



(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 공개특허공보(A)

(11) 공개번호 10-2012-0072784
(43) 공개일자 2012년07월04일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)
C09K 11/06 (2006.01) H01L 51/54 (2006.01)
(21) 출원번호 10-2010-0134673
(22) 출원일자 2010년12월24일
심사청구일자 없음

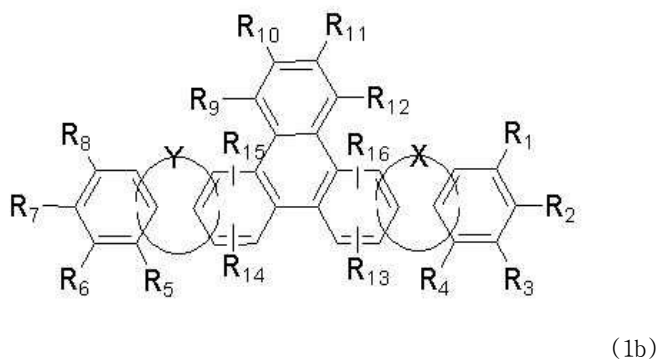
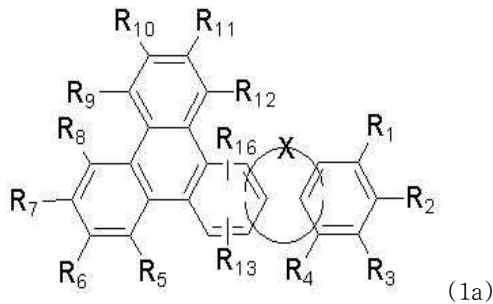
(71) 출원인
에스에프씨 주식회사
충청북도 청원군 오창읍 각리 653-9
(72) 발명자
제종태
충북 청주시 상당구 용암동 건영아파트 106동 801호
김정수
충청남도 홍성군 홍성읍 월산로30번길 39, 202동 401호 (부영아파트)
(뒷면에 계속)
(74) 대리인
특허법인충현

전체 청구항 수 : 총 6 항

(54) 발명의 명칭 이형고리 화합물 및 이를 포함하는 유기전계발광소자

(57) 요약

본 발명은 신규한 이형고리 화합물 및 이를 발광물질로 포함하는 유기전계 발광소자에 관한 것으로서, 구체적으로 하기 화학식 (1a) 또는 (1b)로 표시되는 이형고리 화합물 및 이를 포함하는 유기전계발광소자는 구동전압, 전류효율 등의 발광특성이 우수하다.



대표도 - 도1

80
70
60
50
40
30
20
10

(72) 발명자

권현중

충청북도 청주시 흥덕구 운천동 1420번지 35통 4
반

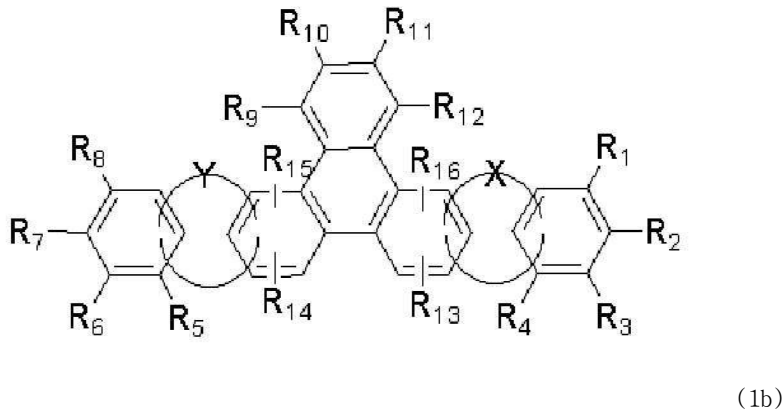
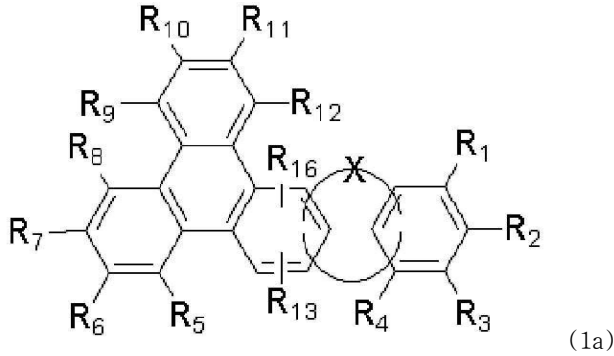
고상원

인천광역시 서구 대평로56번길 32, 101동 1202호
(연희동, 우성아파트)

특허청구의 범위

청구항 1

하기 화학식 (1a) 또는 (1b)로 표시되는 이형고리 화합물:



상기 화학식 (1a) 및 (1b)에서,

X와 Y는 각각 독립적으로 $-NR_{17}$, $-S-$, $-O-$, $-C(R_{17})_2$, $-BR_{17}$, $-Si(R_{17})_2$, $-PR_{17}$ 중에서 선택되며,

R_1 내지 R_{17} 은 각각 독립적으로 수소원자, 중수소원자, 할로젠원자, 탄소수 6 - 40의 치환 또는 비치환의 아릴아미노기, 치환 또는 비치환의 탄소수 3 - 40의 아릴옥시기, 치환 또는 비치환의 탄소수 6 - 40의 아릴기, 치환 또는 비치환의 탄소수 3 - 40의 헤테로아릴기, 게르마늄기, 인, 보론으로부터 선택되고,

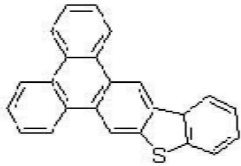
상기 R_1 내지 R_{17} 의 치환기는 수소원자, 중수소 원자, 시아노기, 할로젠원자, 히드록시기, 니트로기, 탄소수 1 - 40의 알킬기, 탄소수 1 - 40의 알콕시기, 탄소수 1 - 40의 알킬아미노기, 탄소수 6 - 40의 아릴아미노기, 탄소수 3 - 40의 헤테로아릴아미노기, 탄소수 1 - 40의 알킬실릴기, 탄소수 6 - 40의 아릴실릴기, 탄소수 6 - 40의 아릴기, 탄소수 3 - 40의 아릴옥시기, 탄소수 3 - 40의 헤테로아릴기, 게르마늄기, 인, 보론으로 이루어진 군으로부터 하나 이상 선택되며,

이때 상기 치환기는 서로 결합하여 포화 혹은 불포화 고리를 형성해도 좋고, 펜던트 방법으로 함께 부착되거나 또는 융합(fused)될 수 있다.

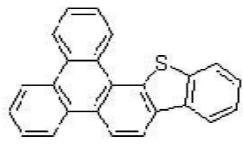
청구항 2

제1항에 있어서,

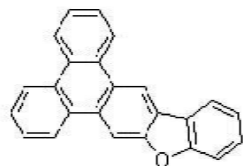
하기 화학식 2 내지 화학식 426으로 표시되는 군으로부터 선택된 어느 하나의 화합물인 것을 특징으로 하는 이형고리 화합물:



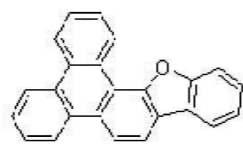
[화학식 2]



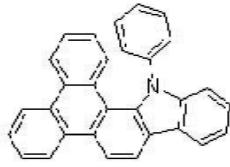
[화학식 3]



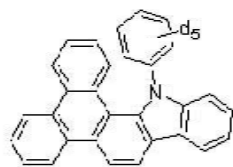
[화학식 4]



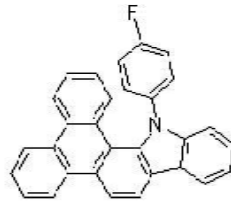
[화학식 5]



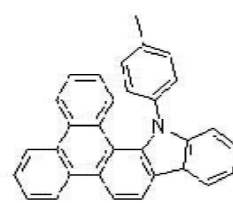
[화학식 6]



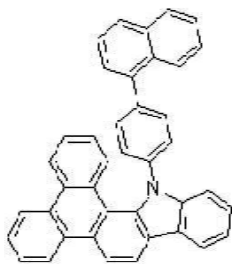
[화학식 7]



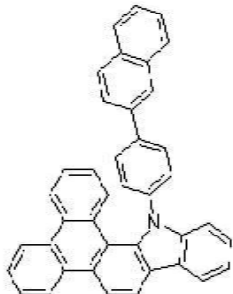
[화학식 8]



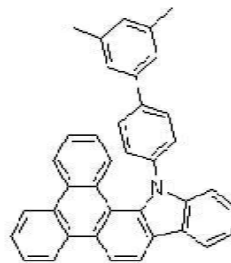
[화학식 9]



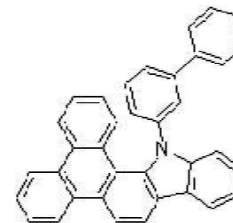
[화학식 10]



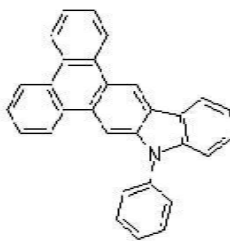
[화학식 11]



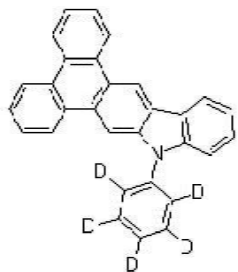
[화학식 12]



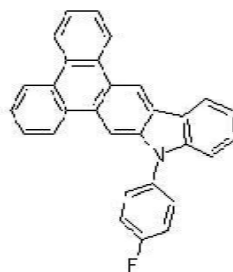
[화학식 13]



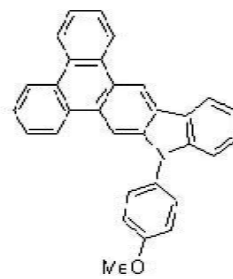
[화학식 14]



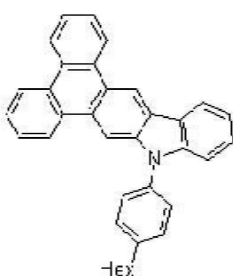
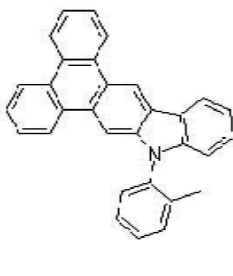
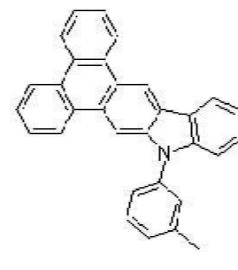
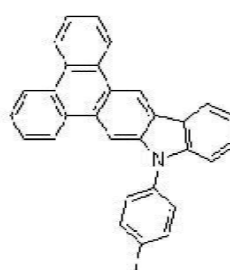
[화학식 15]



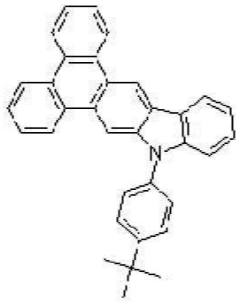
[화학식 16]



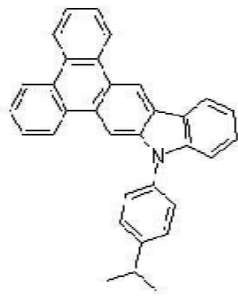
[화학식 17]



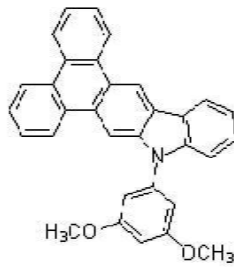
[화학식 18]



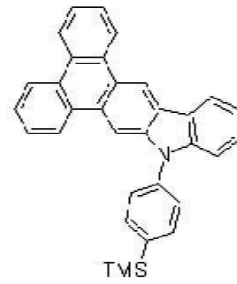
[화학식 19]



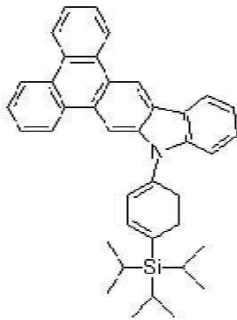
[화학식 20]



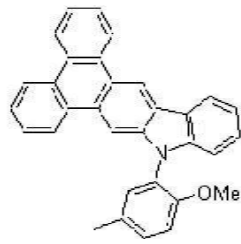
[화학식 21]



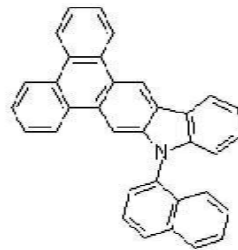
[화학식 22]



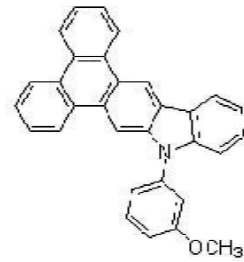
[화학식 23]



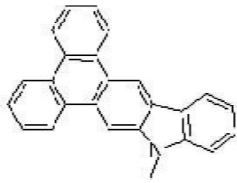
[화학식 24]



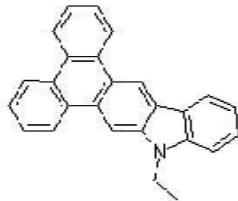
[화학식 25]



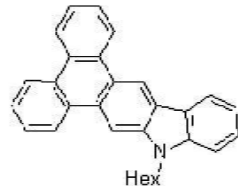
[화학식 26]



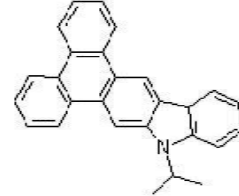
[화학식 27]



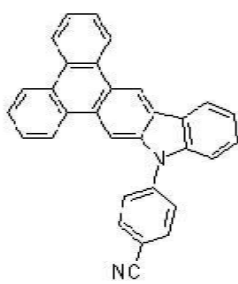
[화학식 28]



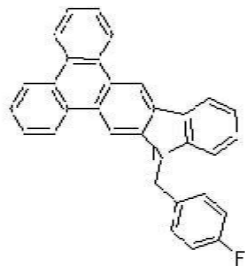
[화학식 29]



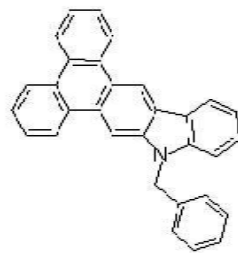
[화학식 30]



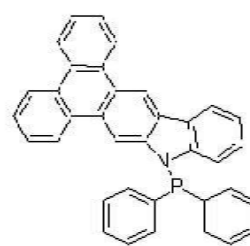
[화학식 31]



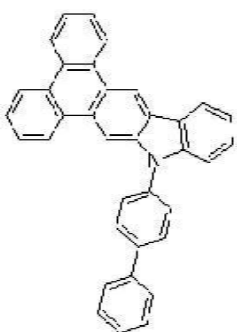
[화학식 32]



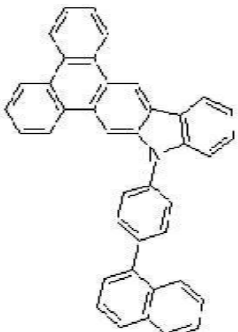
[화학식 33]



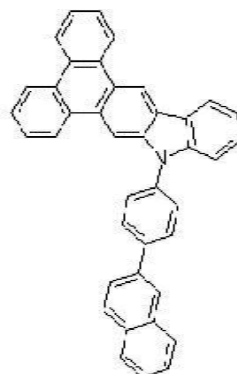
[화학식 34]



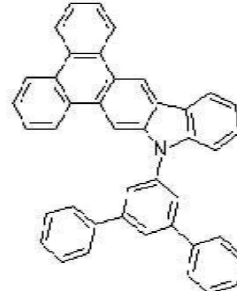
[화학식 35]



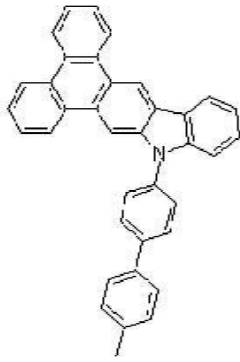
[화학식 36]



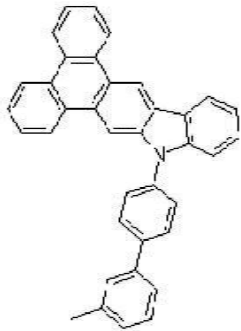
[화학식 37]



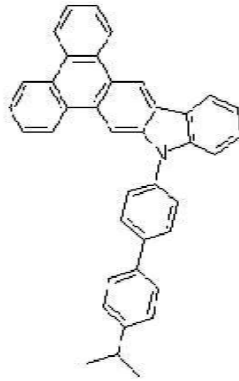
[화학식 38]



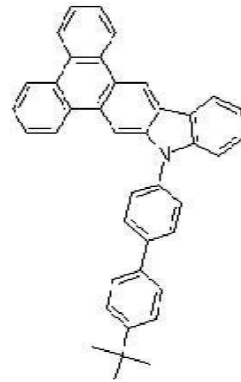
[화학식 39]



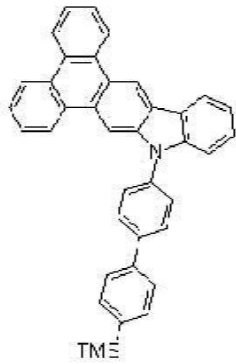
[화학식 40]



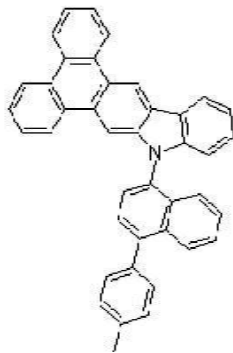
[화학식 42]



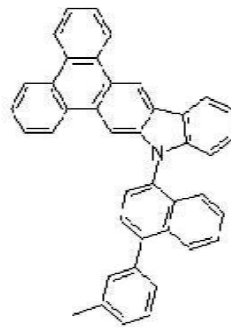
[화학식 43]



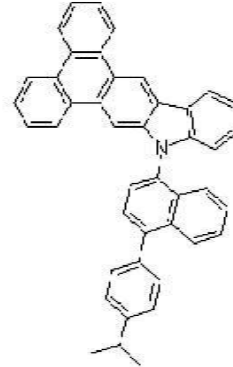
[화학식 44]



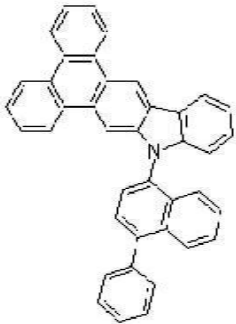
[화학식 45]



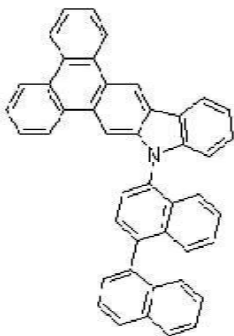
[화학식 46]



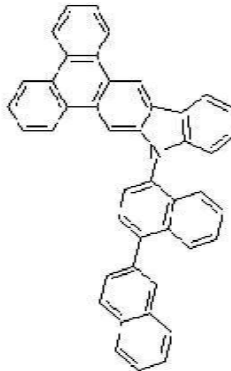
[화학식 47]



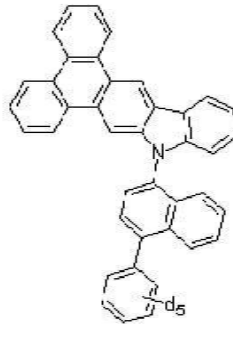
[화학식 48]



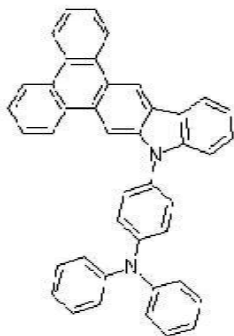
[화학식 49]



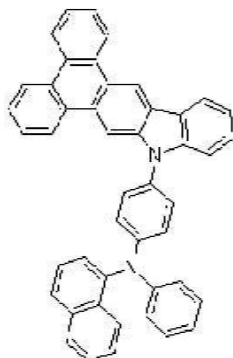
[화학식 50]



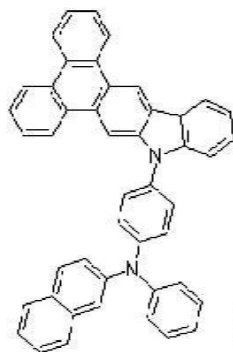
[화학식 51]



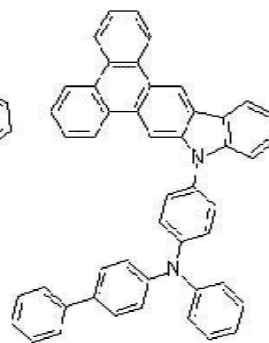
[화학식 52]



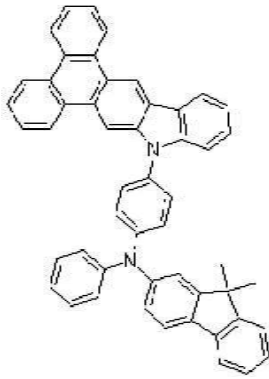
[화학식 53]



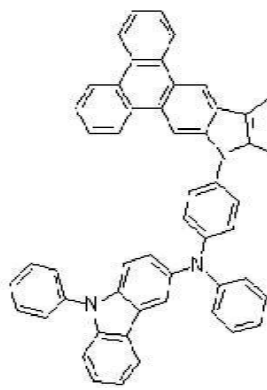
[화학식 54]



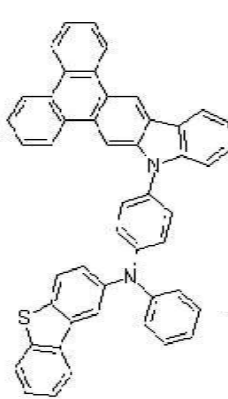
[화학식 55]



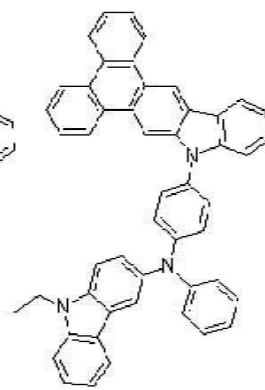
[화학식 56]



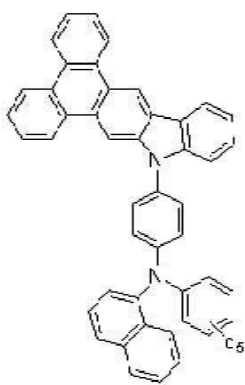
[화학식 57]



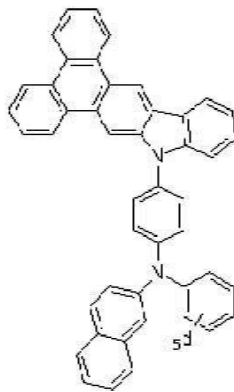
[화학식 58]



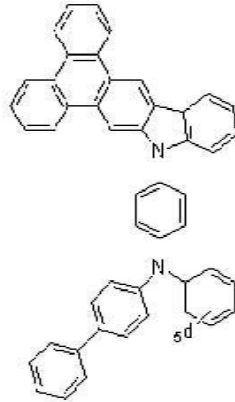
[화학식 59]



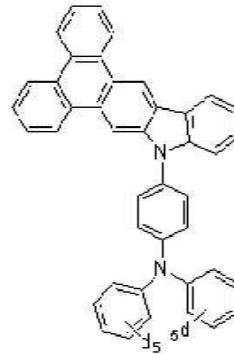
[화학식 60]



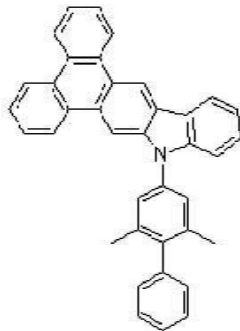
[화학식 61]



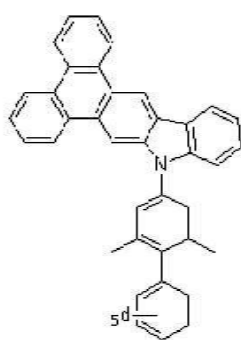
[화학식 62]



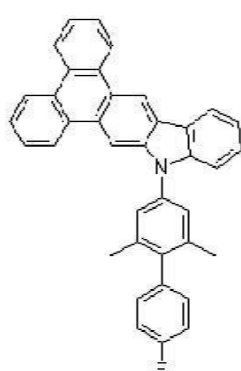
[화학식 63]



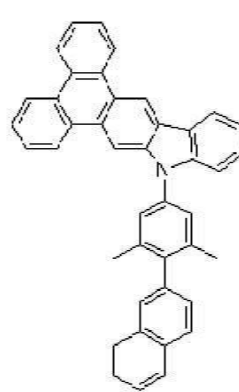
[화학식 64]



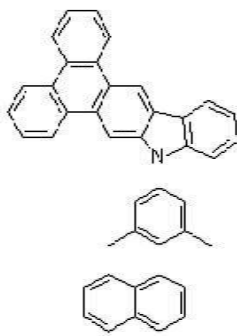
[화학식 65]



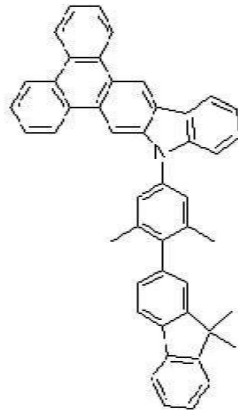
[화학식 66]



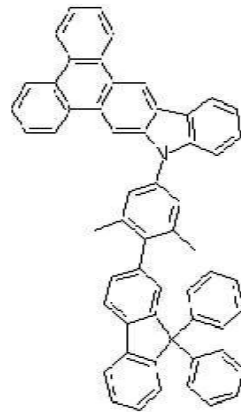
[화학식 67]



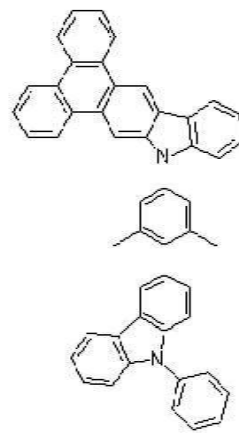
[화학식 68]



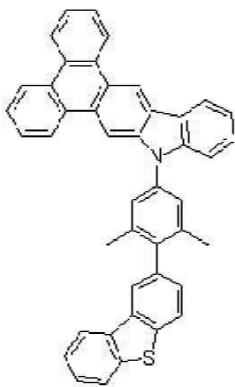
[화학식 69]



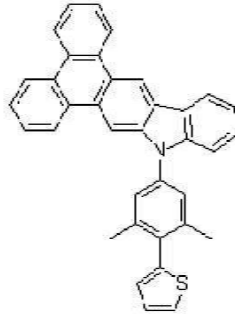
[화학식 70]



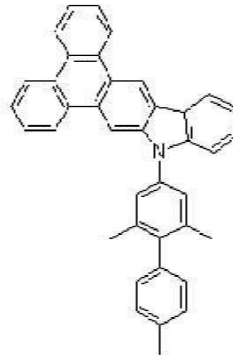
[화학식 71]



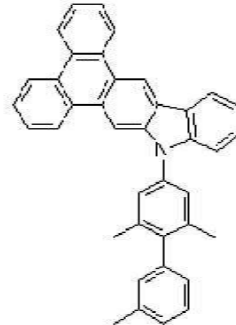
[화학식 72]



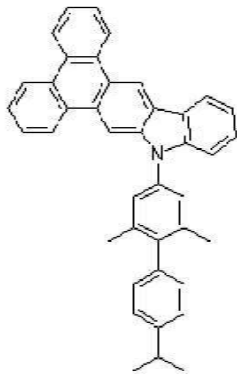
[화학식 73]



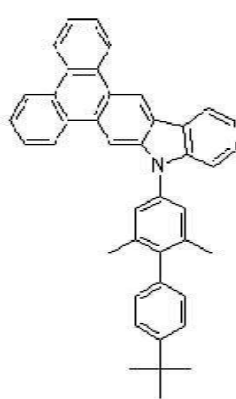
[화학식 74]



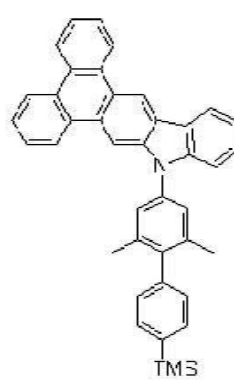
[화학식 75]



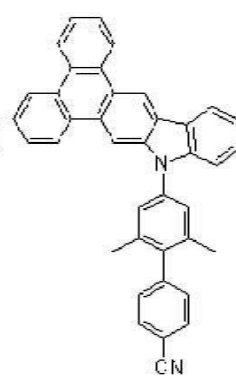
[화학식 76]



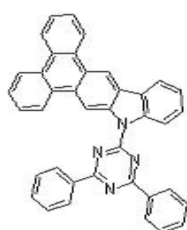
[화학식 77]



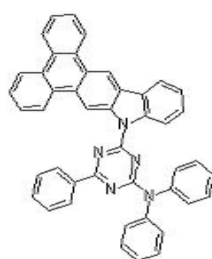
[화학식 78]



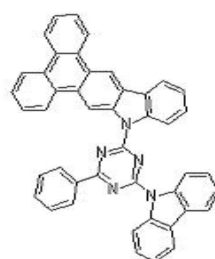
[화학식 79]



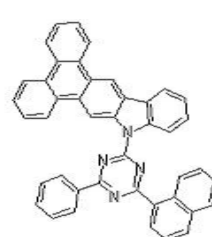
[화학식 80]



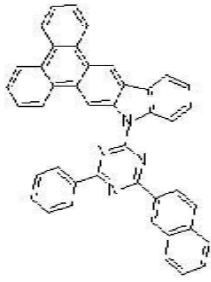
[화학식 81]



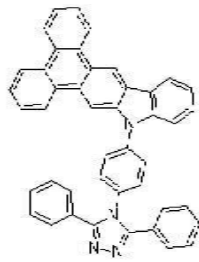
[화학식 82]



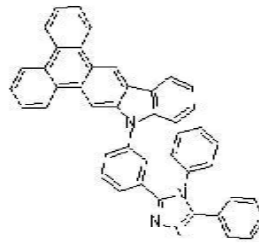
[화학식 83]



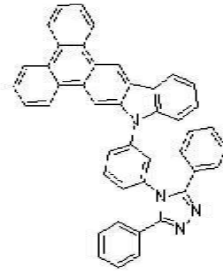
[화학식 84]



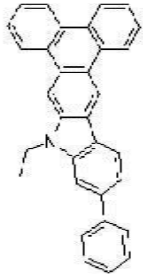
[화학식 85]



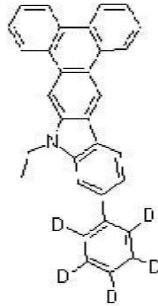
[화학식 86]



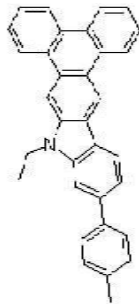
[화학식 87]



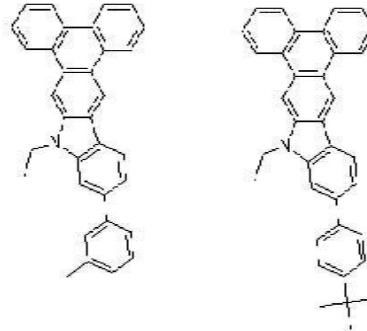
[화학식 88]



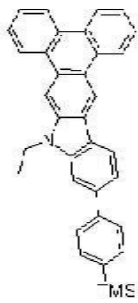
[화학식 89]



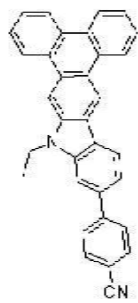
[화학식 90]



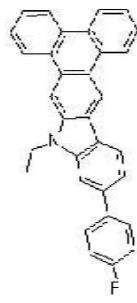
[화학식 91]



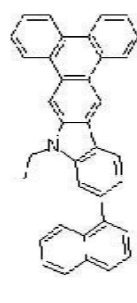
[화학식 92]



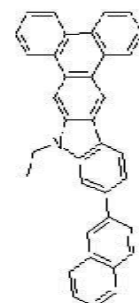
[화학식 93]



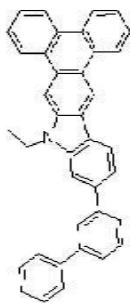
[화학식 94]



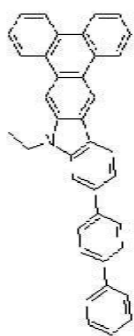
[화학식 95]



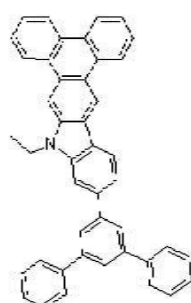
[화학식 96]



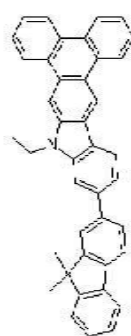
[화학식 97]



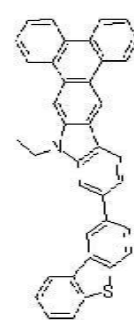
[화학식 98]



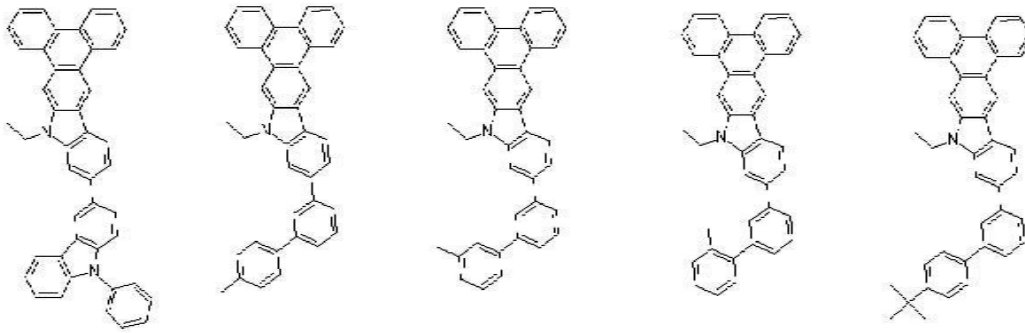
[화학식 99]



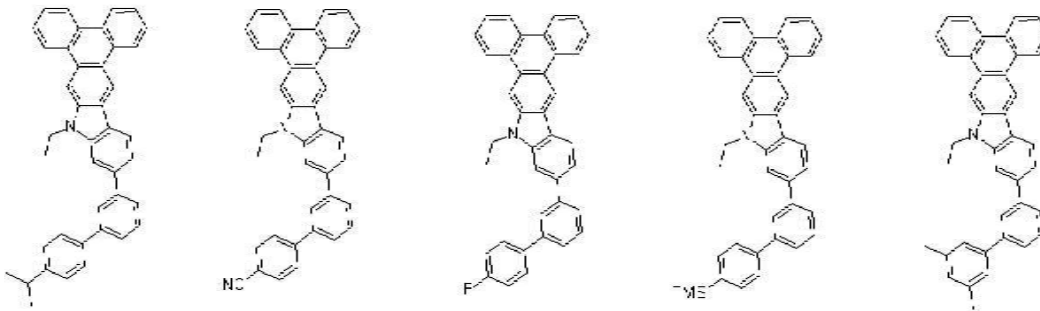
[화학식 100]



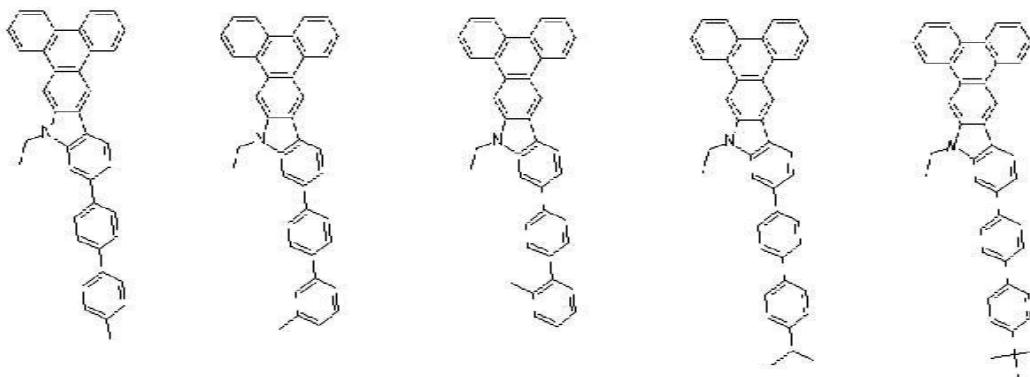
[화학식 101] [화학식 102] [화학식 103] [화학식 104] [화학식 105]



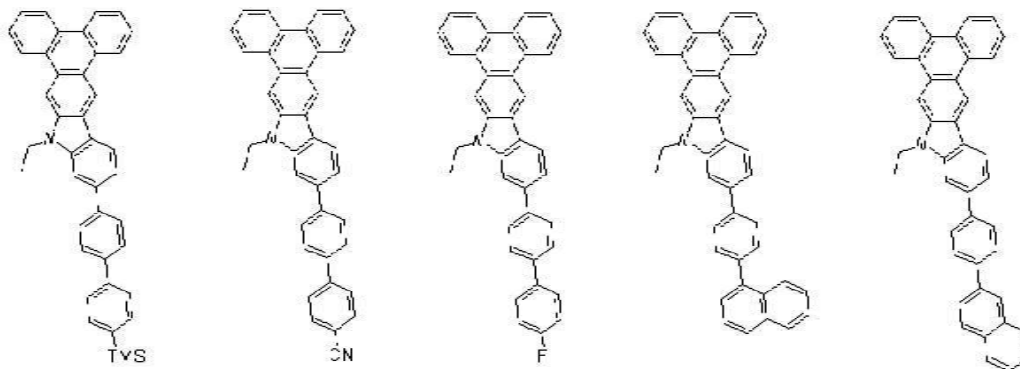
[화학식 106] [화학식 107] [화학식 108] [화학식 109] [화학식 110]



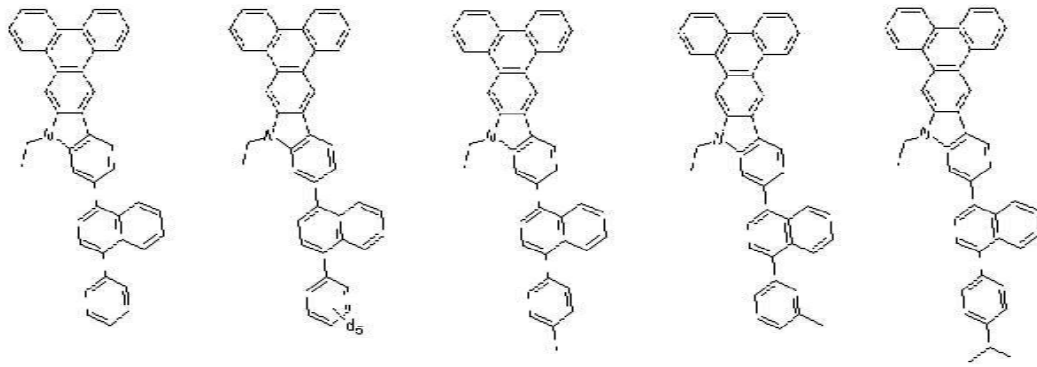
[화학식 111] [화학식 112] [화학식 113] [화학식 114] [화학식 115]



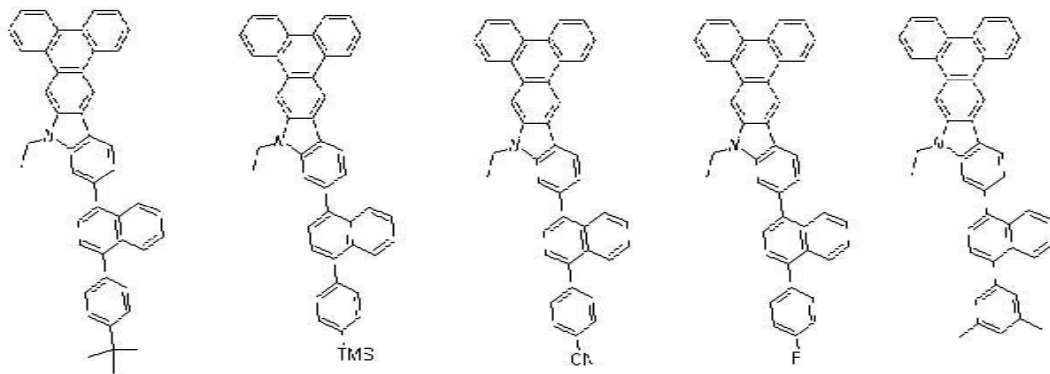
[화학식 116] [화학식 117] [화학식 118] [화학식 119] [화학식 120]



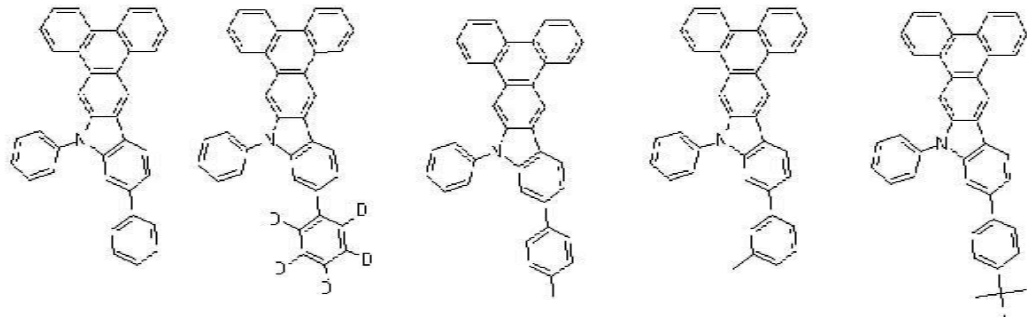
[화학식 121] [화학식 122] [화학식 123] [화학식 124] [화학식 125]



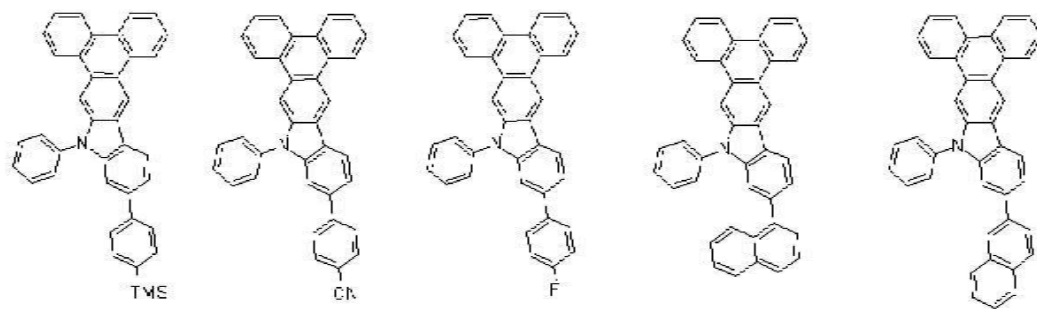
[화학식 126] [화학식 127] [화학식 128] [화학식 129] [화학식 130]



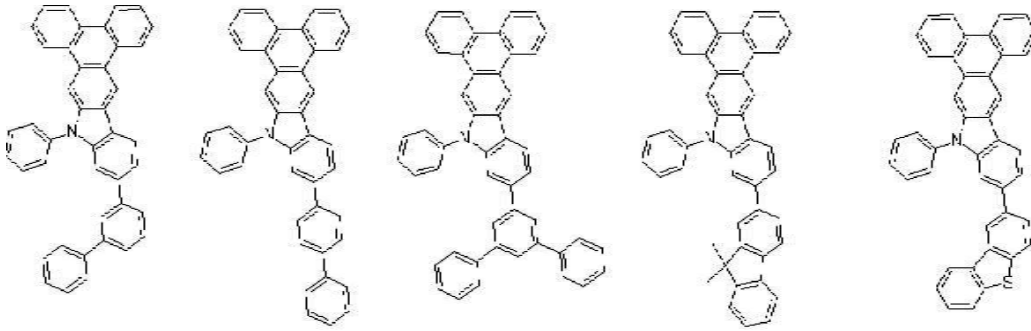
[화학식 131] [화학식 132] [화학식 133] [화학식 134] [화학식 135]



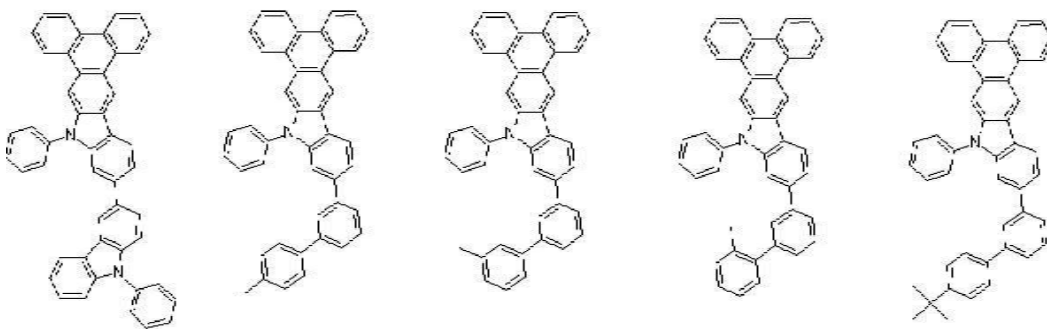
[화학식 136] [화학식 137] [화학식 138] [화학식 139] [화학식 140]



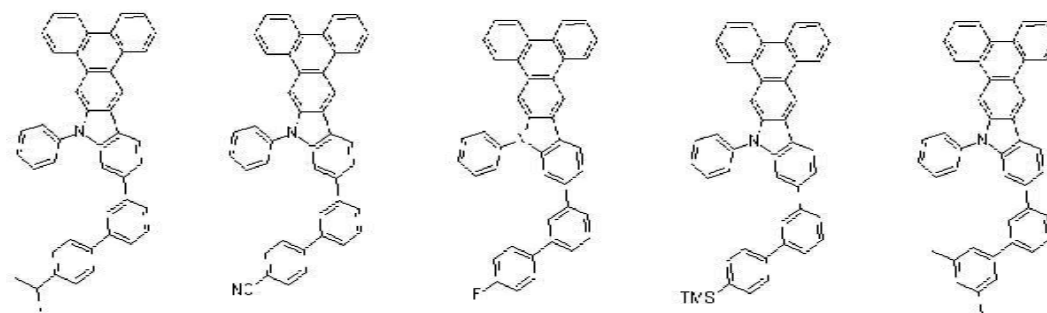
[화학식 141] [화학식 142] [화학식 143] [화학식 144] [화학식 145]



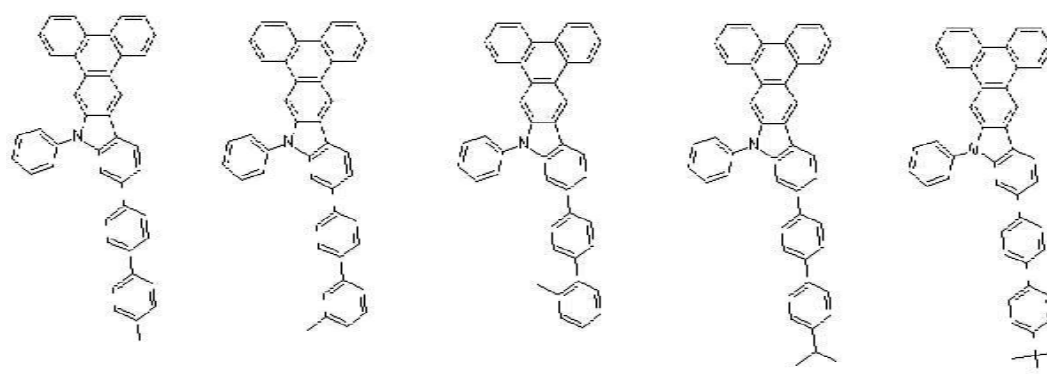
[화학식 146] [화학식 147] [화학식 148] [화학식 149] [화학식 150]



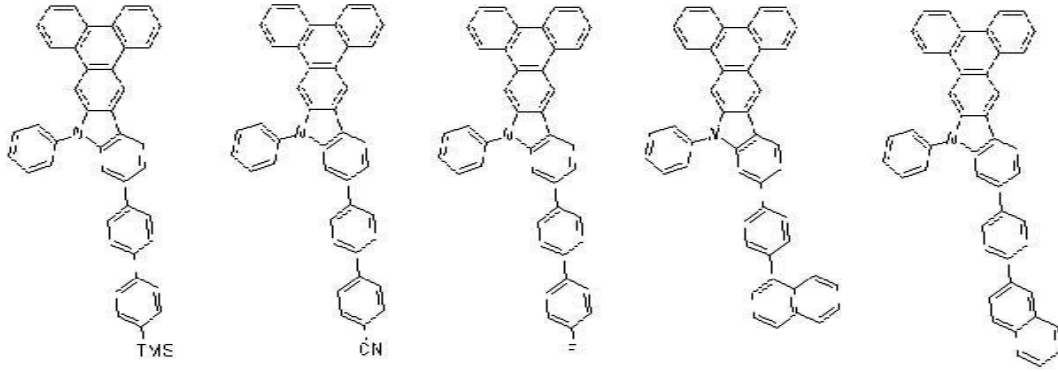
[화학식 151] [화학식 152] [화학식 153] [화학식 154] [화학식 155]



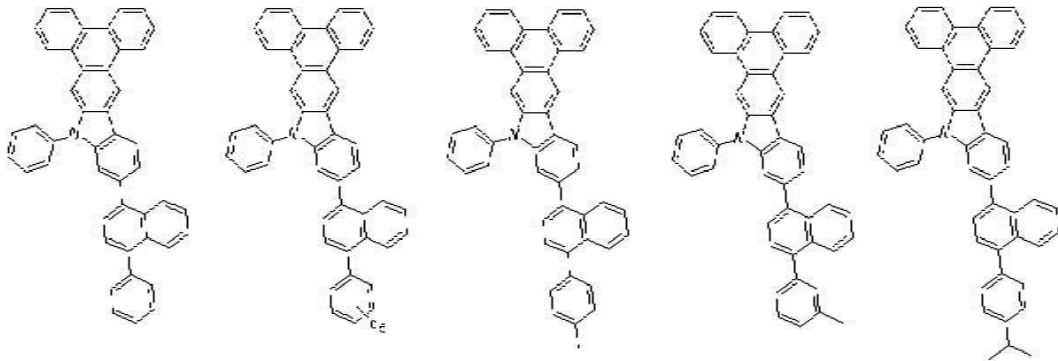
[화학식 156] [화학식 157] [화학식 158] [화학식 159] [화학식 160]



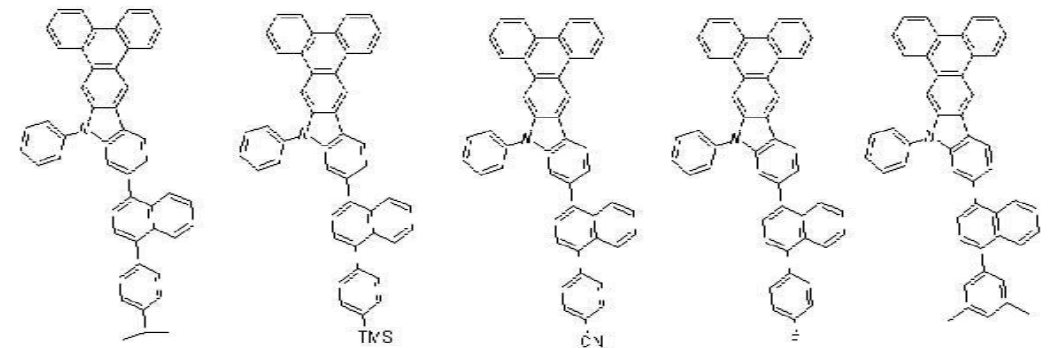
[화학식 161] [화학식 162] [화학식 163] [화학식 164] [화학식 165]



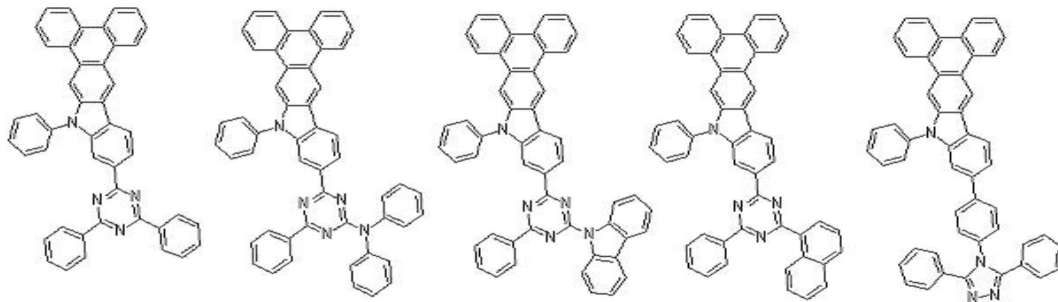
[화학식 166] [화학식 167] [화학식 168] [화학식 169] [화학식 170]



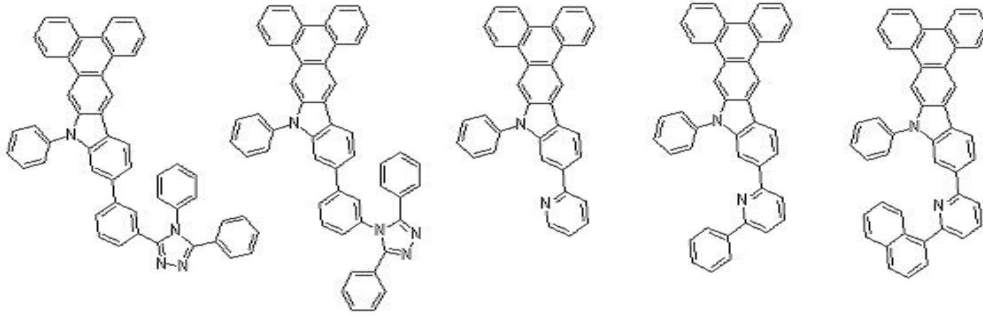
[화학식 171] [화학식 172] [화학식 173] [화학식 174] [화학식 175]



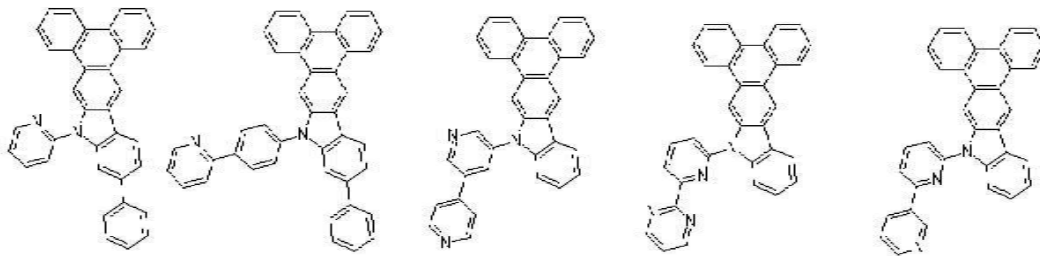
[화학식 176] [화학식 177] [화학식 178] [화학식 179] [화학식 180]



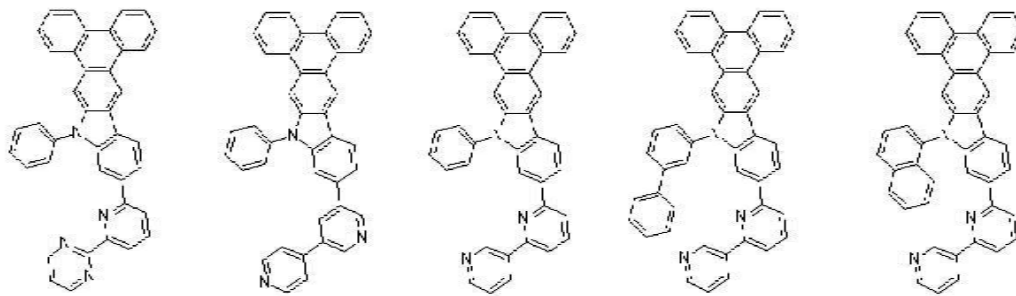
[화학식 181] [화학식 182] [화학식 183] [화학식 184] [화학식 185]



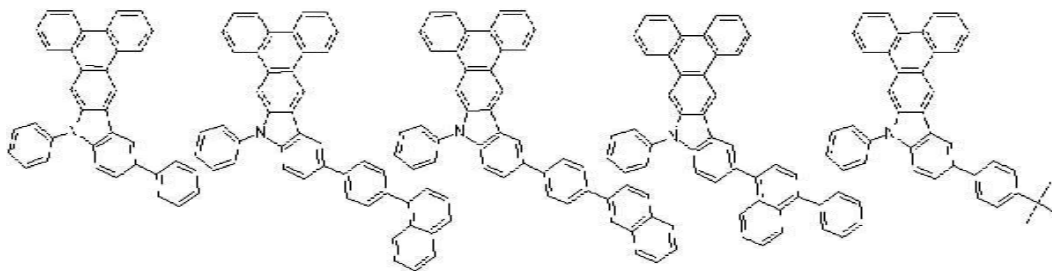
[화학식 186] [화학식 187] [화학식 188] [화학식 189] [화학식 190]



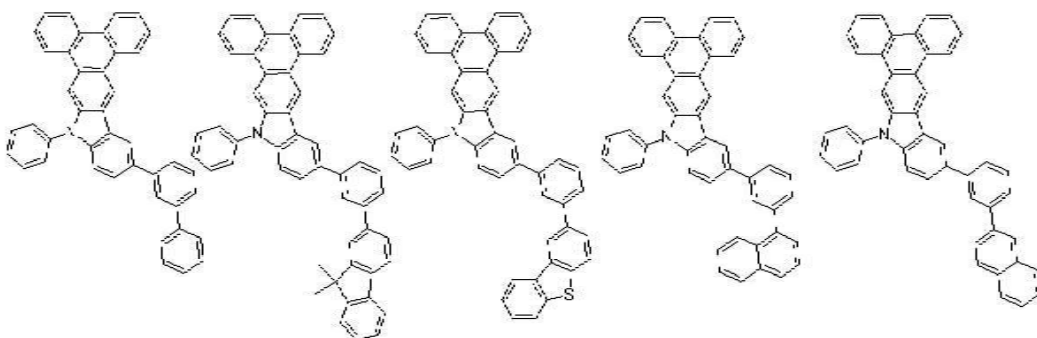
[화학식 191] [화학식 192] [화학식 193] [화학식 194] [화학식 195]



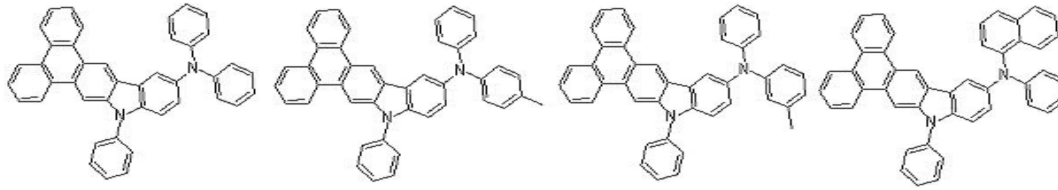
[화학식 196] [화학식 197] [화학식 198] [화학식 199] [화학식 200]



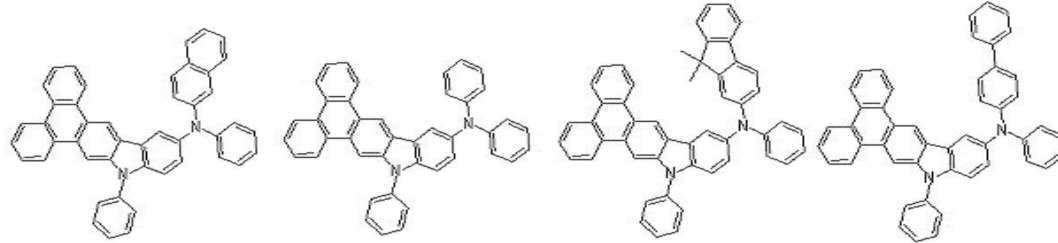
[화학식 201] [화학식 202] [화학식 203] [화학식 204] [화학식 205]



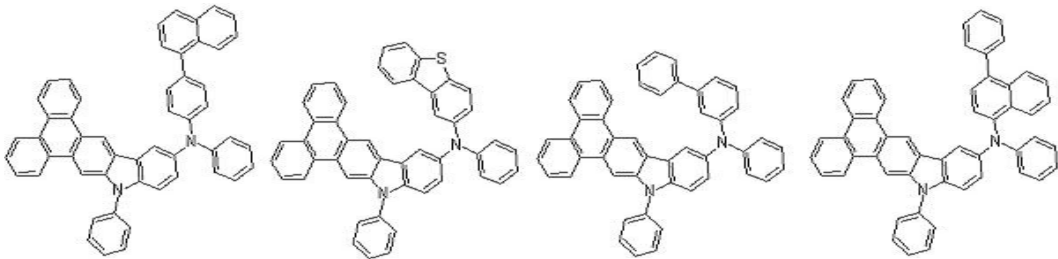
[화학식 206] [화학식 207] [화학식 208] [화학식 209] [화학식 210]



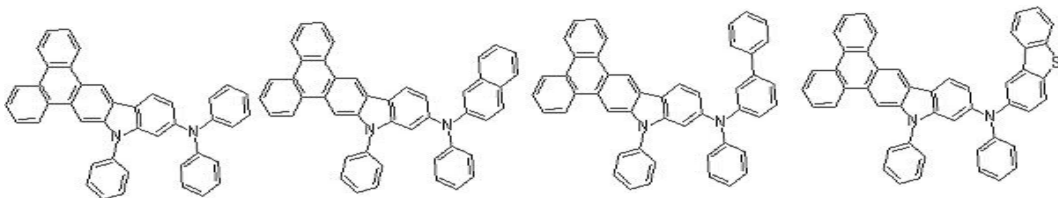
[화학식 211] [화학식 212] [화학식 213] [화학식 214]



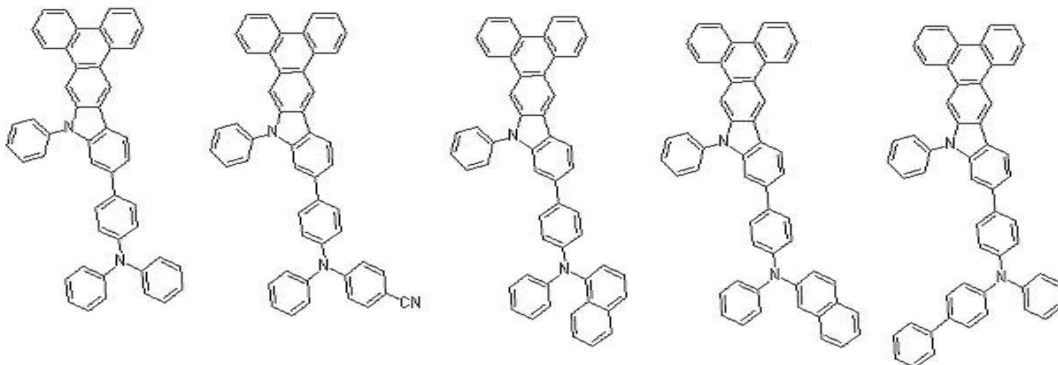
[화학식 215] [화학식 216] [화학식 217] [화학식 218]



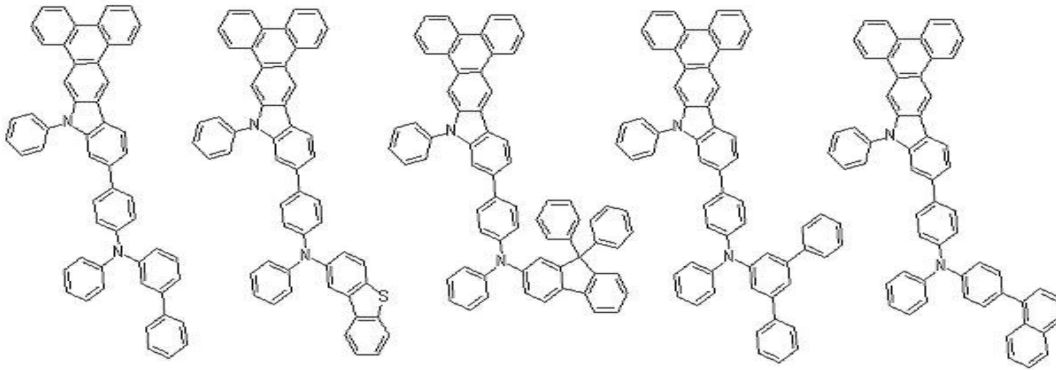
[화학식 219] [화학식 220] [화학식 221] [화학식 222]



[화학식 223] [화학식 224] [화학식 225] [화학식 226]



[화학식 227] [화학식 228] [화학식 229] [화학식 230] [화학식 231]



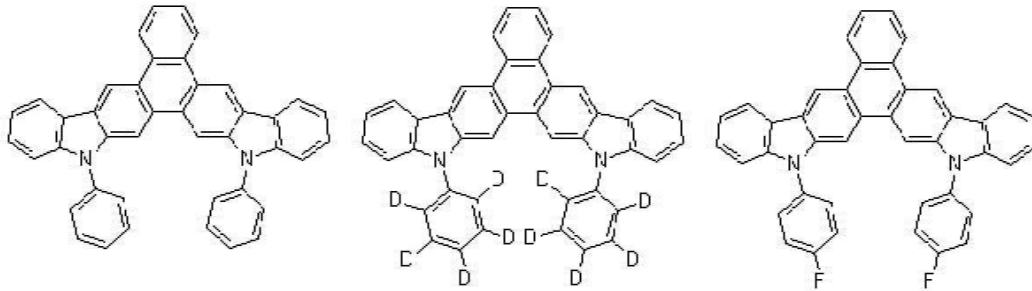
[화학식 233]

[화학식 234]

[화학식 235]

[화학식 236]

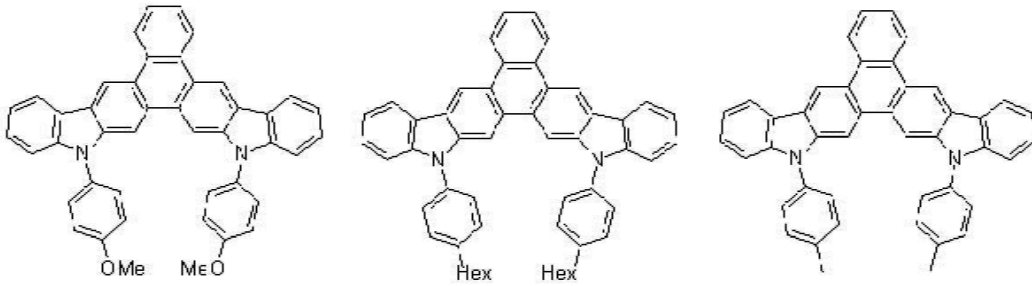
[화학식 232]



[화학식 237]

[화학식 238]

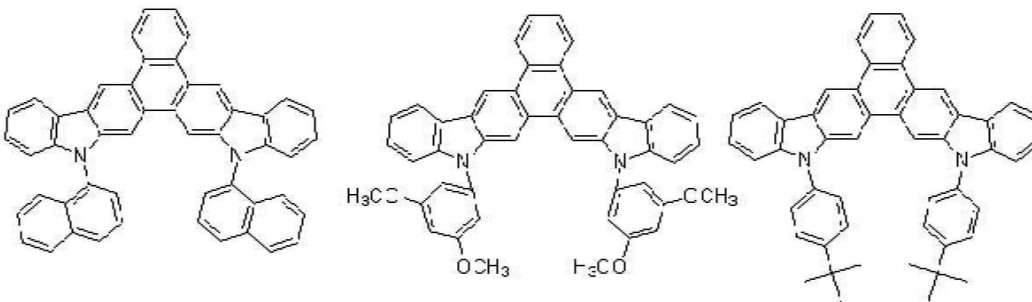
[화학식 239]



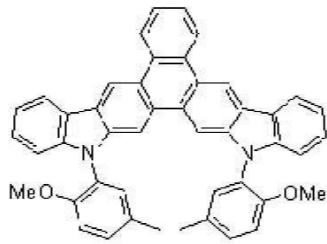
[화학식 240]

[화학식 241]

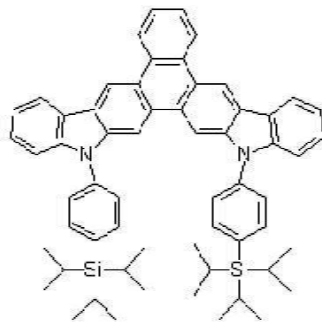
[화학식 242]



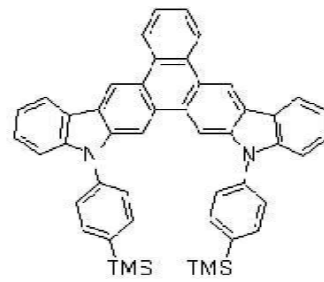
[화학식 243]



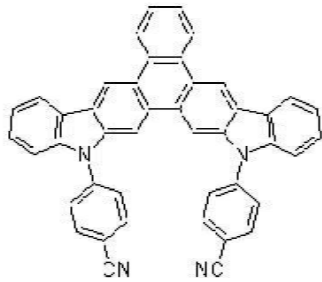
[화학식 244]



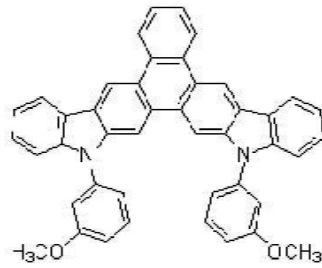
[화학식 245]



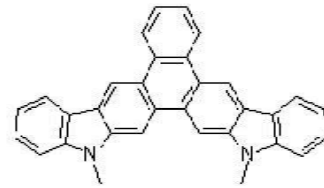
[화학식 246]



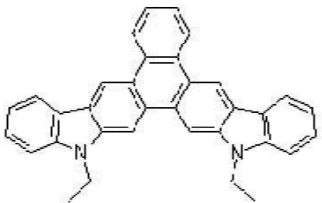
[화학식 247]



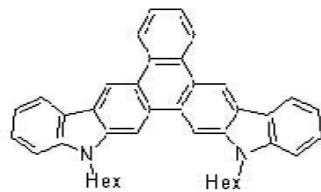
[화학식 248]



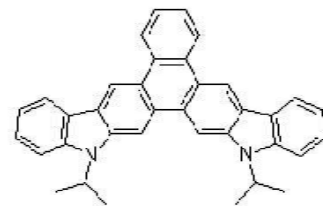
[화학식 249]



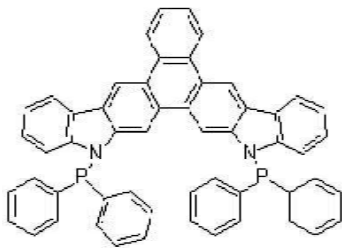
[화학식 250]



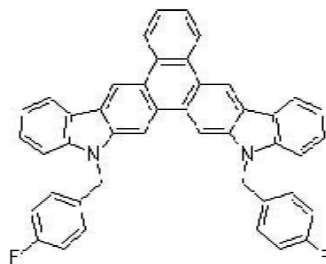
[화학식 251]



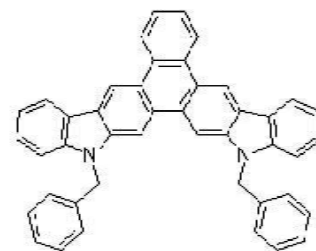
[화학식 252]



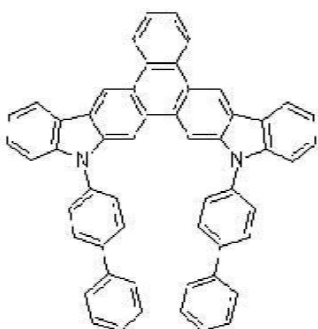
[화학식 253]



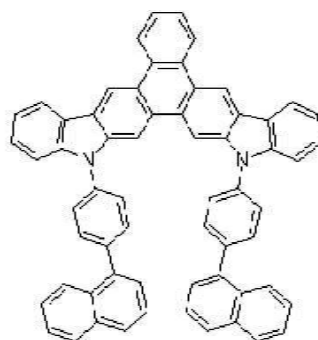
[화학식 254]



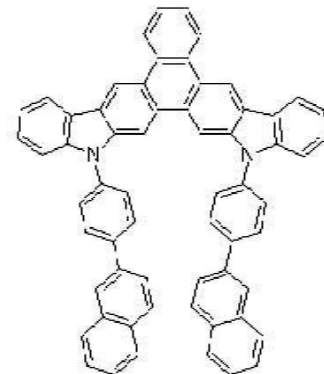
[화학식 255]



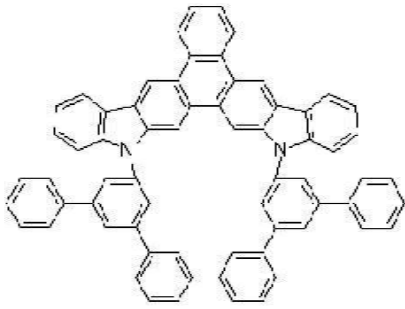
[화학식 256]



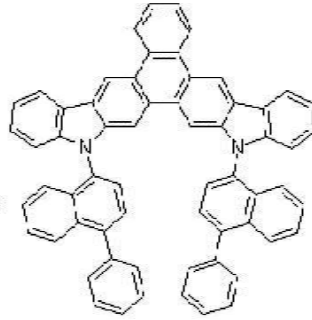
[화학식 257]



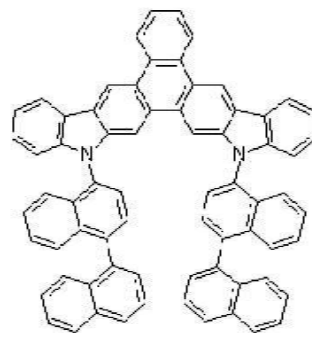
[화학식 258]



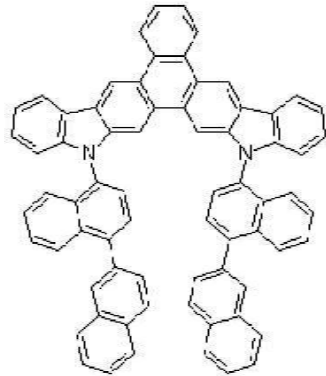
[화학식 259]



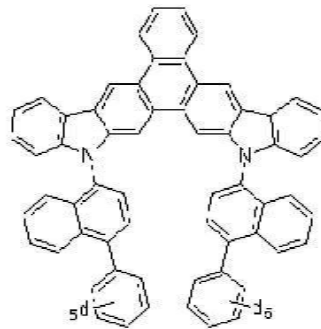
[화학식 260]



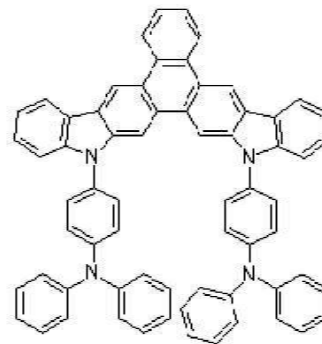
[화학식 261]



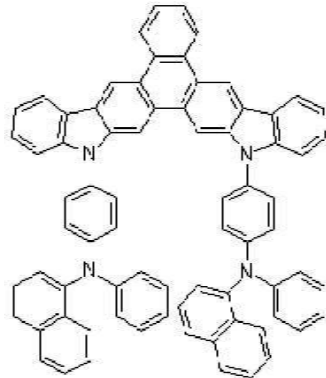
[화학식 262]



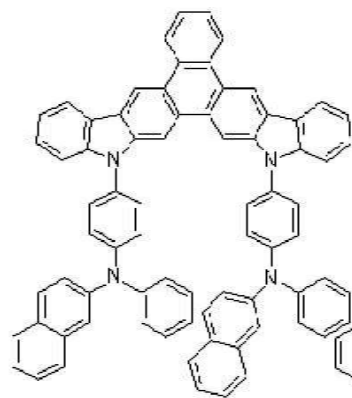
[화학식 263]



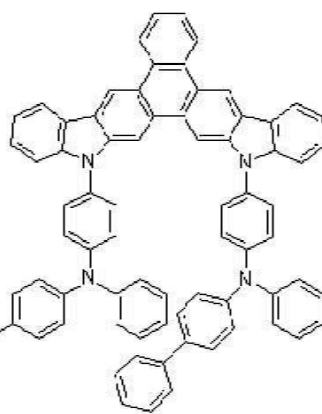
[화학식 264]



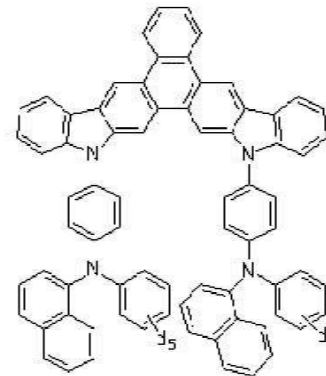
[화학식 265]



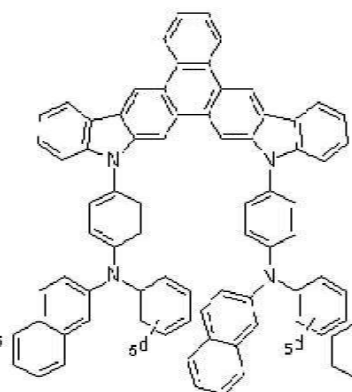
[화학식 266]



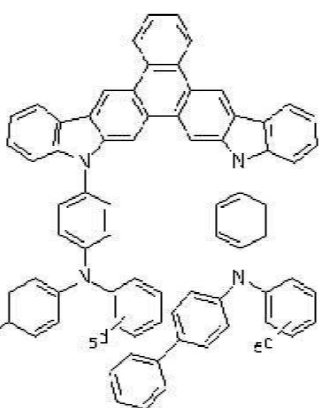
[화학식 267]



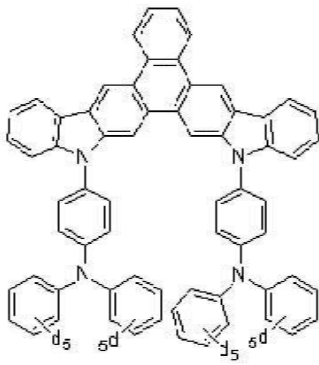
[화학식 268]



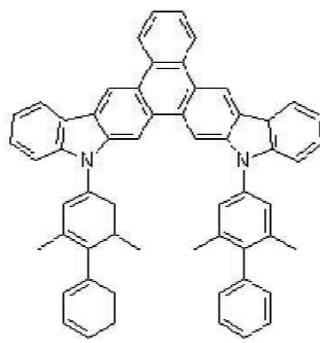
[화학식 269]



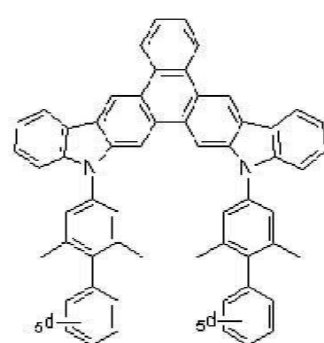
[화학식 270]



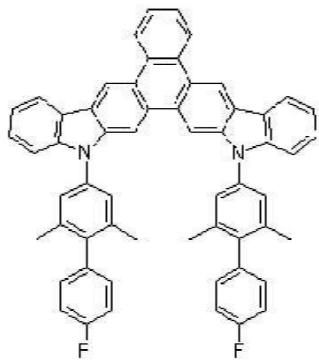
[화학식 271]



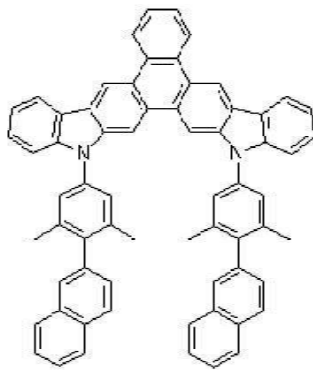
[화학식 272]



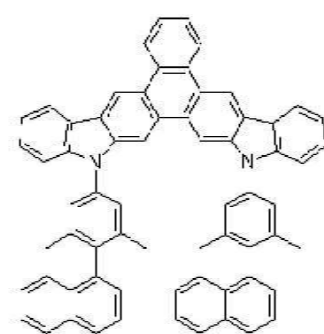
[화학식 273]



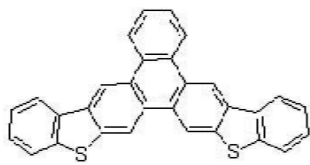
[화학식 274]



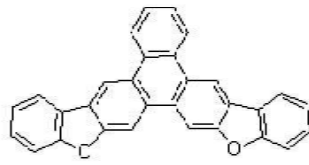
[화학식 275]



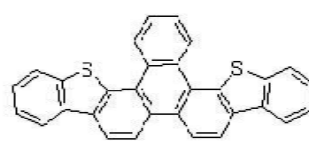
[화학식 276]



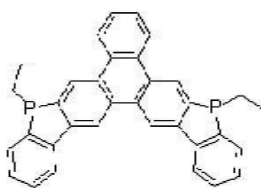
[화학식 277]



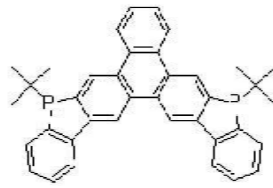
[화학식 278]



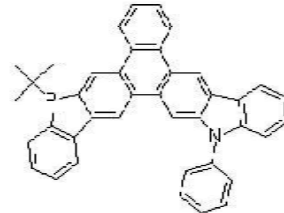
[화학식 279]



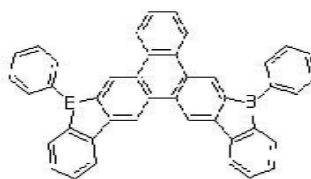
[화학식 280]



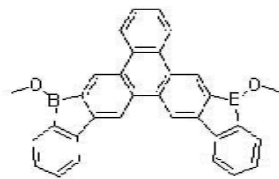
[화학식 281]



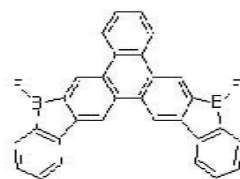
[화학식 282]



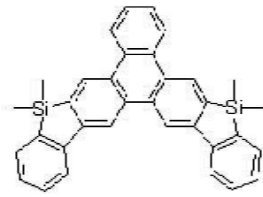
[화학식 283]



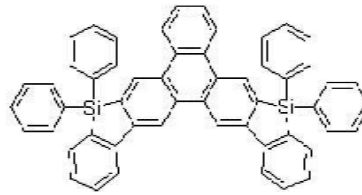
[화학식 284]



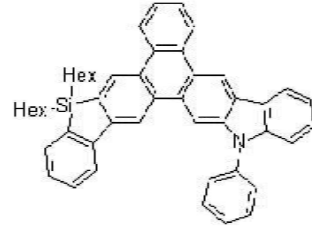
[화학식 285]



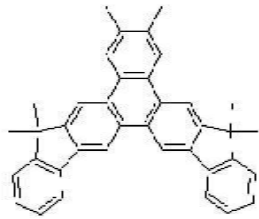
[화학식 286]



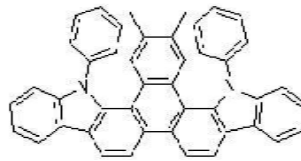
[화학식 287]



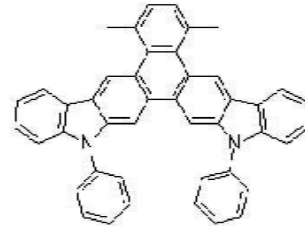
[화학식 288]



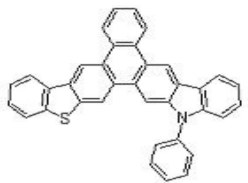
[화학식 289]



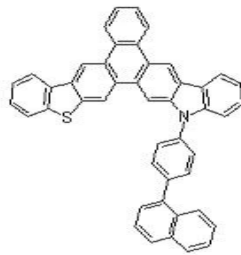
[화학식 290]



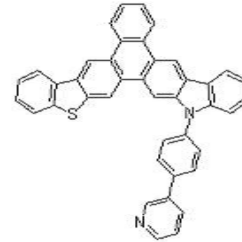
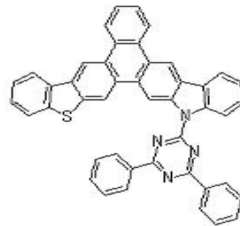
[화학식 291]



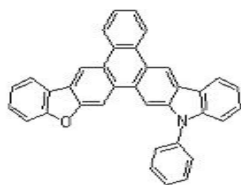
[화학식 292]



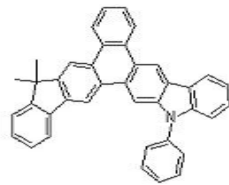
[화학식 293]



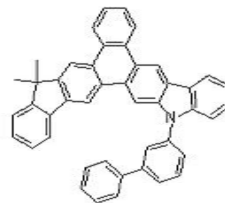
[화학식 294]



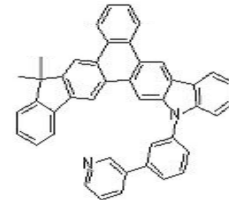
[화학식 295]



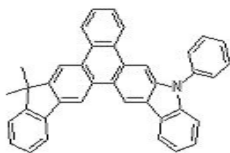
[화학식 296]



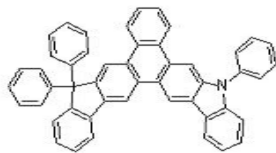
[화학식 297]



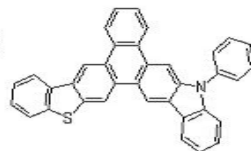
[화학식 298]



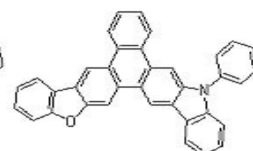
[화학식 299]



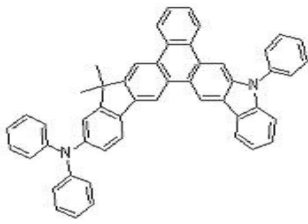
[화학식 300]



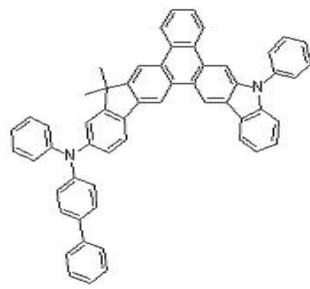
[화학식 301]



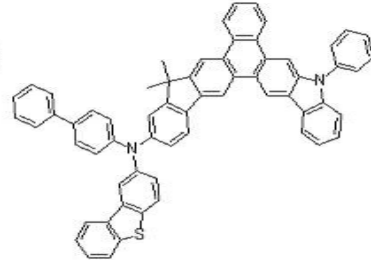
[화학식 302]



[화학식 303]

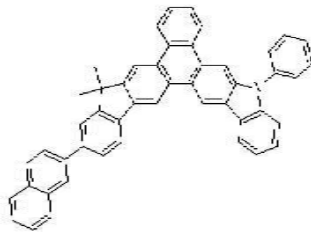


[화학식 304]

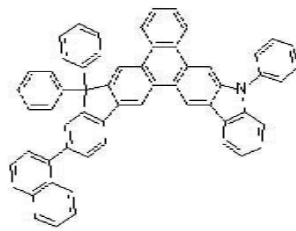


[화학식 305]

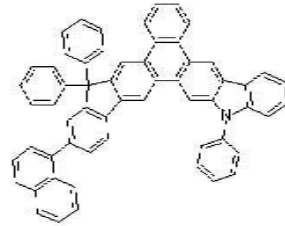
[화학식 306]



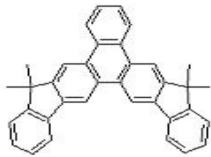
[화학식 307]



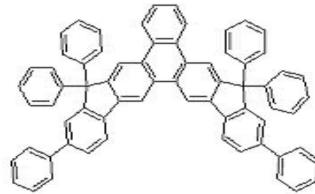
[화학식 308]



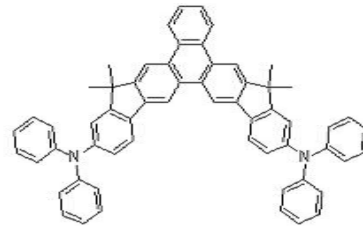
[화학식 309]



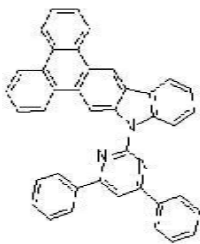
[화학식 310]



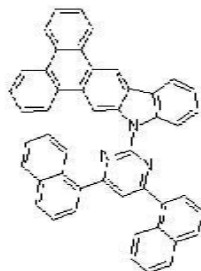
[화학식 311]



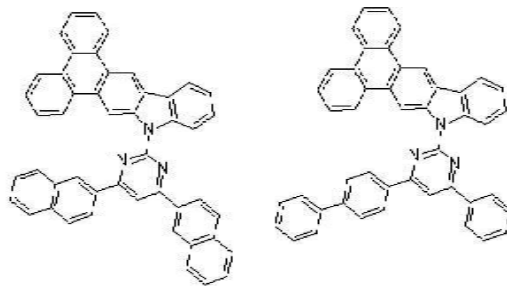
[화학식 312]



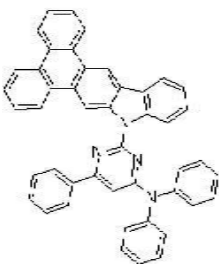
[화학식 313]



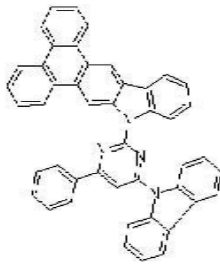
[화학식 314]



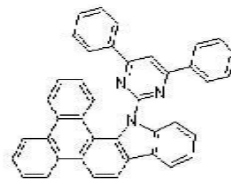
[화학식 315]



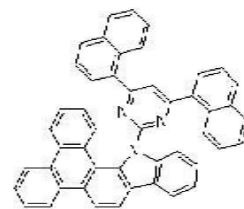
[화학식 316]



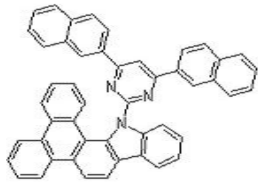
[화학식 317]



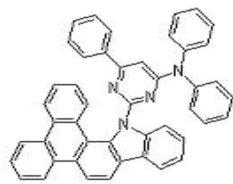
[화학식 318]



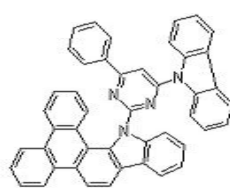
[화학식 319]



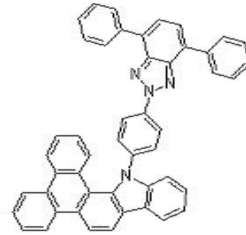
[화학식 320]



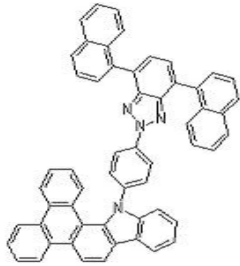
[화학식 321]



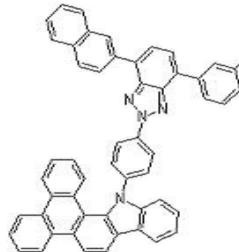
[화학식 322]



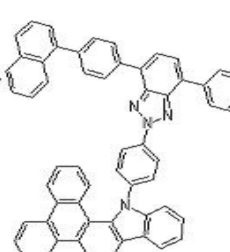
[화학식 323]



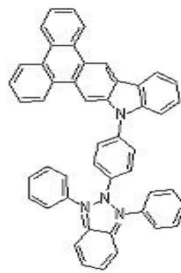
[화학식 324]



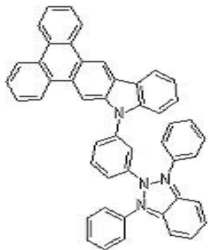
[화학식 325]



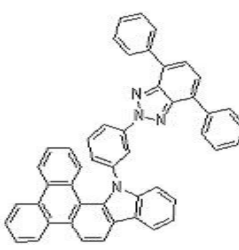
[화학식 326]



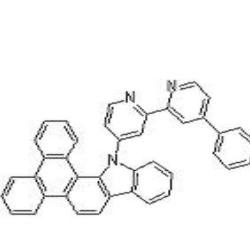
[화학식 327]



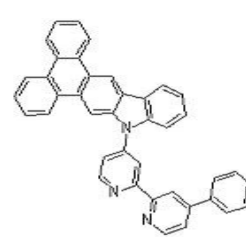
[화학식 328]



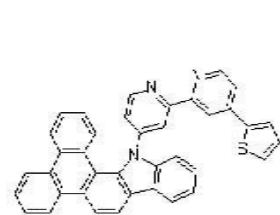
[화학식 329]



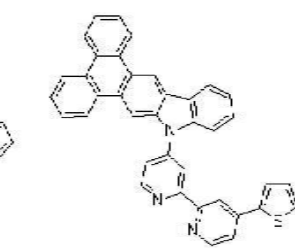
[화학식 330]



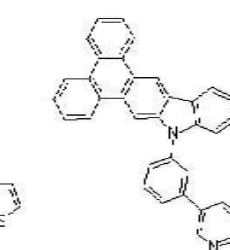
[화학식 331]



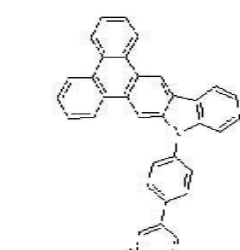
[화학식 332]



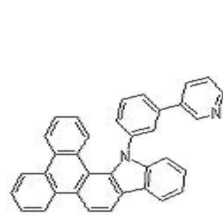
[화학식 333]



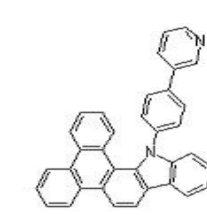
[화학식 334]



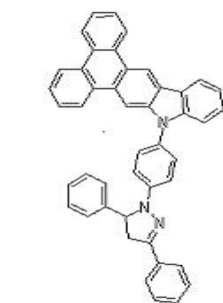
[화학식 335]



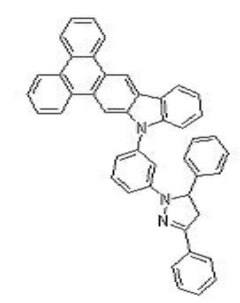
[화학식 336]



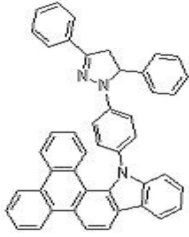
[화학식 337]



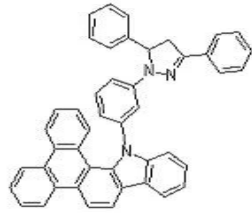
[화학식 338]



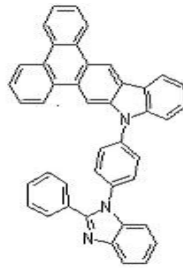
[화학식 339]



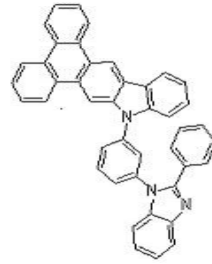
[화학식 340]



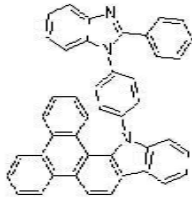
[화학식 341]



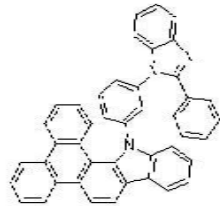
[화학식 342]



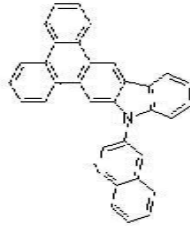
[화학식 343]



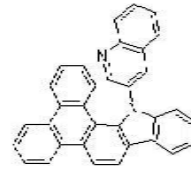
[화학식 344]



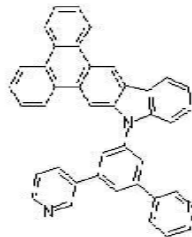
[화학식 345]



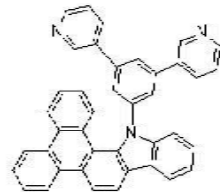
[화학식 346]



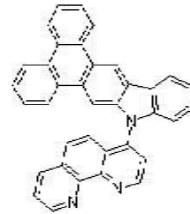
[화학식 347]



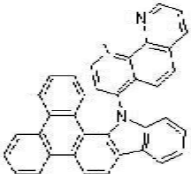
[화학식 348]



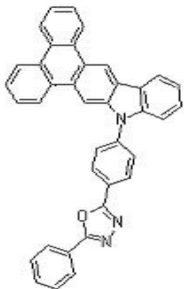
[화학식 349]



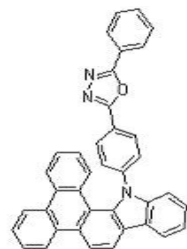
[화학식 350]



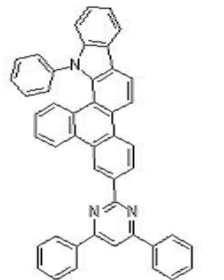
[화학식 351]



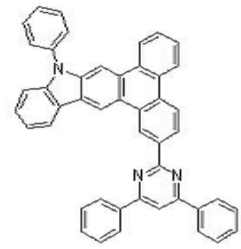
[화학식 352]



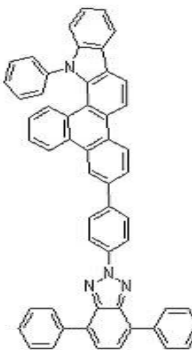
[화학식 353]



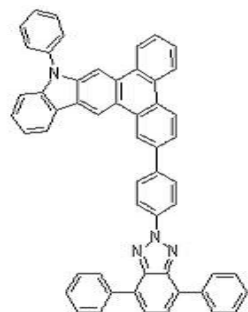
[화학식 354]



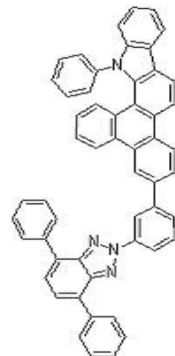
[화학식 355]



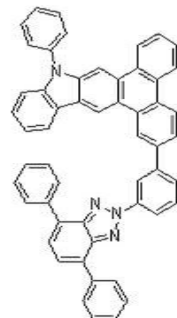
[화학식 356]



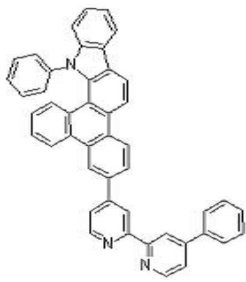
[화학식 357]



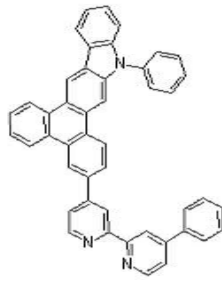
[화학식 358]



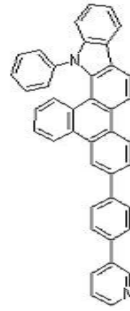
[화학식 359]



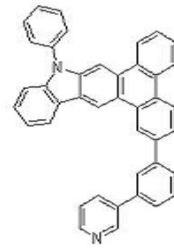
[화학식 360]



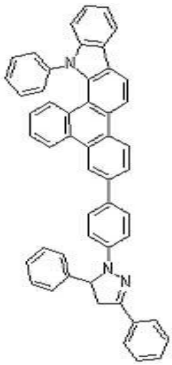
[화학식 361]



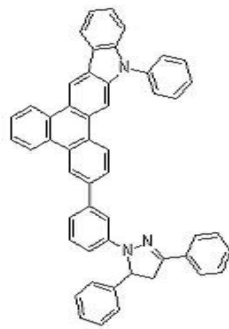
[화학식 362]



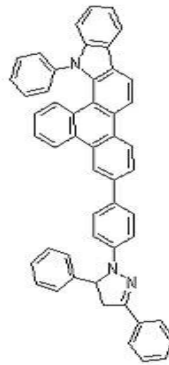
[화학식 363]



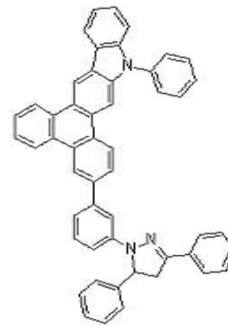
[화학식 364]



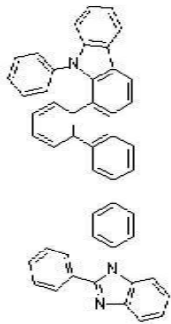
[화학식 365]



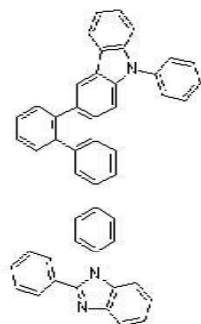
[화학식 366]



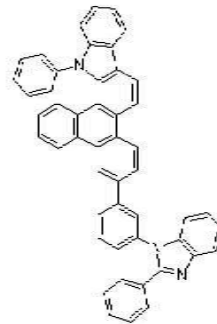
[화학식 367]



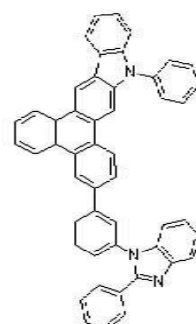
[화학식 368]



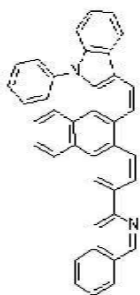
[화학식 369]



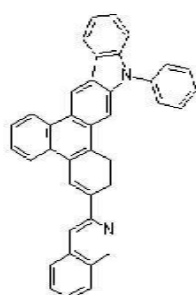
[화학식 370]



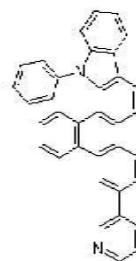
[화학식 371]



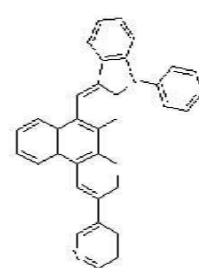
[화학식 372]



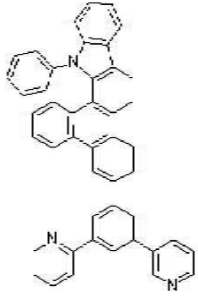
[화학식 373]



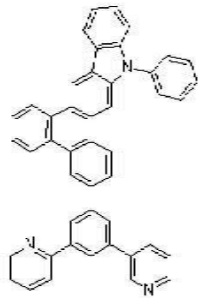
[화학식 374]



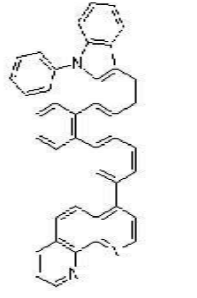
[화학식 375]



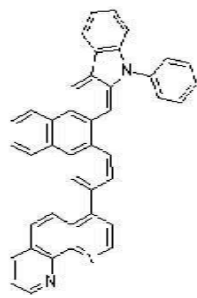
[화학식 376]



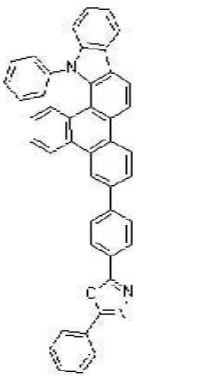
[화학식 377]



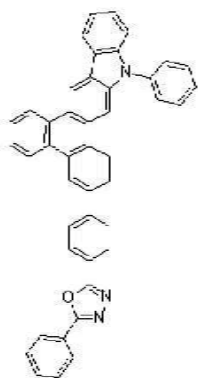
[화학식 378]



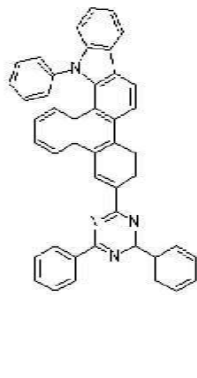
[화학식 379]



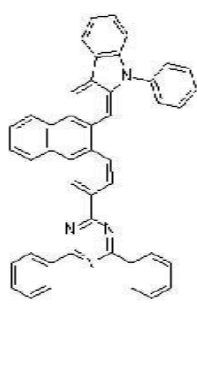
[화학식 380]



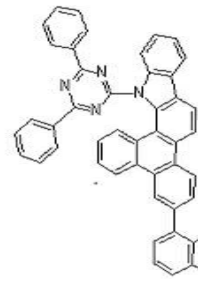
[화학식 381]



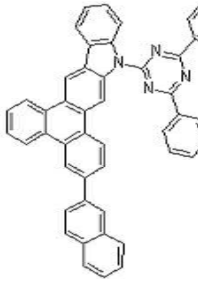
[화학식 382]



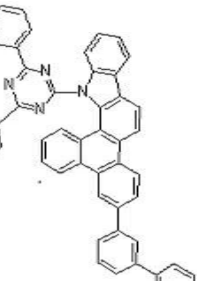
[화학식 383]



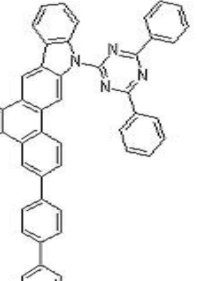
[화학식 384]



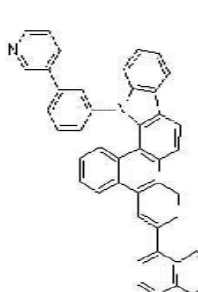
[화학식 385]



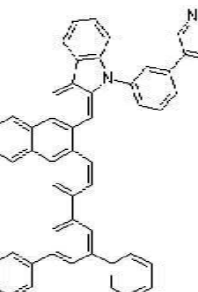
[화학식 386]



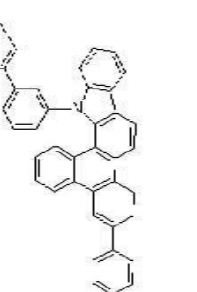
[화학식 387]



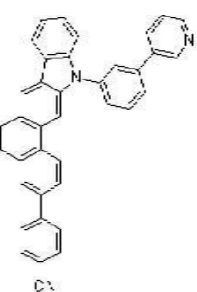
[화학식 388]



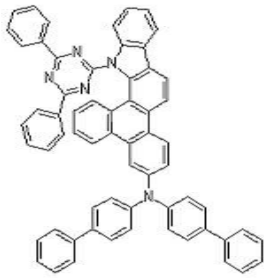
[화학식 389]



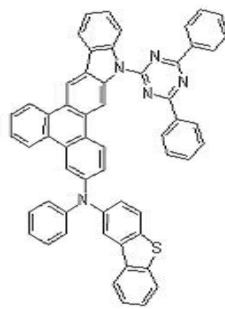
[화학식 390]



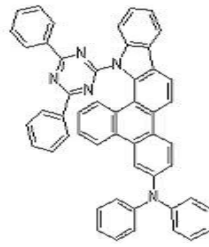
[화학식 391]



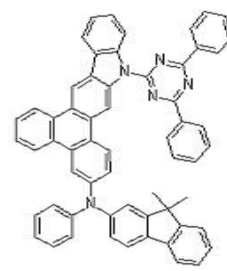
[화학식 392]



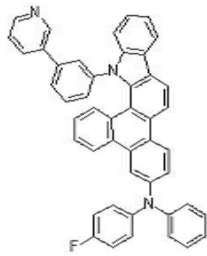
[화학식 393]



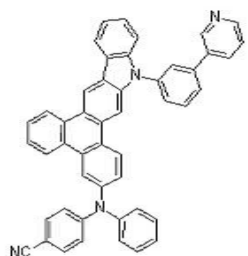
[화학식 394]



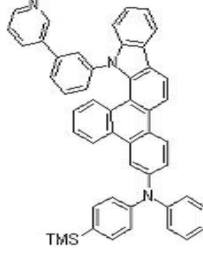
[화학식 395]



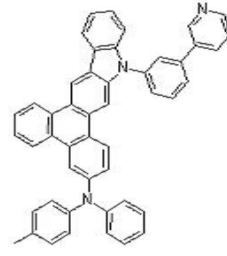
[화학식 396]



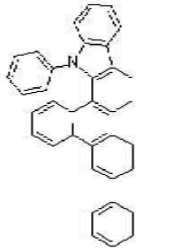
[화학식 397]



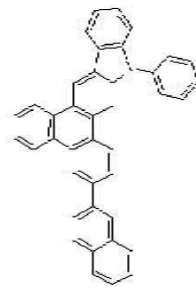
[화학식 398]



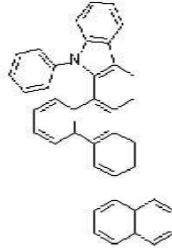
[화학식 399]



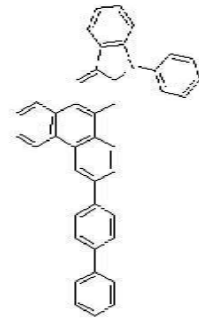
[화학식 400]



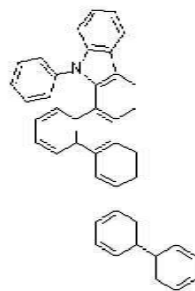
[화학식 401]



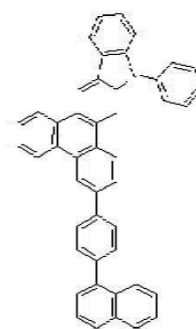
[화학식 402]



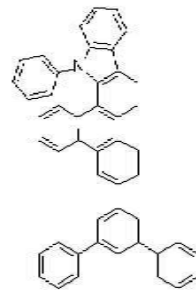
[화학식 403]



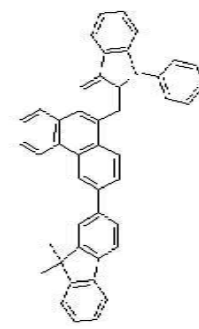
[화학식 404]



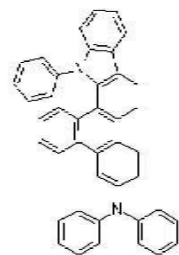
[화학식 405]



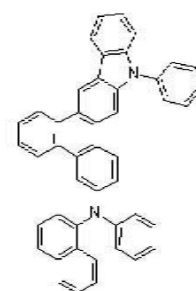
[화학식 406]



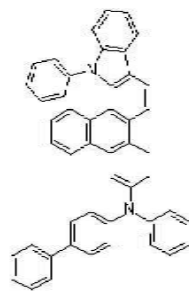
[화학식 407]



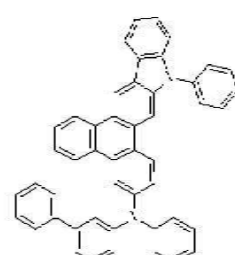
[화학식 408]



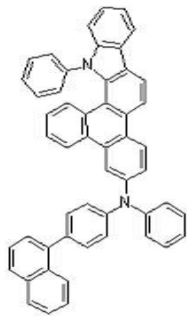
[화학식 409]



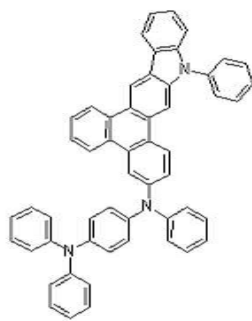
[화학식 410]



[화학식 411]



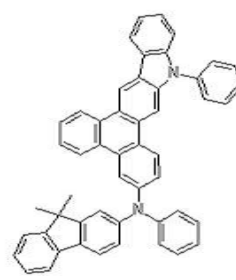
[화학식 412]



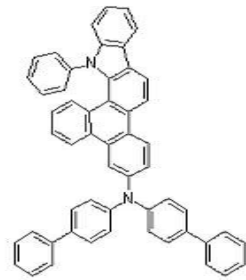
[화학식 413]



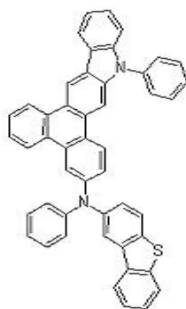
[화학식 414]



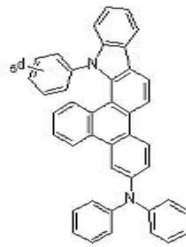
[화학식 415]



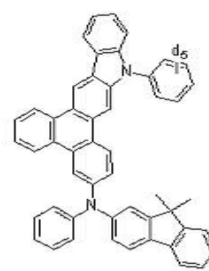
[화학식 416]



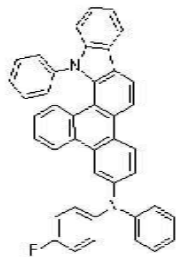
[화학식 417]



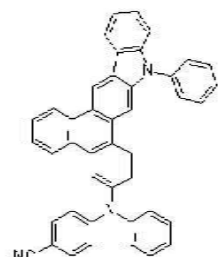
[화학식 418]



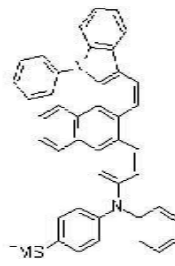
[화학식 419]



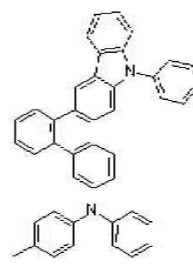
[화학식 420]



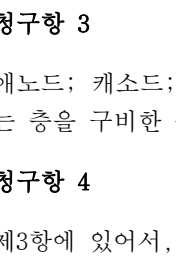
[화학식 421]



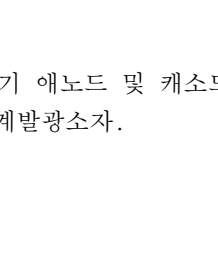
[화학식 422]



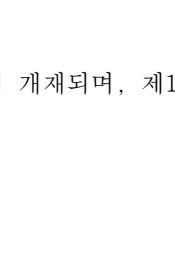
[화학식 423]



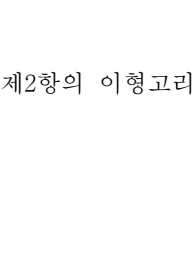
[화학식 424]



[화학식 425]



[화학식 426]



청구항 3

애노드; 캐소드; 및 상기 애노드 및 캐소드 사이에 개재되며, 제1항 또는 제2항의 이형고리 화합물을 포함하는 층을 구비한 유기전계발광소자.

청구항 4

제3항에 있어서,

상기 애노드 및 캐소드 사이에 발광층, 정공주입층, 정공수송층, 전자저지층, 정공저지층, 전자수송층 및 전자주입층 이루어진 균으로부터 선택된 하나 이상의 층을 더 포함하는 것을 특징으로 하는 유기전계발광소자.

청구항 5

제4항에 있어서,

상기 이형고리 화합물 유도체는 상기 애노드 및 캐소드 사이의 발광층 중에 포함되는 것을 특징으로 하는 유기전계발광소자.

청구항 6

제5항에 있어서,

상기 발광층의 두께는 50 내지 2,000 Å인 것을 특징으로 하는 유기전계발광소자.

명세서

기술분야

[0001] 본 발명은 신규한 이형고리 화합물 및 이를 발광물질로 포함하는 유기전계 발광소자에 관한 것으로서, 더욱 상세하게는 구동전압, 전류효율 등의 발광특성이 우수하고 안정적인 이형고리 화합물 및 이를 포함하는 유기전계발광소자에 관한 것이다.

배경기술

[0002] 최근 자체 발광형으로 저전압 구동이 가능한 유기전계발광소자는 평판 표시소자의 주류인 액정디스플레이(LCD, liquid crystal display)에 비해, 시야각, 대조비 등이 우수하고 백라이트가 불필요하며 경량 및 박형이 가능하며 소비전력 측면에서도 유리하고 색 재현 범위가 넓어 차세대 표시소자로서 주목받고 있다.

[0003] 유기전계발광소자(organic light emitting diodes, OLED)는 전자 주입 전극(음극)과 정공 주입 전극(양극) 사이에 형성된 유기 발광층에 전하를 주입하면 전자와 정공이 쌍을 이룬 후 소멸하면서 빛을 내는 소자이다.

[0004] 유기 발광 현상을 이용하는 유기전계발광소자는 통상 양극과 음극 및 이 사이에 유기물층을 포함하는 구조를 가진다. 여기서 유기물층은 유기전계발광소자의 효율과 안정성을 높이기 위하여 각기 다른 물질로 구성된 다층의 구조로 이루어진 경우가 많으며, 예컨대 정공주입층, 정공수송층, 발광층, 전자전달층, 전자주입층 등으로 이루어질 수 있다. 이러한 유기전계발광소자의 구조에서 두 전극 사이에 전압을 걸어주게 되면 양극에서는 정공이, 음극에서는 전자가 유기물층에 주입되게 되고, 주입된 정공과 전자가 만났을 때 엑시톤(exciton)이 형성되며, 이 엑시톤이 다시 바닥상태로 떨어질 때 빛이 나게 된다.

[0005] 유기전계발광소자는 플라스틱 같은 휘 수 있는(flexible) 투명 기판 위에도 소자를 형성할 수 있을 뿐 아니라, 플라즈마 디스플레이 패널(Plasma Display Panel)이나 무기 전계 발광(EL) 디스플레이에 비해 10V이하의 낮은 전압에서 구동이 가능하고, 전력 소모가 비교적 적으며, 색감이 뛰어나다는 장점이 있다. 또한, 유기전계발광소자는 녹색, 청색, 적색의 3가지 색을 나타낼 수가 있어 차세대 풍부한 색 디스플레이 소자로 많은 사람들의 많은 관심의 대상이 되고 있다.

[0006] 유기전계발광소자가 전술한 우수한 특징들을 충분히 발휘하기 위해서는 소자 내 유기물층을 이루는 물질, 예컨대 정공주입 물질, 정공수송 물질, 발광 물질, 전자수송 물질, 전자주입 물질 등이 안정하고 효율적인 재료에 의하여 뒷받침되는 것이 선행되어야 하나, 아직까지 안정하고 효율적인 유기전계발광소자용 유기물층 재료의 개발이 충분히 이루어지지 않은 상태이다. 따라서, 새로운 재료의 개발이 계속 요구되고 있다.

발명의 내용

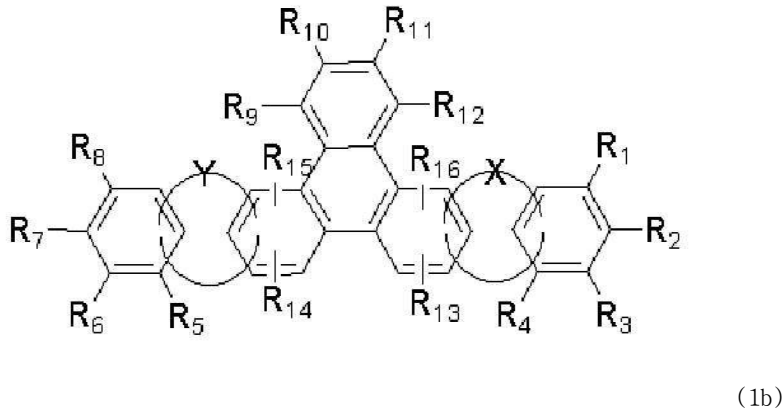
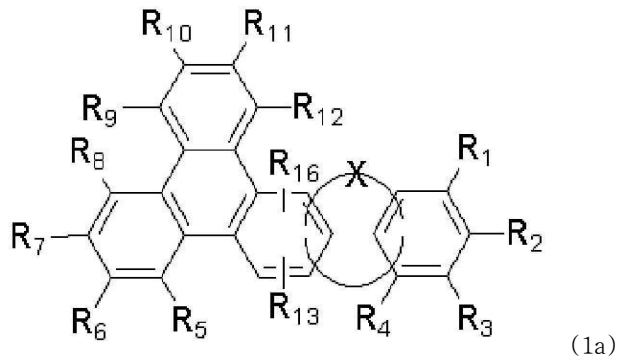
해결하려는 과제

[0007] 따라서, 본 발명이 해결하고자 하는 첫 번째 과제는 종래 인광발광재료에 사용되는 화합물보다 구동전압이 낮고 발광효율이 우수한 특성을 갖는 신규한 이형고리 화합물을 제공하는 것이다.

[0008] 본 발명이 해결하고자 하는 두 번째 과제는 상기 이형고리 화합물을 포함하는 유기전계발광소자를 제공하는 것이다.

과제의 해결 수단

[0009] 본 발명은 상기 과제를 해결하기 위하여, 하기 화학식 (1a) 또는 (1b)로 표시되는 이형고리 화합물을 제공한다.



[0010]

[0011]

[0012]

[0013]

[0014]

[0015]

[0016]

[0017]

[0018]

[0019]

상기 화학식 (1a) 및 (1b)에서,

X와 Y는 각각 독립적으로 $-NR_{17}$, $-S-$, $-O-$, $-C(R_{17})_2$, $-BR_{17}$, $-Si(R_{17})_2$, $-PR_{17}$ 중에서 선택되며,

R_1 내지 R_{17} 는 각각 독립적으로 수소원자, 중수소원자, 할로젠원자, 탄소수 6 - 40의 치환 또는 비치환의 아릴 아미노기, 치환 또는 비치환의 탄소수 3 - 40의 아릴옥시기, 치환 또는 비치환의 탄소수 6 - 40의 아릴기, 치환 또는 비치환의 탄소수 3 - 40의 헤테로아릴기, 케르마늄기, 인, 보론으로부터 선택되고,

R_1 내지 R_{17} 는 수소원자, 중수소 원자, 시아노기, 할로젠원자, 히드록시기, 니트로기, 탄소수 1 - 40의 알킬기, 탄소수 1 - 40의 알콕시기, 탄소수 1 - 40의 알킬아미노기, 탄소수 6 - 40의 아릴아미노기, 탄소수 3 - 40의 헤테로아릴아미노기, 탄소수 1 - 40의 알킬실릴기, 탄소수 6 - 40의 아릴실릴기, 탄소수 6 - 40의 아릴기, 탄소수 3 - 40의 아릴옥시기, 탄소수 3 - 40의 헤테로아릴기, 케르마늄기, 인, 보론으로 이루어진 군 으로부터 선택된 하나 이상의 치환기에 의해서 치환될 수 있으며, 이때 상기 치환기는 서로 결합하여 포화 혹은 불포화 고리를 형성해도 좋고, 펜던트 방법으로 함께 부착되거나 또는 융합(fused)될 수 있다.

또한 본 발명은 애노드, 캐소드 및 상기 애노드와 상기 캐소드 사이에 개재되며, 상기 화학식 (1a) 및 (1b)로 표시되는 이형고리 화합물을 포함하는 층을 구비한 유기전계발광소자를 제공한다.

본 발명의 일 실시예에 의하면, 상기 유기전계발광소자는 상기 화학식 (1a) 및 (1b)로 표시되는 이형고리 화합물을 상기 애노드와 캐소드 사이의 발광층 중에 포함할 수 있다.

본 발명의 다른 일 실시예에 의하면, 상기 유기전계발광소자는 상기 애노드 및 캐소드 사이에 정공주입층, 정공수송층, 전자저지층, 정공저지층, 전자수송층 및 전자주입층으로 이루어진 군으로부터 선택된 하나 이상의 층을 더 포함할 수 있다.

발명의 효과

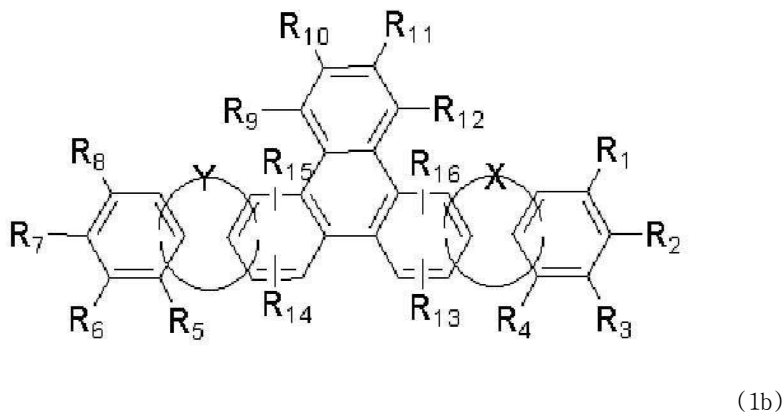
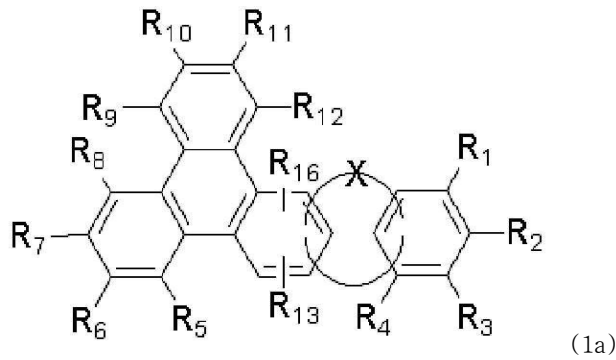
본 발명에 따른 화학식 (1a) 및 (1b)로 표시되는 이형고리 화합물은 기존의 물질에 비하여 안정적이고, 구동 전압 또는 전류 효율 등에 있어서 우수한 발광 특성을 가지므로 이를 포함하는 유기전계발광소자는 저전압 구동이 가능하고, 발광효율을 개선시킬 수 있다.

도면의 간단한 설명

- [0020] 도 1은 본 발명의 실시시에 따른 유기전계발광소자의 구조도이다.
- 도 2는 본 발명의 실시시에 따른 화합물(화학식 6)의 Tg 그래프이다.
- 도 3은 본 발명의 실시시에 따른 화합물(화학식 6)의 ¹H-NMR 데이터이다.
- 도 4는 본 발명의 실시시에 따른 화합물(화학식 6)의 저온 PL 스펙트럼 그래프이다.
- 도 5는 다양한 인광 도펀트의 PL 스펙트럼을 나타낸 그래프이다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

- [0021] 이하, 실시예 및 도면을 참조하여 본 발명을 더욱 상세하게 설명한다.
- [0022] 본 발명은 유기전계발광소자의 구동전압, 전류효율 등의 발광 특성을 개선한 발광층 호스트 물질로서, 상기 화학식 (1a) 및 (1b)로 표시되는 이형고리 화합물인 것이 특징이다.



- [0024]
- [0025] 상기 화학식 (1a) 및 (1b)에서,
- [0026] X와 Y는 각각 독립적으로 -NR₁₇, -S-, -O-, -C(R₁₇)₂, -BR₁₇, -Si(R₁₇)₂, -PR₁₇ 중에서 선택되며,
- [0027] R₁ 내지 R₁₇는 각각 독립적으로 수소원자, 중수소원자, 할로젠원자, 탄소수 6 - 40의 치환 또는 비치환의 아릴아미노기, 치환 또는 비치환의 탄소수 3 - 40의 아릴옥시기, 치환 또는 비치환의 탄소수 6 - 40의 아릴기, 치환 또는 비치환의 탄소수 3 - 40의 헤테로아릴기, 게르마늄기, 인, 보론으로부터 선택되고,
- [0028] 상기 R₁ 내지 R₁₇의 치환기는 수소원자, 중수소 원자, 시아노기, 할로젠원자, 히드록시기, 니트로기, 탄소수 1 - 40의 알킬기, 탄소수 1 - 40의 알콕시기, 탄소수 1 - 40의 알킬아미노기, 탄소수 6 - 40의 아릴아미노기, 탄소수 3 - 40의 헤테로아릴아미노기, 탄소수 1 - 40의 알킬실릴기, 탄소수 6 - 40의 아릴실릴기, 탄소수 6 - 40의 아릴기, 탄소수 3 - 40의 아릴옥시기, 탄소수 3 - 40의 헤테로아릴기, 게르마늄기, 인, 보론으로 이루어진 군으로부터 하나 이상 선택되며, 이때 상기 치환기는 서로 결합하여 포화 혹은 불포화 고리를 형성해도 좋고, 펜던트 방법으로 함께 부착되거나 또는 융합(fused)될 수 있다.
- [0029] 본 발명에서 사용되는 치환기인 알킬기의 구체적인 예로는 메틸기, 에틸기, 프로필기, 이소부틸기, sec-부틸기, tert-부틸기, 펜틸기, iso-아밀기, 헥실기, 헵틸기, 옥틸기, 스테아릴기, 트리클로로메틸기, 트리플루오

르메틸기 등을 들 수 있으며, 상기 알킬기 중 하나 이상의 수소 원자는 중수소 원자, 할로겐 원자, 히드록시기, 니트로기, 시아노기, 트리플루오로메틸기, 실릴기(이 경우 "알킬실릴기"라 함), 치환 또는 비치환된 아미노기(-NH₂, -NH(R), -N(R')(R'')), 여기서 R, R' 및 R''은 각각 독립적으로 탄소수 1 내지 24의 알킬기임(이 경우 "알킬아미노기"라 함)), 아미디노기, 히드라진기, 히드라진기, 카르복실기, 술폰산기, 인산기, 탄소수 1 내지 24의 알킬기, 탄소수 1 내지 24의 할로겐화된 알킬기, 탄소수 2 내지 24의 알케닐기, 탄소수 2 내지 24의 알킬닐기, 탄소수 1 내지 24의 헤테로알킬기, 탄소수 5 내지 24의 아릴기, 탄소수 6 내지 24의 아릴알킬기, 탄소수 3 내지 24의 헤테로아릴기 또는 탄소수 3 내지 24의 헤테로아릴알킬기로 치환될 수 있다.

[0030] 본 발명의 화합물에서 사용되는 치환기인 알콕시기의 구체적인 예로는 메톡시기, 에톡시기, 프로폭시기, 이소부틸옥시기, sec-부틸옥시기, 펜틸옥시기, iso-아밀옥시기, 헥실옥시기 등을 들 수 있으며, 상기 알킬기의 경우와 마찬가지로 치환기로 치환가능하다.

[0031] 본 발명의 화합물에서 사용되는 치환기인 할로젠기의 구체적인 예로는 플루오르(F), 클로린(Cl), 브롬(Br) 등을 들 수 있다.

[0032] 본 발명의 화합물에서 사용되는 치환기인 아릴기의 구체적인 예로는 페닐기, 2-메틸페닐기, 3-메틸페닐기, 4-메틸페닐기, 4-에틸페닐기, o-비페닐기, m-비페닐기, p-비페닐기, 4-메틸비페닐기, 4-에틸비페닐기, o-터페닐기, m-터페닐기, p-터페닐기, 1-나프틸기, 2-나프틸기, 1-메틸나프틸기, 2-메틸나프틸기, 안트릴기, 페난트릴기, 피레닐기, 플루오레닐기, 테트라히드로나프틸기 등과 같은 방향족 그룹을 들 수 있으며, 상기 알킬기의 경우와 마찬가지로 치환기로 치환가능하다.

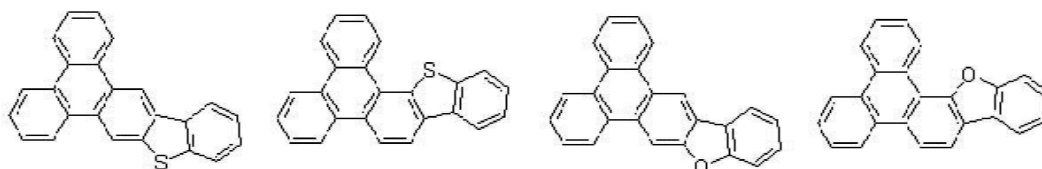
[0033] 본 발명의 화합물에서 사용되는 치환기인 헤테로아릴기의 구체적인 예로는 피리디닐기, 피리미디닐기, 트리아지닐기, 인돌리닐기, 퀴놀리닐기, 피롤리디닐기, 피페리디닐기, 모폴리디닐기, 피페라디닐기, 카바졸릴기, 옥사졸릴기, 옥사디아졸릴기, 벤조옥사졸릴기, 치아졸릴기, 치아디아졸릴기, 벤조치아졸릴기, 트리아졸릴기, 이미다졸릴기, 벤조이미다졸기 등이 있으며, 상기 헤테로아릴기 중 하나 이상의 수소 원자는 상기 알킬기의 경우와 동일한 치환기로 치환가능하다.

[0034] 본 발명에 사용되는 아릴옥시기는 -O- 아릴 라디칼을 의미하며, 이때 아릴기는 상기에서 정의된 바와 같고, 구체적인 예로서 페녹시, 나프톡시, 안트라세닐옥시, 페난트레닐옥시, 플루오레닐옥시, 인데닐옥시 등을 들 수 있고, 아릴옥시기에 포함되어 있는 하나 이상의 수소 원자는 추가로 치환가능하다.

[0035] 본 발명에 사용되는 치환기인 실릴기의 구체적인 예로는 트리메틸실릴, 트리에틸실릴, 트리페닐실릴, 트리메톡시실릴, 디메톡시페닐실릴, 디페닐메틸실릴, 실릴, 디페닐비닐실릴, 메틸사이클로뷰틸실릴, 디메틸퓨릴실릴 등을 들 수 있다.

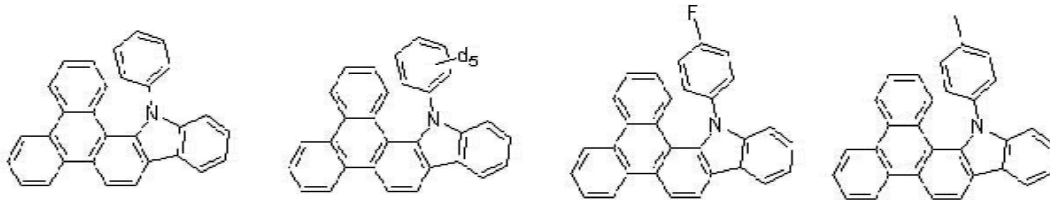
[0036] 본 발명에 있어서, "치환된"이라는 용어는 수소원자, 중수소 원자, 시아노기, 할로겐원자, 히드록시기, 니트로기, 탄소수 1 - 40의 알킬기, 탄소수 1 - 40의 알콕시기, 탄소수 1 - 40의 알킬아미노기, 탄소수 6 - 40의 아릴아미노기, 탄소수 3 - 40의 헤테로아릴아미노기, 탄소수 1 - 40의 알킬실릴기, 탄소수 6 - 40의 아릴실릴기, 탄소수 6 - 40의 아릴기, 탄소수 3 - 40의 아릴옥시기, 탄소수 3 - 40의 헤테로아릴기, 케르마늄기, 인, 보론으로 이루어진 군으로부터 선택된 하나 이상의 치환기로 치환되는 것을 의미한다.

[0037] 본 발명에 따른 상기 화학식 (1a) 및 (1b)에 따른 이형고리 화합물은 구체적으로 하기 [화학식 2] 내지 [화학식 426]으로 표시되는 화합물 중 어느 하나일 수 있으나, 본 발명이 이에 제한되는 것은 아니다.

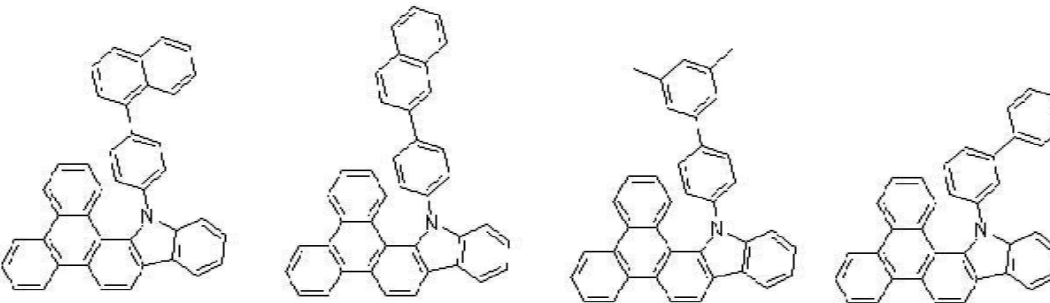


[0038]

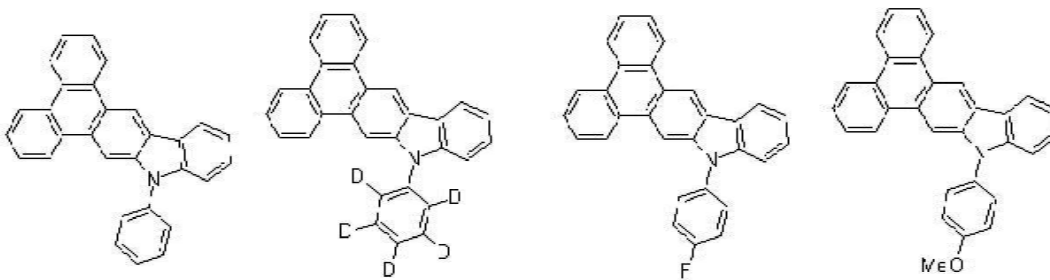
[0039] [화학식 2] [화학식 3] [화학식 4] [화학식 5]



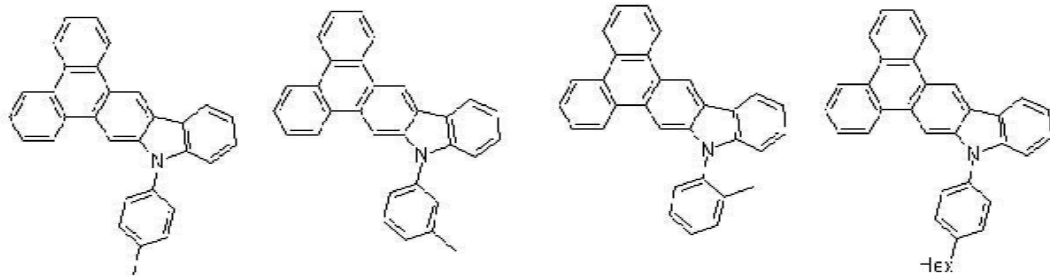
[0040]
[0041] [화학식 6] [화학식 7] [화학식 8] [화학식 9]



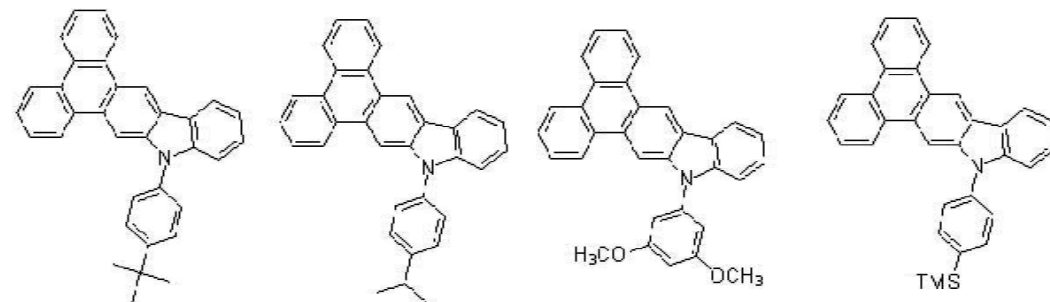
[0042]
[0043] [화학식 10] [화학식 11] [화학식 12] [화학식 13]



[0044]
[0045] [화학식 14] [화학식 15] [화학식 16] [화학식 17]

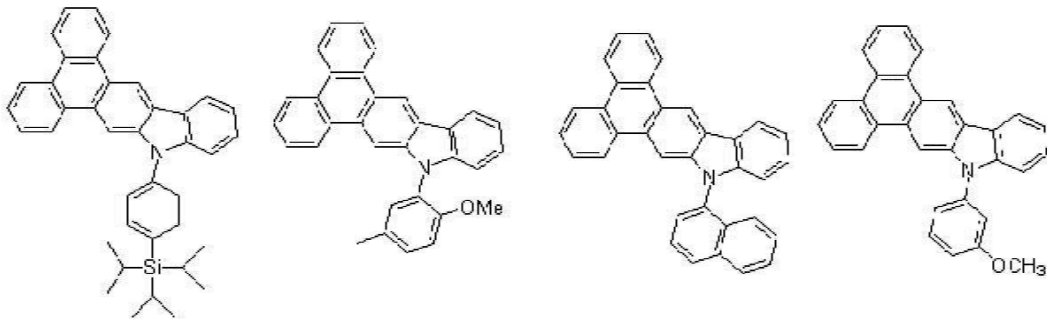


[0046]
[0047] [화학식 18] [화학식 19] [화학식 20] [화학식 21]

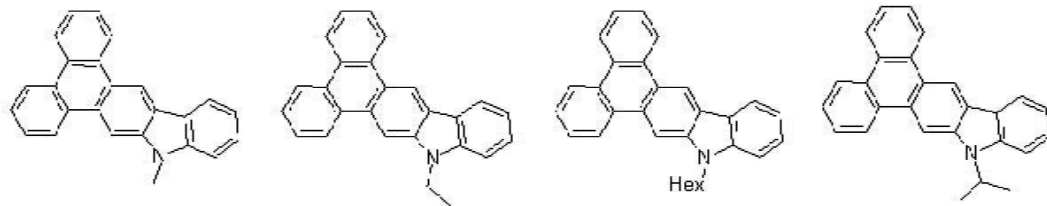


[0048]

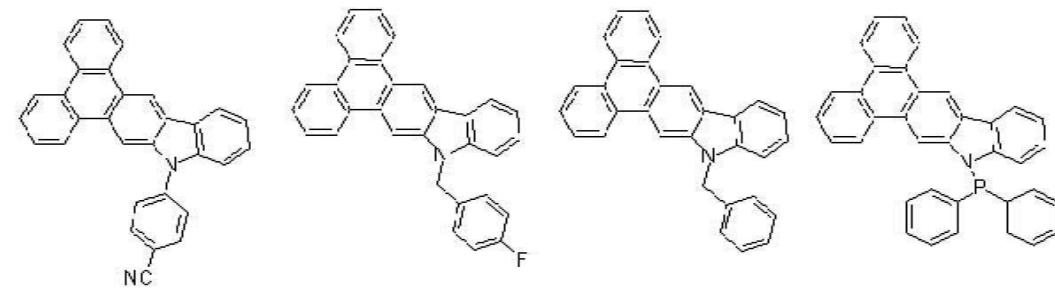
[0049] [화학식 22] [화학식 23] [화학식 24] [화학식 25]



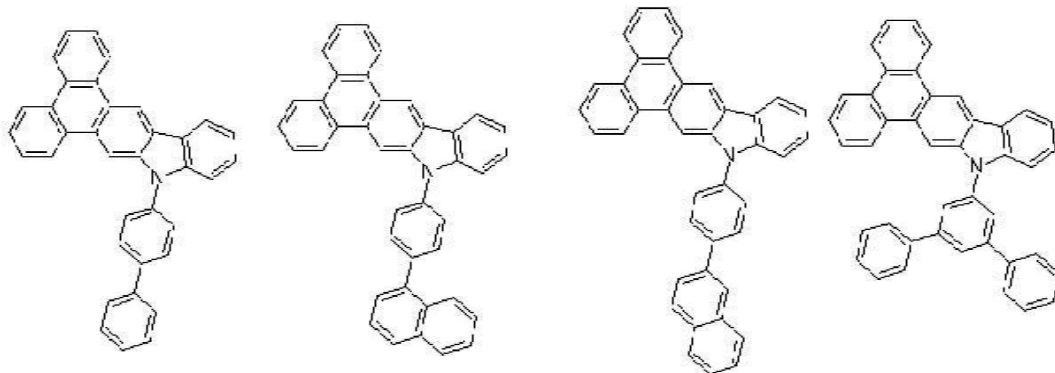
[0050]
[0051] [화학식 26] [화학식 27] [화학식 28] [화학식 29]



[0052]
[0053] [화학식 30] [화학식 31] [화학식 32] [화학식 33]

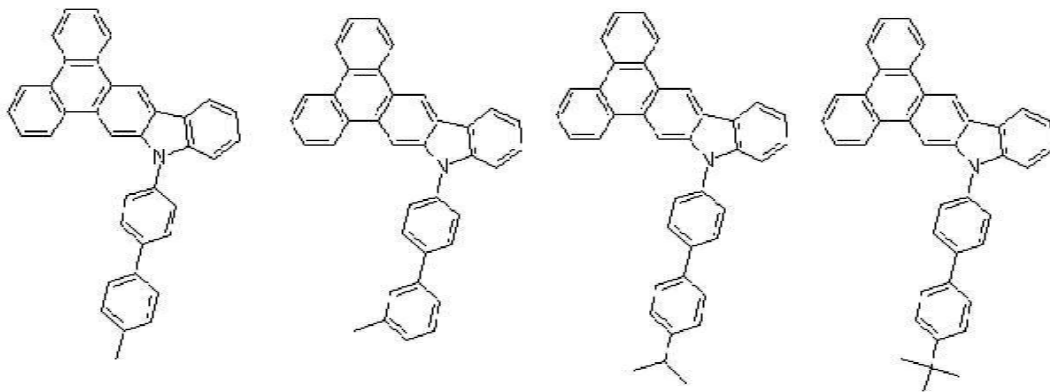


[0054]
[0055] [화학식 34] [화학식 35] [화학식 36] [화학식 37]

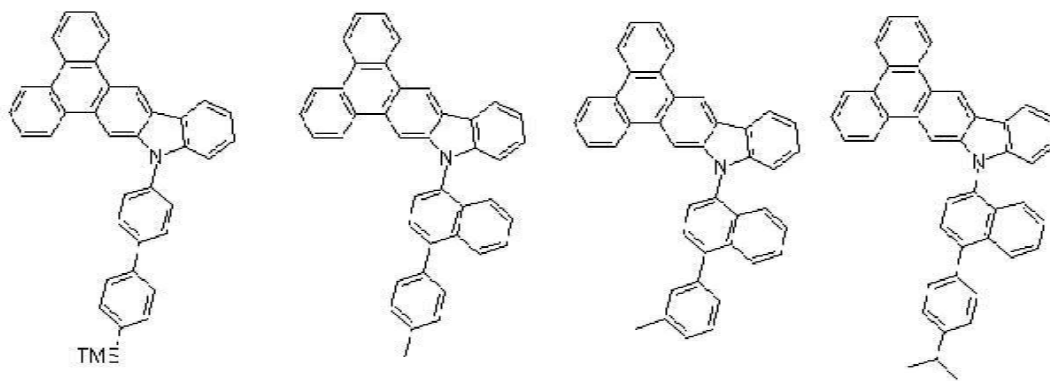


[0056]

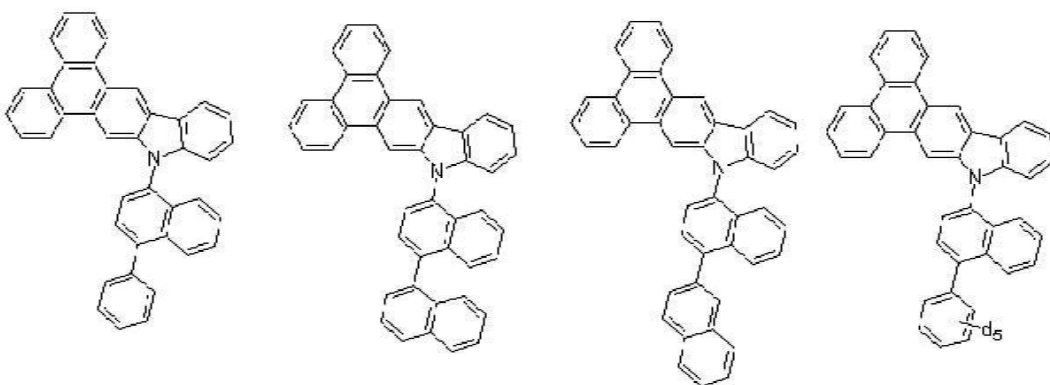
[0057] [화학식 38] [화학식 39] [화학식 40] [화학식 42]



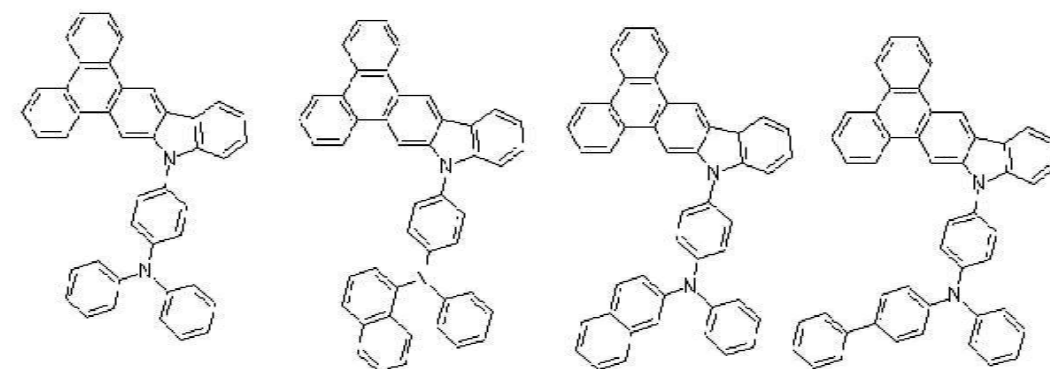
[0058]
[0059] [화학식 43] [화학식 44] [화학식 45] [화학식 46]



[0060]
[0061] [화학식 47] [화학식 48] [화학식 49] [화학식 50]

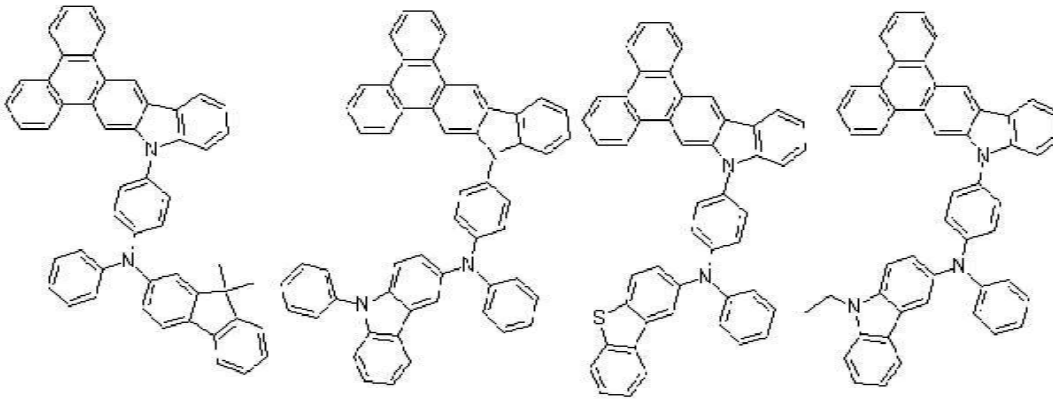


[0062]
[0063] [화학식 51] [화학식 52] [화학식 53] [화학식 54]

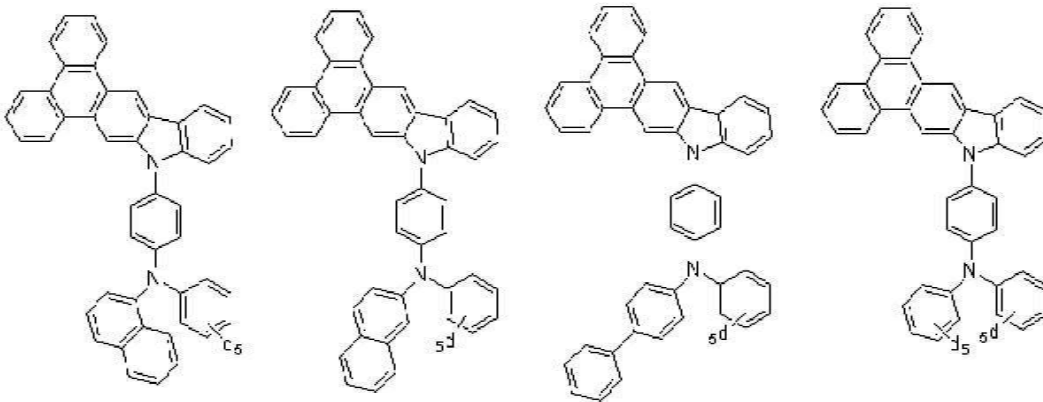


[0064]

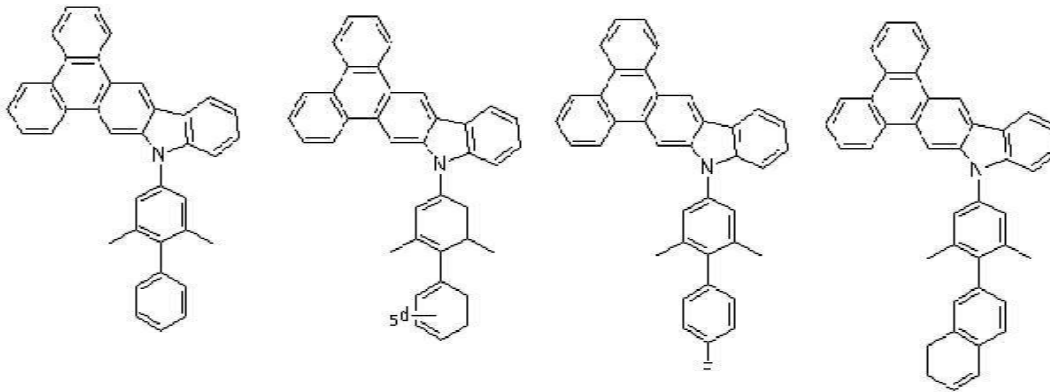
[0065] [화학식 55] [화학식 56] [화학식 57] [화학식 58]



[0066]
 [0067] [화학식 59] [화학식 60] [화학식 61] [화학식 62]

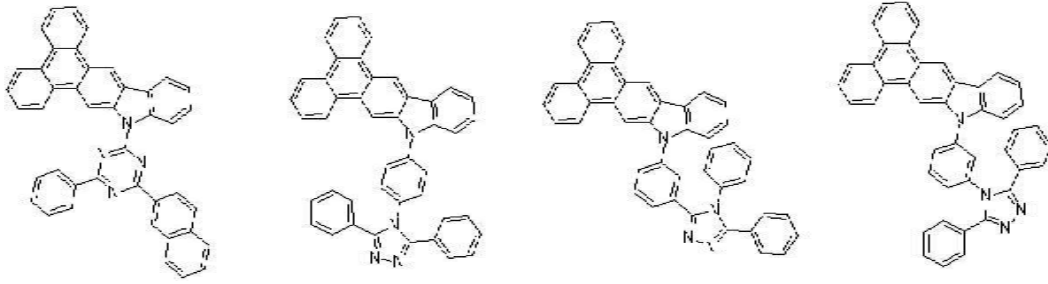


[0068]
 [0069] [화학식 63] [화학식 64] [화학식 65] [화학식 66]



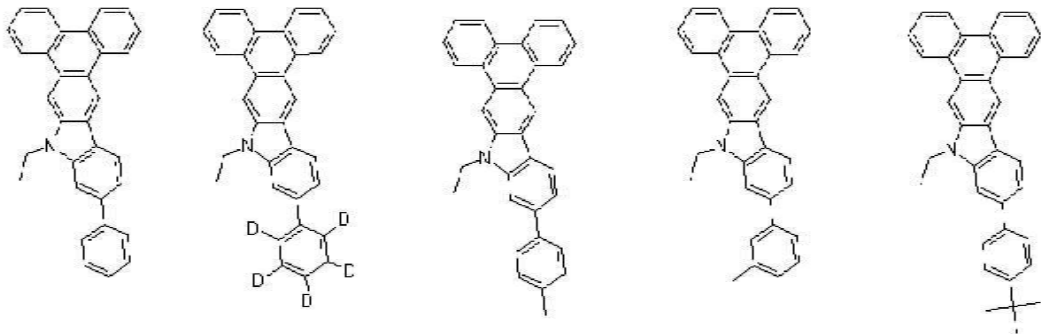
[0070]

[0079] [화학식 83] [화학식 84] [화학식 85] [화학식 86]



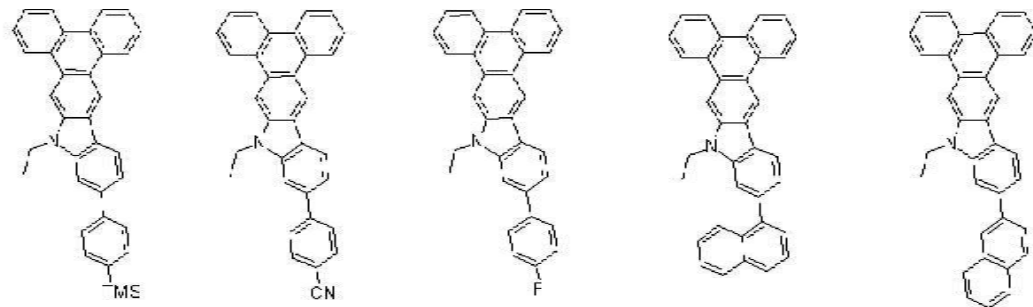
[0080]

[0081] [화학식 87] [화학식 88] [화학식 89] [화학식 90]



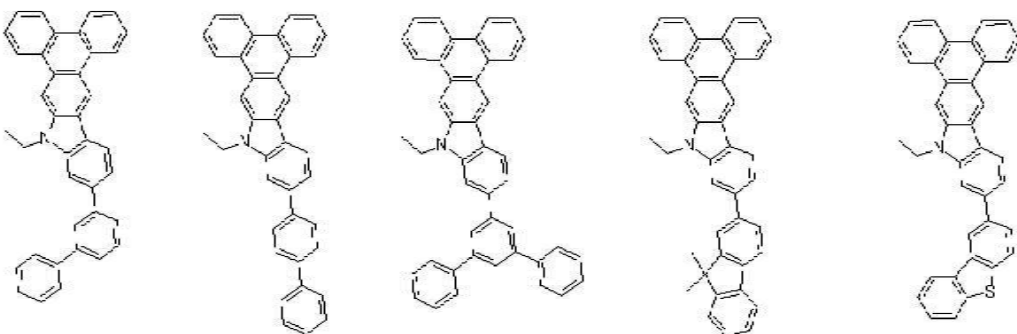
[0082]

[0083] [화학식 91] [화학식 92] [화학식 93] [화학식 94] [화학식 95]



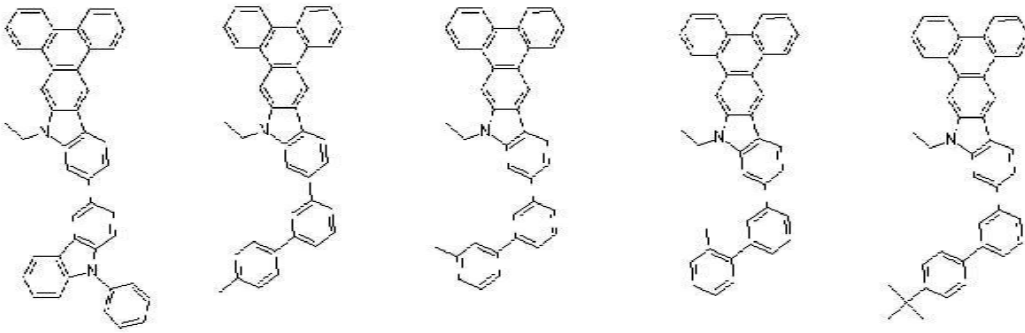
[0084]

[0085] [화학식 96] [화학식 97] [화학식 98] [화학식 99] [화학식 100]



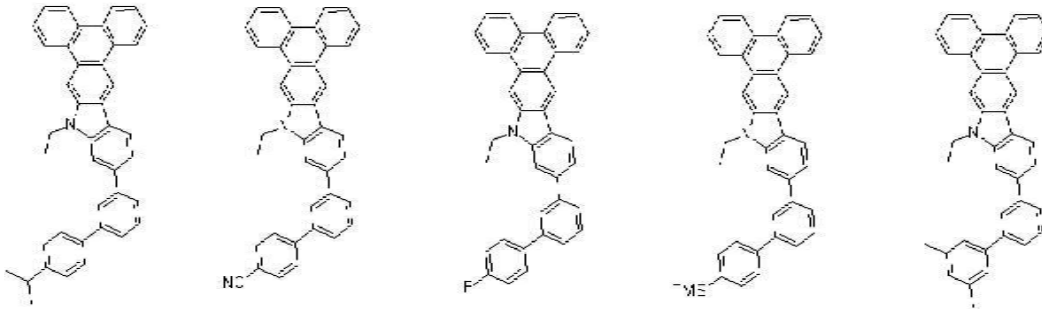
[0086]

[0087] [화학식 101] [화학식 102] [화학식 103] [화학식 104] [화학식 105]



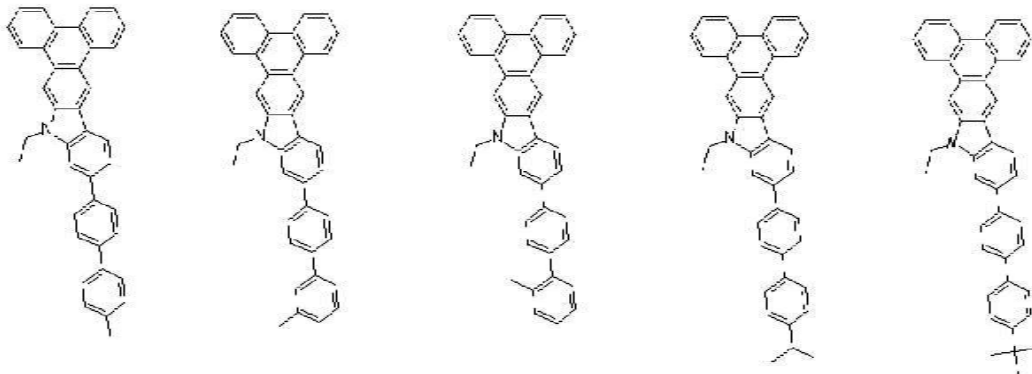
[0088]

[0089] [화학식 106] [화학식 107] [화학식 108] [화학식 109] [화학식 110]



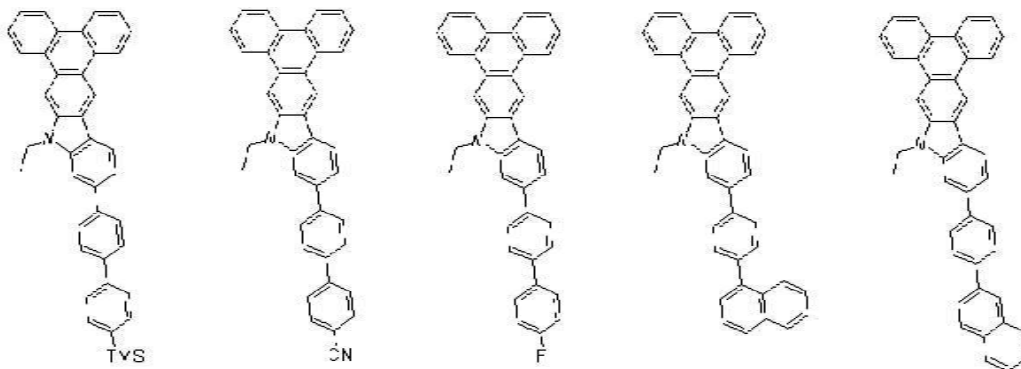
[0090]

[0091] [화학식 111] [화학식 112] [화학식 113] [화학식 114] [화학식 115]



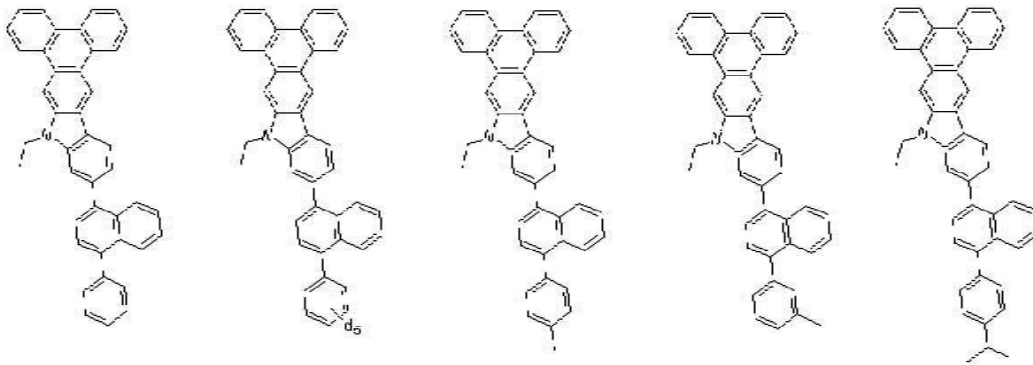
[0092]

[0093] [화학식 116] [화학식 117] [화학식 118] [화학식 119] [화학식 120]



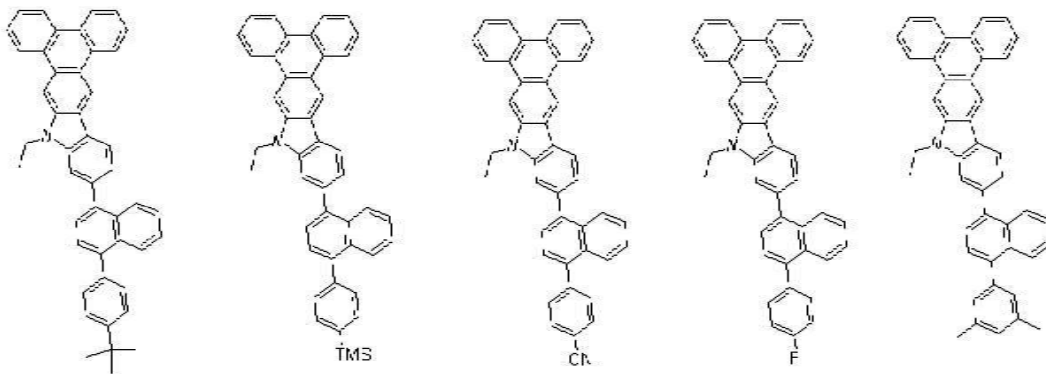
[0094]

[0095] [화학식 121] [화학식 122] [화학식 123] [화학식 124] [화학식 125]



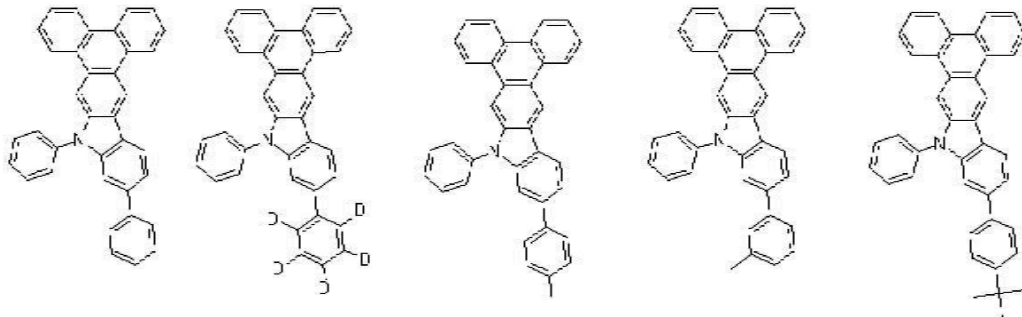
[0096]

[0097] [화학식 126] [화학식 127] [화학식 128] [화학식 129] [화학식 130]



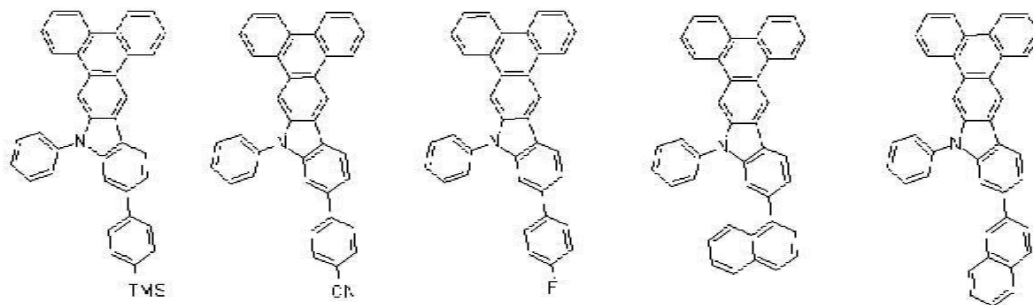
[0098]

[0099] [화학식 131] [화학식 132] [화학식 133] [화학식 134] [화학식 135]



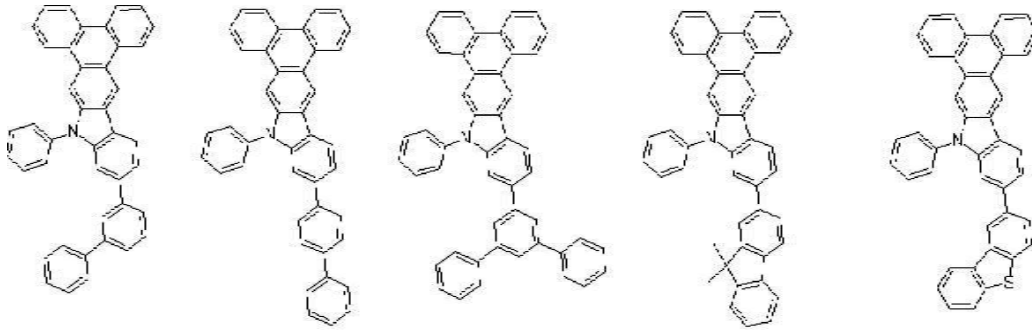
[0100]

[0101] [화학식 136] [화학식 137] [화학식 138] [화학식 139] [화학식 140]

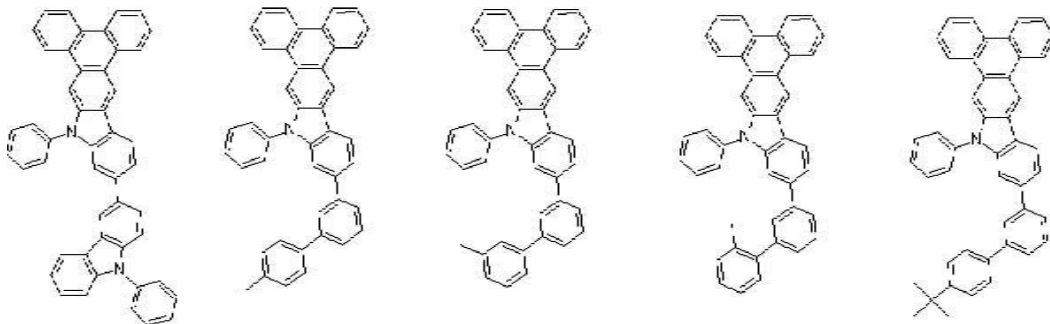


[0102]

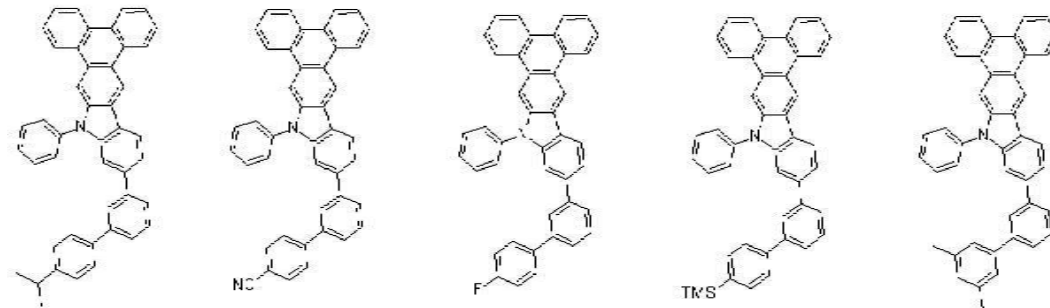
[0103] [화학식 141] [화학식 142] [화학식 143] [화학식 144] [화학식 145]



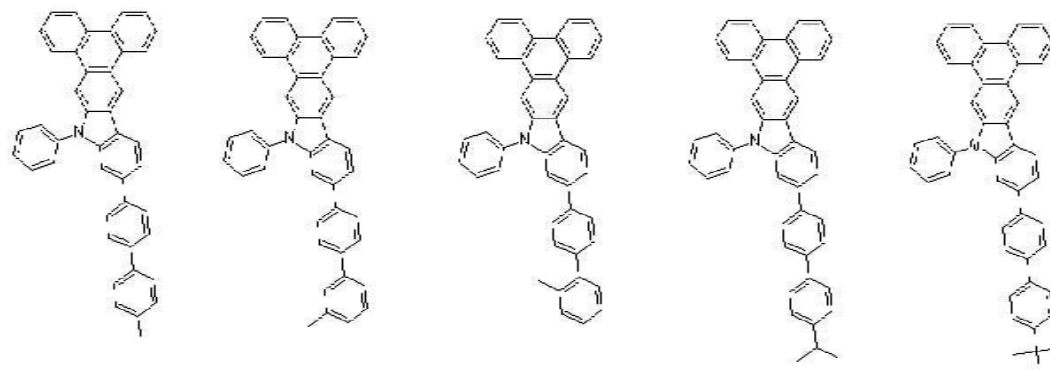
[0104] [0105] [화학식 146] [화학식 147] [화학식 148] [화학식 149] [화학식 150]



[0106] [0107] [화학식 151] [화학식 152] [화학식 153] [화학식 154] [화학식 155]

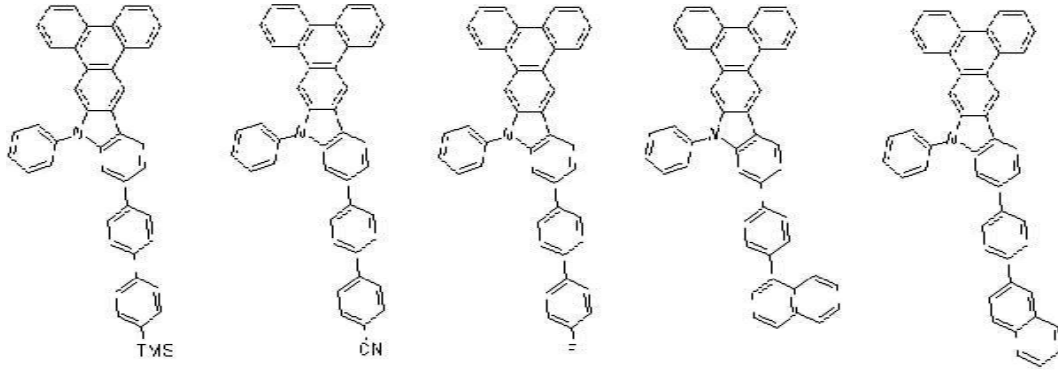


[0108] [0109] [화학식 156] [화학식 157] [화학식 158] [화학식 159] [화학식 160]



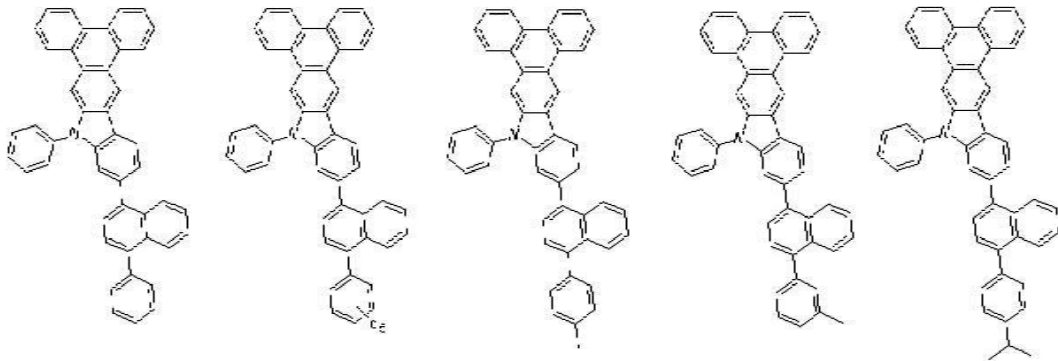
[0110]

[0111] [화학식 161] [화학식 162] [화학식 163] [화학식 164] [화학식 165]



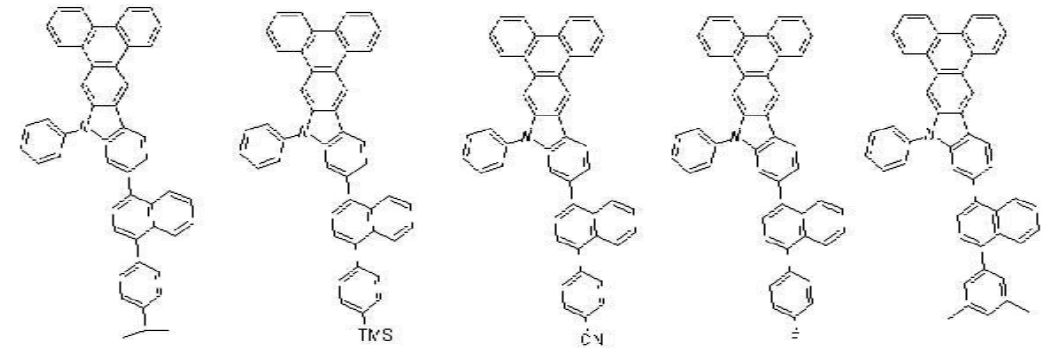
[0112]

[0113] [화학식 166] [화학식 167] [화학식 168] [화학식 169] [화학식 170]



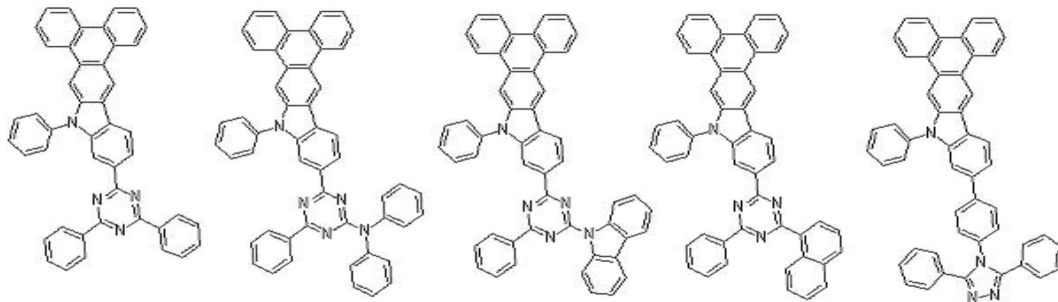
[0114]

[0115] [화학식 171] [화학식 172] [화학식 173] [화학식 174] [화학식 175]



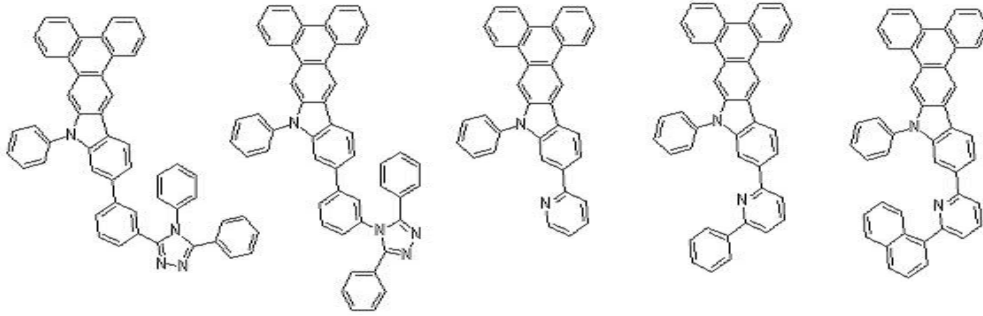
[0116]

[0117] [화학식 176] [화학식 177] [화학식 178] [화학식 179] [화학식 180]



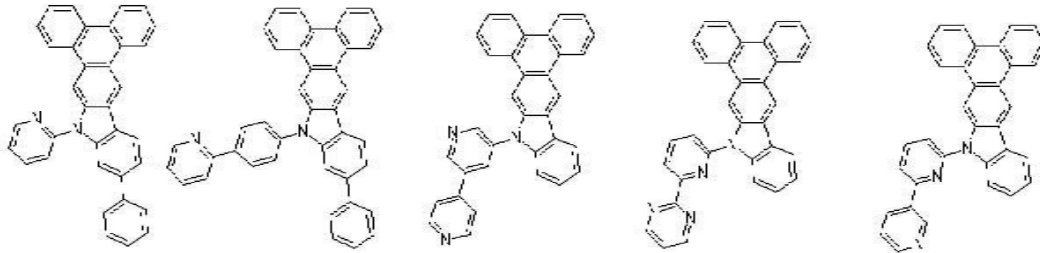
[0118]

[0119] [화학식 181] [화학식 182] [화학식 183] [화학식 184] [화학식 185]



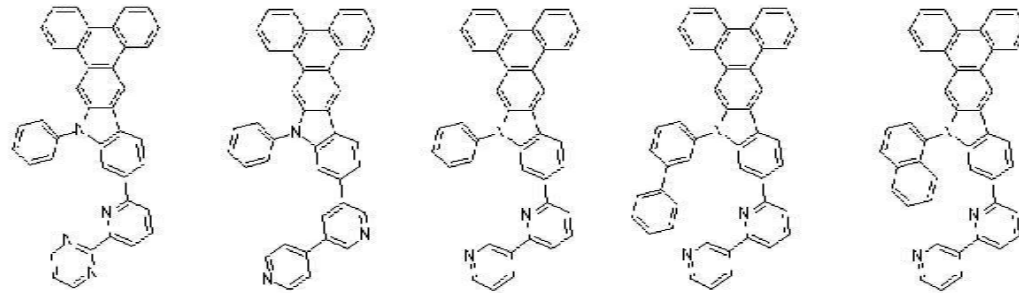
[0120]

[0121] [화학식 186] [화학식 187] [화학식 188] [화학식 189] [화학식 190]



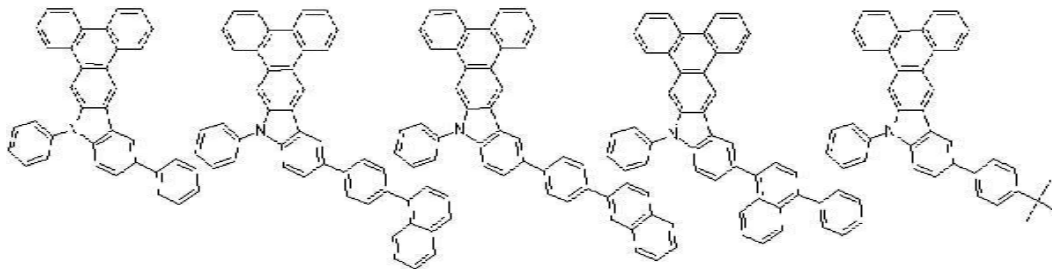
[0122]

[0123] [화학식 191] [화학식 192] [화학식 193] [화학식 194] [화학식 195]



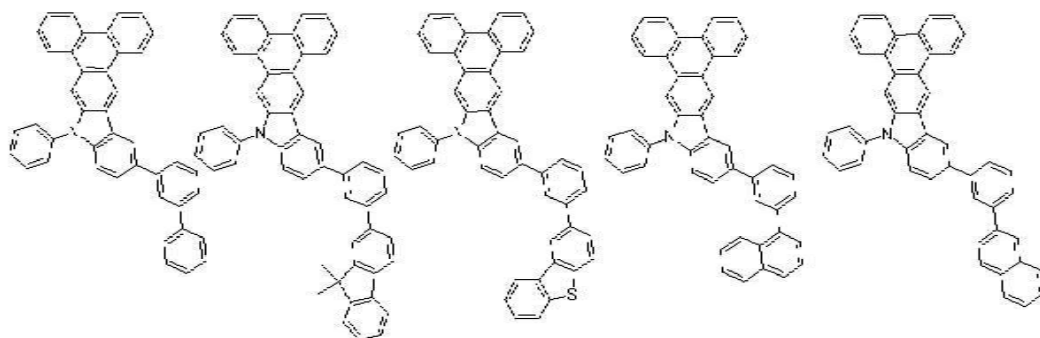
[0124]

[0125] [화학식 196] [화학식 197] [화학식 198] [화학식 199] [화학식 200]



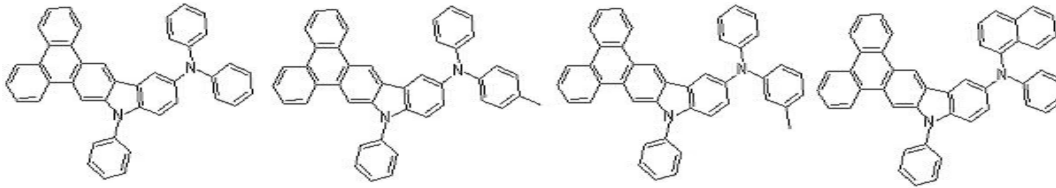
[0126]

[0127] [화학식 201] [화학식 202] [화학식 203] [화학식 204] [화학식 205]



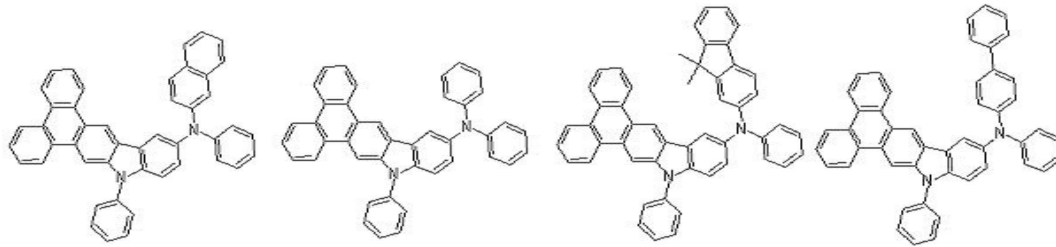
[0128]

[0129] [화학식 206] [화학식 207] [화학식 208] [화학식 209] [화학식 210]



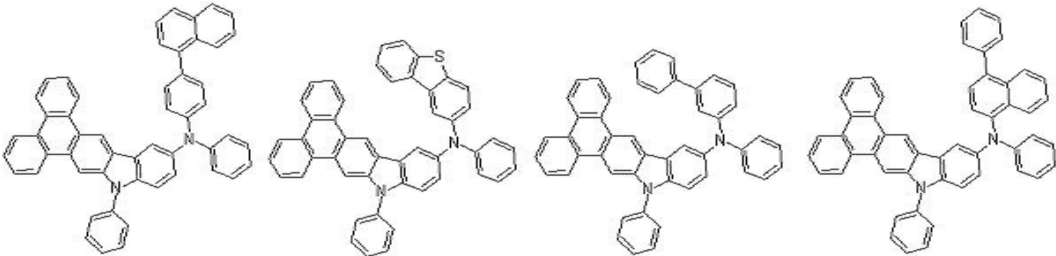
[0130]

[0131] [화학식 211] [화학식 212] [화학식 213] [화학식 214]



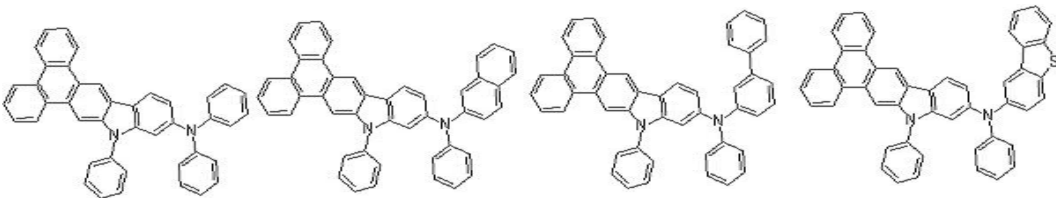
[0132]

[0133] [화학식 215] [화학식 216] [화학식 217] [화학식 218]



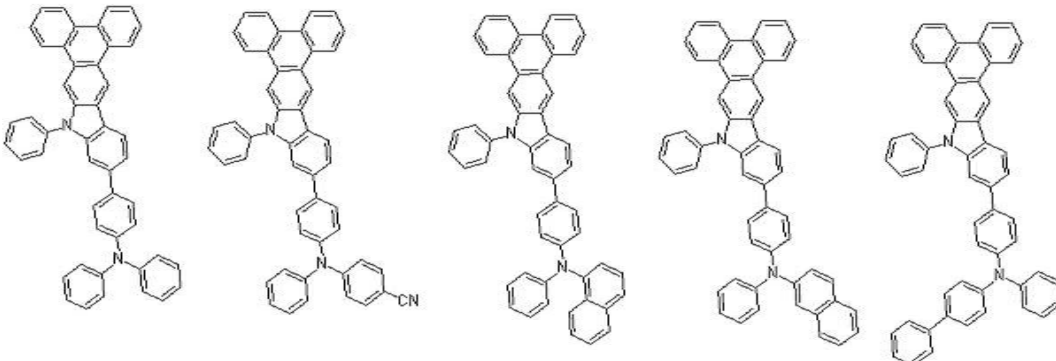
[0134]

[0135] [화학식 219] [화학식 220] [화학식 221] [화학식 222]



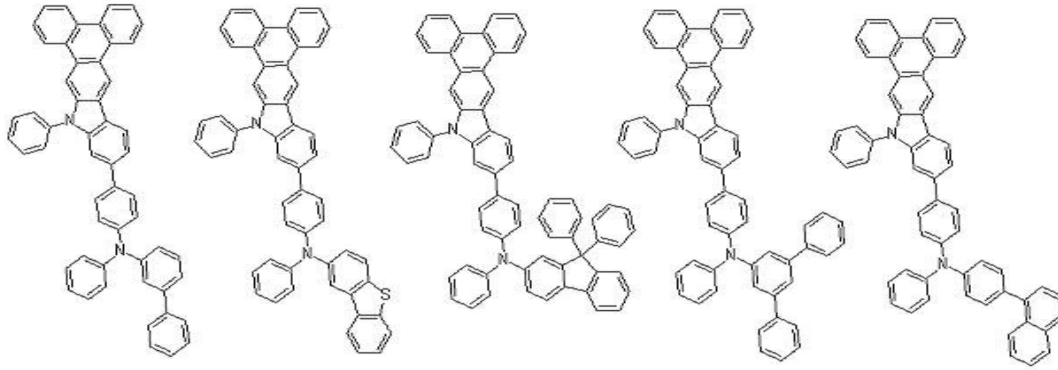
[0136]

[0137] [화학식 223] [화학식 224] [화학식 225] [화학식 226]



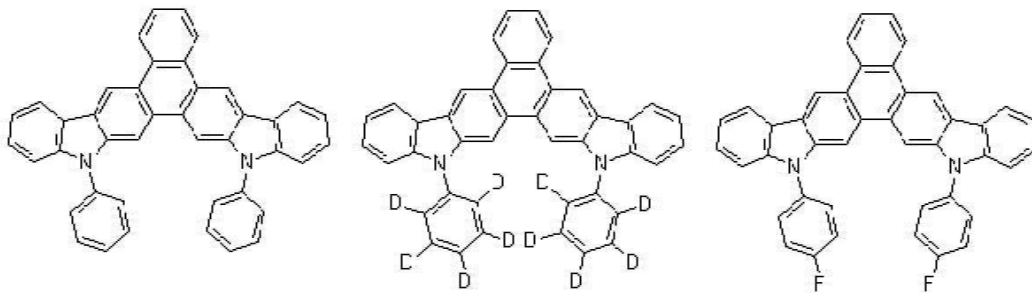
[0138]

[0139] [화학식 227] [화학식 228] [화학식 229] [화학식 230] [화학식 231]



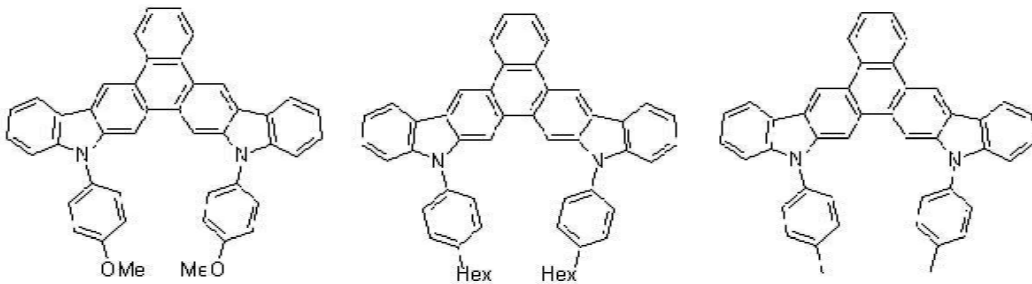
[0140]

[0141] [화학식 232] [화학식 233] [화학식 234] [화학식 235] [화학식 236]



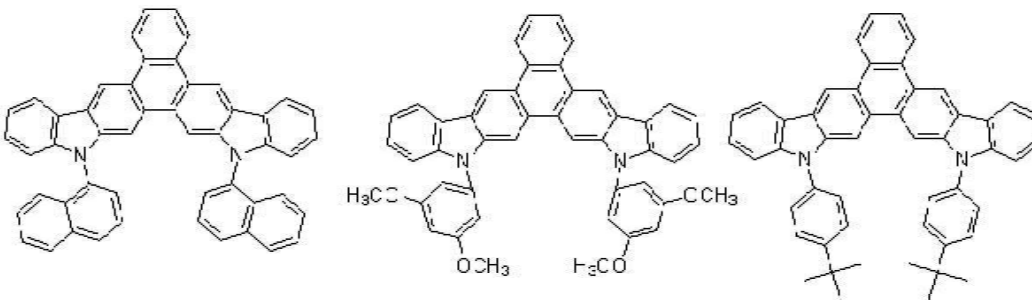
[0142]

[0143] [화학식 237] [화학식 238] [화학식 239]



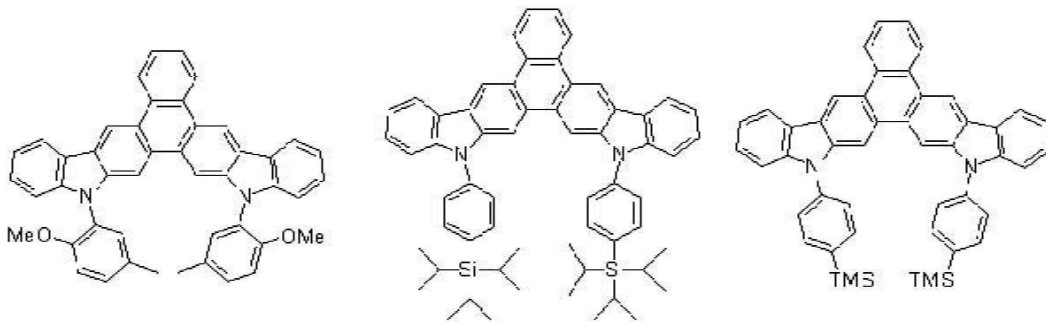
[0144]

[0145] [화학식 240] [화학식 241] [화학식 242]

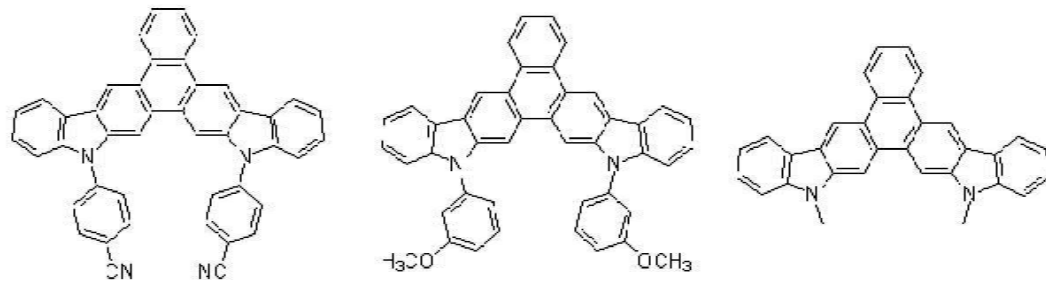


[0146]

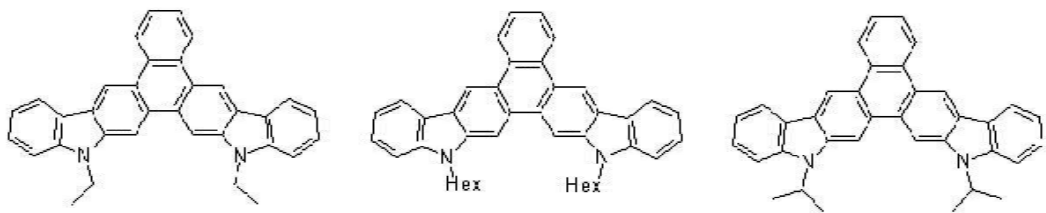
[0147] [화학식 243] [화학식 244] [화학식 245]



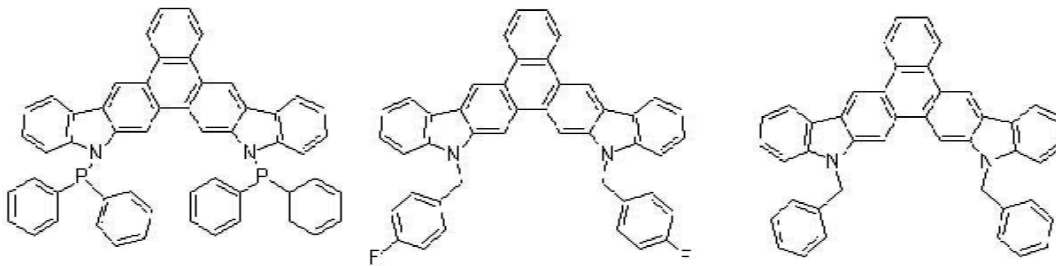
[0148] [0149] [화학식 246] [화학식 247] [화학식 248]



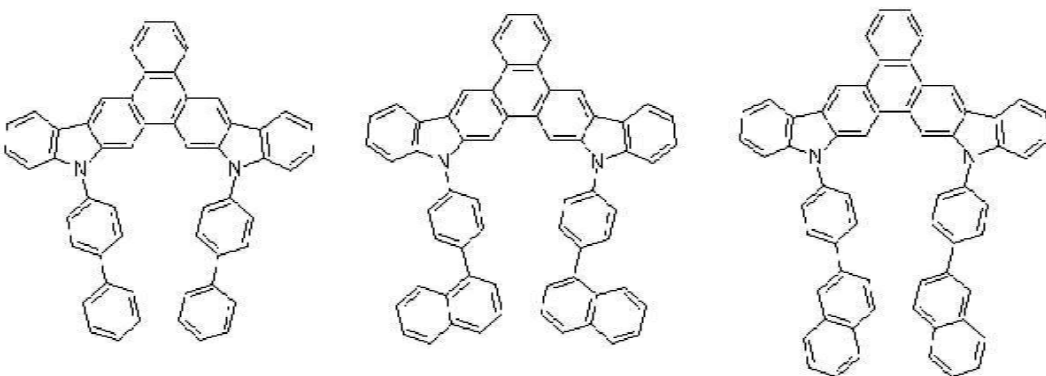
[0150] [0151] [화학식 249] [화학식 250] [화학식 251]



[0152] [0153] [화학식 252] [화학식 253] [화학식 254]



[0154] [0155] [화학식 255] [화학식 256] [화학식 257]



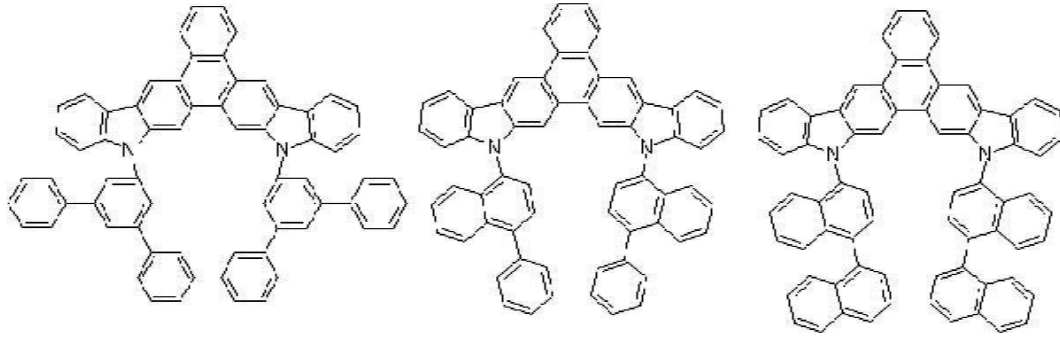
[0156]

[0157]

[화학식 258]

[화학식 259]

[화학식 260]



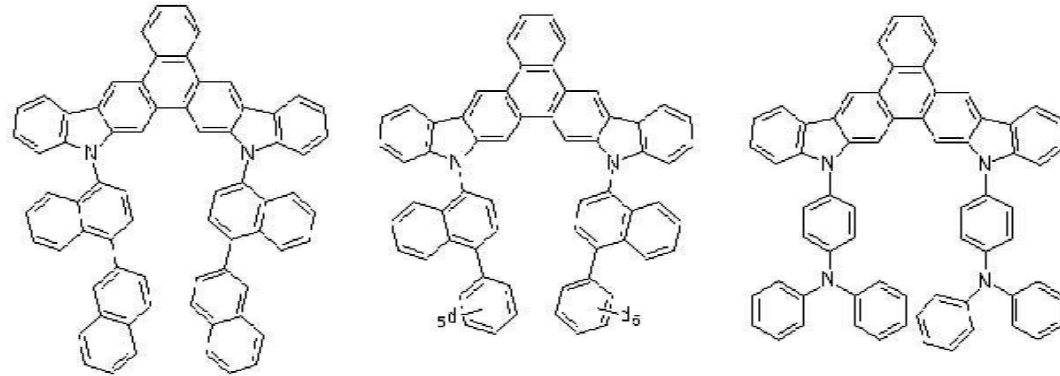
[0158]

[0159]

[화학식 261]

[화학식 262]

[화학식 263]



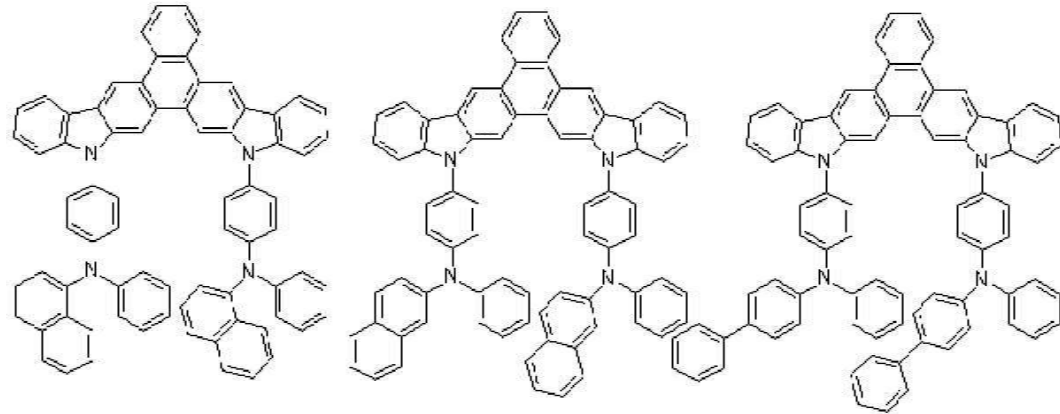
[0160]

[0161]

[화학식 264]

[화학식 265]

[화학식 266]



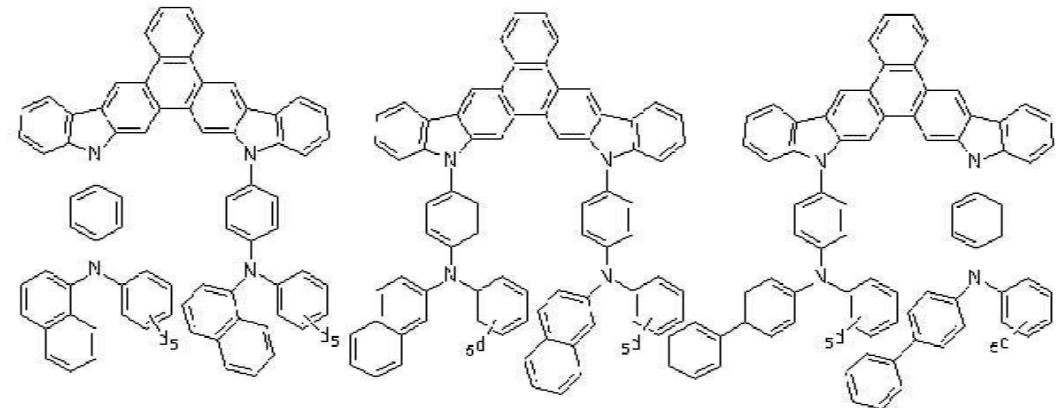
[0162]

[0163]

[화학식 267]

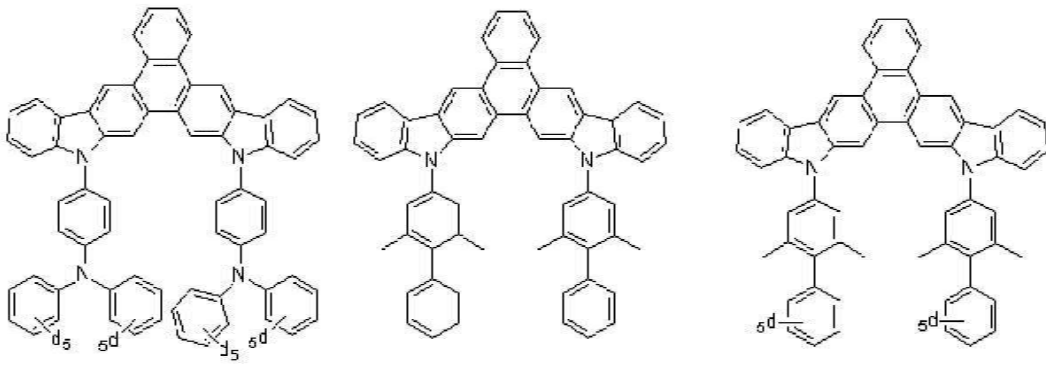
[화학식 268]

[화학식 269]

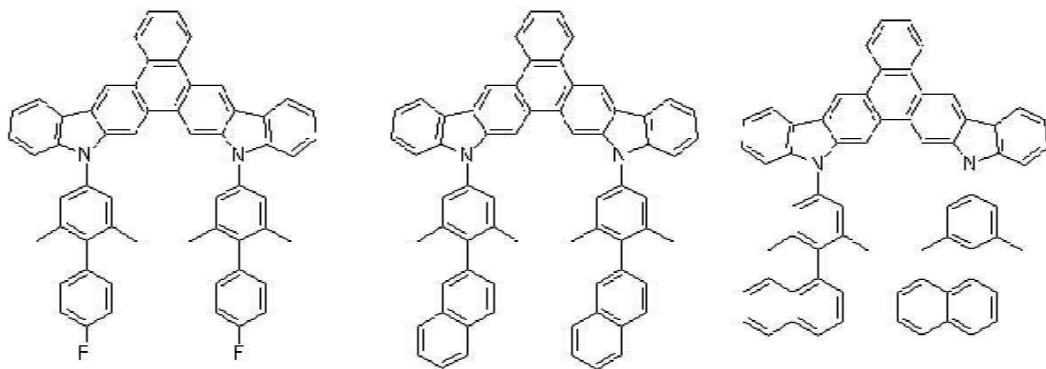


[0164]

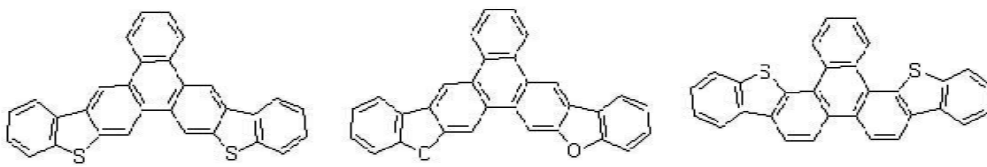
[0165] [화학식 270] [화학식 271] [화학식 272]



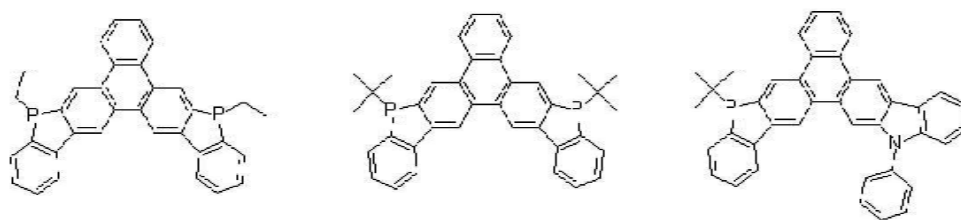
[0166]
[0167] [화학식 273] [화학식 274] [화학식 275]



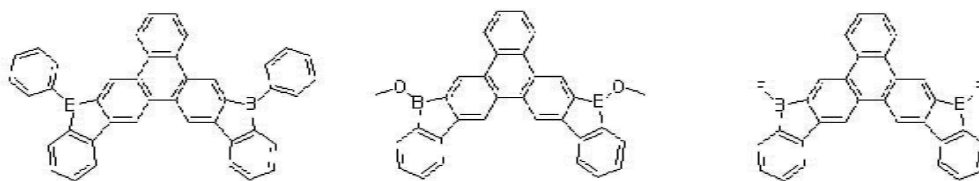
[0168]
[0169] [화학식 276] [화학식 277] [화학식 278]



[0170]
[0171] [화학식 279] [화학식 280] [화학식 281]

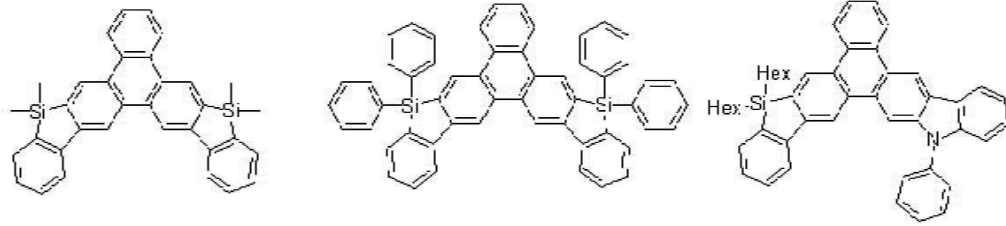


[0172]
[0173] [화학식 282] [화학식 283] [화학식 284]

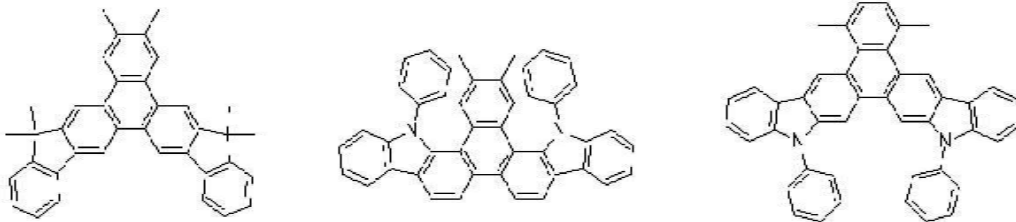


[0174]

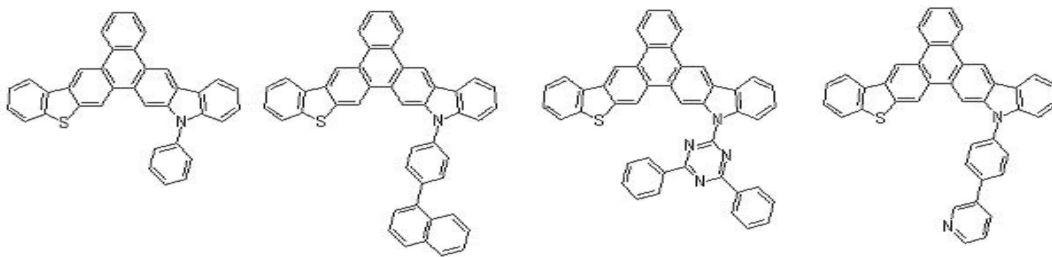
[0175] [화학식 285] [화학식 286] [화학식 287]



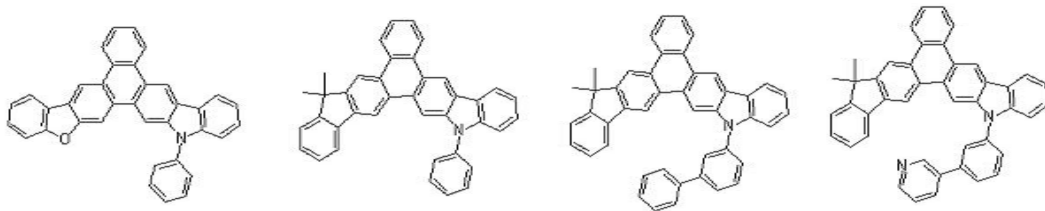
[0176]
[0177] [화학식 288] [화학식 289] [화학식 290]



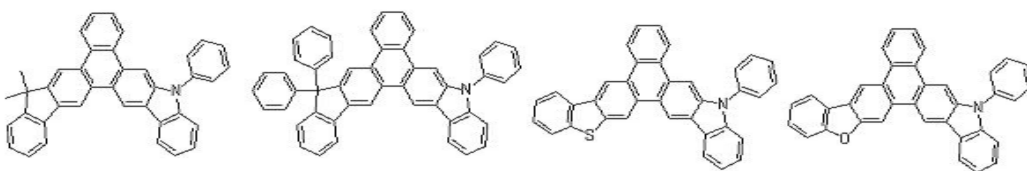
[0178]
[0179] [화학식 291] [화학식 292] [화학식 293]



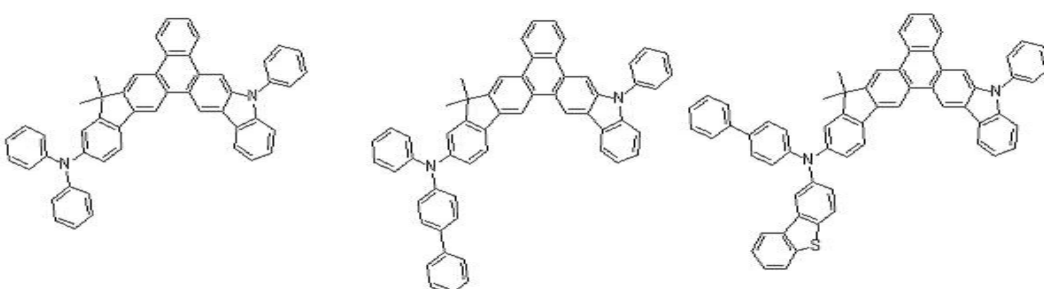
[0180]
[0181] [화학식 294] [화학식 295] [화학식 296] [화학식 297]



[0182] [화학식 298] [화학식 299] [화학식 300] [화학식 301]

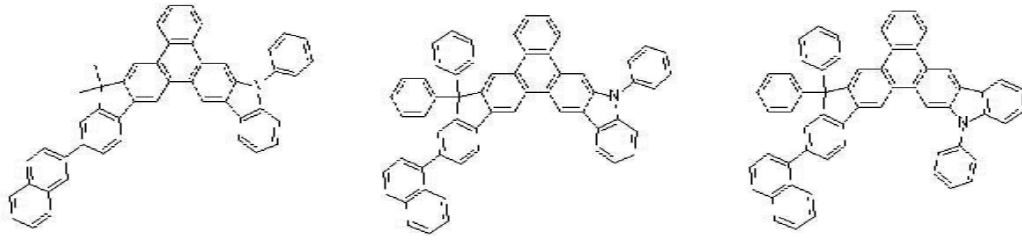


[0183]
[0184] [화학식 302] [화학식 303] [화학식 304] [화학식 305]

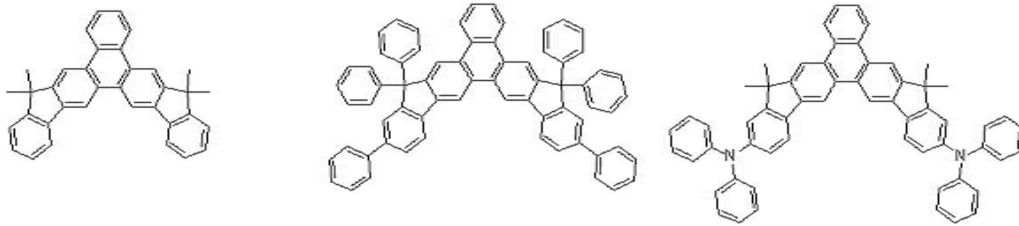


[0185]
- 48 -

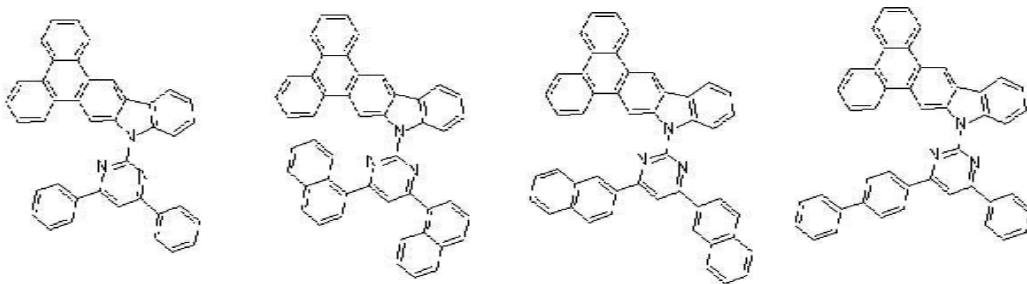
[0186] [화학식 306] [화학식 307] [화학식 308]



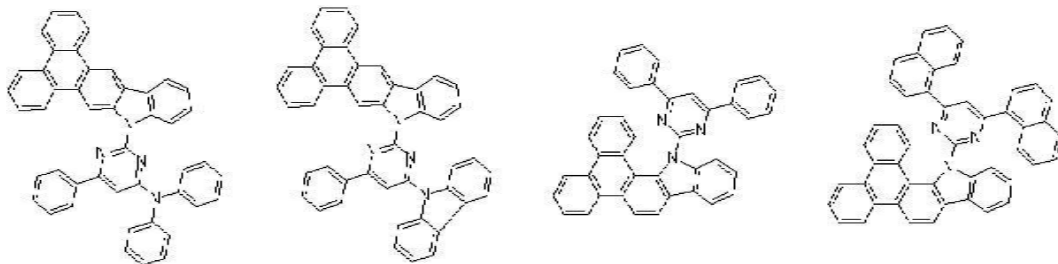
[0187] [0188] [화학식 309] [화학식 310] [화학식 311]



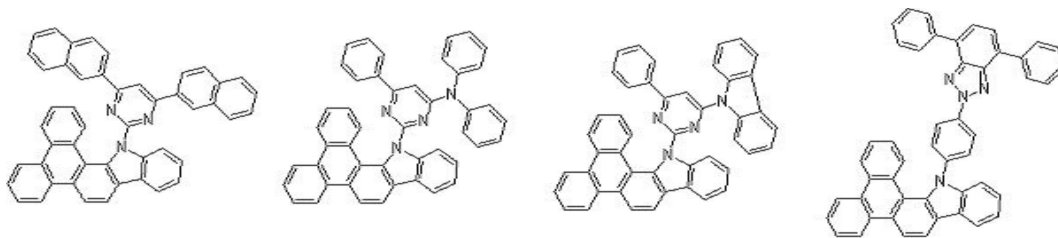
[0189] [0190] [화학식 312] [화학식 313] [화학식 314]



[0191] [0192] [화학식 315] [화학식 316] [화학식 317] [화학식 318]

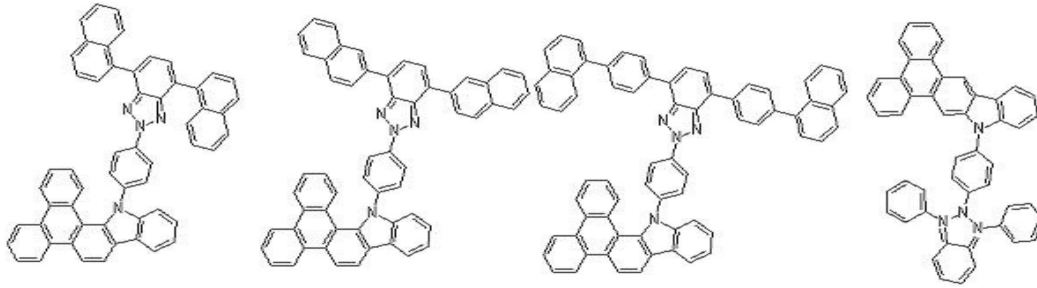


[0193] [0194] [화학식 319] [화학식 320] [화학식 321] [화학식 322]

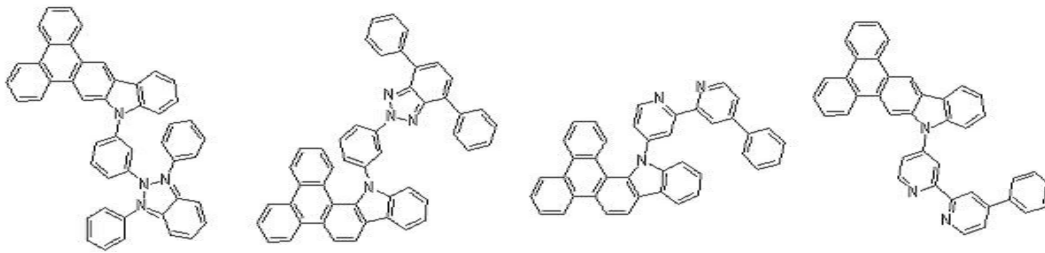


[0195]

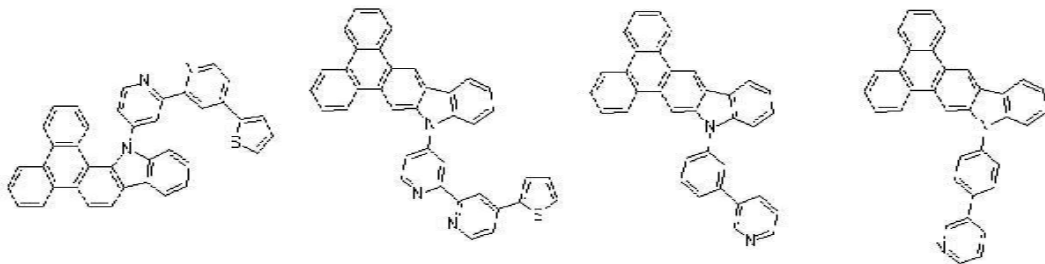
[0196] [화학식 323] [화학식 324] [화학식 325] [화학식 326]



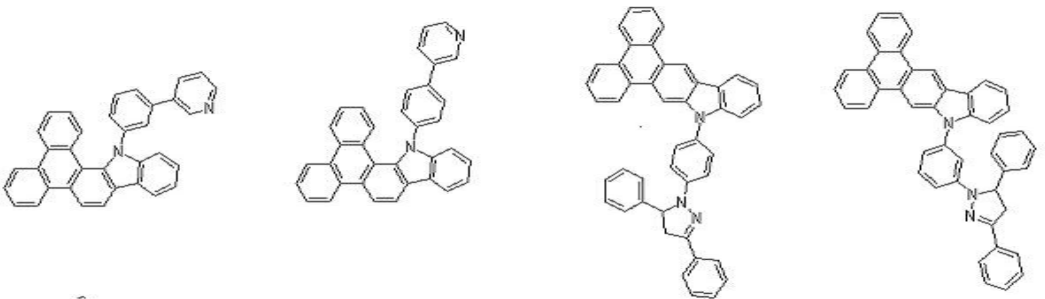
[0197]
[0198] [화학식 327] [화학식 328] [화학식 329] [화학식 330]



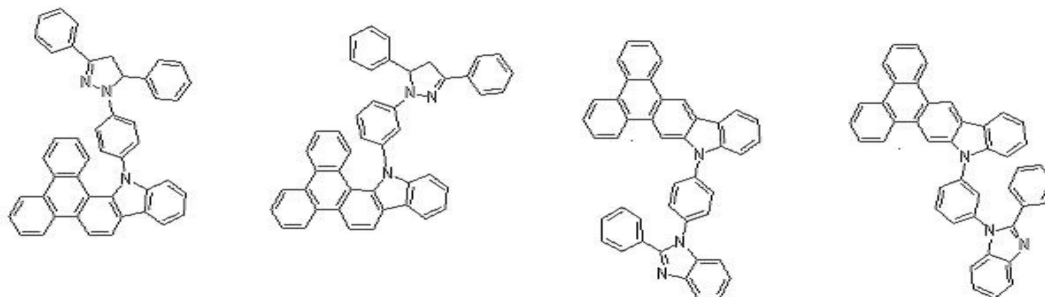
[0199]
[0200] [화학식 331] [화학식 332] [화학식 333] [화학식 334]



[0201]
[0202] [화학식 335] [화학식 336] [화학식 337] [화학식 338]

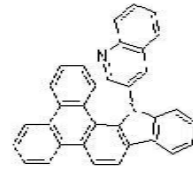
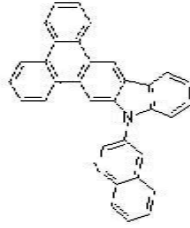
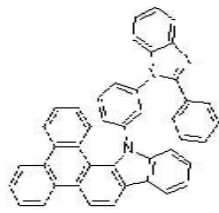
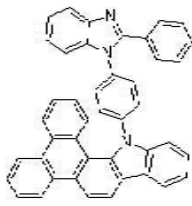


[0203]
[0204] [화학식 339] [화학식 340] [화학식 341] [화학식 342]



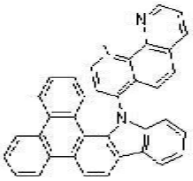
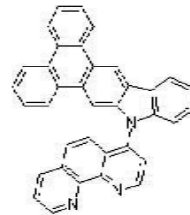
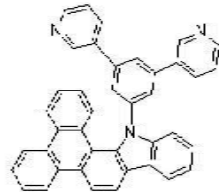
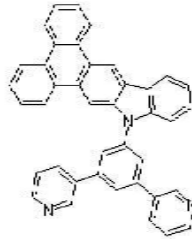
[0205]

[0206] [화학식 343] [화학식 344] [화학식 345] [화학식 346]



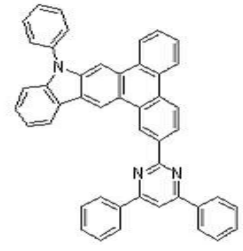
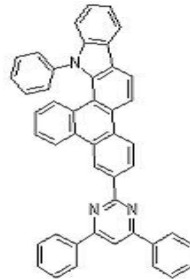
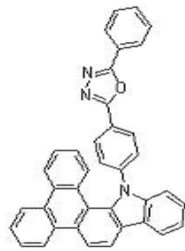
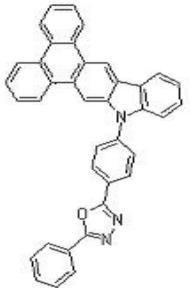
[0207]

[0208] [화학식 347] [화학식 348] [화학식 349] [화학식 350]



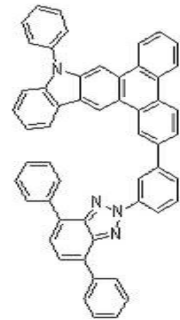
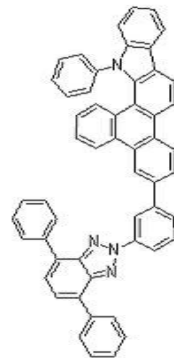
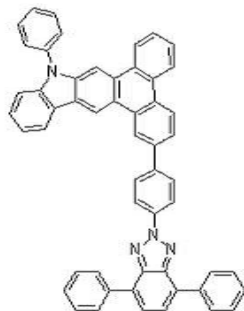
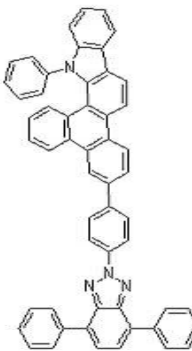
[0209]

[0210] [화학식 351] [화학식 352] [화학식 353] [화학식 354]



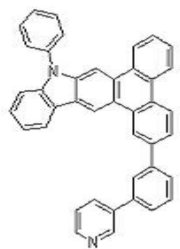
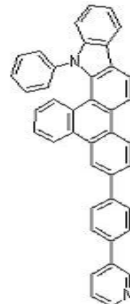
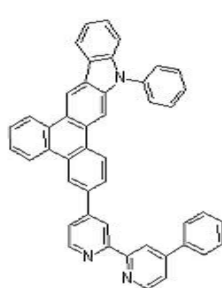
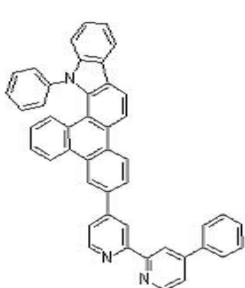
[0211]

[0212] [화학식 355] [화학식 356] [화학식 357] [화학식 358]



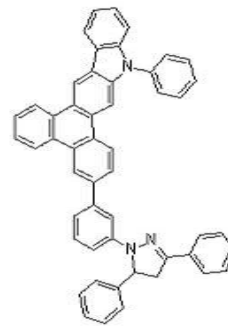
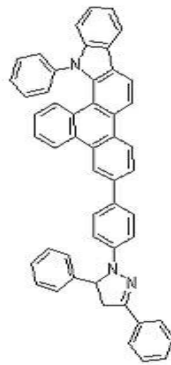
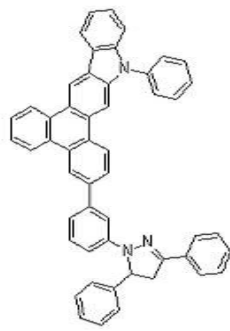
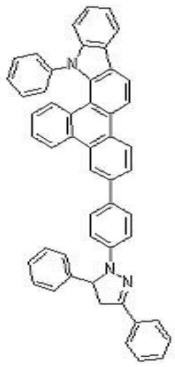
[0213]

[0214] [화학식 359] [화학식 360] [화학식 361] [화학식 362]

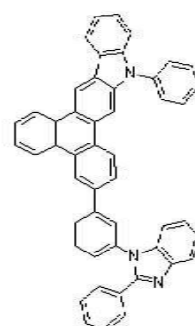
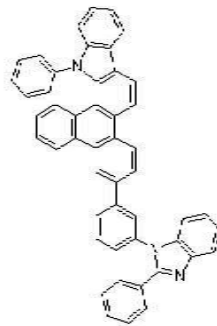
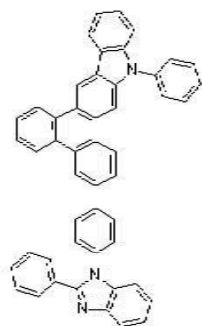
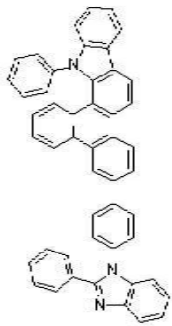


[0215]

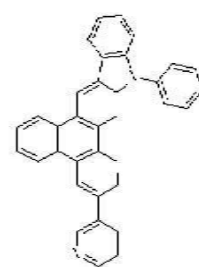
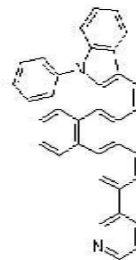
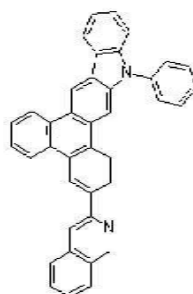
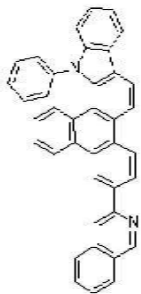
[0216] [화학식 363] [화학식 364] [화학식 365] [화학식 366]



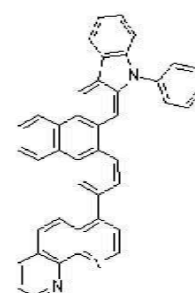
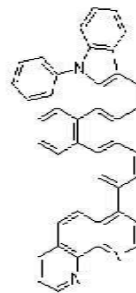
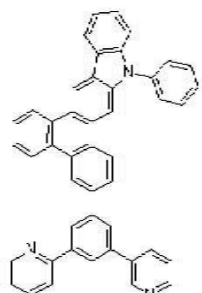
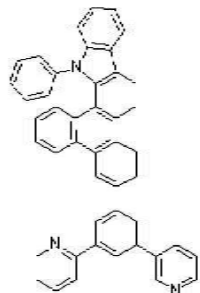
[0217] [0218] [화학식 367] [화학식 368] [화학식 369] [화학식 370]



[0219] [0220] [화학식 371] [화학식 372] [화학식 373] [화학식 374]

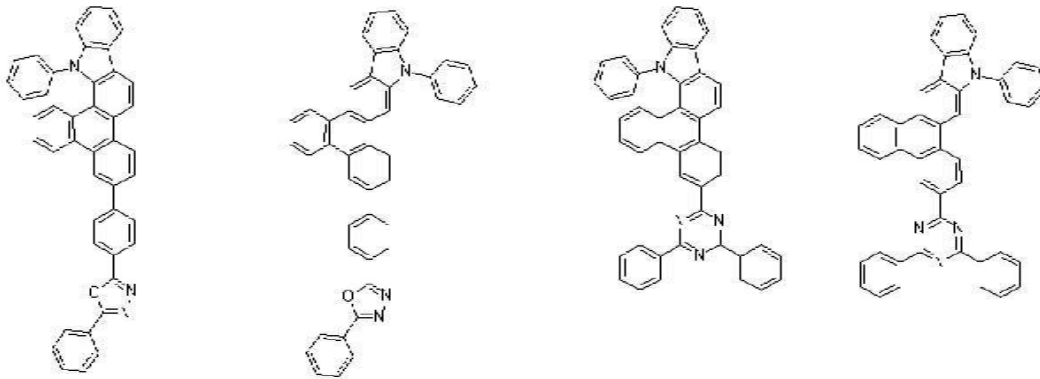


[0221] [0222] [화학식 375] [화학식 376] [화학식 377] [화학식 378]

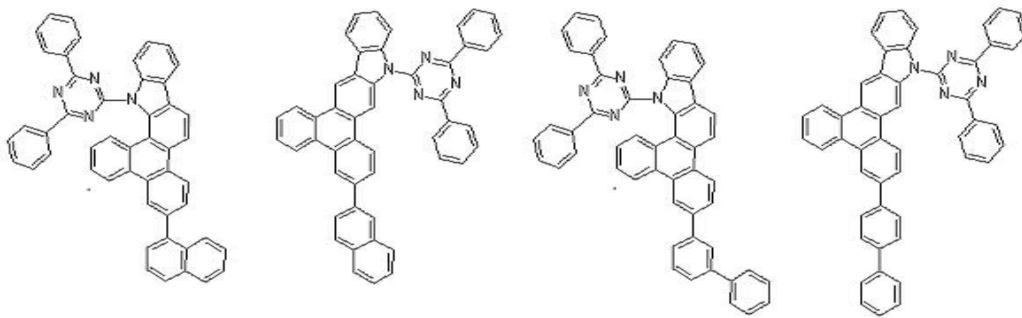


[0223]

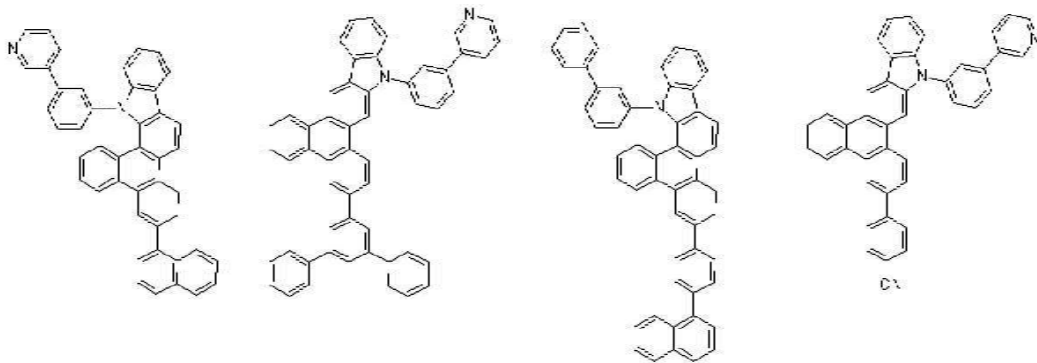
[0224] [화학식 379] [화학식 380] [화학식 381] [화학식 382]



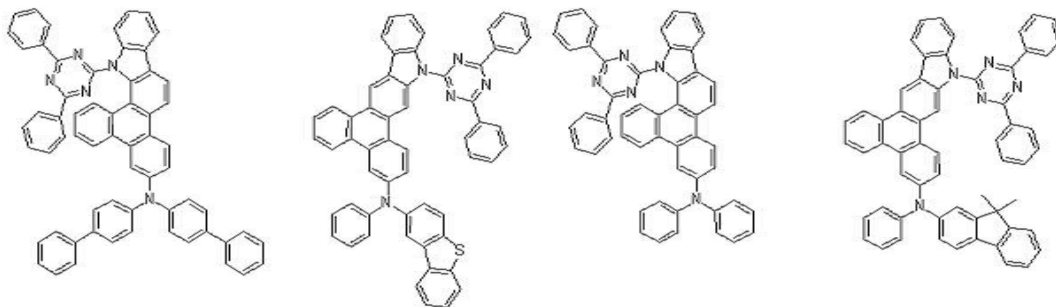
[0225]
[0226] [화학식 383] [화학식 384] [화학식 385] [화학식 386]



[0227]
[0228] [화학식 387] [화학식 388] [화학식 389] [화학식 390]



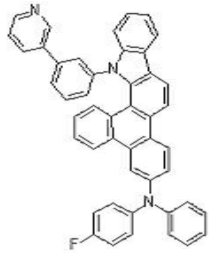
[0229]
[0230] [화학식 391] [화학식 392] [화학식 393] [화학식 394]



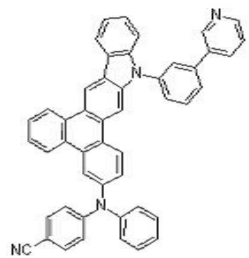
[0231]

[0232]

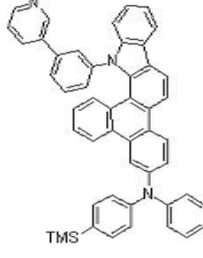
[화학식 395]



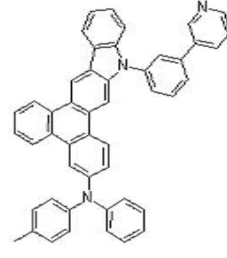
[화학식 396]



[화학식 397]



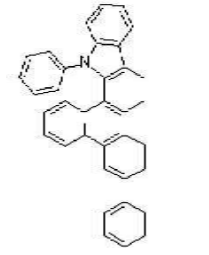
[화학식 398]



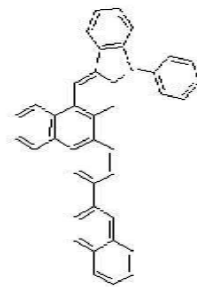
[0233]

[0234]

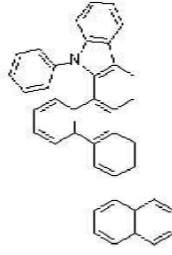
[화학식 399]



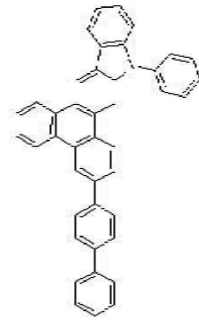
[화학식 400]



[화학식 401]

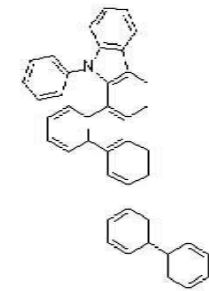


[화학식 402]

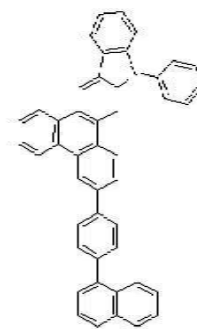


[0235]

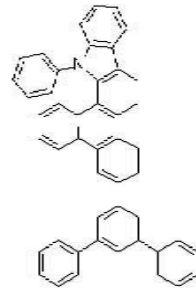
[화학식 403]



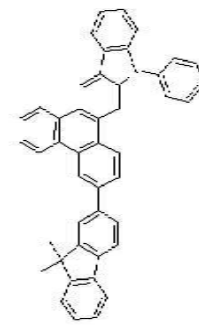
[화학식 404]



[화학식 405]



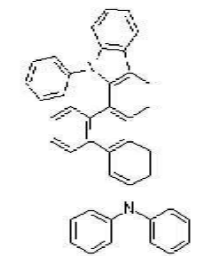
[화학식 406]



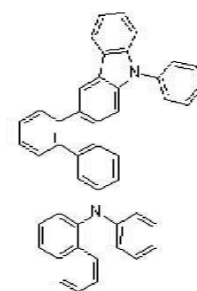
[0236]

[0237]

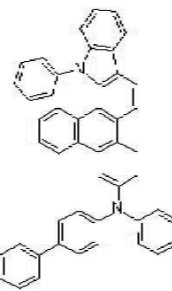
[화학식 407]



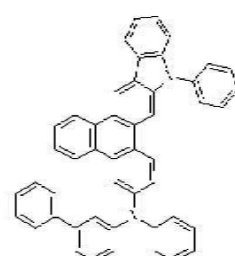
[화학식 408]



[화학식 409]

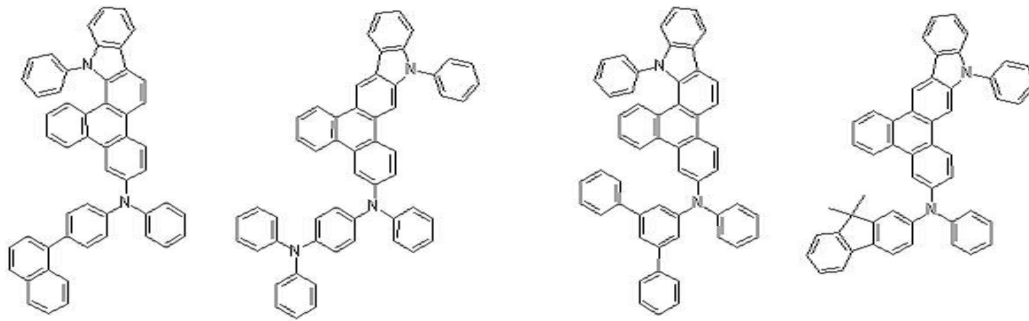


[화학식 410]

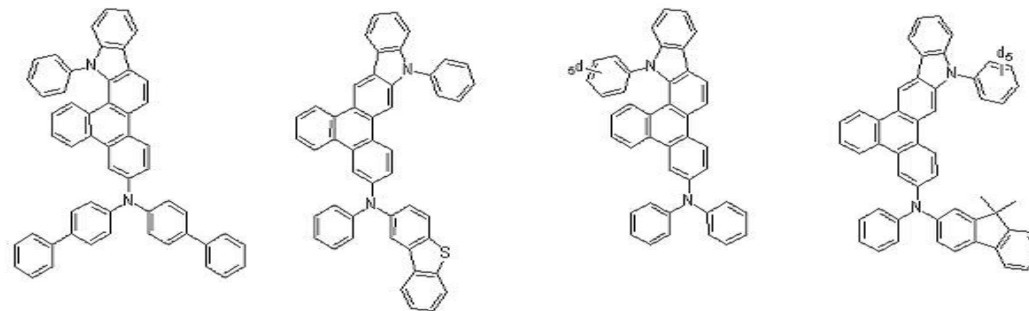


[0238]

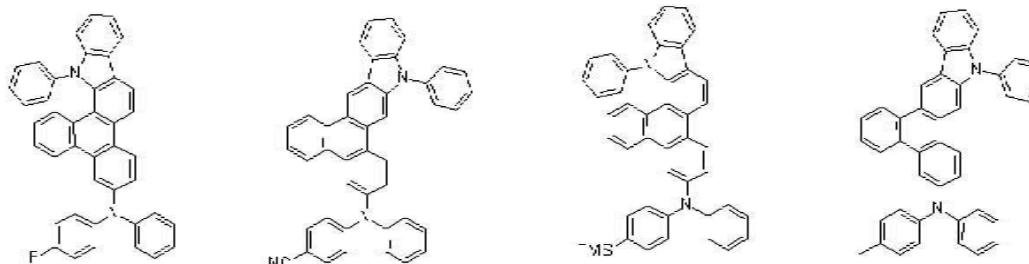
[0239] [화학식 411] [화학식 412] [화학식 413] [화학식 414]



[0240]
[0241] [화학식 415] [화학식 416] [화학식 417] [화학식 418]



[0242]
[0243] [화학식 419] [화학식 420] [화학식 421] [화학식 422]



[0244]
[0245] [화학식 423] [화학식 424] [화학식 425] [화학식 426]

[0246] 또한 본 발명에 따른 유기전계발광소자는 애노드; 캐소드; 및 상기 애노드 및 캐소드 사이에 개재되며, 상기 이형고리 화합물을 포함하는 층을 구비한 것이 특징이다.

[0247] 본 발명의 일실시예에 따르면, 상기 애노드 및 캐소드 사이에 정공주입층, 정공수송층, 전자저지층, 정공저지층, 전자수송층 및 전자주입층 이루어진 균으로부터 선택된 하나 이상의 층을 더 포함할 수 있으며, 이 중에서 발광층에 포함되는 것이 바람직하다. 상기 발광층의 두께는 통상 50 내지 2,000 Å이다.

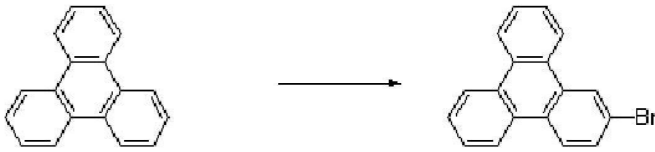
[0248] 이하, 실시예를 통해 본 발명을 보다 구체적으로 설명하기로 한다. 그러나 이는 단지 발명의 이해를 돕기 위해 예시적으로 제공되는 것으로서 본 발명의 범위가 이에 제한되는 것으로 해석되어서는 안된다.

[0249] **합성예 1: 화학식 6의 화합물 합성**

[0250] 1-1. 1-a의 합성

[0251] 하기 반응식 1 의하여 <1-a>를 합성하였다.

[0252] [반응식 1]



[0253]

[0254]

<1-a>

[0255]

1 L 반응용기에 트리페닐렌 19.0 g(0.083 mol)과 니트로벤젠 600 ml를 넣는다. 그리고 철 파우더 0.07 g(0.001 mol)을 넣는다. 반응용기의 온도를 0도로 낮춘다. 동일온도에서 니트로벤젠 50 ml에 브롬 20.0 g(0.125 mol)이 들어있는 용액을 천천히 적가한다. 5시간 동안 교반시킨다. HPLC로 반응 진행 정도 확인한다. 용액중 구성 성분의 비율이 254 nm에서 2:7:1이 되면 Na₂CO₃수용액을 넣어서 반응을 종료시킨다. 반응용액을 염화메틸렌으로 추출하고 유기층을 건조시킨다. 남아있는 니트로벤젠을 감압증류로 제거하고 브로모트리페닐렌을 추가 정제없이 다음반응에 사용한다.

[0256]

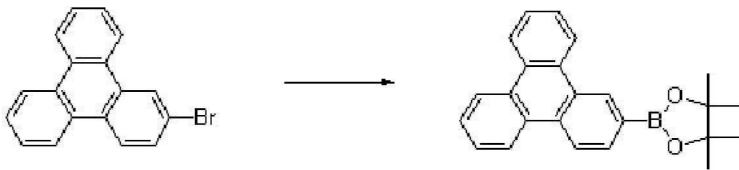
1-2. 1-b의 합성

[0257]

하기 반응식 2 의하여 <1-b>를 합성하였다.

[0258]

[반응식 2]



[0259]

[0260]

<1-b>

[0261]

500 ml 둥근바닥 플라스크에 <1-a> 20.0 g(0.065 mol), 비스(피나콜라토)디보론 24.80 g(0.098 mol), PdCl₂(dppf) 1.1 g(0.001 mol), 포타슘아세테이트 19.17 g(0.195 mol)을 넣은 후 톨루엔 300 ml를 넣고 110도에서 12시간 동안 환류시킨다. 반응이 종료되면 뜨거운 상태에서 감압 여과한다. 용액을 건조시킨 후에 염화메틸렌과 노르말헥산을 전개용매로 컬럼크로마토그래피를 이용하여 <1-b> 15.2 g(65.9 %)을 제조하였다.

[0262]

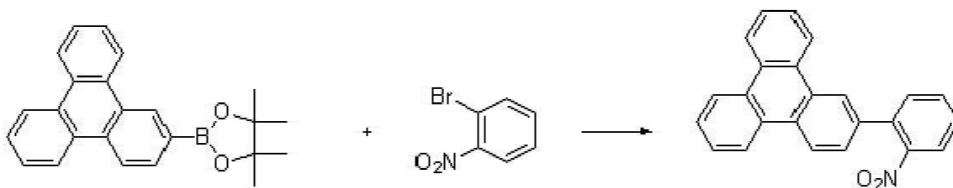
1-3. 1-c의 합성

[0263]

하기 반응식3에 의하여 <1-c>를 합성하였다.

[0264]

[반응식3]



[0265]

[0266]

<1-c>

[0267]

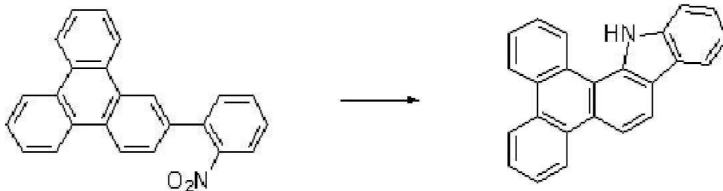
250 ml 둥근 바닥 플라스크에 <1-c> 14.91 g(0.042 mol), 2-브로모니트로벤젠 10.26 g(0.051 mol), 테트라키스트라이페닐포스핀 팔라듐(0) 1.0 g(0.001 mol), 포타슘카보네이트 11.70 g(0.08 mol)을 넣고 1,4-디옥산

70ml, 톨루엔 70ml, 물 30 ml를 넣은 후 80도에서 6시간 동안 교반시킨다. 반응이 완료되면 실온으로 온도를 낮추고 톨루엔과 물로 추출하여 유기층을 건조시킨후 컬럼크로마토그래피로 <1-c> 11.60 g(78.4%)를 제조하였다.

[0268] 1-4. 1-d의 합성

[0269] 하기 반응식4에 의하여 <1-d>를 합성하였다.

[0270] [반응식4]



[0271]

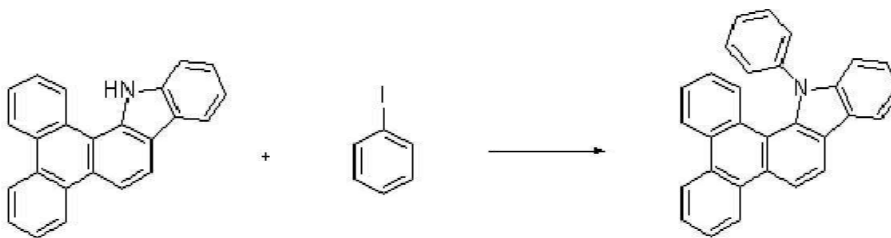
[0272] <1-d>

[0273] 500ml의 둥근 바닥 플라스크에 반응식 3로부터 얻은 <1-c> 10.0 g (0.029mol), 트리페닐포스핀 37.54 g (0.143mol), 디클로로벤젠 200ml를 넣고 12시간 동안 환류시킨다. 반응이 종료되면 상기 용액을 상온으로 냉각하고 건조시킨 후 컬럼크로마토그래피로 분리하여 얻은 고체를 건조하여 <1-d> 4.2 g(46.2 %)을 제조하였다.

[0274] 1-5, 화학식 6의 합성

[0275] 하기 반응식 5에 의하여 화학식 7을 합성하였다.

[0276] [반응식 5]



[0277]

[0278] 화학식6

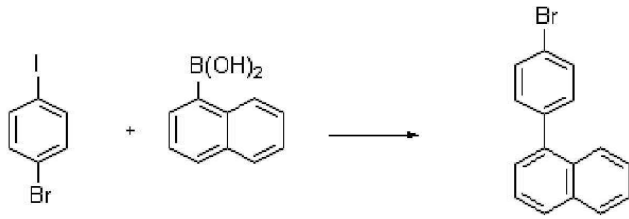
[0279] 100 ml 둥근바닥플라스크에 <1-d> 8.50 g(0.027mol), 요도드벤젠(Iodobenzene) 10.93 g(0.054 mol), CuCl 0.66 g(0.007 mol), 포타슘카보네이트 11.10 g(0.080 mol)을 넣고 DMSO 50 ml에 녹인 후에 12시간 동안 환류시킨다. TLC로 반응종료여부를 확인한 후에 반응이 종료되면 에틸아세테이트로 추출하고 유기층을 건조시킨 후 테트라 히드로퓨란과 아세톤으로 재결정한다. 재결정으로 순도를 높여 화학식6를 7.8 g(74.0 %)를 제조하였다.

[0280] **합성예 2: 화학식 39의 화합물 합성**

[0281] 2-1. 2-a의 합성

[0282] 하기 반응식 6 의하여 <2-a>를 합성하였다.

[0283] [반응식 6]



[0284]

[0285]

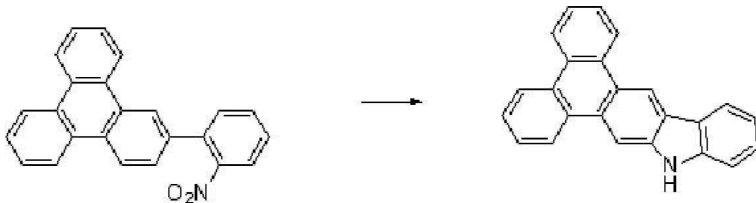
<2-a>

[0286] 5 L 둥근바닥 플라스크에 4-브로모-요요드벤젠(4-Bromo-iodobenzene) 200 g(0.707 mol), 1-나프틸-보론산(1-naphthyl- boronic acid) 121.6 g(0.707 mol), Pd(PPh₃)₄ 16.4 g(0.014 mol), 포타슘카보네이트 195.4 g(1.414 mol)을 넣고 테트라히드로퓨란 1000 ml, 톨루엔 1000 ml, 물 400 ml를 넣고 12시간 동안 환류시킨다. TLC로 반응종료여부를 확인한다. 반응이 종료되면 추출하여 유기층을 건조시킨다. 컬럼크로마토그래피로 <2-a> 120.1 g(60.0 %) 제조하였다.

[0287] 2-2. 2-b의 합성

[0288] 하기 반응식 7에 의하여 <2-b>를 합성하였다.

[0289] [반응식 7]



[0290]

[0291]

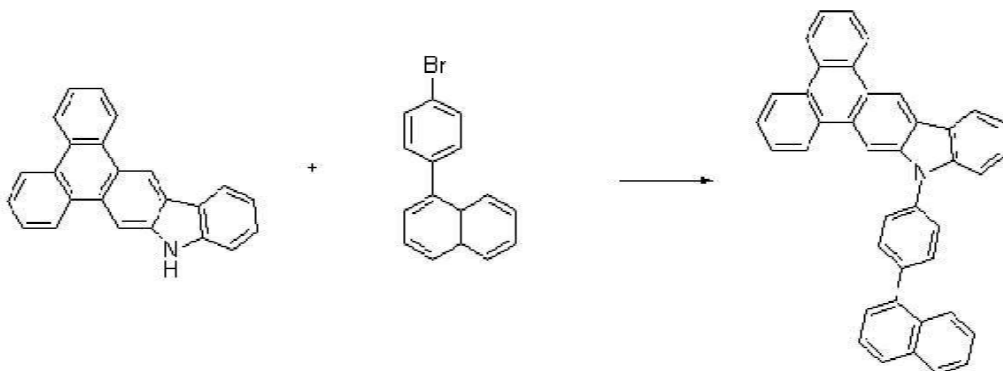
<2-b>

[0292] 500ml의 둥근 바닥 플라스크에 반응식 3로부터 얻은 <1-c> 10.0 g (0.029mol), 트리페닐포스핀 37.54 g (0.143mol), 디클로로벤젠 200ml를 넣고 12시간 동안 환류시킨다. 반응이 종료되면 상기 용액을 상온으로 냉각하고 건조시킨 후 컬럼크로마토그래피로 분리하여 얻은 고체를 건조하여 <2-b> 4.2 g(46.2 %)을 제조하였다.

[0293] 2-3, 화학식 5의 합성

[0294] 하기 반응식 8에 의하여 화학식 39을 합성하였다.

[0295] [반응식 8]



[0296]

[0297] 화학식39

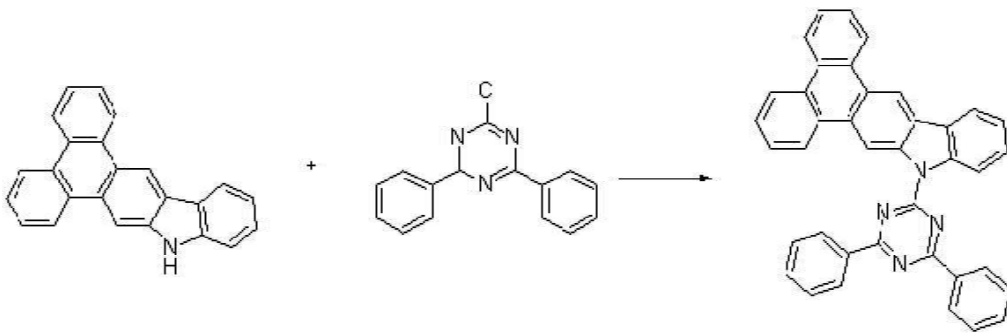
[0298] 250 ml 둥근바닥플라스크에 <2-b> 4.3 g(0.015 mol), <2-a> 4.0 g(0.013 mol), Pd(OAc)₂ 0.11 g(0.001 mol)을 톨루엔 80 ml에 녹인 후에 소듐터서리부톡사이드 4.8 g(0.05 mol)을 넣고 70도로 온도를 올린다. 반응기의 온도가 70도가 되면 트리-tert-부틸포스핀 2 ml(0.001 mol)을 넣는다. 그리고 2시간 동안 환류시킨다. 반응이 종료되면 여과한 후에 유기층을 건조시킨다. 유기층을 테트라히드로 퓨란과 아세톤으로 재결정으로 순도를 높인다. 화학식39 3.8 g(58.0 %)를 제조하였다.

[0299] **합성예 3: 화학식 83의 화합물 합성**

[0300] 3-1, 화학식 5의 합성

[0301] 하기 반응식9에 의하여 화학식 83을 합성하였다.

[0302] [반응식 9]



[0303]

[0304] 화학식 83

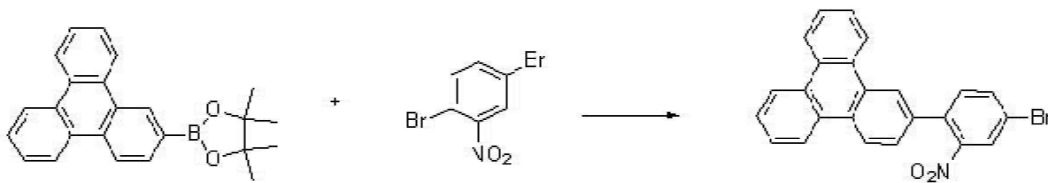
[0305] 500 ml 둥근바닥 플라스크에 NaH 0.57 g(0.024 mol)을 넣고 질소분위기에서 DMF 100 ml를 넣고 0도에서 교반시킨다. <2-b> 4.2 g(0.013 mol)을 DMF 90 ml에 녹인 후 반응용기에 천천히 적가하고 같은 온도에서 1시간 동안 교반시킨다. 클로로디페닐트리아진 5.31 g(0.020 mol)을 DMF 75 ml에 녹인 후 반응용기에 천천히 적가한다. 천천히 실온으로 올리고 반응이 종료되면 반응용기에 물을 넣고 생성된 고체를 여과한다. 재결정으로 정제하여 화학식 83을 5.5 g(75.8%) 제조하였다.

[0306] **합성예 4: 화학식 150의 화합물 합성**

[0307] 4-1. 4-a의 합성

[0308] 하기 반응식 10 의하여 <4-a>를 합성하였다.

[0309] [반응식 10]



[0310]

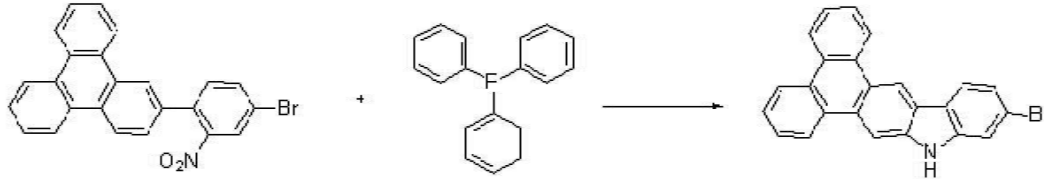
[0311] <4-a>

[0312] 250 ml 둥근 바닥 플라스크에 <1-b> 15.0 g(0.050 mol), 2,5-디브로모트로벤젠 15.58 g(0.055 mol), 테트라키스트리페닐포스핀 팔라듐(0) 1.1 g(0.001 mol), 포타슘카보네이트 12.78 g(0.09 mol)을 넣고 1,4-디옥산 75ml, 톨루엔 75ml, 물 30 ml를 넣은 후 80도에서 6시간 동안 교반시킨다. 반응이 완료되면 실온으로 온도를 낮추고 톨루엔과 물로 추출하여 유기층을 건조시킨후 컬럼크로마토그래피로 <4-a> 14.10 g(71.2 %)를 제조하였다.

[0313] 4-2. 4-b의 합성

[0314] 하기 반응식 11 의하여 <4-b>를 합성하였다.

[0315] [반응식 11]



[0316]

[0317]

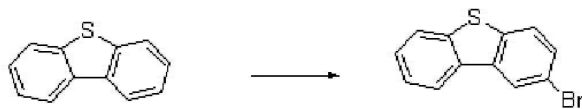
<4-b>

[0318] 500ml의 둥근 바닥 플라스크에 반응식 10로부터 얻은 <4-a> 14.0 g (0.033mol), 트리페닐포스핀 42.87 g (0.163mol), 디클로로벤젠 280ml를 넣고 12시간동안 환류시킨다. 반응이 종료되면 상기 용액을 상온으로 냉각하고 건조시킨 후 컬럼크로마토그래피로 분리하여 얻은 고체를 건조하여 <4-b> 4.1 g(31.7 %)을 제조하였다.

[0319] 4-3. 4-c의 합성

[0320] 하기 반응식12 의하여 <4-c>를 합성하였다.

[0321] [반응식 12]



[0322]

[0323]

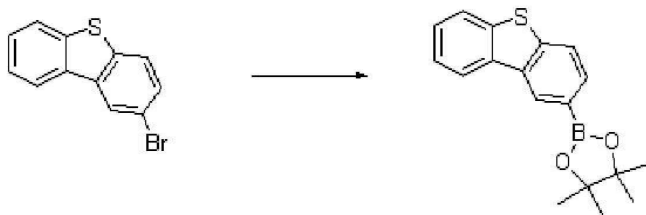
<4-c>

[0324] 1L 반응용기에 디벤조티오펜 25.0 g(0.135 mol)을 넣고 클로로포름 250 ml에 녹인 후 반응기의 온도를 0도로 낮춘다. 브롬 21.5 g(0.135 mol)을 클로로포름 80 ml에 희석시킨 후에 반응용기에 천천히 적가한다. 적가 후 상온으로 온도를 천천히 올리고 8시간 동안 교반시킨다. 반응종료여부를 TLC로 확인한다. 반응이 종료되면 물 100 ml를 넣고 소듐티오설페이트로 브롬을 제거한다. 클로로포름과 물로 추출한다. 유기층을 농축하고 에탄올로 재결정한다. 염화메틸렌과 에탄올로 재결정을 반복하여 순도를 높인다. <4-c>을 17.6 g(50.0%) 제조하였다.

[0325] 4-4. 4-d의 합성

[0326] 하기 반응식 13 의하여 <4-d>를 합성하였다.

[0327] [반응식 13]



[0328]

[0329]

<4-d>

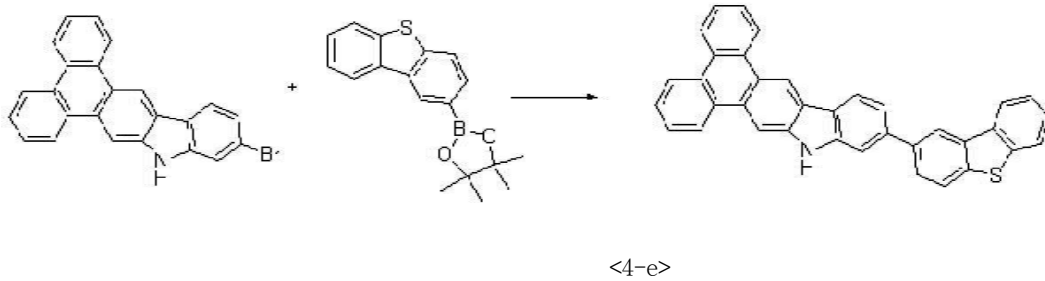
[0330] 500ml 둥근바닥 플라스크에 <4-c> 15.0 g(0.057 mol), 비스(피나콜라토)디보론 21.71 g(0.086 mol), PdCl₂(dppf) 0.9 g(0.001 mol), 포타슘아세테이트 16.78 g(0.171 mol)을 넣은 후 톨루엔 230 ml를 넣고 110도에서 12시간 동안 환류시킨다. 반응이 종료되면 뜨거운 상태에서 감압 여과한다. 용액을 건조시킨 후에 염화

메틸렌과 노르말렉산을 전개용매로 컬럼크로마토그래피를 이용하여 <4-d> 13.8 g(78.0 %)을 제조하였다.

[0331] 4-5. 4-e의 합성

[0332] 하기 반응식 14 의하여 <4-e>를 합성하였다.

[0333] [반응식 14]



[0334]

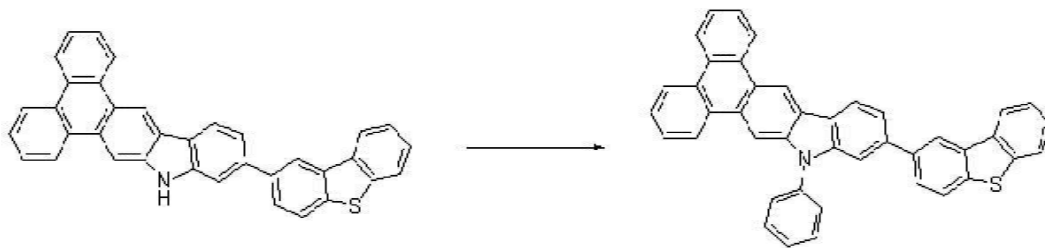
[0335]

[0336] 250 ml 둥근 바닥 플라스크에 <4-b> 10.0 g(0.030 mol), <4-d> 10.46 g(0.034 mol), 테트라키스트리페닐포스핀 팔라듐(0) 0.7 g(0.001 mol), 포타슘카보네이트 8.47 g(0.06 mol)을 넣고 1,4-디옥산 50ml, 톨루엔 50ml, 물 20 ml를 넣은 후 80도에서 6시간 동안 교반시킨다. 반응이 완료되면 실온으로 온도를 낮추고 톨루엔과 물로 추출하여 유기층을 건조시킨 후 재결정으로 <4-e> 11.10 g (72.5 %)를 제조하였다

[0337] 4-6, 화학식 150의 합성

[0338] 하기 반응식15에 의하여 화학식 150을 합성하였다.

[0339] [반응식 15]



[0340]

[0341] 화학식150

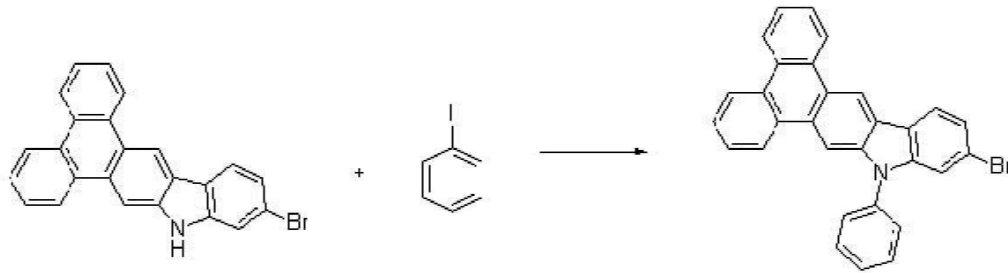
[0342] 100 ml 둥근바닥플라스크에 <4-e> 10.0 g(0.020mol), Iodobenzene 8.17 g(0.040 mol), CuCl 0.50 g(0.005 mol), 포타슘카보네이트 8.30 g(0.060 mol)을 넣고 DMSO 80 ml에 녹인 후에 12시간 동안 환류시킨다. TLC로 반응종료여부를 확인한 후에 반응이 종료되면 에틸아세테이트로 추출하고 유기층을 건조시킨 후 테트라 히드로퓨란과 아세톤으로 재결정한다. 재결정으로 순도를 높여 화학식150를 9.3 g(80.7 %)를 제조하였다.

[0343] **합성에 5: 화학식 181의 화합물 합성**

[0344] 5-1. 5-a의 합성

[0345] 하기 반응식 16 의하여 <5-a>를 합성하였다.

[0346] [반응식 16]



[0347]

[0348]

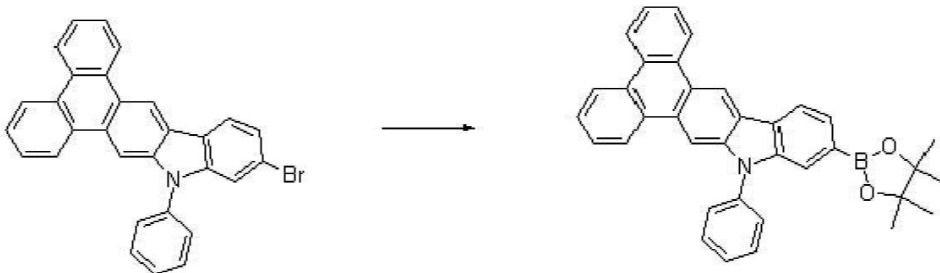
<5-a>

[0349] 100 ml 둥근바닥플라스크에 <4-b> 7.10 g(0.019mol), Iodobenzene 7.62 g(0.037 mol), CuCl 0.46 g(0.005 mol), 포타슘카보네이트 7.74 g(0.056 mol)을 넣고 DMSO 40 ml에 녹인 후에 12시간 동안 환류시킨다. TLC로 반응종료여부를 확인한 후에 반응이 종료되면 에틸아세테이트로 추출하고 유기층을 건조시킨 후 테트라 히드로퓨란과 아세톤으로 재결정한다. 재결정으로 순도를 높여 <5-a>를 7.1 g(80.5 %)를 제조하였다.

[0350] 5-2. 5-b의 합성

[0351] 하기 반응식16의하여 <5-b>를 합성하였다.

[0352] [반응식 16]



[0353]

[0354]

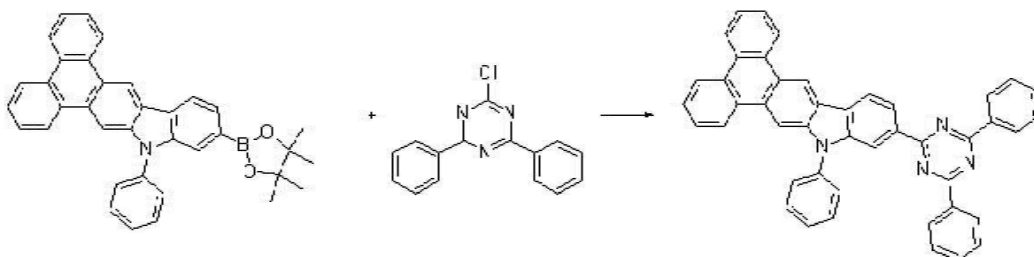
<5-b>

[0355] 500 ml 둥근바닥 플라스크에 <5-a> 7.0 g(0.015 mol), 비스(피나콜라토)디보론 5.6 g(0.022 mol), PdCl₂(dppf) 0.2 g(0.001 mol), 포타슘아세테이트 4.4 g(0.044 mol)을 넣은 후 톨루엔 120 ml를 넣고 110도에서 12시간 동안 환류시킨다. 반응이 종료되면 뜨거운 상태에서 감압 여과한다. 용액을 건조시킨 후에 염화메틸렌과 노르말헥산을 전개용매로 컬럼크로마토그래피를 이용하여 <5-b > 6.2 g(80.5 %)을 제조하였다.

[0356] 5-3, 화학식 181의 합성

[0357] 하기 반응식 17에 의하여 화학식 150을 합성하였다.

[0358] [반응식 17]



[0359]

[0360] 화학식181

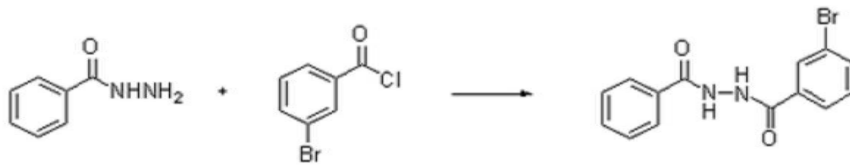
[0361] 250 ml 둥근 바닥 플라스크에 <5-b> 6.2 g(0.012 mol), Chlorodiphenyltriazine 3.8 g(0.014 mol), 테트라키스트리페닐포스핀 팔라듐(0) 0.3 g(0.001 mol), 포타슘카보네이트 3.30 g(0.024 mol)을 넣고 1,4-디옥산 30ml, 톨루엔 30ml, 물 12 ml를 넣은 후 80도에서 6시간 동안 교반시킨다. 반응이 완료되면 실온으로 온도를 낮추고 톨루엔과 물로 추출하여 유기층을 건조시킨 후 재결정으로 화학식 181 5.0 g (67.1 %)를 제조하였다

[0362] **합성에 6: 화학식 186의 화합물 합성**

[0363] 6-1. 6-a의 합성

[0364] 하기 반응식 18 의하여 <6-a>를 합성하였다.

[0365] [반응식 18]



[0366]

[0367]

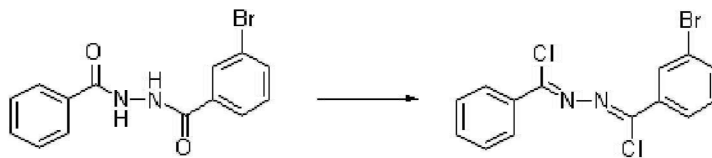
<6-a>

[0368] 2L 반응용기에 3-브로모-벤조일 클로라이드 24.93 g(0.177 mol)을 넣고 테트라히드로퓨란 250 ml에 녹인 후 0도에서 교반시킨다. 벤즈히드라지드 (benzhydrazide) 23.0 g(0.169 mol)을 테트라히드로퓨란 230 ml에 녹인 후 반응기에 천천히 적가한다. 5시간 동안 교반시키고 반응이 종료되면 생성된 고체를 필터하고 테트라히드로퓨란으로 닦아준다. <6-a > 30.6 g(56.8 %)을 제조하였다.

[0369] 6-2. 6-b의 합성

[0370] 하기 반응식 19 의하여 <6-b>를 합성하였다.

[0371] [반응식 19]



[0372]

[0373]

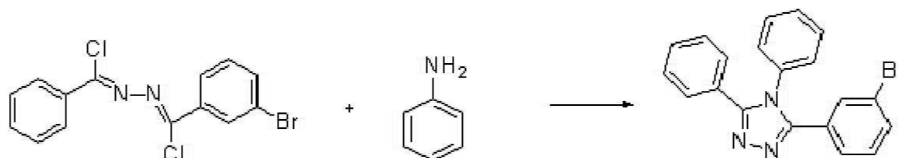
<6-b>

[0374] 1L 반응용기에 <6-a> 30.6 g(0.096 mol), PCl5 43.93 g(0.211 mol)을 넣고 톨루엔 460 ml에 녹인다. 120도에서 환류시키면서 10시간 동안 교반시킨다. 반응이 종료되면 물 500 ml로 반응을 종료시키고 추출한다. 유기층을 무수처리하고 메탄올로 재결정한다. <6-b> 14.2 g(41.6%)를 제조하였다.

[0375] 6-3. 6-c의 합성

[0376] 하기 반응식 20 의하여 <6-c>를 합성하였다.

[0377] [반응식 20]



[0378]

[0379]

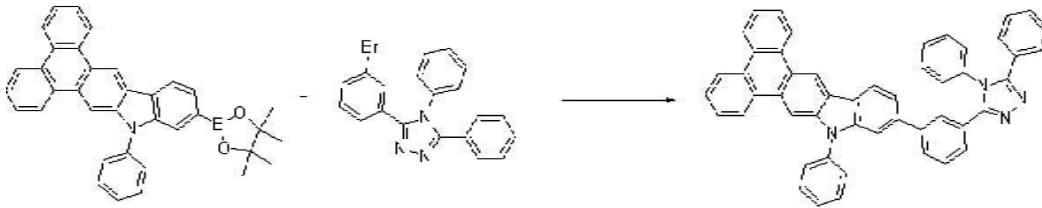
<6-c>

[0380] 250 ml 반응용기에 <6-b> 14.2 g(0.041 mol), 아닐린 3.71 g(0.040 mol)을 N,N -디메틸아닐린 100 ml에 녹인 후 135도에서 5시간 동안 교반시킨다. 반응이 종료되면 1N 염산을 100 ml를 넣고 약 30분 동안 교반시킨다. 생성된 고체를 필터한다. 생성된 고체를 톨루엔에 녹이고 소듐바이카보네이트로 중화시켜 추출한다. 유기층을 무수처리하고 유기층을 농축시킨다. 에탄올과 노르말헥산으로 재결정한다. <6-c> 8.2 g(54.6 %)을 제조하였다.

[0381] 6-4, 화학식 186의 합성

[0382] 하기 반응식 21에 의하여 화학식 186을 합성하였다.

[0383] [반응식 21]



[0384]

[0385] 화학식 186

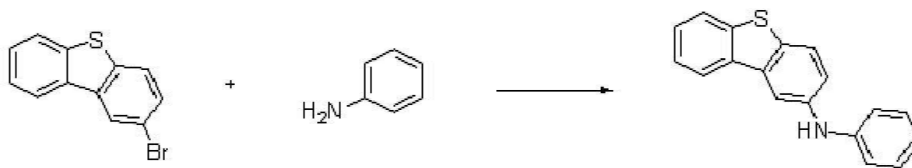
[0386] 250 ml 둥근 바닥 플라스크에 <5-b> 8.3 g(0.016 mol), <6-c> 5.0 g(0.013 mol), 테트라키스트리페닐포스핀 팔라듐(0) 0.3 g(0.001 mol), 포타슘카보네이트 3.70 g(0.027 mol)을 넣고 1,4-디옥산 30ml, 톨루엔 30ml, 물 10 ml를 넣은 후 80도에서 6시간 동안 교반시킨다. 반응이 완료되면 실온으로 온도를 낮추고 톨루엔과 물로 추출하여 유기층을 건조시킨 후 재결정으로 화학식 186 6.2 g (67.7 %)를 제조하였다

[0387] **합성예 7: 화학식 226의 화합물 합성**

[0388] 7-1. 7-a의 합성

[0389] 하기 반응식 22에 의하여 <7-a>를 합성하였다.

[0390] [반응식 22]



[0391]

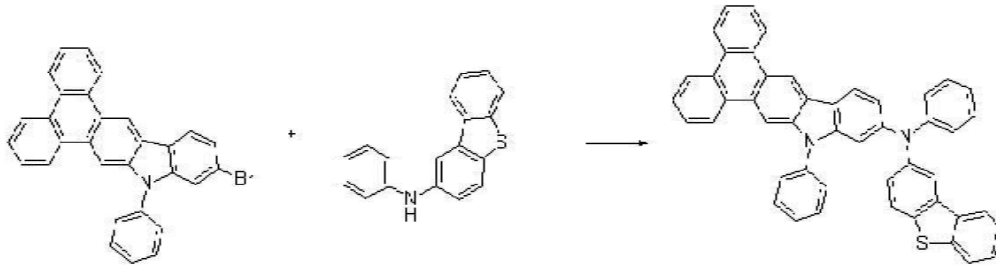
[0392] <7-a>

[0393] 250 ml 둥근바닥플라스크에 <4-c> 17.6 g(0.067 mol), 아닐린 6.2 g(0.067 mol), Pd₂(dba)₃ 1.2 g(0.001 mol), 소듐터셔리부톡사이드 12.9 g(0.134 mol), BINAP 0.8 g(0.001 mol)을 넣고 톨루엔에 녹인다. 8시간 동안 환류시킨다. TLC로 반응종료 여부를 확인한다. 반응이 종료되면 여과한 후 유기층을 농축시킨다. 컬럼크로마토그래피(전개용매 MC:Hex=1:3)로 분리한다. <7-a> 12.0 g(65.2 %) 제조하였다.

[0394] 7-2. 화학식 226의 합성

[0395] 하기 반응식23에 의하여 화학식 226을 합성하였다.

[0396] [반응식23]



[0397]

화학식 226

[0398]

250 ml 둥근바닥플라스크에 <5-a> 10.0 g(0.021 mol), <7-a> 7.0 g(0.025 mol), Pd(OAc)₂ 0.19 g(0.001 mol)을 톨루엔 160 ml에 녹인 후에 소듐터셔리부톡사이드 8.1 g(0.085 mol)을 넣고 70도로 온도를 올린다. 반응기의 온도가 70도가 되면 트리-tert-부틸포스핀 2.12 ml(0.001 mol)을 넣는다. 그리고 2시간 동안 환류시킨다. 반응이 종료되면 여과한 후에 유기층을 건조시킨다. 유기층을 테트라히드로퓨란과 아세톤으로 재결정으로 순도를 높인다. 화학식226 9.0 g(63.8 %)를 제조하였다.

[0399]

합성예 8: 화학식 227의 화합물 합성

[0400]

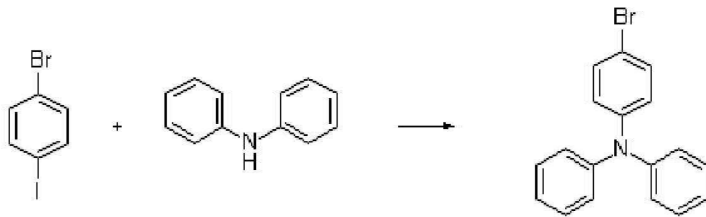
8-1. 8-a의 합성

[0401]

하기 반응식 24 의하여 <8-a>를 합성하였다.

[0402]

[반응식 24]



[0403]

<8-a>

[0404]

[0405]

250 ml 둥근바닥플라스크에 4-브로모요도드벤젠 15.0 g(0.053 mol), 디페닐아민 9.0 g(0.053 mol), Pd(dba)₃ 1.0 g(0.001 mol), 소듐터셔리부톡사이드 10.2 g(0.106 mol), BINAP 0.7 g(0.001 mol)을 넣고 톨루엔에 녹인다. 8시간 동안 환류시킨다. TLC로 반응종료 여부를 확인한다. 반응이 종료되면 여과한 후 유기층을 농축시킨다. 컬럼크로마토 그래피(전개용매 MC:Hex=1:3)로 분리한다. <8-a> 12.8 g(74.5 %) 제조하였다.

[0406]

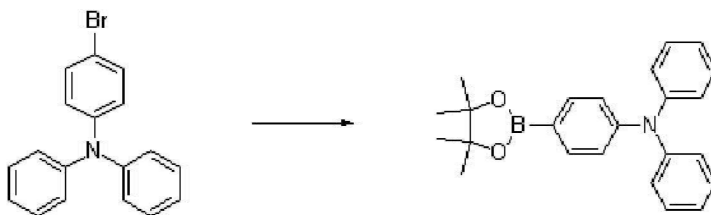
8-2. 8-b의 합성

[0407]

하기 반응식 25 의하여 <8-b>를 합성하였다.

[0408]

[반응식 25]



[0409]

<8-b>

[0410]

[0411]

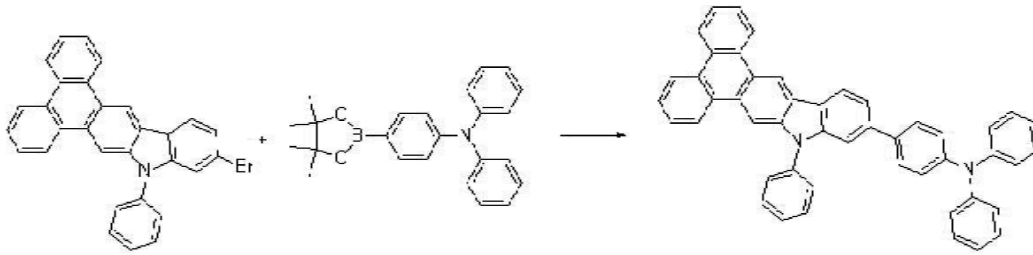
500 ml 둥근바닥 플라스크에 <8-a> 7.0 g(0.039 mol), 비스(피나콜라토)다이보론 15.0 g(0.059 mol),

PdCl₂(dppf) 0.6 g(0.001 mol), 포타슘아세테이트 11.6 g(0.118 mol)을 넣은 후 톨루엔 200 ml를 넣고 110도에서 12시간 동안 환류시킨다. 반응이 종료되면 뜨거운 상태에서 감압 여과한다. 용액을 건조시킨 후에 염화메틸렌과 노르말헥산을 전개용매로 컬럼크로마토그래피를 이용하여 <8-b> 10.2 g(69.6 %)을 제조하였다.

[0412] 8-3. 화학식 227의 합성

[0413] 하기 반응식 6에 의하여 화학식 227을 합성하였다.

[0414] [반응식26]



[0415]

[0416]

화학식 227

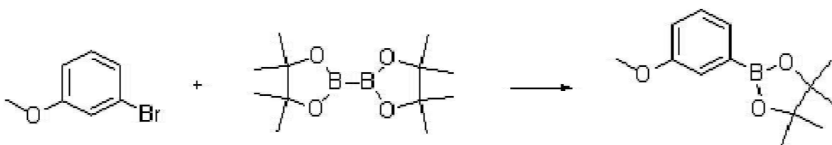
[0417] 250 ml 둥근 바닥 플라스크에 <5-a> 10.0 g(0.021 mol), <8-b> 9.4 g(0.025 mol), 테트라키스트리페닐포스핀 팔라듐(0) 0.5 g(0.001 mol), 포타슘카보네이트 5.9 g(0.042 mol)을 넣고 1,4-디옥산 50ml, 톨루엔 50ml, 물 20 ml를 넣은 후 80도에서 6시간 동안 교반시킨다. 반응이 완료되면 실온으로 온도를 낮추고 톨루엔과 물로 추출하여 유기층을 건조시킨 후 재결정으로 화학식 227 10.2 g (75.7 %)를 제조하였다

[0418] **합성예 9: 화학식 237의 화합물 합성**

[0419] 9-1. 9-a의 합성

[0420] 하기 반응식 27 의하여 <9-a>를 합성하였다.

[0421] [반응식 27]



[0422]

[0423]

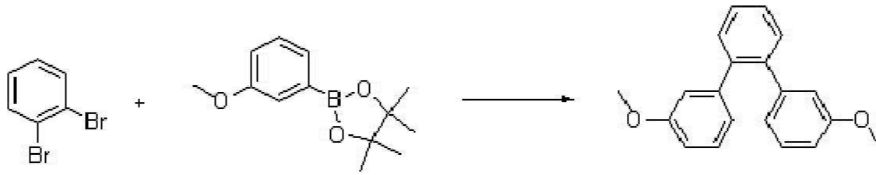
<9-a>

[0424] 250 ml 둥근 바닥 플라스크에 3-브로모 아니솔(3-Bromo anisole), 비스(비나콜라토)디보론 (Bis(pinacolato)diboron), PdCl₂(dppf), 포타슘아세테이트와 톨루엔을 넣고 환류시킨다. 반응종료여부를 TLC 로 확인하고 반응이 완료되면 여과한 후 유기층을 건조시키고, 컬럼 크로마토그래피로 <9-a> 30.0 g(80%)를 제조하였다.

[0425] 9-2. 9-b의 합성

[0426] 하기 반응식 28에 의하여 <9-b>를 합성하였다.

[0427] [반응식 28]



[0428]

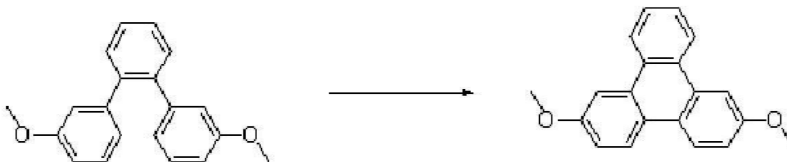
[0429] <9-b>

[0430] <1-a> 29.8 g(0.127 mol)과 1,2-디브로모벤젠 12 g(0.051 mol), Pd(PPh₃)₄ 2.4 g(0.002 mol), 포타슘 카보네이트 28.1 g(0.203 mol)을 250 ml 둥근바닥플라스크에 넣은 후에 테트라히드로퓨란 60 ml, 1,4-다이옥산 60ml, 물 24 ml를 넣고 12시간동안 환류시킨다. TLC로 반응종료여부를 확인 한 후에 톨루엔과 물로 추출하고 유기층을 건조시킨다. 분리하지 않고 바로 다음반응을 진행한다.

[0431] 9-3. 9-c의 합성

[0432] 하기 반응식 29에 의하여 <9-c>를 합성하였다.

[0433] [반응식 29]



[0434]

[0435] <9-c>

[0436] 0도에서 1000ml 둥근바닥 플라스크에 <1-b> 89.0 g(0.307 mol), FeCl₃ 99.4 g(0.613 mol)을 넣고 염화메틸렌 500 ml와 황산 10.5 g을 넣고 4시간동안 동일온도에서 교반시킨다. 실온으로 올린 후에 3시간 더 교반시킨다. 반응이 종료되면 여과하고 메탄올로 재결정한다. <9-c>화합물 75.8 g(64.7%)로 제조하였다.

[0437] 9-4. 9-d의 합성

[0438] 하기 반응식 30에 의하여 <9-d>를 합성하였다.

[0439] [반응식 30]



[0440]

[0441] <9-d>

[0442] 1000 ml 둥근 바닥 플라스크에 <9-c> 89.0 g(0.309 mol)을 염화메틸렌 500 ml에 녹인 후 0도로 냉각시킨다. 그리고 동일온도에서 BBr₃을 넣고 상온으로 천천히 올린 후에 4시간동안 교반시킨다. 반응이 종료되면 물400 ml를 넣는다. 석출된 결정을 여과한다. <9-d>를 75.8 g(64.7%)로 제조하였다.

[0443] 9-5. 9-e의 합성

[0444] 하기 반응식 31에 의하여 <9-e>를 합성하였다.

[0445] [반응식 31]



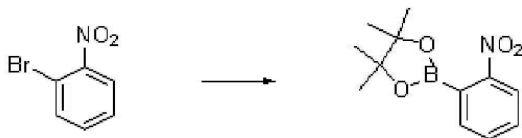
[0446]

[0447] <9-e>

[0448] 2 L의 둥근 바닥 플라스크에 반응식 30로부터 얻은 <9-d> 89.0 g (0.342 mol)을 넣고 염화메틸렌 1.5 L에 녹인다. 그리고 피리딘 202.6 g(0.718 mol)을 넣고 상온에서 4시간 동안 교반시킨다. TLC로 반응종료여부를 확인한다. 반응이 종료되면 메탄올을 넣고 결정을 석출시킨다. 생성된 결정을 여과한다. <9-e> 화합물 75.8 g(64.7%)로 제조하였다.

[0449] 9-6, 9-f의 합성

[0450] 하기 반응식 32에 의하여 <9-f>을 합성하였다.



[0451]

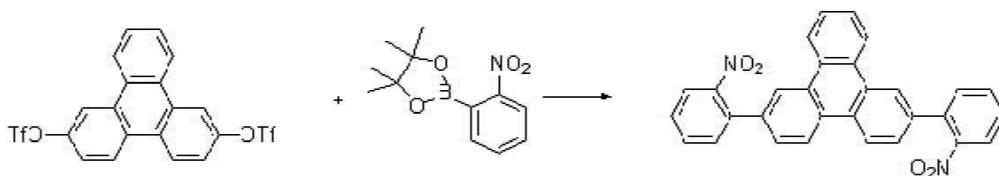
[0452] <9-f>

[0453] 1000 ml 둥근 바닥 플라스크에 2-브로모니트로벤젠 30.0 g(0.149 mol),

[0454] 비스(피나콜라토)디보론 56.6 g(0.223 mol), PdCl₂(dppf) 2.4 g(0.003 mol), 포타슘아세테이트 43.7 g(0.446 mol)와 톨루엔 450 ml을 넣고 환류시킨다. 반응종료여부를 TLC로 확인하고 반응이 완료되면 여과하고 유기층을 건조시킨 후 컬럼 크로마토그래피로 <9-f> 27.4 g(74.1%)를 제조하였다.

[0455] 9-7, 9-g의 합성

[0456] 하기 반응식 33에 의하여 <9-g>을 합성하였다.



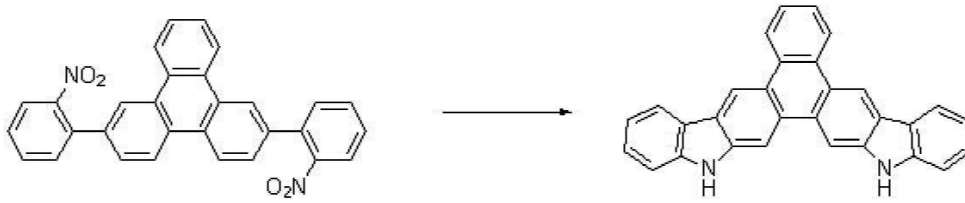
[0457]

[0458] <9-g>

[0459] 500 ml 둥근 바닥 플라스크에 <9-e> 20.0 g(0.038 mol), <9-g> 22.8 g(0.092 mol), 테트라키스트리페닐포스핀 팔라듐(0) 0.9 g(0.001 mol), 포타슘카보네이트 10.5 g(0.076 mol)을 넣고 1,4-다이옥산 100ml, 톨루엔 100ml, 물 40 ml를 넣은 후 80도에서 6시간 동안 교반시킨다. 반응이 완료되면 실온으로 온도를 낮추고 톨루엔과 물로 추출하여 유기층을 건조시킨 후 컬럼크로마토그래피로 <9-g> 12.7 g (70.8 %)를 제조하였다

[0460] 9-9, 9-h의 합성

[0461] 하기 반응식 34에 의하여 <9-h>을 합성하였다.



[0462]

[0463]

<9-h>

[0464] 500ml의 둥근 바닥 플라스크에 반응식 33로부터 얻은 <9-g> 12.7 g (0.027mol), 트리페닐포스핀 35.4 g (0.135mol), 디클로로벤젠 240 ml를 넣고 12시간동안 환류시킨다. 반응이 종료되면 상기 용액을 상온으로 냉각하고 건조시킨 후 컬럼크로마토그래피로 분리하여 얻은 고체를 건조하여 <9-h> 3.8 g(34.6 %)을 제조하였다.

[0465]

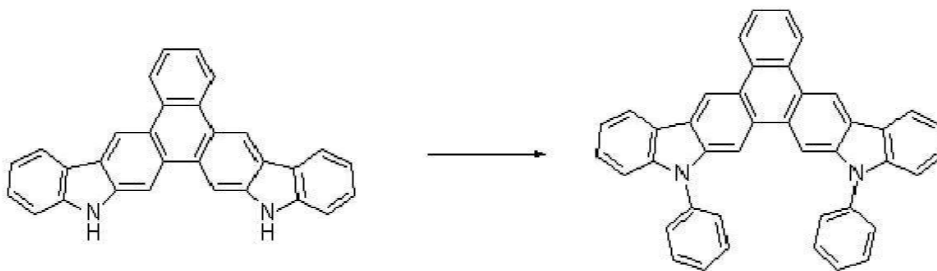
9-10. 화학식 237의 합성

[0466]

하기 반응식 35에 의하여 화학식 237을 합성하였다.

[0467]

[반응식35]



[0468]

[0469]

화학식 237

[0470]

100 ml 둥근바닥플라스크에 <9-h> 3.8 g(0.009mol), 요오드벤젠 5.72 g(0.028 mol), CuCl 0.23 g(0.002 mol), 포타슘카보네이트 3.88 g(0.028 mol)을 넣고 DMSO 30 ml에 녹인 후에 12시간 동안 환류시킨다. TLC로 반응종료여부를 확인한 후에 반응이 종료되면 에틸아세테이트로 추출하고 유기층을 건조시킨 후 1,2-디클로로벤젠으로 재결정한다. 재결정으로 순도를 높여 화학식 237을 3.1 g(59.4 %)를 제조하였다.

[0471]

합성예 10: 화학식 279의 화합물 합성

[0472]

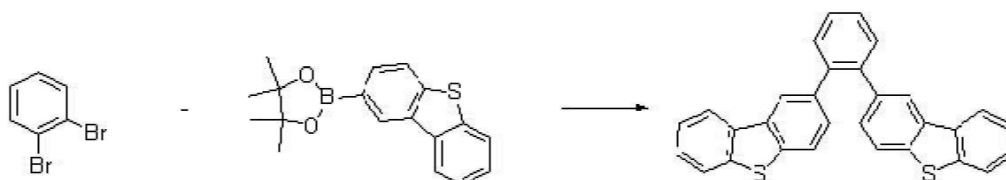
10-1. 10-a의 합성

[0473]

하기 반응식 36 의하여 <10-a>를 합성하였다.

[0474]

[반응식 36]



[0475]

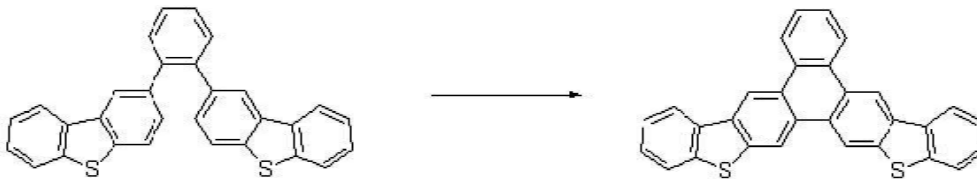
[0476] <10-a>

[0477] <4-d> 15.8 g(0.051 mol)과 1,2-디브로모벤젠 5.0 g(0.021 mol), Pd(PPh₃)₄ 0.5 g(0.001 mol), 포타슘 카보네이트 5.9 g(0.042 mol)을 250 ml 둥근바닥플라스크에 넣은 후에 테트라히드로퓨란 25 ml, 1,4-다이옥산 25ml, 물 10 ml를 넣고 12시간동안 환류시킨다. TLC로 반응종료여부를 확인 한 후에 톨루엔과 물로 추출하고 유기층을 건조시킨다. 염화메틸렌과 노르말헥산으로 재결정한다. <10-a> 8.1 g(86.3 %)을 제조하였다.

[0478] 10-2. 화학식 279의 합성

[0479] 하기 반응식 37에 의하여 화학식 279를 합성하였다.

[0480] [반응식 37]



[0481]

[0482] 화학식 279

[0483] 0도에서 1000ml 둥근바닥 플라스크에 <10-a> 8.1 g(0.018 mol), FeCl₃ 5.9 g(0.037 mol)을 넣고 염화메틸렌 50 ml와 황산 1.5 g을 넣고 4시간동안 동일온도에서 교반시킨다. 실온으로 올린 후에 3시간 더 교반시킨다. 반응이 종료되면 셀라이트 필터하고 메탄올로 재결정한다. 화학식 279 4.7 g(58.3 %)로 제조하였다.

[0484] **실시예**

[0485] **유기 발광다이오드의 제조**

[0486] ITO 글래스의 발광 면적이 2mm x 2mm 크기가 되도록 패터닝한 후 세정하였다. 기판을 진공 챔버에 장착한 후 베이스 압력이 1x10⁻⁶ torr가 되도록 한 후 유기물을 상기 ITO위에 DNTPD(700Å), NPD(300Å), 본 발명에 의해 제조된 화합물 + Ir(ppy)₃ (10%)(300Å), Alq₃ (350Å), LiF(5Å), Al(1,000Å)의 순서로 성막하였으며, 0.4mA에서 측정을 하였다.

[0487] **비교예**

[0488] 비교예를 위한 유기발광다이오드 소자는 상기 실시예의 소자구조에서 발명에 의해 제조된 화합물 대신 CBP를 사용한 점을 제외하고 동일하게 제작하였다.

표 1

[0489]

구분	호스트	도펀트	도핑농도%	ETL	V	Cd/A	CIE _x	CIE _y
비교예1	CBP	Ir(ppy) ₃	10	Alq ₃	8.20	38.81	0.29	0.62
실시예1	화합물6	Ir(ppy) ₃	10	Alq ₃	5.18	48.00	0.32	0.61
실시예2	화합물39	Ir(ppy) ₃	10	Alq ₃	5.75	50.38	0.29	0.62
실시예3	화합물83	Ir(ppy) ₃	10	Alq ₃	6.07	48.90	0.34	0.62
실시예4	화합물150	Ir(ppy) ₃	10	Alq ₃	5.03	47.74	0.35	0.60
실시예5	화합물181	Ir(ppy) ₃	10	Alq ₃	4.92	52.41	0.31	0.61
실시예6	화합물186	Ir(ppy) ₃	10	Alq ₃	5.15	42.81	0.33	0.61
실시예7	화합물226	Ir(ppy) ₃	10	Alq ₃	5.16	42.84	0.32	0.60
실시예8	화합물227	Ir(ppy) ₃	10	Alq ₃	4.99	51.22	0.34	0.61
실시예9	화합물237	Ir(ppy) ₃	10	Alq ₃	6.22	49.13	0.35	0.62
실시예10	화합물279	Ir(ppy) ₃	10	Alq ₃	7.55	42.22	0.33	0.61

[0490] 상기 표에서 보는 바와 같이 본 발명에 의하여 확보된 유기화합물은 인광발광재료로 많이 쓰이는 CBP에 비하여 구동전압이 낮고, 발광효율이 우수한 특성을 보인다.

[0491] 또한 본 발명에 의한 화합물을 이용한 유기전계소자의 성능을 도면에 표시하였다. 도 2의 Tg 그래프에서 확인할 수 있는 바와 같이 본 발명에 의하여 확보된 유기화합물은 녹는점이 372.3도이며, 열분해온도가 503.5도로써 상당히 높은 특징이 있다. 이는 본 발명에 의한 화합물을 상업적으로 이용하는 경우 발광소자의 열적 안정성 문제를 해결하는데 있어서 아주 우수한 특성이라 보여진다.

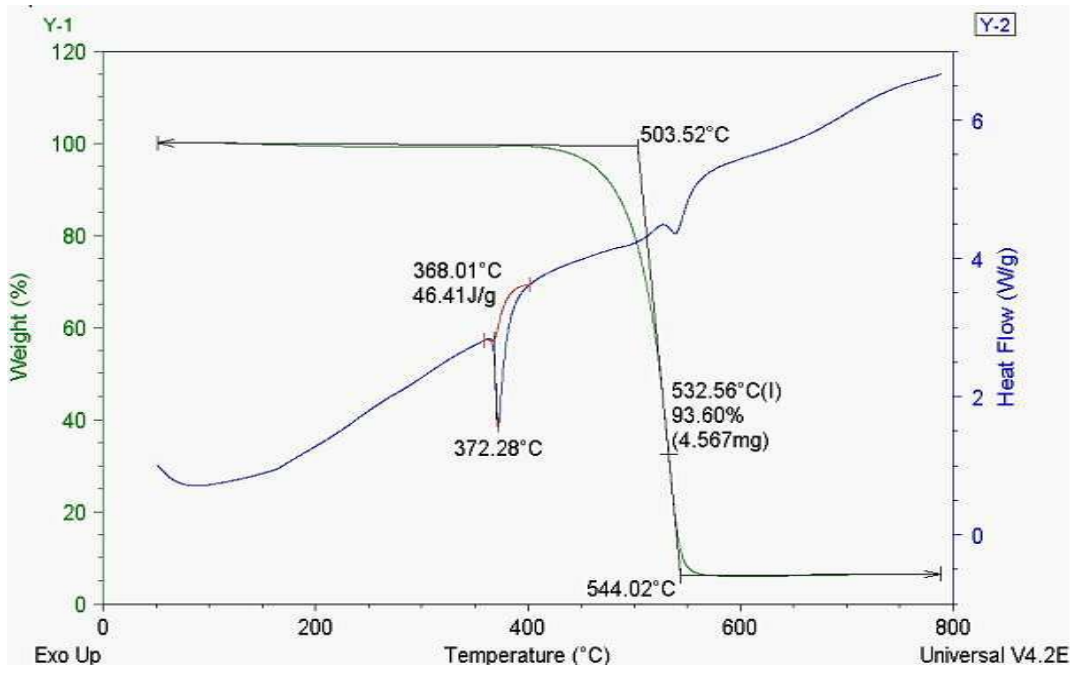
[0492] 본 발명에 의한 화합물에 대하여 저온(77 K)에서 측정된 PL스펙트럼(도 4)을 살펴보면, 본 화합물들은 도 5의 다양한 도판트중 녹색 영역에 해당하는 Ir(ppy)₃의 스펙트럼 보다 넓은 영역을 포함하고 있으므로, 본 화합물을 호스트 물질로 사용할 경우 Dexter형 에너지 전달과정(Dexter Type Energy Transfer Process)에 의하여 효율적으로 에너지를 도판트로 전달할 수 있음을 알 수 있다. (I_{max} Ir(ppy)₃: 517 nm)(인용문헌 Chemical Physics Letters 460 (2008) 155-157)

도면

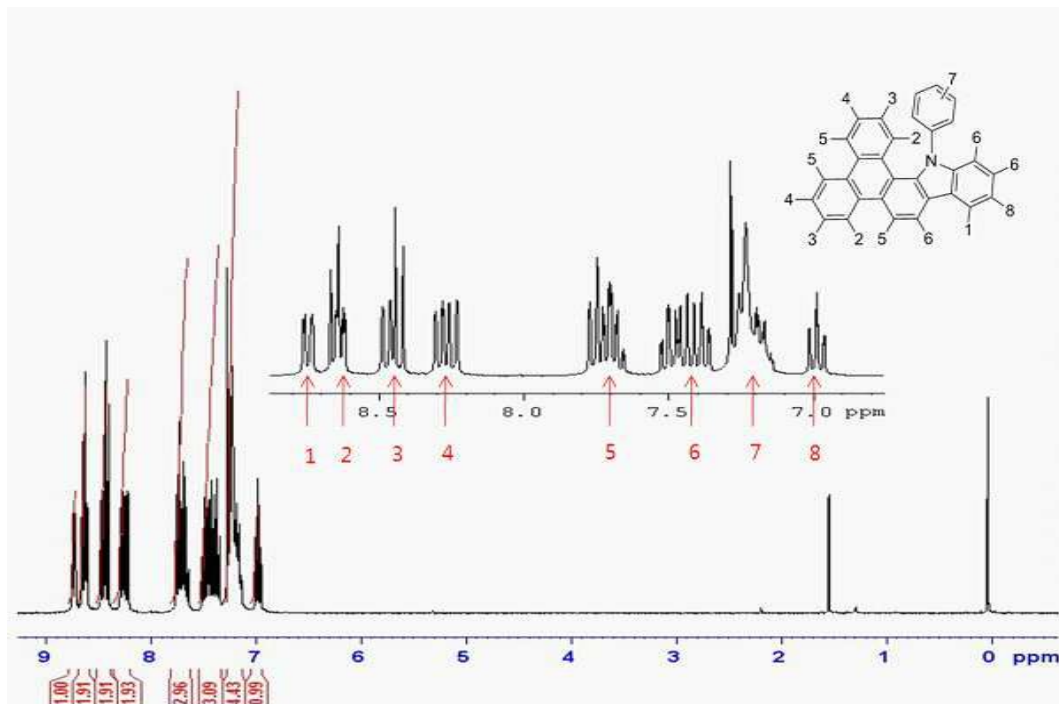
도면1

80
70
60
50
40
30
20
10

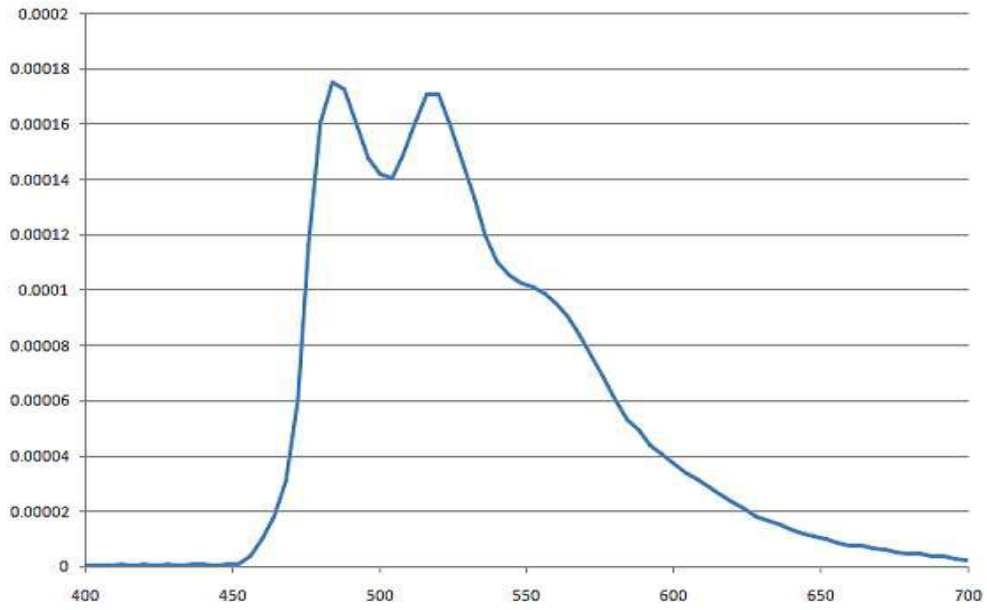
도면2



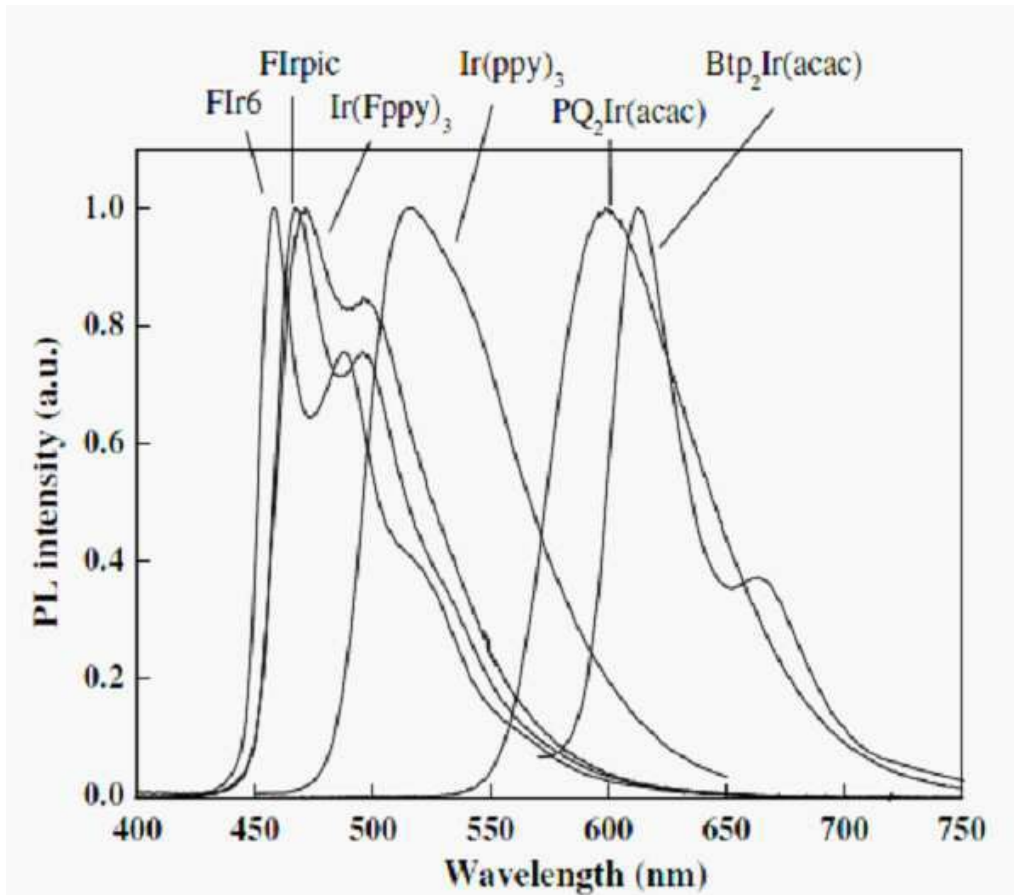
도면3



도면4



도면5



专利名称(译)	公开的环化合物和含有它们的有机电致发光器件		
公开(公告)号	KR1020120072784A	公开(公告)日	2012-07-04
申请号	KR1020100134673	申请日	2010-12-24
[标]申请(专利权)人(译)	SFC股份有限公司		
申请(专利权)人(译)	에스에프씨주식회사		
当前申请(专利权)人(译)	에스에프씨주식회사		
[标]发明人	JE JONG TAE 제종태 KIM JEONG SOO 김정수 KWON HYUN JUNG 권현중 KO SANG WON 고상원		
发明人	제종태 김정수 권현중 고상원		
IPC分类号	C09K11/06 H01L51/54 H01L51/50		
CPC分类号	C09K11/06 H01L51/5056 H01L51/5096 H01L51/5072 H01L51/5092 Y10S428/917		
其他公开文献	KR101866851B1		
外部链接	Espacenet		

摘要(译)

本发明涉及新型环状环化合物和包含该环状环化合物的有机电致发光器件作为发光材料，具体地，由下式 (1a) 或 (1b) 表示的环状环化合物和包含其的有机电致发光器件电压，电流效率等。(1a) 的 (1b) 中 专利公开10-2012-0072784

