



(19) 대한민국특허청(KR)

(12) 등록특허공보(B1)

(45) 공고일자 2015년10월15일

(11) 등록번호 10-1559437

(24) 등록일자 2015년10월05일

- (51) 국제특허분류(Int. Cl.)
C09K 11/06 (2006.01) *H01L 51/50* (2006.01)
- (21) 출원번호 10-2012-0152373(분할)
- (22) 출원일자 2012년12월24일
 심사청구일자 2014년03월12일
- (65) 공개번호 10-2013-0016163
- (43) 공개일자 2013년02월14일
- (62) 원출원 특허 10-2011-0016493
 원출원일자 2011년02월24일
 심사청구일자 2011년02월24일
- (30) 우선권주장 1020110002607 2011년01월11일 대한민국(KR)
- (56) 선행기술조사문헌 KR1020100023783 A*
 *는 심사관에 의하여 인용된 문헌

- (73) 특허권자
 주식회사 엠비케이
 경기도 성남시 중원구 갈마치로 176 (상대원동)
- (72) 발명자
 이재성
 경기 성남시 중원구 갈마치로 176
 안도환
 경기 성남시 중원구 갈마치로 176
 (뒷면에 계속)
- (74) 대리인
 특허법인 대아

전체 청구항 수 : 총 2 항

심사관 : 오세주

(54) 발명의 명칭 유기발광화합물 및 이를 이용한 유기 광소자

(57) 요약

본 발명은 유기 광소자 및 이에 사용되는 유기 발광화합물에 관한 것으로서, 보다 상세하게는 우수한 발광효율, 발광 휘도, 색순도 및 발광 수명을 구현할 수 있는 유기 발광 소자와 이에 사용되는 유기 발광 화합물 또는 태양 광 발전용 광소자 및 이에 사용되는 광화합물에 관한 것으로, 특히 카바졸(Carbazole)계 유도체 및 이를 이용한 유기 광소자를 개발하여 전자수송층(ETM), 발광층(EML), 정공수송층(HTM) 등, 제1전극과 상기 제2전극 사이의 각종 유기막과 같이 다각적으로 쓰일 수 있는 물질을 개발하고, 효율 증가와 구동 전압의 감소와 같은 성능의 개선 및 OLED 재료로서의 능력을 극대화시킬 수 있다.

(72) 발명자

강지승

경기 성남시 중원구 갈마치로 176

박노길

경기 성남시 중원구 갈마치로 176

한근희

경기 성남시 중원구 갈마치로 176

안중복

경기 성남시 중원구 갈마치로 176

김복영

경기 용인시 수지구 상현로 30-9, 쌍용2차 218동
601호 (상현동, 상현마을쌍용2차C단지)

현승학

경기 성남시 중원구 갈마치로 176

명세서

청구범위

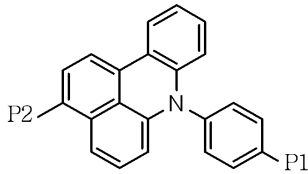
청구항 1

삭제

청구항 2

제1전극; 제2전극; 및 상기 제1전극과 상기 제2전극 사이에 적어도 한 층의 유기막을 포함하는 유기 광소자로서, 상기 유기막이 하기 화학식 F3의 유기 발광화합물을 포함하고,

<화학식 F3>



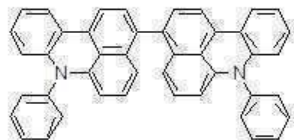
상기 화학식 F3에서

P1은 H, D, F, C6~C40의 아릴기, C5~C40의 헤테로아릴기, C6~C40의 아릴옥시기, C6~C40의 아릴아미노기, C12~C40의 디아릴아미노기 및 C7~C40의 아릴알킬기로 이루어진 군에서 선택되고,

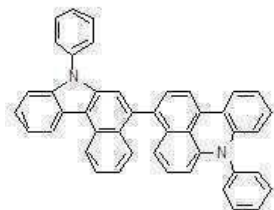
P2는 H, D, F, C6~C40의 아릴기, C5~C40의 헤테로아릴기, C6~C40의 아릴옥시기, C6~C40의 아릴아미노기, C12~C40의 디아릴아미노기, C7~C40의 아릴알킬기로 이루어진 군에서 선택되거나; 또는 상기 P2가 연결된 탄소 원자와 인접하는 탄소 원자와 연결되어 축합(fused) 지방족 고리, 축합 방향족 고리, 축합 헤테로지방족 고리 또는 축합 헤테로방향족 고리를 형성할 수 있는 기이고,

상기 유기 발광화합물이 하기 화학식 55, 57-60, 69-71, 78-81, 83, 97-107, 127, 129, 131, 138 또는 151로 표시되는 것을 특징으로 하는 유기 광소자.

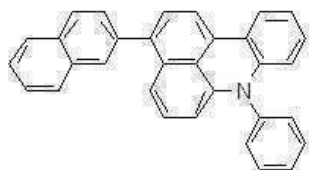
55



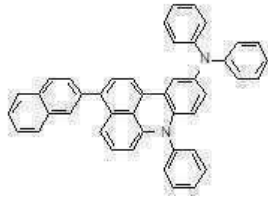
57



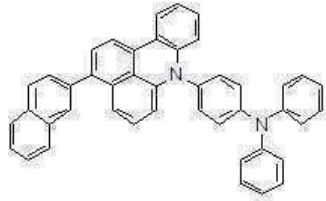
58



59



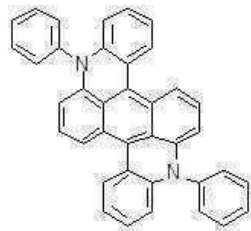
60



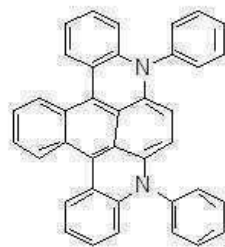
69



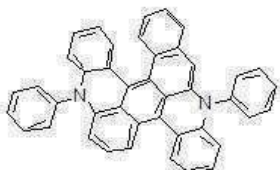
70



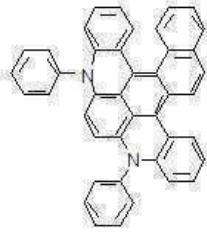
71



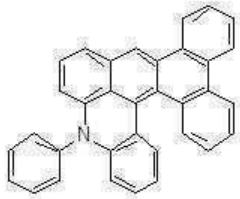
78



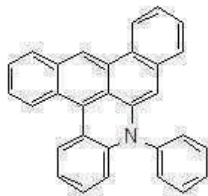
79



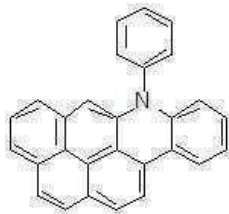
80



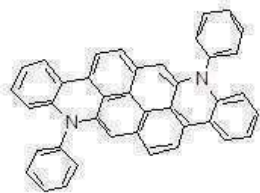
81



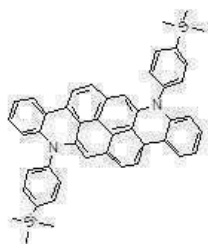
83



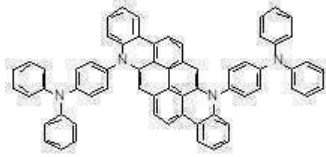
97



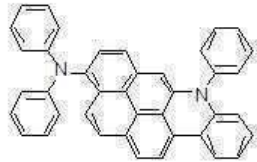
98



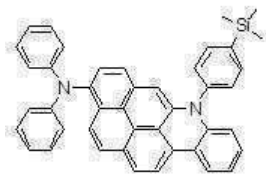
99



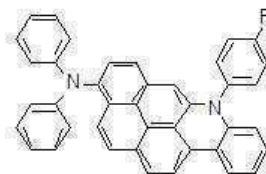
100



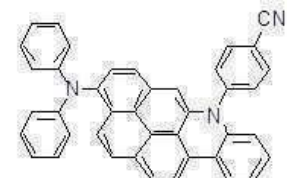
101



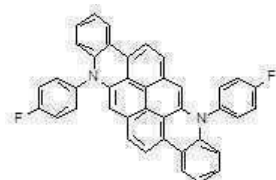
102



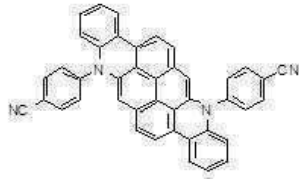
103



104



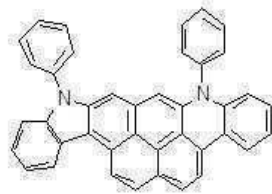
105



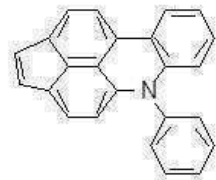
106



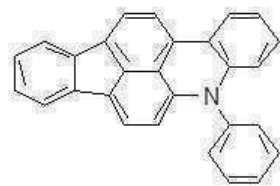
107



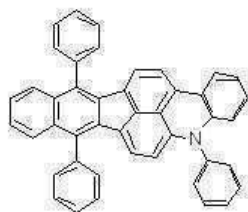
127



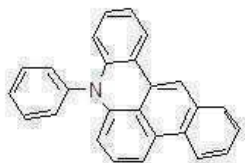
129



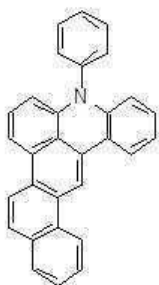
131



138



151



청구항 3

삭제

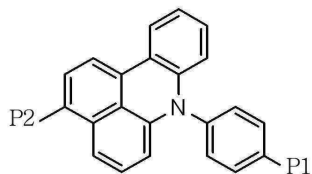
청구항 4

삭제

청구항 5

하기 화학식 F3의 유기 발광화합물이고,

<화학식 F3>



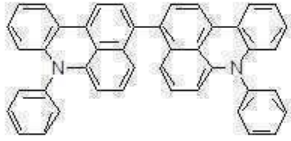
상기 화학식 F3에서

P1은 H, D, F, C6~C40의 아릴기, C5~C40의 헤테로아릴기, C6~C40의 아릴옥시기, C6~C40의 아릴아미노기, C12~C40의 디아릴아미노기 및 C7~C40의 아릴알킬기로 이루어진 군에서 선택되고,

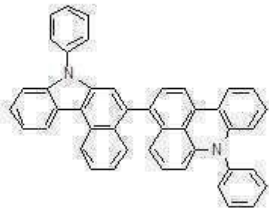
P2는 H, D, F, C6~C40의 아릴기, C5~C40의 헤테로아릴기, C6~C40의 아릴옥시기, C6~C40의 아릴아미노기, C12~C40의 디아릴아미노기, C7~C40의 아릴알킬기로 이루어진 군에서 선택되거나; 또는 상기 P2가 연결된 탄소 원자와 인접하는 탄소 원자와 연결되어 축합(fused) 지방족 고리, 축합 방향족 고리, 축합 헤테로지방족 고리 또는 축합 헤테로방향족 고리를 형성할 수 있는 기이고,

상기 유기 발광화합물이 하기 화학식 55, 57-60, 69-71, 78-81, 83, 97-107, 127, 129, 131, 138 또는 151로 표시되는 것을 특징으로 하는 유기 발광화합물.

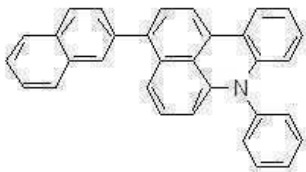
55



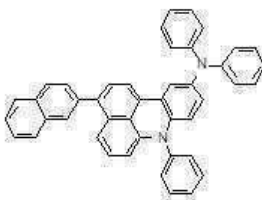
57



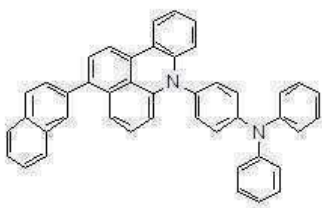
58



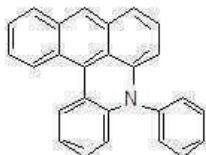
59



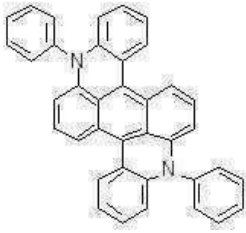
60



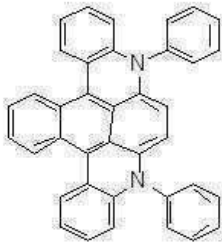
69



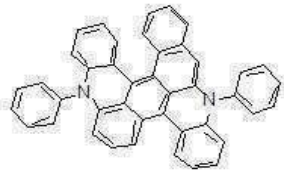
70



71



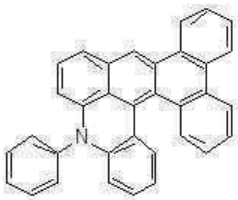
78



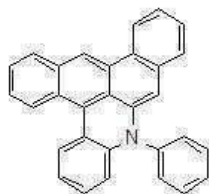
79



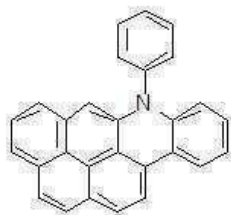
80



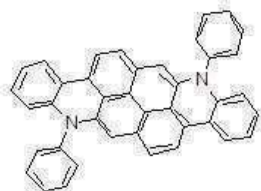
81



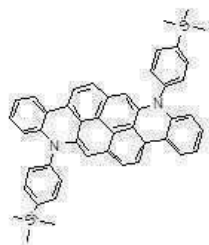
83



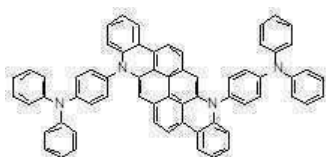
97



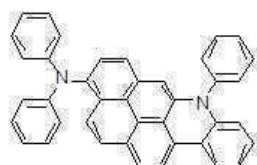
98



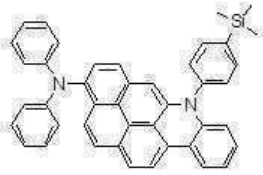
99



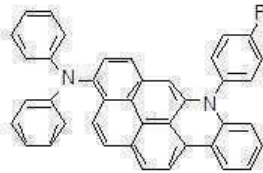
100



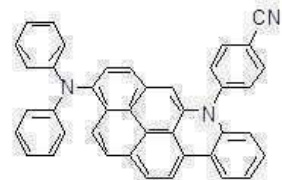
101



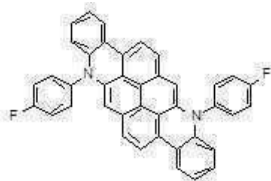
102



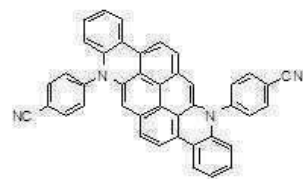
103



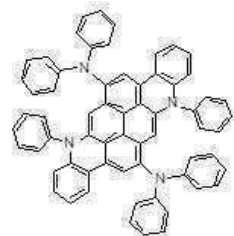
104



105



106



청구항 6

삭제

발명의 설명

기술 분야

[0001] 본 발명은 유기발광화합물, 특히 카바졸(Carbazole)계 유도체 및 이를 이용한 유기 광소자에 관한 것으로서, 보다 상세하게는 우수한 발광효율, 발광 휘도, 색순도 및 발광 수명을 구현할 수 있는 유기 발광 소자와 이에 사용되는 유기 발광 화합물 또는 태양광 발전용 광소자 및 이에 사용되는 광화합물에 관한 것이다.

배경 기술

[0002] 일반적으로 유기 발광 현상이란 유기 물질에 전기에너지를 가했을 때 빛이 나타나는 현상을 말한다. 즉, 양극(anode)과 음극(cathode) 사이에 유기물층을 위치시켰을 때 두 전극 사이에 전압을 걸어주게 되면 양극에서는 정공이, 음극에서는 전자가 유기물층에 주입되게 된다. 주입된 정공과 전자가 만났을 때 엑시톤(exciton)이 형성되고, 이 엑시톤이 다시 바닥상태로 떨어질 때 빛이 나게 된다.

[0003] 유기 전계 발광 소자에 대한 연구는 1950년대 Bernanose가 유기 색소를 함유한 고분자 박막에 높은 교류 전압을 인가 하여 유기 박막으로부터 발광을 관측하였으며, 1965년 안트라센 단결정에 전류를 인가하여 일중항 여기자를 발생시켜 청색 형광을 얻었다.

[0004] 유기 전계 발광 소자를 효율적으로 만들기 위한 한 방법으로서 소자 내의 유기물층을 단층 대신 다층 구조로 제조하는 연구가 진행되어 왔다. 1987년 탕(Tang)에 의하여 정공층과 발광층의 기능층으로 나눈 적층구조의 유기 전계 발광 소자가 제시 되었으며, 현재 사용되는 대부분의 유기 전계 발광 소자는 기관, 양극, 양극으로 정공을 받아들이는 정공 주입층, 정공을 전달하는 정공 전달층, 정공과 전자가 재결합하여 빛을 내는 발광층, 전자를

[0005] 전달하는 전자 전달층, 음극으로부터 전자를 받아들이는 전자 주입층 및 음극으로 이루어져 있다. 이렇게 유기 전계 발광 소자를 다층으로 제작하는 이유는 정공과 전자의 이동속도가 상이하며, 따라서 적절한 정공 주입층 및 전달층, 전자 전달층 및 전자 주입층을 만들어 주면 정공과 전자가 효과적으로 전달될 수 있으며, 소자 내 정공과 전자의 균형이 이루어져 발광 효율을 높일 수 있기 때문이다.

[0006] 전자 수송의 재료에 관한 최초의 보고는 옥사디아졸 유도체(PBD)를 들 수 있다. 이후 트리아졸 유도체(TAZ) 및 페난스로린 유도체(BCP)가 전자 수송성을 나타낸다고 보고 되었다. 전자 수송층은 유기 단분자 물질로는 전자에 대한 안정도와 전자 이동 속도가 상대적으로 우수한 유기 금속착체들이 좋은 후보들이며, 안정성이 우수하고 전자 친화도가 큰 Alq3가 가장 우수한 것으로 보고 되었으며, 현재에도 가장 기본적으로 사용되고 있다. 또한, 중

[0007] 래에 공지된 전자 수송용 물질로는 산요(Sanyo)사에서 발표한 플라본(flavon)유도체 또는 치소(Chisso)사의 게르마늄 및 실리콘시클로펜타디엔 유도체 등이 알려져 있다. (일본공개특허공보 제1998-017860호, 일본공개특허공보 제1999-087067호).

[0008] 또한, 종래의 전자 주입 및 수송층용 물질로는 이미다졸기, 옥사졸기, 티아졸기를 가진 유기 단분자 물질들이 많이 보고되었다. 그러나 이러한 물질들이 전자수송용 물질로 보고되기 이전에 모토롤라(Motorola)사의 EU0700917 A2에 이러한 물질들의 금속착체 화합물들이 유기 발광 소자의 청색 발광층 또는 청록색 발광층에 적용된 것이 이미 보고되었다.

[0009] 1996년도에 코닥사에서 발표하고 미국 특허 제5,645,948호에 기재된 TPBI는 이미다졸기를 가진 대표적인 전자수송층용 물질로 알려져 있으며, 그 구조는 벤젠의 1,3,5 치환 위치에 세 개의 N-페닐 벤즈이미다졸기를 함유하고 기능적으로는 전자를 전달하는 능력뿐 아니라 발광층에서 넘어오는 정공을 차단하는 기능도 있으나, 실제 소자에 적용하기에는 열적 안정성이 낮은 문제점을 가지고 있다.

[0010] 또한, 일본 공개특허공보 평11-345686호에 개시된 전자수송용 물질들은 옥사졸기, 티아졸기를 함유하고 있고 발광층에도 적용할 수 있다고 보고하고 있으나, 구동전압, 휘도 및 소자의 수명 측면에서 실용화에 도달하지 못하고 있다.

[0011] 따라서, 상기와 같은 종래 기술의 문제점을 극복하고 유기 전계 발광 소자의 특성을 더욱 향상시키기 위하여, 유기 전계 발광 소자에서 전자 수송용 물질로 사용될 수 있는 보다 안정적이고 효율적인 재료에 대한 개발이 계속

요구된다.

발명의 내용

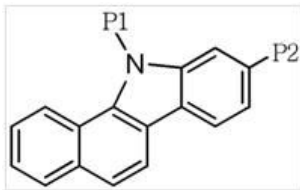
해결하려는 과제

- [0013] 본 발명이 이루고자 하는 첫 번째 기술적 과제는 유기 광소자, 특히 유기 전계 발광소자에 적용할 수 있는 새로운 유기 발광화합물을 제공하는 것이다.
- [0014] 본 발명이 이루고자 하는 두 번째 기술적 과제는 상기 신규 화합물을 포함하여 구동전압이 낮고, 발광효율, 휘도, 색순도, 열적 안정성 및 수명이 향상된 유기 전계 발광 소자 및 태양광 발전을 위한 유기 광소자를 제공하는 것이다.

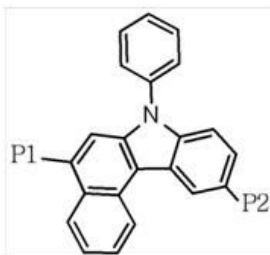
과제의 해결 수단

- [0015] 본 발명에 따른 유기 발광화합물 및 이를 이용한 유기 광소자는 하기 화학식 F1a, F2, F3, F4a 또는 F4b로 표시되는 유기 발광화합물을 기초로 한다:

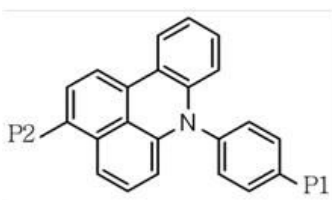
- [0016] <화학식 F1a>



- [0017]
- [0018] <화학식 F2>

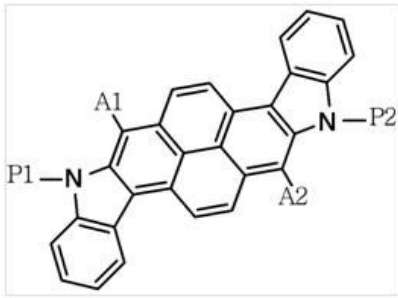


- [0019]
- [0020] <화학식 F3>



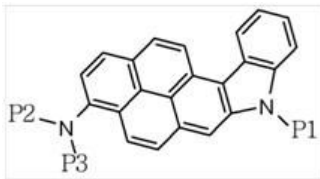
- [0021]

[0022] <화학식 F4a>



[0023]

[0024] <화학식 F4b>



[0025]

[0026] 상기 화학식에서

[0027] P1, P2 및 P3는 각각 독립적으로

[0028] C5~C40의 아릴기, C5~C40의 헤테로아릴기, C5~C40의 아릴옥시기, C5~C40의 아릴아미노기, C5~C40의 디아릴아미노기, C6~C40의 아릴알킬기로 이루어진 군에서 선택되거나 또는 인접하는 기와 축합(fused) 지방족 고리, 축합 방향족 고리, 축합 헤테로지방족 고리 또는 축합 헤테로방향족 고리를 형성하는 기이고,

[0029] A1 및 A2는 각각 독립적으로

[0030] H, D, F, C1~C40의 알킬기, C5~C40의 아릴기, C5~C40의 헤테로아릴기, C5~C40의 아릴옥시기, C1~C40의 알킬옥시기, C5~C40의 아릴아미노기, C5~C40의 디아릴아미노기, C6~C40의 아릴알킬기, C3~C40의 시클로알킬기 및 C3~C40의 헤테로시클로알킬기로 이루어진 군에서 선택되거나 또는 인접하는 기와 축합(fused) 지방족 고리, 축합 방향족 고리, 축합 헤테로지방족 고리 또는 축합 헤테로방향족 고리를 형성하는 기이다.

[0031] 또 본 발명에 따른 유기 발광화합물 및 이를 이용한 유기 광소자는 하기 화학식 1 내지 200의 유기 발광화합물을 기초로 한다:

발명의 효과

[0032] 본 발명에 따른 유기 광소자는 높은 발광 효율, 높은 발광 휘도, 높은 색순도 및 현저히 향상된 발광 수명을 제공한다.

[0033] 아울러 본 발명은 이들 유기 발광 소자 및 유기 발광 화합물, 또는 태양광 발전을 위한 유기 광소자 및 광화합물을 제공한다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

[0034] 이하 본 발명을 상세히 설명하도록 한다.

[0035] 본 발명은 다양한 변경을 가할 수 있고 여러 가지 형태를 가질 수 있는 바, 구현예(態樣, aspect)(또는 실시예)들을 본문에 상세하게 설명하고자 한다. 그러나 이는 본 발명을 특정한 개시 형태에 대해 한정하려는 것이 아니며, 본 발명의 사상 및 기술범위에 포함되는 모든 변경, 균등물 내지 대체물을 포함하는 것으로 이해되어야 한다.

[0036] 본 명세서에서 사용한 용어는 단지 특정한 구현예(태양, 態樣, aspect)(또는 실시예)를 설명하기 위해 사용된 것으로, 본 발명을 한정하려는 의도가 아니다. 단수의 표현은 문맥상 명백하게 다르게 뜻하지 않는 한, 복수의 표현을 포함한다. 본 출원에서, ~포함하다~ 또는 ~이루어진다~ 등의 용어는 명세서 상에 기재된 특징, 숫자, 단계, 동작, 구성요소, 부분품 또는 이들을 조합한 것이 존재함을 지정하려는 것이지, 하나 또는 그 이상의 다른 특징들이나 숫자, 단계, 동작, 구성요소, 부분품 또는 이들을 조합한 것들의 존재 또는 부가 가능성을 미리 배제하지 않는 것으로 이해되어야 한다.

[0037] 다르게 정의되지 않는 한, 기술적이거나 과학적인 용어를 포함해서 여기서 사용되는 모든 용어들은 본 발명이 속하는 기술 분야에서 통상의 지식을 가진 자에 의해 일반적으로 이해되는 것과 동일한 의미를 가지고 있다. 일반적으로 사용되는 사전에 정의되어 있는 것과 같은 용어들은 관련 기술의 문맥 상 가지는 의미와 일치하는 의미를 가지는 것으로 해석되어야 하며, 본 출원에서 명백하게 정의하지 않는 한, 이상적이거나 과도하게 형식적인 의미로 해석되지 않는다.

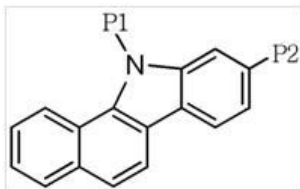
[0038] 본 발명은 카바졸(Carbazole)계 유도체를 개발하여 전자수송층(ETM), 발광층(EML), 정공수송층(HTM) 등, 제1전극과 상기 제2전극 사이의 각종 유기막과 같이 다각적으로 쓰일 수 있는 물질을 제시하고, 효율 증가와 구동 전압의 감소와 같은 성능의 개선 및 OLED 재료로서의 능력을 극대화시킨 물질을 개발하고자 한다.

[0039] 본 명세서에서 유기 발광화합물은 유기 광소자에 사용되는 화합물이라는 의미로서 반드시 발광이 가능한 화합물로 그 범위가 한정되지 않으며, 그 적용 범위도 유기 발광층에 한정되지 않고, 전하 주입층 및 전하 수송층 등 유기 광소자를 구성하는 어느 층에나 모두 사용될 수 있다.

[0040] 또 본 명세서에서 '광화합물' 및 '광소자'라는 용어는 사전적인 또는 관습적인 정의와 무관하게 본 발명이 유기 발광 소자 및 태양광 발전을 위한 소자에 모두 적용되는 경우를 고려하여, 이를 포괄하고자 선정한 용어이다.

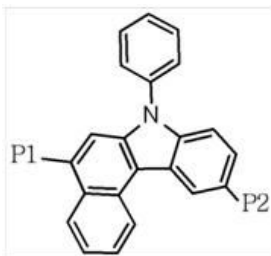
[0041] 본 발명의 제 1태양에 따르는 유기 광소자는, 제1전극; 제2전극; 및 상기 제1전극과 상기 제2전극 사이에 적어도 한 층의 유기막을 포함하는 유기 광소자로서, 상기 유기막이 하기 화학식 F1a, F2, F3, F4a 또는 F4b의 유기 발광화합물을 포함한다:

[0042] <화학식 F1a>



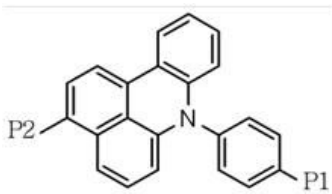
[0043]

[0044] <화학식 F2>



[0045]

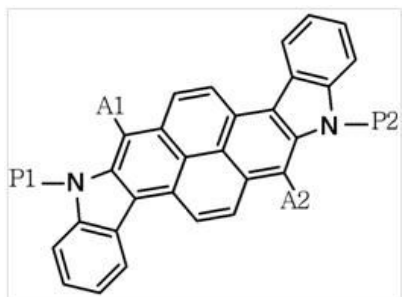
[0046] <화학식 F3>



[0047]

[0048]

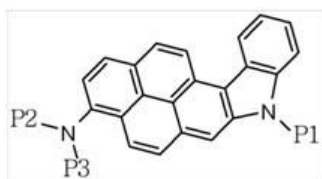
<화학식 F4a>



[0049]

[0050]

<화학식 F4b>



[0051]

[0052]

상기 화학식에서

[0053]

P1, P2 및 P3는 각각 독립적으로

[0054]

C5~C40의 아릴기, C5~C40의 헤테로아릴기, C5~C40의 아릴옥시기, C5~C40의 아릴아미노기, C5~C40의 디아릴아미노기, C6~C40의 아릴알킬기로 이루어진 군에서 선택되거나 또는 인접하는 기와 축합(fused) 지방족 고리, 축합 방향족 고리, 축합 헤테로지방족 고리 또는 축합 헤테로방향족 고리를 형성하는 기이고,

[0055]

A1 및 A2는 각각 독립적으로

[0056]

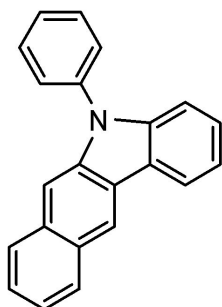
H, D, F, C1~C40의 알킬기, C5~C40의 아릴기, C5~C40의 헤테로아릴기, C5~C40의 아릴옥시기, C1~C40의 알킬옥시기, C5~C40의 아릴아미노기, C5~C40의 디아릴아미노기, C6~C40의 아릴알킬기, C3~C40의 시클로알킬기 및 C3~C40의 헤테로시클로알킬기로 이루어진 군에서 선택되거나 또는 인접하는 기와 축합(fused) 지방족 고리, 축합 방향족 고리, 축합 헤테로지방족 고리 또는 축합 헤테로방향족 고리를 형성하는 기이다.

[0057]

또 본 발명의 제 1태양에 따르는 유기 광소자는, 제1전극; 제2전극; 및 상기 제1전극과 상기 제2전극 사이에 적어도 한 층의 유기막을 포함하는 유기 광소자로서, 상기 유기막이 하기 화학식 F1b의 유기 발광화합물을 포함한다:

[0058]

<화학식 F1b>



[0059]

[0060]

본 발명의 발명자는 상기 화학식 F1a, F2, F3, F4a 또는 F4b의 유기 발광화합물의 치환기에서 P1, P2, P3 및

A1, A2를 선택 특정한,

- [0061] 다양한 유도체를 개발하여 전자수송층(ETM), 발광층(EML), 정공수송층(HTM) 등, 제1전극과 상기 제2전극 사이의 각종 유기막으로 사용될 수 있는 유기 발광화합물 및
- [0062] 이를 이용한 유기 광소자를 개발하고,
- [0063] 유기발광소자로 활용될 경우 효율 증가와 구동 전압의 감소와 같은 성능의 개선 및 OLED 재료로서의 능력을 극대화시킬 수 있고, 특히 발광 수명이 현저히 향상됨을 발견하였으며,
- [0064] 이를 태양광 발전을 위한 광소자 및 광화합물 분야에 응용 적용할 경우 우수한 발전 효율을 얻을 수 있을 것으로 기대된다.
- [0065] 이하에서는 화학식 F1a, F1b, F2, F3, F4a 또는 F4b의 유기 발광화합물 또는 하기 화학식 1 내지 200의 유기 발광화합물을 유기 발광 소자와 관련하여 설명할 것이나, 이에 의하여 본 발명이 제한 해석 되어서는 안 된다.
- [0066] 화학식 F1a, F1b, F2, F3, F4a 또는 F4b의 유기 발광화합물 또는 하기 화학식 1 내지 200의 유기 발광화합물은 유기 광소자 중 제1전극과 제2전극 사이에 개재된 유기막을 이루는 물질로 적합하다. 화학식 F1a, F1b, F2, F3, F4a 또는 F4b의 유기 발광화합물 또는 하기 화학식 1 내지 200의 유기 발광화합물은 유기 발광 소자의 유기막, 특히 정공수송층, 정공주입층 또는 발광층에 사용되기 적합하며 호스트 재료뿐만 아니라 도판트 재료로서도 사용된다. 상기 화학식 F1a, F2, F3, F4a 또는 F4b의 유기 발광화합물은 청색 내지 녹색인 색상을 제공하며 백색 발광 소자에 사용하기에 적합하다.
- [0067] 보다 구체적으로 상기 화학식 F1a (하기 화합물 1 내지 200에서 1 내지 47이 해당됨, 화학식 F1b는 화합물 48임) 또는 F2 (하기 화합물 1 내지 200에서 50 내지 53 및 56이 해당됨)에서
- [0068] P1 및 P2는 각각 독립적으로
- [0069] C5~C40의 아릴기, C5~C40의 헤테로아릴기, C5~C40의 아릴옥시기, C5~C40의 아릴아미노기, C5~C40의 디아릴아미노기, C6~C40의 아릴알킬기로 이루어진 군에서 선택되거나 또는 인접하는 기와 축합(fused) 지방족 고리, 축합 방향족 고리, 축합 헤테로지방족 고리 또는 축합 헤테로방향족 고리를 형성하는 기이다.
- [0070] 상기 화학식 F3(하기 화합물 1 내지 200에서 54, 55와 57 내지 60이 해당됨)에서
- [0071] P1 및 P2는 각각 독립적으로
- [0072] H, D, F, C5~C40의 아릴기, C5~C40의 헤테로아릴기, C5~C40의 아릴옥시기, C5~C40의 아릴아미노기, C5~C40의 디아릴아미노기, C6~C40의 아릴알킬기로 이루어진 군에서 선택되거나 또는 인접하는 기와 축합(fused) 지방족 고리, 축합 방향족 고리, 축합 헤테로지방족 고리 또는 축합 헤테로방향족 고리를 형성하는 기이다.
- [0073] 상기 화학식 F4a(하기 화합물 1 내지 200에서 84 내지 88 및 92, 96이 해당됨) 및 F4b(하기 화합물 1 내지 200에서 89 내지 91 및 93, 94, 95가 해당됨)에서
- [0074] P1, P2 및 P3는 각각 독립적으로
- [0075] C5~C40의 아릴기, C5~C40의 헤테로아릴기, C5~C40의 아릴옥시기, C5~C40의 아릴아미노기, C5~C40의 디아릴아미노기, C6~C40의 아릴알킬기로 이루어진 군에서 선택되거나 또는 인접하는 기와 축합(fused) 지방족 고리, 축합 방향족 고리, 축합 헤테로지방족 고리 또는 축합 헤테로방향족 고리를 형성하는 기이고,
- [0076] A1 및 A2는 각각 독립적으로
- [0077] H, D, F, C1~C40의 알킬기, C5~C40의 아릴기, C5~C40의 헤테로아릴기, C5~C40의 아릴옥시기, C1~C40의 알킬옥시기, C5~C40의 아릴아미노기, C5~C40의 디아릴아미노기, C6~C40의 아릴알킬기, C3~C40의 시클로알킬기 및 C3~C40의 헤테로시클로알킬기로 이루어진 군에서 선택되거나 또는 인접하는 기와 축합(fused) 지방족 고리, 축

합 방향족 고리, 축합 헤테로지방족 고리 또는 축합 헤테로방향족 고리를 형성하는 기이다.

- [0078] 이상 상기 화학식 F1a, F2, F3, F4a 또는 F4b에서 각 화학식은 P1, P2, P3, A1, A2로 작용기를 공통적으로 표현하고 있으나, 각 화학식에서 이들은 상호 무관하다.
- [0079] 한편, 상기 P1, P2, P3, A1, A2의 상기 C1~C40의 알킬기, C2~C40의 알케닐기, C2~C40의 알키닐기, C5~C40의 아릴기, C5~C40의 헤테로아릴기, C5~C40의 아릴옥시기, C1~C40의 알킬옥시기, C5~C40의 아릴아미노기, C5~C40의 디아릴아미노기, C6~C40의 아릴알킬기, C3~C40의 시클로알킬기 및 C3~C40의 헤테로시클로알킬기는
- [0080] 각각 독립적으로 D, F, 할로겐, 니트릴기, 니트로기, C1~C40의 알킬기, C2~C40의 알케닐기, C1~C40의 알콕시기, C1~C40의 아미노기, C3~C40의 시클로알킬기, C3~C40의 헤테로시클로알킬기, C5~C40의 아릴기 및 C5~C40의 헤테로아릴기로 이루어진 군에서 선택되는 하나 이상으로 치환되거나 비치환되는 것이 바람직하다.
- [0081] 또 상기 P1, P2, P3, A1, A2의 상기 C1~C40의 알킬기, C2~C40의 알케닐기, C2~C40의 알키닐기, C5~C40의 아릴기, C5~C40의 헤테로아릴기, C5~C40의 아릴옥시기, C1~C40의 알킬옥시기, C5~C40의 아릴아미노기, C5~C40의 디아릴아미노기, C6~C40의 아릴알킬기, C3~C40의 시클로알킬기 및 C3~C40의 헤테로시클로알킬기에 도입되는 치환기 중에서
- [0082] C1~C40의 알킬기, C2~C40의 알케닐기, C1~C40의 알콕시기, C1~C40의 아미노기, C3~C40의 시클로알킬기, C3~C40의 헤테로시클로알킬기, C5~C40의 아릴기 및 C5~C40의 헤테로아릴기는
- [0083] 각각 독립적으로 D, F, 할로겐, 니트릴기, 니트로기, C1~C40의 알킬기, C2~C40의 알케닐기, C1~C40의 알콕시기, C1~C40의 아미노기, C3~C40의 시클로알킬기, C3~C40의 헤테로시클로알킬기, C5~C40의 아릴기 및 C5~C40의 헤테로아릴기로 이루어진 군에서 선택되는 하나 이상의 제2치환기로 추가적으로 치환되거나; 또는 인접하는 기와 축합 지방족 고리, 축합 방향족 고리, 축합 헤테로지방족 고리 또는 축합 헤테로방향족 고리를 형성하거나 스피로 결합을 하는 것이 바람직하다.
- [0084] 나아가 상기 P1, P2, P3, A1, A2의 상기 C1~C40의 알킬기, C2~C40의 알케닐기, C2~C40의 알키닐기, C5~C40의 아릴기, C5~C40의 헤테로아릴기, C5~C40의 아릴옥시기, C1~C40의 알킬옥시기, C5~C40의 아릴아미노기, C5~C40의 디아릴아미노기, C6~C40의 아릴알킬기, C3~C40의 시클로알킬기 및 C3~C40의 헤테로시클로알킬기에 도입되는 치환기는
- [0085] D, F, 페닐기, 톨일기, 비페닐기, 펜타레닐기, 인데닐기, 나프틸기, 비페닐레닐기, 안트라세닐기, 벤조안트라세닐기, 아즈레닐기, 헵타레닐기, 아세나프틸레닐기, 페나레닐기, 메틸안트릴기, 페난트레닐기, 트리페닐레닐기, 피레닐기, 크리세닐기, 피세닐기, 페릴레닐기, 클로로페릴레닐기, 펜타페닐기, 펜타세닐기, 테트라페닐레닐기, 헥사페닐기, 헥사세닐기, 루비세닐기, 코로네닐기, 트리나프틸레닐기, 헵타페닐기, 헵타세닐기, 플루오레닐기, 피란트레닐기, 오바레닐기, 카르바졸릴기, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오펜릴기, 티오펜릴기, 인돌일기, 푸리닐기, 벤즈이미다졸일기, 퀴놀리닐기, 벤조티오펜릴기, 파라티아지닐기, 피롤일기, 피라졸릴기, 이미다졸릴기, 이미다졸리닐기, 옥사졸릴기, 티아졸릴기, 트리아졸릴기, 테트라졸일기, 옥사디아졸릴기, 피리디닐기, 피리다지닐기, 피리미디닐기, 피라지닐기, 티안트레닐기(thianthrenyl), 사이클로펜틸기, 사이클로헥실기, 옥시라닐기, 피롤리디닐기, 피라졸리디닐기, 이미다졸리디닐기, 피페리디닐기, 피페라지닐기, 모르폴리닐기, 디(C6-C50아릴)아미노기, 실레인기 및 이들의 유도체로 이루어진 군으로부터 선택된 것이 바람직하다.
- [0086] 상기 아릴기는 방향족 고리 시스템을 갖는 1가 그룹으로서, 2 이상의 고리시스템을 포함할 수 있으며, 상기 2이상의 고리 시스템은 서로 결합 또는 축합된 형태로 존재할 수 있다. 상기 헤테로아릴기는 상기 아릴기 중 하나 이상의 탄소가 N, O, S, P, Si 및 Se로 이루어진 군으로부터 선택된 하나 이상으로 치환된 그룹을 가리킨다.
- [0087] 한편, 사이클로알킬기는 고리 시스템을 갖는 알킬기를 가리키며, 상기 헤테로사이클로알킬기는 상기 사이클로알킬기 중 하나 이상의 탄소가 N, O, S, P, Si 및 Se로 이루어진 군으로부터 선택된 하나 이상으로 치환된 그룹을

가리킨다.

[0088] 상기 아릴기 및 헤테로아릴기의 하나 이상의 수소가 치환될 경우, 이들의 치환기는 C1-C50알킬기; C1-C50알콕시
기; 비치환 또는 C1-C50알킬기 또는 C1-C50알콕시기로 치환된 C6-C50아릴기; 비치환 또는 C1-C50알킬기 또는
C1-C50알콕시기로 치환된 C2-C50헤테로아릴기; 비치환 또는 C1-C50알킬기 또는 C1-C50알콕시기로 치환된 C5-C50
사이클로알킬기 및 비치환 또는 C1-C20알킬기 또는 C1-C20알콕시기로 치환된 C5-C50헤테로사이클로알킬기, 또는
실레인기로 표시되는 그룹으로 이루어진 군으로부터 선택된 하나 이상일 수 있다.

[0089] 본 발명의 제 1태양에 따르는 유기 광소자는, 제1전극; 제2전극; 및 상기 제1전극과 상기 제2전극 사이에 적어
도 한 층의 유기막을 포함하는 유기 광소자이다.

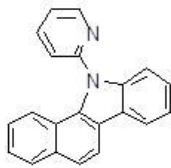
[0090] 본 발명의 유기 광소자에 사용되는 유기 발광화합물은 하기 화학물 1 내지 200의 구조(이하 화학식들에서 '화학
식'은 생략하고 숫자만 기재함)를 가질 수 있으나 이에 한정되는 것은 아니다:

[0091] 1



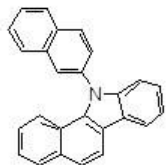
[0092]

[0093] 2



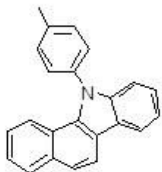
[0094]

[0095] 3



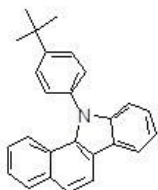
[0096]

[0097] 4



[0098]

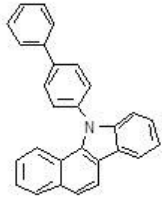
[0099] 5



[0100]

[0101]

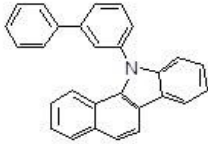
6



[0102]

[0103]

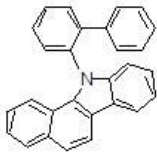
7



[0104]

[0105]

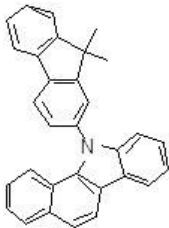
8



[0106]

[0107]

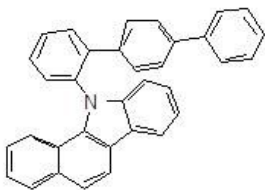
9



[0108]

[0109]

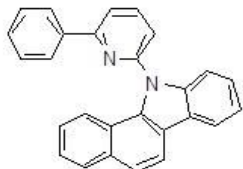
10



[0110]

[0111]

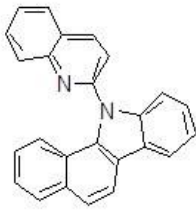
11



[0112]

[0113]

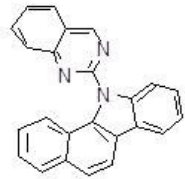
12



[0114]

[0115]

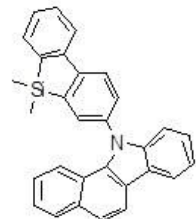
13



[0116]

[0117]

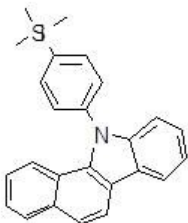
14



[0118]

[0119]

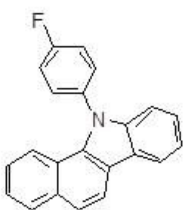
15



[0120]

[0121]

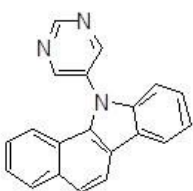
16



[0122]

[0123]

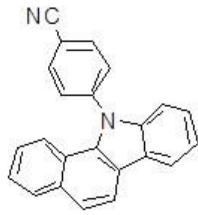
17



[0124]

[0125]

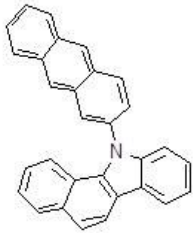
18



[0126]

[0127]

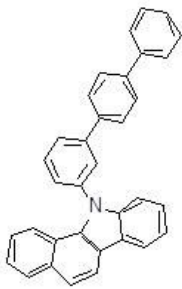
19



[0128]

[0129]

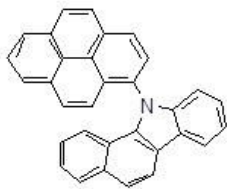
20



[0130]

[0131]

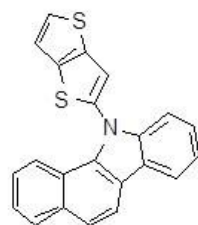
21



[0132]

[0133]

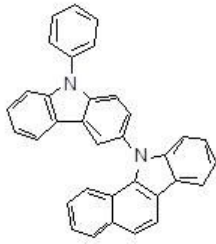
22



[0134]

[0135]

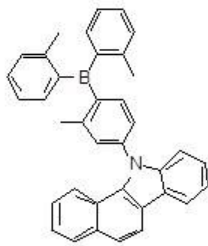
23



[0136]

[0137]

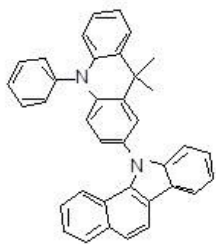
24



[0138]

[0139]

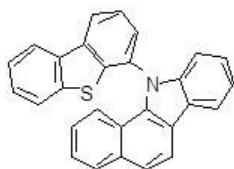
25



[0140]

[0141]

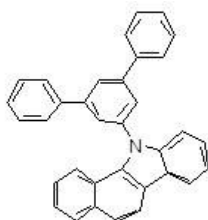
26



[0142]

[0143]

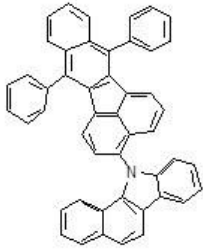
27



[0144]

[0145]

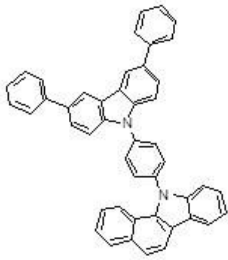
28



[0146]

[0147]

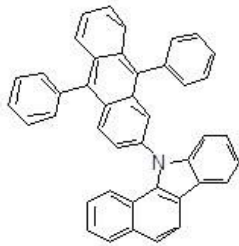
29



[0148]

[0149]

30



[0150]

[0151]

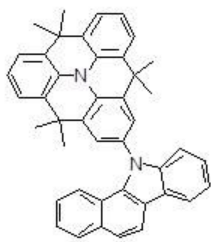
31



[0152]

[0153]

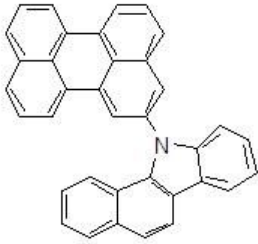
32



[0154]

[0155]

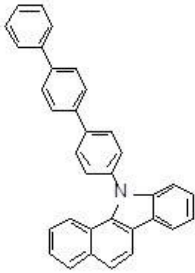
33



[0156]

[0157]

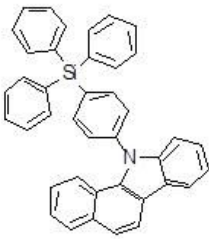
34



[0158]

[0159]

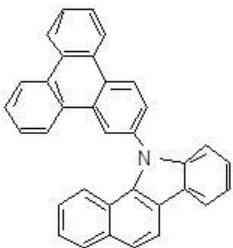
35



[0160]

[0161]

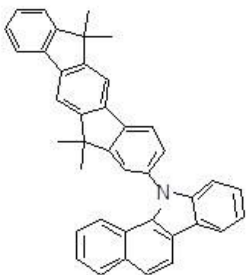
36



[0162]

[0163]

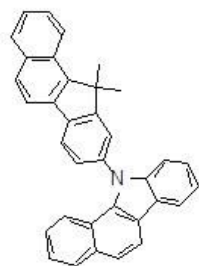
37



[0164]

[0165]

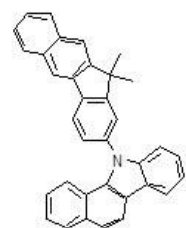
38



[0166]

[0167]

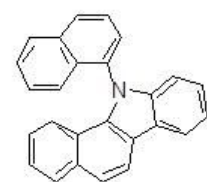
39



[0168]

[0169]

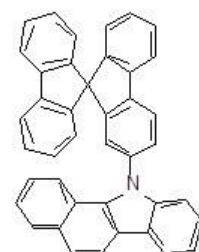
40



[0170]

[0171]

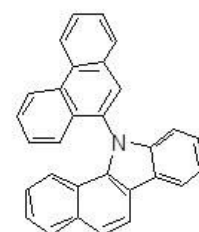
41



[0172]

[0173]

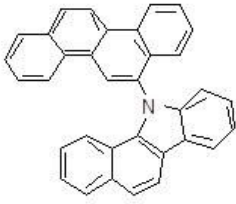
42



[0174]

[0175]

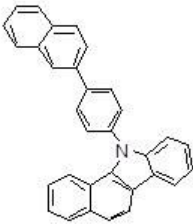
43



[0176]

[0177]

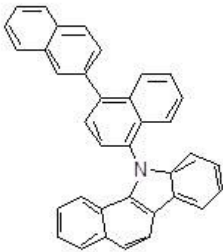
44



[0178]

[0179]

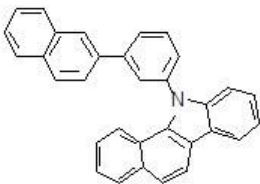
45



[0180]

[0181]

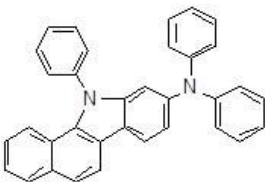
46



[0182]

[0183]

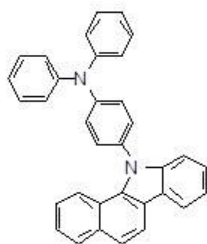
47



[0184]

[0185]

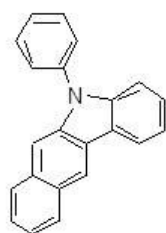
48



[0186]

[0187]

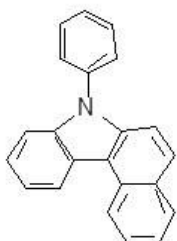
49



[0188]

[0189]

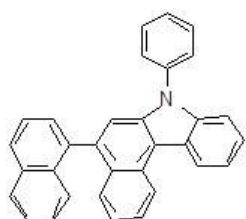
50



[0190]

[0191]

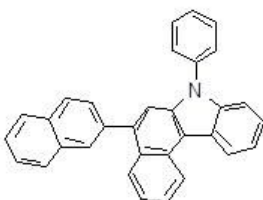
51



[0192]

[0193]

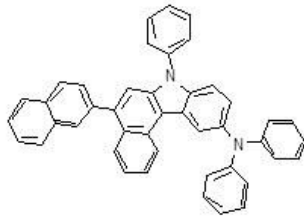
52



[0194]

[0195]

53



[0196]

[0197]

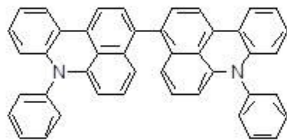
54



[0198]

[0199]

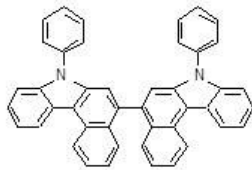
55



[0200]

[0201]

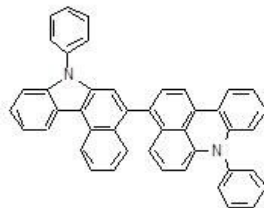
56



[0202]

[0203]

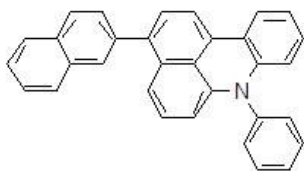
57



[0204]

[0205]

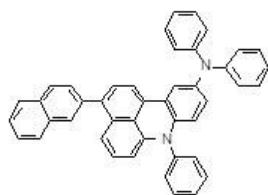
58



[0206]

[0207]

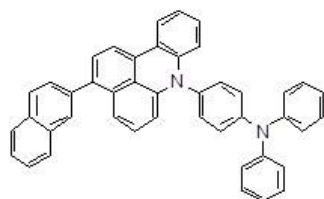
59



[0208]

[0209]

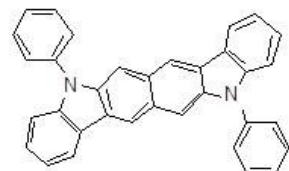
60



[0210]

[0211]

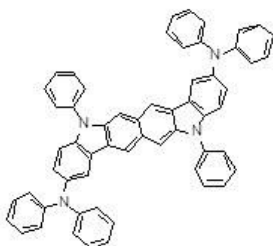
61



[0212]

[0213]

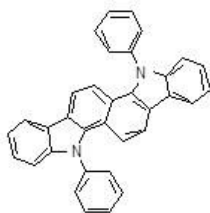
62



[0214]

[0215]

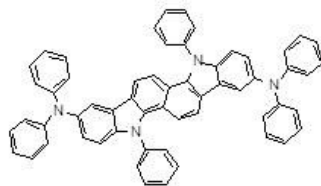
63



[0216]

[0217]

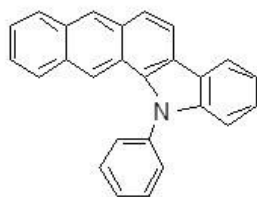
64



[0218]

[0219]

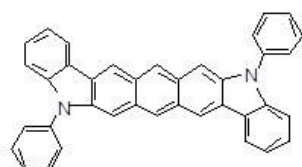
65



[0220]

[0221]

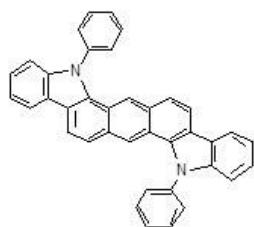
66



[0222]

[0223]

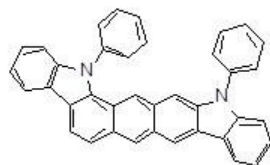
67



[0224]

[0225]

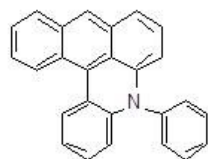
68



[0226]

[0227]

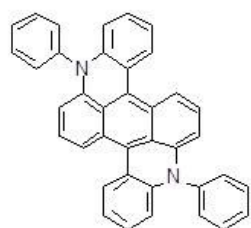
69



[0228]

[0229]

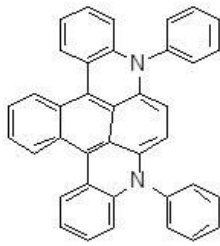
70



[0230]

[0231]

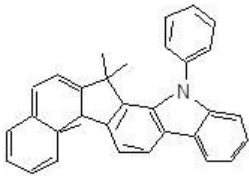
71



[0232]

[0233]

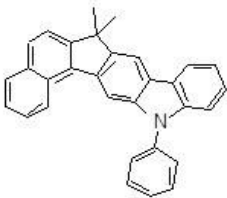
72



[0234]

[0235]

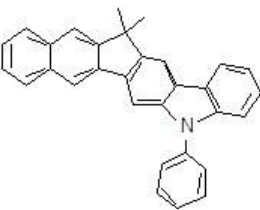
73



[0236]

[0237]

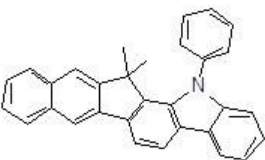
74



[0238]

[0239]

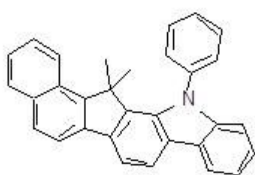
75



[0240]

[0241]

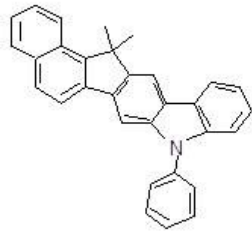
76



[0242]

[0243]

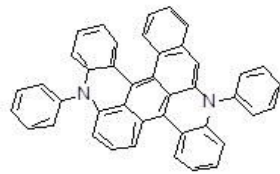
77



[0244]

[0245]

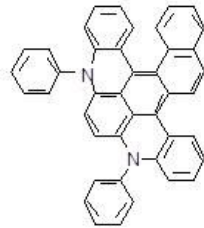
78



[0246]

[0247]

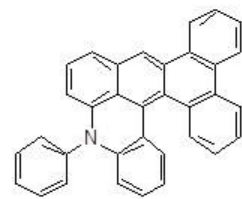
79



[0248]

[0249]

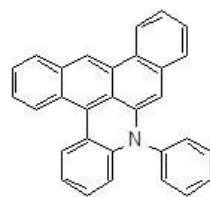
80



[0250]

[0251]

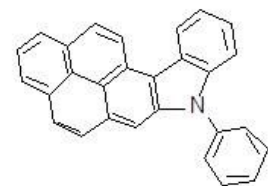
81



[0252]

[0253]

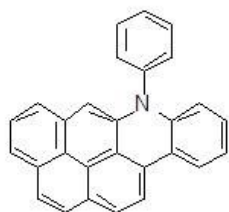
82



[0254]

[0255]

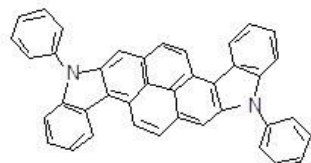
83



[0256]

[0257]

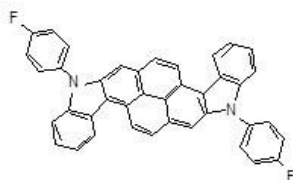
84



[0258]

[0259]

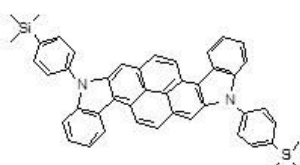
85



[0260]

[0261]

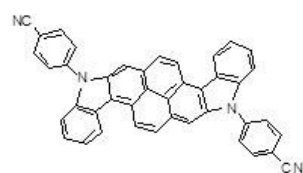
86



[0262]

[0263]

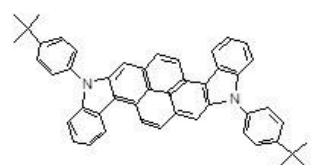
87



[0264]

[0265]

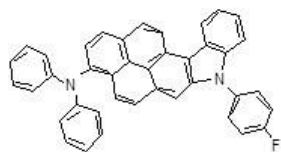
88



[0266]

[0267]

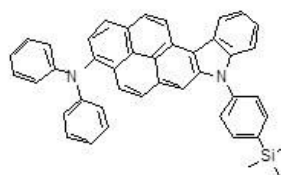
89



[0268]

[0269]

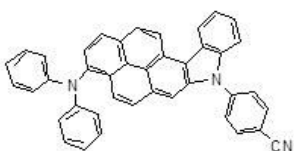
90



[0270]

[0271]

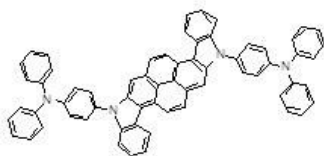
91



[0272]

[0273]

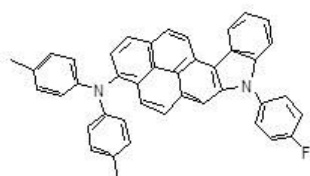
92



[0274]

[0275]

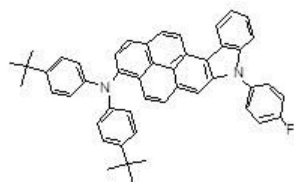
93



[0276]

[0277]

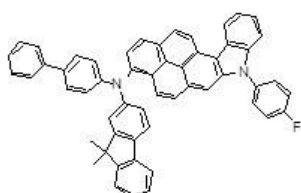
94



[0278]

[0279]

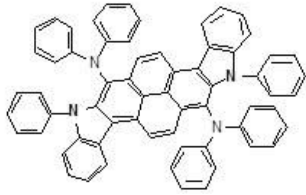
95



[0280]

[0281]

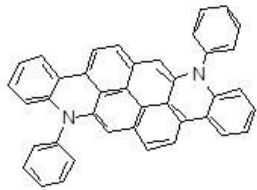
96



[0282]

[0283]

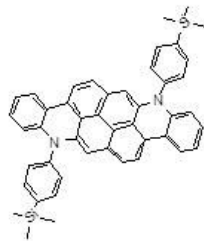
97



[0284]

[0285]

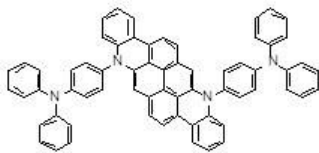
98



[0286]

[0287]

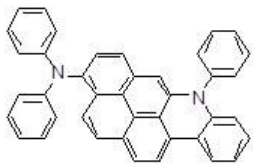
99



[0288]

[0289]

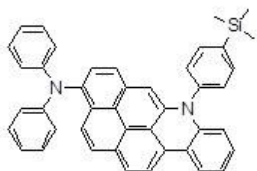
100



[0290]

[0291]

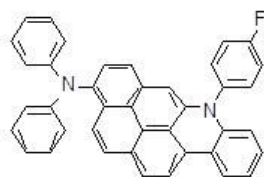
101



[0292]

[0293]

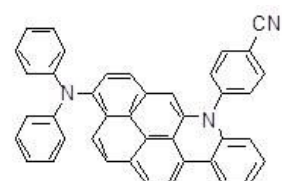
102



[0294]

[0295]

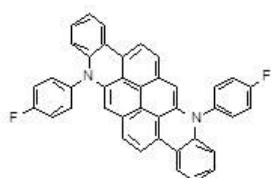
103



[0296]

[0297]

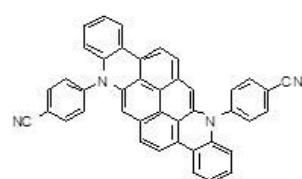
104



[0298]

[0299]

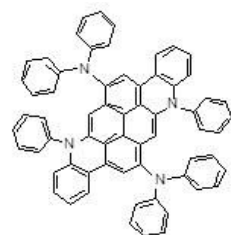
105



[0300]

[0301]

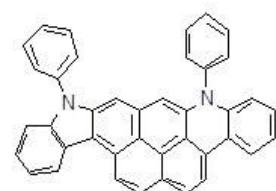
106



[0302]

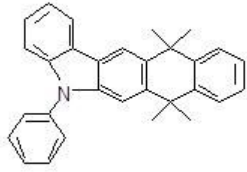
[0303]

107



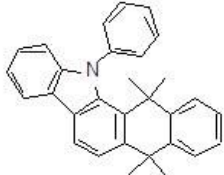
[0304]

[0305] 108



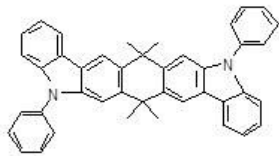
[0306]

[0307] 109



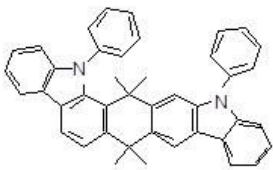
[0308]

[0309] 110



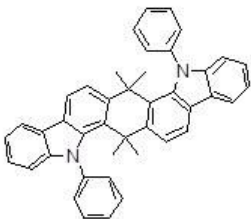
[0310]

[0311] 111



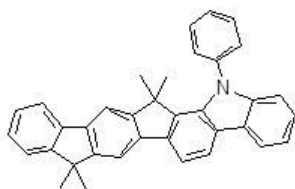
[0312]

[0313] 112



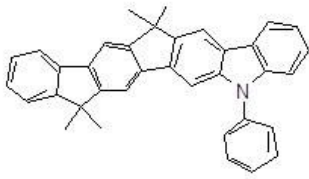
[0314]

[0315] 113

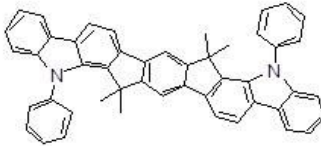


[0316]

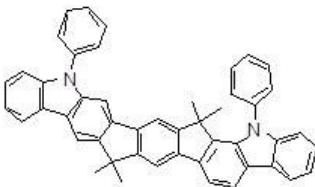
[0317] 114



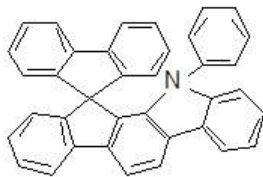
[0318]
[0319] 115



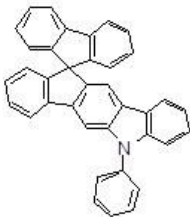
[0320]
[0321] 116



[0322]
[0323] 117



[0324]
[0325] 118



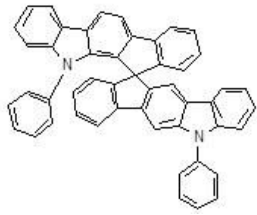
[0326]
[0327] 119



[0328]

[0329]

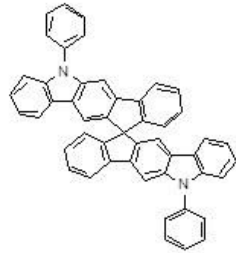
120



[0330]

[0331]

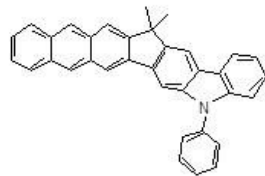
121



[0332]

[0333]

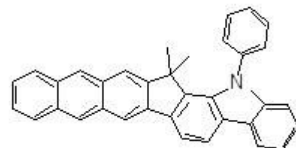
122



[0334]

[0335]

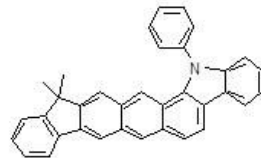
123



[0336]

[0337]

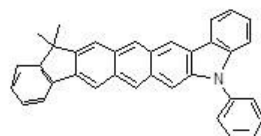
124



[0338]

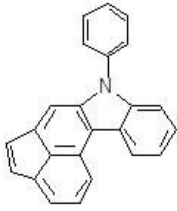
[0339]

125



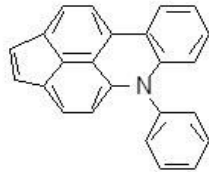
[0340]

[0341] 126



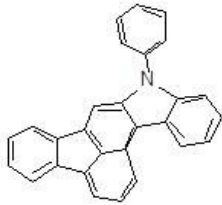
[0342]

[0343] 127



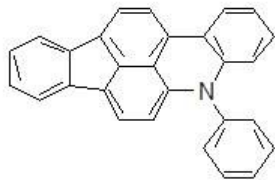
[0344]

[0345] 128



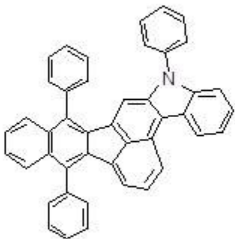
[0346]

[0347] 129



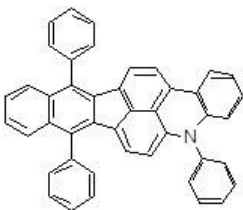
[0348]

[0349] 130



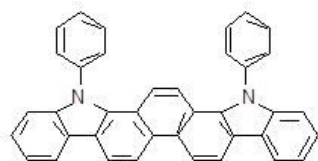
[0350]

[0351] 131



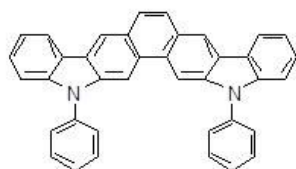
[0352]

[0353] 132



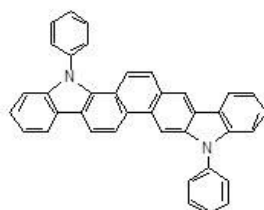
[0354]

[0355] 133



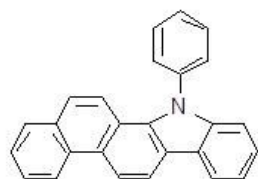
[0356]

[0357] 134



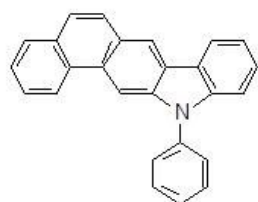
[0358]

[0359] 135



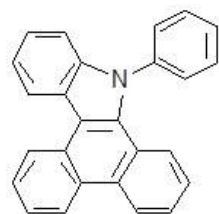
[0360]

[0361] 136



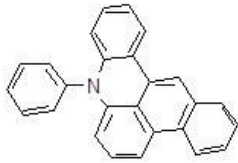
[0362]

[0363] 137



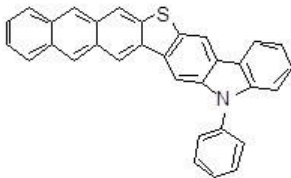
[0364]

[0365] 138



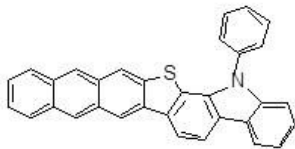
[0366]

[0367] 139



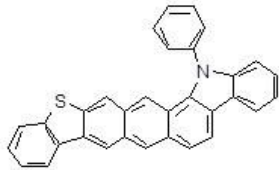
[0368]

[0369] 140



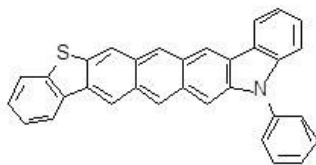
[0370]

[0371] 141



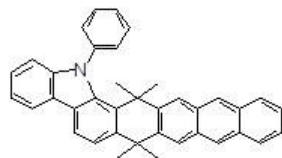
[0372]

[0373] 142



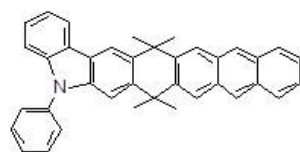
[0374]

[0375] 143



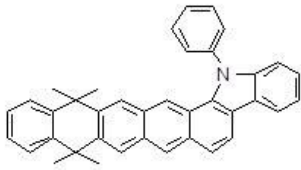
[0376]

[0377] 144



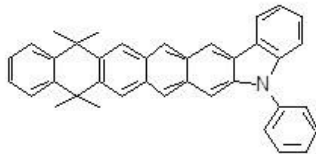
[0378]

[0379] 145



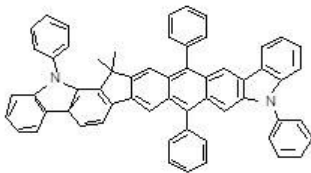
[0380]

[0381] 146



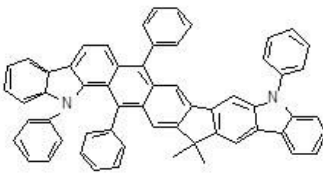
[0382]

[0383] 147



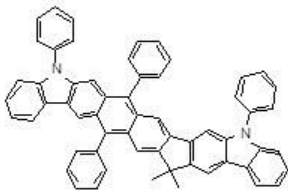
[0384]

[0385] 148



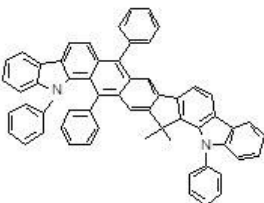
[0386]

[0387] 149



[0388]

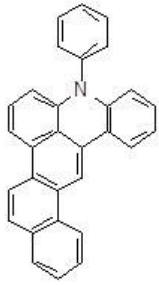
[0389] 150



[0390]

[0391]

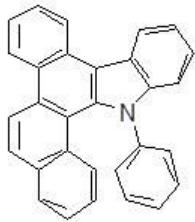
151



[0392]

[0393]

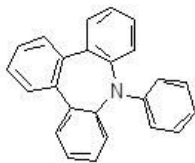
152



[0394]

[0395]

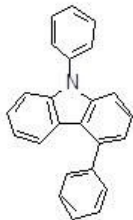
153



[0396]

[0397]

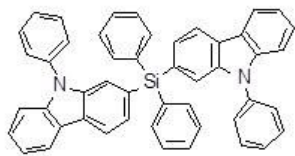
154



[0398]

[0399]

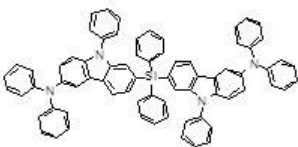
155



[0400]

[0401]

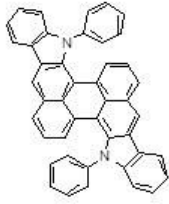
156



[0402]

[0403]

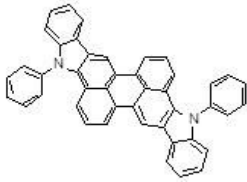
157



[0404]

[0405]

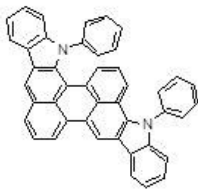
158



[0406]

[0407]

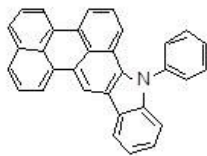
159



[0408]

[0409]

160



[0410]

[0411]

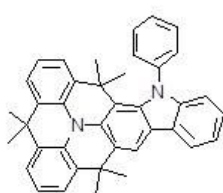
161



[0412]

[0413]

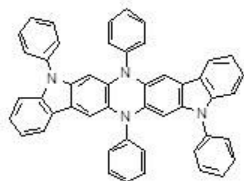
162



[0414]

[0415]

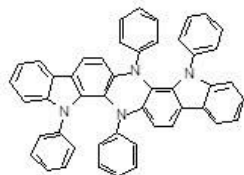
163



[0416]

[0417]

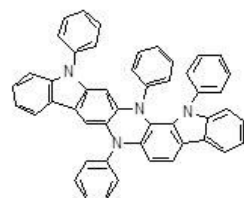
164



[0418]

[0419]

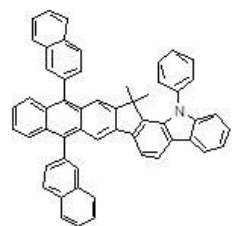
165



[0420]

[0421]

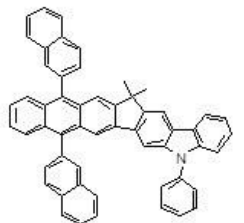
166



[0422]

[0423]

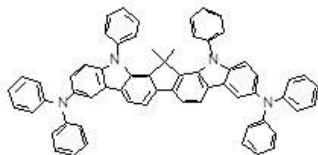
167



[0424]

[0425]

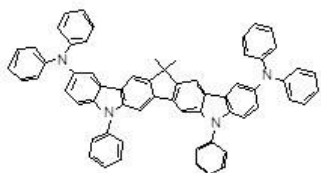
168



[0426]

[0427]

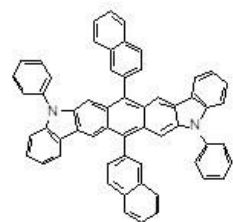
169



[0428]

[0429]

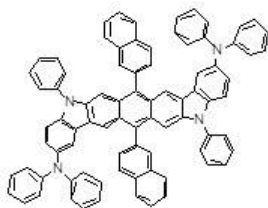
170



[0430]

[0431]

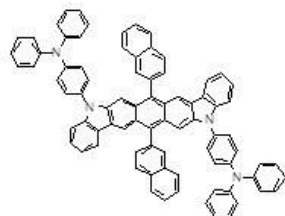
171



[0432]

[0433]

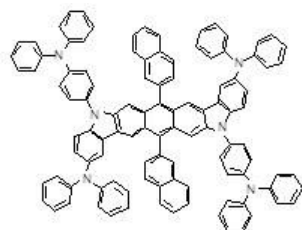
172



[0434]

[0435]

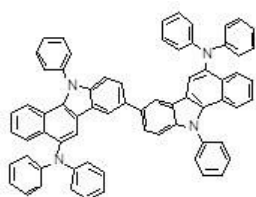
173



[0436]

[0437]

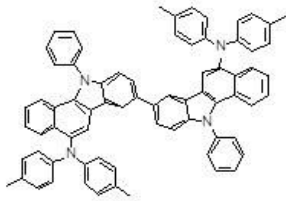
174



[0438]

[0439]

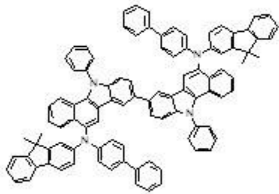
175



[0440]

[0441]

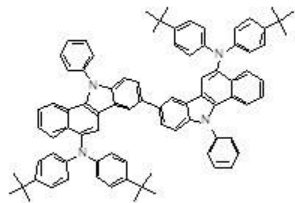
176



[0442]

[0443]

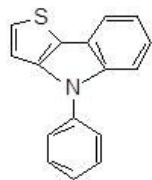
177



[0444]

[0445]

178



[0446]

[0447]

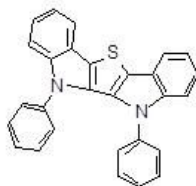
179



[0448]

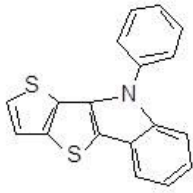
[0449]

180



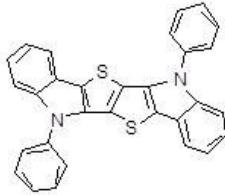
[0450]

[0451] 181



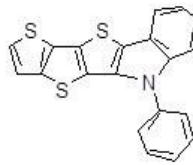
[0452]

[0453] 182



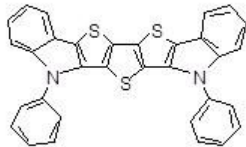
[0454]

[0455] 183



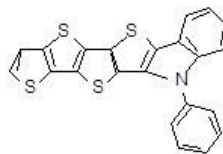
[0456]

[0457] 184



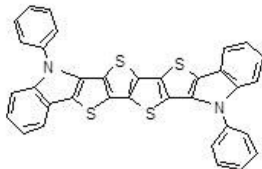
[0458]

[0459] 185



[0460]

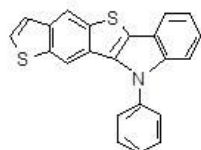
[0461] 186



[0462]

[0463]

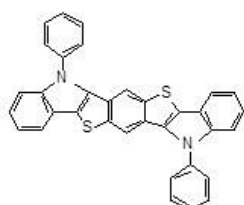
187



[0464]

[0465]

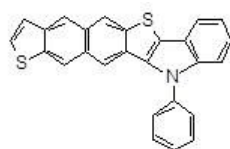
188



[0466]

[0467]

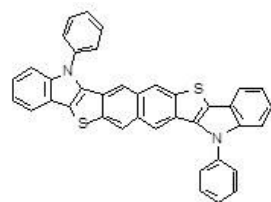
189



[0468]

[0469]

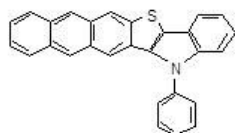
190



[0470]

[0471]

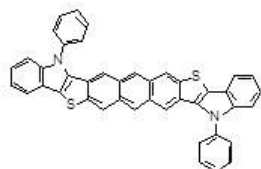
191



[0472]

[0473]

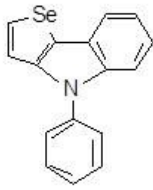
192



[0474]

[0475]

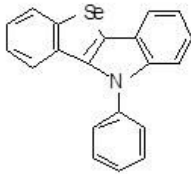
193



[0476]

[0477]

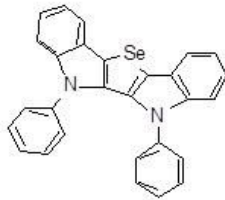
194



[0478]

[0479]

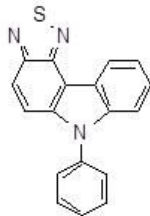
195



[0480]

[0481]

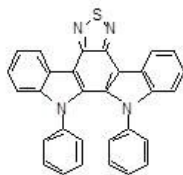
196



[0482]

[0483]

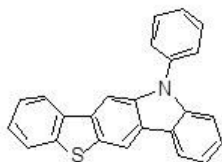
197



[0484]

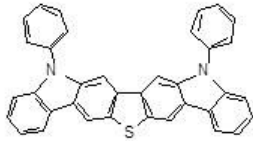
[0485]

198



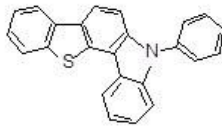
[0486]

[0487] 199



[0488]

[0489] 200



[0490]

[0491] 상기 화학식 F1a, F2, F3, F4a 또는 F4b의 화합물로 표시되는 본 발명에 따른 유기 발광화합물 또는 상기 화학식 1 내지 200의 유기 발광화합물은 통상의 합성 방법을 이용하여 합성될 수 있으며, 상기 화합물의 보다 상세한 합성 경로는 하기 합성예의 반응식들을 참조한다. 상기 화학식 F1a, F1b, F2, F3, F4a 또는 F4b의 유기 발광화합물 또는 상기 화학식 1 내지 200의 유기 발광화합물은 유기 광소자의 유기막, 특히 정공수송층, 정공주입층 또는 발광층에 사용되기 적합하다. 본 발명을 따르는 유기 발광 소자의 구조는 매우 다양하다. 상기 제1전극과 제2전극 사이에 정공주입층, 정공수송층, 정공저지층, 전자저지층, 전자수송층 및 전자주입층으로 이루어진 군으로부터 선택된 하나 이상의 층을 더 포함할 수 있다.

[0492] 보다 구체적으로, 본 발명을 따르는 유기 발광 소자의 구현에는

[0493] 먼저, 유기 발광 소자는 제1전극/정공주입층/발광층/전자수송층/전자주입층/제2전극으로 이루어진 구조를 가질 수 있고,

[0494] 또 유기 발광 소자는 제1전극/정공주입층/정공수송층/발광층/전자수송층/전자주입층/제2전극으로 이루어진 구조를 가질 수 있으며,

[0495] 나아가 유기 발광 소자는 제1전극/정공주입층/정공수송층/발광층/정공저지층/전자수송층/전자주입층/제2전극의 구조를 가질 수 있다.

[0496] 이때, 상기 정공수송층, 정공주입층 및 발광층 중 하나 이상은 본 발명을 따르는 화합물을 포함할 수 있다.

[0497] 본 발명을 따르는 유기 광소자의 발광층은 적색, 녹색, 청색 또는 백색을 포함하는 인광 또는 형광 도펀트를 포함할 수 있다. 이 중, 상기 인광 도펀트는 Ir, Pt, Os, Ti, Zr, Hf, Eu, Tb 및 Tm으로 이루어진 군으로부터 선택된 하나 이상의 원소를 포함하는 유기금속화합물일 수 있다. 또한, 본 발명에 따르는 화합물은 발광층에서 형광 도펀트로도 사용될 수 있다.

[0498] 이하, 본 발명을 따르는 유기 광소자의 제조 방법을 유기 광소자를 참조하여, 살펴보기로 한다. 먼저 기판 상부에 높은 일함수를 갖는 제1전극용 물질을 증착법 또는 스퍼터링법 등에 의해 형성하여 제1전극을 형성한다. 상기 제1전극은 애노드(Anode)일 수 있다. 여기에서 기판으로는 통상적인 유기 광소자에서 사용되는 기판을 사용하는데 기계적 강도, 열적 안정성, 투명성, 표면 평활성, 취급용이성 및 방수성이 우수한 유리 기판 또는 투명 플라스틱 기판이 바람직하다. 제1전극용 물질로는 투명하고 전도성이 우수한 산화인듐주석(ITO), 산화인듐아연(IZO), 산화주석(SnO₂), 산화아연(ZnO) 등을 사용한다.

[0499] 다음으로, 상기 제1전극 상부에 진공증착법, 스펀코팅법, 캐스트법, LB법 등과 같은 다양한 방법을 이용하여 정공주입층(HIL)을 형성할 수 있다.

[0500] 진공증착법에 의하여 정공주입층을 형성하는 경우, 그 증착 조건은 정공주입층의 재료로서 사용하는 화합물, 목적으로 하는 정공주입층의 구조 및 열적 특성 등에 따라 다르지만, 일반적으로 증착온도 100 내지 500°C, 진공도 10⁻⁵ 내지 10⁻³ torr, 증착속도 0.01 내지 100Å/sec, 막 두께는 통상 100Å 내지 1μm 범위에서 적절히 선택하는 것이 바람직하다.

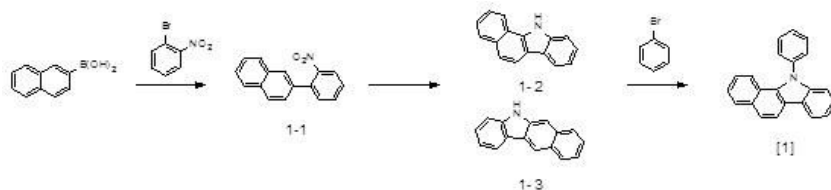
[0501] 스펀코팅법에 의하여 정공주입층을 형성하는 경우, 그 코팅 조건은 정공주입층의 재료로서 사용하는 화합물, 목

적하는 하는 정공주입층의 구조 및 열적 특성에 따라 상이하지만, 약 2000rpm 내지 5000rpm의 코팅 속도, 코팅 후 용매 제거를 위한 열처리 온도는 약 80℃ 내지 200℃의 온도 범위 에서 적절히 선택하는 것이 바람직하다.

- [0502] 상기 정공주입층 물질은 전술한 바와 같은 화학식 a를 갖는 화합물일 수 있다.
- [0503] 또는, 예를 들어, 미국특허 제4,356,429호에 개시된 구리프탈로시아닌 등의 프탈로시아닌 화합물 또는 Advanced Material, 6, p.677(1994)에 기재되어 있는 스타버스트형 아민 유도체류인 TCTA, m-MTDATA, m-MTDAPB, 2-TNATA(4,4',4''-tris(N-(2-naphthyl)-N-phenylamino)triphenylamine:4,4',4''-트리스(N-(나프틸)-N-페닐아미노)트리페닐아민), 용해성이 있는 전도성 고분자인 Pani/DBSA (Polyaniline/Dodecylbenzenesulfonic acid:폴리아닐린/도데실벤젠술폰산) 또는 PEDOT/PSS (Poly(3,4-ethylenedioxythiophene)/Poly(4-styrenesulfonate):폴리(3,4-에틸렌디옥시티오펜)/폴리(4-스티렌술포네이트)), PANI/CSA (Polyaniline/Camphor sulfonic acid:폴리아닐린/캠퍼술폰산) 또는 PANI/PSS (Polyaniline)/Poly(4-styrenesulfonate):폴리아닐린/폴리(4-스티렌술포네이트)) 등과 같은 공지된 정공주입 물질을 사용할 수 있다.
- [0505] 상기 정공주입층의 두께는 약 100Å 내지 10000Å, 바람직하게는 100Å 내지 1000Å일 수 있다. 상기 정공주입층의 두께가 100Å 미만인 경우, 정공주입 특성이 저하될 수 있으며, 상기 정공주입층의 두께가 10000Å를 초과하는 경우, 구동전압이 상승할 수 있기 때문이다.
- [0506] 다르게는, 상기 정공주입층은 진공기상증착법에 의해 형성할 수 있다. 구체적인 증착조건은 사용하는 화합물에 따라 다르지만, 일반적인 정공주입층의 형성과 거의 동일한 조건범위 중에서 선택된다. 예를 들어 DNTPD(N,N-bis-[4-(di-m-tolylamino)phenyl]-N,N'-diphenylbiphenyl-4,4'-diamine) 등이 사용될 수 있다.
- [0507] 다음으로 상기 정공주입층 상부에 진공증착법, 스펀코팅법, 캐스트법, LB법 등과 같은 다양한 방법을 이용하여 정공수송층(HTL)을 형성할 수 있다. 진공증착법 및 스펀팅법에 의하여 정공수송층을 형성하는 경우, 그 증착조건 및 코팅조건은 사용하는 화합물에 따라 다르지만, 일반적으로 정공주입층의 형성과 거의 동일한 조건범위 중에서 선택된다.
- [0508] 상기 정공수송층 물질은 전술한 바와 같은 화학식 a의 화합물을 포함할 수 있다. 또는, 예를 들어, N-페닐카르바졸, 폴리비닐카르바졸 등의 카르바졸 유도체, N,N'-비스(3-메틸페닐)-N,N'-디페닐-[1,1'-비페닐]-4,4'-디아민(TPD), N,N'-디(나프탈렌-1-일)-N,N'-디페닐 벤지딘(α -NPD) 등의 방향족 축합환을 가지는 통상적인 아민 유도체 등과 같은 공지된 정공수송 물질을 사용할 수 있다. 상기 정공수송층의 두께는 약 50Å 내지 1000Å, 바람직하게는 100Å 내지 600Å일 수 있다. 상기 정공수송층의 두께가 50Å 미만인 경우, 정공수송 특성이 저하될 수 있으며, 상기 정공수송층의 두께가 1000Å를 초과하는 경우, 구동전압이 상승할 수 있기 때문이다.
- [0509] 다음으로 상기 정공수송층 상부에 진공증착법, 스펀코팅법, 캐스트법, LB법 등과 같은 방법을 이용하여 발광층(EML)을 형성할 수 있다. 진공증착법 및 스펀코팅법에 의해 발광층을 형성하는 경우, 그 증착조건은 사용하는 화합물에 따라 다르지만, 일반적으로 정공주입층의 형성과 거의 동일한 조건범위 중에서 선택된다.
- [0510] 상기 발광층은 전술한 바와 같이 본 발명을 따르는 화학식 a의 화합물을 포함할 수 있다. 이 때, 화학식 a의 화합물은 적합한 공지의 호스트 재료와 함께 사용될 수 있거나, 공지의 도펀트 재료와 함께 사용될 수 있다.
- [0511] 상기 화학식 a의 화합물을 단독으로 사용하는 것도 가능하다. 호스트 재료의 경우, 예를 들면, Alq3(tris(8-hydroxy-quinolate)aluminium) 또는 CBP(4,4'-N,N'-디카바졸-비페닐), 또는 PVK(폴리(n-비닐카바졸)) 등을 사용할 수 있다.
- [0512] 도펀트 재료의 경우, 형광 도펀트로서는 이데미츠사(Idemitsu사)에서 구입 가능한 IDE102, IDE105 및 야하시바라사에서 구입 가능한 C545T 등을 사용할 수 있으며, 인광 도펀트로서는 적색 인광 도펀트 PtOEP, UDC사의 RD61, 녹색 인광 도펀트 Ir(PPy)3(PPy=2-phenylpyridine), 청색 인광 도펀트인 F2Irpic, UDC사의 적색 인광 도펀트 RD 61 등을 사용할 수 있다. MQD(N-methylquinacridone), 쿠마린(Coumarine)유도체 등도 사용할 수 있다.
- [0513] 도핑 농도는 특별히 제한 되지 않으나 통상적으로 호스트100 중량부를 기준으로 하여 상기 도펀트의 함량은 0.01 ~ 15 중량부이다. 상기 발광층의 두께는 약 100Å 내지 1000Å, 바람직하게는 200Å 내지 600Å일 수 있다.

- [0514] 상기 발광층의 두께가 100Å 미만인 경우, 발광 특성이 저하될 수 있으며, 상기 발광층의 두께가 1000Å를 초과하는 경우, 구동전압이 상승할 수 있기 때문이다.
- [0515] 발광층에 발광 화합물이 인광 도펀트와 함께 사용할 경우에는 삼중항 여기자 또는 정공이 전자수송층으로 확산되는 현상을 방지하기 위하여, 상기 발광층 상부에 진공증착법, 스펀코팅법, 캐스트법, LB법 등과 같은 방법을 이용하여 정공저지층(HBL)을 형성할 수 있다. 진공증착법 및 스펀코팅법에 의해 정공저지층을 형성하는 경우, 그 조건은 사용하는 화합물에 따라 다르지만, 일반적으로 정공주입층의 형성과 거의 동일한 조건범위 중에서 선택된다. 사용가능한 공지의 정공저지재료, 예를 들면 옥사디아졸 유도체나 트리아졸 유도체, 페난트롤린 유도체, BCP 등을 들 수 있다.
- [0516] 상기 정공저지층의 두께는 약 50Å 내지 1000Å, 바람직하게는 100Å 내지 300Å일 수 있다. 상기 정공저지층의 두께가 50Å 미만인 경우, 정공저지 특성이 저하될 수 있으며, 상기 정공저지층의 두께가 1000Å를 초과하는 경우, 구동전압이 상승할 수 있기 때문이다. 상기 정공저지층이 생략될 경우 도 1b에 도시된 구조를 가지는 유기발광 소자가 얻어진다.
- [0517] 다음으로 전자수송층(ETL)을 진공증착법, 또는 스펀코팅법, 캐스트법 등의 다양한 방법을 이용하여 형성한다.
- [0518] 진공증착법 및 스펀코팅법에 의해 전자수송층을 형성하는 경우, 그 조건은 사용하는 화합물에 따라 다르지만, 일반적으로 정공주입층의 형성과 거의 동일한 조건범위 중에서 선택된다. 상기 전자수송층 재료는 전자주입전극(Cathode)로부터 주입된 전자를 안정하게 수송하는 기능을 하는 것으로서 퀴놀린 유도체, 특히 트리스(8-퀴놀리노레이트)알루미늄(Alq3), TAZ, Balq, PBD 등과 같은 공지의 재료를 사용할 수도 있다.
- [0519] 상기 전자수송층의 두께는 약 100Å 내지 1000Å, 바람직하게는 200Å 내지 500Å일 수 있다. 상기 전자수송층의 두께가 100Å 미만인 경우, 전자수송 특성이 저하될 수 있으며, 상기 전자수송층의 두께가 1000Å를 초과하는 경우, 구동전압이 상승할 수 있기 때문이다.
- [0520] 또한 전자수송층 상부에 음극으로부터 전자의 주입을 용이하게 하는 기능을 가지는 물질인 전자주입층(EIL)이 적층될 수 있으며 이는 특별히 재료를 제한하지 않는다.
- [0521] 전자 주입층으로서 LiF, NaCl, CsF, Li₂O, BaO 등과 같은 전자주입층 형성 재료로서 공지된 임의의 물질을 이용할 수 있다. 상기 전자주입층의 증착조건은 사용하는 화합물에 따라 다르지만, 일반적으로 정공주입층의 형성과 거의 동일한 조건범위 중에서 선택된다.
- [0522] 상기 전자주입층의 두께는 약 1Å 내지 100Å, 바람직하게는 5Å 내지 50Å일 수 있다. 상기 전자주입층의 두께가 1Å 미만인 경우, 전자주입 특성이 저하될 수 있으며, 상기 전자주입층의 두께가 100Å를 초과하는 경우, 구동전압이 상승할 수 있기 때문이다.
- [0523] 마지막으로 전자주입층 상부에 진공증착법이나 스퍼터링법 등의 방법을 이용하여 제2전극을 형성할 수 있다.
- [0524] 상기 제2전극은 캐소드(Cathode)로 사용될 수 있다. 상기 제2전극 형성용 금속으로는 낮은 일함수를 가지는 금속, 합금, 전기전도성 화합물 및 이들의 혼합물을 사용할 수 있다. 구체적인 예로서는 리튬(Li), 마그네슘(Mg), 알루미늄(Al), 알루미늄-리튬(Al-Li), 칼슘(Ca), 마그네슘-인듐(Mg-In), 마그네슘-은(Mg-Ag) 등을 들 수 있다. 또한 전면 발광소자를 얻기 위하여 ITO, IZO를 사용한 투과형 캐소드를 사용할 수도 있다.
- [0525] 본 발명의 다른 구현예에 따르는 유기 전계 발광 화합물은 상기 화학식 a로 표현될 수 있으며, 보다 구체적으로는 상기 화학식 1 내지 200로 표현될 수 있다. 상기 화합물들에 대한 구체적인 내용은 상술한 유기 발광 소자에 대하여 설명한 부분과 동일하다.
- [0526] 이하에서, 본 발명의 반응예 및 비교예를 구체적으로 예시하지만, 본 발명이 하기의 합성예 및 실시예로 한정되는 것은 아니다. 이하의 반응예에서 중간체 화합물은 최종 생성물의 번호에 일련번호를 추가하는 방식으로 표기한다. 예를 들어, 화합물 1은 화합물 [1]로 상기 화합물의 중간체 화합물은 [1-1] 등으로 표기한다. 본 명세서에서 화합물의 번호는 화학식의 번호로서 표기한다. 예를 들어, 화학식 1로 표시되는 화합물은 화합물 1로 표기한다.

[0527] [반응 예 1] 화합물 [1]의 합성



[0528]

[0529] 중간체 화합물 [1-1]의 제조

[0530] 2L 반응플라스크에 1-브로모-2-니트로벤젠 50g(247.5mmol), 나프탈렌-2-보론산 51g(297.0mmol), 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐 5.72g(4.95mmol)와 탄산나트륨 51.3g(371.27mmol)을 넣고 1,4-디옥산 1.2L와 증류수 200ml 넣고 질소분위기에서 24시간 동안 환류 교반한다. 반응 종료 후 에틸아세테이트로 추출하여 무수황산 마그네슘으로 건조하여 여과한다. 여과액은 감압 농축하여 실리카겔 크로마토그래프로 분리정제하여 미색고체의 중간체 화합물 [1-1] 45.6g (74%)을 수득하였다.

[0532] 중간체 화합물 [1-2]와 [1-3]의 제조

[0533] 2L 반응플라스크에 중간체 화합물 [1-1] 47.6g(182.9mmol), 트리에틸포스파이트 152.0ml(914.7mmol)을 넣고 큐멘900ml 넣고 질소분위기에서 24시간 동안 환류 교반한다. 반응 종료 후 고진공을 이용하여 감압 농축하여 실리카겔 크로마토그래프로 분리정제하여 흰색고체의 중간체 화합물 [1-2] 19g(46%) 와 [1-3] g 17.4(42%)을 수득하였다.

[0534] 화합물 [1]의 제조

[0535] 중간체 화합물 [1-2] 10g(46.0mmol), 브로모벤젠8.7ml(55.2mmol), 팔라듐(II) 아세테이트 0.21g(0.92mmol), 포타슘 t-부톡사이드 6.6g(69.0mmol), 트리-t-부틸포스핀 1.1ml(4.6mmol)을 넣고 자일렌 250ml를 넣고 질소를 흘려주면서 24시간동안 환류교반시켰다. 반응 종료 후 메탄올 200ml을 첨가하여 결정화 시킨후 감압여과 한 고체를 실리카겔 크로마토그래프로 분리정제하여 미색고체의 목적화합물 [1] 9.8g(73%)을 수득하였다.

[0536] ¹H NMR (300 MHz, CDCl₃) : δ 8.55~8.51(m, 2H), 8.16~8.12(m, 2H), 7.94(d, 1H), 7.67~7.45(m, 8H), 7.33~7.25(m, 2H)

[0537] MS/FAB : 293(M⁺)

[0538] 상기 반응예 1의 방법에 따라 1내지 46, 48 내지 52, 54 내지 58, 60, 61, 63, 65 내지 88, 92, 97 내지 99, 104, 105, 107 내지 155, 157 내지 167, 170, 172, 198 내지 200의 화합물을 제조하였으며, 하기 [제1표군(群)]에 그 결과를 나타내었다.

[0539]

[제1표군(群)]

화합물 번호	수율 (%)	¹ H NMR (300 MHz, CDCl ₃) (δ)	MS/FAB (M ⁺)
1	73	8.55~8.51(m, 2H), 8.16~8.12(m, 2H), 7.94(d, 1H), 7.67~7.45(m, 8H), 7.33~7.25(m, 2H)	293
2	70	8.55~8.51(m, 2H), 8.41(d, 1H), 8.16~8.12(m, 2H), 8.01~7.94(m, 3H), 7.67~7.65(m, 2H), 7.57(d, 1H), 7.40~7.25(m, 3H)	294
3	75	8.55~8.51(m, 2H), 8.16~8.12(m, 2H), 8.00~7.94(m, 4H), 7.83(s, 1H), 7.67~7.57(m, 5H), 7.36~7.25(m, 3H)	343
4	74	8.55~8.51(m, 2H), 8.16~8.12(m, 2H), 7.94(d, 1H), 7.67~7.65(m, 2H), 7.57(d, 1H), 7.42~7.24(m, 6H), 2.24(s, 3H)	307
5	72	8.55~8.51(m, 2H), 8.16~8.12(m, 2H), 7.94(d, 1H), 7.67~7.65(m, 2H), 7.57(d, 1H), 7.46~7.44(m, 2H), 7.33~7.25(m, 4H), 1.25(s, 9H)	349
6	73	8.55~8.51(m, 2H), 8.16~8.12(m, 2H), 7.94(d, 1H), 7.79~7.77(m, 2H), 7.68~7.67(m, 4H), 7.57~7.25(m, 8H)	369
7	69	8.55~8.51(m, 2H), 8.16~8.12(m, 2H), 7.94(d, 1H), 7.67~7.65(m, 2H), 7.57~7.25(m, 11H)	369
8	65	8.55~8.51(m, 2H), 8.16~8.12(m, 2H), 7.94(d, 1H), 7.79 (d, 1H), 7.68~7.67(m, 3H) , 7.57~7.19(m, 10H)	369
9	71	8.55~8.51(m, 2H), 8.16~8.12(m, 2H), 7.94~7.87(m, 3H), 7.67~7.65(m, 2H) , 7.57~7.50(m, 3H), 7.40~7.25(m, 5H), 1.62(s, 6H)	409
10	64	8.55~8.51(m, 2H), 8.16~8.12(m, 2H), 7.94(d, 1H), 7.79(d, 1H) , 7.68~7.67(m, 3H), 7.57~7.25(m, 14H)	445
11	70	8.55~8.51(m, 2H), 8.30~8.28(m, 2H), 8.16~8.12(m, 2H) , 7.94(d, 1H), 7.67~7.25(m, 11H)	370
12	69	8.55~8.51(m, 2H), 8.38(d, 1H), 8.16~7.91(m, 6H), 7.78~7.77(m, 1H), 7.67~7.57(m, 4H), 7.33~7.25(m, 2H)	344
13	64	9.54(s, 1H), 8.55~8.51(m, 2H), 8.16~8.12(m, 2H), 7.94(d, 1H), 7.80~7.78(m, 2H), 7.67~7.57(m, 4H), 7.33~7.25(m, 2H)	345
14	73	8.55~8.51(m, 2H), 8.16~8.12(m, 2H), 7.94~7.89(m, 3H), 7.78(d, 1H), 7.67~7.52(m, 6H), 7.33~7.25(m, 3H), 0.56(s, 6H)	425

[0540]

15	75	8.55~8.51(m, 2H), 8.16~8.12(m, 2H), 7.94(d, 1H), 7.67~7.60(m, 5H), 7.40~7.25(m, 4H), 0.15(s, 9H)	365
16	71	8.55~8.51(m, 2H), 8.16~8.12(m, 2H), 7.94(d, 1H), 7.67~7.57(m, 5H), 7.33~7.24(m, 4H)	311
17	62	9.21(s, 1H), 8.79(s, 2H), 8.55~8.51(m, 2H), 8.16~8.12(m, 2H), 7.94(d, 1H), 7.67~7.65(m, 2H), 7.57(d, 1H), 7.33~7.25(m, 2H)	295
18	72	8.55~8.51(m, 2H), 8.16~8.12(m, 2H), 7.94(d, 1H), 7.80~7.78(m, 2H), 7.67~7.57(m, 5H), 7.33~7.25(m, 2H)	318
19	75	8.55~8.51(m, 2H), 8.30(s, 2H), 8.16~8.12(m, 2H), 7.94~7.90(m, 5H), 7.67~7.65(m, 2H), 7.57(d, 1H), 7.40~7.25(m, 5H)	393
20	73	8.55~8.51(m, 2H), 8.16~8.12(m, 3H), 7.94(d, 1H), 7.67~7.65(m, 2H), 7.57~7.25(m, 15H)	445
21	71	8.45~8.41(m, 2H), 8.06~8.00(m, 4H), 7.84~7.70(m, 4H), 7.61~7.57(m, 6H), 7.47(m, 1H), 7.23~7.15(m, 2H)	417
22	70	8.45~8.41(m, 2H), 8.06~8.02(m, 2H), 7.84(m, 1H), 7.57(m, 2H), 7.47(m, 1H), 7.23~7.10(m, 3H), 6.90~6.86(m, 2H)	355
23	72	8.45~8.41(m, 2H), 8.06~8.02(m, 3H), 7.84(d, 2H), 7.57~7.40(m, 12H), 7.23~7.15(m, 3H)	458
24	74	8.45~8.41(m, 2H), 8.06~8.02(m, 2H), 7.84(d, 1H), 7.57~7.46(m, 7H), 7.33(m, 1H), 7.23~7.13(m, 8H), 2.24(s, 9H)	499
25	75	8.45~8.41(m, 2H), 8.06~8.02(m, 2H), 7.84(d, 1H), 7.57(m, 2H), 7.47(m, 1H), 7.283~7.09(m, 6H), 6.95~6.92(m, 2H), 6.71~6.63(m, 2H), 6.53~6.45(m, 4H), 1.62(s, 6H)	500
26	68	8.45~8.35(m, 4H), 8.06~8.02(m, 2H), 7.88~7.84(m, 2H), 7.57(m, 2H), 7.47~7.40(m, 4H), 7.23~7.15(m, 3H)	399
27	72	8.45~8.35(m, 2H), 8.06~8.02(m, 2H), 7.95(d, 2H), 7.84(d, 1H), 7.60~7.57(m, 3H), 7.41~7.23(m, 13H)	445
28	71	8.45~8.41(m, 4H), 8.06~8.02(m, 2H), 7.84~7.80(m, 3H), 7.70(d, 1H), 7.57(m, 2H), 7.50~7.15(m, 17H)	619
29	73	8.45~8.41(m, 2H), 8.08~8.02(m, 3H), 7.90~7.77(m, 3H), 7.67(d, 2H), 7.59~7.15(m, 20H)	610
30	70	8.45~8.41(m, 2H), 8.06~8.02(m, 2H), 7.84~7.81(m, 5H), 7.57(m, 2H), 7.47~7.15(m, 16H)	545

[0541]

31	63	8.45~8.41(m, 2H), 8.06~8.02(m, 2H), 7.90~7.81(m, 8H), 7.63~7.47(m, 7H), 7.30~7.15(m, 6H)	519
32	65	8.45~8.41(m, 2H), 8.06~8.02(m, 2H), 7.84(d, 1H), 7.57(m, 2H), 7.47(m, 1H), 7.23~7.15(m, 2H), 7.10(s, 2H), 6.77(s, 6H), 1.62(s, 18H)	580
33	67	8.45~8.41(m, 2H), 8.06~8.02(m, 2H), 7.84~7.81(m, 5H), 7.57(m, 2H), 7.47(m, 1H), 7.30~7.15(m, 9H)	467
34	72	8.45~8.41(m, 2H), 8.06~8.02(m, 2H), 7.84(d, 1H), 7.69(d, 2H), 7.58~7.57(m, 4H), 7.47~7.15(m, 12H)	445
35	77	8.45~8.41(m, 2H), 8.06~8.02(m, 2H), 7.84(d, 1H), 7.62~7.57(m, 4H), 7.47~7.15(m, 20H)	551
36	78	8.83~8.80(m, 3H), 8.45~8.41(m, 2H), 8.02~8.00(m, 5H), 7.84~7.70(m, 6H), 7.57(m, 2H), 7.47(m, 1H), 7.23~7.15(m, 2H)	443
37	71	8.45~8.41(m, 2H), 8.06~7.99(m, 3H), 7.84(d, 1H), 7.77(d, 1H), 7.70(s, 1H), 7.57~7.41(m, 6H), 7.34~7.15(m, 5H), 1.62(s, 12H)	525
38	72	8.45~8.41(m, 2H), 8.08~7.84(m, 7H), 7.72(d, 1H), 7.57~7.31(m, 7H), 7.23~7.15(m, 2H), 1.75(s, 6H)	459
39	74	8.45~8.41(m, 2H), 8.18(d, 1H), 8.06~7.99(m, 3H), 7.91~7.84(m, 3H), 7.57~7.42(m, 7H), 7.32(d, 1H), 7.23~7.15(m, 2H), 1.68(s, 6H)	459
40	71	8.45~8.41(m, 2H), 8.06~7.98(m, 5H), 7.84(m, 1H), 7.57(m, 2H), 7.47~7.45(m, 4H), 7.23~7.15(m, 3H)	343
41	73	8.45~8.41(m, 2H), 8.06~8.02(m, 2H), 7.84~7.77(m, 3H), 7.65~7.57(m, 4H), 7.47~7.40(m, 3H), 7.32~7.06(m, 11H)	531
42	71	8.82(d, 2H), 8.45~8.41(m, 2H), 8.06~8.02(m, 4H), 7.84~7.72(m, 5H), 7.63~7.57(m, 3H), 7.47(d, 1H), 7.23~7.15(m, 2H)	393
43	69	8.83(d, 3H), 8.45~8.41(m, 2H), 8.06~8.02(m, 4H), 7.84~7.73(m, 6H), 7.62~7.57(m, 3H), 7.47(d, 1H), 7.23~7.15(m, 2H)	443
44	77	8.45~8.41(m, 2H), 8.06~8.02(m, 2H), 7.90~7.82(m, 4H), 7.69~7.47(m, 11H), 7.23~7.15(m, 2H)	419
45	71	8.45~8.41(m, 3H), 8.069~7.82(m, 8H), 7.63~7.45(m, 9H), 7.33~7.15(m, 3H)	469

[0542]

46	78	8.45~8.41(m, 2H), 8.06~7.99(m, 3H), 7.90~7.82(m, 4H), 7.63~7.36(m, 10H), 7.23~7.15(m, 2H)	419
48	67	8.45~8.41(m, 2H), 8.06~8.02(m, 2H), 7.84(d, 1H), 7.67(t, 2H), 7.57(d, 1H), 7.27~7.10(m, 8H), 6.71(t, 2H), 6.53(d, 6H)	460
49	81	8.45(d, 1H), 8.06(d, 2H), 7.84(d, 1H), 7.57~7.15(m, 11H)	293
50	79	8.45~8.44(m, 2H), 8.06(d, 1H), 7.84(d, 1H), 7.57~7.35(m, 9H), 7.23~7.15(m, 2H)	293
51	76	8.45(d, 4H), 8.32(d, 1H), 7.98~7.94(m, 2H), 7.84(d, 1H), 7.52~7.35(m, 11H), 7.23~7.15(m, 2H)	419
52	77	8.45(d, 3H), 7.90~7.82(m, 4H), 7.63(d, 1H), 7.52~7.35(m, 11H), 7.23~7.15(m, 2H)	419
54	78	8.31(d, 1H), 7.88(d, 1H), 7.49~7.44(m, 3H), 7.28(t, 1H), 7.10~7.06(m, 3H), 6.88(d, 1H), 6.77~6.71(m, 2H), 6.59~6.53(m, 3H)	293
55	67	7.94~7.89(m, 6H), 7.44(d, 2H), 7.28(d, 2H), 7.10~7.06(m, 6H), 6.88(d, 2H), 6.77~6.71(m, 4H), 6.59~6.53(m, 6H)	584
56	66	8.45(d, 6H), 7.84(d, 2H), 7.52~7.35(m, 16H), 7.23~7.15(m, 4H)	584
57	62	8.45(d, 3H), 7.94~7.84(m, 4H), 7.52~7.06(m, 15H), 6.88(d, 1H), 6.77~6.71(m, 2H), 6.59~6.53(m, 3H)	584
58	71	7.94~7.82(m, 6H), 7.63(d, 1H), 7.49~7.44(m, 4H), 7.28(t, 1H), 7.10~7.06(m, 3H), 6.88(d, 1H), 6.77~6.71(m, 2H), 6.59~6.53(m, 3H)	419
60	62	7.94~7.82(m, 6H), 7.63(d, 1H), 7.49~7.44(m, 4H), 7.28(t, 1H), 7.10~7.06(m, 5H), 6.88(d, 1H), 6.77~6.71(m, 3H), 6.59(d, 1H), 6.53(d, 4H), 6.28(d, 4H)	586
61	72	8.45(d, 1H), 8.02(d, 1H), 7.84(d, 1H), 7.53~7.15(m, 19H)	458
63	75	8.45(d, 2H), 8.02(d, 2H), 7.84(d, 2H), 7.48~7.35(m, 12H), 7.23~7.15(m, 4H)	458
65	74	8.45(d, 1H), 8.21(s, 2H), 7.84~7.81(m, 4H), 7.48~7.15(m, 10H)	343
66	71	8.45(d, 2H), 8.21(s, 2H), 7.84~7.81(m, 6H), 7.48~7.35(m, 10H), 7.23~7.15(m, 4H)	508
67	74	8.45(d, 1H), 8.21(s, 2H), 8.02(d, 1H), 7.84~7.81(m, 3H), 7.53~7.19(m, 17H)	508

[0543]

68	65	8.45(d, 1H), 8.21(s, 2H), 8.02(d, 1H), 7.84~7.81(m, 4H), 7.53~7.15(m, 16H)	508
69	78	8.11(s, 1H), 7.81(d, 2H), 7.44(d, 1H), 7.30~7.29(m, 3H), 7.12~7.06(m, 4H), 6.77~6.52(m, 6H)	508
70	72	7.44(d, 2H), 7.30(d, 2H), 7.12~7.06(m, 8H), 6.77~6.71(m, 4H), 6.59~6.51(m, 8H)	508
71	71	7.81(d, 2H), 7.44(d, 2H), 7.29(d, 2H), 7.10~7.06(m, 6H), 6.77~6.71(m, 4H), 6.59~6.53(m, 6H), 6.35(s, 2H)	508
72	75	8.45~8.42(m, 2H), 7.99(d, 1H), 7.90~7.84(m, 3H), 7.61(d, 1H), 7.48~7.35(m, 7H), 7.23~7.15(m, 2H), 7.04(d, 1H), 1.68(s, 6H)	409
73	71	8.75(s, 1H), 8.42(d, 1H), 8.02~7.99(m, 2H), 7.88(d, 1H), 7.53~7.35(m, 10H), 7.19(t, 1H), 7.04(d, 1H), 1.68(s, 6H)	409
74	77	8.75(s, 1H), 8.18(s, 1H), 8.02(d, 1H), 7.91~7.87(m, 2H), 7.53~7.35(m, 11H), 7.19(t, 1H), 1.68(s, 6H)	409
75	75	8.45(d, 1H), 8.18(s, 1H), 7.91~7.84(m, 4H), 7.61(d, 1H), 7.48~7.35(m, 8H), 7.23~7.15(m, 2H), 1.68(s, 6H)	409
76	74	8.45(d, 1H), 8.08(d, 1H), 7.95~7.84(m, 4H), 7.72(d, 1H), 7.61(d, 1H), 7.48~7.35(m, 7H), 7.23~7.15(m, 2H), 1.75(s, 6H)	409
77	71	8.75(s, 1H), 8.08~7.88(m, 4H), 7.72(d, 1H), 7.53~7.35(m, 10H), 7.19(t, 1H), 1.75(s, 6H)	409
78	61	8.83(d, 1H), 8.02(d, 1H), 7.78~7.72(m, 2H), 7.44(d, 2H), 7.30(d, 1H), 7.12~7.06(m, 7H), 6.77~6.71(m, 4H), 6.59~6.49(m, 8H)	558
79	62	8.83(d, 1H), 8.02(d, 1H), 7.81~7.72(m, 3H), 7.44(d, 2H), 7.29(d, 1H), 7.10~7.06(m, 6H), 6.77~6.71(m, 4H), 6.59~6.35(m, 8H)	558
80	72	8.83(d, 2H), 8.11~8.02(m, 3H), 7.78~7.72(m, 4H), 7.44(d, 1H), 7.30(d, 1H), 7.12~7.06(m, 4H), 6.77~6.52(m, 6H)	443
81	69	8.43(d, 1H), 8.17(s, 1H), 8.02(m, 1H), 7.81~7.72(m, 4H), 7.44(m, 1H), 7.29(m, 2H), 7.10~7.06(m, 3H), 6.97~6.91(m, 2H), 6.89~6.79(m, 4H)	393
82	51	8.15(d, 1H), 8.02(m, 2H), 7.84~7.72(m, 3H), 7.61(s, 4H), 7.48~7.35(m, 5H), 7.23~7.15(m, 2H)	367

[0544]

83	54	8.08~7.94(m, 3H), 7.78~7.61(m, 4H), 7.44(d, 1H), 7.10~7.06(m, 3H), 6.91~6.81(m, 3H), 6.79~6.73(m, 3H)	367
84	42	8.15(d, 1H), 8.02(d, 1H), 7.90~7.84(m, 3H), 7.61~7.35(m, 16H), 7.23~7.19(m, 3H)	532
85	41	8.15(d, 1H), 8.02(d, 1H), 7.90~7.84(m, 3H), 7.61~7.40(m, 10H), 7.23~7.14(m, 7H)	568
86	39	8.15(d, 1H), 8.02(d, 1H), 7.90~7.84(m, 3H), 7.61~7.50(m, 9H), 7.40(t, 1H), 7.30~7.19(m, 7H), 0.15(s, 18H)	676
87	42	8.15(d, 1H), 8.02(d, 1H), 7.90~7.84(m, 3H), 7.70~7.53(m, 13H), 7.40(m, 1H), 7.23~7.15(m, 3H)	582
88	46	8.15(d, 1H), 8.02(d, 1H), 7.90~7.84(m, 3H), 7.61~7.50(m, 9H), 7.40(t, 1H), 7.30~7.159(m, 7H), 1.27(s, 18H)	644
92	41	8.45(m, 1H), 8.02(m, 1H), 7.90(s, 2H), 7.84(m, 1H), 7.61(s, 4H), 7.53(m, 1H), 7.40(m, 1H), 7.27~7.10(m, 15H), 6.71(m, 4H), 6.53(d, 12H)	866
97	52	7.96~7.94(m, 4H), 7.44(m, 2H), 7.10~7.06(m, 6H), 6.81~6.71(m, 6H), 6.59~6.53(m, 6H)	532
98	51	7.96~7.94(m, 4H), 7.44(d, 2H), 7.06~7.05(m, 6H), 6.81~6.77(m, 4H), 6.59(m, 2H), 6.51(m, 4H), 0.15(s, 18H)	676
99	49	7.96~7.94(m, 4H), 7.44(d, 2H), 7.10~7.06(m, 10H), 6.77~6.71(m, 8H), 6.59~6.53(m, 10H), 6.28(s, 8H)	866
104	46	8.08~8.06(t, 4H), 7.56(d, 2H), 7.18(t, 2H), 7.01~6.89(m, 8H), 6.71~6.63(m, 6H)	568
105	45	8.08~8.06(t, 4H), 7.56(d, 2H), 7.41(d, 4H), 7.18(t, 2H), 6.93~6.83(m, 8H), 6.74(d, 2H)	582
107	51	8.16~8.06(m, 3H), 7.96(d, 1H), 7.73~7.47(m, 10H), 7.31~7.18(m, 4H), 6.93~6.83(m, 3H), 6.71~6.65(m, 3H)	532
108	71	8.57(d, 1H), 8.00~7.96(t, 2H), 7.60~7.47(m, 5H), 7.35~7.21(m, 7H), 1.74(s, 12H)	401
109	65	8.57(d, 1H), 7.96(d, 1H), 7.88(d, 1H), 7.60~7.47(m, 5H), 7.35~7.21(m, 7H), 1.74(s, 12H)	401
110	75	8.57(d, 2H), 8.00~7.96(t, 4H), 7.60~7.47(m, 10H), 7.35~7.21(m, 6H), 1.74(s, 12H)	566
111	74	8.57(d, 2H), 8.00~7.96(t, 3H), 7.88(d, 1H), 7.60~7.47(m, 10H), 7.35~7.27(m, 6H), 1.74(s, 12H)	566

[0545]

112	69	8.57(d, 2H), 7.96(d, 2H), 7.88(d, 2H), 7.60~7.47(m, 10H), 7.35~7.27(m, 6H), 1.74(s, 12H)	566
113	71	8.57(d, 1H), 8.11(d, 1H), 8.02~7.96(m, 3H), 7.77~7.73(t, 2H), 7.63~7.46(m, 7H), 7.35~7.26(m, 3H), 1.74(s, 12H)	475
114	75	8.87(s, 1H), 8.14~8.11(t, 2H), 8.01(s, 1H), 7.77(s, 1H), 7.65~7.46(m, 10H), 7.31~7.26(m, 2H), 1.74(s, 12H)	475
115	65	8.57(d, 2H), 8.02~7.96(m, 4H), 7.89(s, 2H), 7.73(d, 2H), 7.60~7.47(m, 10H), 7.35~7.27(m, 4H), 1.74(s, 12H)	640
116	66	8.57(d, 2H), 8.14(s, 1H), 8.02~7.96(m, 4H), 7.77~7.73(t, 2H), 7.60~7.47(m, 11H), 7.35~7.27(m, 4H), 1.74(s, 12H)	640
117	32	8.57(d, 1H), 8.01~7.89(m, 5H), 7.69~7.27(m, 16H), 7.14(t, 1H)	461
118	71	8.80(s, 1H), 8.14~8.11(t, 2H), 7.77(d, 2H), 7.60~7.18(m, 18H)	461
119	35	8.57(d, 2H), 8.05~7.96(m, 6H), 7.69~7.47(m, 14H), 7.36~7.20(m, 8H)	646
120	32	8.80(s, 1H), 8.57(d, 1H), 8.14~8.11(t, 2H), 8.01~7.96(m, 3H), 7.63~7.27(m, 22H), 7.14(t, 1H)	646
121	54	8.77(s, 1H), 8.54(d, 1H), 8.11(d, 1H), 8.04~8.02(m, 3H), 7.93(d, 1H), 7.62~7.44(m, 16H), 7.33~7.17(m, 7H)	646
122	73	8.84(s, 1H), 8.31~8.27(m, 2H), 8.11~8.06(d, 1H), 7.91~7.90(m, 2H), 7.75(s, 1H), 7.62~7.38(m, 10H), 7.28(t, 1H), 1.68(s, 6H)	459
123	76	8.54(d, 1H), 8.31~8.27(m, 2H), 8.06(s, 1H), 7.99~7.90(m, 4H), 7.75~7.70(m, 2H), 7.57~7.24(m, 9H), 1.68(s, 6H)	459
124	75	8.54(d, 1H), 8.31~8.27(m, 2H), 8.08~8.06(m, 2H), 7.93~7.90(m, 2H), 7.75(s, 1H), 7.60~7.23(m, 11H), 1.68(s, 6H)	459
125	78	8.54(d, 1H), 8.31~8.27(m, 2H), 8.08~8.06(m, 2H), 7.93~7.90(m, 3H), 7.75(s, 1H), 7.60~7.23(m, 10H), 1.68(s, 6H)	459
126	81	8.54(d, 1H), 7.93~7.89(m, 3H), 7.78(d, 1H), 7.57~7.44(m, 6H), 7.32~7.14(m, 4H)	317
127	79	7.84(d, 1H), 7.78~7.72(m, 2H), 7.53(d, 1H), 7.19~7.14(m, 5H), 6.86~6.80(m, 3H), 6.68~6.62(m, 3H)	317
128	72	8.45(d, 1H), 8.32~8.09(m, 4H), 7.93~7.89(m, 3H), 7.78(d, 1H), 7.57~7.44(m, 6H), 7.32~7.24(m, 2H)	367

[0546]

129	72	8.32~8.09(m, 4H), 7.93(d, 1H), 7.78~7.72(m, 2H), 7.53(d, 1H), 7.19~7.15(m, 3H), 6.86~6.80(m, 3H), 6.68~6.62(m, 3H)	367
130	69	8.35~8.34(m, 3H), 7.93~7.89(m, 3H), 7.78(d, 1H), 7.57~7.24(m, 20H)	569
131	65	8.35~8.34(m, 2H), 7.93(d, 1H), 7.78~7.72(m, 2H), 7.54~7.40(m, 13H), 7.19~7.13(m, 3H), 6.86~6.80(m, 3H), 6.68~6.62(m, 3H)	569
132	73	8.43(d, 2H), 8.05(d, 2H), 7.93~7.87(m, 4H), 7.70~7.44(m, 12H), 7.32~7.24(m, 4H)	508
133	71	8.43(s, 2H), 8.05(d, 1H), 8.02(s, 3H), 7.93(d, 1H), 7.70~7.44(m, 14H), 7.32~7.24(m, 3H)	508
134	75	8.43~8.42(m, 2H), 8.05(d, 1H), 8.02~8.01(m, 2H), 7.93~7.87(m, 2H), 7.70~7.44(m, 14H), 7.32~7.24(m, 3H)	508
135	79	8.43(d, 2H), 8.05(d, 1H), 8.02(d, 1H), 7.93~7.81(m, 4H), 7.70~7.44(m, 7H), 7.32~7.24(m, 2H)	343
136	81	8.43~8.42(m, 2H), 8.02~8.01(m, 3H), 7.87~7.81(m, 2H), 7.70~7.44(m, 9H), 7.28(t, 1H)	343
137	79	8.43(d, 2H), 8.05(d, 1H), 8.02(d, 1H), 7.93(m, 5H), 7.57~7.44(m, 5H), 7.32~7.24(m, 2H)	343
138	77	8.43(d, 1H), 8.19(d, 1H), 8.02(d, 1H), 7.92~7.81(m, 3H), 7.62~7.53(m, 2H), 7.19~7.15(m, 3H), 7.01(d, 1H), 6.86~6.62(m, 5H)	343
139	72	8.11(s, 2H), 8.02(d, 1H), 7.90~7.85(m, 5H), 7.77(s, 1H), 7.62~7.38(m, 9H), 7.28(t, 1H)	449
140	65	8.25(d, 1H), 8.11(s, 2H), 8.04(d, 1H), 7.93~7.90(m, 5H), 7.59~7.24(m, 10H)	449
141	67	8.35(d, 1H), 8.25(m, 1H), 8.11(s, 2H), 7.88~7.81(m, 5H), 7.48~7.15(m, 10H)	449
142	69	8.35(d, 1H), 8.25(m, 1H), 8.11(s, 2H), 7.88~7.81(m, 6H), 7.48~7.35(m, 7H), 7.23~7.15(m, 2H)	449
143	66	8.19(m, 2H), 8.07~8.02(m, 2H), 7.81(m, 2H), 7.54~7.29(m, 11H), 7.19(m, 1H), 6.89(d, 1H), 1.68(s, 12H)	501
144	71	8.35(m, 1H), 8.19(m, 2H), 7.88~7.81(m, 4H), 7.54~7.29(m, 11H), 7.15(m, 1H), 1.68(s, 12H)	501
145	73	8.35(m, 1H), 8.19(m, 2H), 7.84~7.81(m, 2H), 7.54~7.09(m, 14H), 1.68(s, 12H)	501

[0547]

- [0554] 화합물 [47]의 제조
- [0555] 합성 예 1과 동일한 합성방법으로 중간체 화합물 [47-1], 디페닐아민, 팔라듐(II) 아세테이트, 포타슘 t-부톡사이드, 트리-t-부틸포스핀을 넣고 자일렌을 사용하여 밝은노란색고체의 목적화합물 [47] 11.3g(88%)을 수득하였다.
- [0556] ¹H NMR (300 MHz, CDCl₃) : δ 8.41(d, 1H), 8.08~8.02(m, 3H), 7.57~7.35(m, 8H), 7.10(t, 4H), 6.71(t, 2H), 6.53~6.50(m, 5H), 5.75(d, 1H)
- [0557] MS/FAB : 460(M⁺)
- [0558] 상기 반응예 2의 방법에 따라 47, 53, 59, 62, 64, 89 내지 91, 93 내지 96, 100 내지 103, 106, 156, 168, 169, 171, 173의 화합물을 제조하였으며, 하기 [제2표군(群)]에 그 결과를 나타내었다.

[0559] [제2표군(群)]

화합물 번호	수율 (%)	¹ H NMR (300 MHz, CDCl ₃) (δ)	MS/FAB (M ⁺)
47	88	8.41(d, 1H), 8.08~8.02(m, 3H), 7.57~7.35(m, 8H), 7.10(t, 4H), 6.71(t, 2H), 6.53~6.50(m, 5H), 5.75(d, 1H)	460
53	85	8.45(d, 2H), 7.90~7.82(m, 3H), 7.63~7.35(m, 14H), 7.10(t, 4H), 6.71(t, 2H), 6.53(d, 4H), 5.83(d, 1H)	586
59	72	7.94~7.82(m, 6H), 7.63(d, 1H), 7.49~7.48(m, 3H), 7.28(t, 1H), 7.20(t, 6H), 6.88(d, 1H), 6.71(t, 3H), 6.54~6.53(m, 7H), 6.34(d, 1H), 6.24(d, 1H)	586
62	71	7.59(d, 1H), 7.53~7.28(m, 16H), 7.10(t, 8H), 6.71~6.65(m, 6H), 6.53(d, 8H), 5.83(d, 1H)	792
64	69	8.02(d, 2H), 7.59~7.35(m, 16H), 7.10(t, 8H), 6.71(m, 4H), 6.53(d, 8H), 5.83(d, 2H)	792
89	71	8.15(d, 1H), 8.02(s, 1H), 7.84(d, 1H), 7.61~7.50(m, 7H), 7.23~7.10(m, 8H), 6.92(d, 1H), 6.71~6.53(m, 6H)	552
90	71	8.15(d, 1H), 8.02(s, 1H), 7.84(d, 1H), 7.61(s, 4H), 7.53~7.50(m, 3H), 7.30~7.10(m, 8H), 6.92(d, 1H), 6.71~6.53(m, 6H), 0.15(s, 9H)	606
91	70	8.45(m, 1H), 8.02(s, 1H), 7.84(m, 1H), 7.70(d, 2H), 7.65~7.53(m, 7H), 7.23~7.10(m, 6H), 6.92(d, 1H), 6.71(m, 2H), 6.53(m, 4H)	559
93	69	8.45(m, 1H), 8.02(s, 1H), 7.84(m, 1H), 7.61(s, 4H), 7.53~7.50(m, 3H), 7.23~7.14(m, 4H), 6.98(m, 5H), 6.41(d, 4H), 1.34(s, 6H)	580
94	72	8.45(m, 1H), 8.02(s, 1H), 7.84(m, 1H), 7.61(s, 4H), 7.53~7.50(m, 3H), 7.23~7.14(m, 4H), 6.92~6.91(m, 5H), 6.45(d, 4H), 1.25(s, 18H)	664
95	70	8.45(m, 1H), 8.02(s, 1H), 7.84~7.77(m, 2H), 7.61(s, 4H), 7.53~7.14(m, 18H), 6.92(d, 1H), 6.69~6.65(m, 3H), 6.49(m, 1H), 1.62(s, 6H)	744
96	32	8.45(m, 1H), 8.02(m, 1H), 7.84(m, 1H), 7.61(s, 4H), 7.48~7.35(m, 12H), 7.23~7.10(m, 11H), 6.71(m, 4H), 6.53(m, 8H)	866
100	71	8.08(d, 1H), 7.94(d, 1H), 7.61(s, 2H), 7.53(d, 1H), 7.44(d, 1H), 7.10~7.06(m, 7H), 6.92(d, 1H), 6.81~6.71(m, 5H), 6.59~6.53(m, 7H)	534

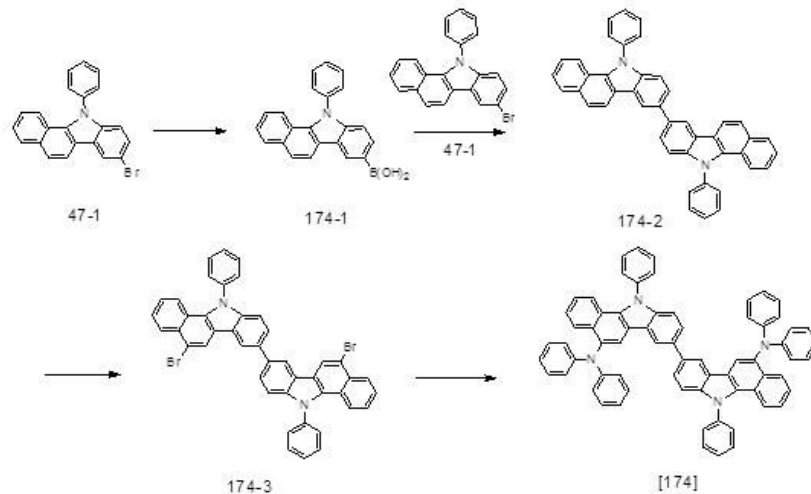
[0560]

101	69	8.20(d, 1H), 8.06(d, 1H), 7.73(s, 2H), 7.65(d, 1H), 7.56(d, 1H), 7.22~7.17(m, 7H), 7.05(d, 1H), 6.93~6.83(m, 4H), 6.71~6.63(m, 7H), 0.27(s, 9H)	806
102	72	8.20(d, 1H), 8.06(d, 1H), 7.73(s, 2H), 7.65(d, 1H), 7.56(d, 1H), 7.22~7.18(m, 5H), 7.04~7.01(m, 3H), 6.93~6.93(m, 4H), 6.71~6.63(m, 7H)	552
103	70	8.20(d, 1H), 8.06(d, 1H), 7.73(s, 2H), 7.65(d, 1H), 7.56(d, 1H), 7.41(d, 2H), 7.22~7.18(m, 5H), 7.04(d, 1H), 6.93~6.83(m, 6H), 6.71~6.65(m, 5H)	559
106	30	7.56(d, 2H), 7.26~7.18(m, 16H), 6.93~6.83(m, 10H), 6.71~6.65(m, 14H)	867
156	51	8.33(d, 1H), 8.02(d, 1H), 7.58~7.10(m, 35H), 6.71~6.65(m, 6H), 6.53(m, 8H), 6.23(d, 1H)	1001
168	52	8.02(d, 2H), 7.73~7.22(m, 24H), 6.83~6.65(m, 12H), 5.95(d, 2H), 1.62(s, 6H)	859
169	61	8.87(s, 1H), 8.12(s, 1H), 7.71~7.22(m, 23H), 6.81~6.65(m, 14H), 5.93(d, 1H), 1.62(s, 6H)	859
171	70	8.02~7.93(m, 10H), 7.73~7.22(m, 29H), 6.83~6.65(m, 14H), 5.94(d, 1H)	1095
173	64	8.02~7.59(m, 20H), 7.39~7.22(m, 21H), 6.83~6.65(m, 30H), 5.94(d, 1H)	1429

[0561]

[0562]

[반응 예 3] 화합물 [174]의 합성



[0563]

[0564]

중간체 화합물 [174-1]의 제조

[0565]

1L 반응플라스크에 질소기류 하에서 테트라히드로퓨란 150mL에 중간체 화합물 [47-1] 10g(27.9mmol)를 녹이고, -78°C에서 2.5M 부틸리튬 13.4mL(33.5mmol)을 적가하였다. 동일 온도에서 30분동안 교반한 후 트리메틸보레이트 3.7mL(33.5mmol)를 첨가하였다. 반응종료 후 1N 염산 수용액에 붓고 에틸아세테이트로 추출한다. 유기층 분리 후 디클로로메탄과 노르말헥산으로 재결정화하여 흰색 고체의 중간체 화합물 [174-1] 5.8g(62%)을 수득하였다..

[0566]

중간체 화합물 [174-2]의 제조

[0567]

합성 예1와 동일한 합성방법으로 중간체 화합물[174-1], 중간체 화합물 [47-1], 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐, 탄산칼륨, 1,4-디옥산을 사용하여 노란색 고체의 목적화합물 [174-2] 5.6g(71%)을 수득하였다.

[0568]

화합물 [174-3]의 제조

[0569]

합성 예 2와 동일한 합성방법으로 중간체 화합물 [174-2], 엔브로모숙시니미드, 디클로로메탄을 사용하여 미색 고체의 목적화합물 [174-3] 6.2g(87%)을 수득하였다

[0570] 화합물 [174]의 제조

[0571] 합성 예 1과 동일한 합성방법으로 중간체 화합물 [174-3], 디페닐아민, 팔라듐(II) 아세테이트, 포타슘 t-부톡시드, 트리-t-부틸포스핀을 넣고 자일렌을 사용하여 밝은노란색고체의 목적화합물 [174] 5.1g(67%)을 수득하였다.

[0572] $^1\text{H NMR}$ (300 MHz, CDCl_3) : δ 8.19~8.02(m, 8H), 7.77(s, 2H), 7.59~7.22(m, 22H), 6.83~6.65(m, 14H)

[0573] MS/FAB : 919(M^+)

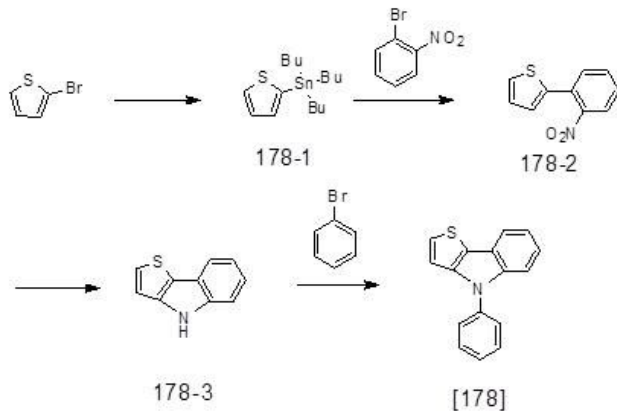
[0574] 상기 반응예 3의 방법에 따라 174 내지 177 화합물을 제조하였으며, 하기 [제3표]에 그 결과를 나타내었다.

[0575] [제3표]

화합물 번호	수율 (%)	$^1\text{H NMR}$ (300 MHz, CDCl_3) (δ)	MS/FAB (M^+)
174	61	8.19~8.02(m, 8H), 7.77(s, 2H), 7.59~7.22(m, 22H), 6.83~6.65(m, 14H)	919
175	65	8.20~8.02(m, 8H), 7.77(s, 2H), 7.59~7.47(m, 14H), 6.98~6.52(m, 18H), 2.24(s, 12H)	975
176	59	8.18~7.89(m, 10H), 7.78(s, 2H), 7.64~7.29(m, 36H), 6.71~6.55(m, 10H), 1.62(s, 12H)	1303
177	57	8.20~8.02(m, 8H), 7.78(s, 2H), 7.59~7.02(m, 22H), 6.79(s, 2H), 6.55(d, 8H), 1.25(s, 36H)	532

[0576]

[0577] [반응 예 4] 화합물 [178]의 합성



[0578]

[0579] 중간체 화합물 [178-1]의 제조

[0580] 2L 반응플라스크에 질소기류 하에서 테트라히드로퓨란 1L에 2-브로모싸이오펜 30g(184.0mmol)를 녹이고, -78°C 에서 2.5M 부틸리튬 88.3mL(220.8mmol)을 적가하였다. 동일 온도에서 10분동안 교반한 후 트리부틸틴클로라이드 59.9mL(220.8mmol)를 첨가하였다. 반응종료 후 에틸아세테이트/중류수로 층분리하여 얻은 유기층을 무수 황산 마그네슘으로 수분을 제거하고 감압증류한다. 농축액을 컬럼크로마토그래프로 분리정제하여 연한 노란색 오일의 중간체화합물 [178-1] 35.7g(52%)을 수득하였다.

[0582] 중간체 화합물 [178-2]의 제조

[0583] 합성 예1와 동일한 합성방법으로 중간체 화합물[178-1], 1-브로모-2-니트로벤젠, 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐, 탄산칼륨, 1,4-디옥산을 사용하여 노란색 고체의 목적화합물 [178-2] 11.0g(72%)을 수득하였다.

[0584] 중간체 화합물 [178-3]의 제조

[0585] 합성 예1와 동일한 합성방법으로 중간체 화합물[178-3], 트리에틸포스파이트, 큐멘을 사용하여 흰색고체의 중간체 화합물 [178-3] 8.1g(87%)을 수득하였다.

[0586] 화합물 [178]의 제조

[0587] 합성 예 1과 동일한 합성방법으로 중간체 화합물 [178-3], 브로모벤젠, 팔라듐(II) 아세테이트, 포타슘 t-부톡시드, 트리-t-부틸포스핀을 넣고 자일렌을 사용하여 밝은노란색고체의 목적화합물 [178] 8.7g(75%)을 수득하였다.

[0588] ¹H NMR (300 MHz, CDCl₃) : δ 8.43(d, 1H), 7.95(d, 1H), 7.51~7.22(m, 8H), 6.97(d, 1H)

[0589] MS/FAB : 249(M⁺)

[0590] 상기 반응예 4의 방법에 따라 178 내지 197의 화합물을 제조하였으며, 하기 [제4표]에 그 결과를 나타내었다.

[0591] [제4표]

화합물 번호	수율 (%)	¹ H NMR (300 MHz, CDCl ₃) (δ)	MS/FAB (M ⁺)
178	87	8.43(d, 1H), 7.95(d, 1H), 7.51~7.22(m, 8H), 6.97(d, 1H)	249
179	85	8.43(d, 1H), 8.07~7.96(m, 3H), 7.59~7.25(m, 9H)	299
180	85	8.43(d, 2H), 7.96(d, 2H), 7.59~7.26(m, 14H)	414
181	83	8.45~7.94(m, 2H), 7.59~7.25(m, 9H)	305
182	84	8.46~7.92(m, 4H), 7.58~7.25(m, 14H)	470
183	81	8.44~7.91(m, 2H), 7.60~6.96(m, 9H)	361
184	80	8.45~7.94(m, 4H), 7.61~7.22(m, 14H)	526
185	71	8.43~7.94(m, 2H), 7.58~6.92(m, 9H)	417
186	70	8.46~7.92(m, 4H), 7.59~7.20(m, 14H)	582
187	75	8.43(d, 1H), 7.98~7.22(m, 12H)	355
188	61	8.45~8.42(m, 2H), 7.96~7.80(m, 4H), 7.62~7.23(m, 14H)	520
189	63	8.45(d, 1H), 7.94~7.24(m, 14H)	405
190	66	8.43~8.40(m, 2H), 7.94~7.75(m, 6H), 7.59~7.22(m, 14H)	570
191	71	8.44~8.30(m, 3H), 7.96~7.90(m, 5H), 7.62~7.21(m, 9H)	399
192	66	8.47~8.31(m, 4H), 7.94~7.91(m, 6H), 7.58~7.23(m, 14H)	620
193	59	8.43~7.94(m, 2H), 7.59~7.20(m, 7H), 6.6(d, 1H), 5.2(d, 1H)	296
194	57	8.43(d, 1H), 7.96~7.77(m, 2H), 7.62~7.23(m, 10H)	346
195	55	8.46~7.93(m, 4H), 7.61~7.25(m, 14H)	461
196	43	8.54(d, 1H), 8.16~7.92(m, 2H), 7.73~7.23(m, 8H)	301
197	42	8.55~7.94(m, 4H), 7.59~7.20(m, 14H)	466

[0592]

[0593] 비교예 1

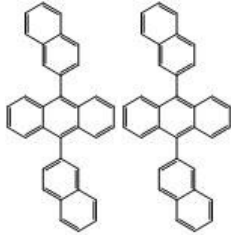
[0594] 하기 화학식 a로 표시되는 화합물 a를 형광 녹색 호스트로 사용하고, 하기 화학식 b로 표시되는 화합물 b를 형광 녹색 도판트로 사용하고, 2-TNATA(4,4',4''-tris(N-naphthalen-2-yl)-N-phenylamino)-triphenylamine)을 정공주입층 물질로 사용하고, α-NPD(N,N'-di(naphthalene-1-yl)-N,N'-diphenylbenzidine)을 정공수송층 물질로 사용하여, 다음과 같은 구조를 갖는 유기발광소자를 제작하였다: ITO/2-TNATA(80nm)/α-NPD(30nm)/화합물 a+화합물b(30nm)/Alq3(30nm)/LiF(0.5nm)/Al(60nm).

[0595] 애노드는 코닝(Corning)사의 15Ω/cm² (1000Å) ITO 유리 기판을 50mm x 50mm x 0.7mm크기로 잘라서 아세톤 이소프로필 알콜과 순수물 속에서 각 15분 동안 초음파 세정한 후, 30분 동안 UV 오존 세정하여 사용하였다. 상기 기판 상부에 2-TANATA를 진공 증착하여 80nm 두께의 정공주입층을 형성하였다. 상기 정공주입층 상부에, α-NPD를 진공 증착하여 30nm 두께의 정공수송층을 형성하였다. 상기 정공수송층 상부에 화학식 a로 표시되는 화합물 a 및 화학식 b로 표시되는 화합물 b(3% 도핑)를 진공 증착하여 30nm두께의 발광층을 형성하였다. 이후, 상기 발광층 상부에 Alq3 화합물을 30nm의 두께로 진공증착하여 전자수송층을 형성하였다. 상기 전자수송층 상부에 LiF 0.5nm(전자주입층)과 Al 60nm(캐소드)를 순차적으로 진공증착하여, 표 6에 표시된 바와 같은 유기발광소자를 제조하였다. 이를 비교샘플 1이라고 한다.

[0596]

<화학식 a>

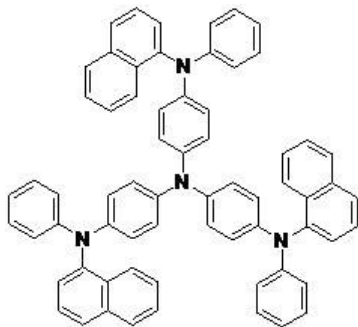
<화학식 b>



[0597]

[0598]

<화학식 c>



[0599]

[0600]

실시예 62, 64, 87, 92, 96, 99, 105, 106, 156, 163~165, 168, 169, 171~177

[0601]

상기 비교예 1 중, 정공수송층 화합물로서 화합물 C(2-TNATA) 대신 상기 합성예에 개시된 화학식 62, 64, 87, 92, 96, 99, 105, 106, 156, 163~165, 168, 169, 171~177으로 표시되는 화합물 62, 64, 87, 92, 96, 99, 105, 106, 156, 163~165, 168, 169, 171~177을 정공수송층 화합물로 각각 이용한 것을 제외하고는 상기 비교예 1과 동일한 방법으로 ITO/ 화합물 62, 64, 87, 92, 96, 99, 105, 106, 156, 163~165, 168, 169, 171~177(80nm)/ α -NPD(30nm)/화합물a+화합물b(30nm)/Alq3(30nm)/LiF(0.5nm)/Al(60nm)의 구조를 갖는 유기발광소자를 제조하였다. 이를 각각 샘플 62, 64, 87, 92, 96, 99, 105, 106, 156, 163~165, 168, 169, 171~177이라고 한다.

[0602]

평가예 1: 비교샘플 1 및 샘플 62, 64, 87, 92, 96, 99, 105, 106, 156, 163~165, 168, 169, 171~177의 발광 특성 평가

[0603]

비교샘플 1 및 샘플 62, 64, 87, 92, 96, 99, 105, 106, 156, 163~165, 168, 169, 171~177에 대하여, Keithley SMU 235, PR650를 이용하여 발광휘도, 발광효율, 발광피크를 각각 평가하여, 그 결과를 하기 [제5표]에 나타내었다. 상기 샘플들은 512~526nm 범위에서 녹색 발광피크값을 보여주었다.

[0604] [제5표]

샘플 No.	정공수송층 화합물 No.	위도 [cd/m ²]	효율 [cd/A]	발광피크 [nm]
비교샘플 1	c	2032	20.3	516
62	62	2142	21.4	525
64	64	2382	23.8	514
87	87	2176	21.8	513
92	92	2051	20.5	519
96	96	2237	22.4	513
99	99	1804	18.0	518
105	105	2853	28.5	516
106	106	2762	27.6	521
156	156	1928	19.3	520
163	163	2784	27.8	520
164	164	2136	21.4	521
165	165	2423	24.2	515
168	168	2451	24.5	514
169	169	2007	20.1	524
171	171	2551	25.5	521
172	172	2231	22.3	522
173	173	1876	18.8	524
174	174	2210	22.1	513
175	175	2060	20.6	515
176	176	2825	28.3	516
177	177	2695	27.0	524

[0605]

[0606] 상기 [제5표]에 보여지는 바와 같이 샘플 62, 64, 87, 92, 96, 99, 105, 106, 156, 163~165, 168, 169, 171~177은 비교샘플 1에 비하여 향상된 발광 특성을 나타내었다.

[0607] 실시예 1~142

[0608] 상기 비교예 1 중, 발광층 형광 도판트 화합물로서 화합물 b 대신 상기 합성예에 개시된 화학식 1~61, 63, 66~86, 88~91, 93, 94, 95, 97, 98, 100~104, 107~155, 157~162, 166, 167, 170, 178~201로 표시되는 화합물 1~61, 63, 66~86, 88~91, 93, 94, 95, 97, 98, 100~104, 107~155, 157~162, 166, 167, 170, 178~201을 발광층 형광 녹색 도판트 화합물로 각각 이용한 것을 제외하고는 상기 비교예 1과 동일한 방법으로 ITO/2-TNATA(80nm)/ α -NPD(30nm)/[화합물A + 형광 녹색 호스트 화합물 1~61, 63, 66~86, 88~91, 93, 94, 95, 97, 98, 100~104, 107~155, 157~162, 166, 167, 170, 178~201 중 하나(3%)](30nm)/Alq3(30nm)/LiF(0.5nm)/Al(60nm)의 구조를 갖는 유기발광소자를 제조하였다. 이를 각각 샘플 1~61, 63, 66~86, 88~91, 93, 94, 95, 97, 98, 100~104, 107~155, 157~162, 166, 167, 170, 178~201라고 한다.

[0609] 평가예 2: 비교샘플 1 및 샘플 1~61, 63, 66~86, 88~91, 93, 94, 95, 97, 98, 100~104, 107~155, 157~162, 166, 167, 170, 178~201의 발광 특성 평가

[0610] 비교샘플 1 및 샘플 1~61, 63, 66~86, 88~91, 93, 94, 95, 97, 98, 100~104, 107~155, 157~162, 166, 167, 170, 178~201에 대하여, Keithley SMU 235, PR650를 이용하여 발광휘도, 발광효율, 발광피크를 각각 평가하여, 그 결과를 하기 [제6표군(群)]에 나타내었다. 상기 샘플들은 512~526nm 범위에서 녹색 발광피크값을 보여주었다.

[0611]

[제6표군(群)]

샘플 No.	호스트 화합물 No.	도판트 화합물 No.	휘도 [cd/m ²]	효율 [cd/A]	발광피크 [nm]
비교샘플 1	a	b	2032	20.3	516
1	a	1	2128	21.3	520
2	a	2	2071	20.7	521
3	a	3	2514	25.1	514
4	a	4	2249	22.5	512
5	a	5	2361	23.6	523
6	a	6	2585	25.9	520
7	a	7	2350	23.5	512
8	a	8	2866	28.7	517
9	a	9	2730	27.3	519
10	a	10	2742	27.4	526
11	a	11	2742	27.4	517
12	a	12	2246	22.5	517
13	a	13	2110	21.1	517
14	a	14	2557	25.6	519
15	a	15	2758	27.6	517
16	a	16	2162	21.6	526
17	a	17	2327	23.3	525
18	a	18	2844	28.4	512
19	a	19	2651	26.5	514
20	a	20	2212	22.1	516
21	a	21	2431	24.3	518

[0612]

22	a	22	2774	27.7	514
23	a	23	2855	28.6	512
24	a	24	1922	19.2	520
25	a	25	1892	18.9	525
26	a	26	2670	26.7	515
27	a	27	2633	26.3	525
28	a	28	2655	26.6	522
29	a	29	2647	26.5	524
30	a	30	2334	23.3	526
31	a	31	2089	20.9	521
32	a	32	2451	24.5	515
33	a	33	2504	25.0	518
34	a	34	2795	28.0	518
35	a	35	1838	18.4	514
36	a	36	2240	22.4	517
37	a	37	2093	20.9	521
38	a	38	2534	25.3	521
39	a	39	2889	28.9	520
40	a	40	2179	21.8	515
41	a	41	2501	25.0	519
42	a	42	1969	19.7	526
43	a	43	2200	22.0	518
44	a	44	2688	26.9	526
45	a	45	2806	28.1	514
46	a	46	2333	23.3	517
47	a	47	2130	21.3	524
48	a	48	2628	26.3	520
49	a	49	2541	25.4	524
50	a	50	2306	23.1	518
51	a	51	1839	18.4	516
52	a	52	1913	19.1	515
53	a	53	1818	18.2	514
54	a	54	2132	21.3	521
55	a	55	2231	22.3	515
56	a	56	2860	28.6	515
57	a	57	2658	26.6	515

[0613]

58	a	58	2690	26.9	512
59	a	59	2501	25.0	524
60	a	60	2147	21.5	520
61	a	61	2377	23.8	514
63	a	63	1856	18.6	519
66	a	66	2749	27.5	515
67	a	67	2511	25.1	513
68	a	68	2088	20.9	513
69	a	69	2111	21.1	525
70	a	70	2727	27.3	525
71	a	71	2752	27.5	517
72	a	72	2283	22.8	520
73	a	73	2304	23.0	513
74	a	74	2339	23.4	520
75	a	75	2800	28.0	520
76	a	76	2069	20.7	520
77	a	77	1850	18.5	524
78	a	78	1929	19.3	523
79	a	79	2185	21.9	513
80	a	80	2298	23.0	517
81	a	81	2626	26.3	512
82	a	82	2100	21.0	525
83	a	83	2183	21.8	516
84	a	84	2030	20.3	512
85	a	85	2119	21.2	525
86	a	86	1994	19.9	517
88	a	88	2372	23.7	520
89	a	89	2559	25.6	518
90	a	90	2476	24.8	514
91	a	91	2573	25.7	516
93	a	93	2394	23.9	526
94	a	94	1953	19.5	513
95	a	95	2190	21.9	526
97	a	97	2746	27.5	513
98	a	98	1872	18.7	518
100	a	100	2870	28.7	518

[0614]

101	a	101	1856	18.6	526
102	a	102	2303	23.0	525
103	a	103	2289	22.9	526
104	a	104	2819	28.2	524
107	a	107	2254	22.5	518
108	a	108	2162	21.6	517
109	a	109	2491	24.9	514
110	a	110	2257	22.6	516
111	a	111	2270	22.7	524
112	a	112	2767	27.7	526
113	a	113	2790	27.9	526
114	a	114	2470	24.7	523
115	a	115	2037	20.4	521
116	a	116	1981	19.8	525
117	a	117	2071	20.7	520
118	a	118	2372	23.7	520
119	a	119	2308	23.1	523
120	a	120	2715	27.2	519
121	a	121	2040	20.4	517
122	a	122	2202	22.0	518
123	a	123	1850	18.5	514
124	a	124	2023	20.2	526
125	a	125	2734	27.3	514
126	a	126	2530	25.3	518
127	a	127	2724	27.2	514
128	a	128	2376	23.8	517
129	a	129	2869	28.7	512
130	a	130	2870	28.7	526
131	a	131	2060	20.6	523
132	a	132	2127	21.3	516
133	a	133	2397	24.0	516
134	a	134	2573	25.7	519
135	a	135	2073	20.7	521
136	a	136	1903	19.0	517
137	a	137	2238	22.4	523
138	a	138	2675	26.8	515

[0615]

139	a	139	2324	23.2	517
140	a	140	2841	28.4	523
141	a	141	2067	20.7	519
142	a	142	1833	18.3	512
143	a	143	2462	24.6	517
144	a	144	2262	22.6	524
145	a	145	2810	28.1	525
146	a	146	2678	26.8	522
147	a	147	2372	23.7	523
148	a	148	2392	23.9	525
149	a	149	1940	19.4	516
150	a	150	2610	26.1	516
151	a	151	1864	18.6	513
152	a	152	2035	20.4	518
153	a	153	1978	19.8	516
154	a	154	2129	21.3	519
155	a	155	1841	18.4	524
157	a	157	2241	22.4	520
158	a	158	2367	23.7	523
159	a	159	2381	23.8	520
160	a	160	2133	21.3	512
161	a	161	2485	24.9	525
162	a	162	2691	26.9	521
166	a	166	2256	22.6	523
167	a	167	2180	21.8	519
170	a	170	2537	25.4	525
178	a	178	2639	26.4	522
179	a	179	2337	23.4	512
180	a	180	1985	19.9	514
181	a	181	2468	24.7	518
182	a	182	2021	20.2	522
183	a	183	1852	18.5	522
184	a	184	1830	18.3	520
185	a	185	2130	21.3	526
186	a	186	1841	18.4	523
187	a	187	2617	26.2	522

[0616]

188	a	188	2832	28.3	519
189	a	189	2827	28.3	521
190	a	190	2247	22.5	514
191	a	191	1872	18.7	512
192	a	192	2287	22.9	513
193	a	193	1956	19.6	526
194	a	194	2715	27.2	524
195	a	195	2887	28.9	512
196	a	196	2459	24.6	512
197	a	197	2171	21.7	520
198	a	198	2279	22.8	518
199	a	199	2850	28.5	525
200	a	200	2851	28.5	521
201	a	201	1802	18.0	526

[0617]

[0618]

상기 [제6표군(群)]에 보여지는 바와 같이 샘플 1~61, 63, 66~86, 88~91, 93, 94, 95, 97, 98, 100~104, 107~155, 157~162, 166, 167, 170, 178~201은 비교샘플 1에 비하여 향상된 발광 특성을 나타내었다.

[0619]

이상의 설명에서 통상의 공지된 기술을 생략되어 있으나, 당업자라면 용이하게 이를 추측 및 추론하고 재현할 수 있다.

专利名称(译)	有机发光化合物和使用其的有机光子器件		
公开(公告)号	KR101559437B1	公开(公告)日	2015-10-15
申请号	KR1020120152373	申请日	2012-12-24
申请(专利权)人(译)	氛围有限公司凯		
当前申请(专利权)人(译)	氛围有限公司凯		
[标]发明人	JEA SUNG LEE 이재성 DO HWAN AHN 안도환 JI SOUNG KANG 강지승 NO GILL PARK 박노길 KEUN HEE HAN 한근희 JUNG BOK AN 안중복 BOK YOUNG KIM 김복영 SEUNG HAK HYUN 현승학		
发明人	이재성 안도환 강지승 박노길 한근희 안중복 김복영 현승학		
IPC分类号	C09K11/06 H01L51/50		
CPC分类号	H01L51/0072 H01L51/5072		
优先权	1020110002607 2011-01-11 KR		
其他公开文献	KR1020130016163A		
外部链接	Espacenet		

摘要(译)

有机发光器件和用于其的有机发光化合物技术领域本发明涉及有机发光器件和用于其的有机发光化合物，更具体地涉及能够实现优异的发光效率，发光亮度，色纯度的有机发光器件。（ETM），用于第一电极的发光层（EML），空穴传输层（HTM）等以及第一电极和第二电极之间的各种有机层，从而改善诸如提高效率 and 降低驱动电压的性能，并最大化作为OLED材料的能力。

