

	(19) 대한민국특허청(KR) (12) 공개특허공보(A)	(11) 공개번호 10-2017-0048159 (43) 공개일자 2017년05월08일
(51) 국제특허분류(Int. Cl.) <i>C09K 11/06</i> (2006.01) <i>C07D 209/82</i> (2006.01) <i>C07D 251/12</i> (2006.01) <i>C07D 307/91</i> (2006.01) <i>C07D 333/76</i> (2006.01) <i>C07D 403/10</i> (2006.01) <i>H01L 51/00</i> (2006.01) <i>H01L 51/50</i> (2006.01) (52) CPC특허분류 <i>C09K 11/06</i> (2013.01) <i>C07D 209/82</i> (2013.01) (21) 출원번호 10-2016-0129962 (22) 출원일자 2016년10월07일 심사청구일자 없음 (30) 우선권주장 1020150148231 2015년10월23일 대한민국(KR)		(71) 출원인 삼성에스디아이 주식회사 경기도 용인시 기흥구 공세로 150-20 (공세동) (72) 발명자 이상진 경기도 수원시 영통구 삼성로 130 (매탄동) 강동민 경기도 수원시 영통구 삼성로 130 (매탄동) (뒷면에 계속) (74) 대리인 팬코리아특허법인

전체 청구항 수 : 총 13 항

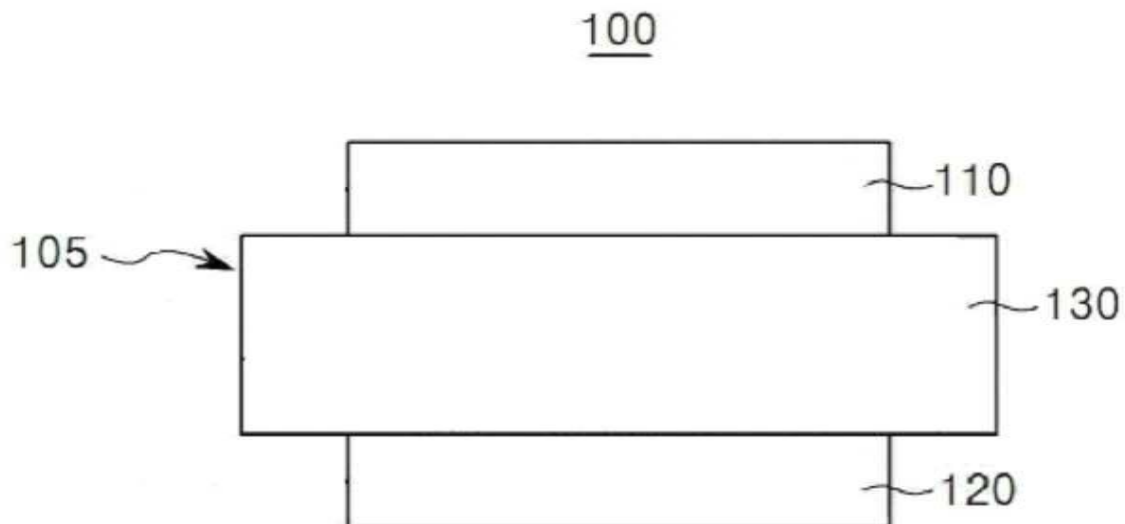
(54) 발명의 명칭 유기 광전자 소자용 조성물, 유기 광전자 소자 및 표시 장치

(57) 요약

화학식 1로 표현되는 적어도 1종의 제1 화합물; 및 화학식 2로 표현되는 적어도 1종의 제2 화합물을 포함하는 유기 광전자 소자용 조성물, 이를 포함하는 유기 광전자 소자 및 상기 유기 광전자 소자를 포함하는 표시 장치에 관한 것이다.

화학식 1 및 2는 명세서에 기재한 바와 같다.

대표도 - 도1



(52) CPC특허분류

C07D 251/12 (2013.01)

C07D 307/91 (2013.01)

C07D 333/76 (2013.01)

C07D 403/10 (2013.01)

H01L 51/0067 (2013.01)

H01L 51/50 (2013.01)

C09K 2211/1059 (2013.01)

C09K 2211/1088 (2013.01)

C09K 2211/1092 (2013.01)

(72) 발명자

김준석

경기도 수원시 영통구 삼성로 130 (매탄동)

이병관

경기도 수원시 영통구 삼성로 130 (매탄동)

이한일

경기도 수원시 영통구 삼성로 130 (매탄동)

장기포

경기도 수원시 영통구 삼성로 130 (매탄동)

한수진

경기도 수원시 영통구 삼성로 130 (매탄동)

김영권

경기도 수원시 영통구 삼성로 130 (매탄동)

유은선

경기도 수원시 영통구 삼성로 130 (매탄동)

명세서

청구범위

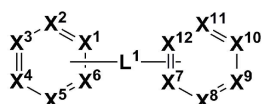
청구항 1

하기 화학식 1로 표현되는 적어도 1종의 제1 화합물; 및

하기 화학식 2로 표현되는 적어도 1종의 제2 화합물

을 포함하는 유기 광전자 소자용 조성물:

[화학식 1]



상기 화학식 1에서,

X^1 내지 X^{12} 는 각각 독립적으로 N, C 또는 CR^a 이고,

X^1 내지 X^6 중 적어도 하나는 N이고,

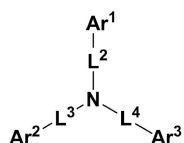
X^7 내지 X^{12} 중 적어도 하나는 N이고,

R^a 는 각각 독립적으로, 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알케닐기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알키닐기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴티오기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴기, 히드록실기, 티올기, 또는 이들의 조합이고,

R^a 는 각각 독립적으로 존재하거나, 인접한 R^a 는 서로 연결되어 고리를 형성하고,

L^1 은 중수소, C1 내지 C40 실릴기, C1 내지 C30 알킬기, C3 내지 C30 시클로알킬기, C2 내지 C30 헤테로시클로알킬기, 또는 C6 내지 C30 아릴기로 치환되거나 비치환된 C6 내지 C30 아릴렌기이고;

[화학식 2]



상기 화학식 2에서,

L^2 내지 L^4 는 각각 독립적으로, 단일 결합, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴렌기, 또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴렌기이고,

Ar^1 내지 Ar^3 은 각각 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로고리기, 또는 이들의 조합이고,

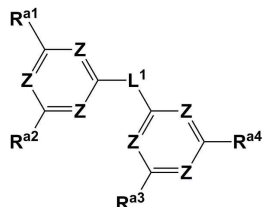
상기 화학식 1 및 2의 "치환"은 별도의 정의가 없는 한, 적어도 하나의 수소가 중수소, 할로젠기, 히드록실기, 아미노기, C1 내지 C30 아민기, C6 내지 C30 아릴아민기, 니트로기, C1 내지 C40 실릴기, C1 내지 C30 알킬기, C3 내지 C30 시클로알킬기, C2 내지 C30 헤테로시클로알킬기, C6 내지 C30 아릴기, C2 내지 C30 헤테로고리기, C1 내지 C20 알콕시기, C1 내지 C10 트리플루오로알킬기 또는 시아노기로 치환된 것을 의미한다.

청구항 2

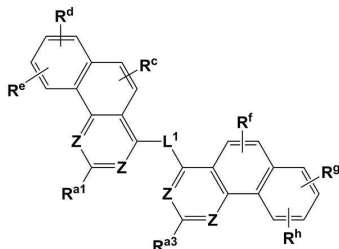
제1항에서,

상기 화학식 1은 하기 화학식 1-I 내지 화학식 1-IV 중 어느 하나로 표현되는 유기 광전자 소자용 조성물:

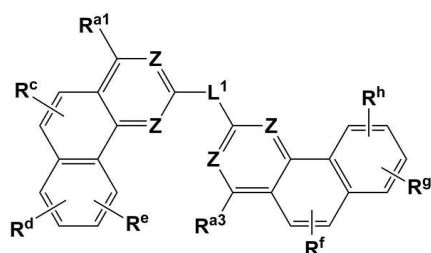
[화학식 1-I]



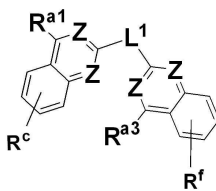
[화학식 1-II]



[화학식 1-III]



[화학식 1-IV]



상기 화학식 1-I 내지 1-IV 에서,

Z는 각각 독립적으로 N, 또는 CR^a이고,

Z 를 포함한 각각의 고리에서 적어도 하나의 Z는 N 이고,

R^a, R^{a1} 내지 R^{a4}, R^c, R^d, R^e, R^f, R^g, 및 R^h는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴기, 또는 이들의 조합이고,

L¹은 중수소, C1 내지 C40 실릴기, C1 내지 C30 알킬기, C3 내지 C30 시클로알킬기, C2 내지 C30 헤테로시클로알킬기 또는 C6 내지 C30 아릴기로 치환되거나 비치환된 C6 내지 C30 아릴렌기이고,

여기서, "치환"은 제1항에서 정의한 바와 같다.

청구항 3

제1항에서,

상기 L¹은 중수소, C1 내지 C40 실릴기, C1 내지 C30 알킬기, 또는 C6 내지 C30 아릴기로 치환되거나 비치환된 페닐렌기;

중수소, C1 내지 C40 실릴기, C1 내지 C30 알킬기, 또는 C6 내지 C30 아릴기로 치환되거나 비치환된 바이페닐렌기;

중수소, C1 내지 C40 실릴기, C1 내지 C30 알킬기 또는 C6 내지 C30 아릴기로 치환되거나 비치환된 터페닐렌기; 또는

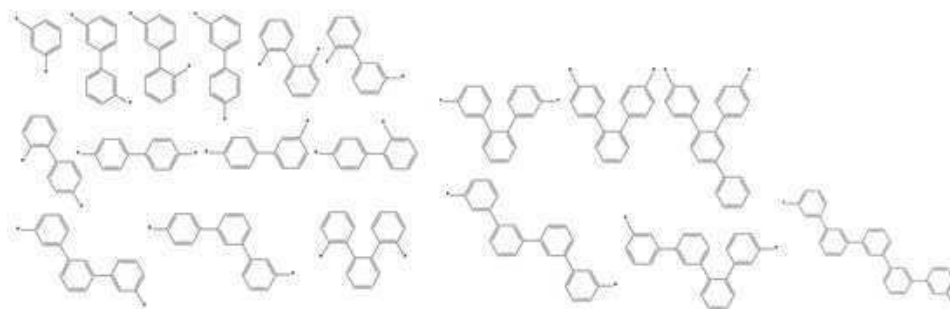
중수소, C1 내지 C40 실릴기, C1 내지 C30 알킬기 또는 C6 내지 C30 아릴기로 치환되거나 비치환된 쿼터페닐렌기인 유기 광전자 소자용 조성물.

청구항 4

제1항에서,

상기 L^1 은 치환되거나 비치환된 하기 그룹 2에 나열된 연결기에서 선택되는 유기 광전자 소자용 조성물:

[그룹 2]



상기 그룹 2에서, *은 이웃 원자와의 연결 지점이다.

청구항 5

제1항에서,

상기 화학식 1의 X^1 내지 X^{12} 는 각각 독립적으로 N, C 또는 CR^a 이고,

X^1 내지 X^6 중 3개는 N이고,

X^7 내지 X^{12} 중 1개 내지 3개는 N이고,

R^a 는 각각 독립적으로, 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴기, 또는 이들의 조합이고,

L^1 은, 중수소, C1 내지 C30 알킬기 또는 C6 내지 C30 아릴기로 치환되거나 비치환된 C6 내지 C30 아릴렌기이고

여기서 "치환"은 별도의 정의가 없는 한 적어도 하나의 수소가 중수소, 할로젠기, 히드록실기, C1 내지 C40 실릴기, C1 내지 C30 알킬기, C3 내지 C30 시클로알킬기, C2 내지 C30 헤테로시클로알킬기, C6 내지 C30 아릴기 또는 C2 내지 C30 헤테로고리기로 치환된 유기 광전자 소자용 조성물.

청구항 6

제5항에서,

상기 R^a 는 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기이고,

상기 C6 내지 C30 아릴기는 치환 또는 비치환된 페닐기, 치환 또는 비치환된 바이페닐기, 치환 또는 비치환된 터페닐기, 치환 또는 비치환된 쿼터페닐기, 치환 또는 비치환된 나프틸기, 치환 또는 비치환된 안트라센일기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐기, 치환 또는 비치환된 트리페닐렌기, 또는 치환 또는 비치환된 페난트레닐기인 유기 광전자 소자용 조성물.

청구항 7

제1항에서,

상기 화학식 2의 L^2 내지 L^4 는 각각 독립적으로, 단일결합, 치환 또는 비치환된 페닐렌기, 치환 또는 비치환된 바이페닐렌기, 치환 또는 비치환된 나프틸기, 치환 또는 비치환된 플루오렌일기, 치환 또는 비치환된 피리딘일기, 치환 또는 비치환된 피리미딘일기, 치환 또는 비치환된 퀴놀린일기, 또는 이들의 조합이고,

Ar^1 내지 Ar^3 은 각각 독립적으로, 치환 또는 비치환된 페닐기, 치환 또는 비치환된 바이페닐기, 치환 또는 비치환된 터페닐기, 치환 또는 비치환된 쿼터페닐기, 치환 또는 비치환된 나프틸기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐

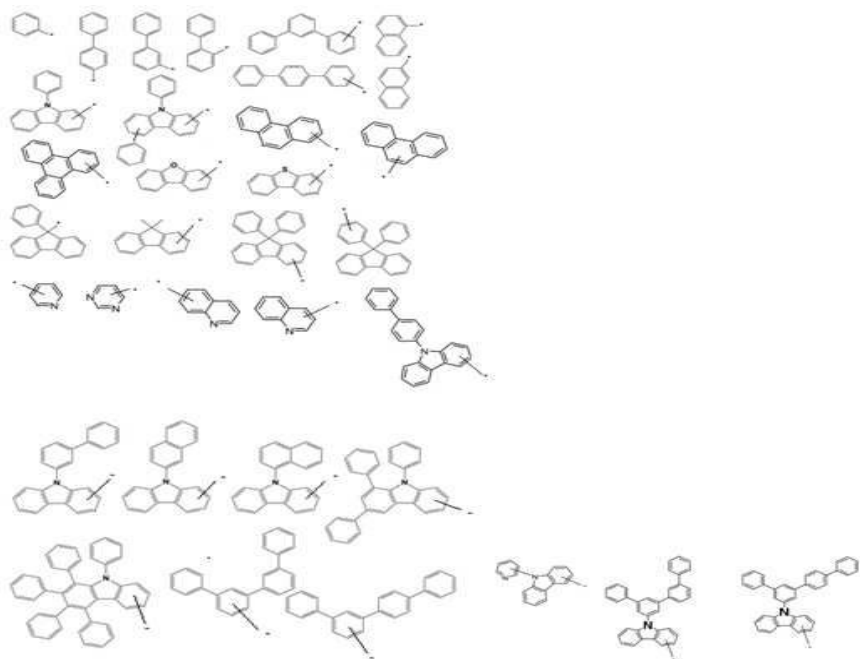
기, 치환 또는 비치환된 카바졸일기, 치환 또는 비치환된 디벤조퓨라닐기, 치환 또는 비치환된 디벤조티오펜일기, 치환 또는 비치환된 안트라센일기, 치환 또는 비치환된 펜난트렌일기, 치환 또는 비치환된 트리페닐렌기, 치환 또는 비치환된 퀴놀린일기, 치환 또는 비치환된 피리딘일기, 치환 또는 비치환된 피리미딘일기, 치환 또는 비치환된 티오펜일기 또는 이들의 조합인 유기 광전자 소자용 조성물.

청구항 8

제7항에서,

상기 화학식 2의 Ar^1 내지 Ar^3 은 치환 또는 비치환된 하기 그룹 4에 나열된 기에서 선택되는 유기 광전자 소자용 조성물:

[그룹 4]



상기 그룹 4에서, *은 이웃 원자와의 연결 지점이다.

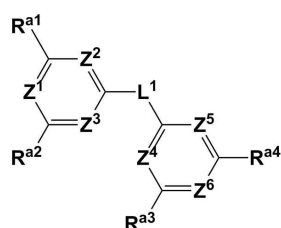
청구항 9

제1항에서,

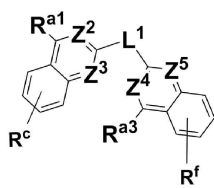
상기 제1 화합물은 하기 화학식 1-Ia 또는 화학식 1-IVa로 표현되고,

상기 제2 화합물은 상기 화학식 2의 L^2 내지 L^4 가 각각 독립적으로, 단일결합, 또는 치환 또는 비치환된 페닐렌기이고, Ar^1 내지 Ar^3 가 각각 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로고리기이되, Ar^1 내지 Ar^3 중 적어도 하나는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로고리기인 유기 광전자 소자용 조성물:

[화학식 1-Ia]



[화학식 1-IVa]



상기 화학식 1-I a 및 1-IVa 에서,

Z^1 내지 Z^6 은 각각 독립적으로 N, 또는 CR^a이고,

Z^1 내지 Z^3 중 적어도 둘은 N이고,

Z^4 내지 Z^6 중 적어도 둘은 N이고,

R^a, 및 R^{a1} 내지 R^{a4}는 각각 독립적으로 수소, 또는 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기이고,

L¹은 중수소, C1 내지 C30 알킬기 또는 C6 내지 C30 아릴기로 치환되거나 비치환된 C6 내지 C30 아릴렌기이고,

여기서, "치환"은 제1항에서 정의한 바와 같다.

청구항 10

제1항에서,

인광 도펀트를 더 포함하는 유기광전자소자용 조성물.

청구항 11

서로 마주하는 애노드와 캐소드, 그리고

상기 애노드와 상기 캐소드 사이에 위치하는 적어도 1층의 유기층

을 포함하고,

상기 유기층은 제1항 내지 제10항 중 어느 한 항에 따른 유기 광전자 소자용 조성물을 포함하는 유기 광전자 소자.

청구항 12

제11항에서,

상기 유기층은 발광층을 포함하고,

상기 발광층은 상기 유기 광전자 소자용 조성물을 포함하는 유기 광전자 소자.

청구항 13

제11항에 따른 유기 광전자 소자를 포함하는 표시 장치.

발명의 설명

기술 분야

[0001] 유기 광전자 소자 및 표시 장치에 관한 것이다.

배경 기술

[0002] 유기 광전자 소자(organic optoelectric diode)는 전기 에너지와 광 에너지를 상호 전환할 수 있는 소자이다.

[0003] 유기 광전자 소자는 동작 원리에 따라 크게 두 가지로 나눌 수 있다. 하나는 광 에너지에 의해 형성된 엑시톤(exciton)이 전자와 정공으로 분리되고 상기 전자와 정공이 각각 다른 전극으로 전달되면서 전기 에너지를 발생시키는 광전 소자이고, 다른 하나는 전극에 전압 또는 전류를 공급하여 전기 에너지로부터 광 에너지를 발생하는 발광 소자이다.

[0004] 유기 광전자 소자의 예로는 유기 광전 소자, 유기 발광 소자, 유기 태양 전지 및 유기 감광체 드럼(organic photo conductor drum) 등을 들 수 있다.

[0005] 이 중, 유기 발광 소자(organic light emitting diode, OLED)는 근래 평판 표시 장치(flat panel display device)의 수요 증가에 따라 크게 주목 받고 있다. 상기 유기 발광 소자는 유기 발광 재료에 전류를 가하여 전기 에너지를 빛으로 전환시키는 소자로서, 통상 양극(anode)과 음극(cathode) 사이에 유기 층이 삽입된 구조로 이루어져 있다.

[0006] 장수명 풀 칼라 디스플레이의 가장 큰 문제가 되고 있는 요소 중의 하나는 청색유기발광소자의 수명이다. 따라서 장수명 청색유기발광소자의 개발을 위해 많은 연구가 진행되고 있는 중이다. 본 발명에서는 이러한 문제점을 해결하기 위해 장수명 청색유기발광소자를 제공하고자 한다.

발명의 내용

해결하려는 과제

[0007] 일 구현예는 고효율 및 장수명 특성을 구현할 수 있는 유기 광전자 소자용 조성물을 제공한다.

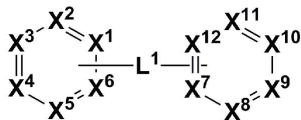
[0008] 다른 구현예는 상기 유기 광전자 소자용 조성물을 포함하는 유기 광전자 소자를 제공한다.

[0009] 또 다른 구현예는 상기 유기 광전자 소자를 포함하는 표시 장치를 제공한다.

과제의 해결 수단

[0010] 일 구현예에 따르면, 하기 화학식 1로 표현되는 적어도 1종의 제1 화합물, 및 하기 화학식 2로 표현되는 적어도 1종의 제2 화합물을 포함하는 유기 광전자 소자용 조성물을 제공한다.

[0011] [화학식 1]



[0012]

[0013] 상기 화학식 1에서,

[0014] X^1 내지 X^{12} 는 각각 독립적으로 N, C 또는 CR^a 이고,

[0015] X^1 내지 X^6 중 적어도 하나는 N이고,

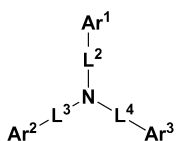
[0016] X^7 내지 X^{12} 중 적어도 하나는 N이고,

[0017] R^a 는 각각 독립적으로, 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알케닐기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬닐기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴티오기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴기, 히드록실기, 티올기, 또는 이들의 조합이고,

[0018] R^a 는 각각 독립적으로 존재하거나, 인접한 R^a 는 서로 연결되어 고리를 형성하고,

[0019] L^1 은 중수소, C1 내지 C40 실릴기, C1 내지 C30 알킬기, C3 내지 C30 시클로알킬기, C2 내지 C30 헤테로시클로알킬기, 또는 C6 내지 C30 아릴기로 치환되거나 비치환된 C6 내지 C30 아릴렌기이고;

[0020] [화학식 2]



[0021]

[0022] 상기 화학식 2에서,

[0023] L^2 내지 L^4 는 각각 독립적으로, 단일 결합, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴렌기, 또는 치환 또는 비치환된

C2 내지 C30 헤테로아릴렌기이고,

[0024] Ar^1 내지 Ar^3 은 각각 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로고리기, 또는 이들의 조합이고,

[0025] 상기 화학식 1 및 2의 "치환"은 별도의 정의가 없는 한, 적어도 하나의 수소가 중수소, 할로젠기, 히드록실기, 아미노기, C1 내지 C30 아민기, C6 내지 C30 아릴아민기, 니트로기, C1 내지 C40 실릴기, C1 내지 C30 알킬기, C3 내지 C30 시클로알킬기, C2 내지 C30 헤테로시클로알킬기, C6 내지 C30 아릴기, C2 내지 C30 헤테로고리기, C1 내지 C20 알콕시기, C1 내지 C10 트리플루오로알킬기 또는 시아노기로 치환된 것을 의미한다.

[0026] 다른 구현예에 따르면, 상기 유기 광전자 소자용 조성물을 포함하는 유기 광전자 소자를 제공한다.

[0027] 또 다른 구현예에 따르면, 상기 유기 광전자 소자를 포함하는 표시 장치를 제공한다.

발명의 효과

[0028] 고효율 · 장수명의 유기 광전자 소자를 구현할 수 있다.

도면의 간단한 설명

[0029] 도 1 및 도 2는 일 구현예에 따른 유기 광전자 소자를 개략적으로 도시한 단면도이다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

[0030] 이하, 본 발명의 구현예를 상세히 설명하기로 한다. 다만, 이는 예시로서 제시되는 것으로, 이에 의해 본 발명이 제한되지는 않으며 본 발명은 후술할 청구범위의 범주에 의해 정의될 뿐이다.

[0031] 본 명세서에서 "치환"이란 별도의 정의가 없는 한, 치환기 또는 화합물 중의 적어도 하나의 수소가 중수소, 할로젠기, 히드록실기, 아미노기, C1 내지 C30 아민기, C6 내지 C30 아릴아민기, 니트로기, C1 내지 C40 실릴기, C1 내지 C30 알킬기, C3 내지 C30 시클로알킬기, C2 내지 C30 헤테로시클로알킬기, C6 내지 C30 아릴기, C2 내지 C30 헤테로고리기, C1 내지 C20 알콕시기, C1 내지 C10 트리플루오로알킬기 또는 시아노기로 치환된 것을 의미한다.

[0032] 또한 상기 치환된 C1 내지 C30 아민기, C1 내지 C40 실릴기, C1 내지 C30 알킬기, C1 내지 C10 알킬실릴기, C3 내지 C30 시클로알킬기, C2 내지 C30 헤테로시클로알킬기, C6 내지 C30 아릴기, C2 내지 C30 헤테로고리기, 또는 C1 내지 C20 알콕시기 중 인접한 두 개의 치환기가 연결되어 융합 고리를 형성할 수도 있다. 예를 들어, 상기 치환된 C6 내지 C30 아릴기는 인접한 또 다른 치환된 C6 내지 C30 아릴기와 연결되어 치환 또는 비치환된 플루오렌 고리를 형성할 수 있고, 상기 치환된 C6 내지 C30 아릴기는 인접한 C1 내지 C30 알케닐기 등과 연결되어 트리페닐렌 고리, 나프탈렌 고리, 피라진 고리, 퀴나졸린 고리, 퀴녹살린 고리, 페난트롤린 고리 등을 형성할 수 있다.

[0033] 본 명세서에서 "헤테로"란 별도의 정의가 없는 한, 하나의 작용기 내에 N, O, S, P 및 Si로 이루어진 군에서 선택되는 헤테로 원자를 1 내지 3개 함유하고, 나머지는 탄소인 것을 의미한다.

[0034] 본 명세서에서 "알킬(alkyl)기"란 별도의 정의가 없는 한, 지방족 탄화수소기를 의미한다. 알킬기는 어떠한 이중결합이나 삼중결합을 포함하고 있지 않은 "포화 알킬(saturated alkyl)기"일 수 있다.

[0035] 상기 알킬기는 C1 내지 C30인 알킬기일 수 있다. 보다 구체적으로 알킬기는 C1 내지 C20 알킬기 또는 C1 내지 C10 알킬기일 수도 있다. 예를 들어, C1 내지 C4 알킬기는 알킬쇄에 1 내지 4 개의 탄소원자가 포함되는 것을 의미하며, 메틸, 에틸, 프로필, 이소-프로필, n-부틸, 이소-부틸, sec-부틸 및 t-부틸로 이루어진 군에서 선택됨을 나타낸다.

[0036] 상기 알킬기는 구체적인 예를 들어 메틸기, 에틸기, 프로필기, 이소프로필기, 부틸기, 이소부틸기, t-부틸기, 펜틸기, 헥실기, 시클로프로필기, 시클로부틸기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기 등을 의미한다.

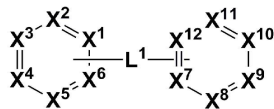
[0037] 본 명세서에서 "아릴(aryl)기"는 탄화수소 방향족 모이어티를 하나 이상 갖는 그룹을 총괄하는 개념으로서,

[0038] 탄화수소 방향족 모이어티의 모든 원소가 p-오비탈을 가지면서, 이들 p-오비탈이 공액(conjugation)을 형성하고 있는 형태, 예컨대 페닐기, 나프틸기 등을 포함하고,

- [0039] 2 이상의 탄화수소 방향족 모이어티들이 시그마 결합을 통하여 연결된 형태, 예컨대 바이페닐기, 터페닐기, 쿼터페닐기 등을 포함하며,
- [0040] 2 이상의 탄화수소 방향족 모이어티들이 직접 또는 간접적으로 융합된 비방향족 융합 고리도 포함할 수 있다. 예컨대, 플루오레닐기 등을 들 수 있다.
- [0041] 아릴기는 모노시클릭, 폴리시클릭 또는 융합 고리 폴리시클릭(즉, 탄소원자들의 인접한 쌍들을 나눠 가지는 고리) 작용기를 포함한다.
- [0042] 본 명세서에서 "헤테로고리기(heterocyclic group)"는 헤테로아릴기를 포함하는 상위 개념으로서, 아릴기, 시클로알킬기, 이들의 융합고리 또는 이들의 조합과 같은 고리 화합물 내에 탄소 (C) 대신 N, O, S, P 및 Si로 이루어진 군에서 선택되는 헤테로 원자를 적어도 한 개를 함유하는 것을 의미한다. 상기 헤테로고리기가 융합고리인 경우, 상기 헤테로고리기 전체 또는 각각의 고리마다 헤테로 원자를 한 개 이상 포함할 수 있다.
- [0043] 일 예로 "헤테로아릴(heteroaryl)기"는 아릴기 내에 탄소 (C) 대신 N, O, S, P 및 Si로 이루어진 군에서 선택되는 헤테로 원자를 적어도 한 개 함유하는 것을 의미한다. 2 이상의 헤테로아릴기는 시그마 결합을 통하여 직접 연결되거나, 상기 C2 내지 C60 헤테로아릴기가 2 이상의 고리를 포함할 경우, 2 이상의 고리들은 서로 융합될 수 있다. 상기 헤테로아릴기가 융합고리인 경우, 각각의 고리마다 상기 헤테로 원자를 1 내지 3개 포함할 수 있다.
- [0044] 상기 헤테로아릴기는 구체적인 예를 들어, 피리디닐기, 피리미디닐기, 피라지닐기, 피리다지닐기, 트리아지닐기, 퀴놀리닐기, 이소퀴놀리닐기 등을 포함할 수 있다.
- [0045] 보다 구체적으로, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기 및/또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로고리기는, 치환 또는 비치환된 페닐기, 치환 또는 비치환된 나프틸기, 치환 또는 비치환된 안트라세닐기, 치환 또는 비치환된 페난트릴기, 치환 또는 비치환된 나프타세닐기, 치환 또는 비치환된 피레닐기, 치환 또는 비치환된 바이페닐기, 치환 또는 비치환된 p-터페닐기, 치환 또는 비치환된 m-터페닐기, 치환 또는 비치환된 크리세닐기, 치환 또는 비치환된 트리페닐레닐기, 치환 또는 비치환된 페틸레닐기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐기, 치환 또는 비치환된 인데닐기, 치환 또는 비치환된 퓨라닐기, 치환 또는 비치환된 티오펜기, 치환 또는 비치환된 피롤릴기, 치환 또는 비치환된 피라졸릴기, 치환 또는 비치환된 이미다졸릴기, 치환 또는 비치환된 트리아졸릴기, 치환 또는 비치환된 옥사졸릴기, 치환 또는 비치환된 티아졸릴기, 치환 또는 비치환된 옥사디아졸릴기, 치환 또는 비치환된 티아디아졸릴기, 치환 또는 비치환된 피리디닐기, 치환 또는 비치환된 피리미디닐기, 치환 또는 비치환된 피라지닐기, 치환 또는 비치환된 트리아지닐기, 치환 또는 비치환된 벤조퓨라닐기, 치환 또는 비치환된 벤조티오펜기, 치환 또는 비치환된 벤즈이미다졸릴기, 치환 또는 비치환된 인돌릴기, 치환 또는 비치환된 퀴놀리닐기, 치환 또는 비치환된 이소퀴놀리닐기, 치환 또는 비치환된 퀴나졸리닐기, 치환 또는 비치환된 퀴녹살리닐기, 치환 또는 비치환된 나프티리디닐기, 치환 또는 비치환된 벤즈옥사진일기, 치환 또는 비치환된 벤즈티아진일기, 치환 또는 비치환된 아크리디닐기, 치환 또는 비치환된 페나진일기, 치환 또는 비치환된 페노티아진일기, 치환 또는 비치환된 페녹사진일기, 치환 또는 비치환된 카바졸릴기, 치환 또는 비치환된 디벤조퓨란일기, 또는 치환 또는 비치환된 디벤조티오펜일기, 또는 이들의 조합일 수 있으나, 이에 제한되지는 않는다.
- [0046] 본 명세서에서, 단일 결합이란 탄소 또는 탄소 이외의 헤테로 원자를 경유하지 않고 직접 연결되는 결합을 의미하는 것으로, 구체적으로 L이 단일 결합이라는 의미는 L과 연결되는 치환기가 중심 코어에 직접 연결되는 것을 의미한다. 즉, 본 명세서에서 단일 결합이란 탄소를 경유하는 메틸렌 등을 의미하는 것이 아니다.
- [0047] 본 명세서에서, 정공 특성이란, 전기장(electric field)을 가했을 때 전자를 공여하여 정공을 형성할 수 있는 특성을 말하는 것으로, HOMO 준위를 따라 전도 특성을 가져 양극에서 형성된 정공의 발광층으로의 주입, 발광층에서 형성된 정공의 양극으로의 이동 및 발광층에서의 이동을 용이하게 하는 특성을 의미한다.
- [0048] 또한 전자 특성이란, 전기장을 가했을 때 전자를 받을 수 있는 특성을 말하는 것으로, LUMO 준위를 따라 전도 특성을 가져 음극에서 형성된 전자의 발광층으로의 주입, 발광층에서 형성된 전자의 음극으로의 이동 및 발광층에서의 이동을 용이하게 하는 특성을 의미한다.
- [0050] 이하 일 구현예에 따른 유기 광전자 소자용 조성물에 대하여 설명한다.
- [0051] 일 구현예에 따른 유기 광전자 소자용 조성물은 하기 화학식 1로 표현되는 적어도 1종의 제1 화합물, 및 하기

화학식 2로 표현되는 적어도 1종의 제2 화합물을 포함할 수 있다.

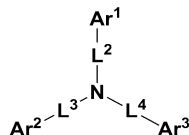
[화학식 1]



상기 화학식 1에서, X^1 내지 X^{12} 는 각각 독립적으로 N, C 또는 CR^a 이고, X^1 내지 X^6 중 적어도 하나는 N이고, X^7 내지 X^{12} 중 적어도 하나는 N이고, R^a 는 각각 독립적으로, 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알케닐기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬닐기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴티오기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴기, 히드록실기, 티올기, 또는 이들의 조합이고, R^a 는 각각 독립적으로 존재하거나, 인접한 R^a 는 서로 연결되어 고리를 형성하고,

L^1 은 중수소, C1 내지 C40 실릴기, C1 내지 C30 알킬기, C3 내지 C30 시클로알킬기, C2 내지 C30 헤테로시클로알킬기, 또는 C6 내지 C30 아릴기로 치환되거나 비치환된 C6 내지 C30 아릴렌기이고;

[화학식 2]



상기 화학식 2에서,

L^2 내지 L^4 는 각각 독립적으로, 단일 결합, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴렌기, 또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴렌기이고,

Ar^1 내지 Ar^3 은 각각 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로고리기, 또는 이들의 조합이고,

상기 화학식 1 및 2의 "치환"은 별도의 정의가 없는 한, 적어도 하나의 수소가 중수소, 할로젠기, 히드록실기, 아미노기, C1 내지 C30 아민기, C6 내지 C30 아릴아민기, 니트로기, C1 내지 C40 실릴기, C1 내지 C30 알킬기, C3 내지 C30 시클로알킬기, C2 내지 C30 헤테로시클로알킬기, C6 내지 C30 아릴기, C2 내지 C30 헤테로고리기, C1 내지 C20 알콕시기, C1 내지 C10 트리플루오로알킬기 또는 시아노기로 치환된 것을 의미한다.

본 발명의 일 구현예에 따른 유기 광전자 소자용 조성물은, 함질소 헤테로고리를 아릴렌 링커로 연결한 화합물을 포함하여 전자 주입 및 전자 수송성이 우수한 제1 화합물과, 적어도 하나의 아릴기 및/또는 헤테로아릴기로 치환된 아민기를 포함하여 정공 주입 및 정공 수송성이 우수한 제2 화합물을 함께 발광층에 사용함으로써, 구동 전압을 저하시키는 동시에 장수명 및 고효율의 유기 발광 소자를 구현할 수 있다.

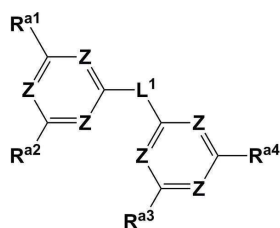
상기 제1 화합물은 연결기 L^1 의 양쪽 말단에 위치한 치환기에 각각 적어도 하나의 질소를 함유하는 고리를 포함함으로써, 전기장 인가 시 전자를 받기 쉬운 구조가 되어 전자 주입량이 증가되어 전자 수송 특성이 상대적으로 강한 특성을 가질 수 있다.

특히, 양쪽 말단 치환기에 포함되는 N의 개수, 연결기 L^1 의 연결 방향 및 연결된 아릴렌기의 개수 등에 따라 전하 주입 특성, 증착 온도, 유리 전이 온도 등 다양한 특성을 조절할 수 있다.

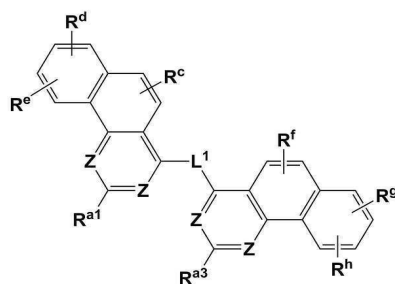
이에 따라 상기 제1 화합물을 적용한 유기 광전자 소자의 구동 전압을 낮출 수 있고, 또한 효율을 개선할 수 있다.

본 발명의 일 실시예에 따른 화학식 1은, 인접한 R^a 가 서로 연결되어 고리를 형성하는 지 여부에 따라 예컨대 하기 화학식 1-I 내지 화학식 1-IV 중 어느 하나로 표현될 수 있다.

[0067] [화학식 1-I]

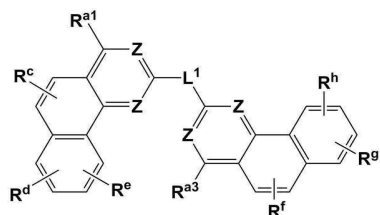


[화학식 1-II]

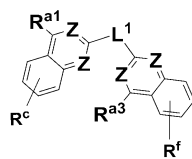


[0068]

[0069] [화학식 1-III]



[화학식 1-IV]



[0070]

[0071] 상기 화학식 1-I 내지 1-IV에서, L^1 은 전술한 바와 같고, Z는 각각 독립적으로 N, 또는 CR^a 이며, R^a 는 전술한 바와 같고, Z를 포함한 각각의 고리에서 적어도 하나의 Z는 N일 수 있다.

[0072] 양 쪽 말단 치환기에 포함되는 N의 개수에 따라 전하 주입 특성, 증착 온도, 유리 전이 온도 등 다양한 특성을 조절할 수 있다. 구체적으로, 전체 N의 개수를 4개 이상으로 조절할 경우, 전자 주입 특성에서 유리한 측면이 있다. 예컨대, N의 개수는 각각 (1개, 3개), (2개, 2개), (2개, 3개), 또는 (3개, 3개)일 수 있으며, 특히 N의 개수가 (3개, 3개)일 경우, 특히 주입된 전자의 안정성, 이동도 측면에서 유리하다.

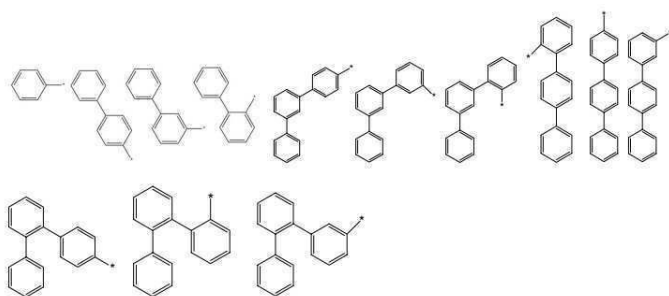
[0073] 본 발명의 일 실시예에서, R^a , R^{a1} 내지 R^{a4} , R^c , R^d , R^e , R^f , R^g , 및 R^h 는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴기, 또는 이들의 조합일 수 있고,

[0074] 구체적으로 수소, 또는 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기일 수 있으며,

[0075] 더욱 구체적으로 수소, 치환 또는 비치환된 페닐기, 치환 또는 비치환된 바이페닐기, 치환 또는 비치환된 터페닐기, 치환 또는 비치환된 쿼터페닐기, 치환 또는 비치환된 나프틸기, 치환 또는 비치환된 안트라세닐기, 치환 또는 비치환된 트리페닐렌기, 치환 또는 비치환된 페난트레닐기, 치환 또는 비치환된 파이레닐기일 수 있다.

[0076] 예컨대, 중수소, C1 내지 C10 알킬기, C6 내지 C12 아릴기로 치환될 수 있거나 비치환된 하기 그룹 1에 나열된 기에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0077] [그룹 1]



[0078]

[0079] 상기 그룹 1에서, *은 연결 지점이다.

[0080] 한편, 본 발명의 다른 일 실시예에서, 상기 인접한 R^a 는 서로 연결되어 고리를 형성할 수 있고, 이 때 R^a 가 연결되어 형성되는 고리는 치환 또는 비치환된 퀴놀리닐기, 치환 또는 비치환된 이소퀴놀리닐기, 치환 또는 비치환

된 퀴나졸리닐기, 또는 치환 또는 비치환된 페난트롤리닐기일 수 있다.

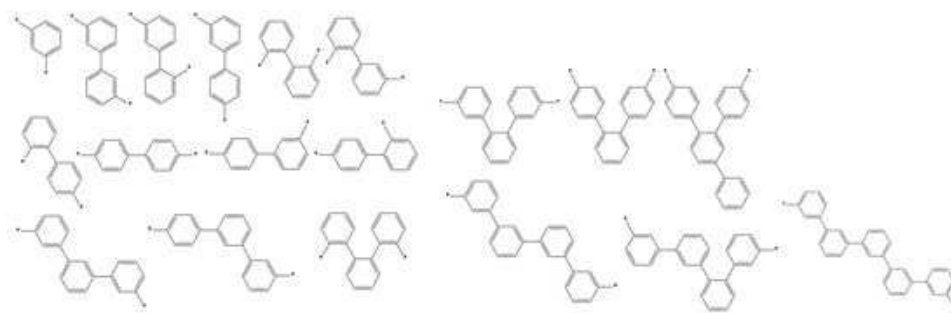
[0081] 구체적으로, 상기 R^a 는 각각 독립적으로 존재하여 치환 또는 비치환된 피리미디닐기, 또는 치환 또는 비치환된 트리아지닐기일 수 있고,

[0082] 상기 인접한 R^a 는 서로 연결되어 치환 또는 비치환된 퀴나졸리닐기를 형성할 수 있다.

[0083] 본 발명의 일 실시예에 따른 화학식 1의 L^1 은, 구체적으로 중수소, C1 내지 C40 실릴기, C1 내지 C30 알킬기, 또는 C6 내지 C30 아릴기로 치환되거나 비치환된 페닐렌기; 중수소, C1 내지 C40 실릴기, C1 내지 C30 알킬기, 또는 C6 내지 C30 아릴기로 치환되거나 비치환된 바이페닐렌기; 중수소, C1 내지 C40 실릴기, C1 내지 C30 알킬기, 또는 C6 내지 C30 아릴기로 치환되거나 비치환된 터페닐렌기; 또는 중수소, C1 내지 C40 실릴기, C1 내지 C30 알킬기, 또는 C6 내지 C30 아릴기로 치환되거나 비치환된 쿼터페닐렌기일 수 있다.

[0084] 특히, 연결기 L^1 의 연결 방향 및 연결된 아릴렌기의 개수에 따라 전하 주입 특성, 증착 온도, 유리 전이 온도 등 다양한 특성을 조절할 수 있고, 예컨대, 치환되거나 비치환된 하기 그룹 2에 나열된 연결기에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0085] [그룹 2]



[0086]

[0087] 상기 그룹 2에서, *은 이웃 원자와의 연결 지점이다.

[0088] 상기 L^1 이 상기와 같은 경우, 상기 화학식 1은 N을 함유하는 헤테로 고리를 2개 포함하는 다이머(dimer) 형태가 될 수 있고, 이러한 다이머 형태는 N을 함유하는 헤테로고리를 3개 포함하는 트라이머(trimer) 형태에 비해 치환기의 특성에 따라서 정공 이동도, 전자 이동도의 특성 조절이 용이하며, 물질간의 결정상 형성을 억제하는 효과를 기대할 수 있다.

[0089] 특히, 상기 L^1 에서 파라 형태로 연결된 모이어티 비율이 높을수록, 분자 자체가 견고해지며, 이에 따라 전하 이동도를 증가시킬 수 있다.

[0090] 또한, 상기 L^1 에서 메타 또는 오르쏘 형태로 연결된 모이어티의 비율을 조절함으로써 증착 온도 및 유리 전이 온도의 조절도 가능해진다. 특히, L^1 에 포함된 아릴기의 개수 및 헤테로 고리에 포함된 치환기의 종류 및 방향을 조절함으로써, LUMO 에너지 레벨을 조절할 수 있으므로, 전하의 주입 특성을 원하는 대로 조절할 수 있다.

[0091] 본 발명의 일 실시예에서, 상기 화학식 1의 X^1 내지 X^{12} 는 각각 독립적으로 N, C 또는 CR^a 이고, X^1 내지 X^6 중 적어도 2개는 N이고, X^7 내지 X^{12} 중 적어도 2개는 N이고, R^a 는 각각 독립적으로, 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C30 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴기, 또는 이들의 조합이고, L^1 은 중수소, C1 내지 C30 알킬기, 또는 C6 내지 C30 아릴기로 치환되거나 비치환된 C6 내지 C30 아릴렌기일 수 있고,

[0092] 더욱 구체적으로, X^1 내지 X^6 으로 구성된 헤테로고리기는 피리미디닐기, 또는 트리아지닐기일 수 있고, X^7 내지 X^{12} 로 구성된 헤테로고리기 역시 피리미디닐기, 또는 트리아지닐기일 수 있다.

[0093] 예컨대, 상기 화학식 1의 X^1 내지 X^{12} 는 각각 독립적으로 N, C 또는 CR^a 이고, X^1 내지 X^6 중 3개는 N이고, X^7 내

지 X^{12} 중 3개는 N일 수 있다. 예를 들어, X^1 내지 X^6 으로 구성된 헤테로고리기, 및 X^7 내지 X^{12} 로 구성된 헤테로고리기 모두 트리아지닐기일 수 있다.

[0094] 여기서 "치환"은 별도의 정의가 없는 한 적어도 하나의 수소가 중수소, 할로젠기, 히드록실기, C1 내지 C40 실릴기, C1 내지 C30 알킬기, C3 내지 C30 시클로알킬기, C2 내지 C30 헤테로시클로알킬기, C6 내지 C30 아릴기, 또는 C2 내지 C30 헤테로고리기로 치환된 것일 수 있다.

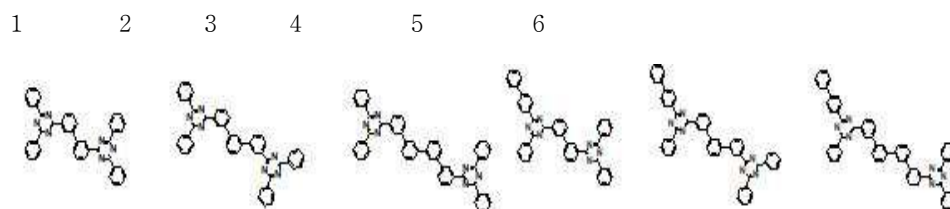
[0095] 구체적으로, 상기 R^a 는 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기이고,

[0096] 상기 C6 내지 C30 아릴기는 치환 또는 비치환된 페닐기, 치환 또는 비치환된 바이페닐기, 치환 또는 비치환된 터페닐기, 치환 또는 비치환된 쿼터페닐기, 치환 또는 비치환된 나프틸기, 치환 또는 비치환된 안트라센일기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐기, 치환 또는 비치환된 트리페닐렌기, 또는 치환 또는 비치환된 페난트레닐기일 수 있다. 또한, 일예에서 R^a 의 "치환 또는 비치환된"에서 "치환"은 중수소, C1 내지 C10 알킬기, C6 내지 C20의 아릴기 또는 피리미딘기 일 수 있다.

[0097] 상기 화학식 1로 표현되는 제1화합물은 예컨대 하기 그룹 3에 나열된 화합물일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

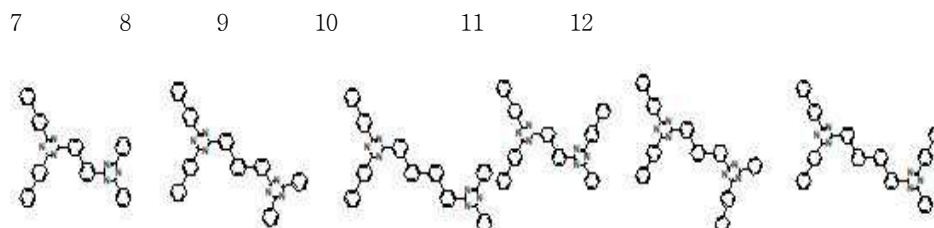
[0098] [그룹 3]

[0099]



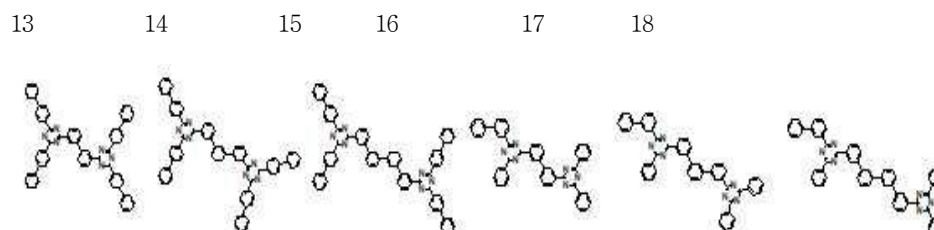
[0100]

[0101]



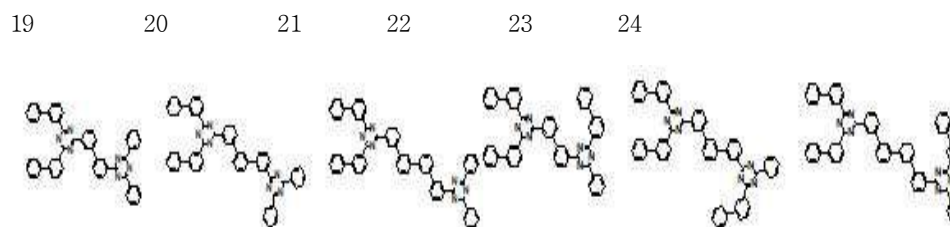
[0102]

[0103]



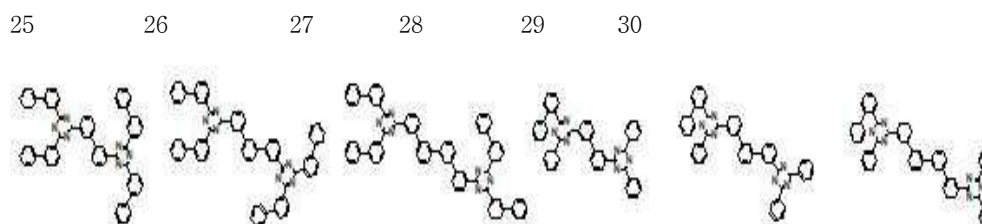
[0104]

[0105]



[0106]

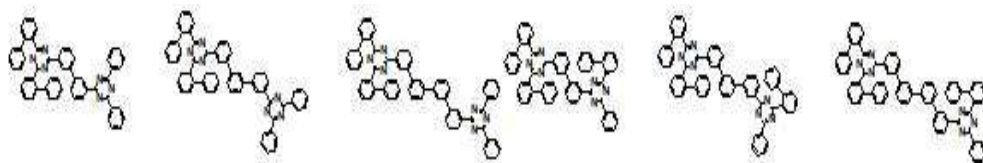
[0107]



[0108]

[0109]

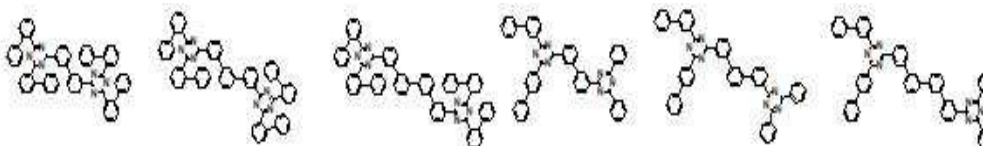
31 32 33 34 35 36



[0110]

[0111]

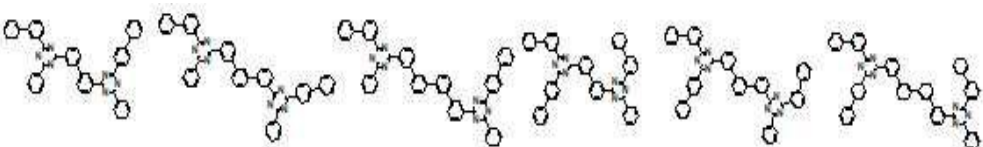
37 38 39 40 41 42



[0112]

[0113]

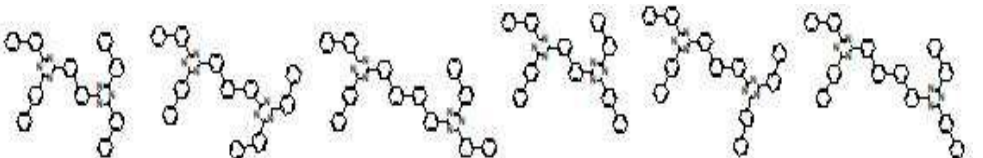
43 44 45 46 47 48



[0114]

[0115]

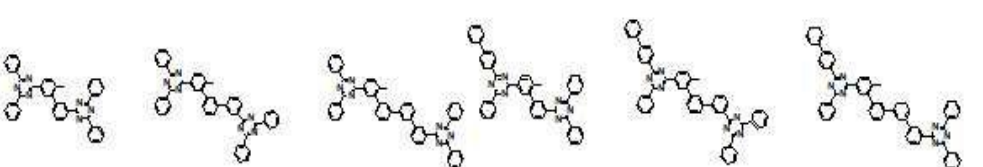
49 50 51 52 53 54



[0116]

[0117]

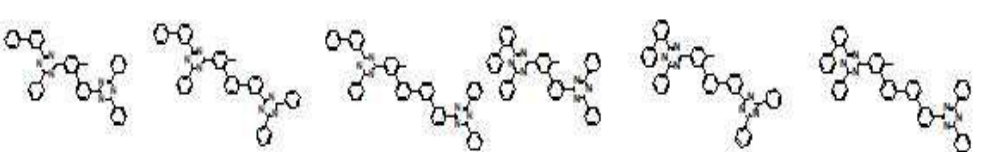
55 56 57 58 59 60



[0118]

[0119]

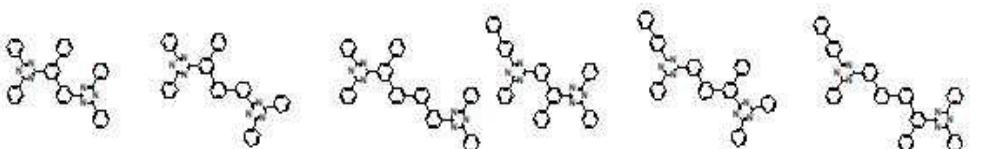
61 62 63 64 65 66



[0120]

[0121]

67 68 69 70 71 72



[0122]

[0123]

73

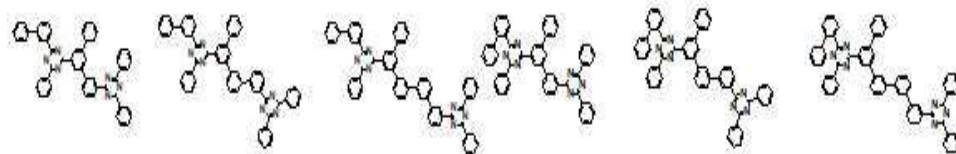
74

75

76

77

78



[0124]

[0125]

79

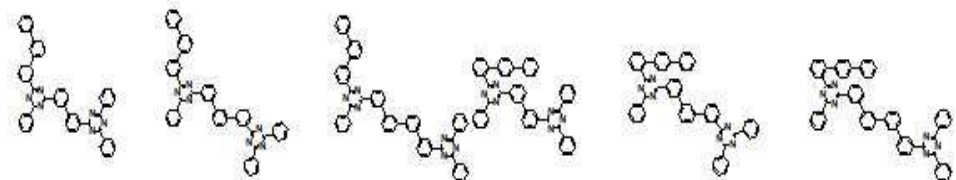
80

81

82

83

84



[0126]

[0127]

85

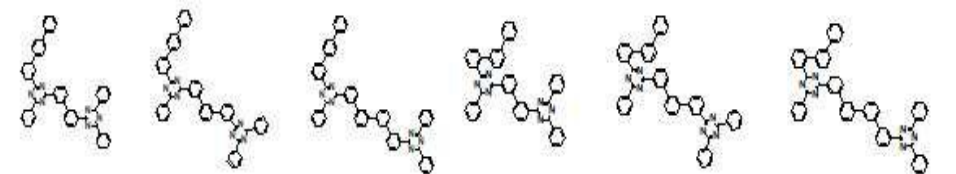
86

87

88

89

90



[0128]

[0129]

91

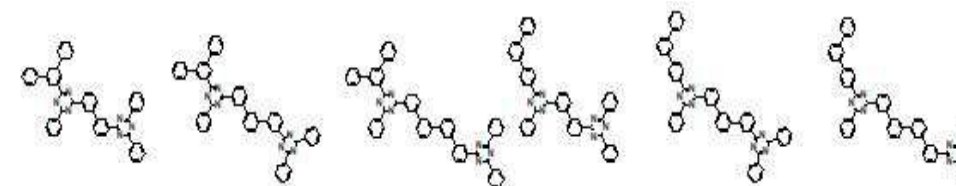
92

93

94

95

96



[0130]

[0131]

97

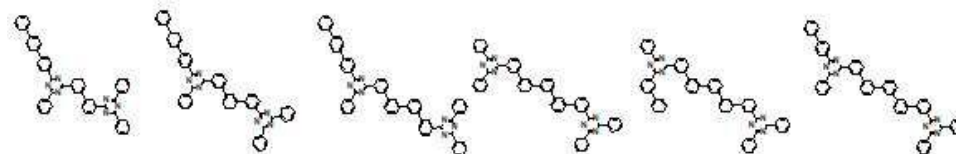
98

99

100

101

102



[0132]

[0133]

103

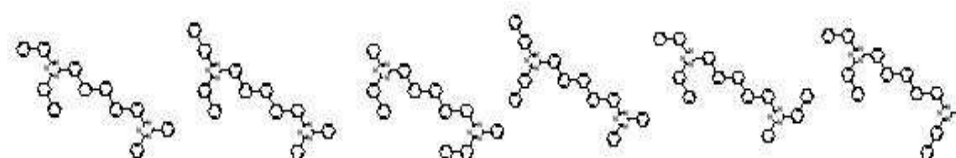
104

105

106

107

108



[0134]

[0135]

109

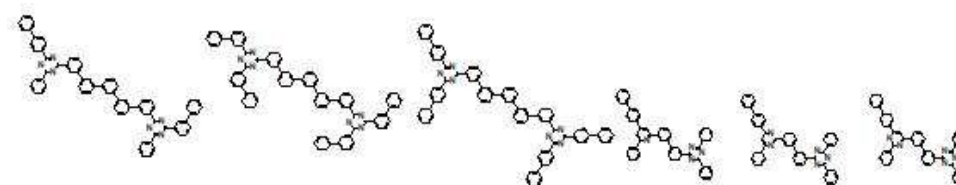
110

111

112

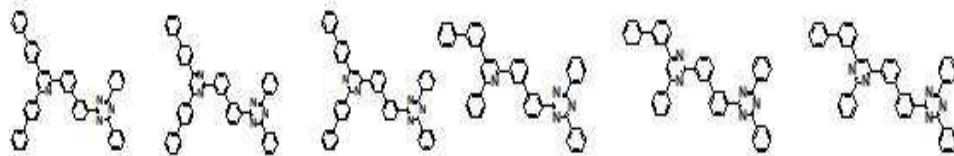
113

114



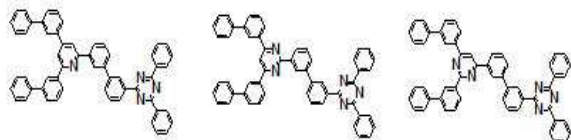
[0136]

[0137] 115 116 117 118 119 120



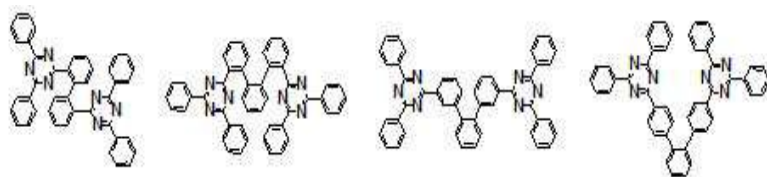
[0138]

[0139] 121 122 123



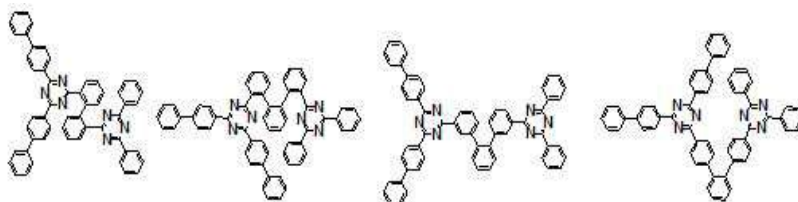
[0140]

[0141] 124 125 126 127



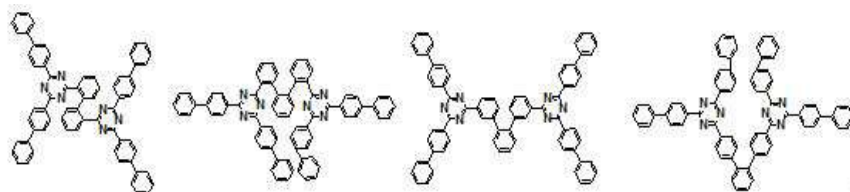
[0142]

[0143] 128 129 130 131



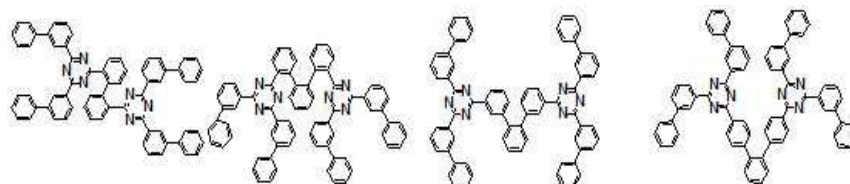
[0144]

[0145] 132 133 134 135



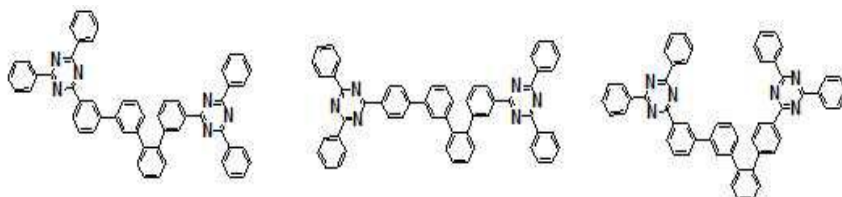
[0146]

[0147] 136 137 138 139



[0148]

[0149] 140 141 142



[0150]

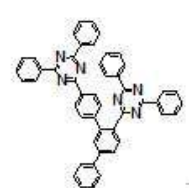
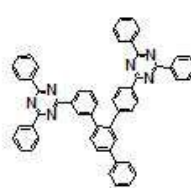
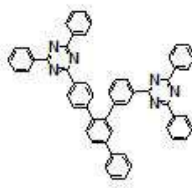
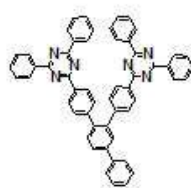
[0151]

143

144

145

146



[0152]

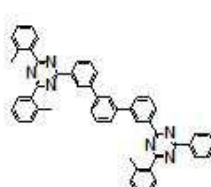
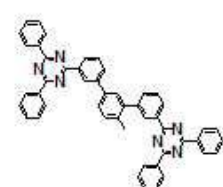
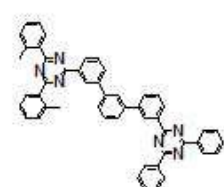
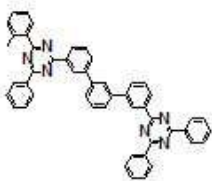
[0153]

147

148

149

150



[0154]

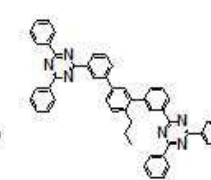
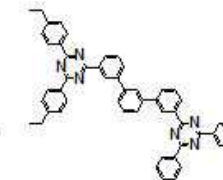
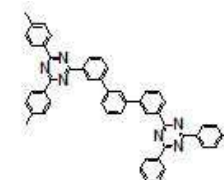
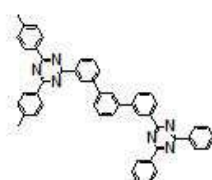
[0155]

151

152

153

154



[0156]

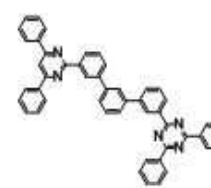
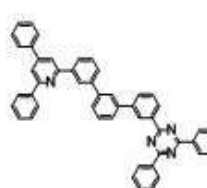
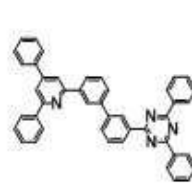
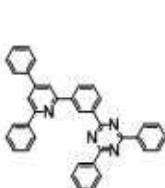
[0157]

155

156

157

158



[0158]

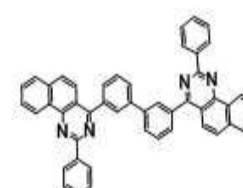
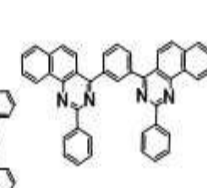
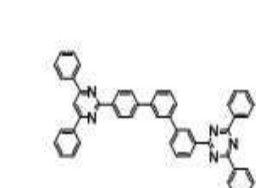
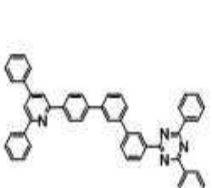
[0159]

159

160

161

162

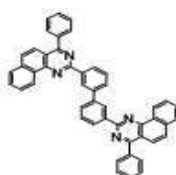
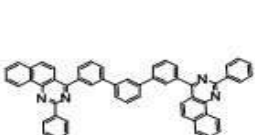


[0160]

[0161]

163

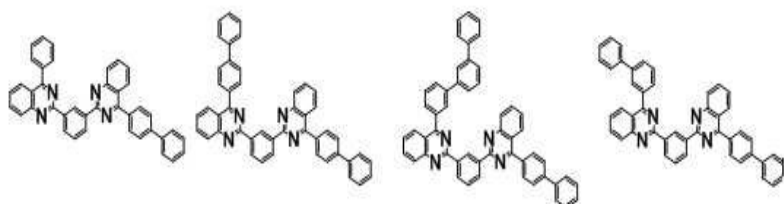
164



[0162]

[0163]

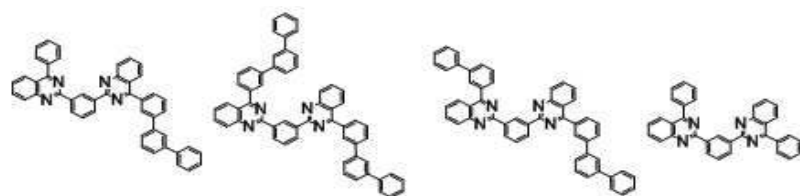
165 166 167 168



[0164]

[0165]

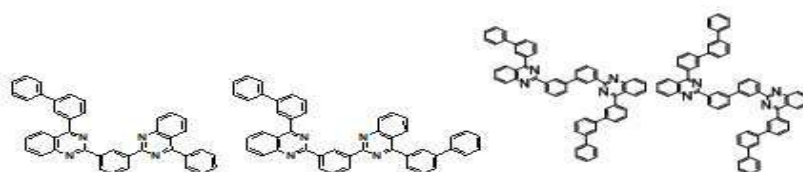
169 170 171 172



[0166]

[0167]

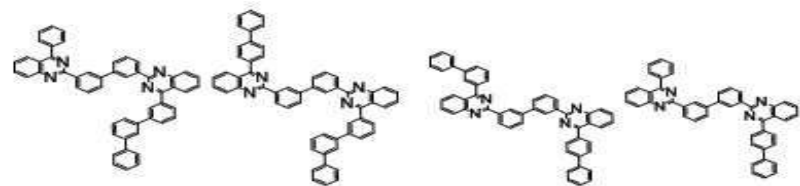
173 174 175 176



[0168]

[0169]

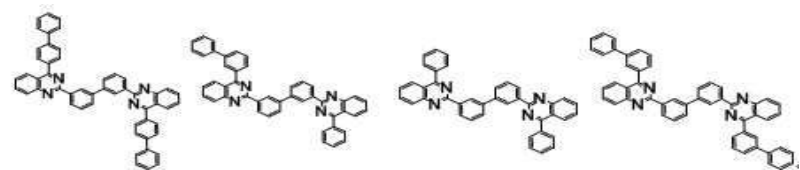
177 178 179 180



[0170]

[0171]

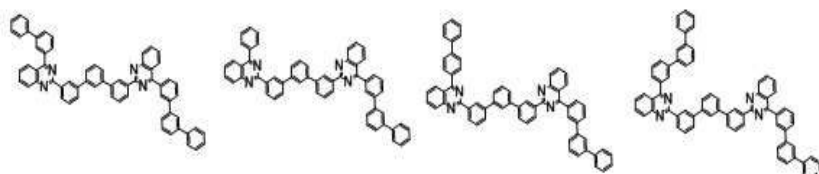
181 182 183 184



[0172]

[0173]

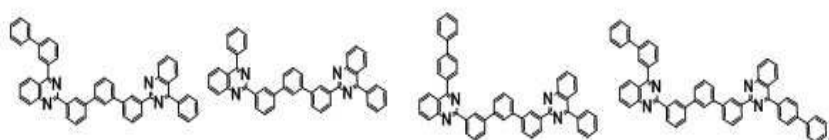
185 186 187 188



[0174]

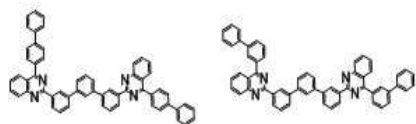
[0175]

189 190 191 192



[0176]

[0177] 193 194



[0178]

[0179] 발광층에 사용되는 상기 제1 화합물은 전자의 수송 및 주입 특성이 강해 경우에 따라서는 재료의 결정성이 증가할 수 있다.

[0180] 따라서, 제1 화합물을 단독으로 사용하는 것보다는 정공 수송 및 주입 특성이 강한 재료와 함께 사용함으로써, 정공의 수송 및 주입 특성/전자의 수송 및 주입 특성이 균형 잡힌 재료가 유리할 수 있다.

[0181] 상기 정공 수송 및 주입 특성이 강한 화합물은 상기 화학식 2로 표현되는 제2 화합물일 수 있다.

[0182] 상기 제2 화합물은 적어도 하나의 아릴기 및/또는 헤테로아릴기로 치환된 아민기를 포함하여 정공 특성이 상대적으로 강한 특성을 가지는 화합물로, 상기 제1 화합물과 함께 발광층에 사용되어 전하의 이동성을 높이고 안정성을 높임으로써 발광 효율 및 수명 특성을 현저히 개선시킬 수 있다.

[0183] 상기 화학식 2의 L^2 내지 L^4 는 각각 독립적으로, 단일 결합, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴렌기, 또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로아릴렌기일 수 있고,

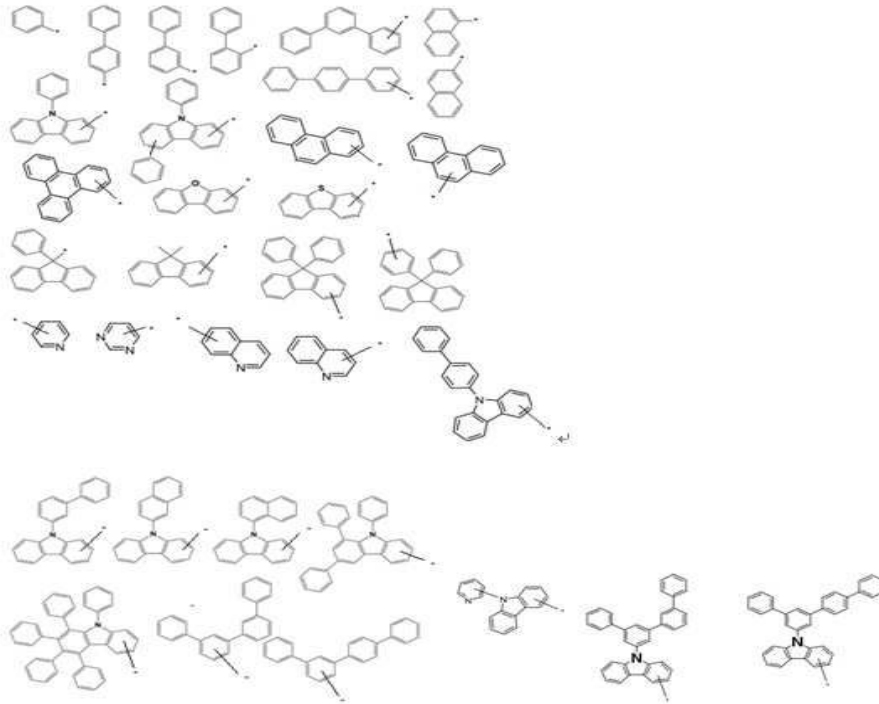
[0184] 예컨대, 단일결합, 치환 또는 비치환된 페닐렌기, 치환 또는 비치환된 바이페닐렌기, 치환 또는 비치환된 나프틸기, 치환 또는 비치환된 플루오렌일기, 치환 또는 비치환된 피리딘일기, 치환 또는 비치환된 피리미딘일기, 치환 또는 비치환된 퀴놀린일기 또는 이들의 조합일 수 있다.

[0185] 또한, 상기 화학식 2의 Ar^1 내지 Ar^3 은 각각 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로고리, 또는 이들의 조합일 수 있고,

[0186] 더욱 구체적으로, 치환 또는 비치환된 페닐기, 치환 또는 비치환된 바이페닐기, 치환 또는 비치환된 터페닐기, 치환 또는 비치환된 쿼터페닐기, 치환 또는 비치환된 나프틸기, 치환 또는 비치환된 플루오렌일기, 치환 또는 비치환된 카바졸일기, 치환 또는 비치환된 디벤조퓨라닐기, 치환 또는 비치환된 디벤조티오펜일기, 치환 또는 비치환된 안트라센일기, 치환 또는 비치환된 펜난트렌일기, 치환 또는 비치환된 트리페닐렌기, 치환 또는 비치환된 퀴놀린일기, 치환 또는 비치환된 피리딘일기, 치환 또는 비치환된 피리미딘일기, 치환 또는 비치환된 티오펜일기 또는 이들의 조합일 수 있다.

[0187] 예컨대, 상기 Ar^1 내지 Ar^3 은 각각 독립적으로, 치환되거나 비치환된 하기 그룹 4에 나열된 기에서 선택될 수 있다.

[0188] [그룹 4]



[0189]

[0190] 상기 그룹 4에서, *은 이웃 원자와의 연결 지점이다.

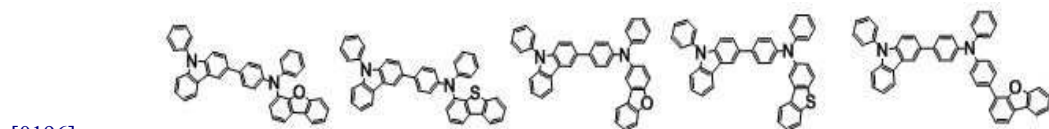
[0191] 본 발명의 일 실시예에 따른 화학식 2의 Ar^1 내지 Ar^3 은 C6 내지 C30 아릴기, 또는 C1 내지 C30 알킬기로 더욱 치환될 수 있으며, 치환기들끼리 연결되어 융합 고리를 형성할 수 있다.

[0192] 예컨대, Ar^1 내지 Ar^3 의 치환기가 트리페닐메틸기인 경우, 트리페닐메틸기의 인접한 2개의 페닐기가 연결되어 플루오렌 고리를 형성할 수 있다.

[0193] 상기 화학식 2로 표현되는 제2 화합물은 예컨대 하기 그룹 5에 나열된 화합물일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

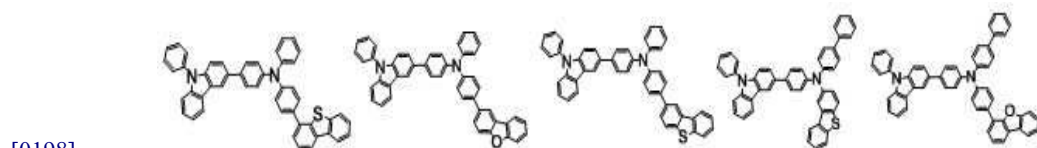
[0194] [그룹 5]

[0195] [A-1] [A-2] [A-3] [A-4] [A-5]



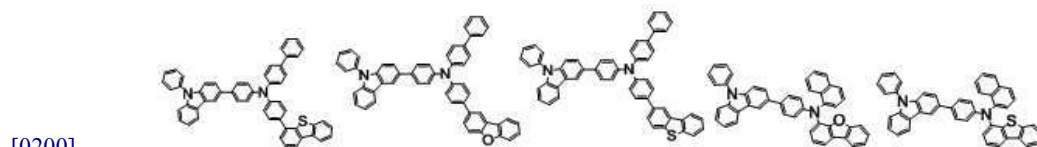
[0196]

[0197] [A-6] [A-7] [A-8] [A-9] [A-10]



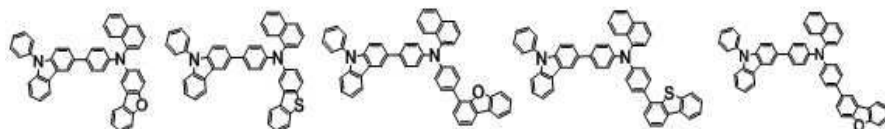
[0198]

[0199] [A-11] [A-12] [A-13] [A-14] [A-15]



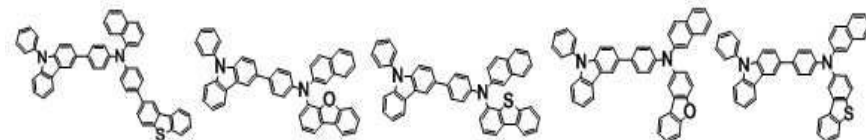
[0200]

[0201] [A-16] [A-17] [A-18] [A-19] [A-20]



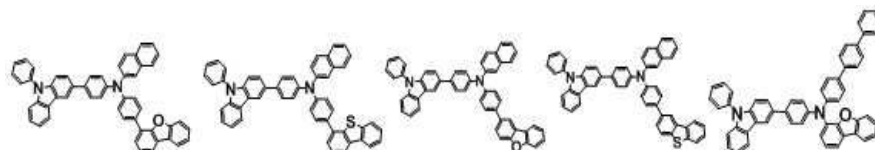
[0202]

[0203] [A-21] [A-22] [A-23] [A-24] [A-25]



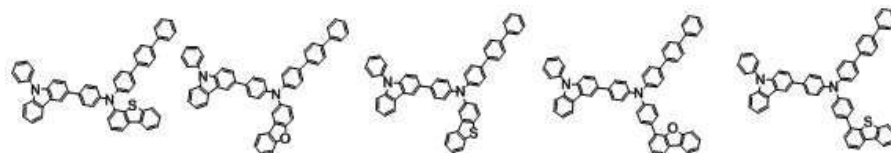
[0204]

[0205] [A-26] [A-27] [A-28] [A-29] [A-30]



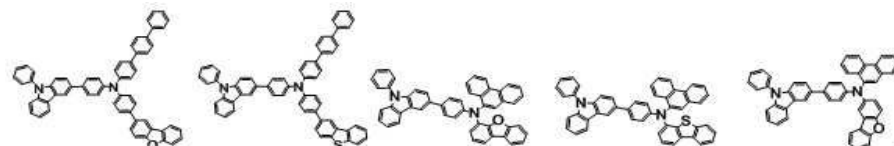
[0206]

[0207] [A-31] [A-32] [A-33] [A-34] [A-35]



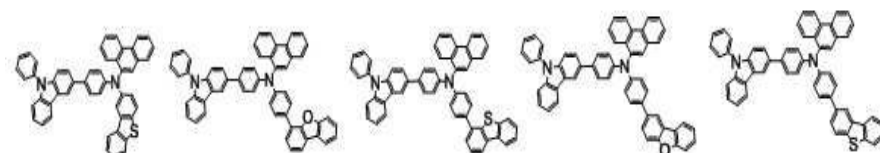
[0208]

[0209] [A-36] [A-37] [A-38] [A-39] [A-40]



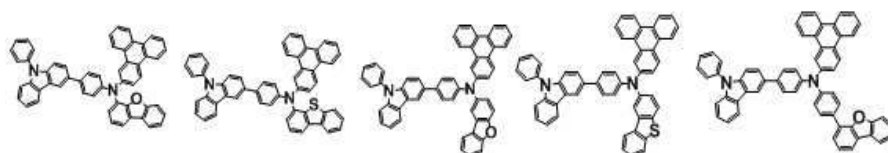
[0210]

[0211] [A-41] [A-42] [A-43] [A-44] [A-45]



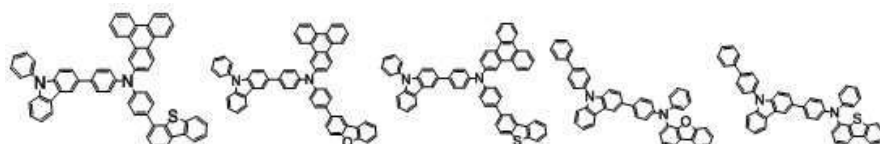
[0212]

[0213] [A-46] [A-47] [A-48] [A-49] [A-50]



[0214]

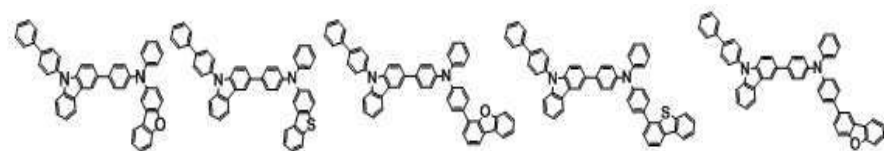
[0215] [A-51] [A-52] [A-53] [A-54] [A-55]



[0216]

[0217]

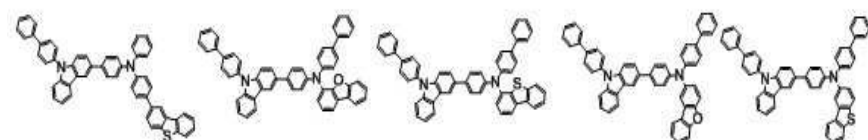
[A-56] [A-57] [A-58] [A-59] [A-60]



[0218]

[0219]

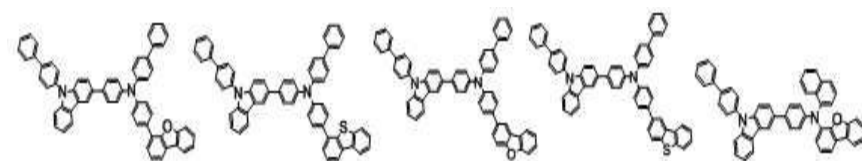
[A-61] [A-62] [A-63] [A-64] [A-65]



[0220]

[0221]

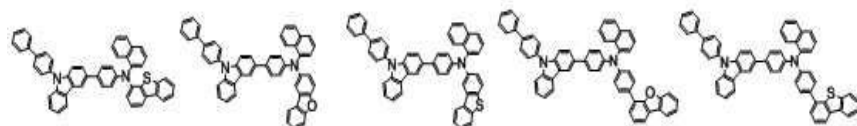
[A-66] [A-67] [A-68] [A-69] [A-70]



[0222]

[0223]

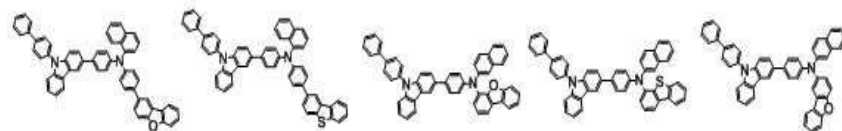
[A-71] [A-72] [A-73] [A-74] [A-75]



[0224]

[0225]

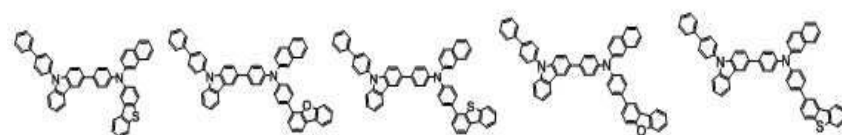
[A-76] [A-77] [A-78] [A-79] [A-80]



[0226]

[0227]

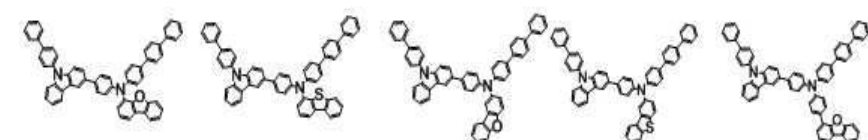
[A-81] [A-82] [A-83] [A-84] [A-85]



[0228]

[0229]

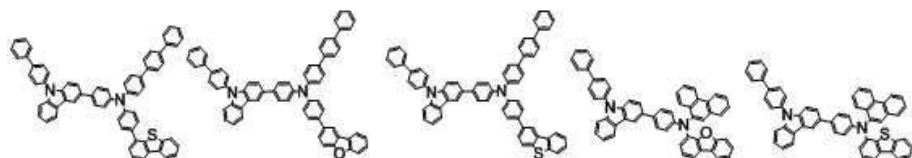
[A-86] [A-87] [A-88] [A-89] [A-90]



[0230]

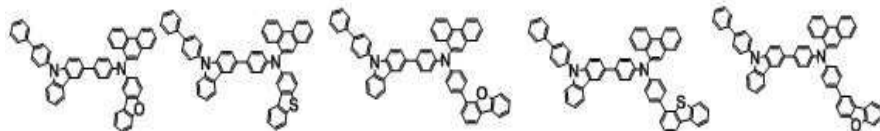
[0231]

[A-91] [A-92] [A-93] [A-94] [A-95]

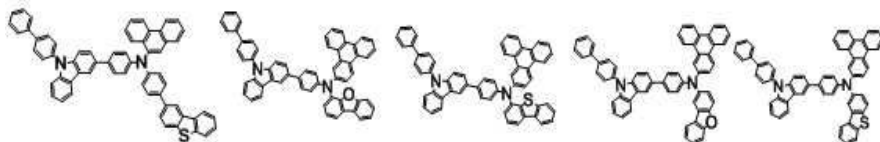


[0232]

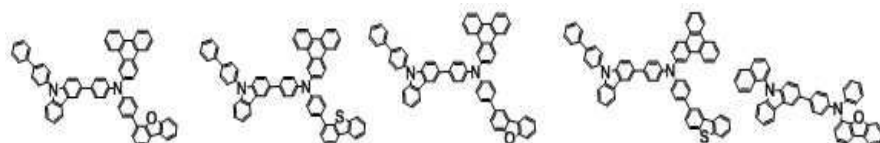
[0233] [A-96] [A-97] [A-98] [A-99] [A-100]



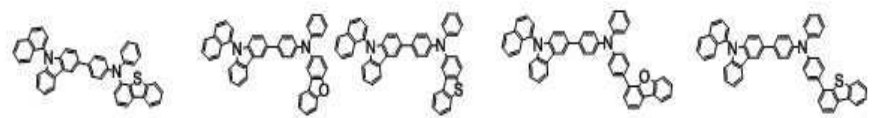
[0234]
[0235] [A-101] [A-102] [A-103] [A-104] [A-105]



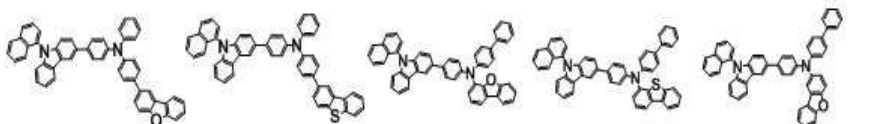
[0236]
[0237] [A-106] [A-107] [A-108] [A-109] [A-110]



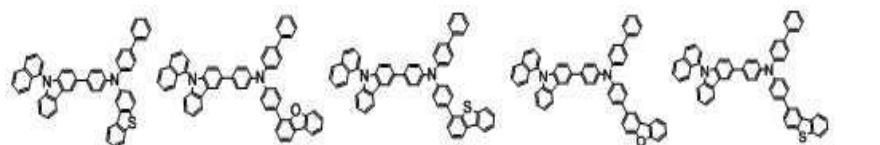
[0238]
[0239] [A-111] [A-112] [A-113] [A-114] [A-115]



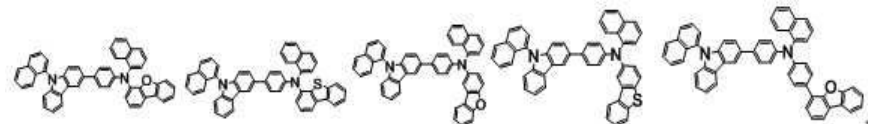
[0240]
[0241] [A-116] [A-117] [A-118] [A-119] [A-120]



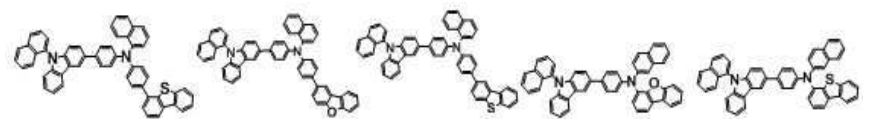
[0242]
[0243] [A-121] [A-122] [A-123] [A-124] [A-125]



[0244]
[0245] [A-126] [A-127] [A-128] [A-129] [A-130]

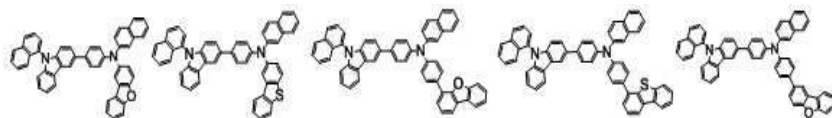


[0246]
[0247] [A-131] [A-132] [A-133] [A-134] [A-135]



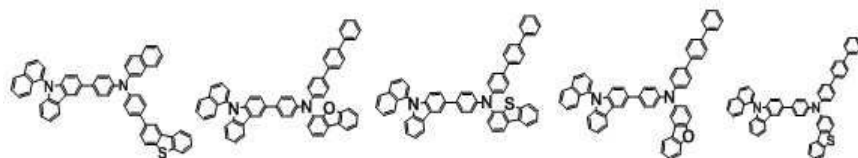
[0248]

[0249] [A-136] [A-137] [A-138] [A-139] [A-140]



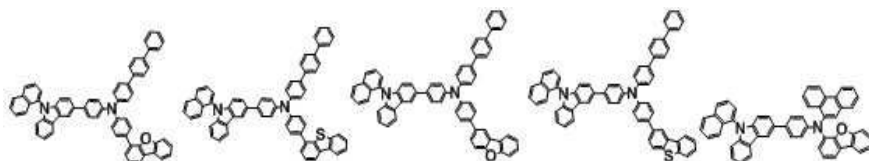
[0250]

[0251] [A-141] [A-142] [A-143] [A-144] [A-145]



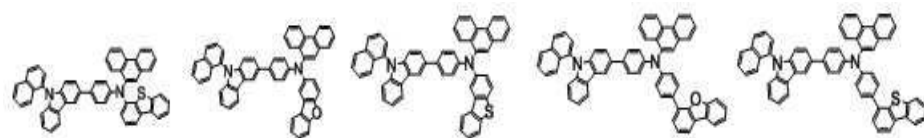
[0252]

[0253] [A-146] [A-147] [A-148] [A-149] [A-150]



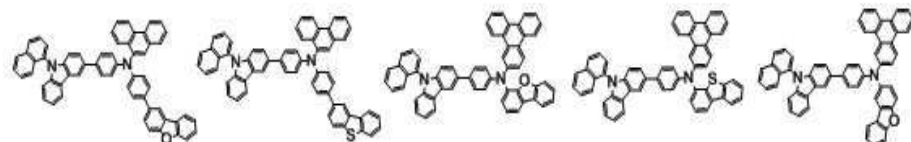
[0254]

[0255] [A-151] [A-152] [A-153] [A-154] [A-155]



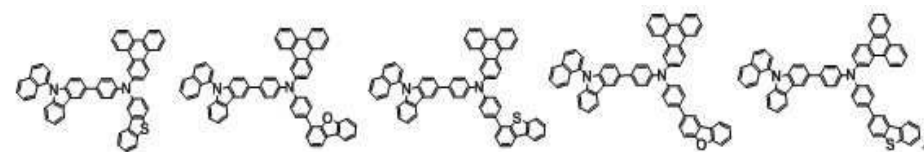
[0256]

[0257] [A-156] [A-157] [A-158] [A-159] [A-160]



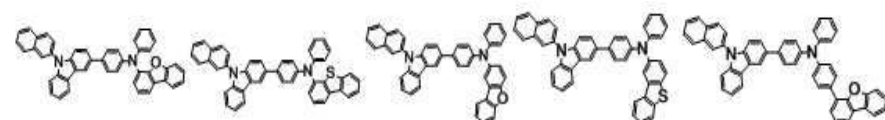
[0258]

[0259] [A-161] [A-162] [A-163] [A-164] [A-165]



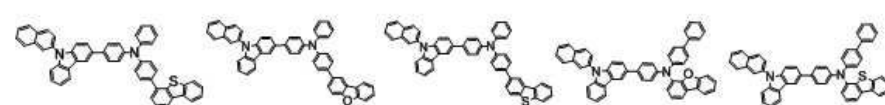
[0260]

[0261] [A-166] [A-167] [A-168] [A-169] [A-170]



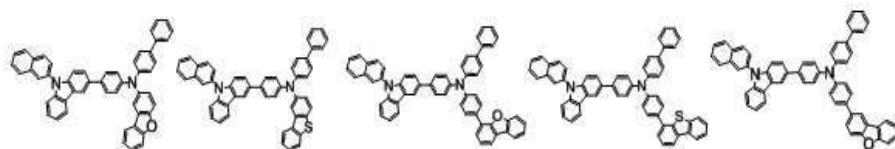
[0262]

[0263] [A-171] [A-172] [A-173] [A-174] [A-175]



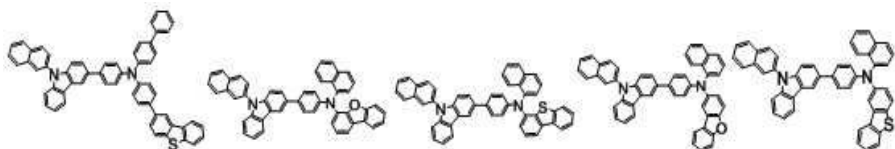
[0264]

[0265] [A-176] [A-177] [A-178] [A-179] [A-180]



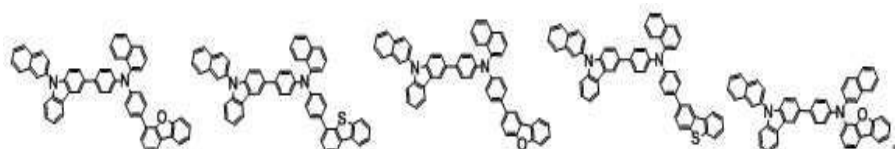
[0266]

[0267] [A-181] [A-182] [A-183] [A-184] [A-185]



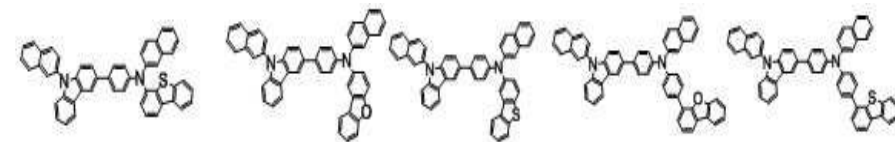
[0268]

[0269] [A-186] [A-187] [A-188] [A-189] [A-190]



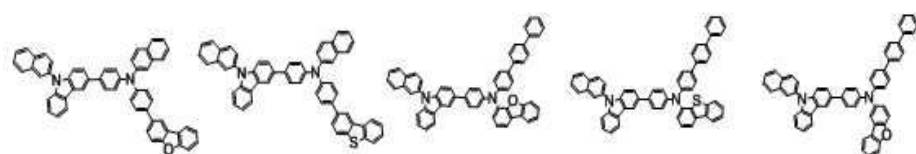
[0270]

[0271] [A-191] [A-192] [A-193] [A-194] [A-195]



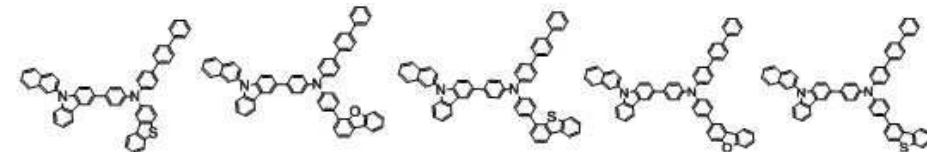
[0272]

[0273] [A-196] [A-197] [A-198] [A-199] [A-200]



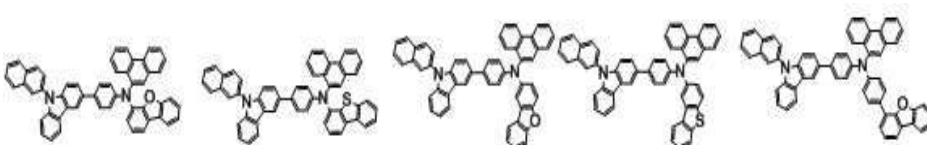
[0274]

[0275] [A-201] [A-202] [A-203] [A-204] [A-205]



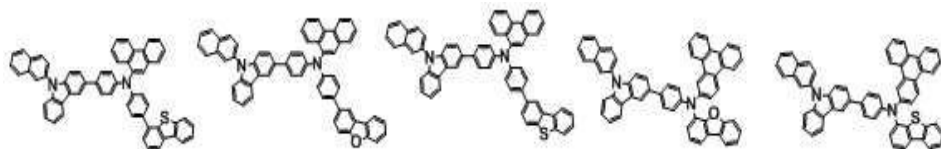
[0276]

[0277] [A-206] [A-207] [A-208] [A-209] [A-210]



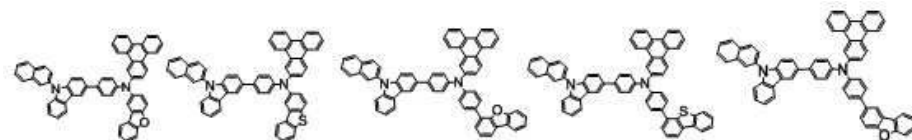
[0278]

[0279] [A-211] [A-212] [A-213] [A-214] [A-215]



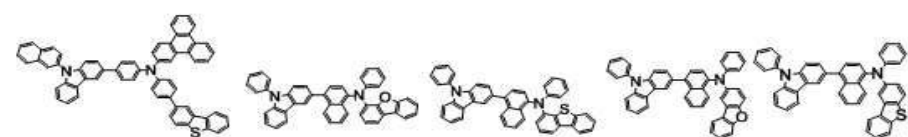
[0280]

[0281] [A-216] [A-217] [A-218] [A-219] [A-220]



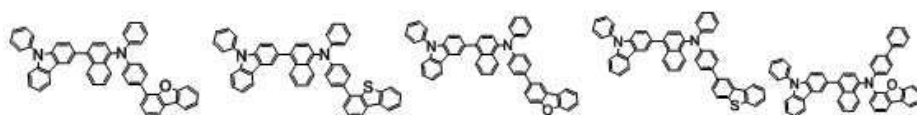
[0282]

[0283] [A-221] [A-222] [A-223] [A-224] [A-225]



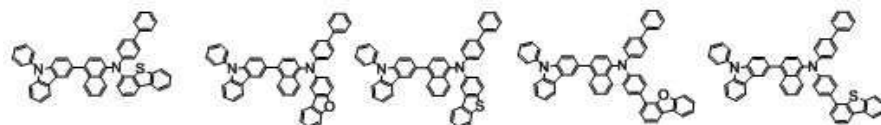
[0284]

[0285] [A-226] [A-227] [A-228] [A-229] [A-230]



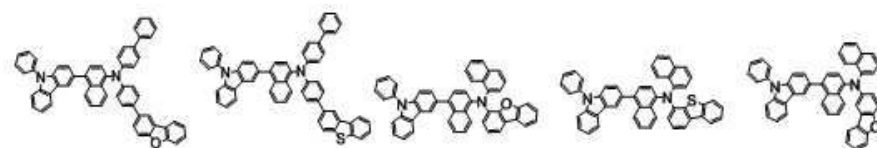
[0286]

[0287] [A-231] [A-232] [A-233] [A-234] [A-235]



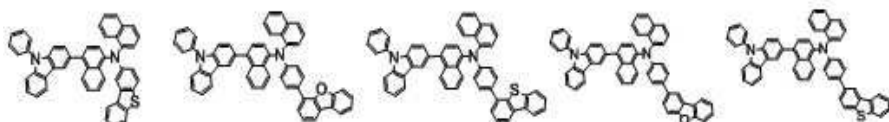
[0288]

[0289] [A-236] [A-237] [A-238] [A-239] [A-240]



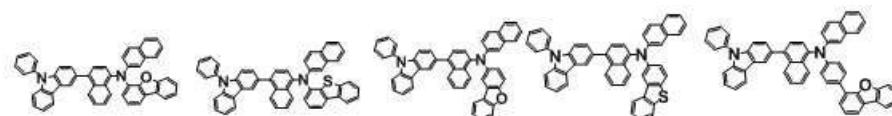
[0290]

[0291] [A-241] [A-242] [A-243] [A-244] [A-245]



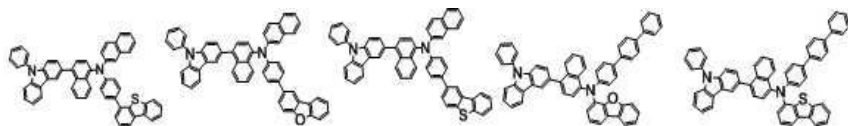
[0292]

[0293] [A-246] [A-247] [A-248] [A-249] [A-250]



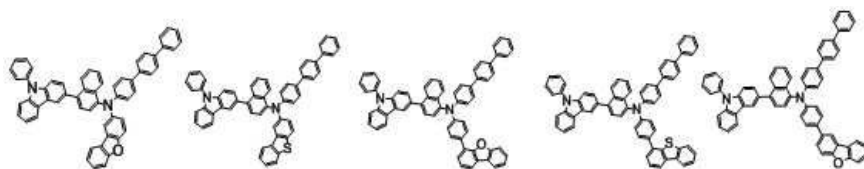
[0294]

[\[0295\]](#) [\[A-251\]](#) [\[A-252\]](#) [\[A-253\]](#) [\[A-254\]](#) [\[A-255\]](#)



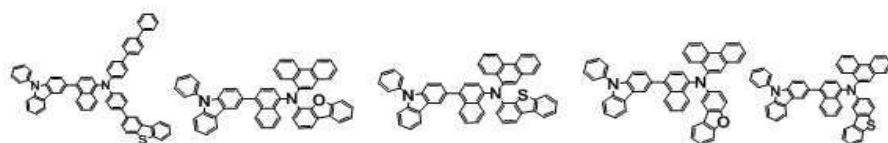
[0296]

[\[0297\]](#) [\[A-256\]](#) [\[A-257\]](#) [\[A-258\]](#) [\[A-259\]](#) [\[A-260\]](#)



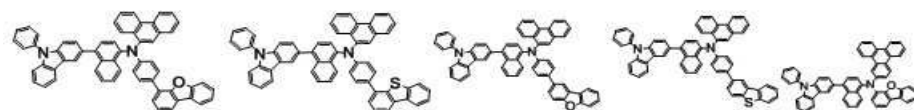
[0298]

[\[0299\]](#) [\[A-261\]](#) [\[A-262\]](#) [\[A-263\]](#) [\[A-264\]](#) [\[A-265\]](#)



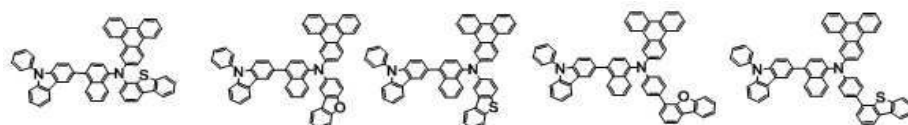
[0300]

[0301] [A-266] [A-267] [A-268] [A-269] [A-270]



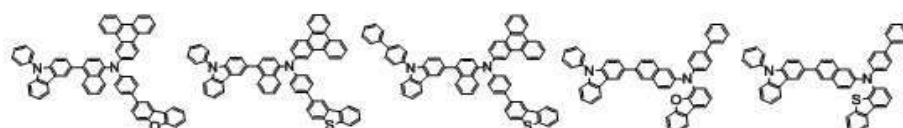
[0302]

[0303] [A-271] [A-272] [A-273] [A-274] [A-275]



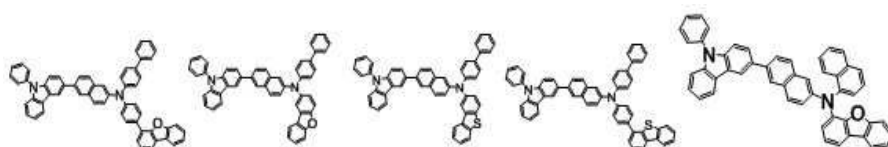
[0304]

[0305] [A-276] [A-277] [A-278] [A-279] [A-280]



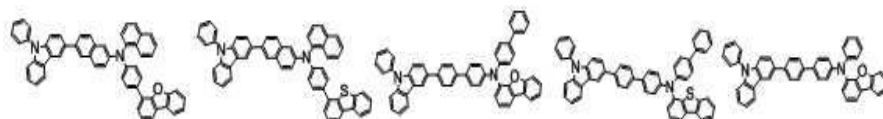
[0306]

[0307] [A-281] [A-282] [A-283] [A-284] [A-285]



[0308]

[0309] [A-286] [A-287] [A-288] [A-289] [A-290]



[0310]

[0311]

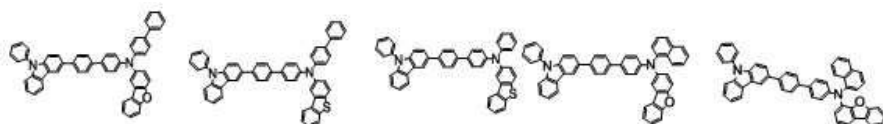
[A-291]

[A-292]

[A-293]

[A-294]

[A-295]



[0312]

[0313]

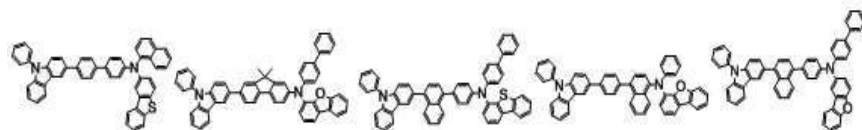
[A-296]

[A-297]

[A-298]

[A-299]

[A-300]



[0314]

[0315]

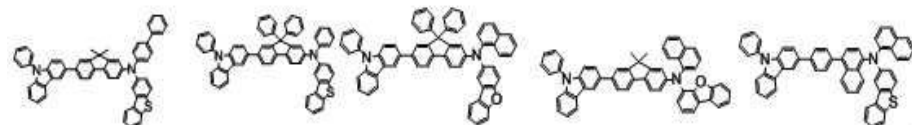
[A-301]

[A-302]

[A-303]

[A-304]

[A-305]



[0316]

[0317]

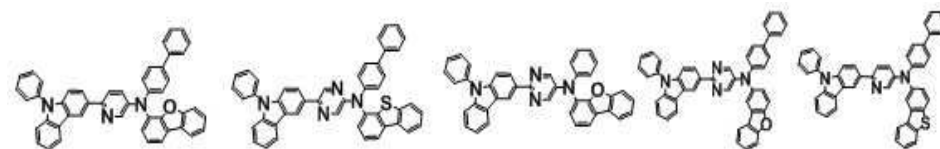
[A-306]

[A-307]

[A-308]

[A-309]

[A-310]



[0318]

[0319]

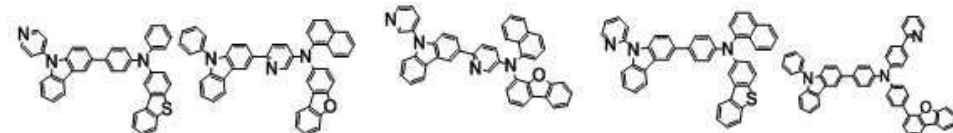
[A-311]

[A-312]

[A-313]

[A-314]

[A-315]



[0320]

[0321]

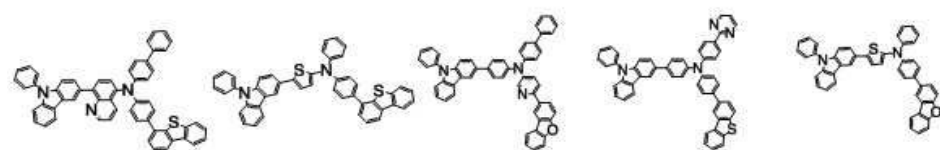
[A-316]

[A-317]

[A-318]

[A-319]

[A-320]



[0322]

[0323]

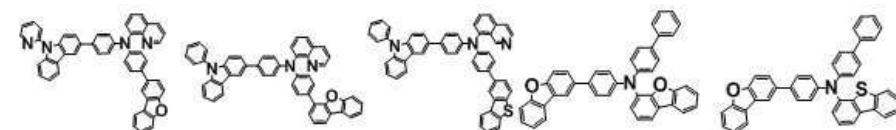
[A-321]

[A-322]

[A-323]

[A-324]

[A-325]



[0324]

[0325]

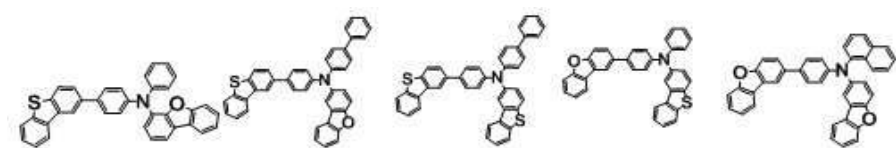
[A-326]

[A-327]

[A-328]

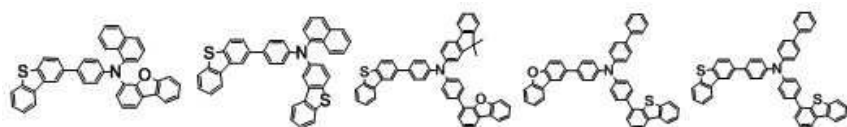
[A-329]

[A-330]

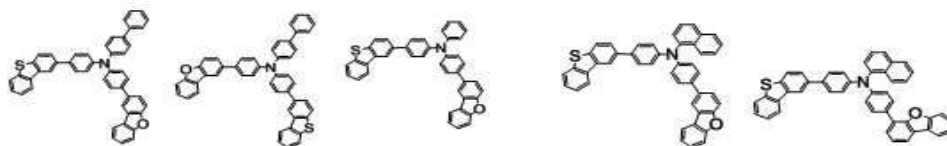


[0326]

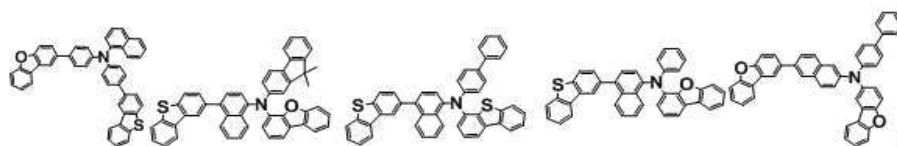
[0327] [A-331] [A-332] [A-333] [A-334] [A-335]



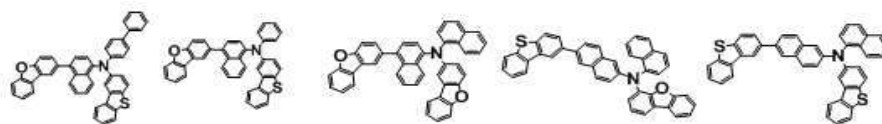
[\[0329\]](#) [\[A-336\]](#) [\[A-337\]](#) [\[A-338\]](#) [\[A-339\]](#) [\[A-340\]](#)



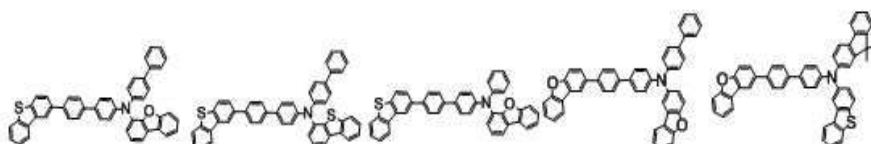
[\[0331\]](#) [\[A-341\]](#) [\[A-342\]](#) [\[A-343\]](#) [\[A-344\]](#) [\[A-345\]](#)



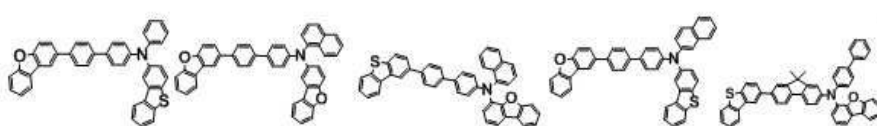
[\[0333\]](#) [\[A-346\]](#) [\[A-347\]](#) [\[A-348\]](#) [\[A-349\]](#) [\[A-350\]](#)



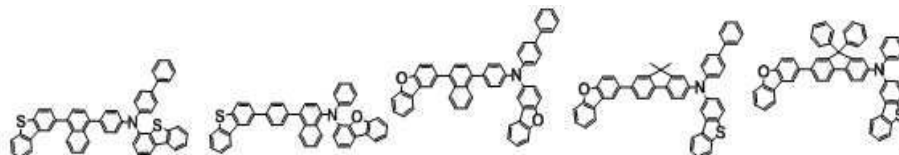
[\[0335\]](#) [\[A-351\]](#) [\[A-352\]](#) [\[A-353\]](#) [\[A-354\]](#) [\[A-355\]](#)



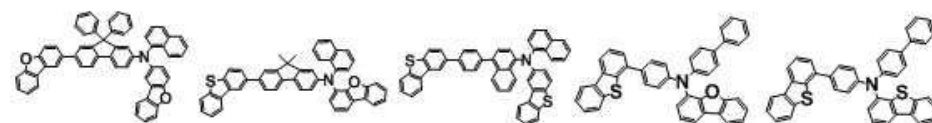
[\[0337\]](#) [\[A-356\]](#) [\[A-357\]](#) [\[A-358\]](#) [\[A-359\]](#) [\[A-360\]](#)

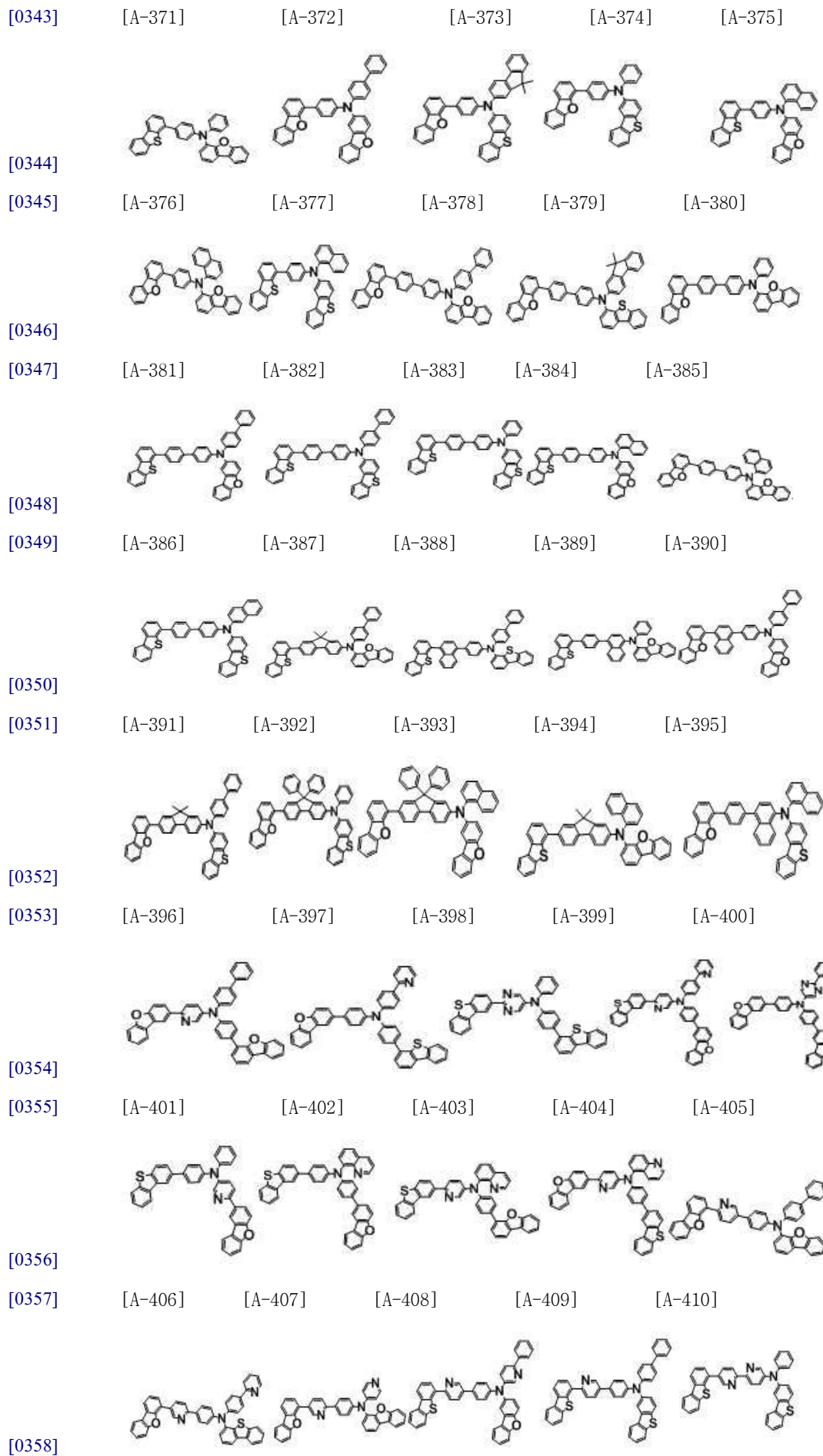


[0339] [A-361] [A-362] [A-363] [A-364] [A-365]



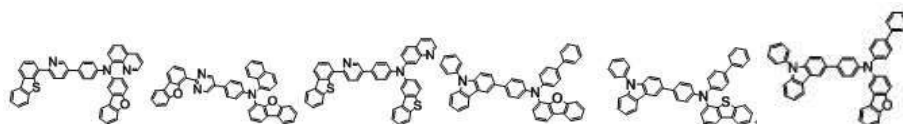
[\[0341\]](#) [\[A-366\]](#) [\[A-367\]](#) [\[A-368\]](#) [\[A-369\]](#) [\[A-370\]](#)



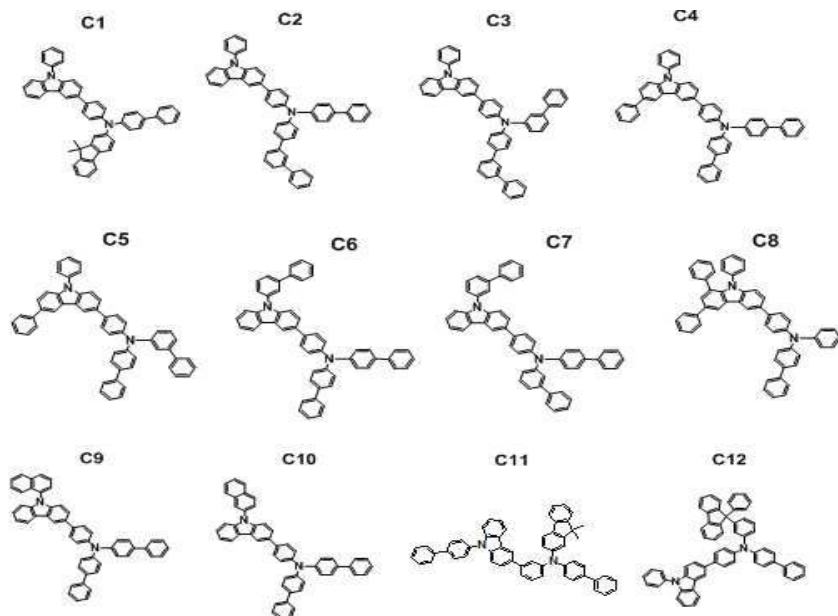


[0359] [A-411] [A-412] [A-413] [A-414] [A-415] [A-416]

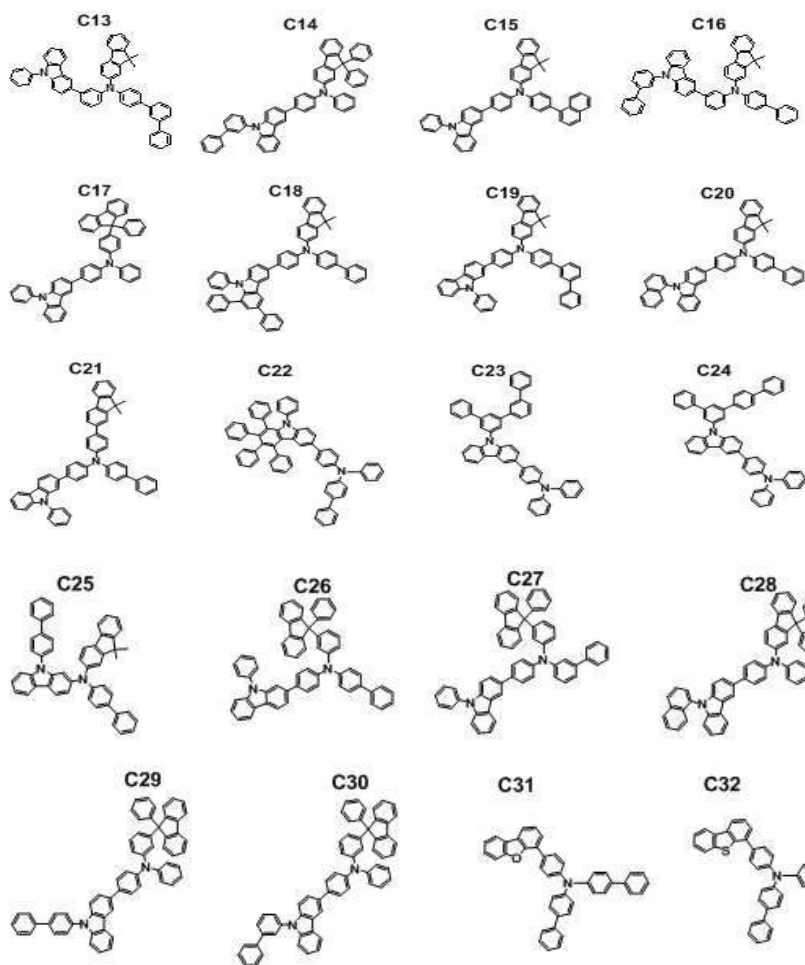
[0360]



[0361]



[0362]



[0363]

[0364] 한편, 정공 특성을 가지는 상기 제2 화합물과 상기 제1 화합물의 비율을 조절함으로써 전하의 이동성을 조절할

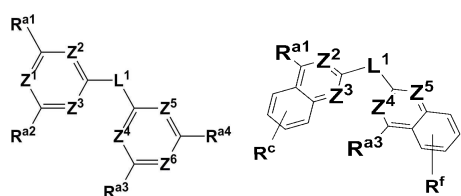
수 있는 장점이 있다.

[0365] 상기 제2 화합물의 HOMO 에너지 레벨은 -4.6 내지 -5.5 범위 및 LUMO 에너지 레벨은 -1.7 내지 -0.850 eV의 범위일 수 있다.

[0366] 또한, 상기 제1 화합물과 제2 화합물은 예컨대 약 1:9 내지 9:1의 중량비로 포함될 수 있고, 구체적으로 2:8 내지 8:2, 3:7 내지 7:3, 4:6 내지 6:4, 그리고 5:5의 중량비로 포함될 수 있다. 상기 범위로 포함됨으로써 바이폴라 특성이 더욱 효과적으로 구현되어 효율과 수명을 동시에 개선할 수 있다.

[0367] 구체적으로, 발광층(32)에서 상기 제1 화합물, 및 상기 제2 화합물이 동시에 호스트로서 포함될 수 있으며, 예컨대 상기 제1 화합물은 하기 화학식 1-Ia 또는 화학식 1-IVa로 표현되고, 상기 제2 화합물은 상기 화학식 2의 L^2 내지 L^4 가 각각 독립적으로, 단일결합, 또는 치환 또는 비치환된 페닐렌기이고, Ar^1 내지 Ar^3 가 각각 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로고리기이되, Ar^1 내지 Ar^3 중 적어도 하나는 치환 또는 비치환된 C2 내지 C30 헤테로고리기일 수 있다.

[0368] [화학식 1-Ia] [화학식 1-IVa]



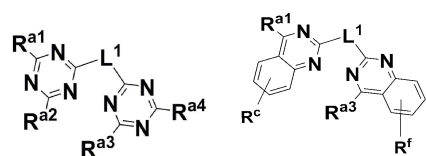
[0369]

[0370] 상기 화학식 1-Ia 및 1-IVa에서, Z^1 내지 Z^6 은 각각 독립적으로 N, 또는 CR^a 이고, Z^1 내지 Z^3 중 적어도 둘은 N이고, Z^4 내지 Z^6 중 적어도 둘은 N이고, R^a , R^{a1} 내지 R^{a4} 는 각각 독립적으로 수소, 또는 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기이고, L^1 은 중수소, C1 내지 C30 알킬기, 또는 C6 내지 C30 아릴기로 치환되거나 비치환된 C6 내지 C30 아릴렌기이고;

[0371] 여기서, "치환"은 전술한 바와 같다.

[0372] 더욱 구체적으로, 상기 제1 화합물은 하기 화학식 1-Ia-1 또는 화학식 1-IVa-1로 표현되고, 상기 제2 화합물은 화학식 2의 Ar^1 내지 Ar^3 이 각각 독립적으로, 치환 또는 비치환된 페닐기, 치환 또는 비치환된 바이페닐기, 치환 또는 비치환된 터페닐기, 치환 또는 비치환된 나프틸기, 치환 또는 비치환된 페난트레닐기, 치환 또는 비치환된 카바졸일기, 치환 또는 비치환된 디벤조퓨란일기, 또는 치환 또는 비치환된 디벤조티오펜일기이되, Ar^1 내지 Ar^3 중 적어도 하나가 치환 또는 비치환된 카바졸일기, 치환 또는 비치환된 디벤조퓨란일기, 또는 치환 또는 비치환된 디벤조티오펜일기일 수 있다.

[0373] [화학식 1-Ia-1][화학식 1-IVa-1]



[0374]

[0375] 상기 화학식 1-Ia-1 및 화학식 1-IVa-1에서, R^{a1} 내지 R^{a4} , L^1 , R^c , R^f , 및 "치환"은 전술한 바와 같다.

[0376] 발광층(32)은 호스트로서 전술한 제1 화합물과 제2 화합물 외에 1종 이상의 화합물을 더 포함할 수 있다. 예컨대, 정공 특성이 우수한 아릴 아민 화합물 또는 아릴 아민 카바졸 화합물 등을 더욱 포함할 수 있다.

[0377] 발광층(32)은 도펀트를 더 포함할 수 있다. 상기 도펀트는 상기 호스트에 미량 혼합되어 발광을 일으키는 물질로, 일반적으로 삼중항 상태 이상으로 여기시키는 다중항 여기(multiple excitation)에 의해 발광하는 금속 착체(metal complex)와 같은 물질이 사용될 수 있다. 상기 도펀트는 예컨대 무기, 유기, 유무기 화합물일 수 있으며, 1종 또는 2종 이상 포함될 수 있다.

- [0378] 상기 도펀트는 적색, 녹색 또는 청색의 도펀트일 수 있으며, 예컨대 인광 도펀트일 수 있다. 상기 인광 도펀트의 예로는 Ir, Pt, Os, Ti, Zr, Hf, Eu, Tb, Tm, Fe, Co, Ni, Ru, Rh, Pd 또는 이들의 조합을 포함하는 유기 금속화합물을 들 수 있다. 상기 인광 도펀트는 예컨대 하기 화학식 Z로 표현되는 화합물을 사용할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0379] [화학식 Z]
- [0380] L_2MX
- [0381] 상기 화학식 Z에서, M은 금속이고, L 및 X는 서로 같거나 다르며 M과 착화합물을 형성하는 리간드이다.
- [0382] 상기 M은 예컨대 Ir, Pt, Os, Ti, Zr, Hf, Eu, Tb, Tm, Fe, Co, Ni, Ru, Rh, Pd 또는 이들의 조합일 수 있고, 상기 L 및 X는 예컨대 바이덴테이트 리간드일 수 있다.
- [0383] 상기 조성물은 유기 광전자 소자의 유기층에 적용될 수 있으며, 일 예로 상기 조성물은 발광층에 적용될 수 있다. 예컨대 발광층의 호스트로서 적용될 수 있다.
- [0384] 상기 조성물은 건식 성막법 또는 용액 공정으로 형성될 수 있다. 상기 건식 성막법은 예컨대 화학기상증착법, 스퍼터링, 플라즈마 도금 및 이온도금 일 수 있고, 둘 이상의 화합물을 동시에 성막하거나 증착 온도가 같은 화합물을 혼합하여 같이 성막할 수 있다. 상기 용액 공정은 예컨대 잉크젯 인쇄법, 스핀 코팅, 슬릿 코팅, 바 코팅 및/또는 딥 코팅일 수 있다.
- [0385] 이하 상술한 조성물을 적용한 유기 광전자 소자를 설명한다.
- [0386] 상기 유기 광전자 소자는 전기 에너지와 광 에너지를 상호 전환할 수 있는 소자이면 특별히 한정되지 않으며, 유기발광소자, 유기광전소자, 유기태양전지, 유기트랜지스터, 유기 감광체 드럼 및 유기메모리소자로 이루어진 군에서 선택된 어느 하나일 수 있다.
- [0387] 상기 유기 광전자 소자는 서로 마주하는 애노드와 캐소드, 그리고 상기 애노드와 상기 캐소드 사이에 위치하는 적어도 1층의 유기층을 포함할 수 있고, 상기 유기층은 전술한 조성물을 포함할 수 있다.
- [0388] 여기서는 유기 광전자 소자의 일 예인 유기 발광 소자를 도면을 참고하여 설명한다.
- [0389] 도 1은 일 구현예에 따른 유기 발광 소자를 보여주는 단면도이다.
- [0390] 도 1을 참고하면, 일 구현예에 따른 유기 발광 소자(100)는 서로 마주하는 애노드(110)와 캐소드(120), 그리고 애노드(110)와 캐소드(120) 사이에 위치하는 유기층(105)을 포함한다.
- [0391] 애노드(110)는 예컨대 정공 주입이 원활하도록 일 함수가 높은 도전체로 만들어질 수 있으며, 예컨대 금속, 금속 산화물 및/또는 도전성 고분자로 만들어질 수 있다. 양극(120)은 예컨대 니켈, 백금, 바나듐, 크롬, 구리, 아연, 금과 같은 금속 또는 이들의 합금; 아연산화물, 인듐산화물, 인듐주석산화물(ITO), 인듐아연산화물(IZO)과 같은 금속 산화물; ZnO와 Al 또는 SnO₂와 Sb와 같은 금속과 산화물의 조합; 폴리(3-메틸티오펜), 폴리(3,4-(에틸렌-1,2-디옥시)티오펜)(polyethylenedioxythiophene: PEDOT), 폴리피롤 및 폴리아닐린과 같은 도전성 고분자 등을 들 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0392] 캐소드(120)는 예컨대 전자 주입이 원활하도록 일 함수가 낮은 도전체로 만들어질 수 있으며, 예컨대 금속, 금속 산화물 및/또는 도전성 고분자로 만들어질 수 있다. 음극(110)은 예컨대 마그네슘, 칼슘, 나트륨, 칼륨, 타 이타늄, 인듐, 이트륨, 리튬, 가돌리늄, 알루미늄, 은, 주석, 납, 세슘, 바륨 등과 같은 금속 또는 이들의 합금; LiF/Al, LiO₂/Al, LiF/Ca, LiF/Al 및 BaF₂/Ca과 같은 다층 구조 물질을 들 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0393] 유기층(105)은 전술한 조성물을 포함하는 발광층(130)을 포함한다.
- [0394] 도 2는 다른 구현예에 따른 유기 발광 소자를 보여주는 단면도이다.
- [0395] 도 2를 참고하면, 본 구현예에 따른 유기 발광 소자(200)는 전술한 구현예와 마찬가지로 서로 마주하는 애노드(110)와 캐소드(120), 그리고 애노드(110)와 캐소드(120) 사이에 위치하는 유기층(105)을 포함한다.
- [0396] 유기층(105)은 발광층(130) 및 발광층(130)과 캐소드(120) 사이에 위치하는 보조층(140)을 포함한다. 보조층(140)은 캐소드(120)와 발광층(130) 사이의 전하 주입 및 이동을 용이하게 할 수 있다. 보조층(140)은 예컨대

전자수송층, 전자주입층 및/또는 전자수송보조층일 수 있다.

[0397] 도 1 및 도 2에서 유기층(105)으로서 추가로 애노드(110)와 발광층(130) 사이에 위치하는 적어도 1층의 보조층을 더 포함할 수 있다.

[0398] 상술한 유기 발광 소자는 유기 발광 표시 장치에 적용될 수 있다.

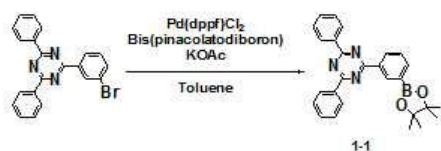
[0400] 이하에서는 본 발명의 구체적인 실시예들을 제시한다. 다만, 하기에 기재된 실시예들은 본 발명을 구체적으로 예시하거나 설명하기 위한 것에 불과하며, 이로서 본 발명이 제한되어서는 아니된다.

[0402] 이하, 본 발명의 합성에 및 실시예에 사용된 출발물질 및 반응물은 특별한 언급이 없는 경우, Sigma-Aldrich社 또는 TCI社에서 구입하였다.

[0404] 제1화합물의 합성

[0405] 합성예 1: 화합물 1의 합성

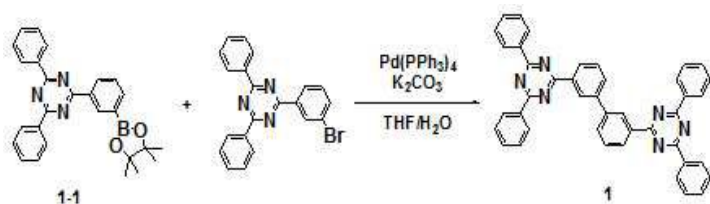
[0406] a) 중간체 1-1의 합성



[0407]

[0408] 500 mL의 둥근 바닥 플라스크에 2-(3-브로모페닐)-4,6-다이페닐-1,3,5-트리아진 20g (51.51mmol)을 톨루엔 250 mL에 녹인다. 다이클로로다이페닐포스피노페로센 팔라듐 0.05 당량, 비스피나콜라도 다이보론 1.2 당량, 초산칼륨 2 당량을 넣고 질소 대기하에서 18 시간 동안 가열 환류시켰다. 반응액을 냉각시키고, 물 100 mL를 넣고 유기층을 추출한다. 유기층을 모아 활성탄소를 처리 후 실리카겔에서 여과한 후 여액을 농축한다. 농축된 잔사를 모아 톨루엔 200 mL와 아세톤 50 mL 에서 결정화하여 생성물 중간체 1-1 19.1 g을 얻었다.

[0410] b) 화합물 1의 합성

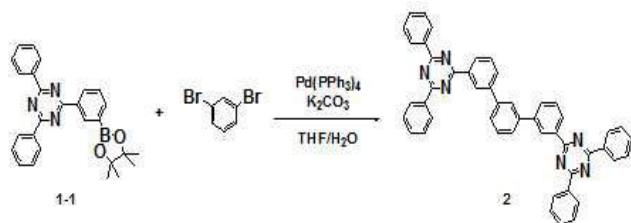


[0411]

[0412] 500 mL의 둥근 바닥 플라스크에 상기 합성된 중간체 1-1 19g (43.79 mmol)을 테트라하이드로퓨란 200 mL, 증류수 50 mL를 넣고, 2-(3-브로모페닐)-4,6-다이페닐-1,3,5-트리아진 1 당량, 테트라키스트리페닐포스핀 팔라듐 0.03 당량, 탄산칼륨 2 당량을 넣고 질소 대기하에서 가열 환류한다. 18 시간 후 반응액을 냉각시키고, 석출된 고체를 여과하고, 물 500 mL로 씻는다. 고체를 모노클로로벤젠 500 mL로 재결정하여 화합물 1을 22.41 g 얻었다.

[0413] LC/MS calculated for: C42H28N6 Exact Mass: 616.2375 found for: 617.24 [M+H]

[0415] 합성예 2: 화합물 2의 합성



[0416]

[0417]

500 mL 둥근 바닥 플라스크에 상기 합성된 중간체 1-1 15 g (34.46 mmol)과, 1,3-다이브로모벤젠 0.5 당량, 테트라키스트리페닐포스핀 팔라듐 0.03 당량, 탄산칼륨 2 당량, 테트라하이드로퓨란 200 mL, 증류수 50 mL를 넣고 질소 대기하에서 가열 환류한다. 20 시간 후 반응액을 냉각시키고, 석출된 고체를 여과하고, 물 500 mL로 씻는다. 고체를 다이클로로벤젠 400 mL로 재결정하여 화합물 2를 9.2 g 얻었다.

[0418]

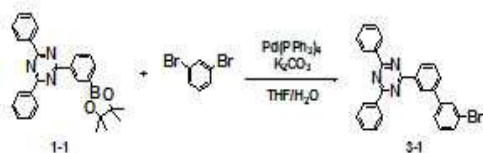
LC/MS calculated for: $\text{C}_{48}\text{H}_{32}\text{N}_6$ Exact Mass: 692.2688 found for: 693.27 [M+H]

[0420]

합성예 3: 화합물 3의 합성

[0421]

a) 중간체 3-1의 합성



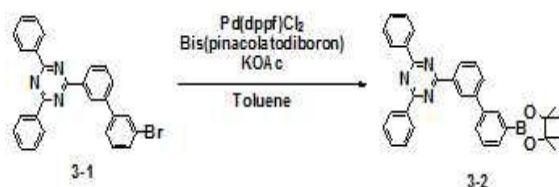
[0422]

[0423]

500 mL 둥근 바닥 플라스크에 상기 합성된 중간체 1-1 30 g (68.92 mmol)과, 1,3-다이브로모벤젠 1.2 당량, 테트라키스트리페닐포스핀 팔라듐 0.03 당량, 탄산칼륨 2 당량, 테트라하이드로퓨란 300 mL, 증류수 100 mL를 넣고 질소 대기하에서 가열 환류한다. 18 시간 후 반응액을 냉각시키고, 반응액을 메탄올 1L에 현탁시키고, 교반 여과한 후 물 500 mL로 씻는다. 고체를 다이클로로벤젠 400 mL로 재결정하여 중간체 3-1을 32 g 얻었다.

[0425]

b) 중간체 3-2의 합성



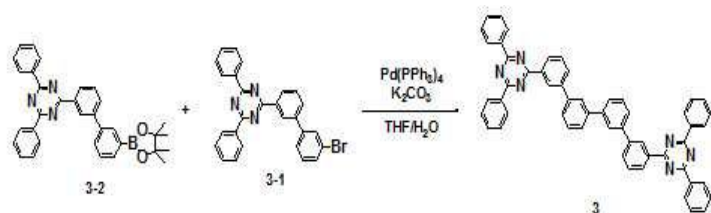
[0426]

[0427]

500 mL 둥근 바닥 플라스크에 상기 합성된 중간체 3-1 32 g (68.91 mmol)을 합성예 1의 a) 중간체 1-1 합성법과 동일하게 반응시켜 중간체 3-2를 29.96 g 얻었다.

[0429]

c) 화합물 3의 합성



[0430]

[0431]

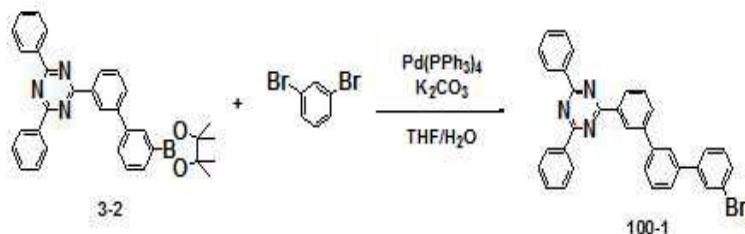
500 mL 둥근 바닥 플라스크에 상기 합성된 중간체 3-2 15 g (29.33 mmol)과, 상기 합성된 중간체 3-1 1 당량, 테트라키스트리페닐포스핀 팔라듐 0.03 당량, 탄산칼륨 2 당량, 테트라하이드로퓨란 200 mL, 증류수 50 mL를 넣고 질소 대기하에서 가열 환류한다. 18 시간 후 반응액을 냉각시키고, 반응액을 여과한 후 물 500 mL로 씻는다.

고체를 다이클로로벤젠 500 mL로 재결정하여 화합물 3을 16.01 g 얻었다.

[0432] LC/MS calculated for: C₅₄H₃₆N₆ Exact Mass: 768.3001 found for: 769.3 [M+H]

[0434] **합성예 4: 화합물 100의 합성**

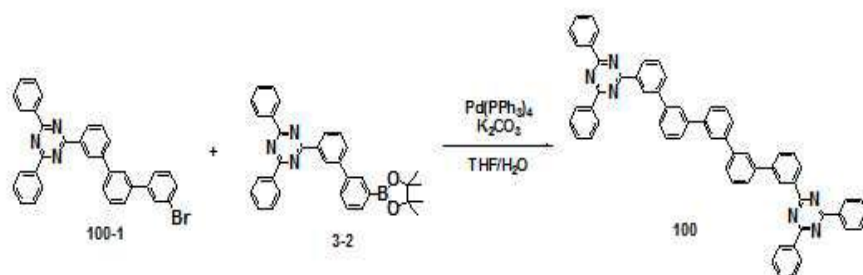
[0435] a) 중간체 100-1의 합성



[0436]

[0437] 500 mL 둥근 바닥 플라스크에 상기 합성된 중간체 3-2 15 g (29.33 mmol)을 합성예 3의 a)중간체 3-1의 합성법과 동일하게 반응시켜, 중간체 100-1을 12.84 g 얻었다.

[0439] b) 화합물 100의 합성



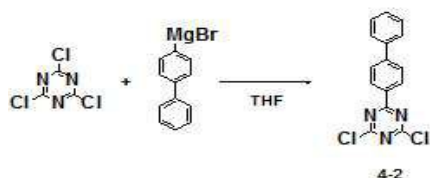
[0440]

[0441] 500 mL 둥근 바닥 플라스크에 상기 합성된 중간체 100-1 12 g (22.2 mmol)과, 상기 합성된 중간체 3-2 1.2 g, 테트라키스트리페닐포스핀 팔라듐 0.03 당량, 탄산칼륨 2 당량, 테트라하이드로퓨란 150 mL, 증류수 50 mL를 넣고 질소 대기하에서 가열 환류한다. 18 시간 후 반응액을 냉각시키고, 반응액을 메탄올 1L에 현탁시키고, 교반 여과한 후 물 500 mL로 씻는다. 고체를 다이클로로벤젠 500 mL로 재결정하여 화합물 100을 13.3 g 얻었다.

[0442] LC/MS calculated for: C₆₀H₄₀N₆ Exact Mass: 844.3314 found for 845.34 [M+H]

[0444] **합성예 5: 화합물 4의 합성**

[0445] a) 중간체 4-2의 합성



[0446]

[0447] 500 mL 둥근바닥플라스크에 시아누릭클로라이드 15 g(81.34 mmol)을 무수 테트라하이드로퓨란 200 mL에 녹이고, 질소대기하에서 4-바이페닐 마그네슘브로마이드 용액 (0.5M 테트라하이드로퓨란) 1 당량을 0 °C에서 적가하고 서서히 상온으로 올린다. 상온에서 1 시간 동안 교반한 후, 반응액을 얼음물 500 mL에 넣고 층분리시킨다. 유기층을 분리하고 무수 황산마그네슘을 처리하고 농축한다. 농축된 잔사를 테트라하이드로퓨란과 메탄올로 재결정하여 중간체 4-2를 17.2 g 얻었다.



[0453] c) 화합물 4의 합성



[0456] LC/MS calculated for: C₄₈H₃₂N₆ Exact Mass: 692.2688 found for 692.27 [M+H]

[0458] 합성예 6: 화합물 16의 합성

[0459] a) 중간체 16-2의 합성

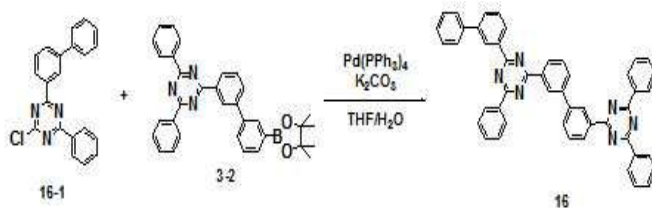


[0463] b) 중간체 16-1의 합성



[0465] 중간체 4-2 대신에 중간체 16-2를 사용하여 상기 합성에 5의 b)의 방법과 동일한 방법으로 중간체 16-1을 합성하였다.

[0467] c) 화합물 16의 합성

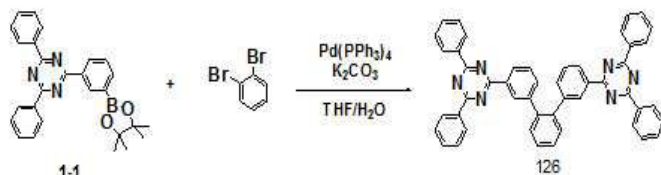


[0468]

[0469] 중간체 16-1을 사용하여 상기 합성에 5의 c)와 같은 방법으로 화합물 16을 합성하였다.

[0470] LC/MS calculated for: C₄₈H₃₂N₆ Exact Mass: 692.2688 found for 692.27 [M+H]

[0472] 합성에 7: 화합물 126의 합성



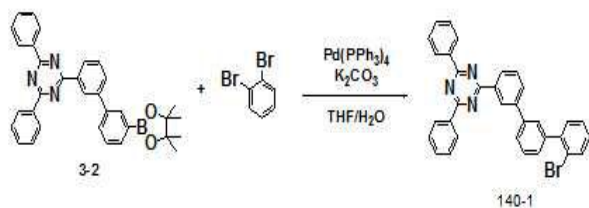
[0473]

[0474] 중간체로 1,2-다이브로모벤젠을 사용하여 상기 합성에 2와 같은 방법으로 화합물 126을 합성하였다.

[0475] LC/MS calculated for: C₄₈H₃₂N₆ Exact Mass: 692.2688, found for 693.28 [M+H]

[0477] 합성에 8: 화합물 140의 합성

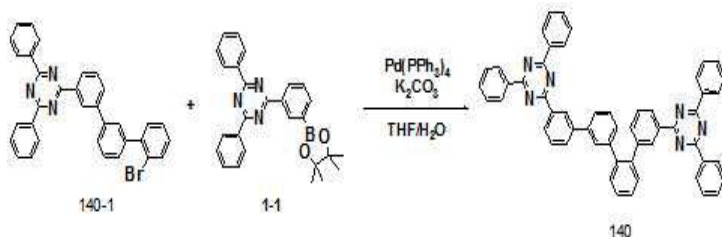
[0478] a) 중간체 140-1의 합성



[0479]

[0480] 500 mL 둥근 바닥 플라스크에 상기 중간체 3-2 20 g (39.11 mmol)을 넣고, 1,2-다이브로모벤젠 1.1 당량, 테트라키스트리페닐포스핀 팔라듐 0.03 당량, 탄산칼륨 2 당량, 테트라하이드로퓨란 200 mL, 증류수 50 mL를 넣고 질소 대기하에서 가열 환류한다. 18 시간 후 반응액을 냉각시키고, 반응액을 메탄올 500 mL에 현탁시키고, 교반여과한 후 물 500 mL로 씻는다. 생성된 고체를 모노클로로벤젠 500 mL로 재결정하여 중간체 140-1을 18.4 g 얻었다.

[0482] b) 화합물 140의 합성



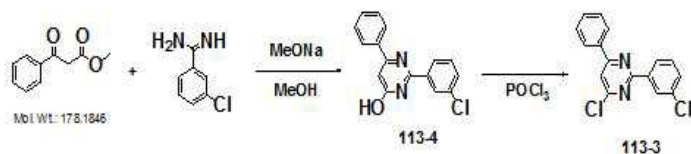
[0483]

[0484] 500 mL 둥근 바닥 플라스크에 상기 합성된 중간체 140-1 18 g (33.31 mmol)을 넣고, 상기 합성된 중간체 1-1 1.1 당량, 테트라키스트리페닐포스핀 팔라듐 0.03 당량, 탄산칼륨 2 당량, 테트라하이드로퓨란 200 mL, 증류수 50 mL를 넣고 질소 대기하에서 가열 환류한다. 18 시간 후 반응액을 냉각시키고, 반응액을 메탄올 500 mL에 현탁시키고, 교반 여과한 후 물 500 mL로 씻는다. 생성된 고체를 모아 노르말헥산과 초산에틸 혼합용매로 실리카 겔 컬럼 정제하여 화합물 140을 19.2 g 얻었다.

[0485] LC/MS calculated for: C₅₄H₃₆N₆ Exact Mass: 768.3001, found for 769.3 [M+H]

[0487] **합성예 9: 화합물 113의 합성**

[0488] a) 중간체 113-3의 합성

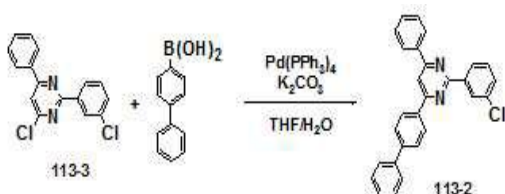


[0489]

[0490] 500 mL 둥근 바닥 플라스크에 메틸 벤조일 아세테이트 30 g (168.37 mmol)을 넣고, 3-클로로페닐 아미딘 1.1 당량, 소듐 메톡사이드 1.2 당량을 메탄올 200 mL에 넣고 6 시간 동안 가열 환류한다. 반응액을 냉각시키고, 1N 염산 용액을 넣어 pH를 5 정도로 맞추고, 염화메탄으로 추출한다. 추출된 용액을 농축하여 생성된 중간체 113-4는 다음 반응에 그대로 사용한다.

[0491] 500 mL 둥근 바닥 플라스크에 상기 중간체 113-4를 넣고, 포스포릴클로라이드 250 mL를 넣고 5 시간 동안 가열 환류시킨다. 반응액을 냉각시키고, 얼음물 1 L에 반응액을 천천히 가하고 교반한다. 물층을 염화메탄 500 mL로 추출하고 무수 황산마그네슘으로 건조하고 농축한다. 농축된 잔사를 노르말헥산과 초산에틸을 이용하여 실리카 겔 컬럼으로 정제하여 중간체 113-3 39 g을 얻었다.

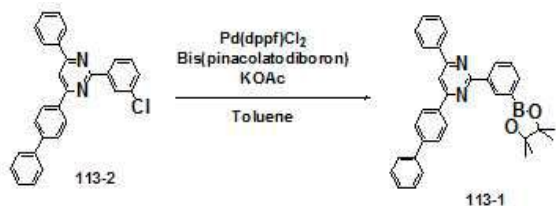
[0493] b) 중간체 113-2의 합성



[0494]

[0495] 500 mL 둥근 바닥 플라스크에 상기 합성된 중간체 113-3 30 g (99.6 mmol)을 넣고, 바이페닐 보로닉 एस이드 1.2 당량, 테트라키스트리페닐포스핀 팔라듐 0.03 당량, 탄산칼륨 2 당량, 테트라하이드로퓨란 250 mL, 증류수 70 mL를 넣고 질소 대기하에서 가열 환류한다. 18 시간 후 반응액을 냉각시키고, 반응액을 메탄올 500 mL에 현탁시키고, 교반 여과한 후 물 500 mL로 씻는다. 생성된 고체를 모아 톨루엔 500 mL로 가열 재결정하여 중간체 113-2 35.9 g을 얻었다.

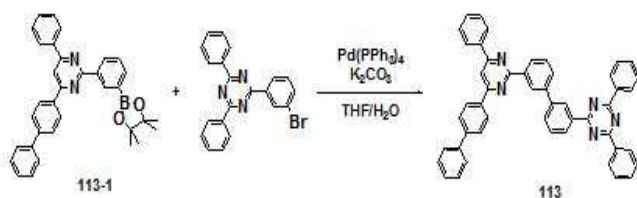
[0497] c) 중간체 113-1의 합성



[0498]

[0499] 500 mL 둥근 바닥 플라스크에 상기 합성된 중간체 113-2 35 g (83.5 mmol)을 넣고, 톨루엔 250 mL, 다이클로로다이페닐포스피노페로센 팔라듐 0.05 당량, 비스피나콜라토 다이보론 1.2 당량, 초산칼륨 2 당량을 넣고 질소 대기하에서 18 시간 동안 가열 환류시켰다. 반응액을 냉각시키고, 물 100 mL를 넣고 유기층을 추출한다. 유기층을 모아 활성탄소를 처리 후 실리카겔에서 여과한 후 여액을 농축한다. 농축된 잔사를 모아 톨루엔 1L에 가열하여 녹이고, 활성탄소를 처리 후 실리카겔에서 여과한다. 여액에 냉각시켜 교반하여 고체를 석출시킨다. 석출된 고체를 여과하여 중간체 113-1을 35.8 g 얻었다.

[0501] d) 화합물 113의 합성



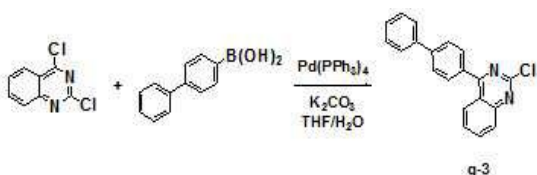
[0502]

[0503] 500 mL 둥근 바닥 플라스크에 상기 합성된 중간체 113-1 35 g (68.6 mmol), 2-(3-브로모페닐)-4,6-다이페닐-1,3,5-트리아진 1 당량, 테트라키스트리페닐포스핀 팔라듐 0.03 당량, 탄산칼륨 2 당량, 테트라하이드로퓨란 250 mL, 증류수 70 mL를 넣고 질소 대기하에서 가열 환류한다. 16 시간 후 반응액을 냉각시키고, 반응액을 메탄올 500 mL에 현탁시키고, 교반 여과한 후 물 500 mL로 씻는다. 생성된 고체를 모아 다이클로로벤젠 500 mL로 가열 재결정하여 화합물 113을 32 g 얻었다.

[0504] LC/MS calculated for: C49H33N5 Exact Mass: 691.2736, found for: 692.29 [M+H]

[0506] 합성예 Ad-1: 화합물 181의 합성

[0507] a) 중간체 q-3의 합성

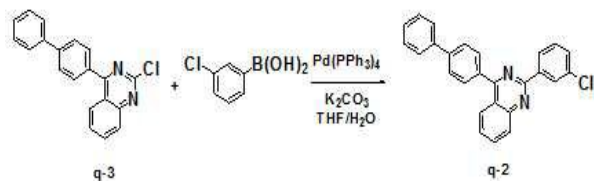


[0508]

[0509] 둥근바닥플라스크에 2,4-디클로로퀴나졸린 1 당량, 4-바이페닐보로닉 에시드 1.1 당량, 테트라키스 트리페닐 포스핀 0.03 당량, 탄산칼륨 3 당량을 테트라하이드로퓨란과 물 3:1 용액에 0.25 몰 농도로 19 시간 동안 가열 환류시켰다. 반응액을 상온으로 냉각시키고, 유기층을 분리하고 농축한다. 농축된 잔사를 노르말 헥산과 디클로로메탄 혼합용액에서 재결정하여 중간체 q-3 15g(수율 75%)을 얻었다.

[0510] LC-Mass (이론치: 316.08g/mol, 측정치: M+1 = 317g/mol)

[0512] b) 중간체 q-2의 합성

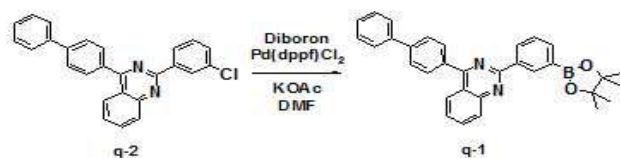


[0513]

[0514] 상기 합성된 중간체 q-3 1 당량, 2-클로로페닐 보로닉에시드 1.2 당량, 테트라키스 트리페닐 포스핀 0.03 당량, 탄산칼륨 3 당량을 테트라하이드로퓨란과 물 3:1 용액에 0.25 몰 농도로 18 시간 동안 가열 환류시켰다. 반응액을 상온으로 냉각시키고, 메탄올에 반응액을 0.1 몰 농도로 희석시켜 교반하여 고체를 석출시킨다. 생성된 고체를 여과하고, 에틸 아세테이트로 재결정하여 중간체 q-2 21g(수율 89%)을 얻었다.

[0515] LC-Mass (이론치: 316.08g/mol, 측정치: M+1 = 317g/mol)

[0517] c) 중간체 q-1의 합성

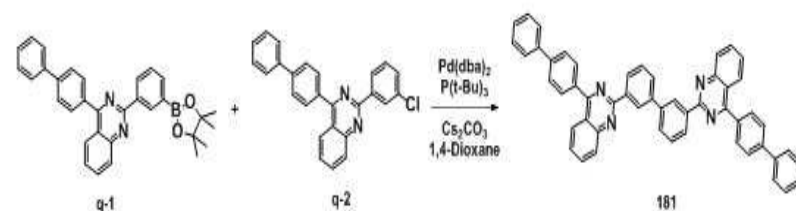


[0518]

[0519] 상기 합성된 중간체 q-2 1 당량을 사용하여 중간체 1-1, 또는 중간체 3-2의 합성 방법과 동일하게 진행하여 중간체 q-1 15g(수율 75%)을 얻었다.

[0520] LC-Mass (이론치: 484.23g/mol, 측정치: M+1 = 485.27g/mol)

[0522] d) 화합물 181의 합성



[0523]

[0524] 상기 합성된 중간체 q-1 1 당량, 중간체 q-2 1 당량을 둥근 플라스크에 넣고, 비스 디벤질리딘 팔라듐 0.03 당량, 트리스 터셔리부틸 포스핀 0.06 당량, 세슘카보네이트 2 당량을 1,4-다이옥산 용매에 0.25 몰 농도로 현탁시키고, 질소 대기하에서 20 시간 동안 가열 환류하였다. 반응 중 생성된 고체를 여과하고, 물로 씻고, 건조한다. 건조된 고체를 디클로로벤젠 0.1 몰 농도에서 가열 재결정하여 화합물 181 11g(수율 72%)을 얻었다

[0525] LC-Mass (이론치: 714.28g/mol, 측정치: M+1 = 715.31g/mol)

[0527] 합성예 Ad-2: 화합물 180의 합성

[0528] 합성예 Ad-1의 a) 중간체 q-3의 합성 단계에서 "4-바이페닐보로닉 에시드" 대신에 "페닐보로닉에시드"를 사용하고, 합성예 Ad-1의 합성법을 적절히 이용하여 화합물 180을 합성하였다.

[0529] LC-Mass (이론치: 638.76g/mol, 측정치: M+1 = 639.80g/mol)

[0531] 합성예 Ad-3: 화합물 183의 합성

[0532] 합성에 Ad-1의 a) 중간체 q-3의 합성 단계에서 "4-바이페닐보로닉 에시드" 대신에 "페닐보로닉에시드"를 사용하고, 합성에 Ad-1의 합성법을 적절히 이용하여 화합물 183을 합성하였다.

[0533] LC-Mass (이론치: 562.66g/mol, 측정치: M+1 = 563.69g/mol)

[0535] 합성에 Ad-4: 화합물 190의 합성

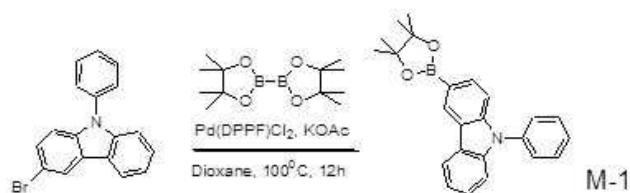
[0536] 합성에 Ad-1의 a) 중간체 q-3의 합성 단계에서 "4-바이페닐보로닉 에시드" 대신에 "페닐보로닉에시드"를 사용하고, b) 단계에서 "2-클로로페닐 보로닉에시드" 대신에 "2-클로로-2'-바이페닐보로닉에시드"를 사용하고 합성에 Ad-1의 합성법을 적절히 이용하여 화합물 190을 합성하였다.

[0537] LC-Mass (이론치: 638.76g/mol, 측정치: M+1 = 639.77g/mol)

[0539] 제2화합물의 합성

[0540] 중간체 M-1의 합성

[0541] [반응식 1]



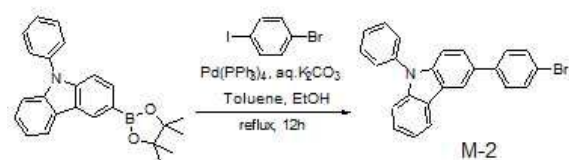
[0542]

[0543] 3-브로모-9-페닐-9H-카바졸 50g(155.18mmol)과 Pd(dppf)Cl₂ 3.41g (4.65mmol), 비스(피나콜라토)디보론 (Bis(pinacolato)diboron) 51.32g (201.8mmol) 및 포타슘아세테이트 45.8g(465.5mmol)을 1,4-다이옥산 (dioxane) 520ml에 용해 시켰다. 반응물을 질소 분위기 하에서 12시간 동안 환류 교반 한 후 디클로로메탄 과 증류수로 3회 추출 하였다. 추출액을 마그네슘설파이트로 건조, 여과하고 여과액을 감압 농축하였다. 생성물을 n-헥산/디클로로메탄(7:3 부피비)으로 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 중간체 M-1을 흰색 고체로 43g (수율 75%)을 수득 하였다.

[0544] LC-Mass (이론치: 369.19g/mol, 측정치: M+1 = 370g/mol)

[0546] 중간체 M-2의 합성

[0547] [반응식 2]



[0548]

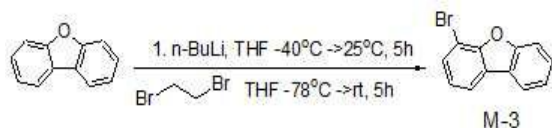
[0549] 중간체 M-1 40g(108.3mmol), 1-브로모-4-아이오덴젠 30.6g(108.3mmol) 및 테트라키스트리페닐포스핀팔라듐 1.25g(1.08mmol)을 플라스크에 넣고 질소 분위기 하에 톨루엔 270ml와 에탄올 135mL에 용해 시켰다.

[0550] 이후 포타슘 카보네이트 31.9g(58.9mmol)을 녹인 수용액 135ml를 첨가 시킨 후 12시간 동안 환류 교반하였다. 반응 종료 후 에틸아세테이트로 추출 후 추출액을 마그네슘 설파이트로 건조, 여과하고 여과액을 감압 농축하였다. 생성물을 n-헥산/디클로로메탄(7:3 부피비)으로 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 중간체 M-2을 흰색 고체로 35g (수율 81%)을 수득 하였다.

[0551] LC-Mass (이론치: 398.29g/mol, 측정치: M+1 = 399g/mol)

[0553] 중간체 M-3의 합성

[0554] [반응식 3]



[0555]

[0556] 진공 하에서 가열 건조한 2구 둥근 바닥 플라스크에 질소 분위기 하에서 디벤조푸라닐기 10g(59.5mmol)을 넣고 무수 테트라하이드로퓨란 119mL를 가하여 용해시킨 후 -40℃로 냉각 및 교반하였다.

[0557] 여기에 2.5M n-부틸리튬 26mL(핵산 내, 65.5mmol)을 천천히 가한 후 상온 및 질소 분위기 하에 5시간 교반하였다. 반응액을 -78℃로 냉각한 후 여기에 무수 테트라하이드로퓨란 10mL에 녹인 1,2-디브로모에탄 22.4g(119mmol)을 천천히 가한 후 상온에서 5시간 교반하였다.

[0558] 반응 종료 후 용액을 감압 농축하여 용매를 제거한 후 증류수와 디클로로메탄으로 추출 후 추출액을 마그네슘 셀파이트 로 건조 및 여과하고 여과액을 감압 농축하였다. 반응액을 n-헥산으로 재결정하여 목적화합물인 중간체 M-3을 흰색고체로 11g(수율 75%)을 수득하였다.

[0559] GC-Mass (이론치: 245.97g/mol, 측정치: 246g/mol)

[0561] 중간체 M-4의 합성

[0562] [반응식 4]



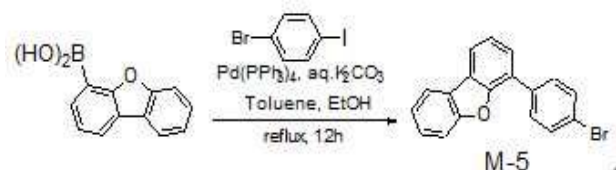
[0563]

[0564] [반응식 4]와 같이 중간체 M-3의 합성법에서, 디벤조푸라닐기 대신 디벤조티오펜 10g(54.3mmol)을 넣고 동일한 방법으로 반응시켜 목적화합물인 중간체 M-4을 흰색고체로 11g(수율 77%)을 수득하였다.

[0565] GC-Mass (이론치: 261.95g/mol, 측정치: 262g/mol)

[0567] 중간체 M-5의 합성

[0568] [반응식 5]



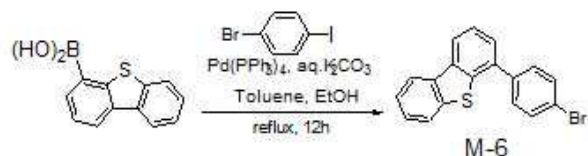
[0569]

[0570] [반응식 5]와 같이 중간체 M-2 합성법에서 중간체 M-1 대신에 4-디벤조푸라닐기보론산(4-dibenzofuranboronic acid) 20g(94.4mmol)을 사용하여 목적 화합물인 중간체 M-5을 흰색 고체로 27g (수율 89%)을 수득 하였다.

[0571] LC-Mass (이론치: 322.00g/mol, 측정치: M+1 = 323g/mol)

[0573] 중간체 M-6의 합성

[0574] [반응식 6]



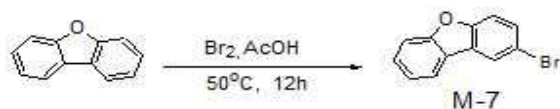
[0575]

[0576] [반응식 6]과 같이, 중간체 M-2의 합성법에서 중간체 M-1 대신에 4-디벤조티오펜보론산(4-dibenzothiopheneboronic acid) 20g(87.69mmol)을 사용하여 목적 화합물인 중간체 M-6을 흰색 고체로 25g(수율 83%)을 수득하였다.

[0577] LC-Mass (이론치: 337.98g/mol, 측정치: M+1 = 338g/mol)

[0579] 중간체 M-7의 합성

[0580] [반응식 7]



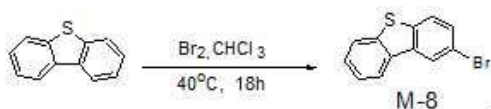
[0581]

[0582] 둥근 바닥 플라스크에 디벤조푸라닐기 30g (178.4mmol)을 넣고 아세트산 270g에 녹인 후 50℃에서 아세트산 6g에 녹인 브롬 29g (181.5mmol)을 4시간 동안 천천히 가하였다. 반응액을 50℃에서 8시간 동안 추가로 교반한 후 냉각하고 증류수에 반응물을 가한다. 오렌지색 고체를 디클로로메탄에 녹인 후 소듐티오설파이트 수용액으로 세척하고 유기층을 마그네슘설파이트로 건조, 여과하고 여과액을 감압 농축하였다. 생성물을 디클로로메탄/n-헥산으로 재결정하여 목적화합물인 중간체 M-7을 흰색 고체로 10.1g (수율 23%)을 수득하였다.

[0583] GC-Mass (이론치: 245.97g/mol, 측정치: 246g/mol)

[0585] 중간체 M-8의 합성

[0586] [반응식 8]



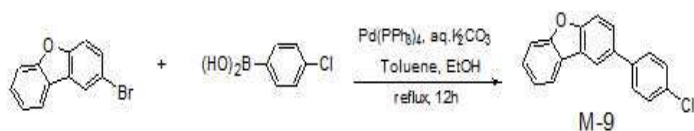
[0587]

[0588] 둥근 바닥 플라스크에 디벤조티오펜기 30g(162.8mmol)을 넣고 클로로포름 2L에 녹인 후 상온에서 브롬 27.3g(170.9mmol)을 6시간 동안 천천히 가하였다. 반응액을 40℃에서 12시간 동안 추가로 교반한 후 냉각하고 소듐티오설파이트 수용액을 가하여 추출한다. 유기층을 마그네슘설파이트로 건조, 여과하고 여과액을 감압 농축하였다. 생성물을 에틸아세테이트/n-헥산으로 재결정하여 목적화합물인 중간체 M-8을 흰색 고체로 15.4g(수율 36%)을 수득하였다.

[0589] GC-Mass (이론치: 261.95g/mol, 측정치: 262g/mol)

[0591] 중간체 M-9의 합성

[0592] [반응식 9]



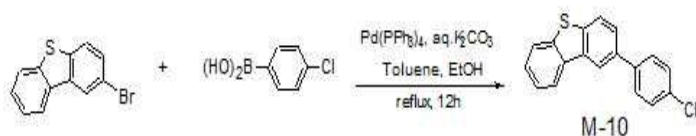
[0593]

[0594] 4-클로로페닐보론산 20g(127.9mmol), 중간체 M-7 30.0g(121.5mmol) 및 테트라키스트리페닐포스핀팔라듐 1.48g(1.28mmol)을 플라스크에 넣고 질소 분위기 하에 톨루엔 320ml와 에탄올 160mL에 용해 시킨 후 포타슘카보네이트 37.7g (255.8mmol)을 녹인 수용액 160ml를 첨가 시킨 후 12시간 동안 환류 교반 하였다. 반응 종료 후 에틸아세테이트로 추출 한 후 추출액을 마그네슘설파이트로 건조, 여과하고 여과액을 감압 농축하였다. 생성물을 n-헥산/디클로로메탄(9:1 부피비)으로 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 중간체 M-9을 흰색 고체로 28.1g(수율 83%)을 수득 하였다.

[0595] LC-Mass (이론치: 278.05g/mol, 측정치: M+1 = 279g/mol)

[0597] 중간체 M-10의 합성

[0598] [반응식 10]



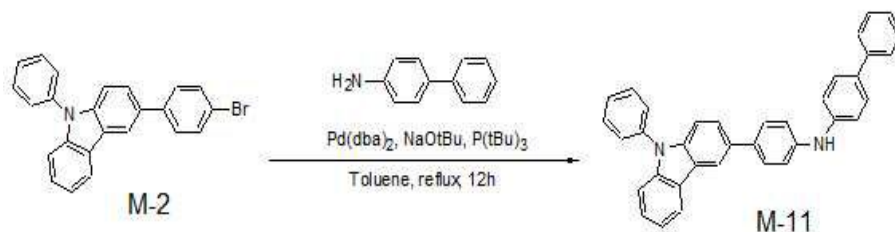
[0599]

[0600] [반응식 10]과 같이, 중간체 M-9의 합성법에서 중간체 M-7 대신에 중간체 M-8 32.0g(121.5mmol)을 목적 화합물인 중간체 M-10을 흰색 고체로 30.4g (수율 85%)을 수득 하였다.

[0601] LC-Mass (이론치: 294.03 g/mol, 측정치: M+1 = 295 g/mol)

[0603] 중간체 M-11의 합성

[0604] [반응식 11]



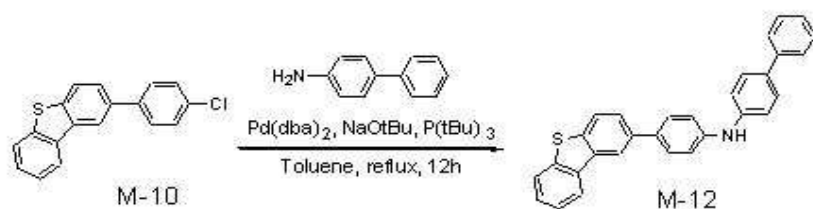
[0605]

[0606] 중간체 M-2 30g(75.3mmol)과 4-아미노바이페닐 14.0g(82.83mmol), 소듐 t-부톡사이드 10.9g(113.0mmol) 및 트리-테트라-부틸포스핀 0.46g(2.26mmol)을 톨루엔 750ml에 용해 시키고, Pd(dba)₂ 0.43g(0.753mmol)을 넣은 후 질소 분위기 하에서 12시간 동안 환류 교반 시킨다. 반응 종료 후 에틸아세테이트와 증류수로 추출 후 유기층을 마그네슘설파이트로 건조, 여과하고 여과액을 감압 농축하였다. 생성물을 n-헥산/디클로로메탄(7:3 부피비)으로 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 중간체 M-11을 흰색 고체로 27.5 g(수율 75%)을 수득 하였다.

[0607] LC-Mass (이론치: 486.21g/mol, 측정치: M+1 = 487g/mol)

[0609] 중간체 M-12의 합성

[0610] [반응식 12]



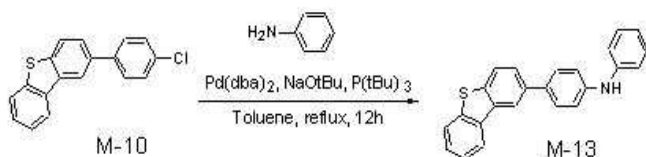
[0611]

[0612] [반응식 12]와 같이, 중간체 M-11 합성법에서 중간체 M-2 대신에 중간체 M-10 5g(17.0mmol)을 사용하여 목적 화합물인 중간체 M-12을 흰색 고체로 5.23g(수율 72%)을 수득 하였다.

[0613] LC-Mass (이론치: 427.14g/mol, 측정치: M+1 = 428g/mol)

[0615] 중간체 M-13의 합성

[0616] [반응식 13]



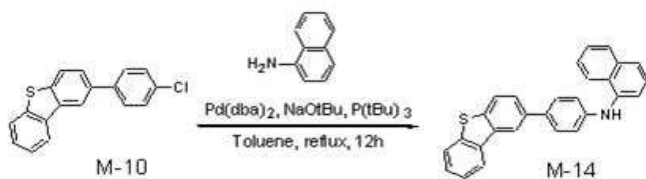
[0617]

[0618] [반응식 13]과 같이, 중간체 M-12합성법에서 4-아미노바이페닐 대신에 아닐린 1.66g(17.85mmol)을 사용하여 목적 화합물인 중간체 M-13을 흰색 고체로 4.66g(수율 78%)을 수득 하였다.

[0619] LC-Mass (이론치: 351.11g/mol, 측정치: M+1 = 352g/mol)

[0621] 중간체 M-14의 합성

[0622] [반응식 14]



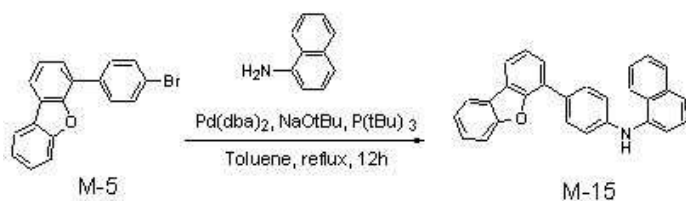
[0623]

[0624] [반응식 14]와 같이, 중간체 M-12의 합성방법에서 4-아미노바이페닐 대신에 1-아미노나프탈렌 2.56g(17.85mmol)을 사용하여 목적 화합물인 중간체 M-14을 흰색 고체로 4.98g(수율 73%)을 수득 하였다.

[0625] LC-Mass (이론치: 401.12g/mol, 측정치: M+1 = 402g/mol)

[0627] 중간체 M-15의 합성

[0628] [반응식 15]



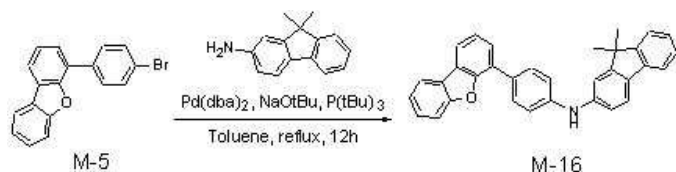
[0629]

[0630] [반응식 15]와 같이 중간체 M-14의 합성방법에서 중간체 M-10 대신에 중간체 M-5 5.49g(17.0mmol)를 사용하여 목적 화합물인 중간체 M-15을 흰색 고체로 5.05g (수율 77%)을 수득 하였다.

[0631] LC-Mass (이론치: 385.15g/mol, 측정치: M+1 = 386g/mol)

[0633] 중간체 M-16의 합성

[0634] [반응식 16]



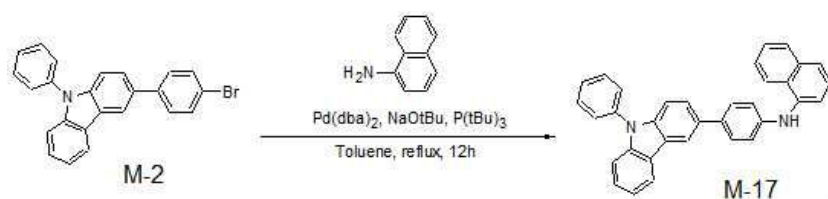
[0635]

[0636] [반응식 16]과 같이 중간체 M-15의 합성법에서 1-아미노나프탈렌 대신에 (9,9-디메틸-9H-플루오렌-2-일)아민 3.74g(17.85mmol)을 사용하여 목적 화합물인 중간체 M-16을 흰색 고체로 6.0g (수율 78%)을 수득 하였다.

[0637] LC-Mass (이론치: 451.19g/mol, 측정치: M+1 = 452g/mol)

[0639] 중간체 M-17의 합성

[0640] [반응식 17]

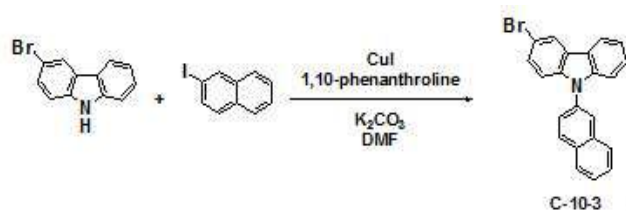


[0641]

[0642] [반응식 17]과 같이 중간체 M-11의 합성법에서 4-아미노바이페닐 대신에 1-아미노나프탈렌 11.9g(82.83mmol)을 사용하여 목적 화합물인 중간체 M-17을 흰색 고체로 25.7 g(수율 74%)을 수득 하였다.

[0643] LC-Mass (이론치: 460.19g/mol, 측정치: M+1 = 461g/mol)

[0645] 중간체 C-10-3의 합성

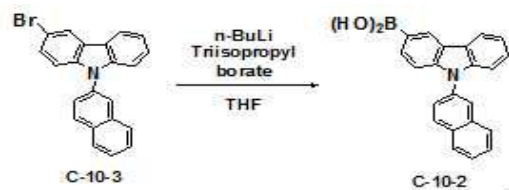


[0646]

[0647] 500 mL 둥근 바닥 플라스크에 3-브로모 카바졸 30 g (121.9 mmol), 2-아이오도 나프탈렌 1.5 당량, 구리 촉매 0.05 당량, 1,10-페난트롤린 0.1 당량, 초산 칼륨 2 당량을 디메틸포름아마이드 250 mL에 넣고 18시간 동안 가 열 환류시켰다. 반응액을 냉각시키고, 물 1 L에 넣고 고체화 교반하였다. 고체를 여과하고, 초산 에틸 500 mL로 재결정하여 중간체 C-10-3 34 g을 얻었다.

[0648] LC/MS calculated for: C22H14BrN Exact Mass: 371.0310, found for: 372.05 [M+H]

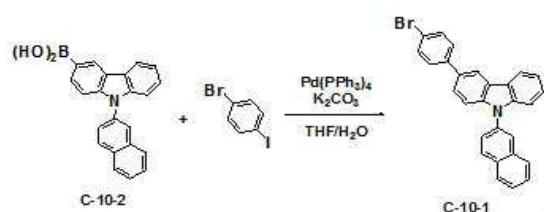
[0650] 중간체 C-10-2의 합성



[0651]

[0652] 500 mL 둥근 바닥 플라스크에 상기 합성된 중간체 C-10-3 34 g (91.33 mmol)을 무수 테트라하이드로퓨란 200 mL에 녹이고, 질소 대기하에서 -78도로 온도를 낮춘다. 부틸리튬 용액 1.3 당량을 적가하고, 30 분간 교반 한 뒤 트리이소프로필보레이트 1.5 당량을 적가하고, 1시간 동안 교반 한 뒤 상온으로 올려 2 시간 교반하였다. 반응액에 물 100 mL를 천천히 가하고 층분리시킨 후 유기층을 분리하였다. 물층을 초산에틸 100 mL로 추출하고 유기층을 모아 포화 소금물 100 mL로 씻고, 무수 황산 마그네슘으로 건조 하고 여과하여 농축하였다. 농축된 잔사를 진공 건조하여 얻은 중간체 C-10-2 33 g을 추가의 정제 없이 다음 반응에 그대로 사용하였다.

[0654] 중간체 C-10-1의 합성

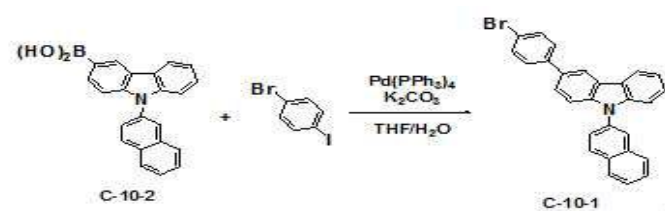


[0655]

[0656] 500 mL 둥근 바닥 플라스크에 상기 합성된 중간체 C-10-2 33 g을 넣고, 4-브로모-아이오도 벤젠 1.5 당량, 테트라키스트리페닐 포스핀 팔라듐 0.05 당량, 탄산 칼륨 2.5 당량을 테트라 하이드로퓨란 200 mL와 물 70 mL 혼합액에 현탁시키고 질소 대기하에서 가열 환류시켰다. 반응액을 냉각시키고 물층을 제거한 뒤 유기층을 모아 농축한다. 농축된 잔사를 노르말 헥산과 초산 에틸 혼합용액으로 실리카겔 컬럼으로 정제하여 중간체 C-10-1 37 g을 얻었다.

[0657] LC/MS calculated for: C₂₈H₁₈BrN, Exact Mass: 447.0623, found for: 447.10

[0659] 합성예 10: 화합물 A-414의 합성

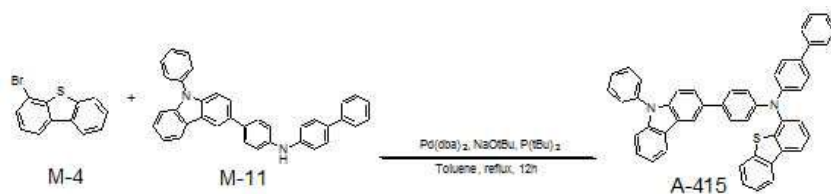


[0660]

[0661] 중간체 M-3 5g(20.2mmol)과 중간체 M-11 9.85g(20.2mmol), 소듐 t-부톡사이드 2.91g(30.3mmol) 및 트리-테트라-부틸포스핀 0.12g (2.26mmol)을 톨루엔 200mL에 용해 시키고, Pd(dba)₂ 0.12g(0.202mmol)을 넣은 후 질소 분위기 하에서 12시간 동안 환류 교반 시킨다. 반응 종료 후 에틸아세테이트와 증류수로 추출 후 유기층을 마그네슘설파이트로 건조, 여과하고 여과액을 감압 농축하였다. 생성물을 n-헥산/디클로로메탄(7:3 부피비)으로 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 A-414를 흰색 고체로 12g(수율 91%) 을 수득 하였다.

[0662] LC-Mass (이론치: 652.25g/mol, 측정치: M+1 = 653g/mol)

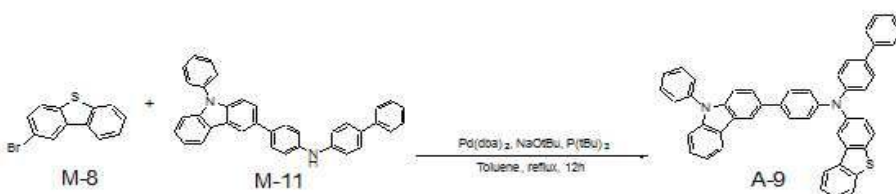
합성예 11: 화합물 A-415의 합성



합성예 10에서 중간체 M-3 대신에 중간체 M-4 5.3g(20.2mmol)을 사용하여 목적 화합물인 A-415를 흰색 고체로 11.8g(수율 87%)을 수득 하였다.

LC-Mass (이론치: 668.23g/mol, 측정치: M+1 = 669g/mol)

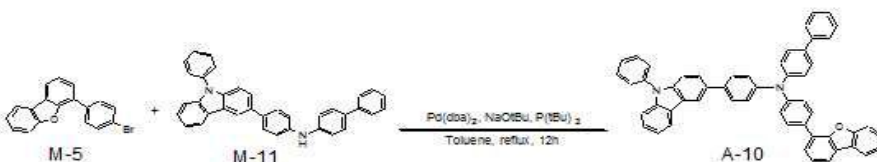
합성예 12: 화합물 A-9의 합성



합성예 10에서 중간체 M-3 대신에 중간체 M-8 5.3g(20.2mmol)을 사용하여 목적 화합물인 A-9를 흰색 고체로 11.8g(수율 87%)을 수득 하였다.

LC-Mass (이론치: 668.23g/mol, 측정치: M+1 = 669g/mol)

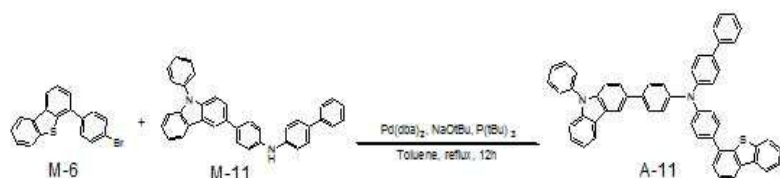
합성예 13: 화합물 A-10의 합성



합성예 10에서 중간체 M-3대신에 중간체 M-5 6.5g(20.2mmol)을 사용하여 목적 화합물인 A-10을 흰색 고체로 12.4g(수율 84%)을 수득 하였다.

LC-Mass (이론치: 728.28g/mol, 측정치: M+1 = 729g/mol)

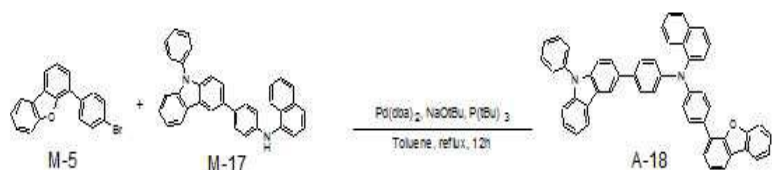
합성예 14: 화합물 A-11의 합성



합성예 10 에서 중간체 M-3 대신에 중간체 M-6 6.85g(20.2mmol)을 사용하여 목적 화합물인 A-11을 흰색 고체로 13.2g(수율 88%)을 수득 하였다.

LC-Mass (이론치: 744.26g/mol, 측정치: M+1 = 745g/mol)

[0684] **합성예 15: 화합물 A-18의 합성**

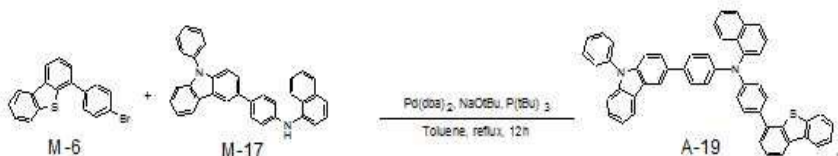


[0685]

[0686] 중간체 M-5 6.53g(20.2mmol)과 중간체 M-17 9.30g(20.2mmol), 소듐 t-부톡사이드 2.91g(30.3mmol) 및 트리-테트라-부틸포스핀 0.12g(2.26mmol)을 톨루엔 200ml에 용해 시키고, Pd(dba)₂ 0.12g(0.202mmol)을 넣은 후 질소 분위기 하에서 12시간 동안 환류 교반 시킨다. 반응 종료 후 에틸아세테이트와 증류수로 추출 후 유기층을 마그네슘설파이트로 건조, 여과하고 여과액을 감압 농축하였다. 생성물을 n-헥산/디클로로메탄(7:3 부피비)으로 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 A-18을 흰색 고체로 12.5g(수율 88%)을 수득 하였다.

[0687] LC-Mass (이론치: 702.27g/mol, 측정치: M+1 = 703g/mol)

[0689] **합성예 16: 화합물 A-19의 합성**

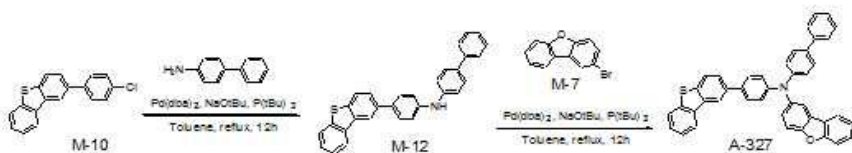


[0690]

[0691] 합성예 15에서 중간체 M-5 대신에 중간체 M-6 6.85g(20.2mmol)을 사용하여 목적 화합물인 A-19을 흰색 고체로 12.3g(수율 85%)을 수득 하였다.

[0692] LC-Mass (이론치: 718.24g/mol, 측정치: M+1 = 719g/mol)

[0694] **합성예 17: 화합물 A-327의 합성**

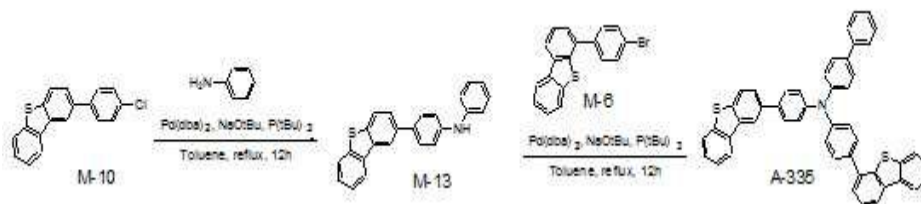


[0695]

[0696] 중간체 M-12 5.2g(12.2mmol)과 중간체 M-7 3.0g(12.2mmol), 소듐 t-부톡사이드 1.76g(18.3mmol) 및 트리-테트라-부틸포스핀 0.074g(0.37mmol)을 톨루엔 120ml에 용해 시키고, Pd(dba)₂ 0.070g(0.122mmol)을 넣은 후 질소 분위기 하에서 12시간 동안 환류 교반 시킨다. 반응 종료 후 에틸아세테이트와 증류수로 추출 후 유기층을 마그네슘설파이트로 건조, 여과하고 여과액을 감압 농축하였다. 생성물을 n-헥산/디클로로메탄(7:3 부피비)으로 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 A-327을 흰색 고체로 6.2g(수율 86%)을 수득 하였다.

[0697] LC-Mass (이론치: 593.18g/mol, 측정치: M+1 = 594g/mol)

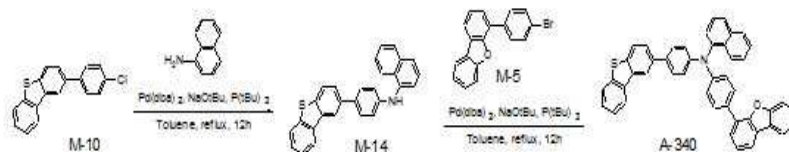
합성예 18: 화합물 A-335의 합성



중간체 M-13 4.3g(12.2mmol)과 중간체 M-6 4.14g(12.2mmol), 소듐 t-부톡사이드 1.76g(18.3mmol) 및 트리-테트라-부틸포스핀 0.074g(0.37mmol)을 톨루엔 120ml에 용해 시키고, Pd(dba)₃ 0.070g(0.122mmol)을 넣은 후 질소 분위기 하에서 12시간 동안 환류 교반 시킨다. 반응 종료 후 에틸아세테이트와 증류수로 추출 후 유기층을 마그네슘설파이트로 건조, 여과하고 여과액을 감압 농축하였다. 생성물을 n-헥산/디클로로메탄(7:3 부피비)으로 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 A-335를 흰색 고체로 6.8g(수율 91%)을 수득 하였다.

LC-Mass (이론치: 609.16g/mol, 측정치: M+1 = 610g/mol)

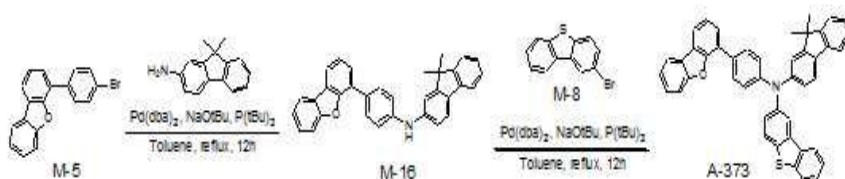
합성예 19: 화합물 A-340의 합성



중간체 M-14 4.9g(12.2mmol)과 중간체 M-5 3.94g(12.2mmol), 소듐 t-부톡사이드 1.76g(18.3mmol) 및 트리-테트라-부틸포스핀 0.074g(0.37mmol)을 톨루엔 120ml에 용해 시키고, Pd(dba)₃ 0.070g(0.122mmol)을 넣은 후 질소 분위기 하에서 12시간 동안 환류 교반 시킨다. 반응 종료 후 에틸아세테이트와 증류수로 추출 후 유기층을 마그네슘설파이트로 건조, 여과하고 여과액을 감압 농축하였다. 생성물을 n-헥산/디클로로메탄(7:3 부피비)으로 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 A-340을 흰색 고체로 7.2g(수율 92%)을 수득 하였다.

LC-Mass (이론치: 643.20g/mol, 측정치: M+1 = 644g/mol)

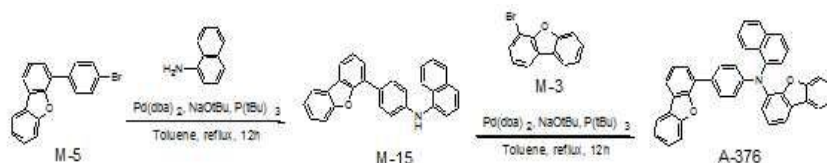
합성예 20: 화합물 A-373의 합성



중간체 M-16 5.51g(12.2mmol)과 중간체 M-8 3.21g(12.2 mmol), 소듐 t-부톡사이드 1.76g(18.3mmol) 및 트리-테트라-부틸포스핀 0.074g(0.37mmol)을 톨루엔 120ml에 용해 시키고, Pd(dba)₃ 0.070g(0.122mmol)을 넣은 후 질소 분위기 하에서 12시간 동안 환류 교반 시킨다. 반응 종료 후 에틸아세테이트와 증류수로 추출 후 유기층을 마그네슘설파이트로 건조, 여과하고 여과액을 감압 농축하였다. 생성물을 n-헥산/디클로로메탄(7:3 부피비)으로 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 A-373을 흰색 고체로 7.0g(수율 91%)을 수득 하였다.

LC-Mass (이론치: 633.21g/mol, 측정치: M+1 = 634g/mol)

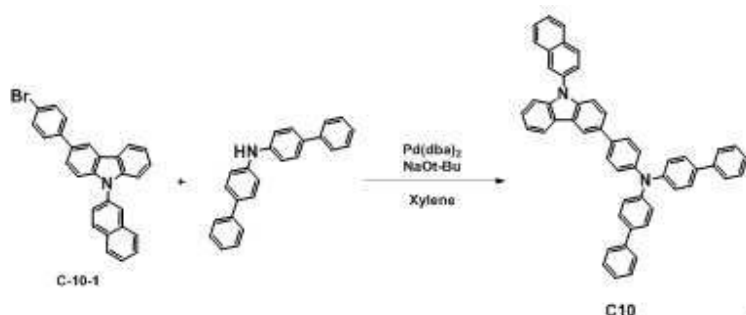
합성예 21: 화합물 A-376의 합성



중간체 M-15 4.7g(12.2mmol)과 중간체 M-3 3.01g(12.2mmol), 소듐 t-부톡사이드 1.76g(18.3mmol) 및 트리-테트라-부틸포스핀 0.074g(0.37mmol)을 톨루엔 120ml에 용해 시키고, Pd(dba)₂ 0.070g(0.122mmol)을 넣은 후 질소 분위기 하에서 12시간 동안 환류 교반 시킨다. 반응 종료 후 에틸아세테이트와 증류수로 추출 후 유기층을 마그네슘설파이트로 건조, 여과하고 여과액을 감압 농축하였다. 생성물을 n-헥산/디클로로메탄(7:3 부피비)으로 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 A-376을 흰색 고체로 6.2g(수율 92%)을 수득 하였다.

LC-Mass (이론치: 551.19g/mol, 측정치: M+1 = 552g/mol)

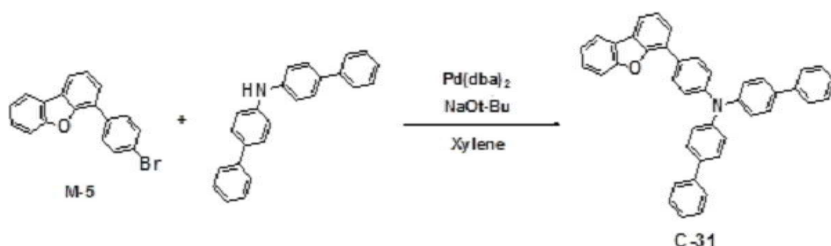
합성예 22: 화합물 C10의 합성



500 mL 둥근 바닥 플라스크에 37 g (82.52 mmol), 다이 바이페닐 아민 1.2 당량, 디벤질리딘 아세톤 비스 팔라듐 0.05 당량, 소듐 터셔리 부톡사이드 1.5 당량을 넣고, 자일렌 250 mL를 넣고 18 시간 동안 가열 환류시켰다. 반응액을 냉각시키고, 메탄올 1 L에 희석시키고 교반한다. 생성된 고체를 여과한다. 물 300 mL, 메탄올 300 mL로 씻고, 고체를 모아 메틸렌 클로라이드 50 mL, 헥산 300 mL로 재결정하여 화합물 C10 43 g을 얻었다.

LC/MS calculated for: C52H36N2 Exact Mass: 688.2878, found for: 688.29

합성예 23: 화합물 C31의 합성



둥근바닥플라스크에 중간체 M-5 10g(30.9mmol)과 비스(4-바이페닐)아민 9.9g(30.9mmol), 소듐 t-부톡사이드 4.5g(46.35mmol)을 넣고 톨루엔 155ml을 가하여 용해 시켰다. 여기에 Pd(dba)₂ 0.178g (0.31mmol)과 트리-터셔리-부틸포스핀 0.125g(0.62mmol)을 차례로 넣은 후 질소 분위기 하에서 4시간 동안 환류 교반 시킨다. 반응 종료 톨루엔과 증류수로 추출 후 유기층을 마그네슘 설파이트로 건조, 여과하고 여과액을 감압 농축하였다. 생성물을 n-헥산/디클로로메탄(8:2 부피비)으로 실리카 겔 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 C31을 16g(수율 92%)을 수득하였다.

[0727] LC-Mass (이론치: 563.22g/mol, 측정치: M^+ = 563.28g/mol)

[0729] **유기 발광 소자의 제작 I-녹색 소자**

[0730] **실시예 1**

[0731] ITO (Indium tin oxide)가 1500Å 두께로 박막 코팅된 유리 기판을 증류수 초음파로 세척하였다. 증류수 세척이 끝나면 이소프로필 알코올, 아세톤, 메탄올 등의 용제로 초음파 세척을 하고 건조시킨 후 플라즈마 세정기로 이송시킨 다음 산소 플라즈마를 이용하여 상기 기판을 10분간 세정한 후 진공 증착기로 기판을 이송하였다. 이렇게 준비된 ITO 투명 전극을 양극으로 사용하여 ITO 기판 상부에 화합물 A를 진공 증착하여 700Å 두께의 정공 주입층을 형성하고 상기 주입층 상부에 화합물 B를 50Å의 두께로 증착한 후, 화합물 C를 1020Å의 두께로 증착하여 정공수송층을 형성하였다. 정공수송층 상부에 합성에 1의 화합물 1 및 합성에 10의 화합물 A-414를 동시에 호스트로 사용하고 도판트로 트리스(2-페닐피리딘)이리듐(III) $[Ir(ppy)_3]$ 를 10wt%로 도핑하여 진공 증착으로 400Å 두께의 발광층을 형성하였다. 여기서 화합물 1과 화합물 A-414는 3:7 중량비로 사용되었으며, 하기 실시예의 경우 별도로 비율을 기술하였다. 이어서 상기 발광층 상부에 화합물 D와 Liq를 동시에 1:1 비율로 진공 증착하여 300Å 두께의 전자수송층을 형성하고 상기 전자수송층 상부에 Liq 15Å과 Al 1200Å을 순차적으로 진공 증착하여 음극을 형성함으로써 유기발광소자를 제작하였다.

[0732] 상기 유기발광소자는 5층의 유기 박막층을 가지는 구조로 되어 있으며, 구체적으로 다음과 같다.

[0733] ITO/화합물A(700Å)/화합물B(50Å)/화합물C(1020Å)/EML[화합물1:A-414:Ir(ppy)₃ = 27wt%:63wt%:10wt%](400Å)/화합물D:Liq(300Å)/Liq(15Å)/Al(1200Å)의 구조로 제작하였다.

[0734] 화합물 A: N4,N4'-diphenyl-N4,N4'-bis(9-phenyl-9H-carbazol-3-yl)biphenyl-4,4'-diamine

[0735] 화합물 B: 1,4,5,8,9,11-hexaazatriphenylene-hexacarbonitrile (HAT-CN),

[0736] 화합물 C: N-(biphenyl-4-yl)-9,9-dimethyl-N-(4-(9-phenyl-9H-carbazol-3-yl)phenyl)-9H-fluoren-2-amine

[0737] 화합물 D: 8-(4-(4,6-di(naphthalen-2-yl)-1,3,5-triazin-2-yl)phenyl)quinoline

[0739] **실시예 2 내지 실시예 16**

[0740] 하기 표 1에 나타난 것과 같이 제1 호스트 및 제2 호스트를 해당 비율로 사용하여 상기 실시예 1과 동일한 방법으로 실시예 2 내지 실시예 16의 유기발광소자를 제작하였다.

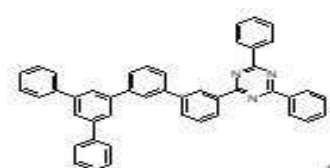
[0742] **비교예 1 내지 비교예 10**

[0743] 하기 표 1에 나타난 것과 같이 제1 호스트를 단독 호스트로 사용하여 상기 실시예 1과 동일한 방법으로 비교예 1 내지 10의 유기발광소자를 제작하였다.

[0745] **비교예 11**

[0746] 화합물 A-414와 하기 비교예 화합물 I을 호스트로서 5:5의 비율로 사용하여 실시예 1과 동일한 방법으로 소자를 제작하였다.

[0747] [비교예 화합물 I]



[0748]

- [0750] **비교예 12**
- [0751] 화합물 1과 mCP(1,3-Bis(N-carbazolyl)benzene)를 호스트로서 5:5의 비율로 사용하여 실시예 1과 동일한 방법으로 소자를 제작하였다.
- [0753] **유기 발광 소자의 제작 II-적색 소자**
- [0754] **실시예 17**
- [0755] 합성예 Ad-1의 화합물 181 및 합성예 23의 화합물 C31을 각각 3:7의 중량비로 혼합하여 동시에 호스트로 사용하고 도판트로 [Ir(piq)₂acac]를 5wt%로 도핑하여 발광층을 형성한 것을 제외하고는 상기 실시예 1과 동일한 방법으로 실시예 17의 유기발광소자를 제작하였다.
- [0757] **실시예 18 내지 실시예 20**
- [0758] 하기 표 2에 나타난 것과 같이 제1 호스트 및 제2 호스트를 해당 비율로 사용하여 상기 실시예 17과 동일한 방법으로 실시예 18 내지 실시예 20의 유기발광소자를 제작하였다.
- [0760] **비교예 13 내지 비교예 15**
- [0761] 하기 표 2에 나타난 것과 같이 제1 호스트를 단독 호스트로 사용하여 상기 실시예 17과 동일한 방법으로 비교예 13 내지 비교예 15의 유기발광소자를 제작하였다.
- [0763] **평가 1: 발광 효율 및 구동 상승 효과 확인**
- [0764] 상기 실시예 1 내지 20, 및 비교예 1 내지 15에 따른 유기발광소자의 발광효율 및 수명 특성을 평가하였다. 구체적인 측정방법은 하기와 같고, 그 결과는 표 1 및 표 2와 같다.
- [0765] (1) 전압변화에 따른 전류밀도의 변화 측정
- [0766] 제조된 유기발광소자에 대해, 전압을 0V 부터 10V까지 상승시키면서 전류-전압계(Keithley 2400)를 이용하여 단위소자에 흐르는 전류값을 측정하고, 측정된 전류값을 면적으로 나누어 결과를 얻었다.
- [0767] (2) 전압변화에 따른 휘도변화 측정
- [0768] 제조된 유기발광소자에 대해, 전압을 0V 부터 10V까지 상승시키면서 휘도계(Minolta Cs-1000A)를 이용하여 그때의 휘도를 측정하여 결과를 얻었다.
- [0769] (3) 발광효율 측정
- [0770] 상기(1) 및 (2)로부터 측정된 휘도와 전류밀도 및 전압을 이용하여 동일 전류밀도(10 mA/cm^2)의 전류 효율(cd/A)을 계산하였다.
- [0771] (4) 수명 측정
- [0772] 제조된 유기발광소자에 대해 폴라로닉스 수명측정 시스템을 사용하여 실시예 1 내지 12 및 비교예 1 내지 비교예 14의 소자를 초기휘도(cd/m^2)를 5000 cd/m^2 로 발광시키고 시간경과에 따른 휘도의 감소를 측정하여 초기 휘도 대비 90%로 휘도가 감소된 시점을 T90 수명으로 측정하였다.
- [0773] (5) 구동전압 측정
- [0774] 전류-전압계(Keithley 2400)를 이용하여 15 mA/cm^2 에서 각 소자의 구동전압을 측정하였으며, 그 결과를 하기 표 1 및 표 2에 기재하였다.

[0775]

녹색 소자 데이터

	제1호스트	제2호스트	제1호스트+ 제2호스트 비율	색	효율 Cd/A	수명 (T90)	구동전압 (Vd)
실시예 1	1	A-414	3:7	녹색	54	235	3.9
실시예 2	2	A-414	3:7	녹색	49	244	4.1
실시예 3	2	C31	3:7	녹색	61	250	3.6
실시예 4	3	A-415	3:7	녹색	52	261	4.3
실시예 5	100	A-9	3:7	녹색	51	280	4.2
실시예 6	4	A-10	2:8	녹색	48	291	3.9
실시예 7	4	C31	2:8	녹색	49	311	3.7
실시예 8	16	A-11	2:8	녹색	53	231	3.8
실시예 9	16	C31	2:8	녹색	62	352	3.6
실시예 10	16	C10	2:8	녹색	55	309	3.7
실시예 11	126	A-18	2:8	녹색	49	278	4.2
실시예 12	126	C31	2:8	녹색	55	334	3.7
실시예 13	140	A-19	3:7	녹색	48	257	4.3
실시예 14	140	C10	3:7	녹색	51	319	3.7
실시예 15	113	A-327	3:7	녹색	47	281	4.1
실시예 16	113	C31	3:7	녹색	61	376	3.8
비교예 1	1	-	-	녹색	35	71	4.8
비교예 2	2	-	-	녹색	35	80	4.9
비교예 3	4	-	-	녹색	37	75	5.1
비교예 4	16	-	-	녹색	40	77	4.7
비교예 5	126	-	-	녹색	33.6	10	4.5
비교예 6	113	-	-	녹색	20.6	32	4.7
비교예 7	A-414	-	-	녹색	18	15	6.2
비교예 8	A-415	-	-	녹색	19	18	6.4
비교예 9	C31	-	-	녹색	21	19	5.9
비교예 10	C10	-	-	녹색	22	23	6.8
비교예 11	비교예 화합물 I	A-414	5:5	녹색	38	54	5.1
비교예 12	1	mCP	5:5	녹색	40	75	4.8

표 2

[0776]

적색 소자 데이터

	제1 호스트	제2 호스트	제1호스트+ 제2호스트 비율	색	효율 Cd/A	수명 (T90)	구동전압 (Vd)
실시예 17	181	C31	3:7	적색	23	450	3.6
실시예 18	180	A-414	3:7	적색	21	400	3.6
실시예 19	183	C31	3:7	적색	22	380	3.94
실시예 20	190	C31	3:7	적색	20	350	3.9
비교예 13	181	-	100	적색	12	25	6.6
비교예 14	C31	-	100	적색	11	33	7.9
비교예 15	A-414	-	100	적색	9	30	8.1

[0777]

표 1 및 표 2를 참고하면, 본 발명에 따른 제 1 호스트와 제 2 호스트의 조합 호스트의 경우, 단독 호스트가 사용되었을 경우보다 발광효율, 수명 및 구동 전압이 월등히 개선된 것을 확인 할 수 있다.

[0779]

본 발명은 상기 실시예들에 한정되는 것이 아니라 서로 다른 다양한 형태로 제조될 수 있으며, 본 발명이 속하는 기술분야에서 통상의 지식을 가진 자는 본 발명의 기술적 사상이나 필수적인 특징을 변경하지 않고서 다른

구체적인 형태로 실시될 수 있다는 것을 이해할 수 있을 것이다. 그러므로 이상에서 기술한 실시예들은 모든 면에서 예시적인 것이며 한정적이 아닌 것으로 이해해야만 한다.

부호의 설명

[0780]

100, 200: 유기발광소자

105: 유기층

110: 애노드

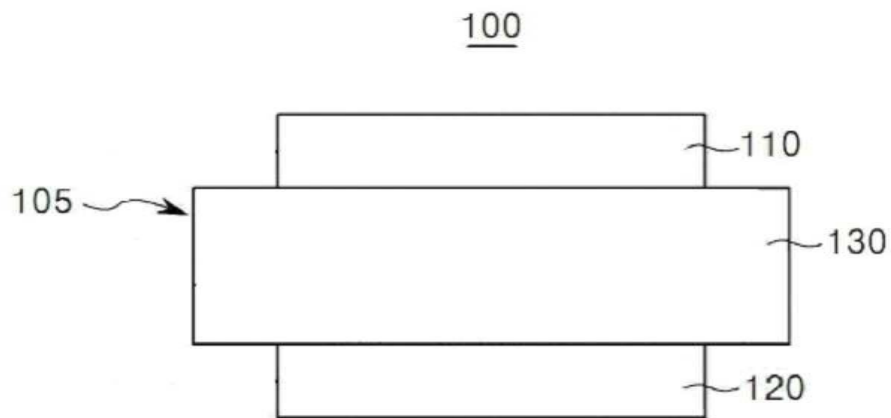
120: 캐소드

130: 발광층

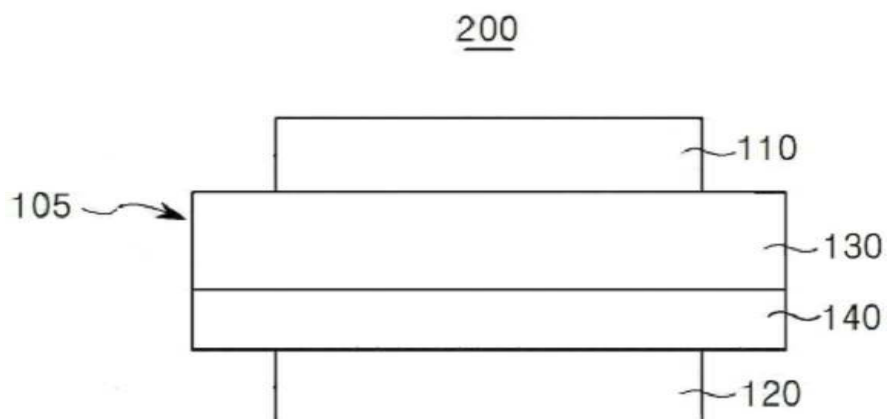
140: 보조층

도면

도면1



도면2



专利名称(译)	标题：用于有机光电器件，有机光电器件和显示器件的组合物		
公开(公告)号	KR1020170048159A	公开(公告)日	2017-05-08
申请号	KR1020160129962	申请日	2016-10-07
申请(专利权)人(译)	三星SD眼有限公司		
当前申请(专利权)人(译)	三星SD眼有限公司		
[标]发明人	LEE SANGSHIN 이상신 KANG DONG MIN 강동민 KIM JUN SEOK 김준석 LEE BYOUNGKWAN 이병관 LEE HANILL 이한일 JANG KIPO 장기포 HAN SUJIN 한수진 KIM YOUNGKWON 김영권 YU EUN SUN 유은선		
发明人	이상신 강동민 김준석 이병관 이한일 장기포 한수진 김영권 유은선		
IPC分类号	C09K11/06 C07D209/82 C07D251/12 C07D307/91 C07D333/76 C07D403/10 H01L51/00 H01L51/50		
CPC分类号	C07D209/86 C07D239/74 C07D251/24 C07D307/91 C07D333/76 C07D403/10 C07D405/12 C07D409/12 C09K11/06 H01L51/0052 H01L51/0059 H01L51/006 H01L51/0061 H01L51/0067 H01L51/0072 H01L51/0073 H01L51/0074 H01L51/0085 H01L51/5016 H01L2251/5384 H01L51/5004 H01L51/5024		
优先权	1020150148231 2015-10-23 KR		
外部链接	Espacenet		

摘要(译)

本发明涉及有机发光电子部件的组合物，其包含表示为化学式1的至少一种第一化合物，和表示为化学式2的至少一种第二化合物，该有机发光电子成分包括同样，显示装置包括有机发光元件。它与说明书中描述的化学式1和2相同。

100

