



(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 공개특허공보(A)

(11) 공개번호 10-2011-0013220
 (43) 공개일자 2011년02월09일

(51) Int. Cl.
C09K 11/06 (2006.01) *H01L 51/50* (2006.01)
C07D 215/00 (2006.01) *C07D 239/72* (2006.01)
 (21) 출원번호 10-2010-0064849
 (22) 출원일자 2010년07월06일
 심사청구일자 없음
 (30) 우선권주장
 1020090070611 2009년07월31일 대한민국(KR)

(71) 출원인
다우어드밴스드디스플레이머티리얼 유한회사
 충청남도 천안시 서북구 백석동 735-2
 (72) 발명자
이효정
 서울시 금천구 시흥2동 우방아파트 104-102
조영준
 서울시 성북구 돈암동 15-1 삼성아파트 101-1111
 (뒷면에 계속)
 (74) 대리인
박창희, 권오식

전체 청구항 수 : 총 10 항

(54) 신규한 유기 발광 화합물 및 이를 포함하는 유기 전계 발광 소자

(57) 요약

본 발명은 신규한 유기 발광 화합물 및 이를 포함하고 있는 유기 전계 발광 소자에 관한 것이다.

본 발명에 따른 유기 발광 화합물은 기존 재료에 비해 발광 효율이 좋고 재료의 수명특성이 뛰어나 소자의 구동 수명이 매우 우수할 뿐만 아니라 전력효율의 상승을 유도하여 소비전력이 개선된 OLED 소자를 제조할 수 있는 장점이 있다.

(72) 발명자

음성진

서울시 구로구 구로3동 1274번지 신성미소지움
104-805

권혁주

서울특별시 광진구 구의3동 현대2차 아파트
206-701

김봉욱

서울특별시 강남구 삼성동 힐스테이트 아파트
208-401

김성민

서울시 양천구 목1동 목동트라팰리스 EB-1003

윤승수

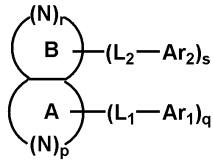
서울시 강남구 수서동 삼익아파트 405-1409

특허청구의 범위

청구항 1

하기 화학식 1로 표시되는 유기 발광 화합물.

[화학식 1]



[상기 화학식 1에 있어서,

A 및 B 고리는 6원의 방향족 고리 또는 6원의 헤테로 방향족 고리이고;

p 및 r은 0 내지 2의 정수를 나타내고, q 및 s는 2 내지 4의 정수를 나타내며, 단 $p+r \geq 1$, $p+q \leq 4$ 및 $r+s \leq 4$ 를 만족하고;

L_1 및 L_2 는 서로 독립적으로 화학결합이거나, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴렌, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)헤테로아릴렌, 치환 또는 비치환된 5원 내지 7원의 헤테로시클로알킬렌, 치환 또는 비치환된 방향족고리가 하나이상 융합된 5원 내지 7원의 헤테로시클로알킬렌, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬렌, 치환 또는 비치환된 방향족고리가 하나이상 융합된 (C3-C30)시클로알킬렌, 치환 또는 비치환된 (C2-C30)알케닐렌, 치환 또는 비치환된 (C2-C30)알키닐렌, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아르(C1-C30)알킬렌, -O- 또는 -S-이고;

Ar_1 및 Ar_2 는 서로 독립적으로 수소, 할로젠, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬이 하나이상 융합된 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)헤테로아릴, 치환 또는 비치환된 5원 내지 7원의 헤테로시클로알킬, 치환 또는 비치환된 방향족고리가 하나이상 융합된 5원 내지 7원의 헤테로시클로알킬, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬, 치환 또는 비치환된 방향족고리가 하나이상 융합된 (C3-C30)시클로알킬, 시아노, $-NR_{11}R_{12}$, $-SiR_{13}R_{14}R_{15}$, $-OR_{16}$, $-SR_{17}$, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아르(C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬아미노, $-SiR_{18}R_{19}R_{20}$ 이 치환 또는 비치환된 (C3-C30)헤테로아릴, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴아미노, 치환 또는 비치환된 (C2-C30)알케닐, 치환 또는 비치환된 (C2-C30)알키닐, 카르복실, 니트로 또는 하이드록시이거나 인접한 치환체와 융합고리를 포함하거나 포함하지 않는 (C3-C30)알킬렌 또는 (C3-C30)알케닐렌으로 연결되어 치환족 고리 및 단일환 또는 다환의 방향족 고리를 형성할 수 있으며;

상기 R_{11} 내지 R_{20} 는 서로 독립적으로 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴 또는 치환 또는 비치환된 (C3-C30)헤테로아릴 또는 인접한 치환체와 융합고리를 포함하거나 포함하지 않는 (C3-C30)알킬렌 또는 (C3-C30)알케닐렌으로 연결되어 치환족 고리 및 단일환 또는 다환의 방향족 고리를 형성할 수 있으며; 상기 헤테로시클로알킬 및 헤테로아릴은 N, O, S 및 Si로부터 선택된 하나 이상의 헤테로원자를 포함한다.]

청구항 2

제 1항에 있어서,

상기 R_{11} 내지 R_{20} , L_1 , L_2 , Ar_1 및 Ar_2 , 의 “치환 또는 비치환”에 있어서, 치환은 서로 독립적으로 중수소, 할로젠, 할로젠이 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, (C6-C30)아릴, (C6-C30)아릴이 치환 또는 비치환된 (C3-C30)헤테로아릴, 5원 내지 7원의 헤테로시클로알킬, 방향족고리가 하나이상 융합된 5원 내지 7원의 헤테로시클로알킬, (C3-C30)시클로알킬, 방향족고리가 하나이상 융합된 (C3-C30)시클로알킬, 트리(C1-C30)알킬실릴, 디(C1-C30)알킬(C6-C30)아릴실릴, 트리(C6-C30)아릴실릴, (C2-C30)알케닐, (C2-C30)알키닐, 시아노, 카바졸릴, $-NR_{31}R_{32}$, $-SiR_{33}R_{34}R_{35}$, $-OR_{36}$, $-SR_{37}$, (C6-C30)아르(C1-C30)알킬, (C1-C30)알킬(C6-C30)아릴, (C1-C30)알킬옥시, (C1-C30)알킬티오, (C6-C30)아릴옥시, (C6-C30)아릴티오, 카르복실, 니트로 또는 하이드록시로 이루어진 군으로부터 선택되는 하나 이상으로 더 치환되거나, 서로 인접한 치환체가 연결되어 고리를 형성할 수 있고, 상기

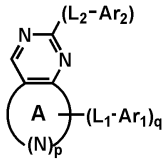
R₃₁ 내지 R₃₇는 서로 독립적으로 (C1-C30)알킬, (C6-C30)아릴, (C3-C30)헤테로아릴 또는 인접한 치환체와 융합고리를 포함하거나 포함하지 않는 (C3-C30)알킬렌 또는 (C3-C30)알케닐렌으로 연결되어 치환족 고리 및 단일환 또는 다환의 방향족 고리를 형성할 수 있는 것을 특징으로 하는 유기 발광 화합물.

청구항 3

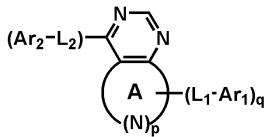
제 1항에 있어서,

하기 화학식 2 내지 화학식 5로 표시되는 유기 발광 화합물.

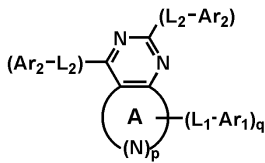
[화학식 2]



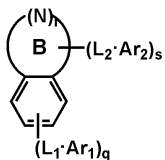
[화학식 3]



[화학식 4]



[화학식 5]



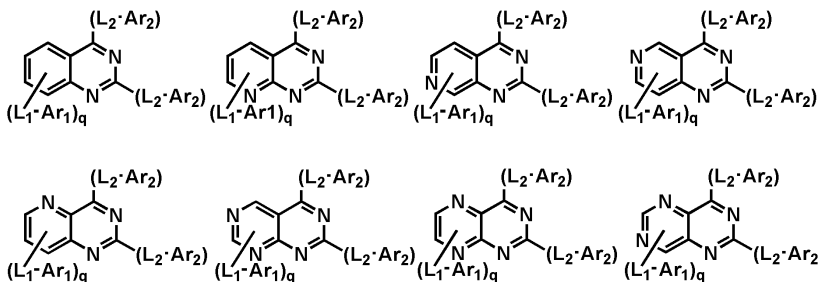
[상기 화학식 2 내지 화학식 5에 있어서,

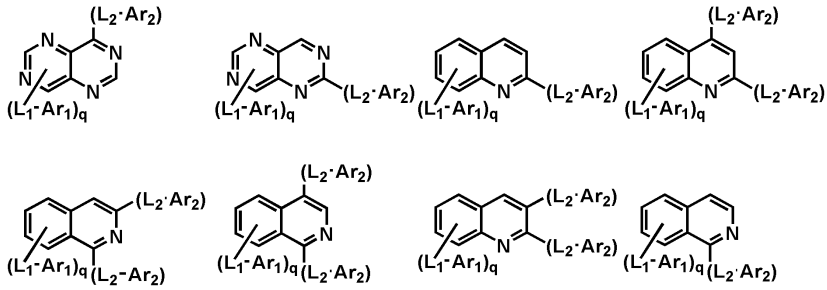
A 및 B 고리, Ar₁, Ar₂, p, q, r 및 s는 청구항 제 1항에서의 정의와 동일하며, 각각의 치환기는 서로 동일하지 않을 수도 있다.]

청구항 4

제 1항에 있어서,

하기 화합물로부터 선택되는 유기 발광 화합물.



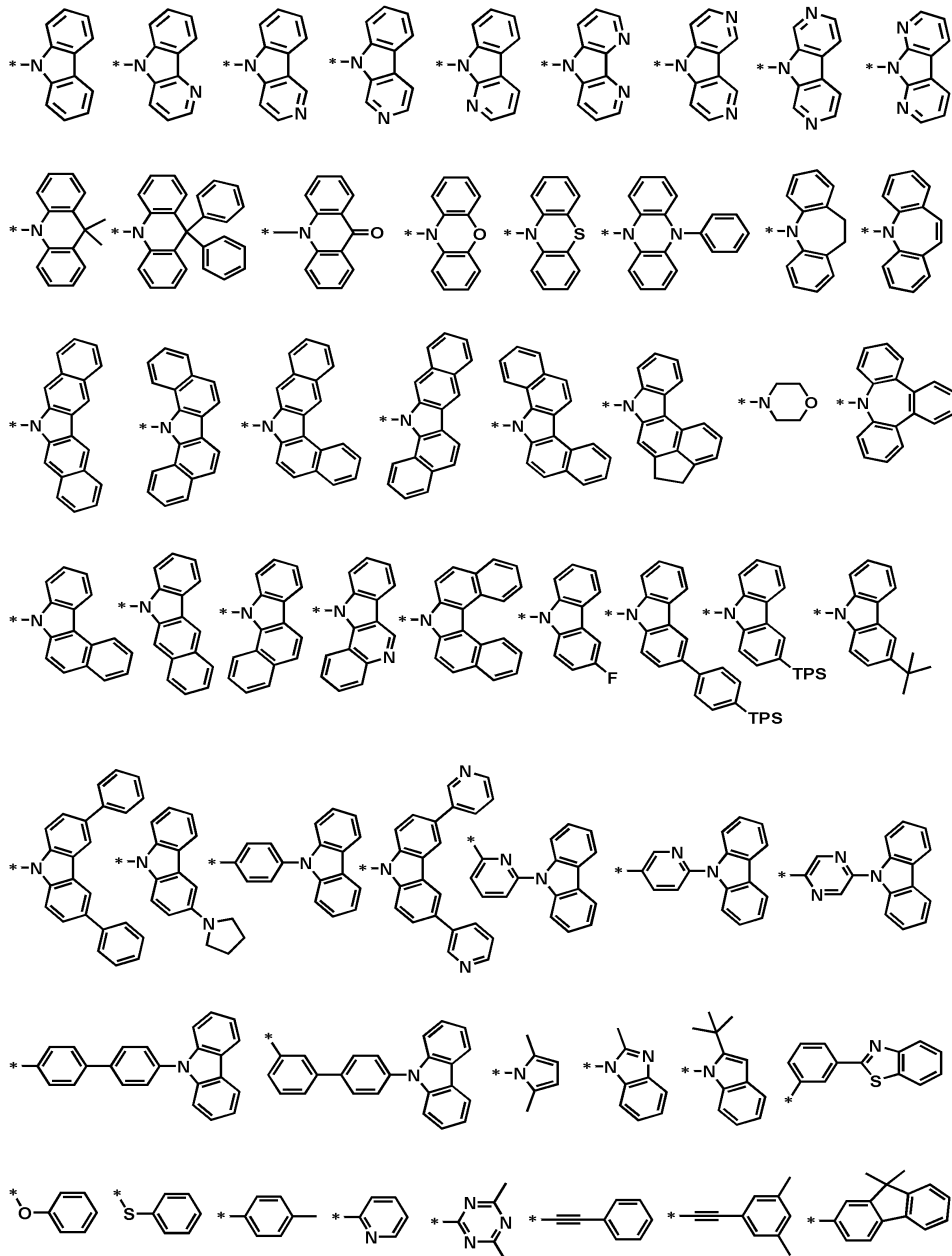


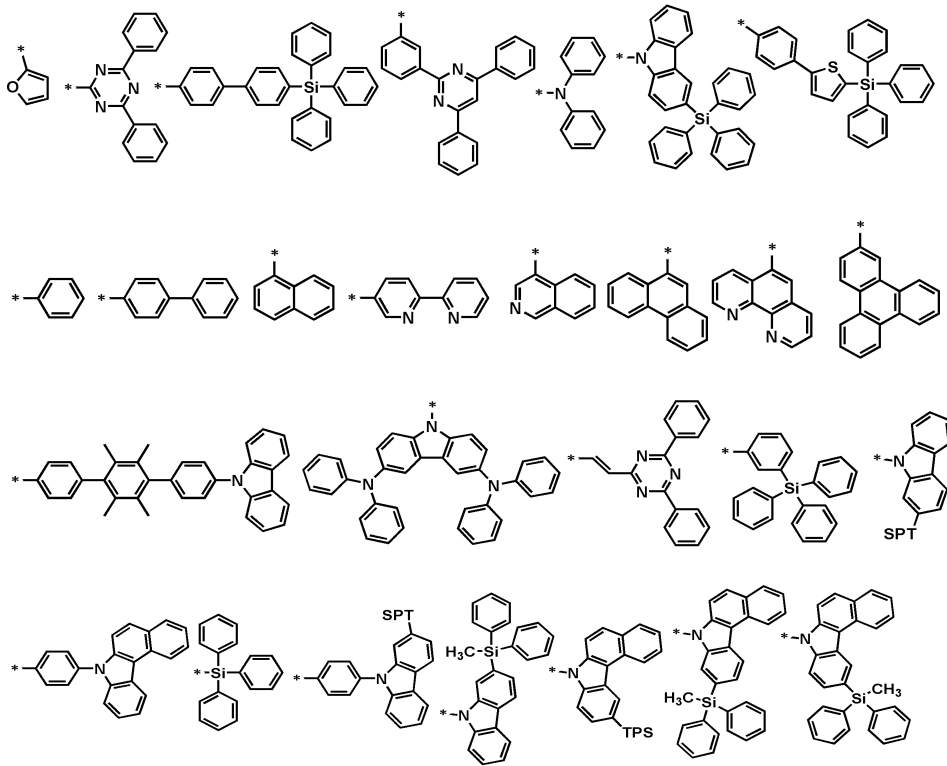
[L_1 및 L_2 , Ar_1 및 Ar_2 , q 는 상기 청구항 제 1항에서의 정의와 동일하며, 각각의 치환기는 서로 동일하지 않을 수도 있다.]

청구항 5

제 4항에 있어서,

상기 Ar_1 및 Ar_2 는 하기 구조에서 선택되는 것을 특징으로 하는 유기 발광 화합물.





청구항 6

제 1항 내지 제 5항의 유기 발광 화합물을 포함하는 것을 특징으로 하는 유기 전계 발광 소자.

청구항 7

제 6항에 있어서,

상기 유기 전계 발광 소자는 제1전극; 제2전극; 및 상기 제1전극과 제2전극 사이에 개재되는 1층 이상의 유기물층으로 이루어져 있으며, 상기 유기물층은 상기 유기 발광 화합물 하나 이상과 인광 도판트 하나 이상을 포함하는 것을 특징으로 하는 유기 전계 발광 소자.

청구항 8

제 7항에 있어서,

상기 유기물층에 아릴아민계 화합물 또는 스티릴아릴아민계 화합물로 이루어진 군으로부터 선택된 하나 이상의 아민계 화합물 또는 1족, 2족, 4주기, 5주기 전이금속, 란타네열금속 및 d-전이원소의 유기금속으로 이루어진 군으로부터 선택되는 하나 이상의 금속 또는 착체화합물을 더 포함하는 것을 특징으로 하는 유기 전계 발광 소자.

청구항 9

제 7항에 있어서,

상기 유기물층은 발광층 및 전하생성층을 포함하는 것을 특징으로 하는 유기 전계 발광 소자.

청구항 10

제 7항에 있어서,

상기 유기물층에 청색, 적색 또는 녹색 발광을 하는 유기발광층 하나 이상을 동시에 포함하여 백색 발광을 하는 유기 전계 발광 소자.

명세서

기술 분야

[0001] 본 발명은 신규한 유기 발광 화합물 및 이를 포함하는 유기 전계 발광 소자에 관한 것으로, 보다 구체적으로는 발광 재료로서 사용되는 신규한 유기 발광 화합물 및 이를 호스트로서 채용하고 있는 유기 전계 발광 소자에 관한 것이다.

배경 기술

[0002] 인광 발광체의 호스트 재료로는 현재까지 CBP가 가장 널리 알려져 있으며, BCP 및 BA1q 등의 정공차단층을 적용한 고효율의 OLED, BA1q 유도체를 호스트로 이용한 고성능의 OLED가 공지되어 있다.

[0003] 그러나 기존의 재료들은 발광 특성 측면에서는 유리한 면이 있으나, 유리전이온도가 낮고 열적 안정성이 매우 좋지 않아서, 진공 하에서 고온 증착 공정을 거칠 때, 물질이 변하는 등 단점을 갖고있다. OLED에서 전력효율 = (π /전압) × 전류효율 이므로, 전력효율은 전압에 반비례하는데, OLED의 소비 전력이 낮으려면 전력 효율이 높아야한다. 실제 인광 발광 재료를 사용한 OLED는 형광 발광 재료를 사용한 OLED에 비해 전류 효율(cd/A)이 상당히 높으나, 인광 발광 재료의 호스트로 BA1q 나 CBP 등 종래의 재료를 사용할 경우, 형광재료를 사용한 OLED에 비해 구동 전압이 높아서 전력 효율(lm/w)면에서 큰 이점이 없었다. 또한, OLED 소자에서의 수명 측면에서도 결코 만족할만한 수준이 되질 못하여 더욱 안정되고, 더욱 성능이 뛰어난 호스트 재료의 개발이 요구되고 있다.

발명의 내용

해결하려는 과제

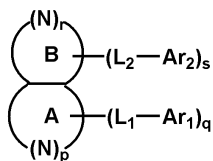
[0004] 따라서, 본 발명자들은 상기의 종래의 문제점을 해결하기 위하여 노력한 결과, 발광 효율이 뛰어나고 수명이 획기적으로 개선된 유기 전계 발광 소자를 실현하기 위한 새로운 발광 화합물을 발명하게 되었다.

[0005] 본 발명의 목적은 상기한 문제점들을 해결하기 위하여 기존의 호스트 재료보다 발광 효율 및 소자 수명이 좋으며, 적절한 색좌표를 갖는 우수한 골격의 유기 발광 화합물을 제공하는 것이며, 또 다른 목적으로서 상기 유기 발광 화합물을 발광 재료로서 채용하는 고효율 및 장수명의 유기 전계 발광 소자를 제공하는 것이다.

과제의 해결 수단

[0006] 본 발명은 하기 화학식 1로 표시되는 유기 발광 화합물 및 이를 포함하는 유기 전계 발광 소자에 관한 것으로서, 본 발명에 따른 유기 발광 화합물은 기존 호스트 재료에 비해 발광효율이 좋고 재료의 수명특성이 뛰어나 소자의 구동수명이 매우 양호한 OLED를 제조할 수 있는 장점이 있다.

[0007] [화학식 1]



[0008]

[0009] [상기 화학식 1에 있어서,

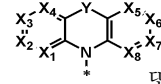
[0010] A 및 B 고리는 6원의 방향족 고리 또는 6원의 헤테로 방향족 고리이고;

[0011] p 및 r은 0 내지 2의 정수를 나타내고, q 및 s는 2 내지 4의 정수를 나타내며, 단 p+r ≥ 1, p+q ≤ 4 및 r+s ≤ 4를 만족하고;

[0012] L₁ 및 L₂는 서로 독립적으로 화학결합이거나, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴렌, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)헤테로아릴렌, 치환 또는 비치환된 5원 내지 7원의 헤테로시클로알킬렌, 치환 또는 비치환된 방향족고리가 하나이상 융합된 5원 내지 7원의 헤테로시클로알킬렌, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬렌, 치환 또는 비치환된 방향족고리가 하나이상 융합된 (C3-C30)시클로알킬렌, 치환 또는 비치환된 (C2-C30)알케닐렌, 치환 또는 비치환된 (C2-C30)알키닐렌, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아르(C1-C30)알킬렌, -O- 또는 -S-이고;

[0013] Ar₁ 및 Ar₂는 서로 독립적으로 수소, 할로젠, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-

C30)아릴, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬이 하나이상 융합된 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)헤테로아릴, 치환 또는 비치환된 5원 내지 7원의 헤테로시클로알킬, 치환 또는 비치환된 방향족고리가 하나이상 융합된 5원 내지 7원의 헤테로시클로알킬, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬, 치환 또는 비치환된 방향족고리가 하나이상 융합된 (C3-C30)시클로알킬, 시아노, -NR₁₁R₁₂, -SiR₁₃R₁₄R₁₅, -OR₁₆, -SR₁₇, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아르(C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬아미노, -SiR₁₈R₁₉R₂₀이 치환 또는 비치환된 (C3-C30)헤테로아릴, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴아미노, 치환 또는 비치환된 (C2-



C30)알케닐, 치환 또는 비치환된 (C2-C30)알키닐, 카르복실, 나이트로, 또는 하이드록시이거나 인접한 치환체와 융합고리를 포함하거나 포함하지 않는 (C3-C30)알킬렌 또는 (C3-C30)알케닐렌으로 연결되어 방향족 고리 및 단일환 또는 다환의 방향족 고리를 형성할 수 있으며;

[0014] 상기 R₁₁ 내지 R₂₀는 서로 독립적으로 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴 또는 치환 또는 비치환된 (C3-C30)헤테로아릴 또는 인접한 치환체와 융합고리를 포함하거나 포함하지 않는 (C3-C30)알킬렌 또는 (C3-C30)알케닐렌으로 연결되어 방향족 고리 및 단일환 또는 다환의 방향족 고리를 형성할 수 있으며;

[0015] 상기 X₁ 내지 X₈은 서로 독립적으로 CR₂₁ 또는 N이고; 단, X₁ 내지 X₈가 모두 CR₂₁ 또는 모두 N인 경우는 제외하며; Y는 화학결합, -(CR₂₂R₂₃)_m-, -(R₂₄)C=C(R₂₅)-, -N(R₂₆)-, -S-, -O- 또는 -Si(R₂₇)(R₂₈)-이고, R₂₁ 내지 R₂₈는 상기 R₁₁ 내지 R₂₀에서의 정의와 동일하고, m은 1 또는 2의 정수이며; 상기 헤테로시클로알킬 및 헤테로아릴은 N, O, S 및 Si로부터 선택된 하나 이상의 헤테로원자를 포함한다.]

[0016] 본 발명에 기재된 “알킬”, “알콕시” 및 그 외 “알킬” 부분을 포함하는 치환체는 직쇄 또는 분쇄 형태를 모두 포함하고, 「시클로알킬」은 치환 또는 비치환된 아다만틸 또는 치환 또는 비치환된 (C7-C30)바이시클로알킬을 모두 포함한다. 본 발명에 기재된 「아릴」은 하나의 수소 제거에 의해서 방향족 탄화수소로부터 유도된 유기 라디칼로, 4 내지 7원, 바람직하게는 5 또는 6원을 포함하는 단일 또는 융합고리계를 포함하며, 하나 이상의 아릴이 화학결합을 통하여 결합되어 있는 구조도 포함한다. 상기 아릴의 구체적인 예로 페닐, 나프틸, 비페닐, 안트릴, 인덴일(indenyl), 플루오레닐, 페난트릴, 트라이페닐레닐, 피렌일, 페틸렌일, 크라이세닐, 나프타세닐, 플루오란텐일 등을 포함하지만, 이에 한정되지 않는다. 「헤테로아릴」은 방향족 고리 골격 원자로서 N, O 및 S로부터 선택되는 1 내지 4개의 헤테로원자를 포함하고, 나머지 방향족 고리 골격 원자가 탄소인 아릴 그룹을 의미하는 것으로, 5 내지 6원의 단환 헤테로아릴 또는 하나 이상의 벤젠환과 축합된 다환식 헤테로아릴이며, 부분적으로 포화될 수도 있다. 또한, 본 발명에서의 헤테로아릴은 하나 이상의 헤테로아릴이 화학결합을 통하여 결합되어 있는 구조도 포함된다. 상기 헤테로아릴기는 고리 내 헤테로원자가 산화되거나 사원화되어, 예를 들어 N-옥사이드 또는 4차 염을 형성하는 2가 아릴 그룹을 포함한다. 상기 헤테로아릴의 구체적인 예로 퓨릴, 티에닐, 피롤릴, 이미다졸릴, 피라졸릴, 티아졸릴, 티아디아졸릴, 이소티아졸릴, 이속사졸릴, 옥사졸릴, 옥사디아졸릴, 트리아지닐, 테트라지닐, 트리아졸릴, 테트라졸릴, 퓨라자닐, 피리딜, 피라지닐, 피리미디닐, 피리다지닐 등의 단환 헤테로아릴, 벤조퓨릴, 벤조티에닐, 이소벤조퓨릴, 벤조이미다졸릴, 벤조티아졸릴, 벤조이소티아졸릴, 벤조이속사졸릴, 벤조옥사졸릴, 이소인돌릴, 인돌릴, 인다졸릴, 벤조티아디아졸릴, 퀴놀릴, 이소퀴놀릴, 신놀리닐, 퀴나졸리닐, 퀴놀리진일, 퀴녹살리닐, 카바졸릴, 페난트리디닐, 벤조디옥솔릴 등의 다환식 헤테로아릴 및 이들의 상응하는 N-옥사이드(예를 들어, 피리딜 N-옥사이드, 퀴놀릴 N-옥사이드), 이들의 4차 염 등을 포함하지만, 이에 한정되지 않는다.

[0017] 또한, 본 발명에 기재되어 있는 “(C1-C30)알킬” 기는 (C1-C20)알킬 또는 (C1-C10)알킬을 포함하고, “(C6-C30)아릴” 기는 (C6-C20)아릴 또는 (C6-C12)아릴을 포함한다. “(C3-C30)헤테로아릴” 기는 (C3-C20)헤테로아릴 또는 (C3-C12)헤테로아릴을 포함하고, “(C3-C30)시클로알킬” 기는 (C3-C20)시클로알킬 또는 (C3-C7)시클로알킬을 포함한다. “(C2-C30)알케닐 또는 알키닐” 기는 (C2-C20)알케닐 또는 알키닐, (C2-C10)알케닐 또는 알키닐을 포함한다.

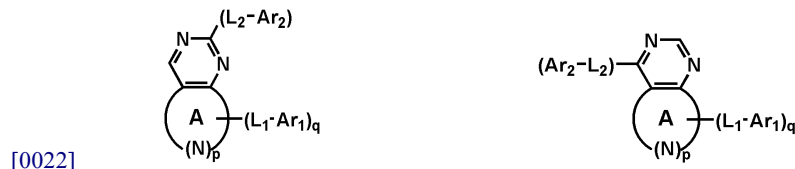
[0018] 또한 상기 R₁₁ 내지 R₂₀, L₁, L₂, Ar₁, Ar₂ 및 R₂₁ 내지 R₂₈의 “치환 또는 비치환”에 있어서, 치환은 서로 독립적으로 중수소, 할로겐, 할로겐이 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, (C6-C30)아릴, (C6-C30)아릴이 치환 또는 비

치환된 (C3-C30)헤테로아릴, 5원 내지 7원의 헤테로시클로알킬, 방향족고리가 하나이상 융합된 5원 내지 7원의 헤테로시클로알킬, (C3-C30)시클로알킬, 방향족고리가 하나이상 융합된 (C3-C30)시클로알킬, 트리(C1-C30)알킬실릴, 디(C1-C30)알킬(C6-C30)아릴실릴, 트리(C6-C30)아릴실릴, (C2-C30)알케닐, (C2-C30)알키닐, 시아노, 카바졸릴, -NR₃₁R₃₂, -SiR₃₃R₃₄R₃₅, -OR₃₆, -SR₃₇, (C6-C30)아르(C1-C30)알킬, (C1-C30)알킬(C6-C30)아릴, (C1-C30)알킬옥시, (C1-C30)알킬티오, (C6-C30)아릴옥시, (C6-C30)아릴티오, 카르복실, 나이트로 또는 하이드록시로 이루어진 군으로부터 선택되는 하나 이상으로 더 치환되거나, 서로 인접한 치환체가 연결되어 고리를 형성할 수 있고, 상기 R₃₁ 내지 R₃₇는 서로 독립적으로 (C1-C30)알킬, (C6-C30)아릴, (C3-C30)헤테로아릴 또는 인접한 치환체와 융합고리를 포함하거나 포함하지 않는 (C3-C30)알킬렌 또는 (C3-C30)알케닐렌으로 연결되어 치환족 고리 및 단일환 또는 다환의 방향족 고리를 형성할 수 있는 것을 의미한다.

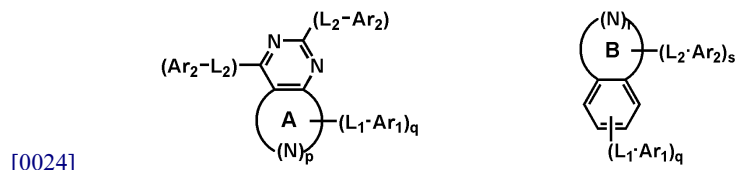
[0019] 상기 R₁₁ 내지 R₂₈는 서로 독립적으로 수소, 할로젠, 메틸, 에틸, 프로필, 부틸, 펜틸, 헥실, 에틸헥실, 헵틸, 옥틸 등의 알킬, 페닐, 나프틸, 플루오레닐, 바이페닐, 페난트릴, 터페닐, 피레닐, 퍼릴레닐, 스피로바이폴루오레닐, 플루오란테닐, 크리세닐, 트리페닐레닐 등의 아릴, 1,2-디하이드로아세나프틸 등의 시클로알킬이 하나 이상 융합된 아릴, 디벤조티오펜, 디벤조퓨릴, 카바졸릴, 피리디, 퓨릴, 티에닐, 퀴놀릴, 트리아지닐, 피리미디닐, 피리다지닐, 퀴놀살리닐, 페난트롤리닐 등의 헤테로아릴, 벤조피롤리디노, 벤조피페리디노, 디벤조모폴리노, 디벤조아제피노 등의 하나 이상의 방향족고리가 융합된 헤테로시클로알킬, 페닐, 나프틸, 플루오레닐, 바이페닐, 페난트릴, 터페닐, 피레닐, 퍼릴레닐, 스피로바이폴루오레닐, 플루오란테닐, 크리세닐, 트리페닐레닐 등의 아릴 또는 디벤조티오펜, 디벤조퓨릴, 카바졸릴, 피리디, 퓨릴, 티에닐, 퀴놀릴, 트리아지닐, 피리미디닐, 피리다지닐, 퀴놀살리닐, 페난트롤리닐 등의 헤테로아릴이 치환된 아미노, 비페닐옥시 등의 아릴옥시, 비페닐티오 등의 아릴티오, 비페닐메틸, 트리페닐메틸 등의 아르알킬, 카르복실, 나이트로 또는 하이드록시로부터 선택되어지나, 이에 한정되는 것은 아니며, 상기 화학식 1에서와 같이 더 치환될 수 있다.

[0020] 또한, 본 발명의 유기 발광 화합물은 하기 화학식 2 내지 화학식 5로 표시되는 구조의 화합물로 예시될 수 있다.

[0021] [화학식 2] [화학식 3]



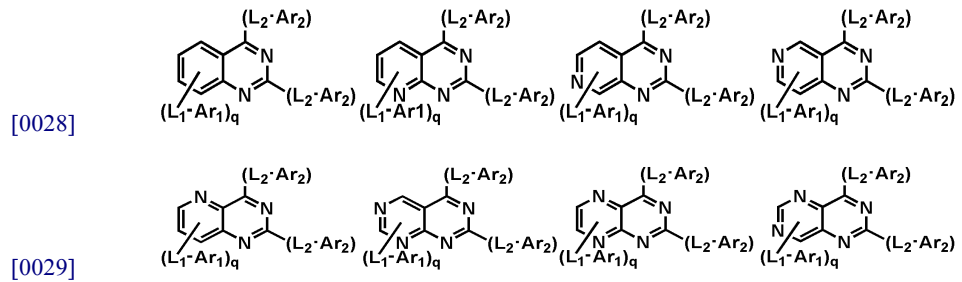
[0023] [화학식 4] [화학식 5]



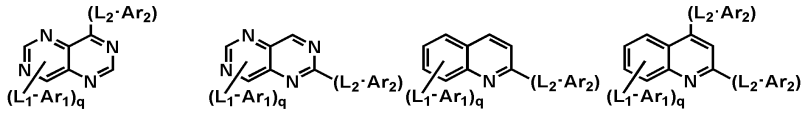
[0025] [상기 화학식 2 내지 화학식 5에 있어서,

[0026] A 및 B 고리, Ar₁ 및 Ar₂, p, q, r, s는 상기 화학식 1에서의 정의와 동일하며, 각각의 치환기는 서로 동일하지 않을 수도 있다.]

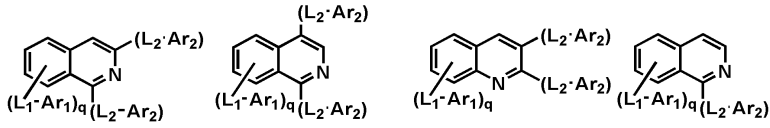
[0027] 또한, 본 발명의 유기 발광 화합물은 하기 구조의 화합물로 예시될 수 있다.



[0030]



[0031]



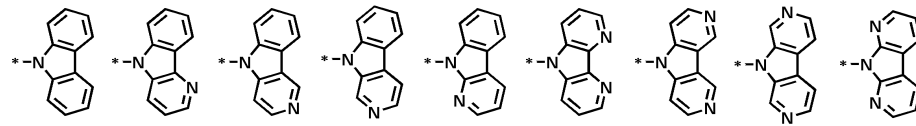
[0032]

[L_1 및 L_2 , Ar_1 및 Ar_2 , q 는 상기 화학식 1에서의 정의와 동일하며, 각각의 치환기는 서로 동일하지 않을 수도 있다.]

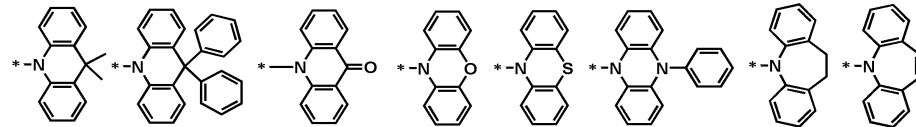
[0033]

본 발명의 Ar_1 및 Ar_2 는 하기 구조로 예시되어지나, 이에 한정되는 것은 아니다.

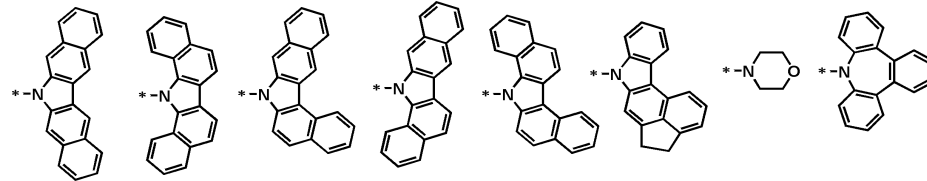
[0034]



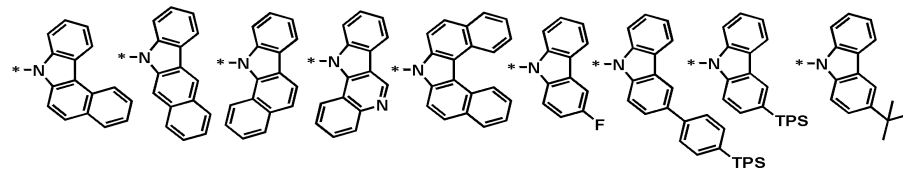
[0035]



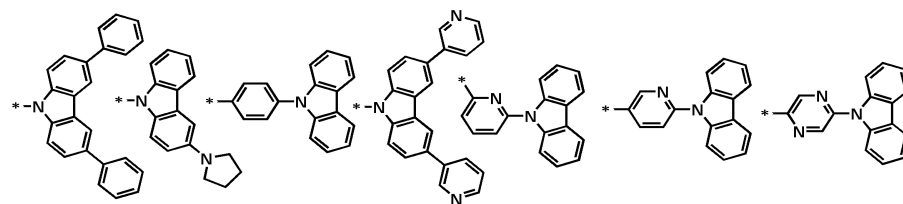
[0036]



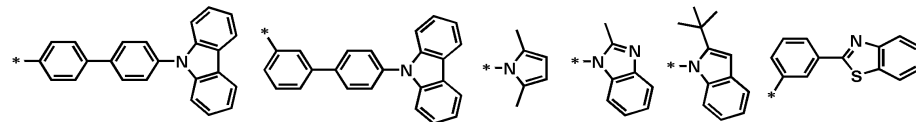
[0037]



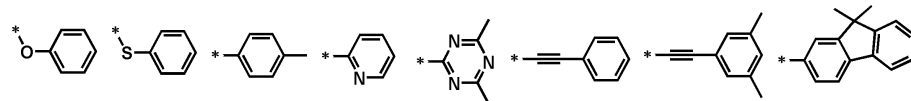
[0038]



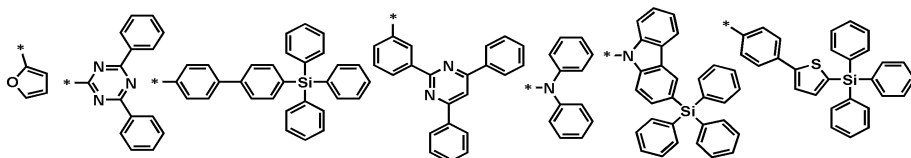
[0039]

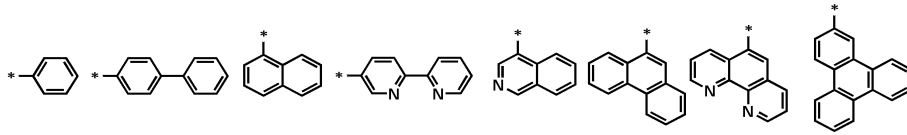


[0040]

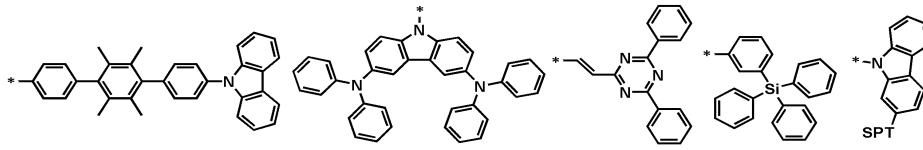


[0041]

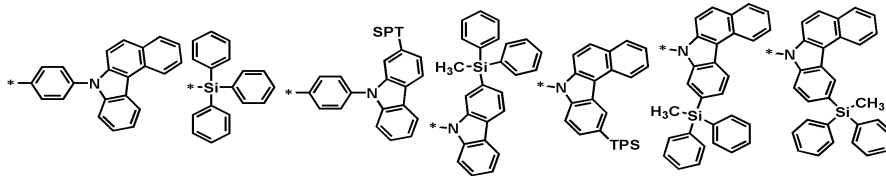




[0042]



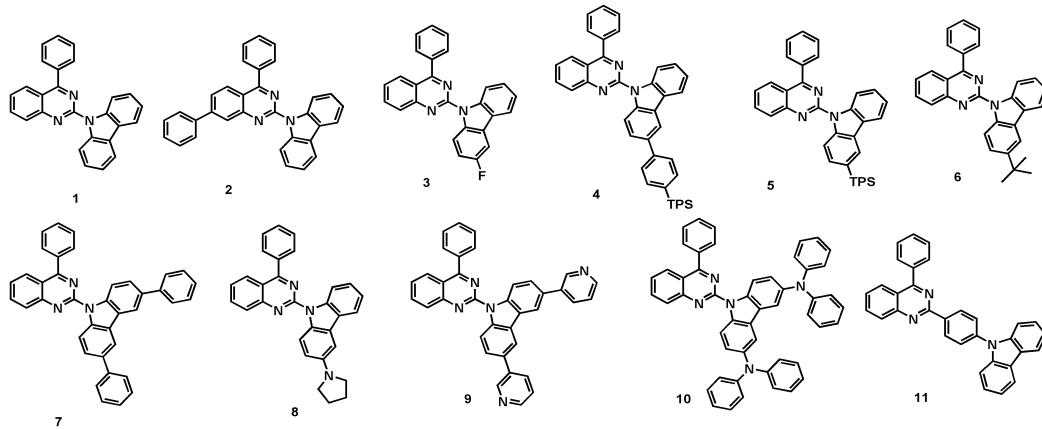
[0043]



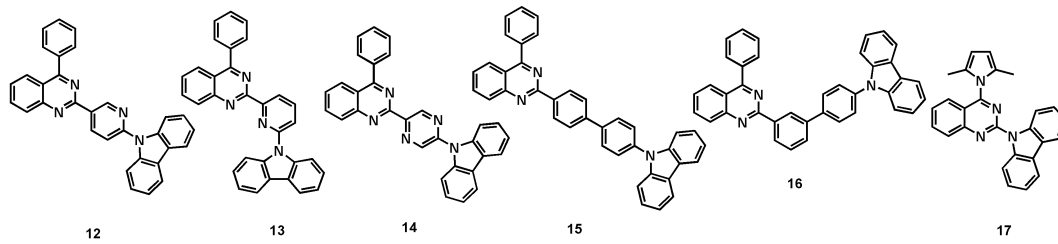
[0044]

[0045]

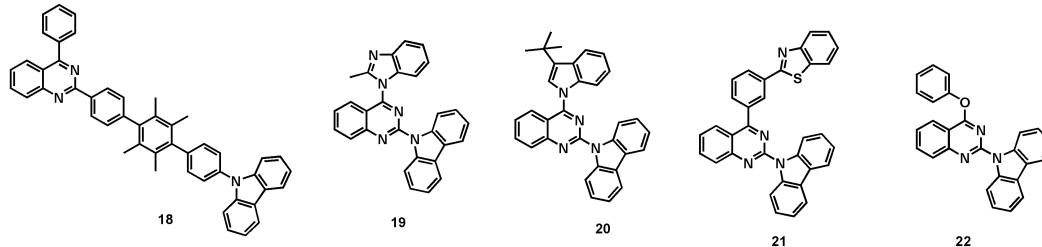
본 발명에 따른 유기 발광 화합물은 보다 구체적으로 하기의 화합물로서 예시될 수 있으나, 하기 화합물이 본 발명을 한정하는 것은 아니다.

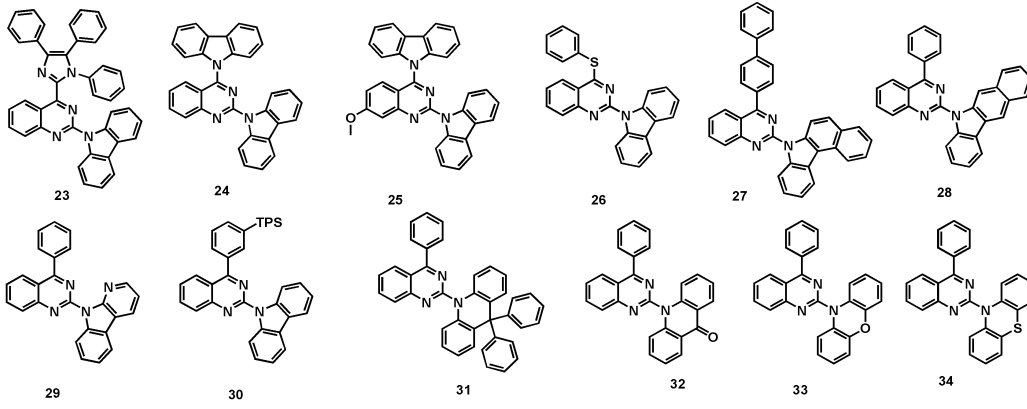


[0046]

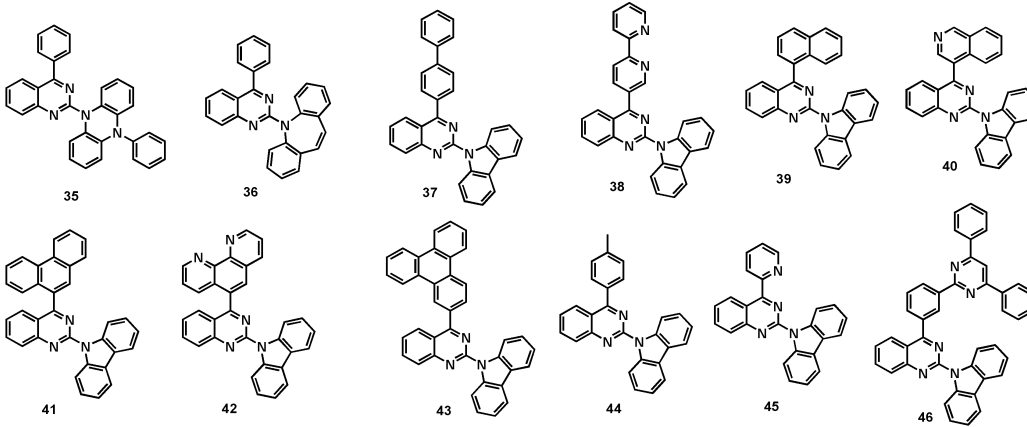


[0047]

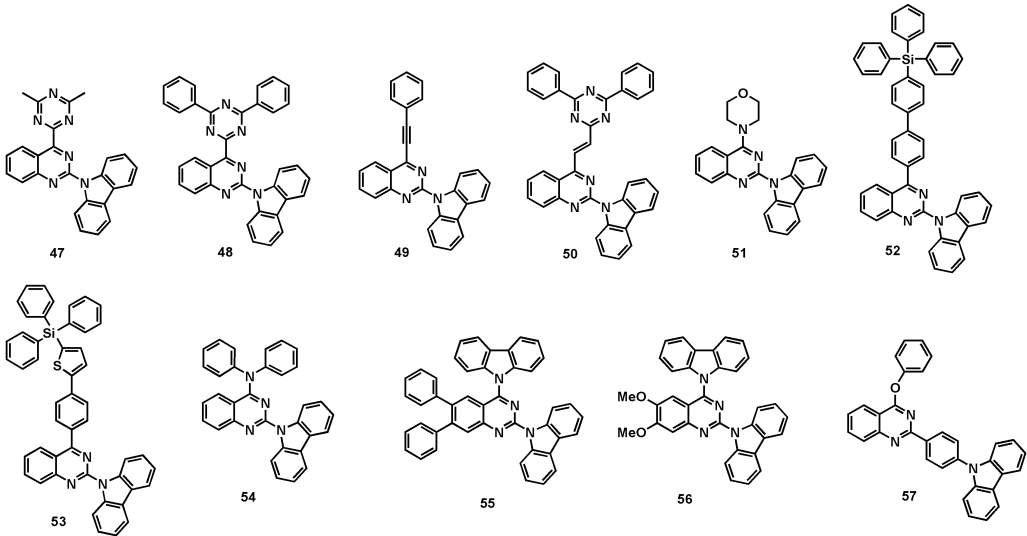




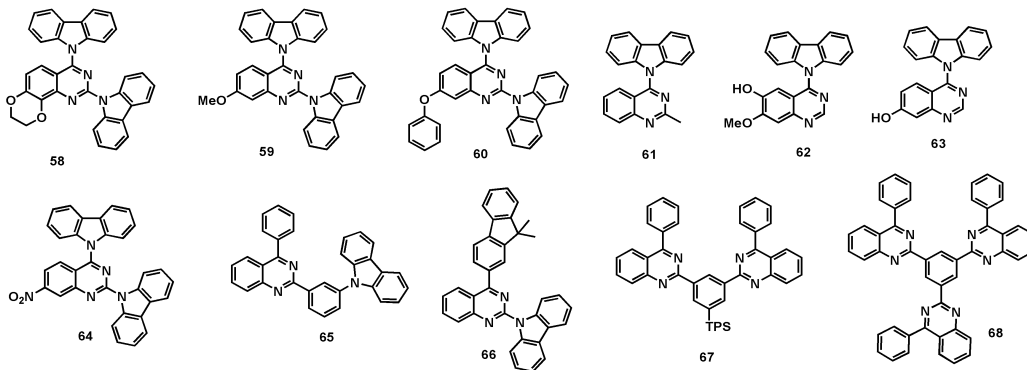
[0048]



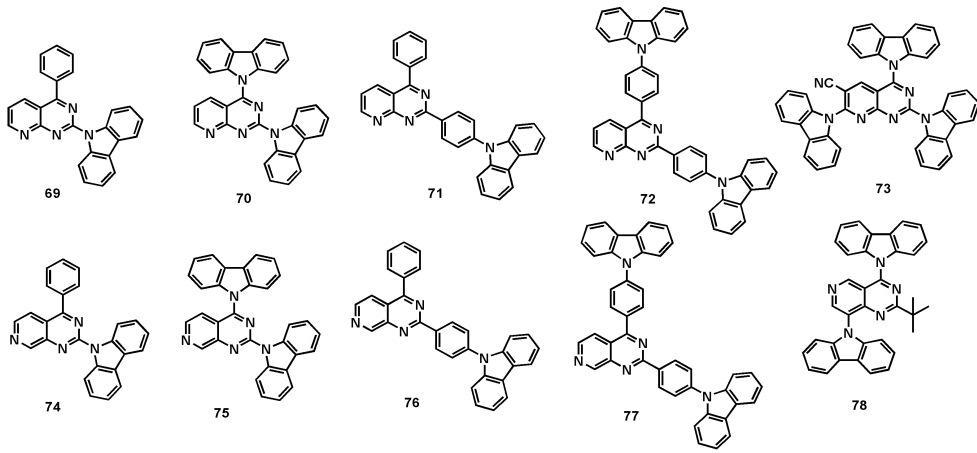
[0049]



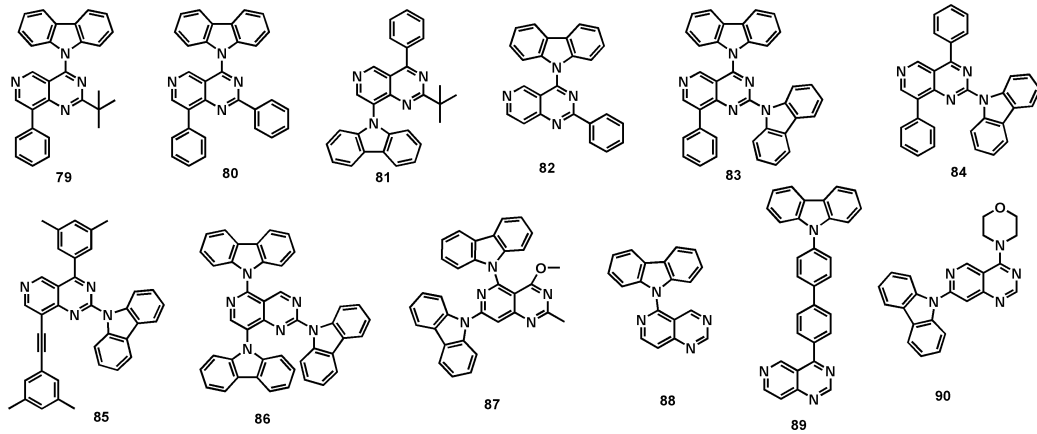
[0050]



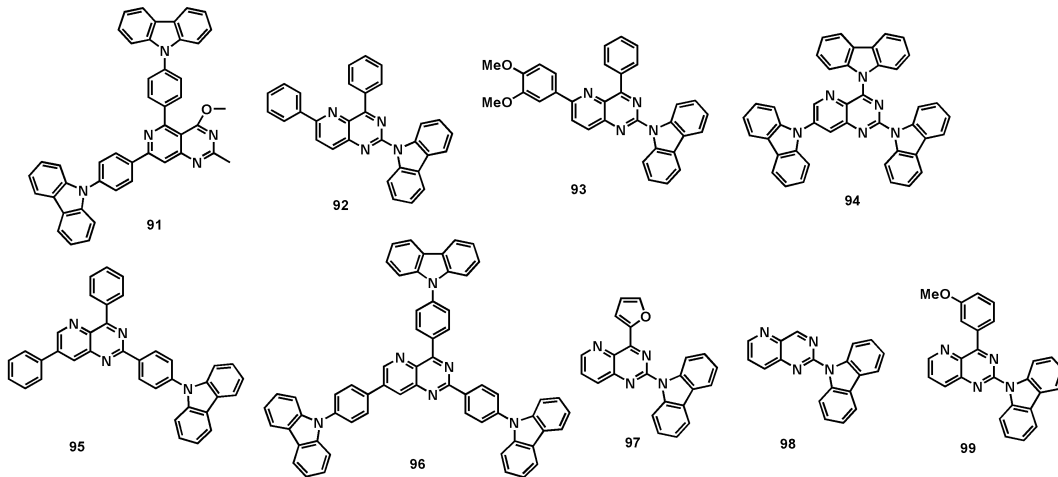
[0051]



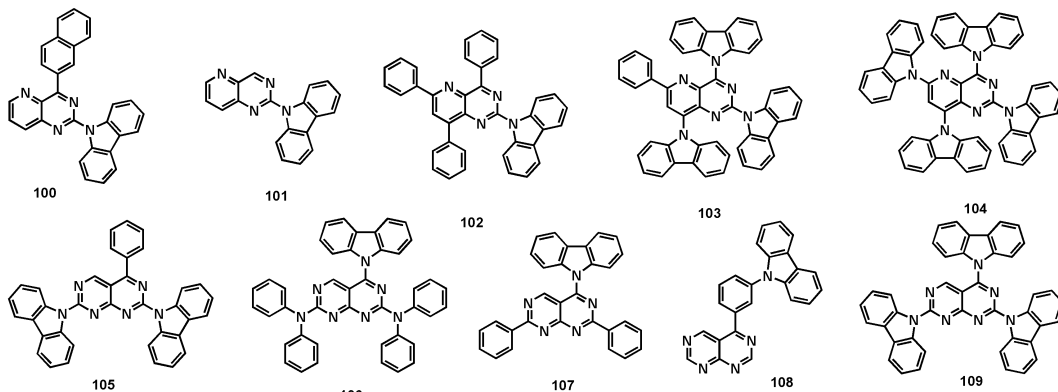
[0052]



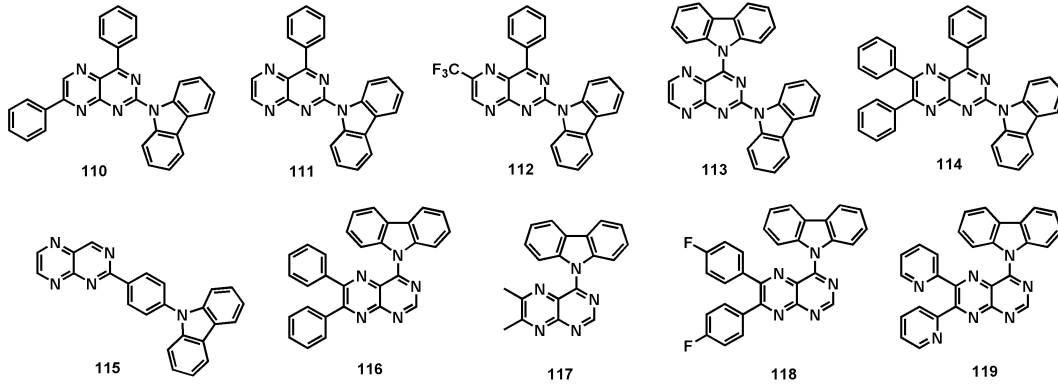
[0053]



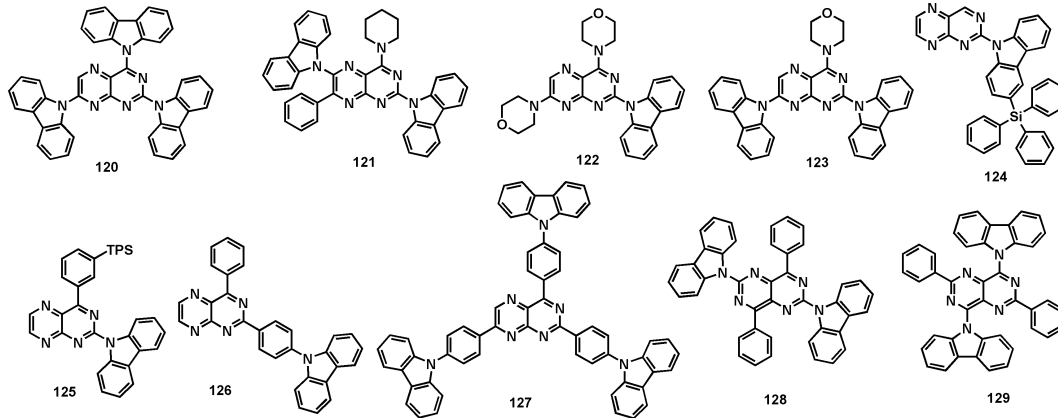
[0054]



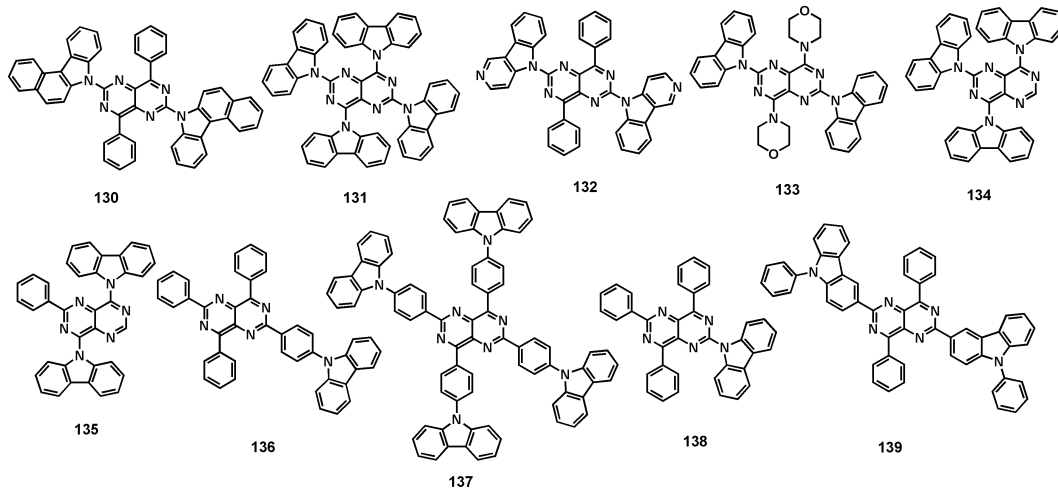
[0055]



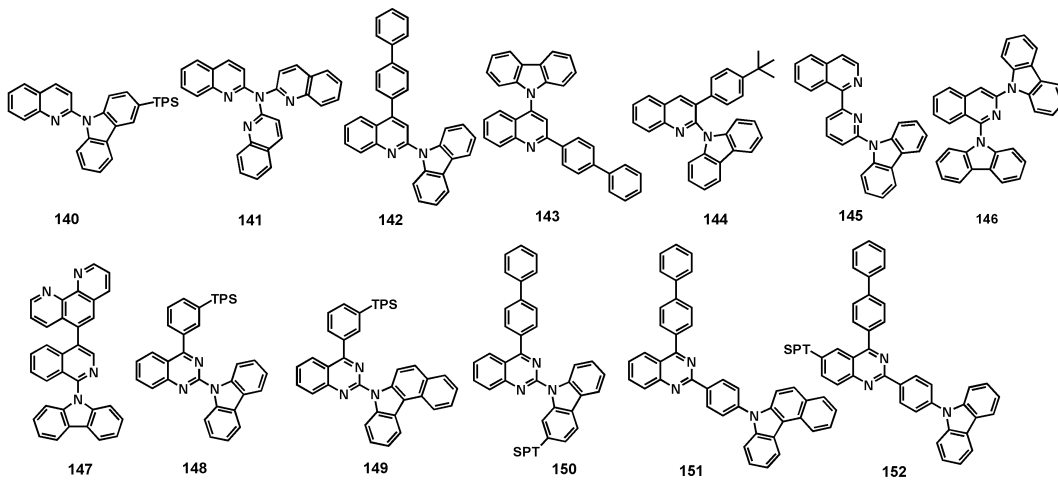
[0056]



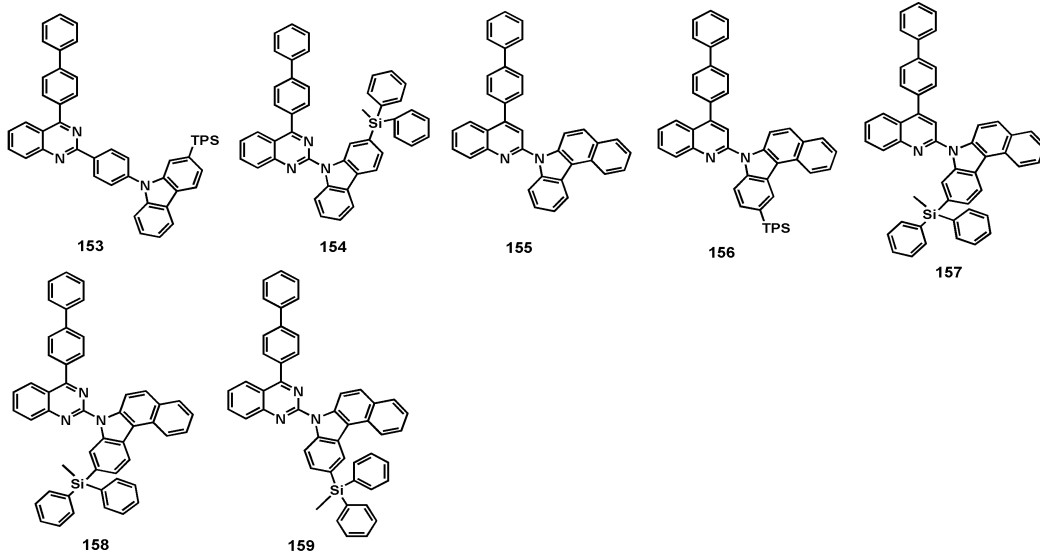
[0057]



[0058]



[0059]



[0060]

[0061]

또한 본 발명은 유기 전계 발광 소자를 제공하며, 본 발명에 따른 유기 전계 발광 소자는 제1전극; 제2전극; 및 상기 제1전극 및 제2전극 사이에 개재되는 1층 이상의 유기물층으로 이루어진 유기 전계 발광 소자에 있어서, 상기 유기물층은 상기 화학식 1의 유기 발광 화합물을 하나 이상 포함하는 것을 특징으로 한다. 상기 유기 발광 화합물은 발광층의 호스트 물질로 사용되어진다.

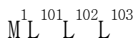
[0062]

본 발명에 따른 유기 전계 발광 소자는 상기 유기물층이 발광층을 포함하며, 상기 발광층은 상기 화학식 1의 하나 이상의 유기 발광 화합물 이외에 하나 이상의 인광 도판트를 더 포함하는 것을 특징으로 하며, 본 발명의 유기 전계 발광 소자에 적용되는 발광 도판트는 특별히 제한되지는 않으나, 하기 화학식 6의 화합물로 예시될 수 있다.

[0063]

[화학식 6]

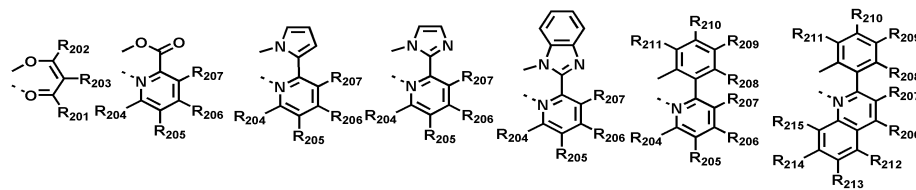
[0064]



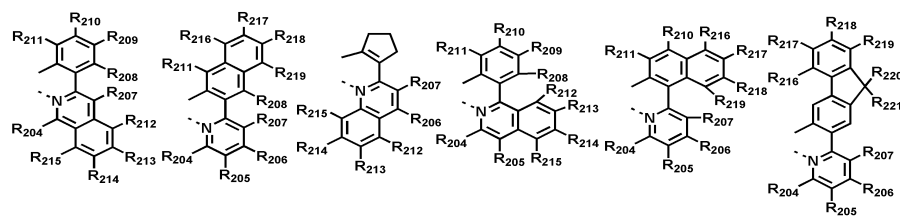
[0065]

여기서 M^1 은 7족, 8족, 9족, 10족, 11족, 13족, 14족, 15족 및 16족의 금속으로 이루어진 군으로부터 선택되고, 리간드 L^{101} , L^{102} 및 L^{103} 는 서로 독립적으로 하기 구조로부터 선택되어진다.

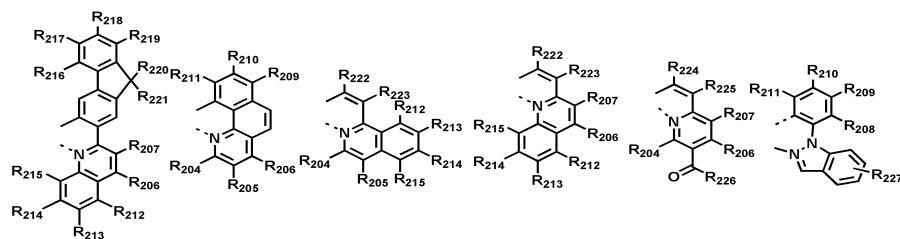
[0066]

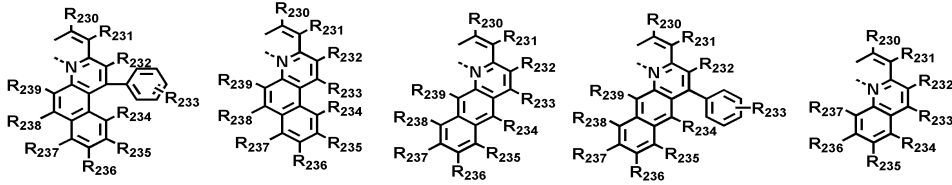
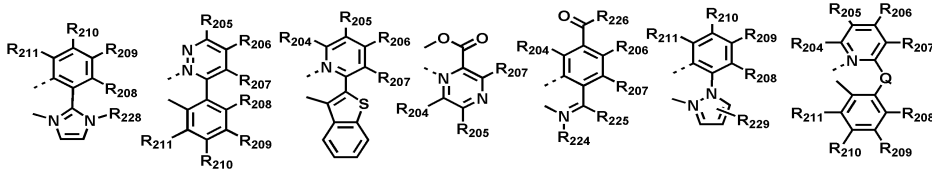


[0067]



[0068]





[0069]

[0070]

[0071]

[0072]

[0073]

[0074]

[0075]

[0076]

[0077]

[0078]

[0079]

[0080]

[상기 화학식 6에서,

R₂₀₁ 내지 R₂₀₃은 서로 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠이 치환되거나 치환되지 않은 (C1-C30)알킬, (C1-C30)알킬이 치환되거나 치환되지 않은 (C6-C30)아릴 또는 할로젠이고;

R₂₀₄ 내지 R₂₁₉는 서로 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된(C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된(C1-C30)알콕시, 치환 또는 비치환된(C3-C30)시클로알킬, 치환 또는 비치환된(C2-C30)알케닐, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된 모노 또는 치환 또는 비치환된 디-(C1-C30)알킬아미노, 치환 또는 비치환된 모노 또는 디-(C6-C30)아릴아미노, SF₅, 치환 또는 비치환된 트리(C1-C30)알킬실릴, 치환 또는 비치환된 디(C1-C30)알킬(C6-C30)아릴실릴, 치환 또는 비치환된 트리(C6-C30)아릴실릴, 시아노 또는 할로젠이고;

R₂₂₀ 내지 R₂₂₃는 서로 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠이 치환되거나 치환되지 않은 (C1-C30)알킬 또는 (C1-C30)알킬이 치환되거나 치환되지 않은 (C6-C30)아릴이고;

R₂₂₄ 및 R₂₂₅는 서로 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된(C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된(C6-C30)아릴 또는 할로젠이거나, R₂₂₄와 R₂₂₅는 융합고리를 포함하거나 포함하지 않는 (C3-C12)알킬렌 또는 (C3-C12)알케닐렌으로 연결되어 치환족 고리 및 단일환 또는 다환의 방향족 고리를 형성하며;

R₂₂₆은 치환 또는 비치환된(C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된(C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된(C5-C30)헤테로아릴 또는 할로젠이고;

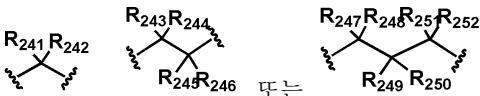
R₂₂₇ 내지 R₂₂₉은 서로 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된(C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된(C6-C30)아릴 또는 할로젠이고;

R₂₃₀ 및 R₂₃₁는 서로 독립적으로 수소, 할로젠이 치환되거나 치환되지 않은 (C1-C20)알킬, (C6-C20)아릴, 할로젠, 시아노, 트리(C1-C20)알킬실릴, 디(C1-C20)알킬(C6-C20)아릴실릴, 트리(C6-C20)아릴실릴, (C1-C20)알콕시, (C1-C20)알킬카보닐, (C6-C20)아릴카보닐, 디(C1-C20)알킬아미노 또는 디(C6-C20)아릴아미노이거나, R₂₃₀과 R₂₃₁는 융합고리를 포함하거나 포함하지 않는 (C3-C12)알킬렌 또는 (C3-C12)알케닐렌으로 연결되어 치환족 고리 및 단일환 또는 다환의 방향족 고리를 형성하며;

상기 R₂₃₀ 및 R₂₃₁의 알킬, 아릴 또는 융합고리를 포함하거나 포함하지 않는 (C3-C12)알킬렌 또는 (C3-C12)알케닐렌으로 연결되어 형성된 치환족 고리 및 단일환 또는 다환의 방향족 고리는 할로젠이 치환되거나 치환되지 않은 (C1-C20)알킬, 할로젠, 시아노, 트리(C1-C20)알킬실릴, 디(C1-C20)알킬(C6-C20)아릴실릴, 트리(C6-C20)아릴실릴, (C1-C20)알콕시, (C1-C20)알킬카보닐, (C6-C20)아릴카보닐, 디(C1-C20)알킬아미노, 디(C6-C20)아릴아미노, 페닐, 나프틸, 안트릴, 플루오레닐, 스피로바이플루오레닐 또는 로부터 선택되는 하나 이상의 치환기로 더 치환될 수 있거나, 할로젠이 치환되거나 치환되지 않은 (C1-C20)알킬, 할로젠, 시아노, 트리(C1-C20)알킬실릴, 디(C1-C20)알킬(C6-C20)아릴실릴, 트리(C6-C20)아릴실릴, (C1-C20)알콕시, (C1-C20)알킬카보닐, (C6-C20)아릴카보닐, 디(C1-C20)알킬아미노, 디(C6-C20)아릴아미노, 페닐, 나프틸, 안트릴, 플루오레닐, 스피로바이플루오레닐 또는 로 이루어진 군에서 선택되는 하나 이상의 치환기가 치환된 페닐 또는 플루오레닐로 더 치환될 수 있고;

R₂₃₂ 내지 R₂₃₉은 서로 독립적으로 수소, 할로젠이 치환되거나 치환되지 않은(C1-C20)알킬, (C1-C20)알콕시, (C3-

C12)시클로알킬, 할로젠, 시아노, (C6-C20)아릴, (C4-C20)헤테로아릴, 트리(C1-C20)알킬실릴, 디(C1-C20)알킬 (C6-C20)아릴실릴 또는 트리(C6-C20)아릴실릴이고;

[0081] Q는  이며, R₂₄₁ 내지 R₂₅₂는 서로 독립적으로 수소, 할로젠이 치환되거나 치환되지 않은 (C1-C60)알킬, (C1-C30)알콕시, 할로젠, (C6-C60)아릴, 시아노, (C5-C60)시클로알킬이거나, R₂₄₁ 내지 R₂₅₂는 서로 인접한 치환체와 알킬렌 또는 알케닐렌으로 연결되어 (C5-C7)스피로고리 또는 (C5-C9)융합 고리를 형성하거나, R₂₀₇ 또는 R₂₀₈과 알킬렌 또는 알케닐렌으로 연결되어 (C5-C7)융합고리를 형성할 수 있다.]

[0082] 상기 M¹은 Ir, Pt, Pd, Rh, Re, Os, Tl, Pb, Bi, In, Sn, Sb, Te, Au 및 Ag로부터 선택되며, 상기 화학식 6의 화합물은 한국특허출원번호 제10-2009-0037519호에 예시된 것도 포함하나, 이에 한정되지는 않는다.

[0083] 본 발명의 유기 전계 발광 소자는 상기 화학식 1의 유기 발광 화합물을 포함하고, 동시에 아릴아민계 화합물 또는 스티릴아릴아민계 화합물로 이루어진 군으로부터 선택된 하나 이상의 화합물을 포함할 수 있으며, 상기 아릴아민계 화합물 또는 스티릴아릴아민계 화합물은 한국특허출원번호 제10-2008-0123276호, 제10-2008-0107606호 또는 제10-2008-0118428호에 예시된 것도 포함하나, 이에 한정되지는 않는다.

[0084] 또한, 본 발명의 유기 전계 발광 소자에 있어서, 유기물층에 상기 화학식 1의 유기 발광 화합물 이외에 1족, 2족, 4주기, 5주기 전이금속, 란타넘계열금속 및 d-전이원소의 유기금속으로 이루어진 군으로부터 선택되는 하나 이상의 금속 또는 착체화합물을 더 포함할 수도 있고, 상기 유기물층은 발광층과 전하생성층을 동시에 포함할 수 있다.

[0085] 또한, 상기 유기물층에 상기 유기 발광 화합물 이외에 청색, 적색 또는 녹색 발광을 하는 유기발광층 하나 이상을 동시에 포함하여 백색 발광을 하는 유기 전계 발광 소자를 형성할 수 있다.

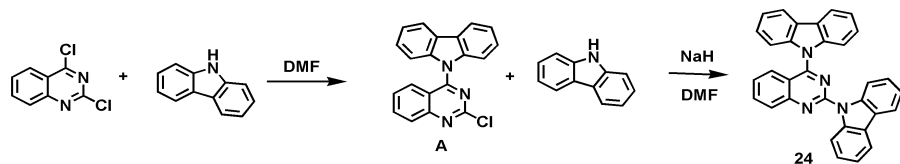
발명의 효과

[0086] 본 발명에 따른 유기 발광 화합물은 OLED 소자에서 유기 발광 재료의 호스트 재료로 사용되어 기존 호스트 재료에 비해 발광효율이 좋고 재료의 수명특성이 뛰어나 소자의 구동수명이 매우 양호한 OLED를 제조할 수 있는 장점이 있다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

[0087] 이하에서, 본 발명의 상세한 이해를 위하여 본 발명의 대표 화합물을 들어 본 발명에 따른 유기 발광 화합물, 이의 제조방법 및 소자의 발광특성을 설명하나, 이는 단지 그 실시 양태를 예시하기 위한 것일 뿐, 본 발명의 범위를 한정하는 것은 아니다.

[제조예 1] 화합물 24의 제조



화합물 A의 제조

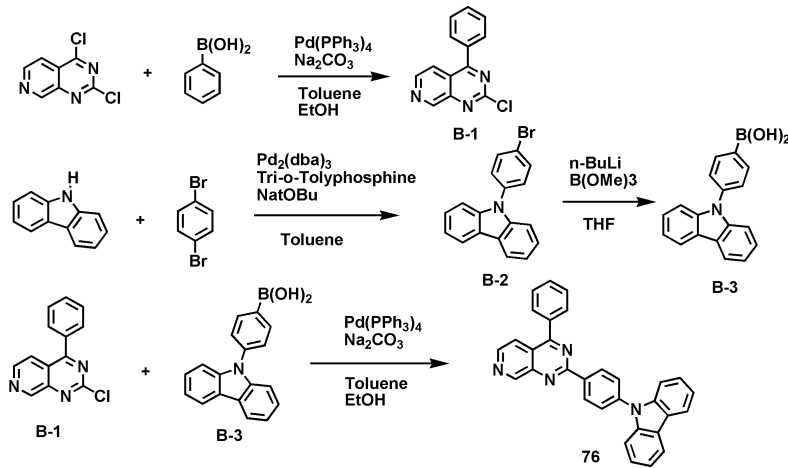
[0091] 2,4-다이클로로 퀴나졸린 2 g(10.0 mmol)을 DMF 20 mL에 녹인 후, 카바졸 3.69 g(22.1 mmol)을 첨가하고 실온에서 2시간 동안 교반한다. 반응물에 물을 첨가하여 반응을 종결 시킨 후 에틸 아세테이트로 추출한 후 5% 시트릭산으로 씻어준다. 소듐 설페이트를 이용하여 잔여 수분을 제거한 뒤 건조시키고 컬럼 분리하여 화합물 A 2.6 g(7.88 mmol, 79%)를 얻었다.

화합물 24의 제조

[0093] 카바졸 1.97 g(11.8 mmol)을 DMF에 녹인 후, 소듐하이드라이드 605 mg(15.8 mmol)을 DMF에 녹인 용액에 첨가하여 1시간 동안 교반한다. 여기에 화합물 A 2.6 g (7.88 mmol)를 DMF에 녹인 용액을 첨가하고 실온에서 24시간 교반시킨다. 반응이 끝나면 생성된 고체를 거른 후, 에틸 아세테이트로 추출하고 컬럼 분리하여 화합물 24 2

g(4.3 mmol, 71 %)를 얻었다.

[0094] [제조예 2] 화합물 76의 제조



[0095]

[0096] 화합물 B-1의 제조

[0097] 2,4-다이클로로피리도[3,4-d]피리미딘 5 g(24.9 mmol), 페닐보로닉산 3.6 g(29.9 mmol), Pd(PPh₃)₄ 1/15 g(0.996 mmol), 소듐카보네이트 수용액 87 mL, 에탄올 87 mL를 톨루엔 180 mL에 녹인 후 120 °C에서 3시간 동안 환류 교반시킨다. 반응이 끝나면 에틸 아세테이트로 유기층을 추출한 뒤 마그네슘 설페이트를 이용하여 잔여 수분을 제거하고 건조시킨 후 컬럼 분리하여 화합물 B-1 4 g(16.5 mmol, 67 %)를 얻었다.

[0098] 화합물 B-2의 제조

[0099] 카바졸 4 g(23.9 mmol), 1,4-다이브로모 벤젠 14.1 g(59.8 mmol), Pd₂(dba)₃ 438 mg(0.478 mmol), 트라이오쏘-톨릴포스핀 436 mg(1.43 mmol), 소듐티부톡사이드 4.59 g(47.8 mmol)을 톨루엔 120 mL에 녹인 후, 120 °C에서 6시간 동안 환류 교반시킨다. 반응이 끝나면 에틸 아세테이트로 유기층을 추출한 뒤 마그네슘 설페이트를 이용하여 잔여 수분을 제거하고 건조시킨 후 컬럼 분리하여 화합물 B-2 4 g(12.4 mmol, 65 %)를 얻었다.

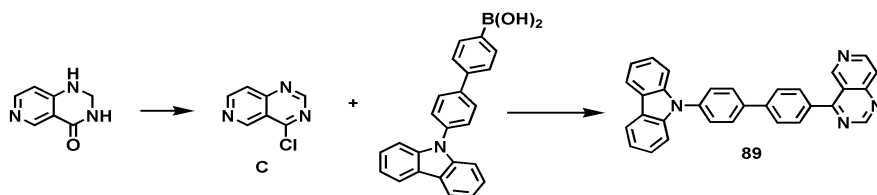
[0100] 화합물 B-3의 제조

[0101] 화합물 B-2 4 g(12.4 mmol)을 THF 40 mL에 녹인 후 -78 °C로 냉각시킨다. 10분 후 n-부틸리튬(2.5M in hexane) 5.95 mL(14.88 mmol)을 플라스크에 천천히 첨가하고 1시간 동안 교반시킨다. 트라이메틸 보레이트 2.35 mL(18.6 mmol)을 상기 플라스크에 천천히 첨가한 후 24시간 동안 교반시킨다. 반응이 끝나면 1M HCl을 첨가하고 에틸 아세테이트로 추출한 뒤, 마그네슘 설페이트를 이용하여 잔여 수분을 제거하고 건조시킨 후 컬럼 분리하여 화합물 B-3 2 g(6.96 mmol, 57 %)를 얻었다.

[0102] 화합물 76의 제조

[0103] 화합물 B-1 1.4 g(5.8 mmol), 화합물 B-3 2 g(6.96 mmol), Pd(PPh₃)₄ 268 mg(0.232 mmol), 소듐카보네이트 수용액 8 mL, 에탄올 8 mL를 톨루엔 20 mL에 녹인 뒤 120 °C에서 24시간 동안 환류 교반시킨다. 반응이 끝나면 에틸 아세테이트로 유기층을 추출한 뒤 마그네슘 설페이트를 이용하여 잔여 수분을 제거하고 건조시킨 후 컬럼 분리하여 화합물 76 1 g(2.23 mmol, 40 %)를 얻었다.

[0104] [제조예 3] 화합물 89의 제조



[0105]

[0106] 화합물 C의 제조

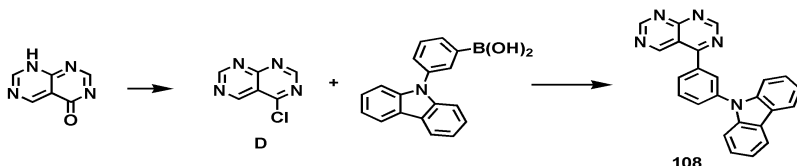
[0107] 2,3-다이하이드로피리도[4,3-d]피리미딘-4(1H) 5.0 g(33.5 mmol)을 포스포러스옥시클로라이드 50 mL로 녹인 후

100 °C에서 5시간 동안 환류 교반시킨다. 반응이 끝나면 얼음물에 반응물을 천천히 붓고 5M NaOH로 중화 시킨 후 떨어지는 고체를 거른 후, 컬럼 분리하여 화합물 **C** 2.5 g(15.0 mmol, 45 %)를 얻었다.

[0108] 화합물 89의 제조

[0109] 4-클로로피리도[4,3-d]피리미딘 2.5 g(15.0 mmol), 3-(9H-카바졸-9-일)바이페닐보로닉산 8.1 g(22.5 mmol), Pd(PPh₃)₄ 693 mg(0.60 mmol), 소듐카보네이트 수용액 52 mL, 에탄올 52 mL을 톨루엔 100 mL에 녹인 후, 120 °C에서 3시간 동안 환류 교반시킨다. 반응이 끝나면 에틸 아세테이트로 추출한 뒤, 마그네슘 설페이트를 이용하여 잔여 수분을 제거하고 건조시킨 후, 컬럼 분리하여 화합물 **89** 3 g(6.69 mmol, 50 %)를 얻었다.

[0110] [제조예 4] 화합물 108의 제조



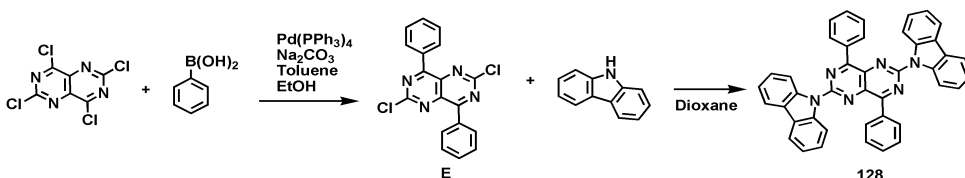
[0111] 화합물 D의 제조

[0112] 피리미도[4,5-d]피리미딘-4(8H)-원 5.0 g(33.7 mmol)을 포스포러스옥시클로라이드 50 mL로 녹인 후 100 °C에서 5시간 동안 환류 교반시킨다. 반응이 끝나면 얼음물에 반응물을 천천히 붓고 5M NaOH로 중화 시킨 후 떨어지는 고체를 거른 뒤, 컬럼 분리하여 화합물 **D** 2.2 g(13.2 mmol, 40 %)를 얻었다.

[0113] 화합물 108의 제조

[0114] 4-클로로피리도[4,3-d]피리미딘 2.2 g(13.2 mmol), 3-(9H-카바졸-9-일)바이페닐보로닉산 5.6 g(19.8 mmol), Pd(PPh₃)₄ 610 mg(0.52 mmol), 소듐카보네이트 수용액 46 mL, 에탄올 46 mL을 톨루엔 100 mL에 녹인 후, 120 °C에서 3시간 동안 환류 교반시킨다. 반응이 끝나면 에틸 아세테이트로 추출한 뒤, 마그네슘 설페이트를 이용하여 잔여 수분을 제거하고 건조시킨 후, 컬럼 분리하여 화합물 **108** 3.4 g(9.2 mmol, 70 %)를 얻었다.

[0115] [제조예 5] 화합물 128의 제조



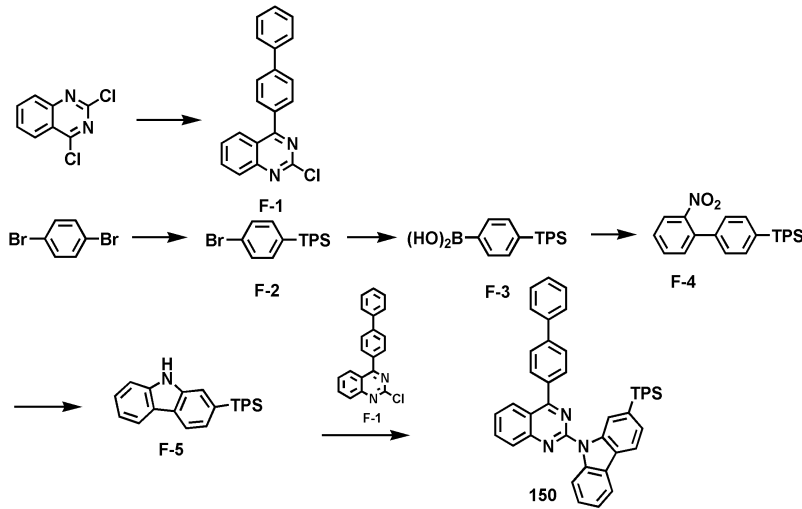
[0116] 화합물 E의 제조

[0117] 퍼클로로피리디도[5,4-d]피리미딘 5 g(18.5 mmol), 페닐보로닉산 4.96 g(40.7 mmol), Pd(PPh₃)₄ 856 mg(0.74 mmol), 소듐카보네이트 수용액 65 mL, 에탄올 65 mL을 톨루엔 200 mL에 녹인 후, 120 °C에서 3시간 동안 환류 교반시킨다. 반응이 끝나면 에틸 아세테이트로 추출한 뒤, 마그네슘 설페이트를 이용하여 잔여 수분을 제거하고 건조시킨 후, 컬럼 분리하여 화합물 **E** 5 g(14.1 mmol, 77 %)를 얻었다.

[0118] 화합물 128의 제조

[0119] 화합물 **E** 5 g(14.1 mmol)과 카바졸 5.2 g(31.1 mmol)을 다이옥산 50 mL에 녹인 후, 100 °C에서 1시간 동안 환류 교반시킨다. 반응이 끝나면 에틸 아세테이트로 추출한 뒤, 마그네슘 설페이트를 이용하여 잔여 수분을 제거하고 건조시킨 후, 컬럼 분리하여 화합물 **128** 7 g(16.2 mmol, 80 %)를 얻었다.

[0122] [제조예 6] 화합물 150의 제조



[0123]

[0124] 화합물 F-1의 제조

[0125] 2,4-다이클로로퀴놀린 15 g(75.36 mmol), 4-바이페닐보로닉산 16.4 g(82.89 mmol), Pd(PPh₃)₄ (3.76 mmol), 2M-Na₂CO₃ 110 mL 및 에탄올 50 mL을 톨루엔 300mL에 녹인 후, 100 °C에서 3시간 동안 환류 교반시킨다. 반응이 끝나면 상온으로 냉각하여 에틸아세테이트로 추출한 뒤, 증류수로 세척하고 마그네슘 설페이트를 이용하여 잔여 수분을 제거하고 건조시킨 후, 컬럼 분리하여 화합물 F-1 12 g(37.88 mmol, 50.26 %)을 얻었다.

[0126] 화합물 F-2의 제조

[0127] 1,4-다이브로모벤젠 15 g(63.58 mmol) 을 테트라하이드로퓨란 300 mL 에 녹이고 -78°C에서 n-부틸리튬 26.7 mL(2.5M in hexane, 66.76 mmol)을 천천히 넣어 1시간 동안 교반시킨다. 이 후 클로로트라이페닐실란 20.6 mL 을 테트라하이드로퓨란 70 mL 에 녹인 용액을 첨가하여 상온에서 12시간 교반하였다. 반응이 끝나면 생성된 흰 고체를 필터하여 버리고, 여액을 에틸아세테이트로 추출하여 증류수로 세척하고, 마그네슘설페이트를 이용하여 잔여 수분을 제거하고 건조하고, 감압 증류하였다. 이후, 에틸아세테이트와 메탄올로 재결정하여 화합물 F-2 17.5 g(42.12 mmol, 66.25 %)을 얻었다.

[0128] 화합물 F-3의 제조

[0129] 화합물 F-2 20 g(48.14 mmol)을 테트라하이드로퓨란 500mL에 녹이고 -78°C에서 n-부틸리튬 23.1 mL(2.5M in Hexane, 57.5 mmol)을 천천히 넣어 1시간 동안 교반한 후, 트리메틸보레이트 8.5 mL(77.03 mmol)을 넣어 상온에서 12시간 교반하였다. 이후, 에틸아세테이트로 추출하고 증류수로 세척하였고, 에틸아세테이트와 n-헥산으로 재결정하여 화합물 F-3 14 g(36.81 mmol, 76.46 %) 을 얻었다.

[0130] 화합물 F-4의 제조

[0131] 2-브로모니트로벤젠 5 g(24.75 mmol), 화합물 F-3 10.35 g(27.22 mmol), Pd(PPh₃)₄ 1.4 g(1.23 mmol), 2M-K₂CO₃ 35 mL, 에탄올 50 mL를 톨루엔 100mL에 녹인 후, 100°C에서 12시간 동안 환류 교반하였다. 반응이 끝나면 상온으로 냉각하고 증류수로 세척하며 에틸아세테이트로 유기층을 추출한 뒤 마그네슘설페이트를 이용하여 잔여 수분을 제거하고 건조시킨 후, 에틸아세테이트와 메탄올로 재결정하여 화합물 F-4 11 g(24.03 mmol, 97.12 %)을 얻었다.

[0132] 화합물 F-5의 제조

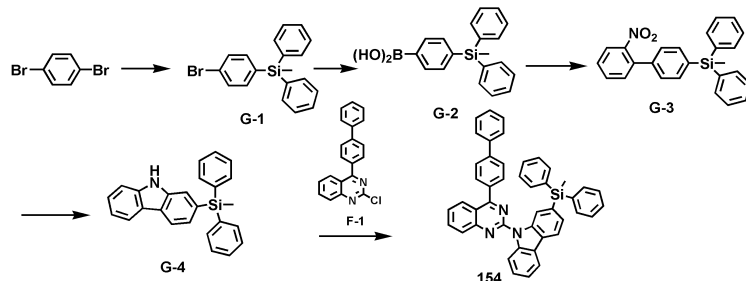
[0133] 화합물 F-4 11 g(24.03 mmol)을 1,2-다이클로로벤젠 100 mL에 녹이고 트리에틸포스파이트 200 mL를 넣고 150°C에서 15시간 동안 교반하였다. 감압 증류 후 고체를 클로로포름에 녹여 실리카 필터하여 화합물 F-5 8 g(18.81 mmol, 78.40 %)을 얻었다.

[0134] 화합물 150의 제조

[0135] 화합물 F-5 4.8 g(11.36 mmol)을 다이메틸폼아마이드 100 mL에 녹이고, 이것을 DMF 25 mL에 NaH 0.56

g(14.20 mmol)을 녹인 용액에 넣고 1시간 동안 상온에서 교반하였다. 이후, 화합물 **F-1** 3 g(9.47 mmol)을 다이메틸폼아마이드 50 mL에 녹인 용액을 첨가하고 상온에서 12시간 교반하였다. 증류수로 세척하며 에틸아세테이트로 추출한 후, 감압 증류하였다. 이것을 클로로포름에 녹여 실리카 필터한 후, 메탄올, 에틸아세테이트 및 다이메틸폼아마이드로 재결정하여 화합물 **150** 2.8 g(5.46 mmol, 57.68 %)을 얻었다.

[0136] **[제조예 7] 화합물 154의 제조**



[0137]

[0138] **화합물 G-1의 제조**

[0139] 1,4-다이브로모벤젠 20 g(84.78 mmol) 을 테트라하이드로퓨란 550 mL 에 녹이고 -78℃에서 n-부틸리튬 37.3 mL(2.5M in hexane, 93.25 mmol)을 천천히 넣어 1시간 동안 교반시킨다. 이 후 다이페닐메틸실릴클로라이드 21.3 mL을 테트라하이드로퓨란 50 mL에 녹인 용액을 첨가하여 상온에서 12시간 교반하였다. 반응이 끝나면, 에틸아세테이트로 추출하여 증류수로 세척하고, 마그네슘설페이트를 이용하여 잔여 수분을 제거하고 건조하고, 감압 증류하였다. 이후, 클로로포름에 녹여 실리카 필터하여 화합물 **G-1** 16 g(45.28 mmol, 53.9 %)을 얻었다.

[0140] **화합물 G-2의 제조**

[0141] 화합물 **G-1** 16 g(45.28 mmol)을 테트라하이드로퓨란 200mL에 녹이고 -78℃에서 n-부틸리튬 21.7 mL(2.5M in Hexane, 54.34 mmol)을 천천히 넣어 1시간 동안 교반한 후, 트리메틸보레이트 7.57 mL(67.92 mmol)을 넣어 상온에서 12시간 교반하였다. 이후, 에틸아세테이트로 추출하고 증류수로 세척하였고, 에틸아세테이트와 n-헥산으로 재결정하여 화합물 **G-2** 12 g(37.70 mmol, 83.27 %) 을 얻었다.

[0142] **화합물 G-3의 제조**

[0143] 2-브로모니트로벤젠 7 g(34.65 mmol), 화합물 **G-2** 12.13 g(38.11 mmol), Pd(PPh₃)₄ 2.0 g(1.73 mmol), 2M-K₂CO₃ 40 mL, 에탄올 50 mL를 톨루엔 120 mL에 녹인 후, 100℃에서 12시간 동안 환류 교반하였다. 반응이 끝나면 상온으로 냉각하고 증류수로 세척하며 에틸아세테이트로 유기층을 추출한 뒤 마그네슘설페이트를 이용하여 잔여 수분을 제거하고 건조시킨 후, 감압 증류 하였다. 이후, 얻은 화합물을 메틸렌클로라이드에 녹여서 실리카 필터하고 감압 증류하여 화합물 **G-3** 13 g(32.86 mmol, 94.85 %)을 얻었다.

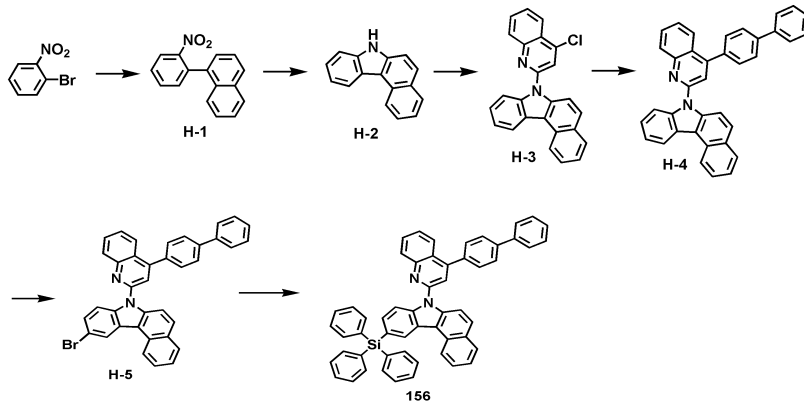
[0144] **화합물 G-4의 제조**

[0145] 화합물 **G-3** 13 g(32.86 mmol)을 1,2-다이클로로벤젠 150 mL에 녹이고 트리에틸포스파이트 200 mL를 넣고 150℃에서 15시간 동안 교반하였다. 감압 증류 후 고체를 클로로포름에 녹여 실리카 필터하여 화합물 **G-4** 10.5 g(28.88 mmol, 87.80 %)을 얻었다.

[0146] **화합물 154의 제조**

[0147] 화합물 **G-4** 5.04 g(13.88 mmol)을 다이메틸폼아마이드 30 mL에 녹이고, 이것을 DMF 30 mL에 NaH 0.75 g(18.95 mmol)을 녹인 용액에 넣고 1시간 동안 상온에서 교반하였다. 이후, 화합물 **F-1** 4 g(12.62 mmol)을 다이메틸폼아마이드 140 mL에 녹인 용액을 첨가하고 상온에서 12시간 교반하였다. 증류수로 세척하며 에틸아세테이트로 추출한 후, 감압 증류하였다. 이것을 클로로포름에 녹여 실리카 필터한 후, 메탄올, 에틸아세테이트 및 다이메틸폼아마이드로 재결정하여 화합물 **154** 3.6 g(5.59 mmol, 44.37 %)을 얻었다.

[0148] [제조예 8] 화합물 156의 제조



[0149]

[0150]

[0151] 화합물 H-1의 제조

[0152] 2-브로모니트로벤젠 40 g(0.198 mol), 1-나프탈렌보로닉산 37.46 g(0.217 mol), Pd(PPh₃)₄ 6.86 g(0.005 mol), 2M-K₂CO₃ 200 mL 및 에탄올 100 mL를 톨루엔 300 mL에 녹인 후, 100℃에서 4시간 동안 환류 교반하였다. 반응이 끝나면 상온으로 냉각하고 증류수로 세척하며 에틸아세테이트로 유기층을 추출한 뒤 마그네슘설페이트를 이용하여 잔여 수분을 제거하고 건조시킨 후, 감압 증류 하였다. 이후, 얻은 화합물을 메틸렌클로라이드에 녹여서 실리카 필터하고 감압 증류하여 화합물 H-1 45 g(0.180 mol, 91.17 %)을 얻었다.

[0153] 화합물 H-2의 제조

[0154] 화합물 H-1 45 g(0.180 mol)을 1,2-다이클로로벤젠 200 mL에 녹이고 트리에틸포스파이트 400 mL를 넣고 150℃에서 12시간 동안 교반하였다. 이후, 상온으로 냉각하고 감압 증류하였고, 컬럼 분리하여 화합물 H-2 32 g(0.147 mol, 81.82 %)을 얻었다.

[0155] 화합물 H-3의 제조

[0156] 화합물 H-2 24.6 g(113.6 mmol)을 2,4-다이클로로퀴놀린 15 g(75.7 mmol), CuI 28.8 g(151.4 mmol), Cs₂CO₃ 73 g(227.2 mmol), 트랜스 1,2-다이아미노사이클로헥산 2.713 mL(22.72 mmol), 1,2-다이클로로벤젠 500 mL을 넣고 180℃에서 12시간 동안 환류 교반하였다. 반응이 끝나면 상온으로 냉각하고 증류수로 세척하며 에틸아세테이트로 유기층을 추출한 뒤 마그네슘설페이트를 이용하여 잔여 수분을 제거하고 건조시킨 후, 감압 증류 하였다. 이것을 컬럼 분리하여 화합물 H-3 20 g(52.79 mmol, 70.38 %)을 얻었다.

[0157] 화합물 H-4의 제조

[0158] 화합물 H-3 20 g(52.79 mmol), 4-바이페닐보로닉산 31 g(158.3 mmol), Pd(OAc)₂ 1.18 g(5.27 mmol), P(t-부틸)₃ 5.2 mL(50% in toluene, 10.5 mmol), K₃PO₄ 33.6 g(158.3 mmol)을 1,4-다이옥산 600 mL에 넣고 100℃에서 5시간 동안 환류 교반하였다. 반응이 끝나면 상온으로 냉각하고 증류수로 세척하며 에틸아세테이트로 유기층을 추출한 뒤 마그네슘설페이트를 이용하여 잔여 수분을 제거하고 건조시킨 후, 감압 증류 하였다. 이것을 컬럼 분리하여 화합물 H-4 15 g(30.20mmol, 57.21 %)을 얻었다.

[0159] 화합물 H-5의 제조

[0160] 화합물 H-4 10 g(20.13 mmol)을 테트라하이드로퓨란 300 mL에 녹이고 상온에서 NBS 3.94 g(22.15 mmol)을 넣고 상온에서 12시간 동안 교반하였다. 반응이 끝나면 상온으로 냉각하고 증류수로 세척하며 에틸아세테이트로 유기층을 추출한 뒤 마그네슘설페이트를 이용하여 잔여 수분을 제거하고 건조시킨 후, 감압 증류 하였다. 이후, 컬럼 분리하여 화합물 H-5 9.5 g(16.50 mmol, 82.53 %)을 얻었다.

[0161] 화합물 156의 제조

[0162] 화합물 H-5 10 g(17.36 mmol)을 테트라하이드로퓨란 200 mL에 녹이고 -78℃에서 n-부틸리튬 13.89 mL(2.5M in Hexane, 34.73 mmol)을 천천히 넣고 1시간 동안 교반하였다. 이후, 트리페닐클로로실란 10.2 g을 테트라하이드로퓨란 200 mL에 녹여 넣은 후, 상온에서 12시간 동안 교반하였다. 반응이 끝나면 증류수를 넣고 에틸아세테이트로 추출하며 증류수로 씻어 주었고, 마그네슘설페이트를 이용하여 건조시킨 후, 감압 증류하였다. 이후, 컬럼

분리하여 화합물 156 5 g(6.62 mmol, 38.14 %)을 얻었다.

[0163] 또한 상기 화학식 2 내지 화학식 5로 표시되는 다양한 화합물들은 2,4-다이클로로피리도[2,3-d]피리미딘(OChem Incorporation), 2-클로로-피리도[3,2-d]피리미딘(Anichem LLC), 피리도[4,3-d]피리미딘-4(3H)-원(Aces Pharma, Inc.), 2-클로로-6,7-다이메틸-프테리딘(International Laboratory Limited), 2-클로로프테리딘(Princeton BioMolecular Research, Inc.), 3-클로로퀴놀린(Texas Biochemicals Inc.), 2,4-다이클로로퀴놀린(Shanghai PI Chemicals Ltd), 2,3-다이클로로퀴놀린(Aces Pharma, Inc.), 1-클로로아이소퀴놀린(Alfa Aesar, China Ltd.), 1,3-다이클로로아이소퀴놀린(Aalen Chemical Co. Ltd.), 1,4-다이클로로아이소퀴놀린(Bepharma Ltd)에서 선택되는 어느 하나 또는 둘 이상의 혼합물을 출발물질로 해서 공지된 합성방법으로 다양한 치환기를 도입하여 합성할 수 있다.

[0164] 상기 제조예 1 내지 8의 방법을 이용하여 유기 발광 화합물 1 내지 화합물 159을 제조하였으며, 표 1에 제조된 유기 발광 화합물들의 1H NMR 및 MS/FAB를 나타내었다.

[0165] [표 1]

화합물 번호	¹ H NMR(CDCl ₃ , 200 MHz)	MS/FAB	
		found	calculate d
1	δ = 7.25~7.33(3H, m), 7.41(1H, m), 7.5~7.51(3H, m), 7.63(1H, m), 7.79~7.8(3H, m), 7.94(1H, m), 8.05~8.16(4H, m), 8.55(1H, m)	371.43	371.14
2	δ = 7.25~7.33(3H, m), 7.41(2H, m), 7.5~7.52(7H, m), 7.63(1H, m), 7.79(2H, m), 7.94(1H, m), 8.02(1H, m), 8.12(2H, m), 8.45(1H, m), 8.55(1H, m)	447.53	447.17
3	δ = 7.25~7.33(3H, m), 7.41(1H, m), 7.51(2H, m), 7.61(1H, m), 7.79~7.8(3H, m), 7.94(1H, m), 8.05~8.06(3H, m), 8.16(1H, m), 8.55(1H, m)	389.42	389.13
4	δ = 7.25(1H, m), 7.33~7.55(21H, m), 7.69(1H, m), 7.77~7.8(4H, m), 7.87~7.94(4H, m), 8.05~8.06(2H, m), 8.16(1H, m), 8.55(1H, m)	705.92	705.26
5	δ = 7.25(1H, m), 7.33~7.55(20H, m), 7.73~7.83(5H, m), 7.94(1H, m), 8.05~8.06(2H, m), 8.16(1H, m), 8.55(1H, m)	629.82	629.23
6	δ = 1.35(9H, s), 7.25(1H, m), 7.33(1H, m), 7.41(1H, m), 7.51~7.55(3H, m), 7.62(1H, m), 7.79~7.8(3H, m), 7.94(1H, m), 8.05~8.06(2H, m), 8.16(1H, m), 8.36(1H, m), 8.55(1H, m)	427.54	427.20
7	δ = 7.41(3H, m), 7.51~7.52(10H, m), 7.69(1H, m), 7.77~7.8(5H, m), 7.87(1H, m), 8~8.06(3H, m), 8.16~8.18(2H, m)	523.63	523.20
8	δ = 1.92(4H, m), 3.44(4H, m), 6.88~6.9(2H, m), 7.25(1H, m), 7.33(1H, m), 7.41~7.51(4H, m), 7.79~7.8(3H, m), 7.94(1H, m), 8.05~8.06(2H, m), 8.16(1H, m), 8.55(1H, m)	440.54	440.20
9	δ = 7.41(1H, m), 7.51(2H, m), 7.57(2H, m), 7.69(1H, m), 7.77~7.8(5H, m), 7.87(1H, m), 8~8.06(3H, m), 8.16~8.18(2H, m), 8.42(2H, m), 8.7(2H, m), 9.24(2H, m)	525.60	525.20
10	δ = 5.93(1H, m), 6.63(8H, m), 6.75~6.81(6H, m), 7.2(8H, m), 7.38~7.41(2H, m), 7.51(2H, m), 7.63(1H, m), 7.69(1H, m), 7.79~7.8(3H, m), 8.05~8.06(2H, m), 8.16(1H, m)	705.85	705.29
11	δ = 7.25~7.33(3H, m), 7.41(1H, m), 7.5~7.51(3H, m), 7.58~7.68(4H, m), 7.79~7.84(6H, m), 7.94(1H, m), 8.12~8.16(2H, m), 8.55(1H, m)	447.53	447.17
12	δ = 7.25~7.33(3H, m), 7.41(1H, m), 7.5~7.51(3H, m), 7.58~7.63(2H, m), 7.79~7.88(5H, m), 7.94~7.96(2H, m), 8.12~8.16(2H, m), 8.55~8.58(2H, m)	448.52	448.17
13	δ = 7.25~7.33(3H, m), 7.41(1H, m), 7.5~7.51(3H, m), 7.58~7.63(2H, m), 7.72(1H, m), 7.79~7.86(5H, m), 7.94(1H, m), 8.12~8.16(2H, m), 8.38(1H, m), 8.55(1H, m)	448.52	448.17
14	δ = 7.25~7.33(3H, m), 7.41(1H, m), 7.5~7.51(3H, m), 7.58~7.63(2H, m), 7.79~7.84(4H, m), 7.94(1H, m), 8.12~8.16(2H, m), 8.55(1H, m), 8.79(1H, s), 8.82(1H, s)	449.51	449.16
15	δ = 7.25~7.33(5H, m), 7.41(1H, m), 7.5~7.51(3H, m), 7.58~7.68(4H, m), 7.79~7.85(8H, m), 7.94(1H, m), 8.12~8.16(2H, m), 8.55(1H, m)	523.63	523.20
16	δ = 7.25~7.33(3H, m), 7.41(1H, m), 7.48~7.51(4H, m), 7.57~7.7(6H, m), 7.79~7.84(6H, m), 7.94(1H, m), 8.12~8.16(2H, m), 8.24(1H, m), 8.55(1H, m)	523.63	523.20
17	δ = 1.96(6H, s), 5.83(2H, m), 7.25~7.33(3H, m), 7.5(1H, m), 7.63(1H, m), 7.8(1H, m), 7.94(1H, m), 8.05~8.16(4H, m), 8.55(1H, m)	388.46	388.17

[0166]

18	$\delta = 2.69(12H, s), 7.25\sim 7.33(5H, m), 7.41(1H, m), 7.5\sim 7.51(3H, m), 7.58\sim 7.68(4H, m), 7.79\sim 7.85(8H, m), 7.94(1H, m), 8.12\sim 8.16(2H, m), 8.55(1H, m)$	655.83	655.30
19	$\delta = 2.51(3H, m), 7.22\sim 7.33(5H, m), 7.5(1H, m), 7.59\sim 7.63(2H, m), 7.8(1H, m), 7.94(1H, m), 8.05\sim 8.16(4H, m), 8.55\sim 8.56(2H, m)$	425.48	425.16
20	$\delta = 1.35(9H, s), 6.85(1H, m), 7.13(1H, s), 7.25\sim 7.33(3H, m), 7.43(1H, m), 7.5(1H, m), 7.63(1H, m), 7.72(1H, m), 7.8(1H, m), 7.93\sim 7.94(2H, m), 8.05\sim 8.16(4H, m), 8.55(1H, m)$	466.58	466.22
21	$\delta = 7.25\sim 7.33(3H, m), 7.5\sim 7.63(5H, m), 7.7\sim 7.8(3H, m), 7.94\sim 8.05(8H, m), 8.55(1H, m)$	504.60	504.14
22	$\delta = 6.95\sim 7.01(3H, m), 7.25\sim 7.33(5H, m), 7.5(1H, m), 7.63(1H, m), 7.8(1H, m), 7.94(1H, m), 8.05\sim 8.16(4H, m), 8.55(1H, m)$	387.43	387.14
23	$\delta = 7.25\sim 7.33(3H, m), 7.41\sim 7.51(12H, m), 7.58\sim 7.63(3H, m), 7.79\sim 7.8(3H, m), 7.94(1H, m), 8.05\sim 8.16(4H, m), 8.55(1H, m)$	589.69	589.23
24	$\delta = 7.25\sim 7.33(6H, m), 7.5(2H, m), 7.63(2H, m), 7.8(1H, m), 7.94(2H, m), 8.05\sim 8.16(5H, m), 8.55(2H, m)$	460.53	460.17
25	$\delta = 3.83(3H, m), 7.25\sim 7.33(7H, m), 7.5(2H, m), 7.63(2H, m), 7.74(1H, m), 7.94\sim 7.95(3H, m), 8.12(2H, m), 8.55(2H, m)$	490.55	490.18
26	$\delta = 7.23\sim 7.39(8H, m), 7.5(1H, m), 7.63(1H, m), 7.8(1H, m), 7.94(1H, m), 8.05\sim 8.16(4H, m), 8.55(1H, m)$	403.50	403.11
27	$\delta = 7.25(1H, m), 7.33(1H, m), 7.41(1H, m), 7.51\sim 7.52(4H, m), 7.63\sim 7.67(4H, m), 7.8\sim 7.85(3H, m), 7.94(1H, m), 8.05\sim 8.06(2H, m), 8.16(2H, m), 8.3(2H, m), 8.54\sim 8.55(2H, m)$	497.59	497.19
28	$\delta = 7.25(1H, m), 7.33(1H, m), 7.4\sim 7.41(2H, m), 7.51\sim 7.55(3H, m), 7.67(2H, m), 7.79\sim 7.8(3H, m), 7.94(1H, m), 8.05\sim 8.06(2H, m), 8.16(3H, m), 8.55(1H, m)$	421.49	421.16
29	$\delta = 7.25(1H, m), 7.33\sim 7.41(3H, m), 7.51(2H, m), 7.79\sim 7.8(3H, m), 7.94(1H, m), 8.05\sim 8.06(2H, m), 8.16(1H, m), 8.43(1H, m), 8.51\sim 8.55(2H, m)$	372.42	372.14
30	$\delta = 7.25\sim 7.37(20H, m), 7.61\sim 7.63(2H, m), 7.76\sim 7.8(2H, m), 7.89\sim 7.94(2H, m), 8.05\sim 8.16(4H, m), 8.55(1H, m)$	629.82	629.23
31	$\delta = 6.51(2H, m), 6.69(2H, m), 6.98\sim 7.01(4H, m), 7.11(4H, m), 7.26(2H, m), 7.33(4H, m), 7.41(1H, m), 7.51(2H, m), 7.58(1H, m), 7.79\sim 7.84(4H, m), 8.16(1H, m)$	537.65	537.22
32	$\delta = 6.73(2H, m), 6.91(2H, m), 7.39\sim 7.41(3H, m), 7.51\sim 7.58(5H, m), 7.79\sim 7.84(4H, m), 8.16(1H, m)$	399.44	399.14
33	$\delta = 6.59(2H, m), 6.77(2H, m), 6.89\sim 6.92(4H, m), 7.41(1H, m), 7.51(2H, m), 7.58(1H, m), 7.79\sim 7.84(4H, m), 8.16(1H, m)$	387.43	387.14
34	$\delta = 6.97(2H, m), 7.16\sim 7.21(6H, m), 7.41(1H, m), 7.51(2H, m), 7.58(1H, m), 7.79\sim 7.84(4H, m), 8.16(1H, m)$	403.50	403.11
35	$\delta = 6.38(4H, m), 6.56(4H, m), 6.63(2H, m), 6.81(1H, m), 7.2(2H, m), 7.41(1H, m), 7.51(2H, m), 7.58(1H, m), 7.79\sim 7.84(4H, m), 8.16(1H, m)$	462.54	462.18
36	$\delta = 6.63(2H, m), 6.81(2H, m), 6.99\sim 7.05(4H, m), 7.25(2H, m), 7.41(1H, m), 7.51(2H, m), 7.58(1H, m), 7.79\sim 7.84(4H, m), 8.16(1H, m)$	397.47	397.16
37	$\delta = 7.25\sim 7.33(3H, m), 7.41(1H, m), 7.5\sim 7.52(5H, m), 7.63(1H, m), 7.8\sim 7.85(3H, m), 7.94(1H, m), 8.05\sim 8.16(4H, m), 8.3(2H, m), 8.55(1H, m)$	447.53	447.17

[0167]

38	$\delta = 7.14(1H, m), 7.25\sim 7.33(3H, m), 7.5(1H, m), 7.63(1H, m), 7.7(1H, m), 7.8(1H, m), 7.88(1H, m), 7.94(1H, m), 8.05\sim 8.16(4H, m), 8.53\sim 8.55(2H, m), 8.81(1H, m), 8.99(1H, m), 9.3(1H, m)$	449.51	449.16
39	$\delta = 7.25\sim 7.33(3H, m), 7.5\sim 7.55(3H, m), 7.61\sim 7.63(2H, m), 7.8(1H, m), 7.94\sim 7.95(2H, m), 8.04\sim 8.16(6H, m), 8.55(2H, m)$	421.49	421.16
40	$\delta = 7.25\sim 7.33(3H, m), 7.42(1H, m), 7.49\sim 7.5(2H, m), 7.63(1H, m), 7.76\sim 7.8(2H, m), 7.92\sim 7.94(2H, m), 8.05\sim 8.16(4H, m), 8.43(1H, m), 8.55(1H, m), 8.87(1H, m)$	422.48	422.15
41	$\delta = 7.25\sim 7.33(3H, m), 7.5(1H, m), 7.63(1H, m), 7.8\sim 7.94(7H, m), 8.05\sim 8.16(6H, m), 8.55(1H, m), 8.93(2H, m)$	471.55	471.17
42	$\delta = 7.25\sim 7.33(3H, m), 7.5(1H, m), 7.58\sim 7.65(4H, m), 7.8(1H, m), 7.94(1H, m), 8.05\sim 8.16(4H, m), 8.38(2H, m), 8.55(1H, m), 8.83(2H, m)$	473.53	473.16
43	$\delta = 7.25\sim 7.33(3H, m), 7.5(1H, m), 7.63(1H, m), 7.8\sim 7.88(5H, m), 7.94(1H, m), 8.04\sim 8.18(8H, m), 8.55(1H, m), 8.93(2H, m), 9.15(1H, m)$	521.61	521.19
44	$\delta = 2.34(3H, m), 7.25\sim 7.33(5H, m), 7.5(1H, m), 7.63\sim 7.67(3H, m), 7.8(1H, m), 7.94(1H, m), 8.05\sim 8.16(4H, m), 8.55(1H, m)$	385.46	385.16
45	$\delta = 7.25\sim 7.36(4H, m), 7.5(1H, m), 7.63(1H, m), 7.8\sim 7.85(2H, m), 7.94(1H, m), 8.05\sim 8.16(4H, m), 8.4(1H, m), 8.55\sim 8.59(2H, m)$	372.42	372.14
46	$\delta = 7.25\sim 7.33(3H, m), 7.41(2H, m), 7.5\sim 7.51(5H, m), 7.57\sim 7.63(2H, m), 7.7\sim 7.8(7H, m), 7.94(1H, m), 8.05\sim 8.16(4H, m), 8.23(1H, s), 8.24(1H, m), 8.55(1H, m)$	601.70	601.23
47	$\delta = 2.44(6H, s), 7.25\sim 7.33(3H, m), 7.5(1H, m), 7.63(1H, m), 7.8(1H, m), 7.94(1H, m), 8.05\sim 8.16(4H, m), 8.55(1H, m)$	402.45	402.16
48	$\delta = 7.25\sim 7.33(3H, m), 7.41(2H, m), 7.5\sim 7.51(5H, m), 7.63(1H, m), 7.8(1H, m), 7.94(1H, m), 8.05\sim 8.16(4H, m), 8.28(4H, m), 8.55(1H, m)$	526.59	526.19
49	$\delta = 7.25\sim 7.33(3H, m), 7.42\sim 7.43(3H, m), 7.5\sim 7.55(3H, m), 7.63(1H, m), 7.8(1H, m), 7.94(1H, m), 8.05\sim 8.16(4H, m), 8.55(1H, m)$	395.45	395.14
50	$\delta = 6.99(2H, m), 7.25\sim 7.33(3H, m), 7.41(2H, m), 7.5\sim 7.51(5H, m), 7.63(1H, m), 7.8(1H, m), 7.94(1H, m), 8.05\sim 8.16(4H, m), 8.28(4H, m), 8.55(1H, m)$	552.63	552.21
51	$\delta = 3.57(4H, m), 3.65(4H, m), 7.25\sim 7.33(3H, m), 7.5(1H, m), 7.63(1H, m), 7.8(1H, m), 7.94(1H, m), 8.05\sim 8.16(4H, m), 8.55(1H, m)$	380.44	380.16
52	$\delta = 7.25\sim 7.37(9H, m), 7.46\sim 7.55(12H, m), 7.63(1H, m), 7.8\sim 7.94(6H, m), 8.05\sim 8.16(4H, m), 8.3(2H, m), 8.55(1H, m)$	705.92	705.26
53	$\delta = 7.25\sim 7.37(10H, m), 7.46\sim 7.55(10H, m), 7.63(1H, m), 7.73(1H, m), 7.8\sim 7.85(3H, m), 7.94(1H, m), 8.05\sim 8.16(4H, m), 8.3(2H, m), 8.55(1H, m)$	711.95	711.22
54	$\delta = 6.63(4H, m), 6.81(2H, m), 7.2\sim 7.33(7H, m), 7.5(1H, m), 7.63(1H, m), 7.8(1H, m), 7.94(1H, m), 8.05\sim 8.16(4H, m), 8.55(1H, m)$	462.54	462.18
55	$\delta = 7.25\sim 7.33(6H, m), 7.41(2H, m), 7.5\sim 7.51(6H, m), 7.63(2H, m), 7.79(4H, m), 7.94(2H, m), 8.12(2H, m), 8.34(1H, s), 8.51(1H, s), 8.55(2H, m)$	612.72	612.23
56	$\delta = 3.83(2H, s), 7.25\sim 7.33(6H, m), 7.46(1H, s), 7.5(2H, m), 7.63(3H, m), 7.63(0H, s), 7.94(2H, m), 8.12(2H, m), 8.55(2H, m)$	520.58	520.19

[0168]

57	$\delta = 6.95\sim 7.01(3H, m), 7.25\sim 7.33(5H, m), 7.5(1H, m), 7.58\sim 7.68(4H, m), 7.79\sim 7.84(4H, m), 7.94(1H, m), 8.12\sim 8.16(2H, m), 8.55(1H, m)$	463.53	463.17
58	$\delta = 4.28(4H, m), 7.2\sim 7.33(7H, m), 7.5\sim 7.51(3H, m), 7.63(2H, m), 7.94(2H, m), 8.12(2H, m), 8.55(2H, m)$	518.56	518.17
59	$\delta = 3.83(3H, m), 7.25\sim 7.33(7H, m), 7.5(2H, m), 7.63(2H, m), 7.74(1H, m), 7.94\sim 7.95(3H, m), 8.12(2H, m), 8.55(2H, m)$	490.55	490.18
60	$\delta = 7.14\sim 7.17(3H, m), 7.25\sim 7.33(6H, m), 7.41\sim 7.5(5H, m), 7.63(2H, m), 7.89\sim 7.94(3H, m), 8.02(1H, m), 8.12(2H, m), 8.55(2H, m)$	552.62	552.20
61	$\delta = 2.44(3H, m), 7.25\sim 7.33(3H, m), 7.5(1H, m), 7.63(1H, m), 7.8(1H, m), 7.94(1H, m), 8.05\sim 8.16(4H, m), 8.55(1H, m)$	309.36	309.13
62	$\delta = 3.83(3H, s), 5.35(1H, s), 7.25\sim 7.33(3H, m), 7.42(1H, s), 7.5(1H, m), 7.57(1H, s), 7.63(1H, m), 7.94(1H, m), 8.12(1H, m), 8.55(1H, m), 9.36(1H, s)$	341.36	341.12
63	$\delta = 5.35(1H, s), 7.25\sim 7.33(4H, m), 7.5(1H, m), 7.63(1H, m), 7.7(1H, m), 7.89\sim 7.94(2H, m), 8.12(1H, m), 8.55(1H, m), 9.36(1H, s)$	311.34	311.11
64	$\delta = 7.25\sim 7.33(6H, m), 7.5(2H, m), 7.63(2H, m), 7.94(2H, m), 8.12(2H, m), 8.32(1H, m), 8.55(2H, m), 8.73(1H, m), 9.16(1H, m)$	505.53	505.15
65	$\delta = 7.25\sim 7.33(3H, m), 7.41\sim 7.51(6H, m), 7.58\sim 7.63(2H, m), 7.79\sim 7.84(4H, m), 7.94(1H, m), 8.09\sim 8.16(3H, m), 8.28(1H, m), 8.55(1H, m)$	447.53	447.17
66	$\delta = 1.72(6H, s), 7.25\sim 7.38(5H, m), 7.5\sim 7.55(2H, m), 7.63(2H, m), 7.77\sim 7.8(2H, m), 7.87\sim 7.94(3H, m), 8.05\sim 8.16(4H, m), 8.55(1H, m)$	487.59	487.20
67	$\delta = 7.37\sim 7.58(23H, m), 7.72(2H, m), 7.79\sim 7.84(9H, m), 8.16(2H, m)$	744.95	744.27
68	$\delta = 7.41(3H, m), 7.51(6H, m), 7.58(3H, m), 7.66(3H, m), 7.79\sim 7.84(12H, m), 8.16(3H, m)$	690.79	690.25
69	$\delta = 7.25\sim 7.41(5H, m), 7.5\sim 7.51(3H, m), 7.63(1H, m), 7.79(2H, m), 7.94(1H, m), 8.12(1H, m), 8.43(1H, m), 8.51\sim 8.55(2H, m)$	372.42	372.14
72	$\delta = 7.25\sim 7.36(7H, m), 7.5(2H, m), 7.63\sim 7.68(6H, m), 7.79(4H, m), 7.94(2H, m), 8.12(2H, m), 8.43(1H, m), 8.51\sim 8.55(3H, m)$	613.71	613.23
75	$\delta = 7.25\sim 7.38(7H, m), 7.5(2H, m), 7.63(2H, m), 7.94(2H, m), 8.12(2H, m), 8.43(1H, m), 8.55(2H, m), 8.87(1H, m)$	461.52	461.16
76	$\delta = 7.25\sim 7.41(5H, m), 7.5\sim 7.51(3H, m), 7.63\sim 7.68(3H, m), 7.79(4H, m), 7.94(1H, m), 8.12(1H, m), 8.43(1H, m), 8.55(1H, m), 8.87(1H, m)$	448.52	448.17
79	$\delta = 1.35(9H, s), 7.25\sim 7.33(3H, m), 7.41(1H, m), 7.5\sim 7.52(5H, m), 7.63(1H, m), 7.94(1H, m), 8.12(1H, m), 8.55(1H, m), 8.98(1H, m), 9.24(1H, m)$	428.53	428.20
85	$\delta = 2.34(12H, s), 7.25\sim 7.33(5H, m), 7.5(1H, m), 7.6\sim 7.67(5H, m), 7.94(1H, m), 8.12(1H, m), 8.55(1H, m), 8.79(1H, m), 8.95(1H, m)$	528.65	528.23
89	$\delta = 7.25\sim 7.33(3H, m), 7.5\sim 7.51(2H, m), 7.63\sim 7.68(3H, m), 7.79\sim 7.85(4H, m), 7.94(1H, m), 8.12(1H, m), 8.3(2H, m), 8.43(1H, m), 8.55(1H, m), 9.27(1H, s), 9.51(1H, m)$	448.52	448.17
93	$\delta = 3.83(6H, s), 6.97(1H, m), 7.25\sim 7.33(3H, m), 7.41\sim 7.51(6H, m), 7.62\sim 7.63(2H, m), 7.76(1H, m), 7.9\sim 7.97(3H, m), 8.12(1H, m), 8.55(1H, m)$	508.57	508.19

[0169]

98	$\delta = 7.22\sim 7.33(4H, m), 7.5(1H, m), 7.63(1H, m), 7.94\sim 7.97(2H, m), 8.12(1H, m), 8.43(1H, m), 8.55(1H, m), 8.87(1H, s)$	296.33	296.11
104	$\delta = 7.25(4H, m), 7.29(5H, s), 7.29\sim 7.33(4H, m), 7.5(4H, m), 7.63(4H, m), 7.94(4H, m), 8.12(4H, m), 8.55(4H, m)$	791.90	791.28
108	$\delta = 7.25\sim 7.33(3H, m), 7.46\sim 7.51(3H, m), 7.63(1H, m), 7.79(1H, m), 7.94(1H, m), 8.09\sim 8.12(2H, m), 8.55(1H, m), 8.78(1H, m), 9.26(1H, m), 9.27(1H, s)$	373.41	373.13
112	$\delta = 7.25\sim 7.33(3H, m), 7.41\sim 7.51(6H, m), 7.63(1H, m), 7.94(1H, m), 8.12(1H, m), 8.55(1H, m), 8.57(1H, s)$	441.41	441.12
115	$\delta = 7.25\sim 7.33(3H, m), 7.5(1H, m), 7.63\sim 7.68(3H, m), 7.79(2H, m), 7.94(1H, m), 8.12(1H, m), 8.5(1H, s), 8.55(1H, m), 8.63(2H, m)$	373.41	373.13
121	$\delta = 1.53(4H, m), 1.59(2H, m), 4.03(4H, m), 7.25\sim 7.33(6H, m), 7.41(1H, m), 7.5\sim 7.51(4H, m), 7.63(2H, m), 7.79(2H, m), 7.94(2H, m), 8.12(2H, m), 8.55(2H, m)$	621.73	621.26
124	$\delta = 7.25(1H, m), 7.33\sim 7.37(8H, m), 7.46(6H, m), 7.55(3H, m), 7.73(1H, m), 7.83(1H, m), 7.94(1H, m), 8.55(1H, m), 8.63(2H, m), 8.87(1H, s)$	555.70	555.19
125	$\delta = 7.25\sim 7.37(20H, m), 7.61\sim 7.63(2H, m), 7.76(1H, m), 7.89\sim 7.94(2H, m), 8.12(1H, m), 8.55(1H, m), 8.63(2H, m)$	631.80	631.22
126	$\delta = 7.25\sim 7.33(3H, m), 7.41\sim 7.51(6H, m), 7.63\sim 7.68(3H, m), 7.79(2H, m), 7.94(1H, m), 8.12(1H, m), 8.55(1H, m), 8.63(2H, m)$	449.51	449.16
130	$\delta = 7.25(2H, m), 7.33(2H, m), 7.41\sim 7.51(10H, m), 7.63\sim 7.67(8H, m), 7.94(2H, m), 8.16(2H, m), 8.54\sim 8.55(4H, m)$	714.81	714.25
132	$\delta = 7.25(2H, m), 7.33(2H, m), 7.41\sim 7.51(12H, m), 7.94(2H, m), 8.43(2H, m), 8.55(2H, m), 9.34(2H, m)$	616.67	616.21
139	$\delta = 7.25\sim 7.33(3H, m), 7.41\sim 7.51(17H, m), 7.58\sim 7.63(5H, m), 7.69(1H, m), 7.77(2H, m), 7.87(1H, m), 7.94\sim 8(2H, m), 8.12(1H, m), 8.18(1H, m), 8.55(1H, m)$	766.89	766.28
141	$\delta = 7.37(3H, m), 7.57(3H, m), 7.69\sim 7.75(6H, m), 7.94(3H, m), 8.22(3H, m)$	398.46	398.15
142	$\delta = 7.25\sim 7.33(7H, m), 7.41(1H, m), 7.5\sim 7.52(5H, m), 7.6\sim 7.63(2H, m), 7.68(1H, s), 7.78(1H, m), 7.94\sim 7.98(2H, m), 8.06\sim 8.12(2H, m), 8.55(1H, m)$	446.54	446.18
144	$\delta = 1.35(3H, s), 7.25\sim 7.38(7H, m), 7.5(1H, m), 7.6\sim 7.63(2H, m), 7.78(1H, m), 7.94\sim 7.98(2H, m), 8.06\sim 8.12(2H, m), 8.42(1H, m), 8.55(1H, m)$	426.55	426.21
146	$\delta = 7.25\sim 7.33(6H, m), 7.42(2H, m), 7.49\sim 7.5(3H, m), 7.63(3H, m), 7.92\sim 7.94(3H, m), 8.12(2H, m), 8.55(2H, m)$	459.54	459.17
147	$\delta = 7.25\sim 7.33(3H, m), 7.42(1H, m), 7.49\sim 7.5(2H, m), 7.58\sim 7.65(4H, m), 7.76(1H, m), 7.92\sim 7.94(2H, m), 8.12(1H, m), 8.38(2H, m), 8.43(1H, s), 8.55(1H, m), 8.83(2H, m)$	472.54	472.17
148	$\delta = 7.25\sim 7.37(20H, m), 7.61\sim 7.63(2H, m), 7.76\sim 7.8(2H, m), 7.89\sim 7.94(2H, m), 8.05\sim 8.16(4H, m), 8.55(1H, m)$	629.82	629.23
149	$\delta = 7.25(1H, m), 7.33\sim 7.46(14H, m), 7.55(3H, m), 7.61\sim 7.67(5H, m), 7.76\sim 7.8(2H, m), 7.89\sim 7.94(2H, m), 8.05\sim 8.06(2H, m), 8.16(2H, m), 8.54\sim 8.55(2H, m)$	679.88	679.24
150	$\delta = 7.25(1H, m), 7.28\sim 7.41(22H, m), 7.68(1H, m), 7.8\sim 7.85(3H, m), 7.94(1H, m), 8.05\sim 8.06(2H, m), 8.16(1H, m), 8.22(1H, m), 8.3(2H, m), 8.55(1H, m)$	705.92	705.26
151	$\delta = 7.25(1H, m), 7.33(1H, m), 7.41(1H, m), 7.51\sim 7.52(4H, m), 7.58\sim 7.68(7H, m), 7.79\sim 7.85(6H, m), 7.94(1H, m), 8.16(2H, m), 8.3(2H, m), 8.54\sim 8.55(2H, m)$	573.68	573.22

[0170]

152	$\delta = 7.25(1H, m), 7.29(1H, m), 7.33\sim 7.46(22H, m), 7.63\sim 7.68(3H, m), 7.79\sim 7.85(4H, m), 7.94(1H, m), 8.11\sim 8.12(3H, m), 8.26\sim 8.3(3H, m), 8.55(1H, m)$	782.01	781.29
153	$\delta = 7.25(1H, m), 7.28(1H, m), 7.33\sim 7.46(22H, m), 7.68(3H, m), 7.79\sim 7.85(6H, m), 7.94(1H, m), 8.16(1H, m), 8.22(1H, m), 8.3(2H, m), 8.55(1H, m)$	782.01	781.29
154	$\delta = 0.66(3H, m), 7.25(1H, m), 7.28\sim 7.41(17H, m), 7.68(1H, m), 7.8\sim 7.85(3H, m), 7.94(1H, m), 8.05\sim 8.06(2H, m), 8.16(1H, m), 8.22(1H, m), 8.3(2H, m), 8.55(1H, m)$	643.85	643.24
155	$\delta = 7.25(5H, m), 7.33(1H, m), 7.41(1H, m), 7.51\sim 7.52(4H, m), 7.6\sim 7.67(5H, m), 7.68(1H, s), 7.78(1H, m), 7.94\sim 7.98(2H, m), 8.06(1H, m), 8.16(1H, m), 8.54\sim 8.55(2H, m)$	496.60	496.19
156	$\delta = 7.25(4H, m), 7.36(1H, m), 7.37(6H, m), 7.41(1H, m), 7.46\sim 7.55(18H, m), 7.68(1H, s), 7.78\sim 7.83(2H, m), 7.98\sim 8.06(3H, m), 8.16(1H, m), 8.54(1H, m)$	754.99	754.28
157	$\delta = 0.66(3H, m), 7.25\sim 7.28(5H, m), 7.37(4H, m), 7.41(1H, m), 7.46(4H, m), 7.51\sim 7.6(13H, m), 7.68(0H, s), 7.78(1H, m), 7.98(1H, m), 8.06(1H, m), 8.16(1H, m), 8.53\sim 8.54(2H, m)$	692.92	692.26
158	$\delta = 0.66(3H, m), 7.28(1H, m), 7.37\sim 7.55(15H, m), 7.63\sim 7.68(5H, m), 7.8\sim 7.85(3H, m), 8.05\sim 8.06(2H, m), 8.16(2H, m), 8.3(2H, m), 8.53\sim 8.54(2H, m)$	693.91	693.26
159	$\delta = 0.66(3H, m), 7.36\sim 7.55(16H, m), 7.63\sim 7.67(4H, m), 7.8\sim 7.85(4H, m), 8.04\sim 8.06(3H, m), 8.16(2H, m), 8.3(2H, m), 8.54(1H, m)$	693.91	693.26

[0171]

[0172]

[실시예 1-8] 본 발명에 따른 유기 발광 화합물을 이용한 OLED 소자 제작

[0173]

본 발명의 발광 재료를 이용한 구조의 OLED 소자를 제작하였다. 우선, OLED용 글래스(삼성-코닝사 제조)로부터 얻어진 투명전극 ITO 박막(15 Ω/□) 을, 트리클로로에틸렌, 아세톤, 에탄올, 증류수를 순차적으로 사용하여 초음파 세척을 실시한 후, 이소프로판올에 넣어 보관한 후 사용하였다. 다음으로, 진공 증착 장비의 기관 폴더에 ITO 기관을 설치하고, 진공 증착 장비 내의 셀에 하기 구조의 2-TNATA [4,4',4"-tris(N,N-(2-naphthyl)-phenylamino)triphenylamine] 넣고, 챔버 내의 진공도가 10⁻⁶ torr에 도달할 때까지 배기시킨 후, 셀에 전류를 인가하여 2-TNATA를 증발시켜 ITO 기관 상에 60 nm 두께의 정공주입층을 증착하였다.

[0174]

이어서, 진공 증착 장비 내의 다른 셀에 하기구조 NPB [N,N'-bis(α-naphthyl)-N,N'-diphenyl-4,4'-diamine]을 넣고, 셀에 전류를 인가하여 NPB를 증발시켜 정공주입층 위에 20 nm 두께의 정공전달층을 증착하였다.

[0175]

진공 증착 장비 내의 한쪽 셀에 호스트 재료로 10⁻⁶ torr하에서 진공 승화 정제된 본 발명에 따른 화합물(예 : 화합물 52)을 넣고, 다른쪽 셀에는 발광 도판트(예 : 화합물 (piq)₂Ir(acac) [bis-(1-phenylisoquinolyl)iridium(III)acetylacetonate])를 각각 넣은 후, 두 물질을 다른 속도로 증발시켜 4 내지 10mol%로 도포함으로써 상기 정공 전달층 위에 30 nm 두께의 발광층을 증착하였다.

[0176]

이어서 전자전달층으로써 Alq [tris(8-hydroxyquinoline)-aluminum(III)]를 20 nm 두께로 증착한 다음, 전자 주입층으로 하기 구조의 화합물 Liq(lithium quinolate)를 1 내지 2 nm 두께로 증착한 후, 다른 진공 증착 장비를 이용하여 Al 음극을 150 nm의 두께로 증착하여 OLED를 제작하였다.

[0177]

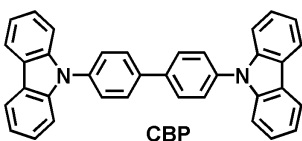
실시예에 따른 구동전압(V) 및 발광효율(cd/A)의 결과를 하기의 표 2에 나타내었다.

[0178]

[비교예 1] 종래의 발광 재료를 이용한 OLED 소자 제작

[0179]

진공 증착 장비 내의 다른 셀에 발광 호스트 재료로서 본 발명에 따른 유기 발광 화합물 대신에 CBP를 사용한 것과 전자전달층으로 BALq [Bis(2-methyl-8-quinolinato)(p-phenylphenolato) aluminum(III)]를 사용한 것 이외에는 실시예 1과 동일하게 OLED 소자를 제작하였다.



[0180]

[0181]

본 발명에 따른 유기 발광 화합물을 함유하는 실시예 1 내지 실시예 5의 OLED 소자와 비교예 1에서 제조된 종래의 발광 화합물을 함유하는 OLED 소자의 구동전압 및 전력효율을 1,000 cd/m² 에서 측정하여 하기 표 2에 나타

내었다.

[0182] [표 2]

	호스트재료	발광재료	@1,000cd/m ²		발광색
			구동전압 (V)	발광효율 (cd/A)	
실시예 1	화합물 27	(piq) ₂ Ir(acac)	6.8	7.2	적색
실시예 2	화합물 37	(piq) ₂ Ir(acac)	6.7	7.4	적색
실시예 3	화합물 52	(piq) ₂ Ir(acac)	7.0	7.7	적색
실시예 4	화합물 77	(piq) ₂ Ir(acac)	6.6	7.1	적색
실시예 5	화합물 143	(piq) ₂ Ir(acac)	6.6	7.2	적색
실시예 6	화합물 153	(piq) ₂ Ir(acac)	6.8	7.6	적색
실시예 7	화합물 154	(piq) ₂ Ir(acac)	6.9	7.5	적색
실시예 8	화합물 155	(piq) ₂ Ir(acac)	6.6	7.4	적색
실시예 9	화합물 156	(piq) ₂ Ir(acac)	6.9	7.8	적색
비교예 1	CBP	(piq) ₂ Ir(acac)	7.5	6.5	적색

[0183]

[0184]

상기 표 2에 나타난 바와 같이, 본 발명에서 개발한 유기 발광 화합물들의 발광특성이 종래의 재료 대비 우수한 특성을 보이는 것을 확인할 수 있었다. 또한 본 발명에 따른 유기 발광 화합물을 적색 발광용 호스트 재료로 사용한 소자는 발광효율이 높을 뿐만 아니라 구동전압을 강하시켜줌으로써 종래의 재료와 비교해 소비전력의 개선을 기대할 수 있다.

专利名称(译)	新型有机电致发光化合物和含有它们的有机电致发光器件		
公开(公告)号	KR1020110013220A	公开(公告)日	2011-02-09
申请号	KR1020100064849	申请日	2010-07-06
[标]申请(专利权)人(译)	罗门哈斯电子材料有限公司		
申请(专利权)人(译)	룸엔드하스전자재료코리아유한회사		
当前申请(专利权)人(译)	룸엔드하스전자재료코리아유한회사		
[标]发明人	LEE HYO JUNG 이효정 CHO YOUNG JUN 조영준 EUM SUNG JIN 음성진 KWON HYUCK JOO 권혁주 KIM BONG OK 김봉옥 KIM SUNG MIN 김성민 YOON SEUNG SOO 윤승수		
发明人	이효정 조영준 음성진 권혁주 김봉옥 김성민 윤승수		
IPC分类号	C09K11/06 H01L51/50 C07D215/00 C07D239/72		
CPC分类号	H01L51/0072 C09K2211/1029 C07D417/04 H01L51/0085 C09K2211/1037 C09K2211/1416 C09K2211/1033 C07D413/04 C07D403/14 H05B33/14 C09K11/06 C09K2211/1059 H01L51/0094 C09K2211/1014 H01L2251/308 C09K2211/1044 Y02B20/181 H01L51/0081 H01L51/5016		
代理人(译)	李昌勋		
优先权	1020090070611 2009-07-31 KR		
外部链接	Espacenet		

摘要(译)

本发明涉及新型有机发光化合物和包含该化合物的有机电致发光器件。根据本发明的有机电致发光化合物具有优异的传统材料的发光效率和寿命特性，并且具有优异的器件驱动寿命，有一个优点。

