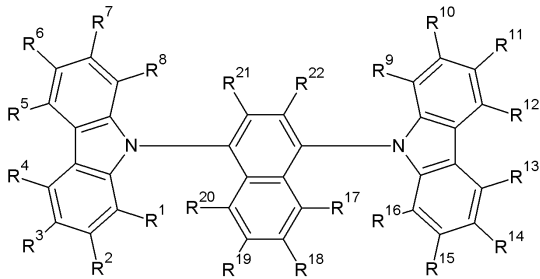
[0018] 고효율, 고휘도, 장수명 등의 특성을 가지는 유기발광소자를 제공할 수 있는 화합물을 제공하는 것이다.

[0019] 상기 화합물을 포함하는 유기발광소자 및 상기 유기발광소자를 포함하는 표시장치를 제공하는 것이다.

과제의 해결 수단

[0020] 본 발명의 일 구현예에서는, 하기 화학식 1로 표시되는 유기발광소자용 화합물을 제공한다.

[0021] [화학식 1]



[0022]

[0023] 상기 화학식 1에서,

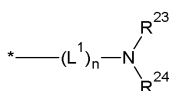
[0024] R¹ 내지 R¹⁶은 각각 독립적으로 수소원자, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C20 아릴기 또는 치환 또는 비치환된 아민기이고,

[0025] R¹⁷ 내지 R²²는 각각 독립적으로 수소원자 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 알킬기이고,

[0026] 단, R¹ 내지 R⁴ 및 R⁹ 내지 R¹² 중 적어도 하나는 치환된 C6 내지 C20 아릴기 또는 치환 또는 비치환된 아민기이다.

[0027] 상기 R¹ 내지 R⁴ 및 R⁹ 내지 R¹² 중 적어도 하나는 하기 화학식 2로 표시될 수 있다.

[0028] [화학식 2]



[0029]

[0030] 상기 화학식 2에서,

[0031] R^{23} 및 R^{24} 는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 C6 내지 C20 아릴기 또는 치환 또는 비치환된 플루오레닐기이고,

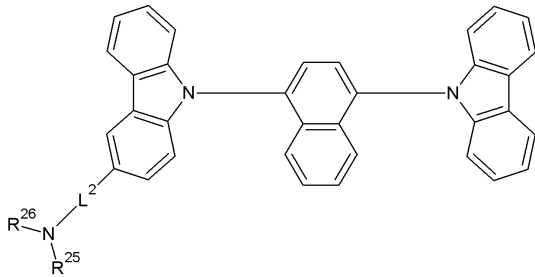
[0032] L^1 은 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 알킬렌기 또는 치환 또는 비치환된 C6 내지 C20 아릴렌기이고,

[0033] n 은 0 또는 1의 정수이다.

[0034] 상기 R^1 내지 R^4 중 적어도 하나는 치환된 C6 내지 C20 아릴기 또는 치환 또는 비치환된 아민기이고, 상기 R^9 내지 R^{12} 중 적어도 하나는 치환된 C6 내지 C20 아릴기 또는 치환 또는 비치환된 아민기일 수 있다.

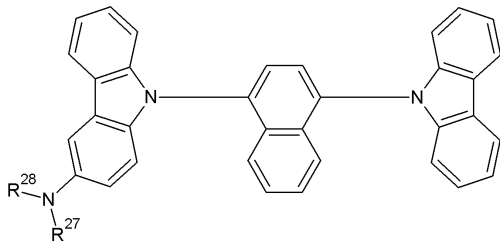
[0035] 상기 화학식 1로 표시되는 유기발광소자용 화합물은 하기 화학식 3 내지 화학식 6으로 이루어진 군에서 선택된 어느 하나로 표시될 수 있다.

[0036] [화학식 3]



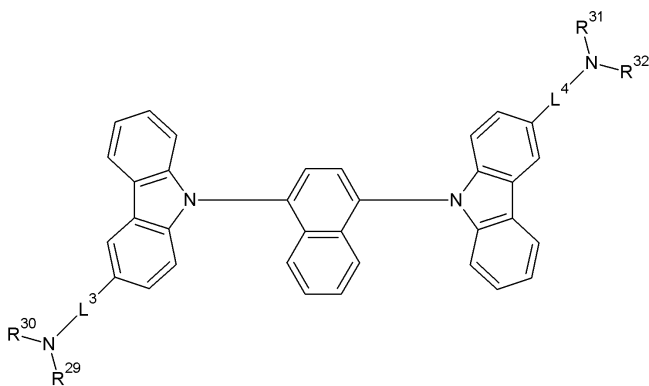
[0037]

[0038] [화학식 4]



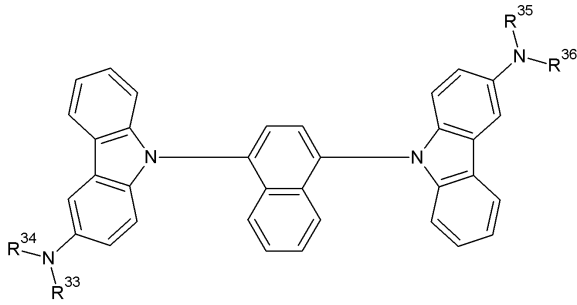
[0039]

[0040] [화학식 5]



[0041]

[0042] [화학식 6]



[0043]

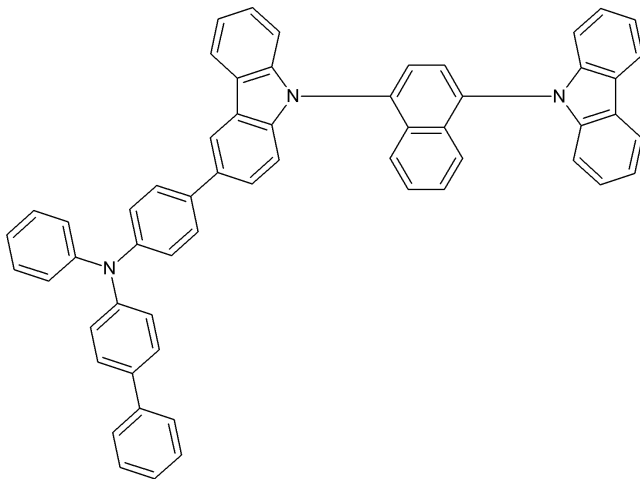
[0044] 상기 화학식 3 내지 화학식 6에서,

[0045] R^{25} 내지 R^{36} 은 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 C6 내지 C20 아릴기 또는 치환 또는 비치환된 플루오레닐기 이고,

[0046] L^2 내지 L^4 는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 C6 내지 C20 아릴렌기이다.

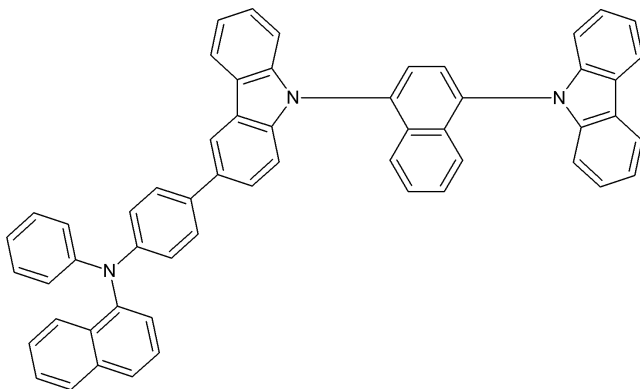
[0047] 상기 화학식 1로 표시되는 유기발광소자용 화합물은 하기 화학식 7 내지 화학식 18로 이루어진 군에서 선택된 어느 하나로 표시될 수 있다.

[0048] [화학식 7]



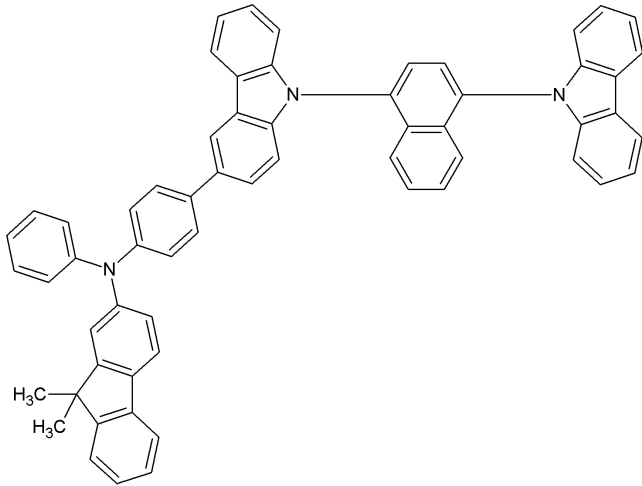
[0049]

[0050] [화학식 8]



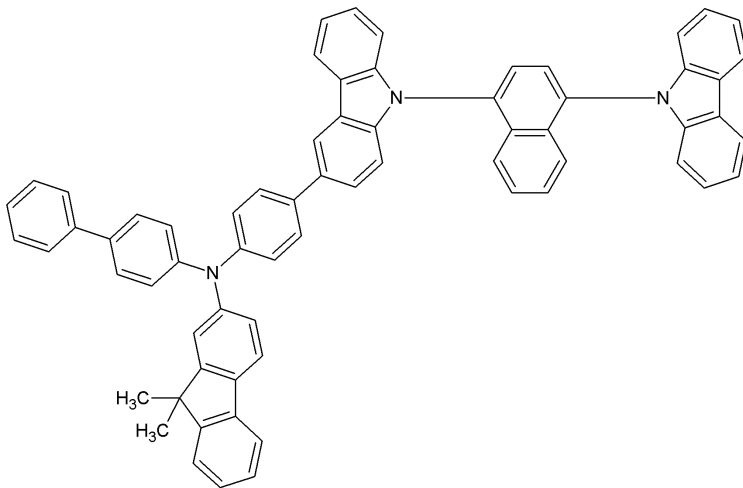
[0051]

[0052] [화학식 9]



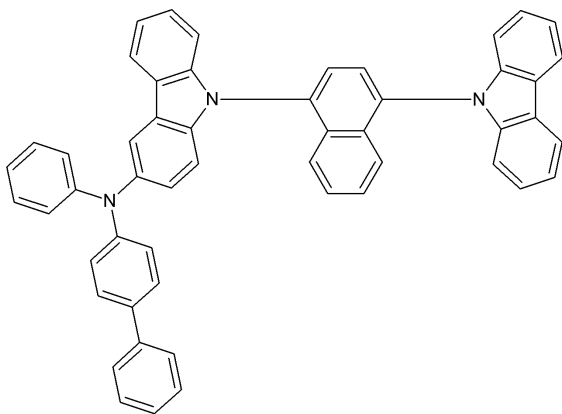
[0053]

[0054] [화학식 10]



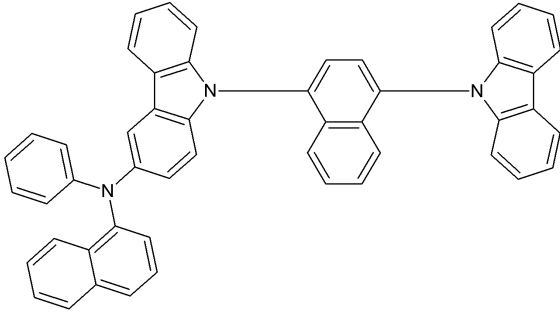
[0055]

[0056] [화학식 11]



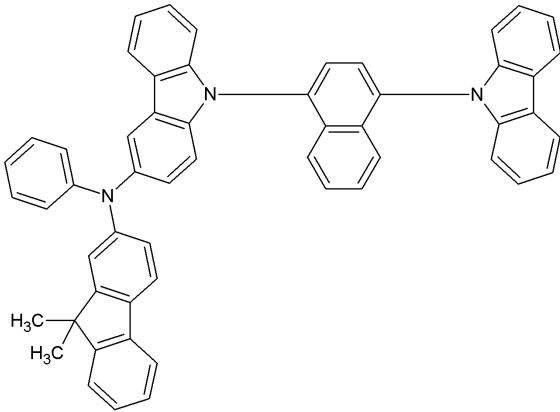
[0057]

[0058] [화학식 12]



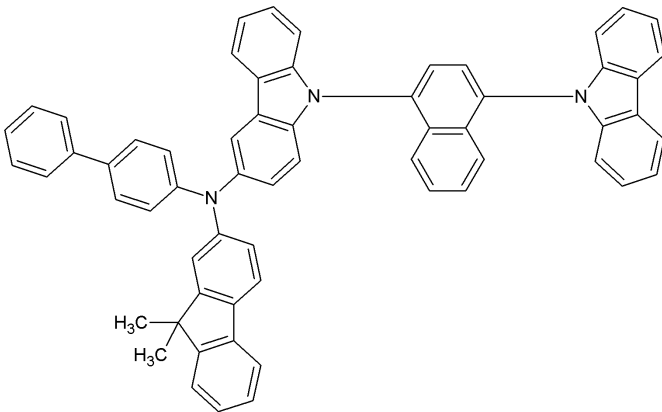
[0059]

[0060] [화학식 13]



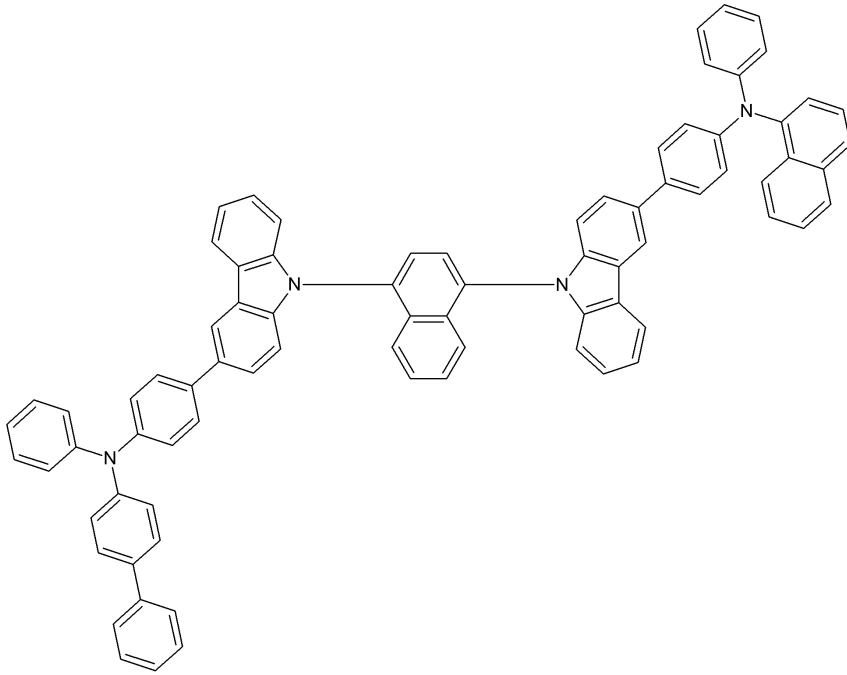
[0061]

[0062] [화학식 14]



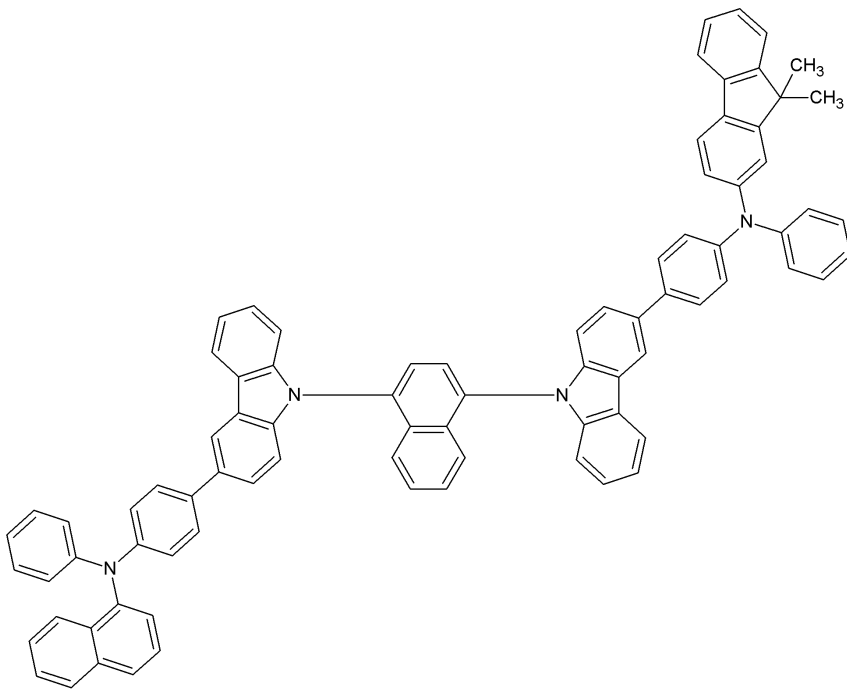
[0063]

[0064] [화학식 15]



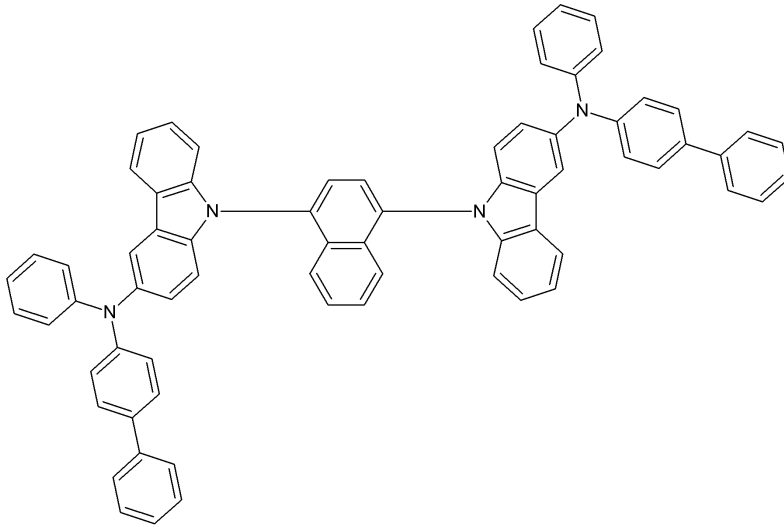
[0065]

[0066] [화학식 16]



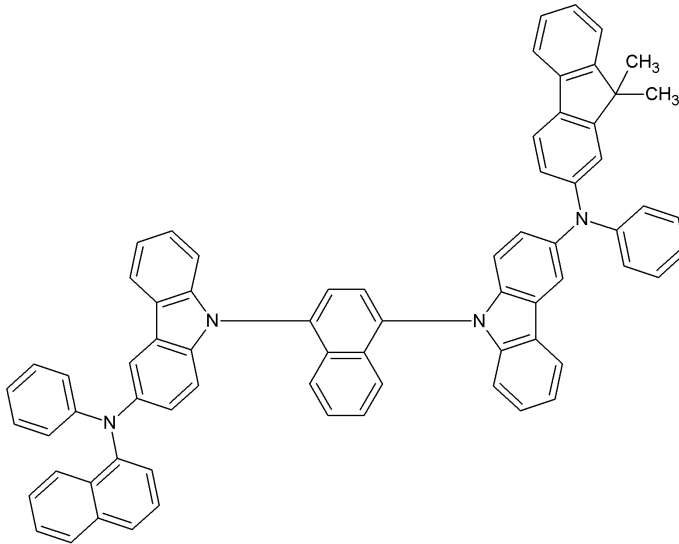
[0067]

[0068] [화학식 17]



[0069]

[0070] [화학식 18]



[0071]

[0072] 본 발명의 다른 일 구현예에서는, 양극, 음극 및 상기 양극과 음극 사이에 개재되는 한 층 이상의 유기박막층을 포함하고, 상기 유기박막층 중 적어도 어느 한 층은 전술한 본 발명의 일 구현예에 따른 화합물을 포함하는 것인 유기발광소자를 제공한다.

[0073] 상기 유기박막층은 전자 주입층, 전자 수송층, 정공 주입층, 정공 수송층 또는 발광층일 수 있다.

[0074] 상기 유기박막층은 정공 주입층 또는 정공 수송층일 수 있다.

[0075] 상기 유기박막층은 정공 수송층일 수 있다.

[0076] 본 발명의 또 다른 일 구현예에서는, 전술한 본 발명의 일 구현예인 유기발광소자를 포함하는 표시장치를 제공한다.

발명의 효과

[0077] 본 발명의 일 구현예에 따른 화합물을 포함하는 유기발광소자는 우수한 전기화학적 및 열적 안정성을 가지고 휘도 특성이 우수하며, 낮은 구동전압에서도 높은 발광효율을 가질 수 있다.

도면의 간단한 설명

[0078] 도 1 내지 도 5는 본 발명의 일 구현예에 따른 유기발광소자에 대한 다양한 구현예들을 나타내는 단면도이다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

[0079] 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.

[0080] 본 명세서에서 "치환"이란 별도의 정의가 없는 한, 치환기 또는 화합물 중의 적어도 하나의 수소가 중수소, 할로젠기, 히드록시기, 아미노기, 플루오레닐기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 아민기, 니트로기, 치환 또는 비치환된 C1 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.

[0081] 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. 구체적으로, 상기 치환된 C6 내지 C30 아릴기는 인접한 또다른 치환된 C6 내지 C30 아릴기와 융합되어 치환 또는 비치환된 플루오렌 고리를 형성할 수 있다.

[0082] 본 명세서에서 "헤테로"란 별도의 정의가 없는 한, 하나의 작용기 내에 N, O, S 및 P로 이루어진 군에서 선택되는 헤테로 원자를 1개 내지 3개 함유하고, 나머지는 탄소인 것을 의미한다.

[0083] 본 명세서에서 *는 탄소 원자 또는 탄소 이외의 원자와 연결되는 부분을 의미한다.

[0084] 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.

[0085] 상기 알킬기는 C1 내지 C20 알킬기일 수 있다. 보다 구체적으로 알킬기는 C1 내지 C10 알킬기 또는 C1 내지 C6 알킬기일 수도 있다. 예를 들어, C1 내지 C4 알킬기는 알킬쇄에 1개 내지 4 개의 탄소원자가 포함되는 것을 의미하며, 메틸, 에틸, 프로필, 이소-프로필, n-부틸, 이소-부틸, sec-부틸 및 t-부틸로 이루어진 군에서 선택됨을 나타낸다.

[0086] 상기 알킬기는 구체적인 예를 들어 메틸기, 에틸기, 프로필기, 이소프로필기, 부틸기, 이소부틸기, t-부틸기, 펜틸기, 헥실기, 시클로프로필기, 시클로부틸기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기 등을 의미한다.

[0087] 본 명세서에서 "아릴(aryl)기"는 환형인 치환기의 모든 원소가 p-오비탈을 가지고 있으며, 이들 p-오비탈이 공액(conjugation)을 형성하고 있는 치환기를 의미한하고, 모노시클릭 또는 융합 고리 폴리시클릭(즉, 탄소원자들의 인접한 쌍들을 나눠 가지는 고리) 작용기를 포함한다.

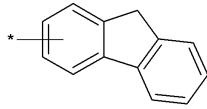
[0088] 본 명세서에서 "헤테로아릴(heteroaryl)기"는 아릴기 내에 N, O, S 및 P로 이루어진 군에서 선택되는 헤테로 원자를 1개 내지 3개 함유하고, 나머지는 탄소인 것을 의미한다. 상기 헤테로아릴기가 융합고리인 경우, 각각의 고리마다 상기 헤테로 원자를 1개 내지 3개 포함할 수 있다.

[0089] 보다 구체적으로, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기 및/또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴기는, 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 바이페닐일기, 치환 또는 비치환된 p-터페닐기, 치환 또는 비치환된 m-터페닐기, 치환 또는 비치환된 크리세닐기, 치환 또는 비치환된 트리페닐레닐기, 치환 또는 비치환된 페릴레닐기, 치환 또는 비치환된 인데닐기, 치환 또는 비치환된 퓨라닐기, 치환 또는 비치환된 티오페닐기, 치환 또는 비치환된 피롤릴기, 치환 또는 비치환된 피라졸릴기, 치환 또는 비치환된 이미다졸일기, 치환 또는 비치환된 트리아졸일기, 치환 또는 비치환된 옥사졸일기, 치환 또는 비치환된 티아졸일기, 치환 또는 비치환된 옥사디아졸일기, 치환 또는 비치환된 티아디아졸일기, 치환 또는 비치환된 피리딜기, 치환 또는 비치환된 피리미디닐기, 치환 또는 비치환된 피라지닐기, 치환 또는 비치환된 트리아지닐기, 치환 또는 비치환된 벤조퓨라닐기, 치환 또는 비치환된 벤조티오페닐기, 치환 또는 비치환된 벤즈이미다졸일기, 치환 또는 비치환된 인돌일기, 치환 또는 비치환된 퀴놀리닐기, 치환 또는 비치환된 이

소퀴놀리닐기, 치환 또는 비치환된 퀴나졸리닐기, 치환 또는 비치환된 퀴녹살리닐기, 치환 또는 비치환된 나프티리디닐기, 치환 또는 비치환된 벤즈옥사진일기, 치환 또는 비치환된 벤즈티아진일기, 치환 또는 비치환된 아크리디닐기, 치환 또는 비치환된 페나진일기, 치환 또는 비치환된 페노티아진일기, 치환 또는 비치환된 페녹사진일기 또는 이들의 조합일 수 있으나, 이에 제한되지는 않는다.

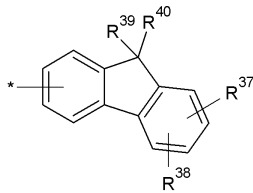
[0090] 예컨대, 치환 또는 비치환된 플루오레닐기는 하기 화학식 100 또는 화학식 101로 표시될 수 있고, 치환 또는 비치환된 플루오레닐렌기는 하기 화학식 102 또는 화학식 103으로 표시될 수 있다.

[0091] [화학식 100]



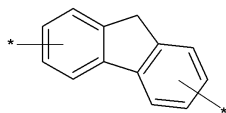
[0092]

[0093] [화학식 101]



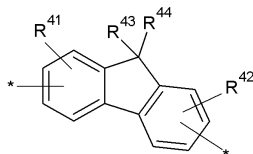
[0094]

[0095] [화학식 102]



[0096]

[0097] [화학식 103]



[0098]

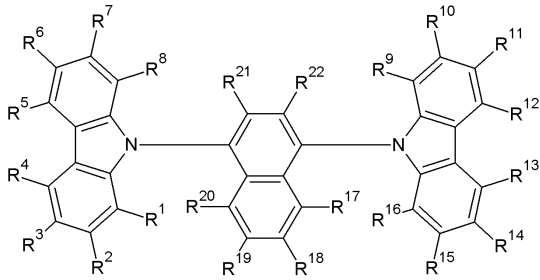
[0099] 상기 화학식 100 내지 화학식 103에서, R³⁷ 내지 R⁴⁴는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 할로젠기, 히드록시기, 아미노기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 아민기, 니트로기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C40 실릴기, C1 내지 C30 알킬기, C1 내지 C10 알킬실릴기, C3 내지 C30 시클로알킬기, C6 내지 C30 아릴기, C1 내지 C20 알콕시기, 플루오로기, 트리플루오로메틸기 등의 C1 내지 C10 트리플루오로알킬기, 및 시아노기로 이루어진 군에서 선택될 수 있다.

[0100] 본 명세서에서, 정공 특성이란, HOMO 준위를 따라 전도 특성을 가져 양극에서 형성된 정공의 발광층으로의 주입 및 발광층에서의 이동을 용이하게 하는 특성을 의미한다. 보다 구체적으로, 전자를 밀어내는 특성과도 유사할 수 있다.

[0101] 또한 전자 특성이란, LUMO 준위를 따라 전도 특성을 가져 음극에서 형성된 전자의 발광층으로의 주입 및 발광층에서의 이동을 용이하게 하는 특성을 의미한다. 보다 구체적으로 전자를 당기는 특성과도 유사할 수 있다.

[0102] 본 발명의 일 구현예에서는, 하기 화학식 1로 표시되는 화합물을 제공할 수 있다.

[0103] [화학식 1]



[0104]

[0105] 상기 화학식 1에서,

[0106] R¹ 내지 R¹⁶은 각각 독립적으로 수소원자, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C20 아릴기 또는 치환 또는 비치환된 아민기이고,

[0107] R¹⁷ 내지 R²²는 각각 독립적으로 수소원자 또는 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 알킬기이고,

[0108] 단, R¹ 내지 R⁴ 및 R⁹ 내지 R¹² 중 적어도 하나는 치환된 C6 내지 C20 아릴기 또는 치환 또는 비치환된 아민기이다.

[0109] 유기발광소자를 실용화하기 위해서는 다층구조로 소자를 구성하는 것 이외에 소자 재료인 정공수송 물질의 역할이 매우 중요하다. 장수명의 소자를 위해서는 정공수송 물질이 열적 그리고 전기적으로 안정성을 지녀야 하는데, 내열성이 낮은 재료에서는 소자 구동 시에 발생하는 열에 의해, 낮은 온도에서도 열분해가 일어나, 재료가 열화되기 쉽다. 또한, 내열성이 낮은 재료에서는 짧은 시간에서도 박막의 결정화가 일어나, 소자가 쉽게 열화되어 버린다. 이는, 전압을 걸어주었을 때 소자에서 발생하는 열로 인하여 열 안정성이 낮은 분자는 결정 안정성이 낮아 재배열 현상이 일어나게 되고, 결국 결정화가 발생하게 되어 소자의 열화 및 결함이 발생하기 때문이다. 따라서 결정성이 낮은 재료를 정공수송 물질로 사용하는 것이 일반적이었다.

[0110] 한편, 유기발광소자는 전류 주입형 소자이기 때문에 만약 사용되는 재료가 낮은 유리전이온도를 갖는다면, 사용 중 발생하는 열이 유기발광소자의 열화를 초래하여 소자의 수명을 단축시키게 되므로, 정공수송 물질은 또한 높은 유리전이온도를 가짐이 바람직하다.

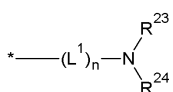
[0111] 일 구현예에 따른 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 바이카바졸나프탈렌 코어에 아릴아미노기 또는 아미노기를 가지는 아릴기를 치환기로 포함한다. 이러한 구조 상의 특징으로 인해 결정화를 방지할 수 있고, 이로 인해 무정형의 특징을 가지게 하여 소자의 수명을 증가시킬 수 있다. 또한, 이온화 전위를 낮추어 유기발광소자 내 정공수송 능력을 향상시켜, 발광 휘도 및 발광 효율이 우수한 유기발광소자를 제공할 수 있다.

[0112] 즉, 일 구현예에 따른 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 1,4-다이카바졸나프탈렌을 코어로 포함한 구조로서, 종래 정공수송 물질보다 높은 정공 이동도를 가지며, 삼중항 에너지 레벨이 높고, 전자 저지성 또한 우수하다. 나아가, 우수한 내열성 및 박막 안정성을 가지며, 상기 코어의 치환기로 아릴아미노기 또는 아미노기를 가지는 아릴기가 도입되어, 결정형성을 줄여주고, 이온화 전위를 낮추어 정공수송 능력을 크게 향상시킬 수 있다.

[0113] 또한, 일 구현예에 따른 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 카바졸의 질소(N)에 열안정성이 우수한 나프탈렌이 직접 결합되는 바, 화합물의 유리 전이온도 등의 열 안정성이 향상되어, 일 구현예에 따른 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하는 유기발광소자의 수명을 증가시킬 수 있다.

[0114] 상기 R¹ 내지 R⁴ 및 R⁹ 내지 R¹² 중 적어도 하나는 하기 화학식 2로 표시될 수 있다.

[0115] [화학식 2]



[0116]

[0117] 상기 화학식 2에서,

[0118] R²³ 및 R²⁴는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 C6 내지 C20 아릴기 또는 치환 또는 비치환된 플루오레닐기이

고,

[0119] L¹은 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 알킬렌기 또는 치환 또는 비치환된 C6 내지 C20 아릴렌기이고,

[0120] n은 0 또는 1의 정수이다.

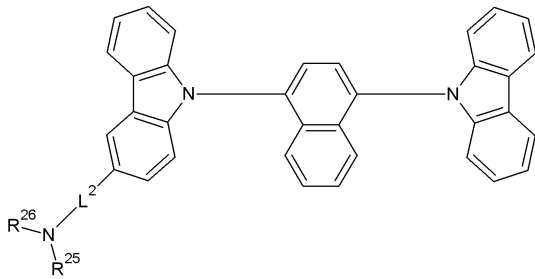
[0121] 상기 R¹ 내지 R⁴ 중 적어도 하나는 치환된 C6 내지 C20 아릴기 또는 치환 또는 비치환된 아민기이고, 상기 R⁹ 내지 R¹² 중 적어도 하나는 치환된 C6 내지 C20 아릴기 또는 치환 또는 비치환된 아민기일 수 있다.

[0122] 예컨대, 상기 R¹ 내지 R⁴ 및 R⁹ 내지 R¹² 중 적어도 하나가 치환된 C6 내지 C20 아릴기인 경우, 상기 치환된 C6 내지 C20 아릴기는 아민기로 치환된 C6 내지 C20 아릴기일 수 있다.

[0123] 예컨대, 상기 R¹ 내지 R⁴ 및 R⁹ 내지 R¹² 중 적어도 하나가 치환 또는 비치환된 아민기인 경우, 상기 치환 또는 비치환된 아민기는 C6 내지 C20 아릴기로 치환 또는 비치환된 아민기일 수 있다.

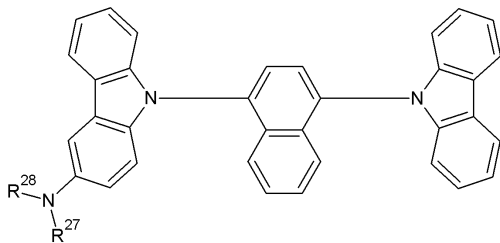
[0124] 예컨대, 상기 화학식 1로 표시되는 유기발광소자용 화합물은 하기 화학식 3 내지 화학식 6 중 어느 하나로 표시 될 수 있다.

[0125] [화학식 3]



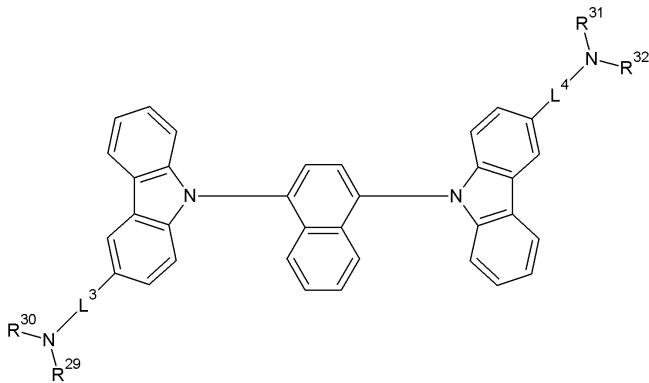
[0126]

[0127] [화학식 4]



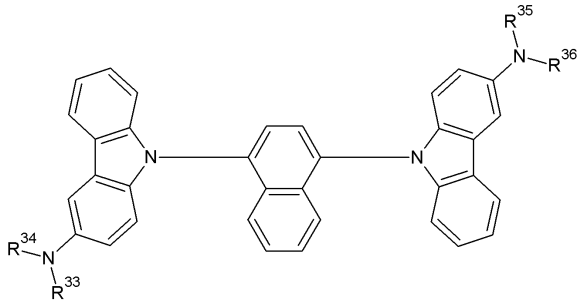
[0128]

[0129] [화학식 5]



[0130]

[0131] [화학식 6]



[0132]

[0133] 상기 화학식 3 내지 화학식 6에서,

[0134] R^{25} 내지 R^{36} 은 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 C6 내지 C20 아릴기 또는 치환 또는 비치환된 플루오레닐기 이고,

[0135] L^2 내지 L^4 는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 C6 내지 C20 아릴렌기이다.

[0136] 구체적으로, 상기 일 구현예에 따른 화합물은 상기 화학식 3 내지 화학식 6 중 어느 하나로 표시되어, 적절한 정공 특성을 가질 수 있다. 즉, 화학식 3 내지 화학식 6의 경우, 1,4-다이카바졸나프탈렌 코어에 아민기가 치환기로 도입되어 매우 우수한 정공 수송 능력을 가질 수 있으며, 정공의 이동성(mobility)이 향상되어 효율은 좋아지고 구동전압은 낮아지게 된다.

[0137] 또한, 상기 L^2 내지 L^4 를 선택적으로 조절하여 화합물 전체의 공액(conjugation) 길이를 결정할 수 있으며, 이로 부터 삼중항(triplet) 에너지 밴드갭을 조절할 수 있다. 이를 통해 유기발광소자에서 필요로 하는 재료의 특성을 구현해 낼 수 있다. 또한, 였소(ortho), 파라(para), 메타(meta) 등의 결합위치 변경을 통해서도 삼중항 에너지 밴드갭을 조절할 수 있다.

[0138] 또한, 상기 화학식 3 내지 화학식 6으로 표시되는 화합물은 R^{25} 내지 R^{36} 의 위치에 다양한 아릴기 및/또는 플루오레닐기를 치환기로 도입함으로써 정공의 이동성(mobility)이 향상되는 화합물이 될 수 있다.

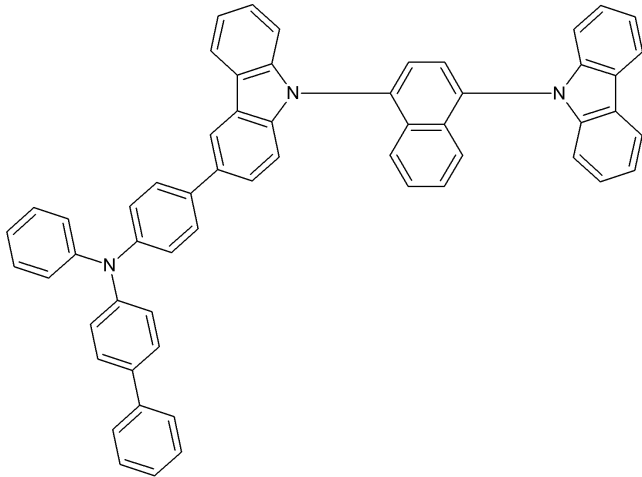
[0139] 상기 화합물의 치환기에 따라 적절한 에너지 준위를 가지는 화합물을 유기발광소자에 사용함으로써, 정공수송 능력이 강화되어 효율 및 구동전압 면에서 우수한 효과를 가지고, 전기화학적 및 열적 안정성이 뛰어나 유기발광소자 구동 시 수명 특성을 향상시킬 수 있다.

[0140] 구체적으로, 상기 R^{25} 내지 R^{36} 은 각각 독립적으로, 치환 또는 비치환된 페닐기, 치환 또는 비치환된 바이페닐기, 치환 또는 비치환된 나프틸기, 치환 또는 비치환된 안트라세닐기, 치환 또는 비치환된 페난트레닐기 또는 치환 또는 비치환된 플루오레닐기일 수 있다. 이러한 경우, 물질의 용해도(Solubility)가 향상되어, 같은 분자량의 화합물보다 승화성이 좋아져 증착에 용이하며, 열안정성을 확보할 수 있다. 또한, 화합물의 정공 특성을 적절하게 조절할 수 있다.

[0141] 구체적으로, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물의 중량평균 분자량은 600 g/mol 내지 1000 g/mol 일 수 있다. 상기 화학식 1로 표시되는 화합물이 상기 범위 내의 중량평균 분자량을 가짐으로써, 증착 및 소자평가 공정 시 발생하는 압력 및 열에 대한 안정성을 확보할 수 있다.

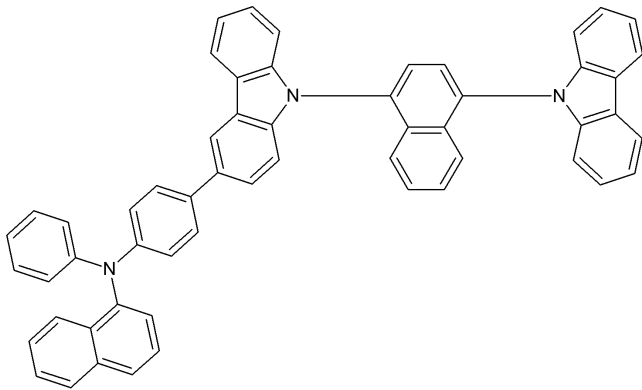
[0142] 예컨대, 상기 화학식 1로 표시되는 유기발광소자용 화합물은 하기 화학식 7 내지 화학식 18 중 어느 하나로 표시될 수 있으나, 이에 제한되는 것은 아니다.

[0143] [화학식 7]



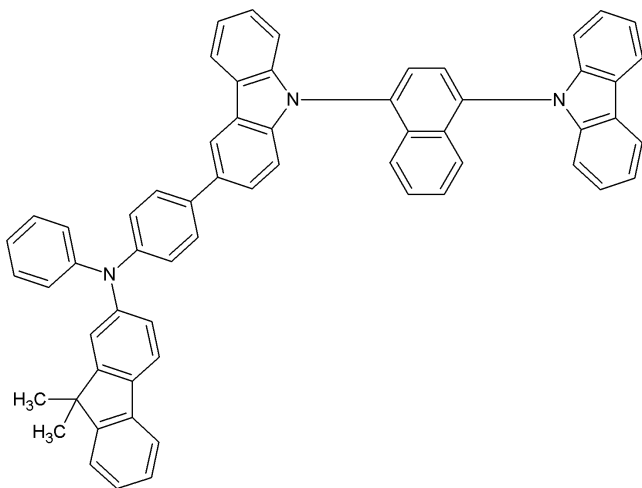
[0144]

[0145] [화학식 8]



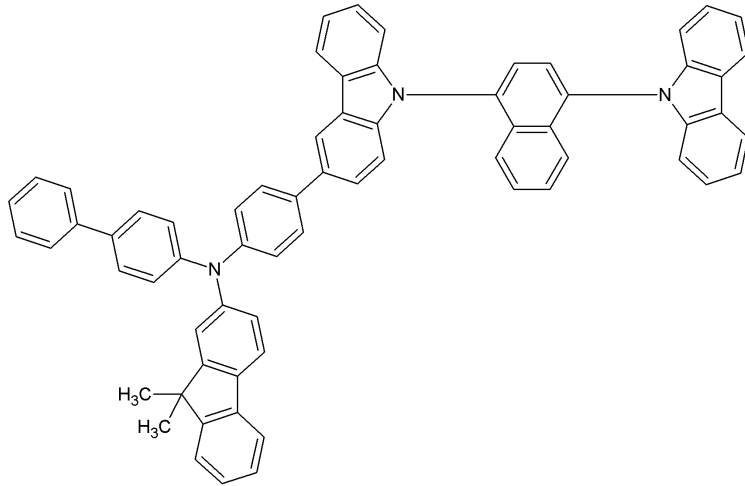
[0146]

[0147] [화학식 9]



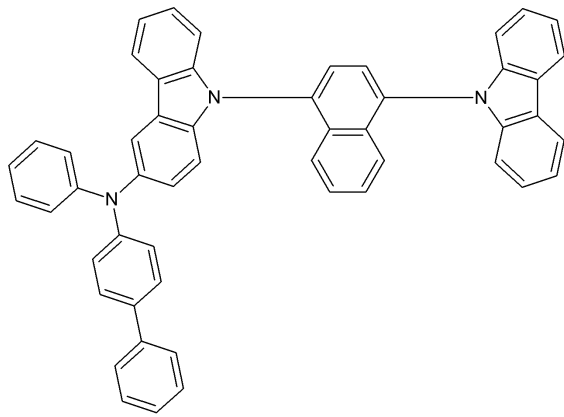
[0148]

[0149] [화학식 10]



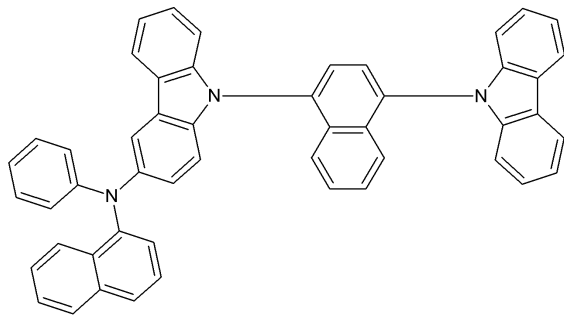
[0150]

[0151] [화학식 11]



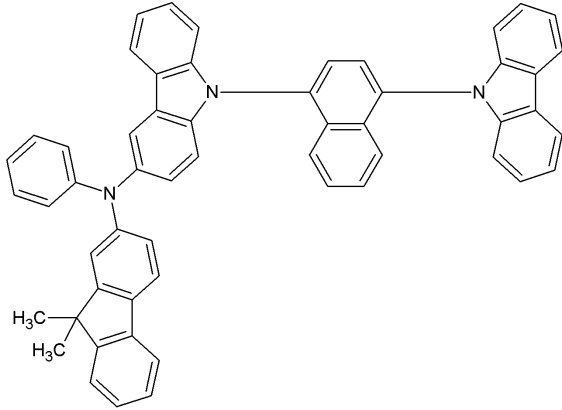
[0152]

[0153] [화학식 12]



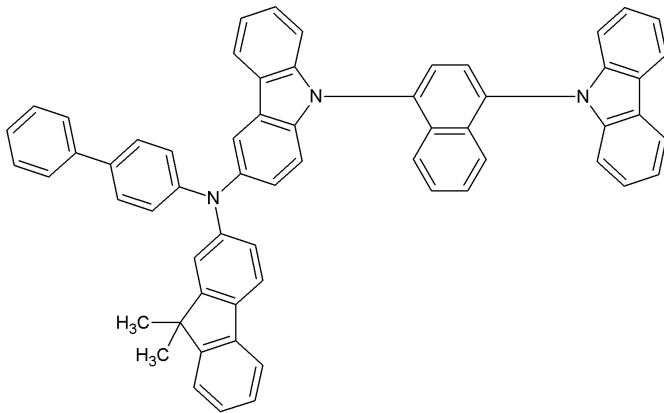
[0154]

[0155] [화학식 13]



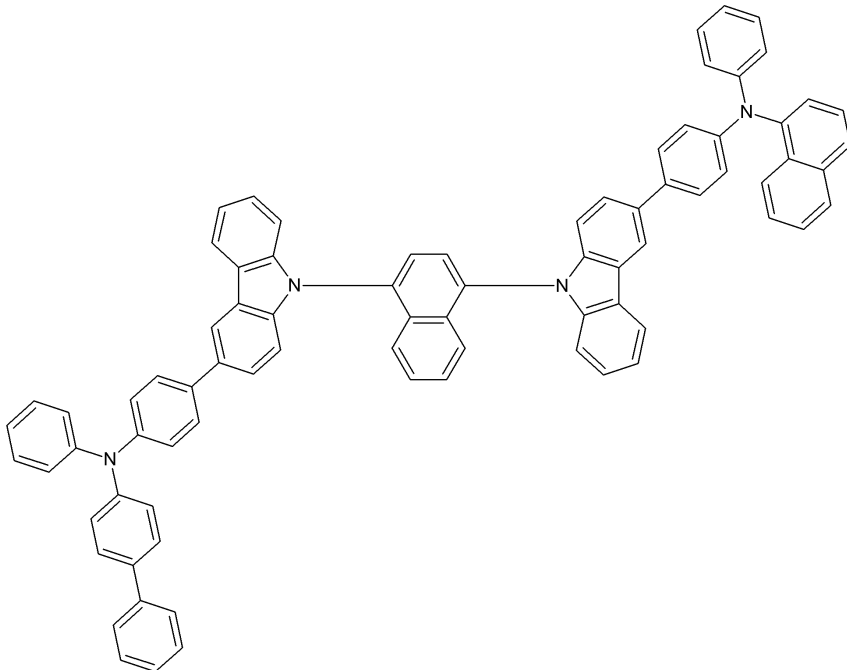
[0156]

[0157] [화학식 14]



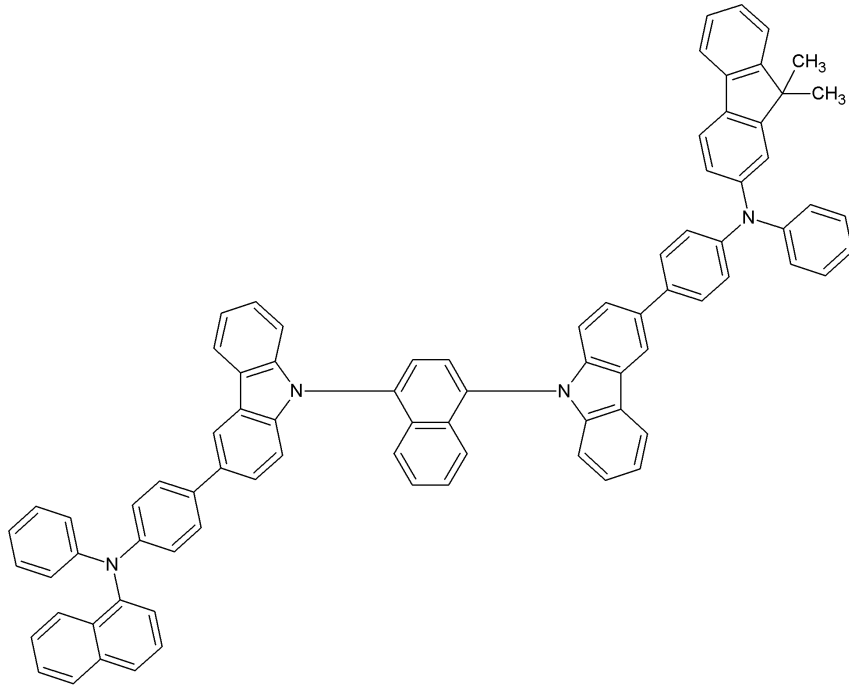
[0158]

[0159] [화학식 15]



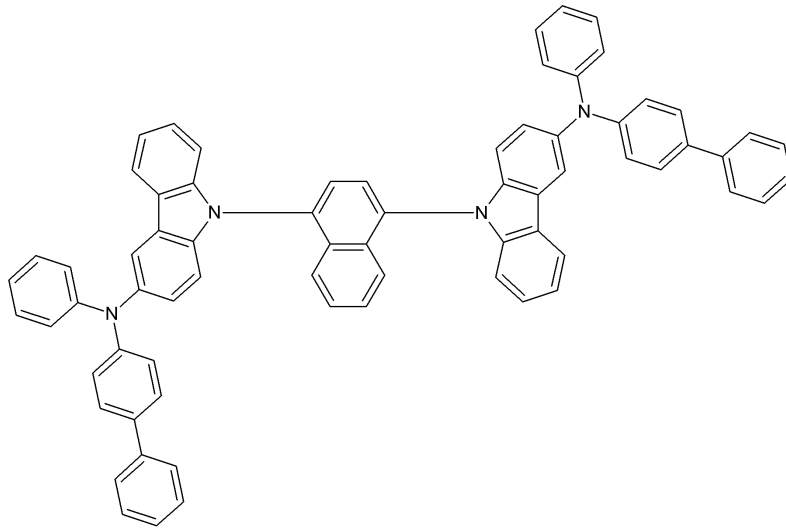
[0160]

[0161] [화학식 16]



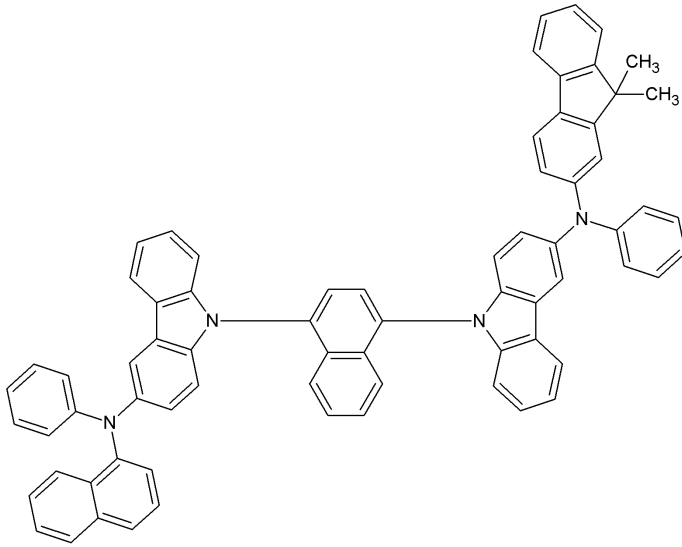
[0162]

[0163] [화학식 17]



[0164]

[0165] [화학식 18]



[0166]

[0167] 본 발명의 다른 일 구현예에서는, 양극, 음극 및 상기 양극과 음극 사이에 개재되는 한 층 이상의 유기박막층을 포함하고, 상기 유기박막층 중 적어도 어느 한 층은 상기 본 발명의 일 구현예에 따른 화합물을 포함하는 것인 유기발광소자를 제공한다.

[0168] 상기 유기발광소자용 화합물은 유기박막층에 사용되어 유기발광소자의 수명 특성, 효율 특성, 전기화학적 안정성 및 열적 안정성을 향상시키며, 구동전압을 낮출 수 있다.

[0169] 상기 유기박막층은 전자 주입층, 전자 수송층, 정공 주입층, 정공 수송층 또는 발광층일 수 있다.

[0170] 상기 유기박막층은 구체적으로, 정공 주입층 또는 정공 수송층일 수 있다.

[0171] 상기 유기박막층은 구체적으로, 정공 수송층일 수 있다.

[0172] 도 1 내지 도 5는 본 발명의 일 구현예에 따른 화합물을 포함하는 유기발광소자의 단면도이다.

[0173] 도 1 내지 도 5를 참조하면, 본 발명의 일 구현예에 따른 유기발광소자(100 및 200)는 양극(120), 음극(110) 및 이 양극과 음극 사이에 개재된 적어도 1층의 유기박막층을 포함하는 구조를 갖는다.

[0174] 상기 양극(120)은 양극 물질을 포함하며, 이 양극 물질로는 통상 유기박막층으로 정공주입이 원활할 수 있도록 일 함수가 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)(polyethylenedioxythiophene: 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.

[0175] 상기 음극(110)은 음극 물질을 포함하여, 이 음극 물질로는 통상 유기박막층으로 전자주입이 용이하도록 일 함수가 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/Ca과 같은 다층 구조 물질 등을 들 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다. 바람직하게는 상기 음극으로 알루미늄 등과 같은 금속전극을 사용할 수 있다.

[0176] 먼저 도 1을 참조하면, 도 1은 유기박막층(105)으로서 발광층(130)만이 존재하는 유기발광소자(100)를 나타낸 것으로, 상기 유기박막층은 발광층(130)만으로 존재할 수 있다.

[0177] 도 2를 참조하면, 도 2는 유기박막층으로서 전자수송층을 포함하는 발광층(230)과 정공 수송층(140)이 존재하는 2층형 유기발광소자(200)를 나타낸 것으로, 도 2에 나타난 바와 같이, 유기박막층은 발광층(230) 및 정공 수송

층(140)을 포함하는 2층형일 수 있다. 이 경우 발광층(130)은 전자수송층의 기능을 하며, 정공수송층(140)은 ITO와 같은 투명전극과의 접합성 및 정공수송성을 향상시키는 기능을 한다.

[0178] 도 3을 참조하면, 도 3은 유기박막층으로서 전자 수송층(150), 발광층(130) 및 정공 수송층(140)이 존재하는 3층형 유기발광소자(300)로서, 상기 유기박막층에서 발광층(130)은 독립된 형태로 되어 있고, 전자수송성이나 정공수송성이 우수한 막(전자 수송층(150) 및 정공 수송층(140))을 별도의 층으로 쌓은 형태를 나타내고 있다.

[0179] 도 4를 참조하면, 도 4는 유기박막층으로서 전자주입층(160), 발광층(130), 정공 수송층(140) 및 정공주입층(170)이 존재하는 4층형 유기발광소자(400)로서, 상기 정공주입층(170)은 양극으로 사용되는 ITO와의 접합성을 향상시킬 수 있다.

[0180] 도 5를 참조하면, 도 5는 유기박막층으로서 전자주입층(160), 전자 수송층(150), 발광층(130), 정공 수송층(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.

[0181] 상기 도 1 내지 도 5에서 상기 유기박막층을 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 화합물을 포함한다.

[0182] 특히 상기 화합물은 상기 정공 수송층(140)에 사용될 수 있다.

[0183] 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.

[0184] 본 발명의 또 다른 일 구현예에서는, 상기 유기발광소자를 포함하는 표시장치를 제공한다.

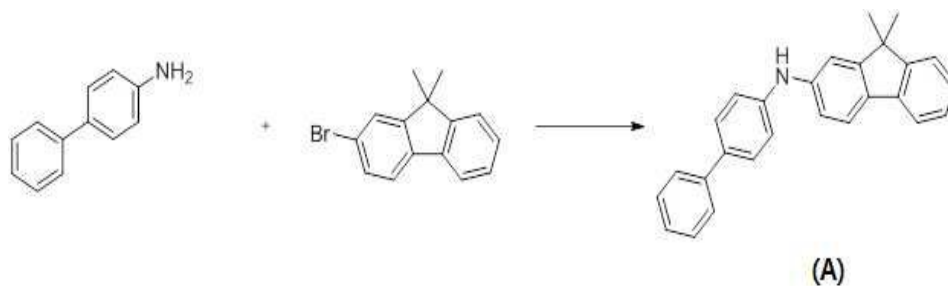
[0185] 이하에서는 본 발명의 구체적인 실시예들을 제시한다. 다만, 하기에 기재된 실시예들은 본 발명을 구체적으로 예시하거나 설명하기 위한 것에 불과하며, 이로서 본 발명이 제한되어서는 아니된다.

[0186] (유기발광소자용 화합물의 제조)

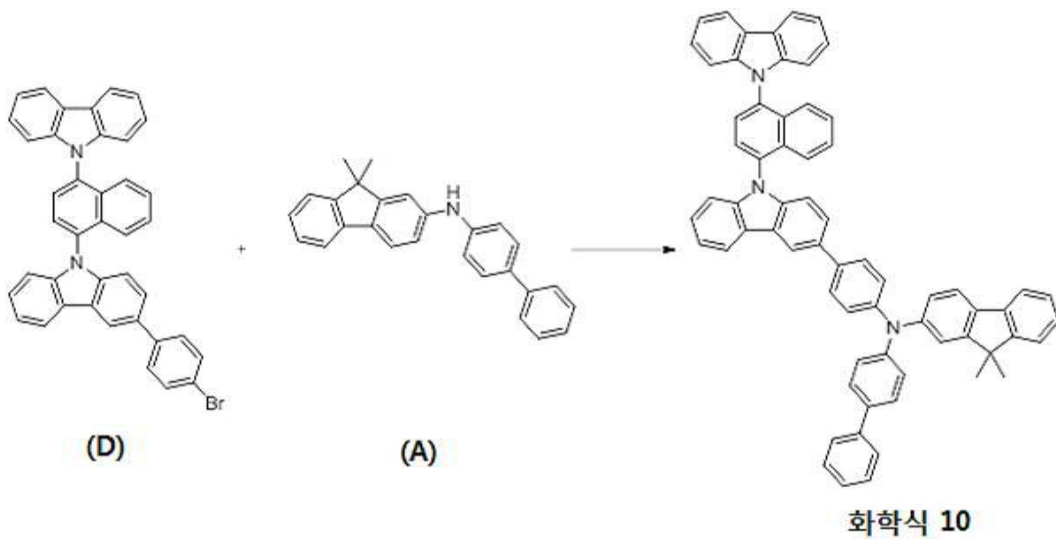
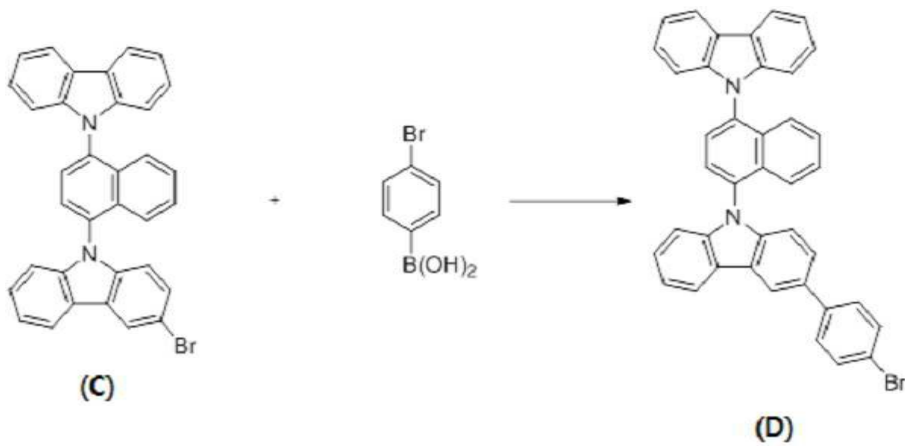
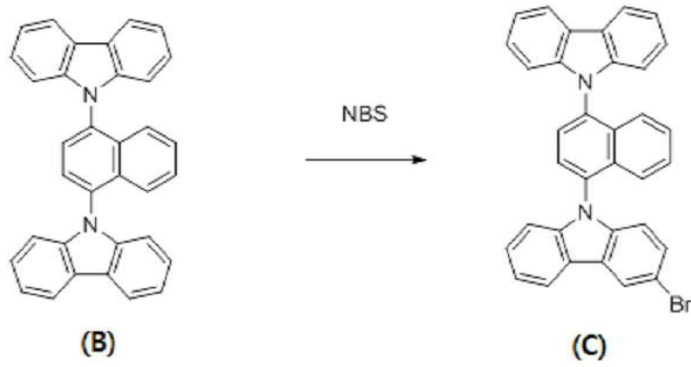
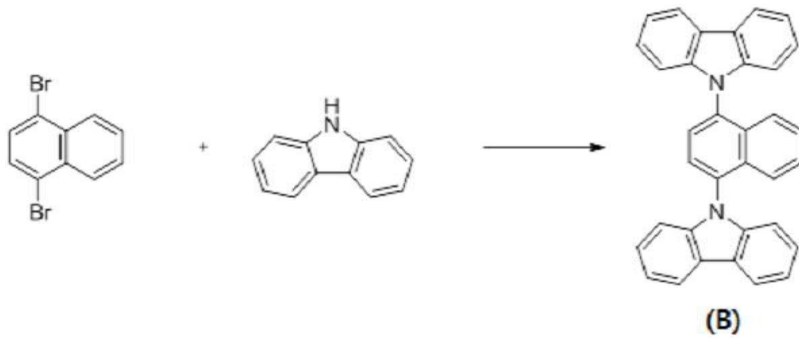
[0187] 제조예 1: 화학식 10의 합성

[0188] 상기 화학식 10을 하기 반응식 1과 같은 5단계 경로를 통해 합성하였다.

[0189] [반응식 1]



[0190]



[0194]

[0195] 단계 1 : 중간체 생성물 (A)의 합성

[0196] 4-아미노바이페닐 38g (224.55 mmol), 2-브로모-9,9-다이메틸플루오렌 40.89g (149.70 mmol), 세슘카보네이트 107.30g (329.33 mmol), 팔라듐(II)아세테이트 3.36g (14.97 mmmol)을 톨루엔 600 ml에 현탁시킨 후 트리-tert-부틸포스핀 14.53mL (29.94 mmol)를 넣고 12시간 동안 환류 교반하였다. 디클로로메탄과 증류수로 추출하고 유기층을 실리카겔 필터한다. 유기 용액을 제거하고 hexan : 디클로로메탄 = 7 : 3(v/v)으로 실리카겔 컬럼하여 중간체 생성물 (A) 50.0g (수율: 90%)을 얻었다.

[0197] 분자식: C₂₇H₂₃N

[0198] HRMS (70 eV, EI+): m/z 361.49

[0199] 단계 2 : 중간체 생성물 (B)의 합성

[0200] 1,4-다이브로모나프탈렌 50g (174.84 mmol), 카바졸 64.32g (384.66 mmol), 세슘카보네이트 125.33g (384.66 mmol), 팔라듐(II)아세테이트 3.92g (17.48 mmmol)을 톨루엔 1000 ml에 현탁시킨 후 트리-tert-부틸포스핀 12.11mL (24.97 mmol)를 넣고 12시간 동안 환류 교반하였다. 디클로로메탄과 증류수로 추출하고 유기층을 실리카겔 필터한다. 유기 용액을 제거하고 실리카겔 컬럼하여 중간체 생성물 (B)를 얻었다.

[0201] 분자식: C₃₄H₂₂N₂

[0202] 단계 3 : 중간체 생성물 (C)의 합성

[0203] 생성물 (B) 30g (65.42 mmol)을 DMF (300ml)에 녹인 용액에 NBS 12.81g (71.96mmol)와 DMF (100ml)혼합용액을 천천히 적가한 후 12시간 동안 교반하였다. 디클로로메탄과 증류수로 추출하고 유기층을 실리카겔 필터한다. 유기 용액을 제거하고 실리카겔 컬럼하여 중간체 생성물 (C) 를 얻었다.

[0204] 분자식: C₃₄H₂₁BrN₂

[0205] 단계 4 : 중간체 생성물 (D)의 합성

[0206] 생성물 (C) 30g (55.82 mmol), 1-브로모-4-보로닉엑시드페닐 16.82g (83.73 mmol), 포타슘카보네이트 15.43g (111.64 mmol), 테트라키스팔라듐 3.22g (2.79 mmmol)을 톨루엔 600 ml, 메탄올 200ml 증류수 200ml에 현탁시킨 후 12시간 동안 환류 교반하였다. 디클로로메탄과 증류수로 추출하고 유기층을 실리카겔 필터한다. 유기 용액을 제거하고 실리카겔 컬럼하여 중간체 생성물 (D) 를 얻었다.

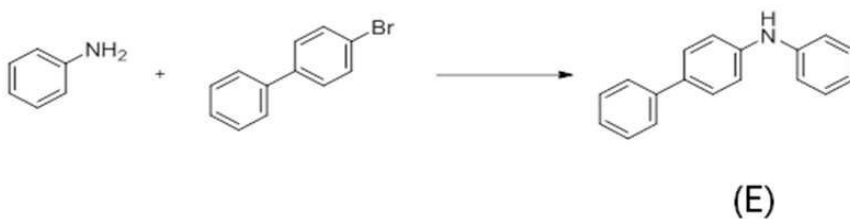
[0207] 분자식: C₄₀H₂₅BrN₂

[0208] 단계 5 : 최종 생성물 (화학식 10)의 합성

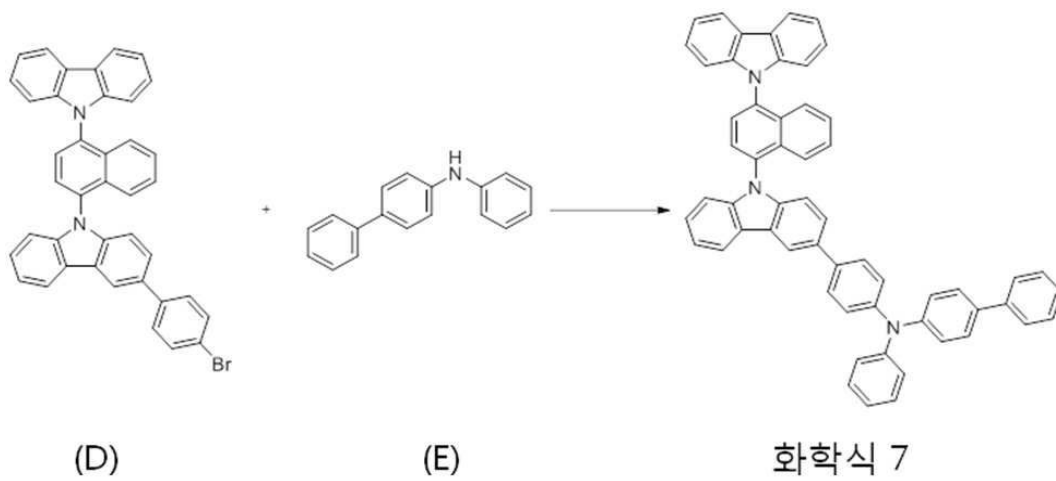
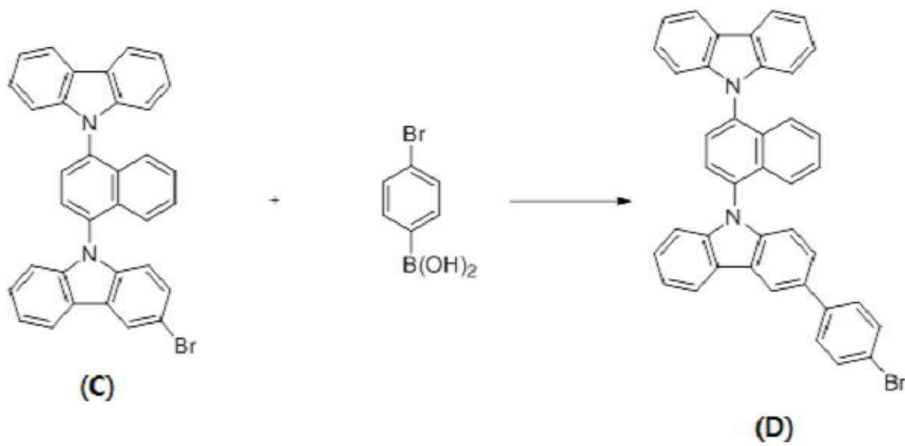
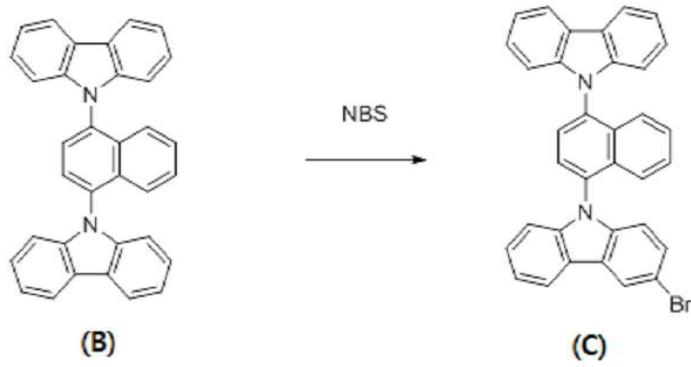
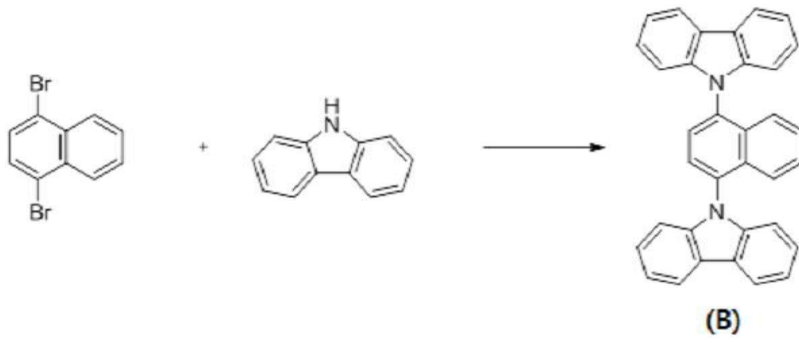
[0209] 생성물 (D) 25g (40.75 mmol), 생성물 (A) 17.67g (48.89 mmol), 소듐터트부톡사이드 11.75g (122.24 mmol), 팔라듐(II)아세테이트 0.91g (4.07 mmmol)을 자일렌 500 ml에 현탁시킨 후 트리-tert-부틸포스핀 3.95mL (8.15 mmol)를 넣고 12시간 동안 환류 교반하였다. 디클로로메탄과 증류수로 추출하고 유기층을 실리카겔 필터한다. 유기 용액을 제거하고 재결정하여 최종 생성물인 화학식 10으로 표시되는 화합물을 얻었다.

[0210] 분자식: C₆₇H₄₇N₃

[0211] 제조예 2: 화학식 7의 합성



[0212]



[0217] 단계 1 : 중간체 생성물 (E)의 합성

[0218] 4-아미노페닐 50g (536.86 mmol), 4-브로모바이페닐 113.78g (448.08 mmol), 세슘카보네이트 349.86g (1073.77

mmol), 팔라듐(II)아세테이트 10.96g (48.81 mmol)을 톨루엔 1000 ml에 현탁시킨 후 트리-tert-부틸포스핀 46.64mL (96.12 mmol)를 넣고 12시간 동안 환류 교반하였다. 디클로로메탄과 증류수로 추출하고 유기층을 실리카겔 필터한다. 유기 용액을 제거하고 실리카겔 컬럼하여 중간체 생성물 (E) 를 얻었다.

[0219] 분자식: C₁₈H₁₅N

[0220] 단계 2 : 중간체 생성물 (B)의 합성

[0221] 1,4-다이브로모나프탈렌 50g (174.84 mmol), 카바졸 64.32g (384.66 mmol), 세슘카보네이트 125.33g (384.66 mmol), 팔라듐(II)아세테이트 3.92g (17.48 mmol)을 톨루엔 1000 ml에 현탁시킨 후 트리-tert-부틸포스핀 12.11mL (24.97 mmol)를 넣고 12시간 동안 환류 교반하였다. 디클로로메탄과 증류수로 추출하고 유기층을 실리카겔 필터한다. 유기 용액을 제거하고 실리카겔 컬럼하여 중간체 생성물 (B) 를 얻었다.

[0222] 분자식: C₃₄H₂₂N₂

[0223] 단계 3 : 중간체 생성물 (C)의 합성

[0224] 생성물 (B) 30g (65.42 mmol)을 DMF (300ml)에 녹인 용액에 NBS 12.81g (71.96mmol)와 DMF (100ml)혼합용액을 천천히 적가한 후 12시간 동안 교반하였다. 디클로로메탄과 증류수로 추출하고 유기층을 실리카겔 필터한다. 유기 용액을 제거하고 실리카겔 컬럼하여 중간체 생성물 (C) 를 얻었다.

[0225] 분자식: C₃₄H₂₁BrN₂

[0226] 단계 4 : 중간체 생성물 (D)의 합성

[0227] 생성물 (C) 30g (55.82 mmol), 1-브로모-4-보로닉엑시드페닐 16.82g (83.73 mmol), 포타슘카보네이트 15.43g (111.64 mmol), 테트라키스팔라듐 3.22g (2.79 mmol)을 톨루엔 600 ml, 메탄올 200ml 증류수 200ml에 현탁시킨 후 12시간 동안 환류 교반하였다. 디클로로메탄과 증류수로 추출하고 유기층을 실리카겔 필터한다. 유기 용액을 제거하고 실리카겔 컬럼하여 중간체 생성물 (D) 를 얻었다.

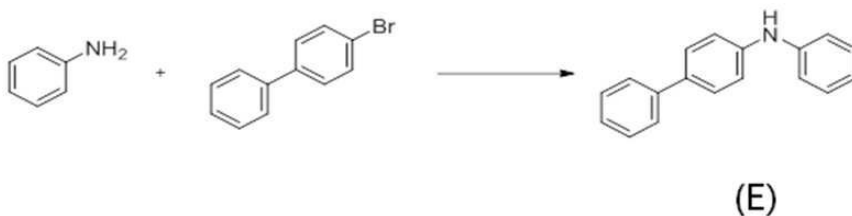
[0228] 분자식: C₄₀H₂₅BrN₂

[0229] 단계 5 : 최종 생성물 (화학식 7)의 합성

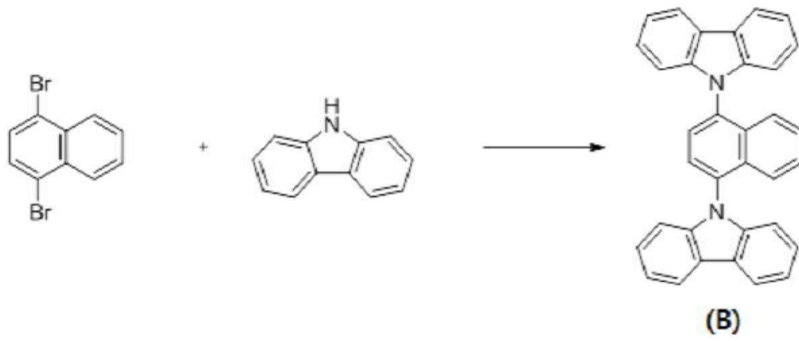
[0230] 생성물 (D) 25g (40.75 mmol), 생성물 (E) 11.99g (48.89 mmol), 소듐터트부톡사이드 11.75g (122.24 mmol), 팔라듐(II)아세테이트 0.91g (4.07 mmol)을 자일렌 500 ml에 현탁시킨 후 트리-tert-부틸포스핀 3.95mL (8.15 mmol)를 넣고 12시간 동안 환류 교반하였다. 디클로로메탄과 증류수로 추출하고 유기층을 실리카겔 필터한다. 유기 용액을 제거하고 재결정하여 최종 생성물인 화학식 7로 표시되는 화합물을 얻었다.

[0231] 분자식: C₅₈H₃₉N₃

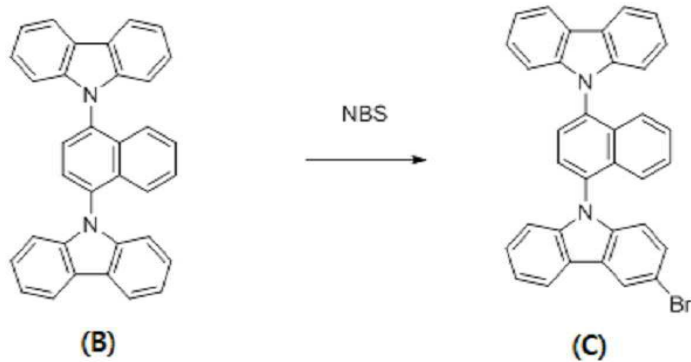
[0232] 제조예 3: 화학식 11의 합성



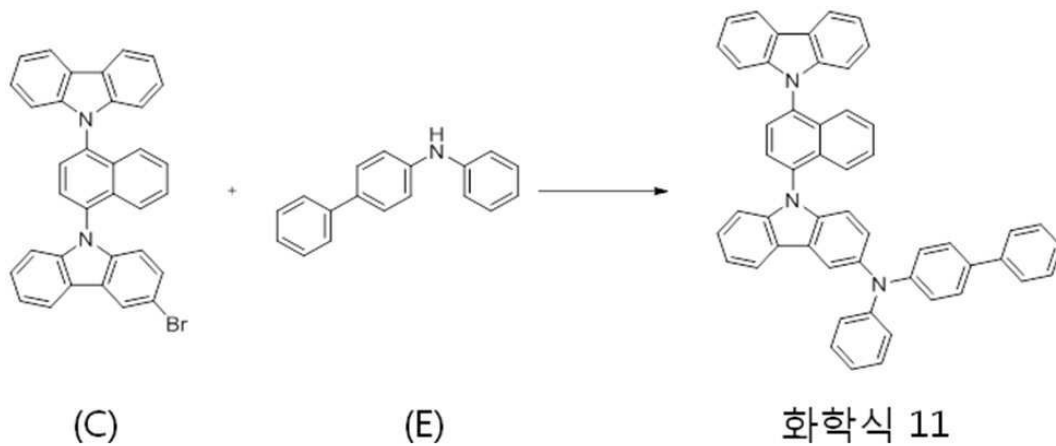
[0233]



[0234]



[0235]



[0236]

[0237] 단계 1 : 중간체 생성물 (E)의 합성

[0238] 4-아미노페닐 50g (536.86 mmol), 4-브로모바이페닐 113.78g (448.08 mmol), 세슘카보네이트 349.86g (1073.77 mmol), 팔라듐(II)아세테이트 10.96g (48.81 mmol)을 톨루엔 1000 ml에 현탁시킨 후 트리-tert-부틸포스핀 46.64mL (96.12 mmol)를 넣고 12시간 동안 환류 교반하였다. 디클로로메탄과 증류수로 추출하고 유기층을 실리카겔 필터한다. 유기 용액을 제거하고 실리카겔 컬럼하여 중간체 생성물 (E) 를 얻었다.

[0239] 분자식: $C_{18}H_{15}N$

[0240] 단계 2 : 중간체 생성물 (B)의 합성

[0241] 1,4-다이브로모나프탈렌 50g (174.84 mmol), 카바졸 64.32g (384.66 mmol), 세슘카보네이트 125.33g (384.66 mmol), 팔라듐(II)아세테이트 3.92g (17.48 mmol)을 톨루엔 1000 ml에 현탁시킨 후 트리-tert-부틸포스핀 12.11mL (24.97 mmol)를 넣고 12시간 동안 환류 교반하였다. 디클로로메탄과 증류수로 추출하고 유기층을 실리카겔 필터한다. 유기 용액을 제거하고 실리카겔 컬럼하여 중간체 생성물 (B) 를 얻었다.

[0242] 분자식: $C_{34}H_{29}N_2$

[0243] 단계 3 : 중간체 생성물 (C)의 합성

[0244] 생성물 (B) 30g (65.42 mmol)을 DMF (300ml)에 녹인 용액에 NBS 12.81g (71.96mmol)와 DMF (100ml)혼합용액을 천천히 적가한 후 12시간 동안 교반하였다. 디클로로메탄과 증류수로 추출하고 유기층을 실리카겔 필터한다. 유기 용액을 제거하고 실리카겔 컬럼하여 중간체 생성물 (C) 를 얻었다.

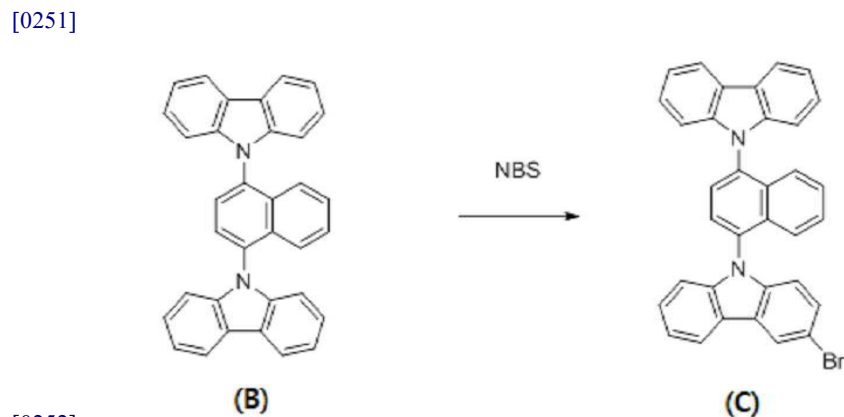
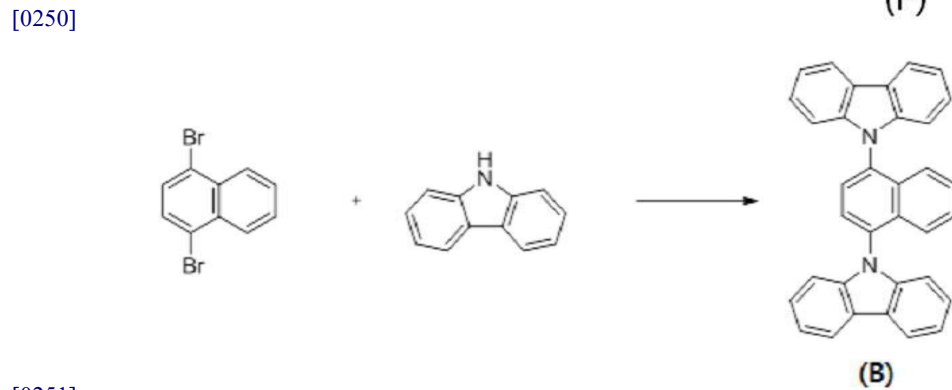
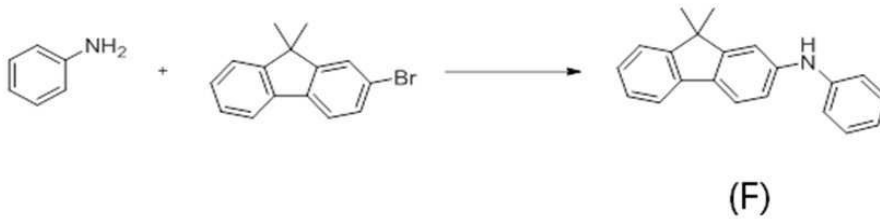
[0245] 분자식: $C_{34}H_{21}BrN_2$

[0246] 단계 4 : 최종 생성물 (화학식 11)의 합성

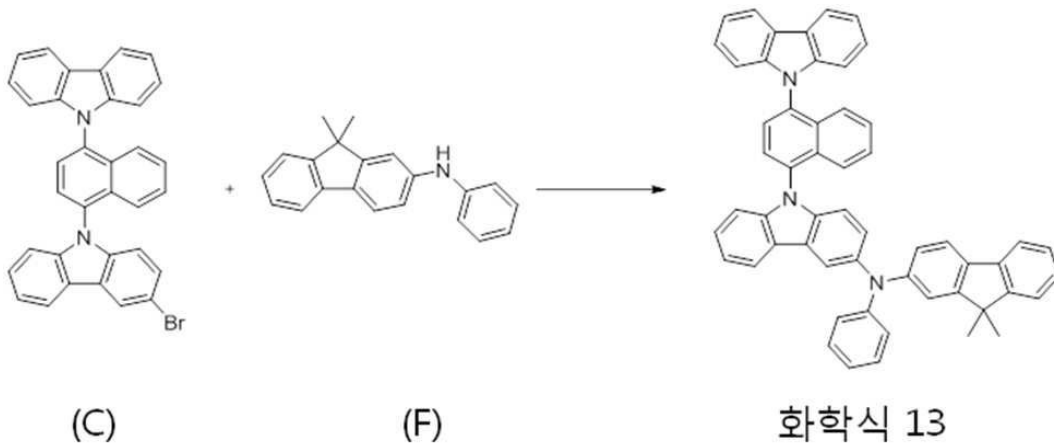
[0247] 생성물 (C) 25g (46.52 mmol), 생성물 (E) 13.69g (55.82 mmol), 소듐터트부톡사이드 13.41g (139.55 mmol), 팔라듐(II)아세테이트 1.04g (4.51 mmol)을 자일렌 500 ml에 현탁시킨 후 트리-tert-부틸포스핀 13.41mL (139.55 mmol)를 넣고 12시간 동안 환류 교반하였다. 디클로로메탄과 증류수로 추출하고 유기층을 실리카겔 필터한다. 유기 용액을 제거하고 재결정하여 최종 생성물인 화학식 11로 표시되는 화합물을 얻었다.

[0248] 분자식: $C_{52}H_{32}N_3$

[0249] 제조예 4: 화학식 13의 합성



[0252]



[0253]

[0254]

단계 1 : 중간체 생성물 (F)의 합성

[0255]

4-아미노페닐 50g (322.13 mmol), 2-브로모-9,9-다이메틸플루오렌 80g (292.85 mmol), 세슘카보네이트 209.91g (644.26 mmol), 팔라듐(II)아세테이트 6.57g (29.28 mmol)을 톨루엔 600 ml에 현탁시킨 후 트리-tert-부틸포스핀 28.42mL (58.57 mmol)를 넣고 12시간 동안 환류 교반하였다. 디클로로메탄과 증류수로 추출하고 유기층을 실리카겔 필터한다. 유기 용액을 제거하고 실리카겔 컬럼하여 중간체 생성물 (F) 를 얻었다.

[0256]

분자식: C₂₁H₁₉N

[0257]

단계 2 : 중간체 생성물 (B)의 합성

[0258]

1,4-다이브로모나프탈렌 50g (174.84 mmol), 카바졸 64.32g (384.66 mmol), 세슘카보네이트 125.33g (384.66 mmol), 팔라듐(II)아세테이트 3.92g (17.48 mmol)을 톨루엔 1000 ml에 현탁시킨 후 트리-tert-부틸포스핀 12.11mL (24.97 mmol)를 넣고 12시간 동안 환류 교반하였다. 디클로로메탄과 증류수로 추출하고 유기층을 실리카겔 필터한다. 유기 용액을 제거하고 실리카겔 컬럼하여 중간체 생성물 (B) 를 얻었다.

[0259]

분자식: C₃₄H₂₂N₂

[0260]

단계 3 : 중간체 생성물 (C)의 합성

[0261]

생성물 (B) 30g (65.42 mmol)을 DMF (300ml)에 녹인 용액에 NBS 12.81g (71.96mmol)와 DMF (100ml)혼합용액을 천천히 적가한 후 12시간 동안 교반하였다. 디클로로메탄과 증류수로 추출하고 유기층을 실리카겔 필터한다. 유기 용액을 제거하고 실리카겔 컬럼하여 중간체 생성물 (C) 를 얻었다.

[0262]

분자식: C₃₄H₂₁BrN₂

[0263]

단계 4 : 최종 생성물 (화학식 13)의 합성

[0264]

생성물 (C) 25g (46.52 mmol), 생성물 (F) 15.93g (55.82 mmol), 소듐터트부톡사이드 13.41g (139.55 mmol), 팔라듐(II)아세테이트 1.04g (4.51 mmol)을 자일렌 500 ml에 현탁시킨 후 트리-tert-부틸포스핀 4.51mL (9.30 mmol)를 넣고 12시간 동안 환류 교반하였다. 디클로로메탄과 증류수로 추출하고 유기층을 실리카겔 필터한다. 유기 용액을 제거하고 재결정하여 최종 생성물인 화학식 13으로 표시되는 화합물을 얻었다.

[0265]

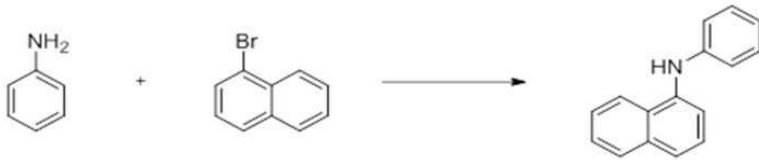
분자식: C₅₅H₃₉N₃

[0266] 제조예 5: 화학식 15의 합성



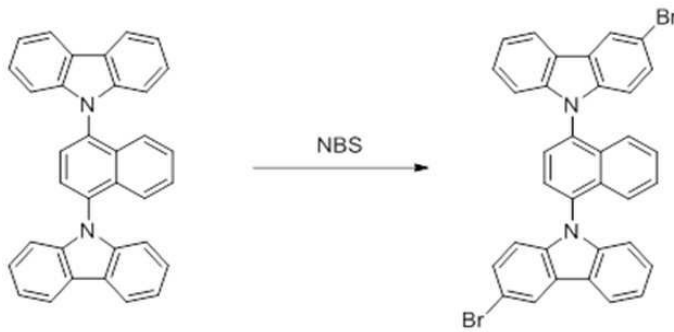
(E)

[0267]



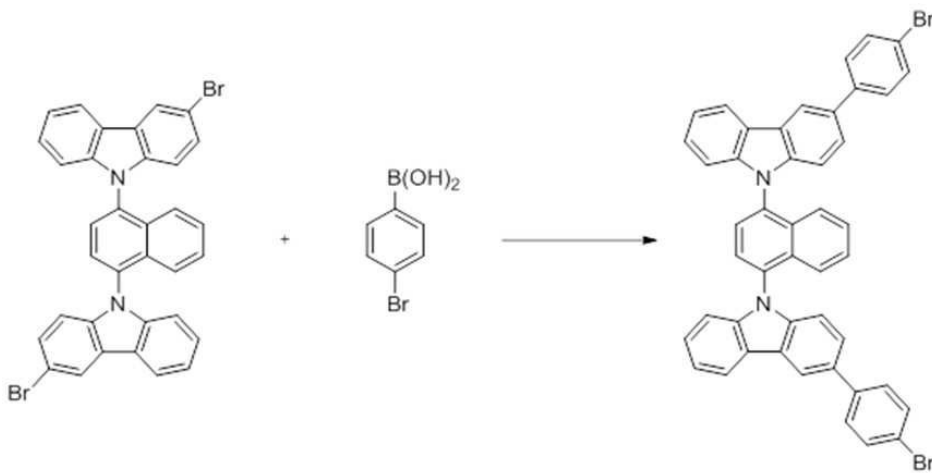
(G)

[0268]



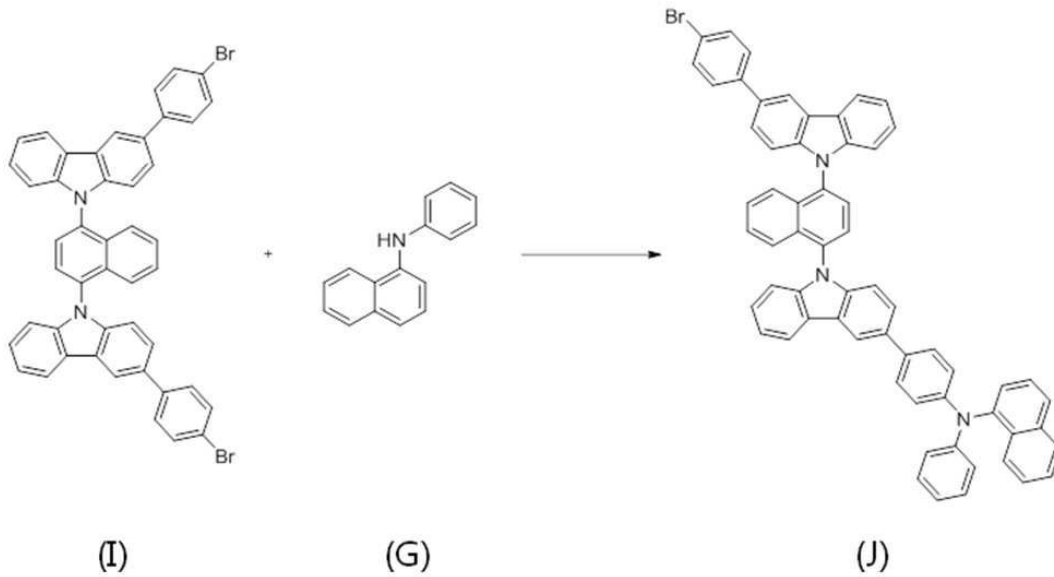
(H)

[0269]

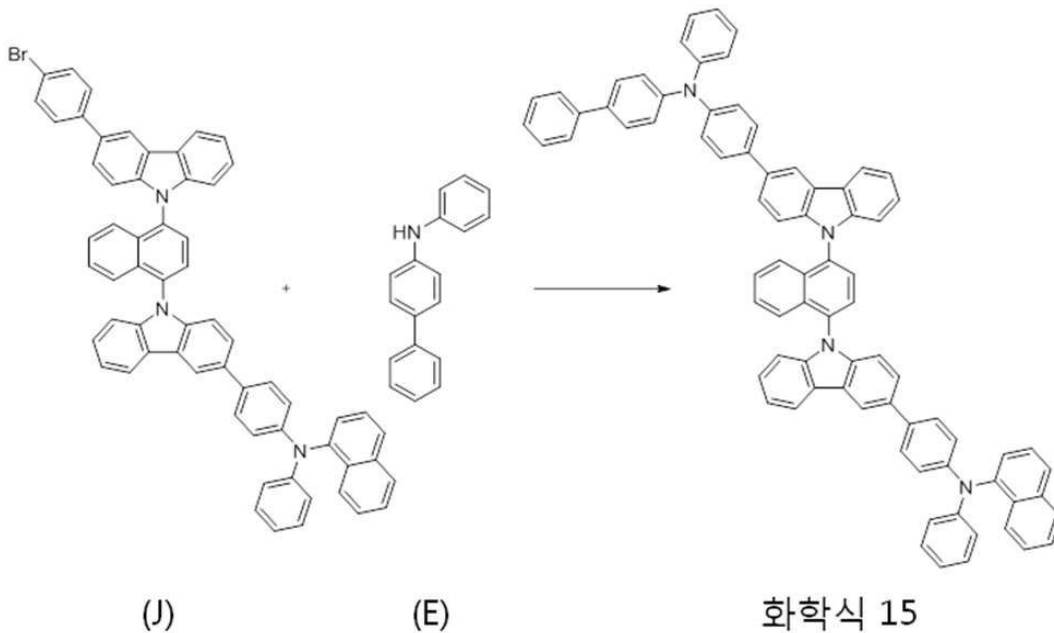


(I)

[0270]



[0271]



[0272]

[0273] 단계 1 : 중간체 생성물 (E)의 합성

[0274] 4-아미노페닐 50g (536.86 mmol), 4-브로모바이페닐 113.78g (448.08 mmol), 세슘카보네이트 349.86g (1073.77 mmol), 팔라듐(II)아세테이트 10.96g (48.81 mmol)을 톨루엔 1000 ml에 현탁시킨 후 트리-tert-부틸포스핀 46.64mL (96.12 mmol)를 넣고 12시간 동안 환류 교반하였다. 디클로로메탄과 증류수로 추출하고 유기층을 실리카겔 필터한다. 유기 용액을 제거하고 실리카겔 컬럼하여 중간체 생성물 (E) 를 얻었다.

[0275] 분자식: C₁₈H₁₅N

[0276] 단계 2 : 중간체 생성물 (G)의 합성

[0277] 4-아미노페닐 30g (322.13 mmol), 2-브로모나프탈렌 60.64g (292.85 mmol), 세슘카보네이트 309.91g (644.26 mmol), 팔라듐(II)아세테이트 6.57g (29.28 mmol)을 톨루엔 1000 ml에 현탁시킨 후 트리-tert-부틸포스핀 28.42mL (58.57 mmol)를 넣고 12시간 동안 환류 교반하였다. 디클로로메탄과 증류수로 추출하고 유기층을 실리카겔 필터한다. 유기 용액을 제거하고 실리카겔 컬럼하여 중간체 생성물 (E) 를 얻었다.

[0278] 분자식: C₁₆H₁₃N

[0279] 단계 3 : 중간체 생성물 (H)의 합성

[0280] 생성물 (B) 30g (65.42 mmol)을 DMF (300ml)에 녹인 용액에 NBS 15.62g (143.92mmol)와 DMF (100ml)혼합용액을 천천히 적가한 후 12시간 동안 교반하였다. 디클로로메탄과 증류수로 추출하고 유기층을 실리카겔 필터한다. 유기 용액을 제거하고 실리카겔 컬럼하여 중간체 생성물 (H) 를 얻었다.

[0281] 분자식: C₃₄H₂₀Br₂N₂

[0282] 단계 4 : 중간체 생성물 (I)의 합성

[0283] 생성물 (H) 30g (48.67 mmol), 1-브로모-4-보로닉엑시드페닐 14.66g (73.01 mmol), 포타슘카보네이트 13.45g (97.35 mmol), 테트라키스팔라듐 2.81g (2.43 mmmol)을 톨루엔 600 ml, 메탄올 200ml 증류수 200ml에 현탁시킨 후 12시간 동안 환류 교반하였다. 디클로로메탄과 증류수로 추출하고 유기층을 실리카겔 필터한다. 유기 용액을 제거하고 실리카겔 컬럼하여 중간체 생성물 (I) 를 얻었다.

[0284] 분자식: C₄₆H₂₈Br₂N₂

[0285] HRMS (70 eV, EI+): m/z 계산값(768.55), 측정값()

[0286] 단계 5 : 중간체 생성물 (J)의 합성

[0287] 생성물 (I) 30g (39.03 mmol), 생성물 (G) 7.7g (35.13 mmol), 세슘카보네이트 27.98g (85.88 mmol), 팔라듐 (II)아세테이트 0.88g (3.90 mmmol)을 톨루엔 600 ml에 현탁시킨 후 트리-tert-부틸포스핀 3.79mL (7.81 mmol)를 넣고 12시간 동안 환류 교반하였다. 디클로로메탄과 증류수로 추출하고 유기층을 실리카겔 필터한다. 유기 용액을 제거하고 실리카겔 컬럼하여 중간체 생성물 (E) 를 얻었다.

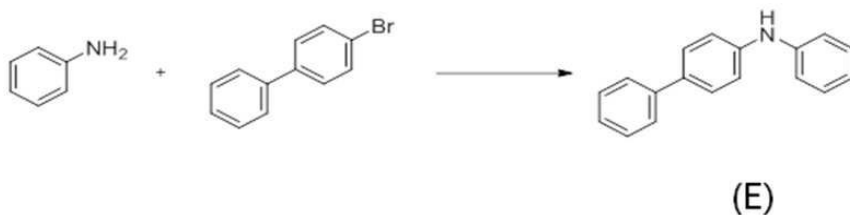
[0288] 분자식: C₆₂H₄₀BrN₃

[0289] 단계 6 : 최종 생성물 (화학식 15)의 합성

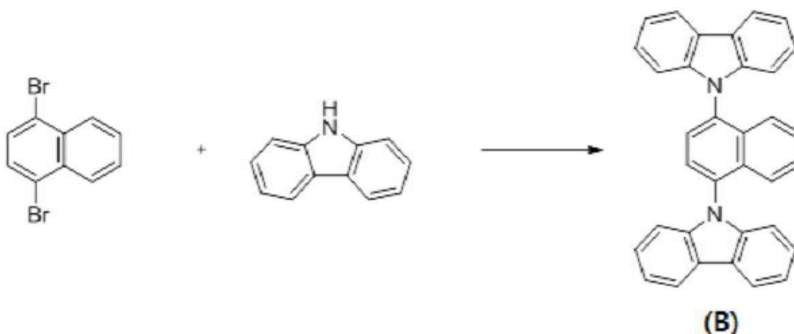
[0290] 생성물 (J) 25g (27.57 mmol), 생성물 (E) 8.12g (33.08 mmol), 소듐터트부톡사이드 7.95g (82.70 mmol), 팔라듐(II)아세테이트 0.62g (2.76 mmmol)을 자일렌 500 ml에 현탁시킨 후 트리-tert-부틸포스핀 2.67mL (5.51 mmol)를 넣고 12시간 동안 환류 교반하였다. 디클로로메탄과 증류수로 추출하고 유기층을 실리카겔 필터한다. 유기 용액을 제거하고 제결정하여 최종 생성물인 화학식 15로 표시되는 화합물을 얻었다.

[0291] 분자식: C₈₀H₅₄N₄

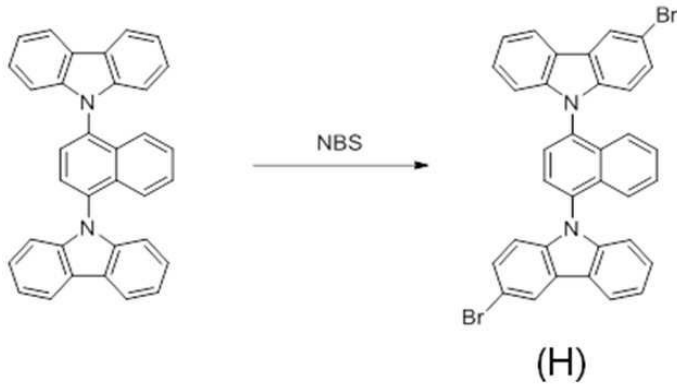
[0292] 제조예 6: 화학식 17의 합성



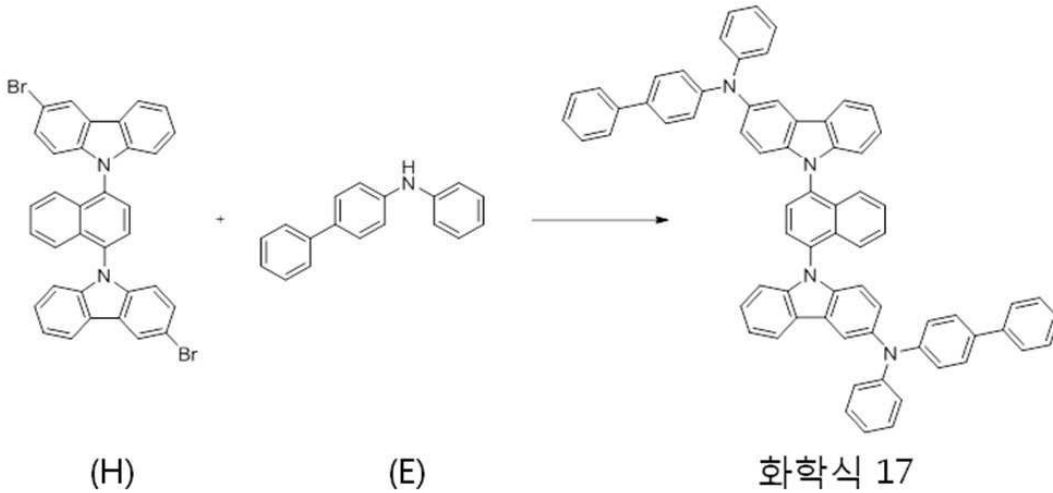
[0293]



[0294]



[0295]



[0296]

[0297] 단계 1 : 중간체 생성물 (E)의 합성

[0298] 4-아미노페닐 50g (536.86 mmol), 4-브로모바이페닐 113.78g (448.08 mmol), 세슘카보네이트 349.86g (1073.77 mmol), 팔라듐(II)아세테이트 10.96g (48.81 mmol)을 톨루엔 1000 ml에 현탁시킨 후 트리-tert-부틸포스핀 46.64mL (96.12 mmol)를 넣고 12시간 동안 환류 교반하였다. 디클로로메탄과 증류수로 추출하고 유기층을 실리카겔 필터한다. 유기 용액을 제거하고 실리카겔 컬럼하여 중간체 생성물 (E) 를 얻었다.

[0299] 분자식: C₁₈H₁₅N

[0300] 단계 2 : 중간체 생성물 (B)의 합성

[0301] 1,4-다이브로모나프탈렌 50g (174.84 mmol), 카바졸 64.32g (384.66 mmol), 세슘카보네이트 125.33g (384.66 mmol), 팔라듐(II)아세테이트 3.92g (17.48 mmol)을 톨루엔 1000 ml에 현탁시킨 후 트리-tert-부틸포스핀 12.11mL (24.97 mmol)를 넣고 12시간 동안 환류 교반하였다. 디클로로메탄과 증류수로 추출하고 유기층을 실리카겔 필터한다. 유기 용액을 제거하고 실리카겔 컬럼하여 중간체 생성물 (B) 를 얻었다.

[0302] 분자식: C₃₄H₂₂N₂

[0303] 단계 3 : 중간체 생성물 (H)의 합성

[0304] 생성물 (B) 30g (65.42 mmol)을 DMF (300ml)에 녹인 용액에 NBS 15.62g (143.92mmol)와 DMF (100ml)혼합용액을 천천히 적가한 후 12시간 동안 교반하였다. 디클로로메탄과 증류수로 추출하고 유기층을 실리카겔 필터한다. 유기 용액을 제거하고 실리카겔 컬럼하여 중간체 생성물 (H) 를 얻었다.

[0305] 분자식: C₃₄H₂₀Br₂N₂

[0306] 단계 4 : 최종 생성물 (화학식 17)의 합성

[0307] 생성물 (H) 25g (40.56 mmol), 생성물 (E) 11.94g (48.67 mmol), 소듐터트부톡사이드 13.62g (121.68 mmol),

팔라듐(II)아세테이트 0.91g (4.06 mmol)을 자일렌 500 ml에 현탁시킨 후 트리-tert-부틸포스핀 3.93mL (8.11 mmol)를 넣고 12시간 동안 환류 교반하였다. 디클로로메탄과 증류수로 추출하고 유기층을 실리카겔 필터한다. 유기 용액을 제거하고 재결정하여 최종 생성물인 화학식 17로 표시되는 화합물을 얻었다.

[0308] 분자식: $C_{70}H_{48}N_4$

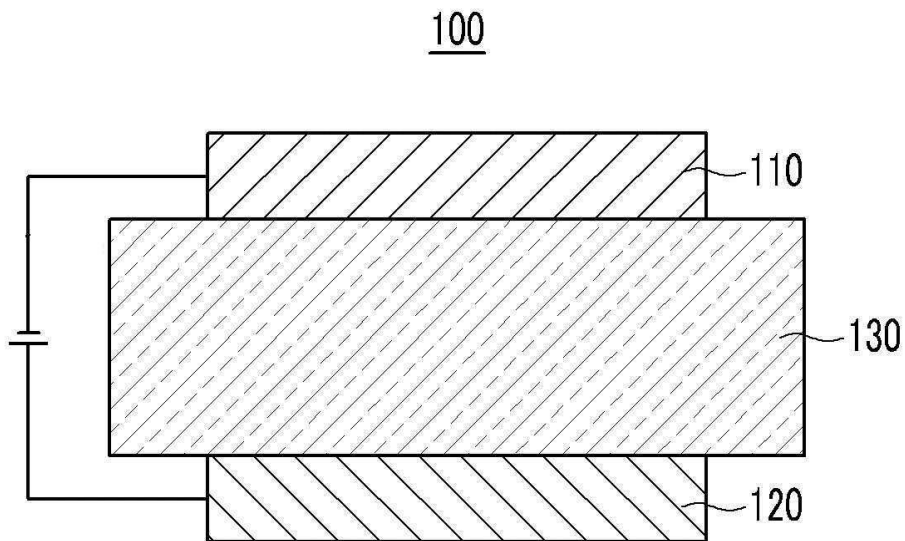
[0309] 본 발명은 상기 실시예들에 한정되는 것이 아니라 서로 다른 다양한 형태로 제조될 수 있으며, 본 발명이 속하는 기술분야에서 통상의 지식을 가진 자는 본 발명의 기술적 사상이나 필수적인 특징을 변경하지 않고서 다른 구체적인 형태로 실시될 수 있다는 것을 이해할 수 있을 것이다. 그러므로 이상에서 기술한 실시예들은 모든 면에서 예시적인 것이며 한정적이 아닌 것으로 이해해야만 한다.

부호의 설명

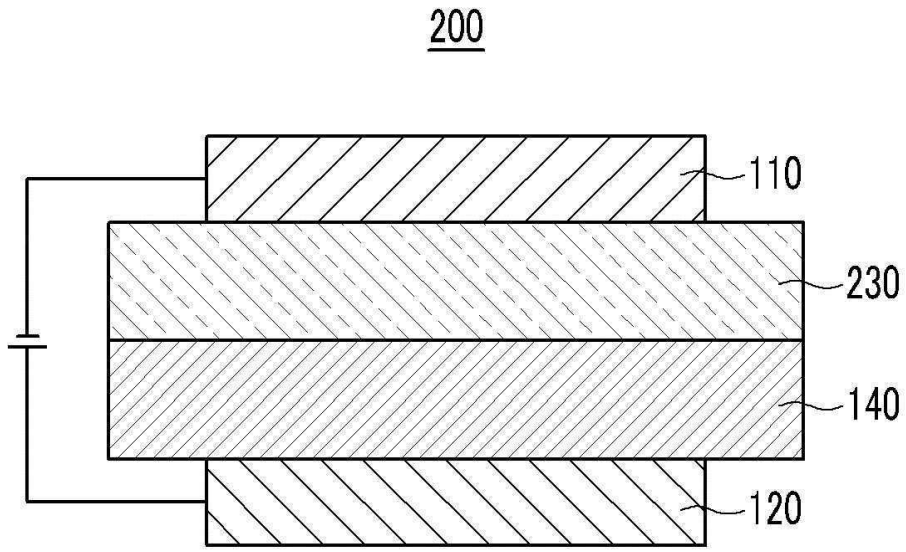
- [0310] 100, 200, 300, 400, 500 : 유기발광소자
 110 : 음극 120 : 양극
 130 : 발광층 140 : 정공 수송층
 150 : 전자 수송층 160 : 전자주입층
 170 : 정공주입층 230 : 전자수송층을 포함하는 발광층

도면

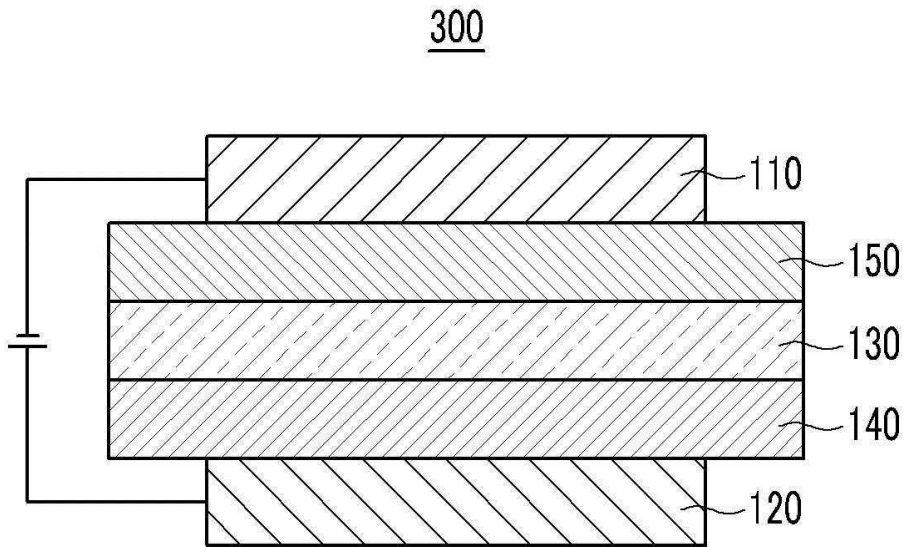
도면1



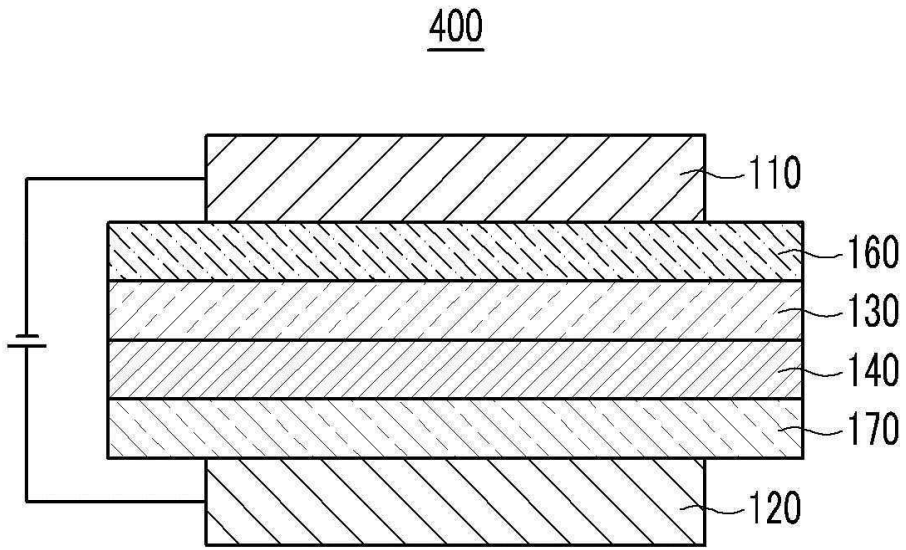
도면2



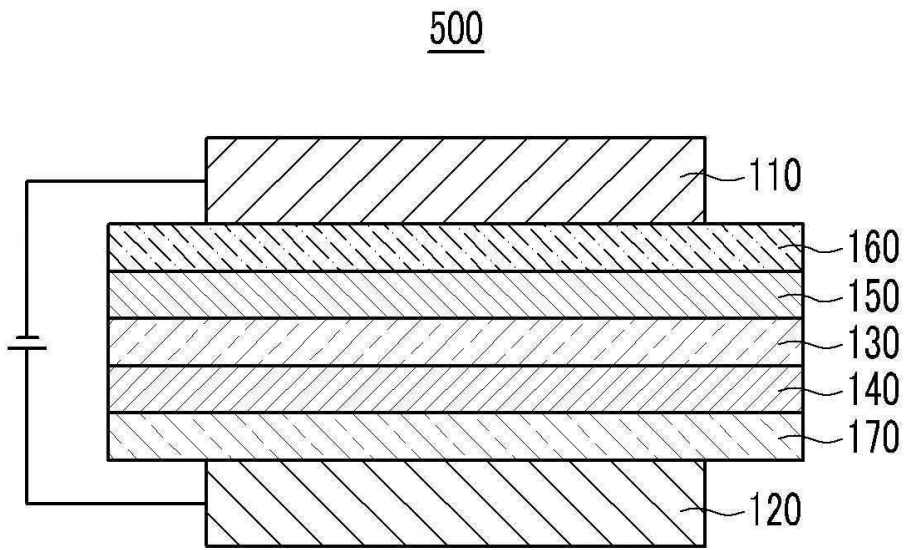
도면3



도면4



도면5



专利名称(译)	标题化合物，含有它的有机发光器件，以及包括有机发光器件的显示器件		
公开(公告)号	KR1020160078765A	公开(公告)日	2016-07-05
申请号	KR1020140188908	申请日	2014-12-24
[标]申请(专利权)人(译)	秀博瑞殷股份有限公司		
申请(专利权)人(译)	Soulbrain有限公司		
当前申请(专利权)人(译)	Soulbrain有限公司		
[标]发明人	PARK JAE KYO 박재교 SONG YONG SUNG 송용성 KIM JIN HEE 김진희 SHIN HWAN SEUNG 신환승 KIM JUNG SUN 김정선 KIM HYUN JIN 김현진 JANG MIN JUNG 장민정		
发明人	박재교 송용성 김진희 신환승 김정선 김현진 장민정		
IPC分类号	C09K11/06 H01L51/50 C07D209/82		
CPC分类号	C09K11/06 C07D209/82 H01L51/50 Y10S428/917		
外部链接	Espacenet		

摘要(译)

提供如下化学式1所示的用于有机发光装置的化合物作为用于有机发光装置的化合物，以及包括该化合物的有机发光装置和包括该有机发光装置的显示装置。[化学式1]图像的存在(特殊参考)(在化学式1中，每个取代基与说明书中定义的不同。)

