



**(19) 대한민국특허청(KR)**  
**(12) 등록특허공보(B1)**

(45) 공고일자 2016년06월07일  
 (11) 등록번호 10-1627693  
 (24) 등록일자 2016년05월31일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)  
*C09K 11/06* (2006.01) *C07C 13/62* (2006.01)  
*H01L 51/50* (2006.01)  
 (21) 출원번호 10-2014-0039916  
 (22) 출원일자 2014년04월03일  
 심사청구일자 2014년04월03일  
 (65) 공개번호 10-2015-0115229  
 (43) 공개일자 2015년10월14일  
 (56) 선행기술조사문헌  
 KR1020090046278 A  
 KR1020140004549 A  
 KR101298485 B1  
 US20130175519 A1

(73) 특허권자  
**(주)피엔에이치테크**  
 경기도 용인시 기흥구 동백중앙로16번길 16-25,  
 706호(중동, 대우프론티어밸리1단지)  
 (72) 발명자  
**현서용**  
 경기도 용인시 수지구 손곤로 54 201동 503호  
**정성욱**  
 충북 청주시 흥덕구 산남로 23 101동 701호  
 (74) 대리인  
**정은열**

전체 청구항 수 : 총 7 항

심사관 : 지무근

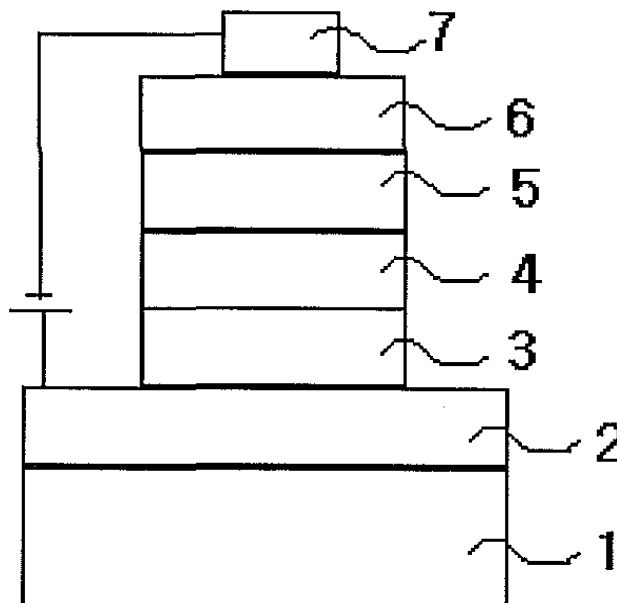
(54) 발명의 명칭 **유기발광 화합물 및 이를 포함하는 유기전계발광소자**

**(57) 요약**

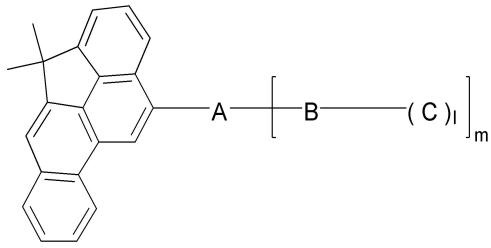
본 발명은 유기전계발광소자에 채용되는 유기발광 화합물에 관한 것으로서, 하기 [화학적 식 1]로 표시되는 것을 특징으로 하고, 이를 발광층 내의 호스트 화합물로 채용하는 경우 구동전압, 휘도 및 장수명 등의 발광특성이 우수한 유기전계발광소자를 구현할 수 있다.

(뒷면에 계속)

**대표도** - 도1



[화학식 1]



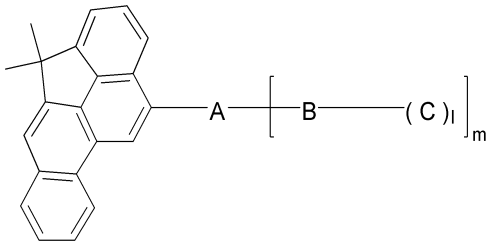
명세서

청구범위

청구항 1

하기 [화학식 1]로 표시되는 유기발광 화합물:

[화학식 1]



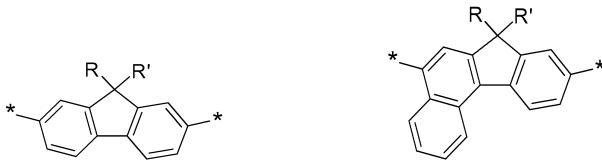
상기 [화학식 1]에서,

A 및 B는 각각 독립적으로 단일결합이거나, 페닐렌기, 메틸기로 치환된 페닐렌기, 나프틸렌기, 안트라센기 및 하기 [구조식 1] 중에서 선택되는 어느 하나이고,

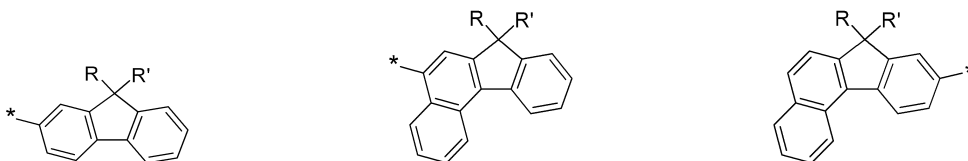
C는 페닐기, 나프틸기, 페나트렌기, 카바졸기 및 하기 [구조식 2] 중에서 선택되는 어느 하나이고,

l 및 m은 각각 0 내지 1의 정수이고,

[구조식 1]



[구조식 2]



상기 [구조식 1]과 [구조식 2]에서, R 및 R'는 각각 메틸기이고, \*는 상기 [화학식 1]에 결합하는 위치이다.

청구항 2

삭제

청구항 3

삭제

청구항 4

삭제

청구항 5

제1 전극, 제2 전극, 및 상기 제1 전극과 제2 전극 사이에 배치된 1층 이상의 유기물층을 포함하는 유기전계발광소자로서,

상기 유기물층 중 1 층 이상은 청구항 1항에 따른 [화학식 1]의 유기발광 화합물을 포함하는 것인 유기전계발광소자.

**청구항 6**

제5항에 있어서,

상기 유기물층은 정공 주입층, 정공 수송층, 및 정공 주입 및 정공 수송을 동시에 하는 층 중 1층 이상을 포함하고, 상기 층들 중 1층 이상이 상기 [화학식 1]로 표시되는 유기발광 화합물을 포함하는 것을 특징으로 하는 유기전계발광소자.

**청구항 7**

제5항에 있어서,

상기 유기물층은 발광층을 포함하고, 상기 발광층이 상기 [화학식 1]로 표시되는 유기발광 화합물을 포함하는 것을 특징으로 하는 유기전계발광소자.

**청구항 8**

제7항에 있어서,

상기 [화학식 1]로 표시되는 유기발광 화합물은 상기 발광층 내의 호스트 화합물로 사용되고, 상기 발광층은 도판트 화합물을 1층 이상 더 포함하는 것을 특징으로 하는 유기전계발광소자.

**청구항 9**

제5항에 있어서,

상기 유기물층은 전자 수송층, 전자 주입층, 및 전자 수송 및 전자 주입을 동시에 하는 층 중 1층 이상을 포함하고, 상기 층들 중 1층 이상이 상기 [화학식 1]로 표시되는 유기발광 화합물을 포함하는 것을 특징으로 하는 유기전계발광소자.

**청구항 10**

제5항에 있어서,

상기 유기물층에 적색, 녹색 또는 청색 발광을 하는 유기 발광층을 하나 이상을 더 포함하여 백색 발광을 하는 것을 특징으로 하는 유기전계발광소자.

**발명의 설명**

**기술 분야**

[0001] 본 발명은 유기발광 화합물 및 이를 포함하여 저전압 구동이 가능하여 전력효율이 우수하고, 동시에 우수한 발광효율 특성 구현이 가능한 유기전계발광소자에 관한 것이다.

**배경 기술**

[0002] 유기발광 현상이란 유기 물질을 이용하여 전기에너지를 빛에너지로 전환시켜주는 현상을 말한다. 유기발광 현상을 이용하는 유기전계발광소자는 통상 양극과 음극 및 이 사이에 유기물층을 포함하는 구조를 가진다. 여기서 유기물층은 유기 발광 소자의 효율과 안정성을 높이기 위하여 각기 다른 물질로 구성된 다층의 구조로 이루어진 경우가 많으며, 예컨대 정공 주입층, 정공 수송층, 발광층, 전자 수송층, 전자 주입층 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. 이러한 유기전계발광소자는 자발광, 고휘도, 고효율, 낮은 구동전압, 넓은 시야각, 높은 콘트라스트, 고속 응답성 등의 특성을 갖는 것으로 알려져 있다.

[0003] 유기전계발광소자에서 유기물층으로 사용되는 물질은 기능에 따라, 발광 물질과 전하 수송 물질, 정공 주입 물질, 정공 수송 물질, 전자 수송 물질, 전자 주입 물질 등으로 분류될 수 있다. 또한, 발광 물질은 발광색에 따라 청색, 녹색, 적색 발광 물질과 보다 나은 천연색을 구현하기 위해 필요한 노란색 및 주황색 발광 물질로 구분될 수 있다.

[0004] 한편, 발광 물질로서 하나의 물질만 사용하는 경우 분자간 상호 작용에 의하여 최대 발광 파장이 장파장으로 이동하고 색순도가 떨어지거나 발광 감쇄 효과로 소자의 효율이 감소되는 문제가 발생하므로, 색순도의 증가와 에너지 전이를 통한 발광 효율을 증가시키기 위하여 발광 물질로서 호스트/도판트 계를 사용할 수 있다.

[0005] 유기전계발광소자가 전술한 우수한 특징들을 충분히 발휘하기 위해서는 소자 내 유기물층을 이루는 물질, 예컨대 정공 주입 물질, 정공 수송 물질, 발광 물질, 전자 수송 물질, 전자 주입 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 있으며, 이와 같은 재료 개발의 필요성은 전술한 다른 유기 전자 소자에서도 마찬가지이다.

**선행기술문헌**

**특허문헌**

[0006] (특허문헌 0001) 대한민국 공개특허공보 제10-2012-0131870호

**발명의 내용**

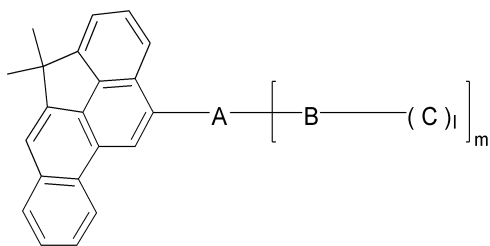
**해결하려는 과제**

[0007] 본 발명은 유기전계발광소자의 유기층에 채용되어 우수한 발광 특성 및 저전압 구동을 구현할 수 있는 신규한 호스트 화합물과 이를 포함하는 유기전계발광소자를 제공하고자 한다.

**과제의 해결 수단**

[0008] 본 발명은 상기 과제를 해결하기 위하여, 하기 [화학식 1]로 표시되는 유기발광 화합물을 제공한다.

[0009] [화학식 1]



[0010]

[0011] 상기 [화학식 1]에 따른 유기발광 화합물의 구체적인 구조 및 치환기에 대해서는 후술한다.

[0012] 또한, 본 발명은 제1 전극, 제2 전극, 및 상기 제1 전극과 제2 전극 사이에 배치된 1층 이상의 유기물층을 포함하는 유기전계발광소자로서, 상기 유기물층 중 1 층 이상은 상기 [화학식 1]에 따른 유기발광 화합물을 포함하는 유기전계발광소자를 제공한다.

**발명의 효과**

[0013] 본 발명에 따른 유기발광 화합물은 열적 안정성이 우수하고, 깊은 HOMO 준위, 높은 삼중항(triplet) 상태 및 정공 안정성을 가져 유기전계발광소자의 유기물층에 채용시 발광 효율, 구동전압, 수명 등에서 우수한 특성을 나타내는 유기전계발광소자의 구현이 가능하다.

**도면의 간단한 설명**

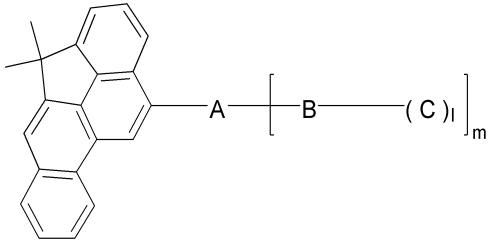
[0014] 도 1 내지 5는 본 발명의 일 실시예에 따른 유기전계발광소자의 구조를 예시한 단면도이다.

**발명을 실시하기 위한 구체적인 내용**

[0015] 이하, 본 발명을 보다 구체적으로 설명한다.

[0016] 본 발명은 하기 [화학식 1]로 표시되는 신규한 유기발광 화합물에 관한 것이다.

[0017] [화학식 1]



[0018]

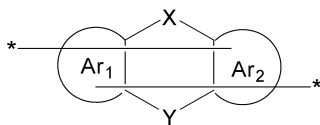
[0019] 상기 [화학식 1]에서,

[0020] A 및 B는 각각 독립적으로 단일결합이거나, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 60의 알킬렌기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 60의 알케닐렌기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 60의 알키닐렌기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 60의 시클로알킬렌기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 60의 헤테로시클로알킬렌기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐렌기, 치환 또는 비치환된 카바졸릴렌기 및 N, O 및 S 원자 중 1개 이상을 포함하는 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 60의 헤테로아릴렌기 중에서 선택된다.

[0021] C는 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴기, N, S, O 및 P 중에서 선택된 1종 이상을 포함하는 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 60의 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬아민기, 치환 또는 비치환된 아랄킬아민기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 30의 아릴아민기, 치환 또는 비치환된 헤테로아릴아민기 중에서 선택된다.

[0022] 상기 A 내지 B 중 적어도 하나 이상은 하기 [화학식 L]이고, 상기 A 및 B가 모두 L인 경우 상기 L은 동일하거나 상이할 수 있으며, i 및 m은 각각 0 내지 4의 정수이며, 상기 i 및 m이 각각 복수인 경우 복수의 C 및  $^*-[B-(C)]_m$ 은 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

[0023] [화학식 L]



[0024]

[0025] 상기 [화학식 L]에서,

[0026] X는 S, O, NR<sub>1</sub>, 또는 CR<sub>1</sub>R<sub>2</sub>이고, Y는 단일결합이거나 NR<sub>1</sub>, 또는 CR<sub>1</sub>R<sub>2</sub>이다.

[0027] Ar<sub>1</sub> 및 Ar<sub>2</sub>는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 50의 아릴기 중에서 선택된다.

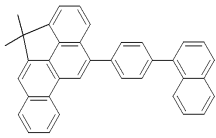
[0028] 상기 R<sub>1</sub> 및 R<sub>2</sub>는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 50의 아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 30의 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 30의 시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알콕시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬티옥시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 30의 아릴티옥시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬아민기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 30의 아릴아민기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 50의 아릴기, 치환 또는 비치환되고 이중 원자로 0, N 또는 S를 갖는 탄소수 2 내지 50의 헤테로아릴기, 시아노기, 니트로기 및 할로젠기로 이루어진 군 중에서 선택되는 어느 하나이다.

- [0029] 본 발명의 바람직한 구현예에 의하면, 상기 A는 단일결합이거나 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴기이고, 상기 B는 치환 또는 비치환된 치환 또는 비치환된 플루오레닐렌기, 치환 또는 비치환된 카바졸릴렌기 및 상기 [화학식 L] 중에서 선택되고, 상기 C는 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴기, 1 내지 3개의 질소를 포함하는 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 40의 헤테로아릴기일 수 있다.
- [0030] 본 발명의 바람직한 일 구현예에 의하면, 상기 [화학식 L]에서, 상기 Ar<sub>1</sub>은 치환 또는 비치환된 페닐기이고, 상기 Ar<sub>2</sub>는 치환 또는 비치환된 탄소수 10 내지 30의 축합아릴기일 수 있다.
- [0031] 본 발명에 있어서, 상기 치환기들의 예시들에 대해서 아래에서 구체적으로 설명하나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0032] 본 발명에 있어서, 상기 알킬기는 직쇄 또는 분지쇄일 수 있고, 탄소수는 특별히 한정되지 않으나 1 내지 50인 것이 바람직하다. 구체적인 예로는 메틸기, 에틸기, 프로필기, n-프로필기, 이소프로필기, 부틸기, n-부틸기, 이소부틸기, tert-부틸기, sec-부틸기, 1-메틸-부틸기, 1-에틸-부틸기, 펜틸기, n-펜틸기, 이소펜틸기, 네오펜틸기, tert-펜틸기, 헥실기, n-헥실기, 1-메틸펜틸기, 2-메틸펜틸기, 4-메틸-2-펜틸기, 3,3-디메틸부틸기, 2-에틸부틸기, 헵틸기, n-헵틸기, 1-메틸헥실기, 시클로헵틸메틸기, 시클로헥틸메틸기, 옥틸기, n-옥틸기, tert-옥틸기, 1-메틸헵틸기, 2-에틸헥실기, 2-프로필펜틸기, n-노닐기, 2,2-디메틸헵틸기, 1-에틸-프로필기, 1,1-디메틸-프로필기, 이소헥실기, 2-메틸펜틸기, 4-메틸헥실기, 5-메틸헥실기 등이 있으나, 이들에 한정되지 않는다.
- [0033] 본 발명에 있어서, 알콕시기는 직쇄 또는 분지쇄일 수 있다. 알콕시기의 탄소수는 특별히 한정되지 않으나, 입체적 방해를 주지 않는 범위인 1 내지 30개인 것이 바람직하다. 구체적으로, 메톡시기, 에톡시기, n-프로폭시기, 이소프로폭시기, i-프로필옥시기, n-부톡시기, 이소부톡시기, tert-부톡시기, sec-부톡시기, n-펜틸옥시기, 네오펜틸옥시기, 이소펜틸옥시기, n-헥실옥시기, 3,3-디메틸부틸옥시기, 2-에틸부틸옥시기, n-옥틸옥시기, n-노닐옥시기, n-데실옥시기, 벤질옥시기, p-메틸벤질옥시기 등이 될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0034] 본 발명에 있어서, 상기 알케닐기는 직쇄 또는 분지쇄일 수 있고, 탄소수는 특별히 한정되지 않으나, 2 내지 40인 것이 바람직하다. 구체적인 예로는 비닐기, 1-프로페닐기, 이소프로페닐기, 1-부테닐기, 2-부테닐기, 3-부테닐기, 1-펜테닐기, 2-펜테닐기, 3-펜테닐기, 3-메틸-1-부테닐기, 1,3-부타디에닐기, 알릴기, 1-페닐비닐-1-일기, 2-페닐비닐-1-일기, 2,2-디페닐비닐-1-일기, 2-페닐-2-(나프틸-1-일)비닐-1-일기, 2,2-비스(디페닐-1-일)비닐-1-일기, 스틸베닐기, 스티레닐기 등이 있으나 이들에 한정되지 않는다.
- [0035] 본 발명에 있어서, 아릴기는 하나의 수소 제거에 의해서 방향족 탄화수소로부터 유도된 유기 라디칼로서, 5 내지 7원, 바람직하게는 5 또는 6원을 포함하는 단일 또는 융합 고리계를 포함하며, 또한 상기 아릴기에 치환기가 있는 경우 이웃하는 치환기와 서로 융합(fused)되어 고리를 추가로 형성할 수 있다.
- [0036] 이러한 아릴의 구체적인 예로 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, 안트라닐기, 페난트라닐기, 피레닐기, 인데닐, 플루오레닐기, 테트라히드로나프틸기, 피렌일, 페릴렌일, 크라이세닐, 나프타세닐, 플루오란텐일 등과 같은 방향족 그룹을 들 수 있다.
- [0037] 또한, 상기 아릴기 중 하나 이상의 수소 원자는 중수소 원자, 할로젠 원자, 히드록시기, 니트로기, 시아노기, 실릴기, 아미노기 (-NH<sub>2</sub>, -NH(R), -N(R')(R'')), R'과 R''은 서로 독립적으로 탄소수 1 내지 10의 알킬기이며, 이 경우 "알킬아미노기"라 함), 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실기, 술폰산기, 인산기, 탄소수 1 내지 24의 알킬기, 탄소수 1 내지 24의 할로겐화된 알킬기, 탄소수 1 내지 24의 알케닐기, 탄소수 1 내지 24의 알키닐기, 탄소수 1 내지 24의 헤테로알킬기, 탄소수 6 내지 24의 아릴기, 탄소수 6 내지 24의 아릴알킬기, 탄소수 2 내지 24의 헤테로아릴기 또는 탄소수 2 내지 24의 헤테로아릴알킬기로 치환될 수 있다.
- [0038] 한편, 본 발명에 따른 유기발광 화합물에 포함된 헤테로아릴기는 상기 아릴기에서 각각의 고리 내에 N, O, P 또는 S 중에서 선택된 1 내지 4개의 헤테로 원자를 포함할 수 있는 탄소수 2 내지 24의 헤테로방향족 유기 라디칼을 의미하며, 상기 고리들은 융합(fused)되어 고리를 형성할 수 있다. 그리고 상기 헤테로아릴기 중 하나 이상

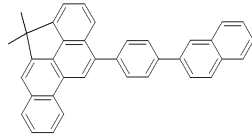
의 수소 원자는 상기 아릴기의 경우와 마찬가지로 치환기로 치환가능하다.

- [0039] 본 발명에서 사용되는 치환기인 알콕시기의 구체적인 예로는 메톡시, 에톡시, 프로폭시, 이소부틸옥시, sec-부틸옥시, 펜틸옥시, iso-아밀옥시, 핵실옥시 등을 들 수 있고, 상기 알콕시기 중 하나 이상의 수소 원자는 상기 아릴기의 경우와 마찬가지로 치환기로 치환가능하다.
- [0040] 본 발명에서 사용되는 치환기인 할로겐기의 구체적인 예로는 플루오르(F), 클로린(Cl), 브롬(Br) 등을 들 수 있다.
- [0041] 본 발명에서 사용되는 치환기인 실릴기의 구체적인 예로는 트리메틸실릴, 트리에틸실릴, 트리페닐실릴, 트리메톡시실릴, 디메톡시페닐실릴, 디페닐메틸실릴, 실릴, 디페닐비닐실릴, 메틸사이클로뷰틸실릴, 디메틸퓨릴실릴 등을 들 수 있고, 상기 실릴기 중 하나 이상의 수소 원자는 상기 아릴기의 경우와 마찬가지로 치환기로 치환가능하다.
- [0042] 본 발명에서 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.
- [0043] 본 발명에서 사용되는 알케닐기의 구체적인 예로는 직쇄상 또는 분지쇄상의 알케닐기를 나타내고, 3-펜테닐기, 4-헥세닐기, 5-헵테닐기, 4-메틸-3-펜테닐기, 2,4-디메틸-펜테닐기, 6-메틸-5-헵테닐기, 2,6-디메틸-5-헵테닐기 등을 들 수 있다.
- [0044] 상기 [화학식 1]로 표시되는 본 발명에 따른 유기발광 화합물은 그 구조적 특이성으로 인하여 유기전계발광소자의 유기물층으로 사용될 수 있고, 보다 구체적으로 유기물층 내의 발광층에 호스트 화합물로 사용될 수 있다.
- [0045] 본 발명에 따른 [화학식 1]로 표시되는 화합물의 바람직한 구체예로는 하기 화합물들이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.

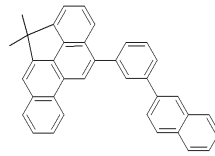
화합물 1



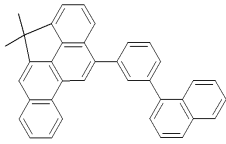
화합물 2



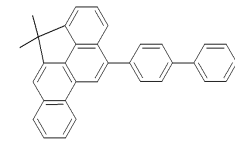
화합물 3



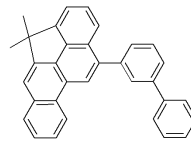
화합물 4



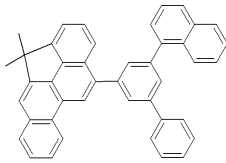
화합물 5



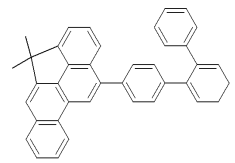
화합물 6



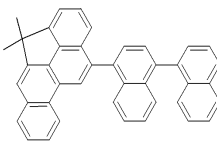
화합물 7



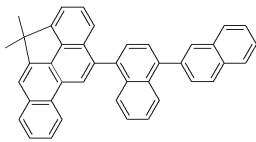
화합물 8



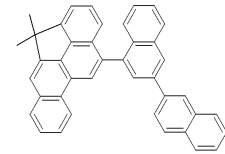
화합물 9



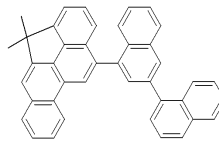
화합물 10



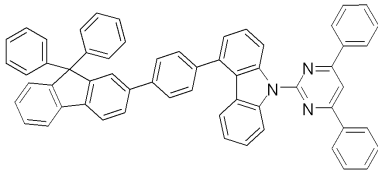
화합물 11



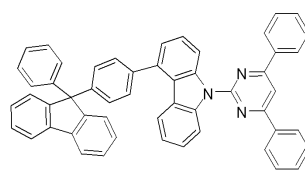
화합물 12



화합물 13

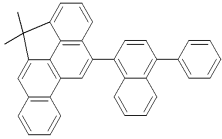


화합물 14

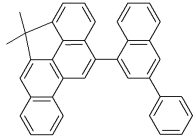


[0046]

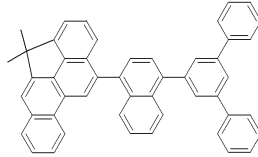
화합물 15



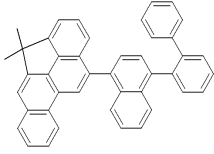
화합물 16



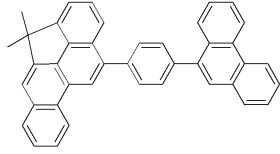
화합물 17



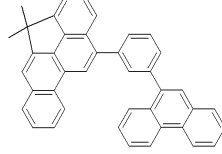
화합물 18



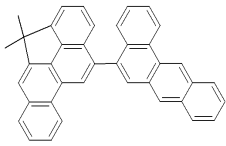
화합물 19



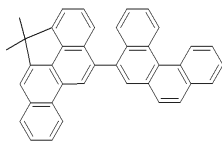
화합물 20



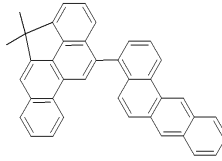
화합물 21



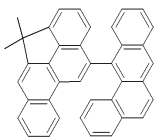
화합물 22



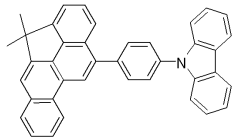
화합물 23



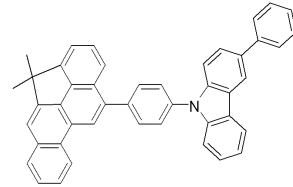
화합물 24



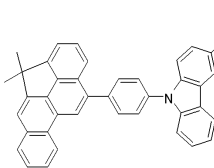
화합물 25



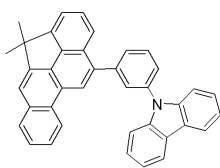
화합물 26



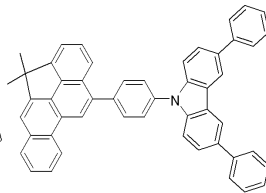
화합물 27



화합물 28

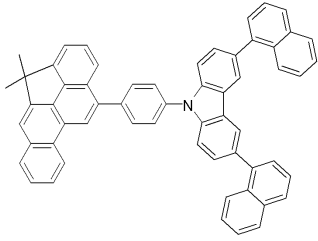


화합물 29

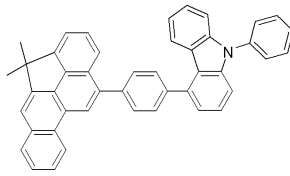


[0047]

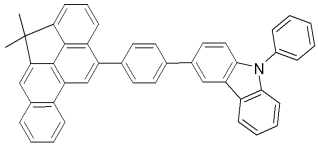
화합물 30



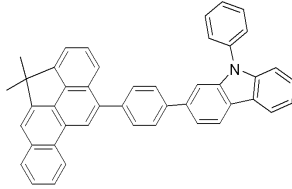
화합물 31



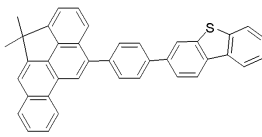
화합물 32



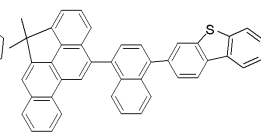
화합물 33



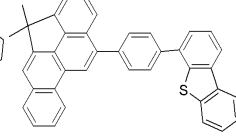
화합물 34



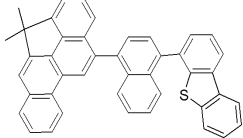
화합물 35



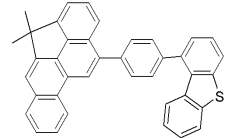
화합물 36



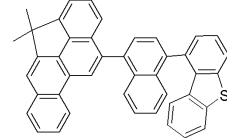
화합물 37



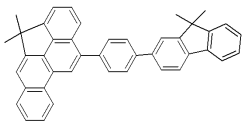
화합물 38



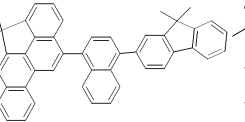
화합물 39



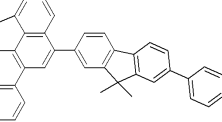
화합물 40



화합물 41

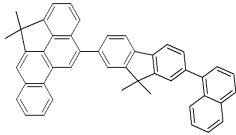


화합물 42

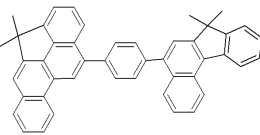


[0048]

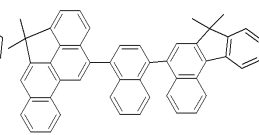
화합물 43



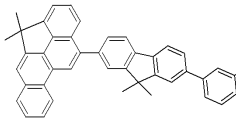
화합물 44



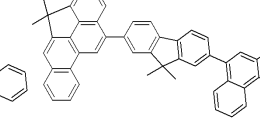
화합물 45



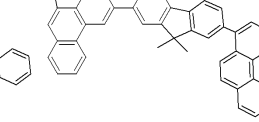
화합물 46



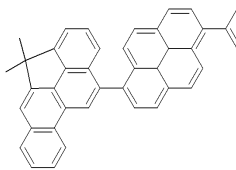
화합물 47



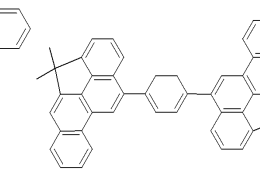
화합물 48



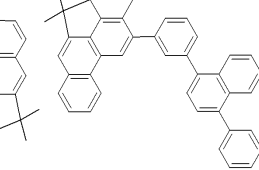
화합물 49



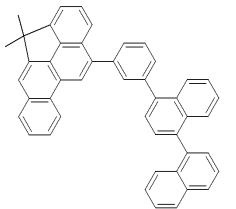
화합물 50



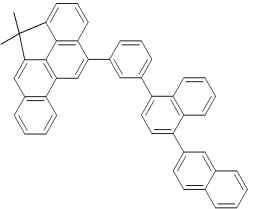
화합물 51



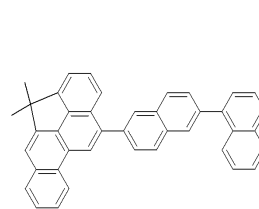
화합물 52



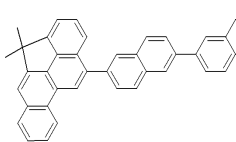
화합물 53



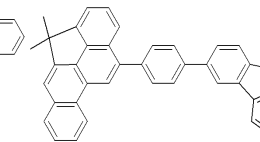
화합물 54



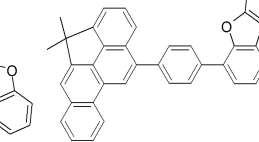
화합물 55



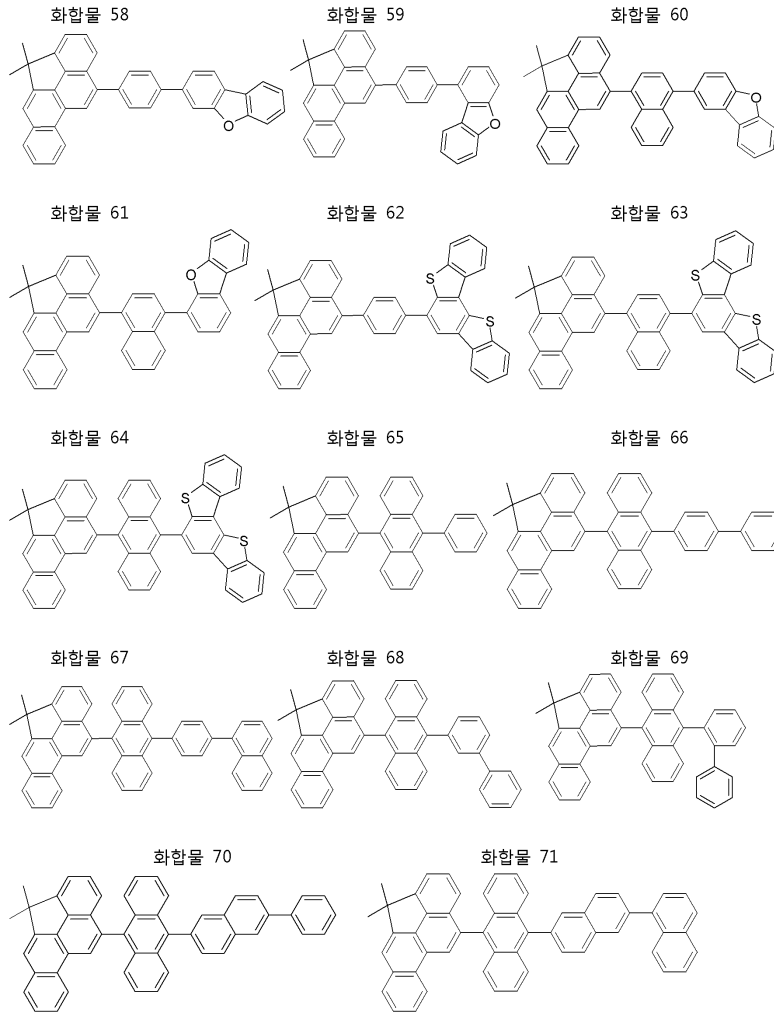
화합물 56



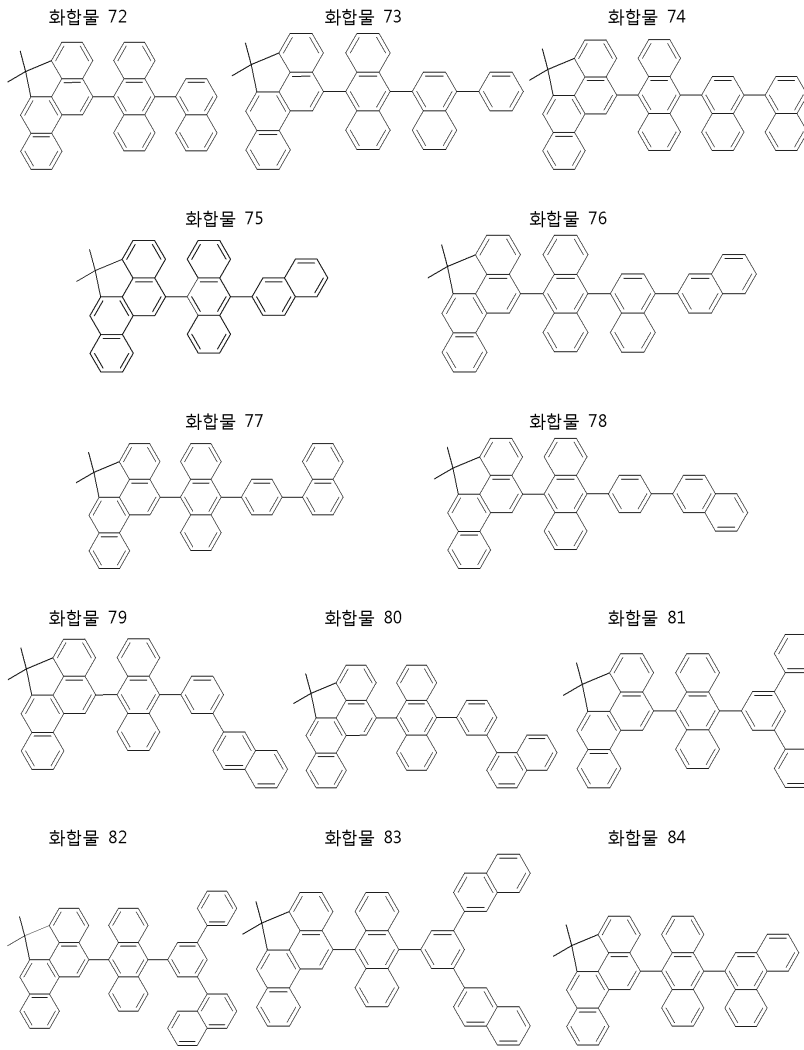
화합물 57



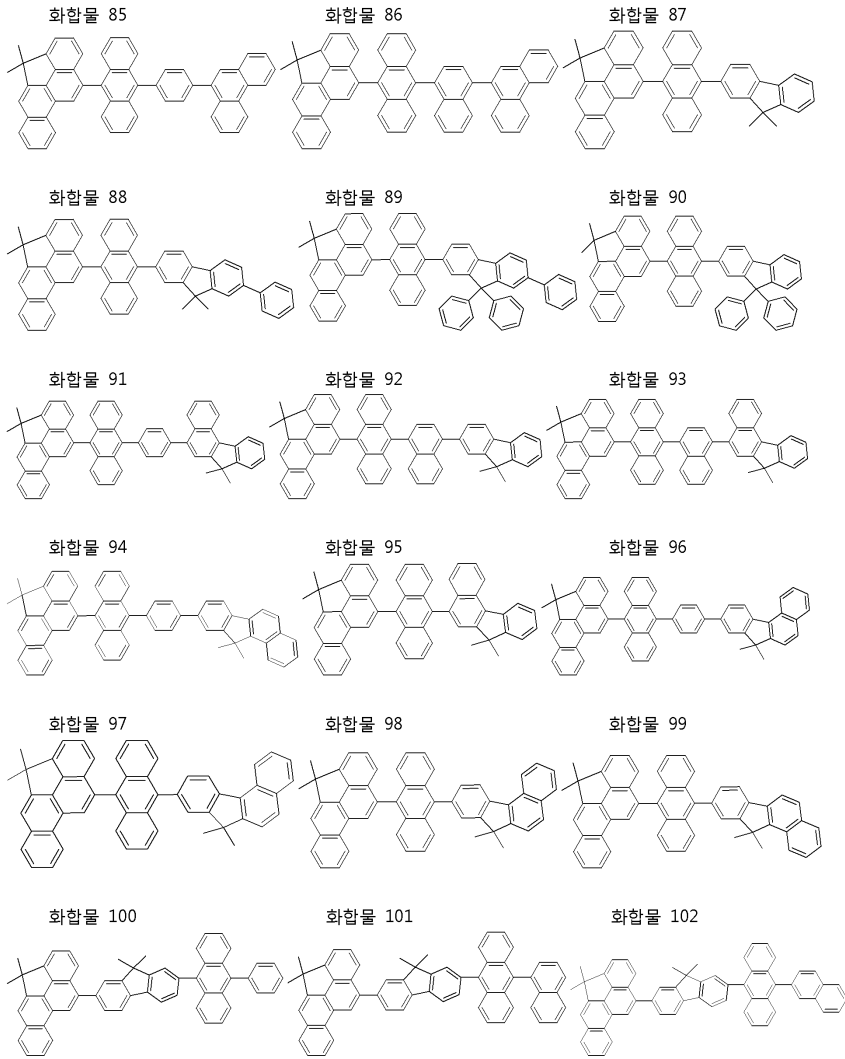
[0049]



[0050]

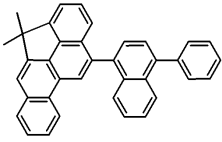


[0051]

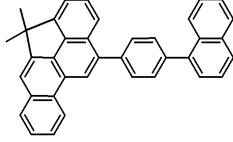


[0052]

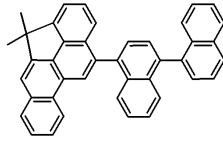
화합물 103



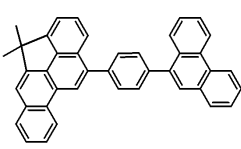
화합물 104



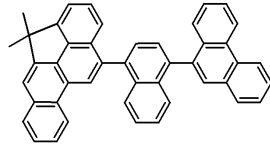
화합물 105



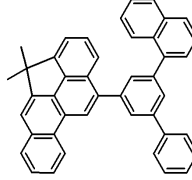
화합물 106



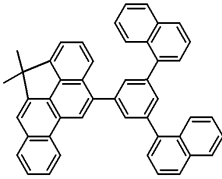
화합물 107



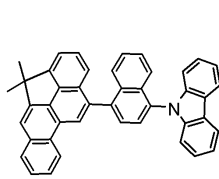
화합물 108



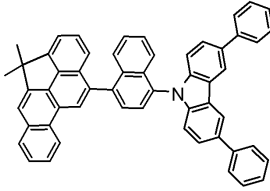
화합물 109



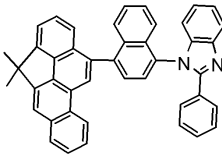
화합물 110



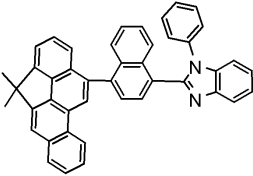
화합물 111



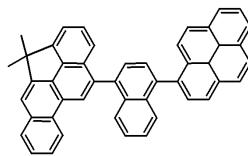
화합물 112



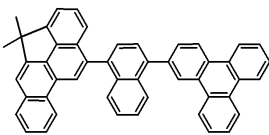
화합물 113



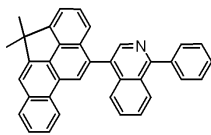
화합물 114



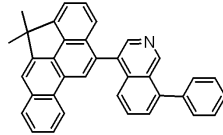
화합물 115



화합물 116

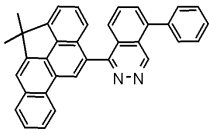


화합물 117

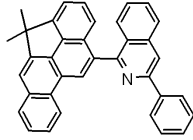


[0053]

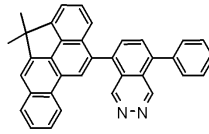
화합물 118



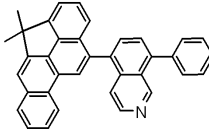
화합물 119



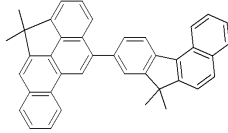
화합물 120



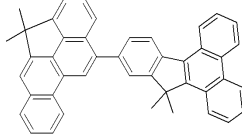
화합물 121



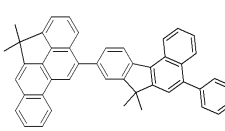
화합물 122



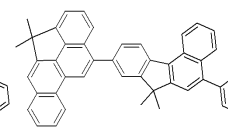
화합물 123



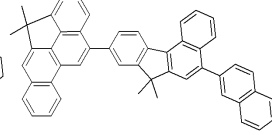
화합물 124



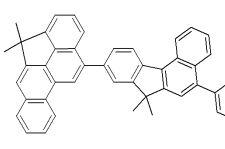
화합물 125



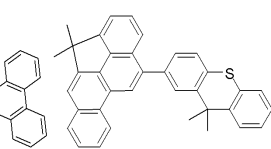
화합물 126



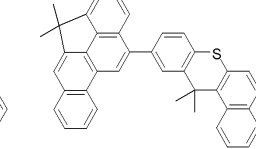
화합물 127



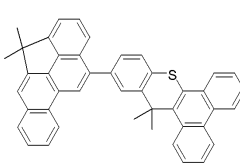
화합물 128



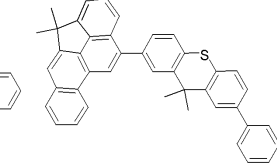
화합물 129



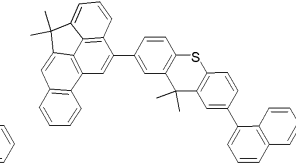
화합물 130



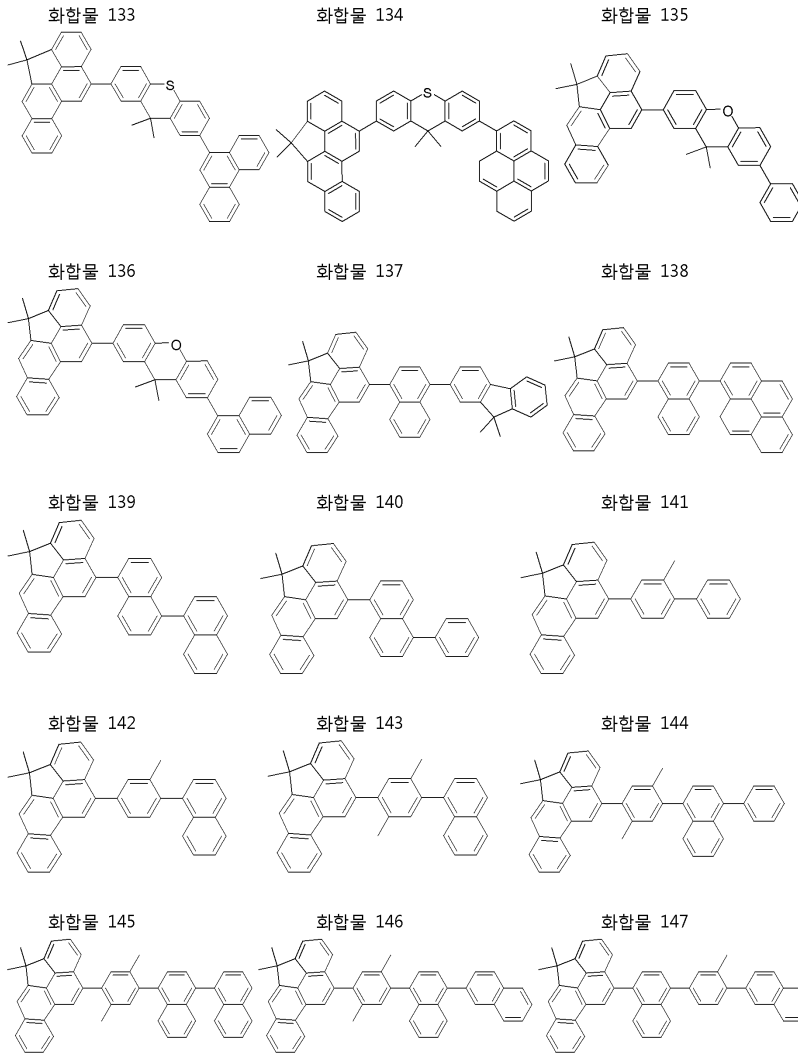
화합물 131



화합물 132

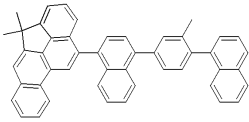


[0054]

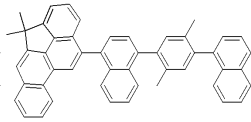


[0055]

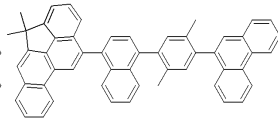
화합물 148



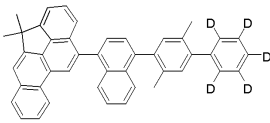
화합물 149



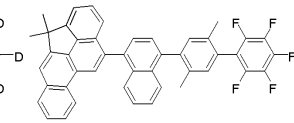
화합물 150



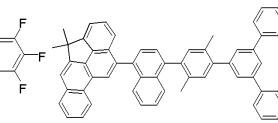
화합물 151



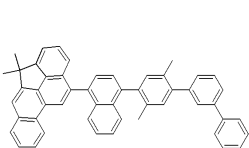
화합물 152



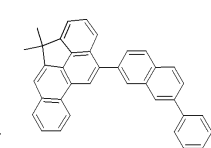
화합물 153



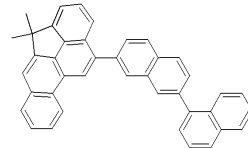
화합물 154



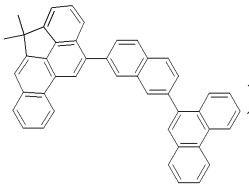
화합물 155



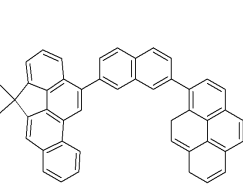
화합물 156



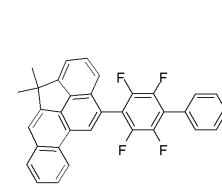
화합물 157



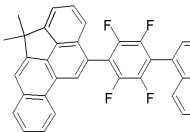
화합물 158



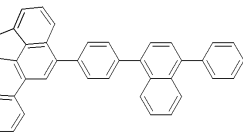
화합물 159



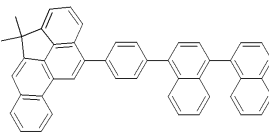
화합물 160



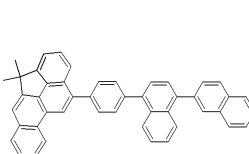
화합물 161



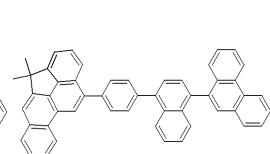
화합물 162



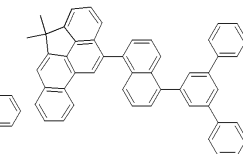
화합물 163



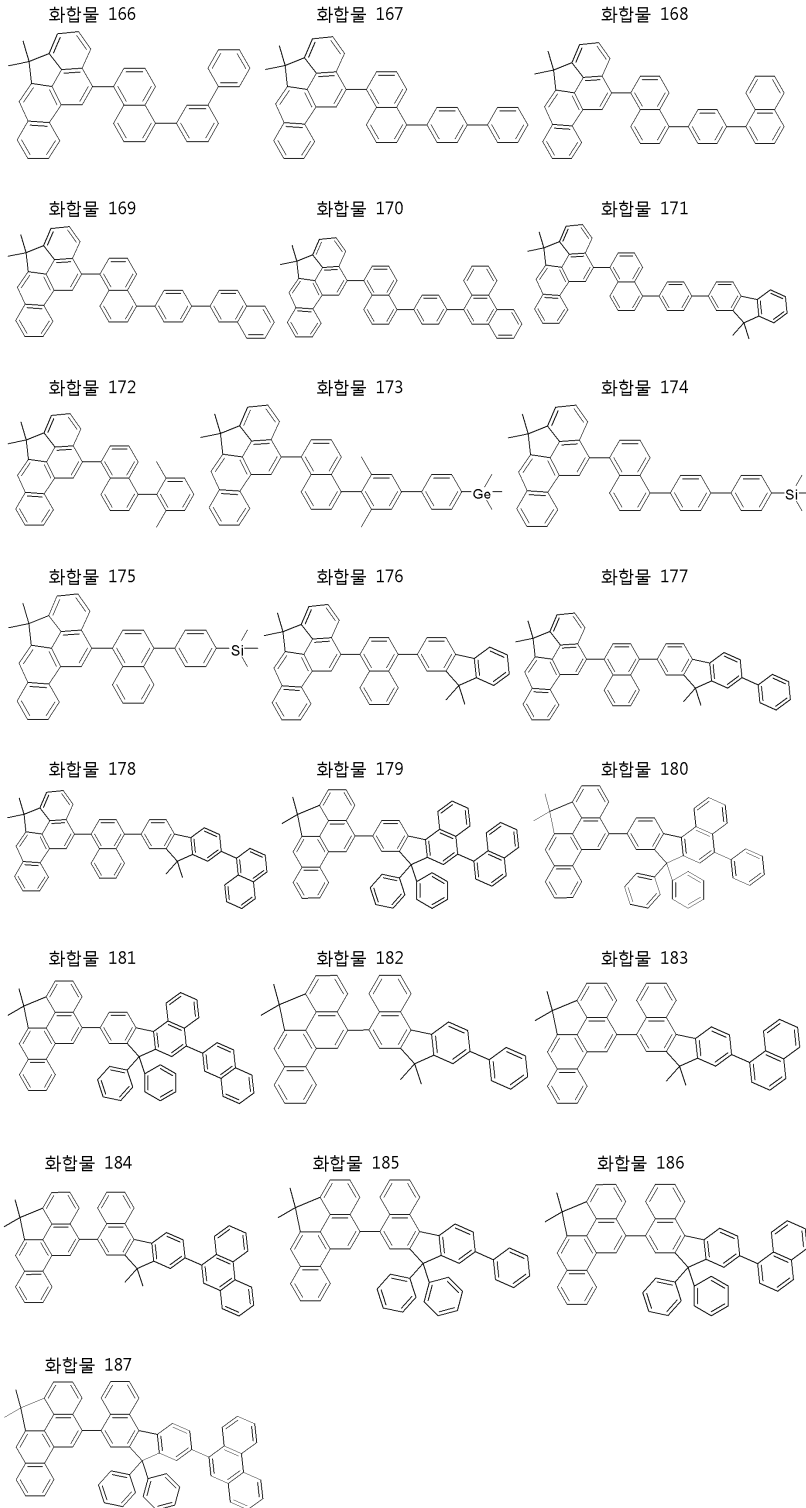
화합물 164



화합물 165



[0056]



[0057]

[0059] 상기와 같은 구조의 코어 구조에 다양한 치환기를 도입함으로써 도입된 치환기의 고유 특성을 갖는 유기발광 화합물을 합성할 수 있다. 예컨대, 유기전계발광소자의 제조시 사용되는 정공 주입층 물질, 정공 수송층 물질, 발광층 물질, 및 전자 수송층 물질에 사용되는 치환기를 상기 구조에 도입함으로써 각 유기물층에서 요구하는 조건들을 충족시키는 물질을 제조할 수 있다. 본 발명의 화합물은 유기전계발광소자의 통상의 제조방법에 따라 소자에 적용할 수 있다.

[0060] 본 발명의 하나의 실시예에 따른 유기전계발광소자는 제1 전극과 제2 전극 및 이 사이에 배치된 유기물층을 포함하는 구조로 이루어질 수 있으며, 본 발명에 따른 유기발광 화합물을 소자의 유기물층에 사용한다는 것을 제외하고는 통상의 소자의 제조 방법 및 재료를 사용하여 제조될 수 있다.

- [0061] 본 발명에 따른 유기전계발광소자의 유기물층은 다층 구조로 이루어질 수도 있으나, 2층 이상의 유기물층이 적층된 다층 구조로 이루어질 수 있다. 예컨대, 정공 주입층, 정공 수송층, 발광층, 전자 수송층, 전자 주입층 등을 포함하는 구조를 가질 수 있다. 그러나, 이에 한정되지 않고 더 적은 수의 유기물층을 포함할 수도 있다.
- [0062] 따라서, 본 발명의 유기전계발광소자에서, 상기 유기물층은 정공 주입층, 정공 수송층, 및 정공 주입 및 정공 수송을 동시에 하는 층 중 1층 이상을 포함할 수 있고, 상기 층들 중 1층 이상이 상기 [화학식 1]로 표시되는 화합물을 포함할 수 있다.
- [0063] 또한, 상기 유기물층은 발광층을 포함할 수 있고, 상기 발광층이 상기 [화학식 1]로 표시되는 화합물을 포함할 수 있다. 여기서, 상기 [화학식 1]로 표시되는 화합물은 발광층 내 호스트 물질로서 포함될 수 있다. 상기 [화학식 1]로 표시되는 화합물이 발광층 내 호스트 물질로서 포함되는 경우에, 상기 발광층은 1종 이상의 도펀트를 포함할 수 있다.
- [0064] 한편 상기 발광층이 호스트 및 도펀트를 포함할 경우, 도펀트의 함량은 통상적으로 호스트 약 100 중량부를 기준으로 하여 약 0.01 내지 약 20 중량부의 범위에서 선택될 수 있다.
- [0065] 이와 같은 다층 구조의 유기물층에서 상기 [화학식 1]로 표시되는 화합물은 발광층, 정공 주입/정공 수송과 발광을 동시에 하는 층, 정공 수송과 발광을 동시에 하는 층, 또는 전자 수송과 발광을 동시에 하는 층 등에 포함될 수 있다.
- [0066] 예컨대, 본 발명에 따른 유기 전자 소자의 구조는 도 1 내지 5에 예시되어 있다.
- [0067] 도 1에는 기관(1) 위에 양극(2), 정공 주입층(3), 정공 수송층(4), 발광층(5), 전자 수송층(6) 및 음극(7)이 순차적으로 적층된 유기 전자 소자의 구조가 예시되어 있다. 이와 같은 구조에 있어서, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 상기 정공 주입층(3), 정공 수송층(4), 발광층(5) 또는 전자 수송층(6)에 포함될 수 있다.
- [0068] 도 2에는 기관(1) 위에 양극(2), 정공 주입층(3), 정공 수송층(4), 발광층(5) 및 음극(7)이 순차적으로 적층된 유기 전자 소자의 구조가 예시되어 있다. 이와 같은 구조에 있어서, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 상기 정공 주입층(3), 정공 수송층(4) 또는 전자 수송층(6)에 포함될 수 있다.
- [0069] 도 3에는 기관(1) 위에 양극(2), 정공 수송층(4), 발광층(5), 전자 수송층(6) 및 음극(7)이 순차적으로 적층된 유기 전자 소자의 구조가 예시되어 있다. 이와 같은 구조에 있어서, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 상기 정공 수송층(4), 발광층(5) 또는 전자 수송층(6)에 포함될 수 있다.
- [0070] 도 4에는 기관(1) 위에 양극(2), 발광층(5), 전자 수송층(6) 및 음극(7)이 순차적으로 적층된 유기 전자 소자의 구조가 예시되어 있다. 이와 같은 구조에 있어서, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 상기 발광층(5) 또는 전자 수송층(6)에 포함될 수 있다.
- [0071] 도 5에는 기관(1) 위에 양극(2), 발광층(5) 및 음극(7)이 순차적으로 적층된 유기 전자 소자의 구조가 예시되어 있다. 이와 같은 구조에 있어서, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 상기 발광층(5)에 포함될 수 있다.
- [0072] 예컨대, 본 발명에 따른 유기 전자 소자의 구조는 도 1 내지 5에 예시되어 있다.
- [0073] 도 1에는 기관(1) 위에 양극(2), 정공 주입층(3), 정공 수송층(4), 발광층(5), 전자 수송층(6) 및 음극(7)이 순차적으로 적층된 유기전계발광소자의 구조가 예시되어 있다. 이와 같은 구조에 있어서, 상기 [화학식 1]로 표시되는 화합물은 상기 정공 주입층(3), 정공 수송층(4), 발광층(5) 또는 전자 수송층(6)에 포함될 수 있다.
- [0074] 도 2에는 기관(1) 위에 양극(2), 정공 주입층(3), 정공 수송층(4), 발광층(5) 및 음극(7)이 순차적으로 적층된 유기전계발광소자의 구조가 예시되어 있다. 이와 같은 구조에 있어서, 상기 [화학식 1]로 표시되는 화합물은 상기 정공 주입층(3), 정공 수송층(4) 또는 전자 수송층(6)에 포함될 수 있다.
- [0075] 도 3에는 기관(1) 위에 양극(2), 정공 수송층(4), 발광층(5), 전자 수송층(6) 및 음극(7)이 순차적으로 적층된 유기전계발광소자의 구조가 예시되어 있다. 이와 같은 구조에 있어서, 상기 [화학식 1]로 표시되는 화합물은 상기 정공 수송층(4), 발광층(5) 또는 전자 수송층(6)에 포함될 수 있다.
- [0076] 도 4에는 기관(1) 위에 양극(2), 발광층(5), 전자 수송층(6) 및 음극(7)이 순차적으로 적층된 유기전계발광소자

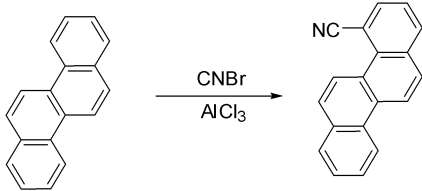
의 구조가 예시되어 있다. 이와 같은 구조에 있어서, 상기 [화학식 1]로 표시되는 화합물은 상기 발광층(5) 또는 전자 수송층(6)에 포함될 수 있다.

- [0077] 도 5에는 기관(1) 위에 양극(2), 발광층(5) 및 음극(7)이 순차적으로 적층된 유기전계발광소자의 구조가 예시되어 있다. 이와 같은 구조에 있어서, 상기 [화학식 1]로 표시되는 화합물은 상기 발광층(5)에 포함될 수 있다.
- [0078] 예컨대, 본 발명에 따른 유기전계발광소자는 스퍼터링(sputtering)이나 전자빔 증발(e-beam evaporation)과 같은 PVD(physical vapor deposition) 방법을 이용하여, 기관상에 금속 또는 전도성을 가지는 금속 산화물 또는 이들의 합금을 증착시켜 양극을 형성하고, 그 위에 정공 주입층, 정공 수송층, 발광층, 전자 수송층을 포함하는 유기물층을 형성한 후, 그 위에 음극으로 사용할 수 있는 물질을 증착시킴으로써 제조될 수 있다.
- [0079] 이와 같은 방법 외에도, 기관상에 음극 물질부터 유기물층, 양극 물질을 차례로 증착시켜 유기전계발광소자를 만들 수도 있다. 상기 유기물층은 정공 주입층, 정공 수송층, 발광층 및 전자 수송층 등을 포함하는 다층 구조일 수도 있으나, 이에 한정되지 않고 단층 구조일 수 있다. 또한, 상기 유기물층은 다양한 고분자 소재를 사용하여 증착법이 아닌 솔벤트 프로세스(solvent process), 예컨대 스핀 코팅, 딥 코팅, 닥터 블레이딩, 스크린 프린팅, 잉크젯 프린팅 또는 열 전사법 등의 방법에 의하여 더 적은 수의 층으로 제조할 수 있다.
- [0080] 상기 양극 물질로는 통상 유기물층으로 정공주입이 원활할 수 있도록 일함수가 큰 물질이 바람직하다. 본 발명에서 사용될 수 있는 양극 물질의 구체적인 예로는 바나듐, 크롬, 구리, 아연, 금과 같은 금속 또는 이들의 합금, 아연 산화물, 인듐 산화물, 인듐 주석 산화물(ITO), 인듐 아연 산화물(IZO)과 같은 금속 산화물, ZnO:Al 또는 SnO<sub>2</sub>:Sb와 같은 금속과 산화물의 조합, 폴리(3-메틸티오펜), 폴리[3,4-(에틸렌-1,2-디옥시)티오펜](PEDT), 폴리피롤 및 폴리아닐린과 같은 전도성 고분자 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.
- [0081] 상기 음극 물질로는 통상 유기물층으로 전자 주입이 용이하도록 일함수가 작은 물질인 것이 바람직하다. 음극 물질의 구체적인 예로는 마그네슘, 칼슘, 나트륨, 칼륨, 타이타늄, 인듐, 이트륨, 리튬, 가돌리늄, 알루미늄, 은, 주석 및 납과 같은 금속 또는 이들의 합금, LiF/Al 또는 LiO<sub>2</sub>/Al과 같은 다층 구조 물질 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.
- [0082] 정공 주입 물질로는 낮은 전압에서 양극으로부터 정공을 잘 주입받을 수 있는 물질로서, 정공 주입 물질의 HOMO(highest occupied molecular orbital)가 양극 물질의 일함수와 주변 유기물층의 HOMO 사이인 것이 바람직하다. 정공 주입 물질의 구체적인 예로는 금속 포피린(porphyrine), 올리고티오펜, 아릴아민 계열의 유기물, 헥사니트릴 헥사아자트리페닐렌, 퀴나크리돈(quinacridone) 계열의 유기물, 페릴렌(perylene) 계열의 유기물, 안트라퀴논 및 폴리아닐린과 폴리티오펜 계열의 전도성 고분자 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.
- [0083] 정공 수송 물질로는 양극이나 정공 주입층으로부터 정공을 수송 받아 발광층으로 옮겨줄 수 있는 물질로 정공에 대한 이동성이 큰 물질이 적합하다. 구체적인 예로는 아릴아민 계열의 유기물, 전도성 고분자, 및 공액 부분과 비공액 부분이 함께 있는 블록 공중합체 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.
- [0084] 발광 물질로는 정공 수송층과 전자 수송층으로부터 정공과 전자를 각각 수송받아 결합시킴으로써 가시광선 영역의 빛을 낼 수 있는 물질로서, 형광이나 인광에 대한 양자효율이 좋은 물질이 바람직하다. 구체적인 예로는 8-히드록시-퀴놀린 알루미늄 착물(Alq<sub>3</sub>), 카르바졸 계열 화합물, 이량체화 스티릴(dimerized styryl) 화합물, BAlq, 10-히드록시벤조 퀴놀린-금속 화합물, 벤족사졸, 벤즈티아졸 및 벤즈이미다졸 계열의 화합물, 폴리(p-페닐렌비닐렌)(PPV) 계열의 고분자, 스피로(spiro) 화합물, 폴리플루오렌, 루브렌 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.
- [0085] 전자 수송 물질로는 음극으로부터 전자를 잘 주입 받아 발광층으로 옮겨줄 수 있는 물질로서, 전자에 대한 이동성이 큰 물질이 적합하다. 구체적인 예로는 8-히드록시퀴놀린의 Al 착물, Alq<sub>3</sub>를 포함한 착물, 유기 라디칼 화합물, 히드록시플라본-금속 착물 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.
- [0086] 본 발명에 따른 유기전계발광소자는 사용되는 재료에 따라 전면 발광형, 후면 발광형 또는 양면 발광형일 수 있다.
- [0087] 또한, 본 발명에 따른 유기발광 화합물은 유기 태양 전지, 유기 감광체, 유기 트랜지스터 등을 비롯한 유기 전자 소자에서도 유기전계발광소자에 적용되는 것과 유사한 원리로 작용할 수 있다.

[0088] 이하, 본 발명의 이해를 돕기 위하여 바람직한 실시예를 제시한다. 그러나, 하기의 실시예는 본 발명을 예시하기 위한 것이며, 이에 의하여 본 발명의 범위가 한정되는 것은 아니다.

[0089] 합성예 1 : [화합물 1]의 합성

[0090] (1) [중간체 1-1]의 합성

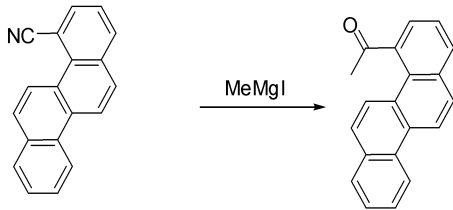


[0091]

[0092] [중간체 1-1]

[0093] chrysene(5.0 g, 0.022 mol)에 cyanic bromide(2.3 g, 0.044 mol), aluminum chloride(3.2 g, 0.024 mol) DMF 110 mL를 넣고 100 °C에서 6시간 교반하여 반응시켰다. 반응 종료 후 냉각하여 H<sub>2</sub>O : MC에 증분리 후 컬럼 정제(n-Hexane : MC)하여 [중간체 1-1]을 3.9 g(70%)수득하였다.(m/z=253)

[0094] (2) [중간체 1-2]의 합성

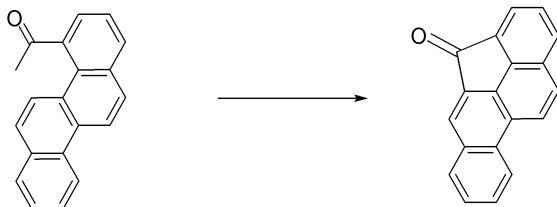


[0095]

[0096] [중간체 1-2]

[0097] [중간체 1-1](5.0 g, 0.020 mol), methyl magnesium iodide(4.0 g, 0.024 mol)에 THF 100 mL를 넣고 -78 °C에서 5시간 교반하여 반응시켰다. 반응종료 후 H<sub>2</sub>O:MC에 증분리 후 컬럼정제(n-HEXANE : MC)하여 [중간체 1-2]를 6.7g (90%)수득하였다.(m/z =270)

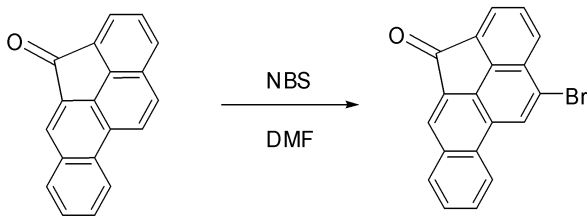
[0098] (3) [중간체 1-3]의 합성



[0099]

[0100] [중간체 1-3]

[0101] (4) [중간체 1-4]의 합성

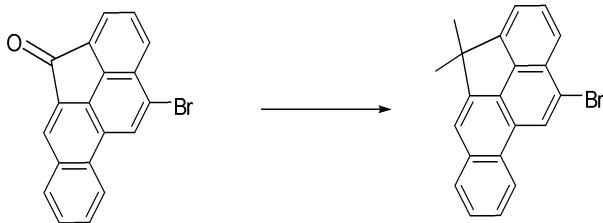


[0102]

[0103] [중간체 1-4]

[0104] [중간체 1-3](5.0 g, 0.020 mol)에 N-bromosuccinimide(3.6 g, 0.020 mol)에 DMF 100 mL를 넣고 20 °C에서 8시간 교반하여 반응시켰다. 반응 종료 후 H<sub>2</sub>O : 아세트산에틸로 충분히 분리 후 컬럼정제(n-Hexane :MC)하여 [중간체 1-4]을 3.2g(48%)수득하였다.(m/z=331)

[0105] (5) [중간체 1-5]의 합성

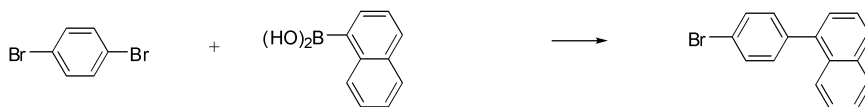


[0106]

[0107] [중간체 1-5]

[0108] [중간체 1-4](5.0 g, 0.015 mol)에 Pd(dba)<sub>2</sub>(0.7 g, 0.0008 mol), potassium-acetate(4.2 g, 0.030 mol)에 DMF 100 mL를 넣고 120 °C에서 8시간 교반하여 반응시켰다. 반응 종료 후 냉각하여 H<sub>2</sub>O : 아세트산에틸로 충분히 분리 후 컬럼정제 (n-HEXANE : MC)하여 [중간체 1-5]을 3.1g (60%)수득하였다. (m/z=347)

[0109] (6) [중간체 1-6]의 합성

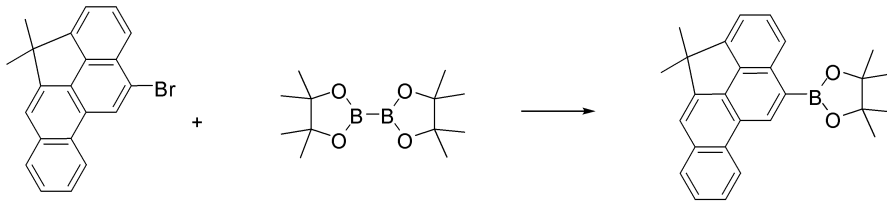


[0110]

[0111] [중간체 1-6]

[0112] 1,4-dibromobenzene(5.0 g, 0.021 mol)에 naphthalen-1-ylboronic acid(4.39 g, 0.025 mol), Pd(pph<sub>3</sub>)<sub>4</sub>(0.8 g, 0.0007 mol), potassium carbonate(3.9 g, 0.028 mol)에 THF 100 mL를 넣고 65 °C에서 18시간 교반하여 반응시켰다. 반응 종료 후 냉각하여 H<sub>2</sub>O : MC에 충분히 분리 후 컬럼정제(n-Hexane :MC)하여 [중간체 1-6]을 3.9g(72%)수득하였다.(m/z=283.16)

[0113] (7) [중간체 1-7]의 합성

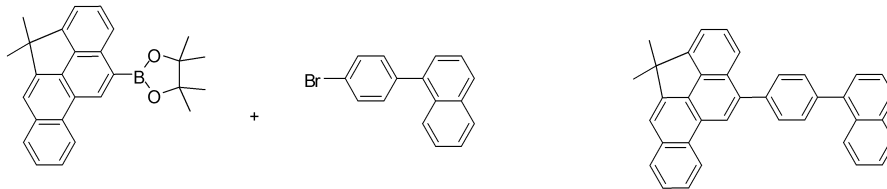


[0114]

[0115] [중간체 1-7]

[0116] [중간체 1-5](5.0 g, 0.014 mol)에 bis(pinacolato)diboron(4.3 g, 0.017 mol), PdCl<sub>2</sub>(dppf)(0.5 g, 0.0007 mol), potassium-acetate(3.9 g, 0.028 mol)에 1,4-dioxane 130 mL를 넣고 95 °C에서 24시간 교반하여 반응시켰다. 반응 종료 후 냉각하여 H<sub>2</sub>O:MC에 층분리 후 컬럼정제(n-Hexane : MC)하여 [중간체 1-7]를 3.9g(71%) 수득하였다. (m/z=394)

[0117] (8) [화합물 1]의 합성



[0118]

[0119] [화합물 1]

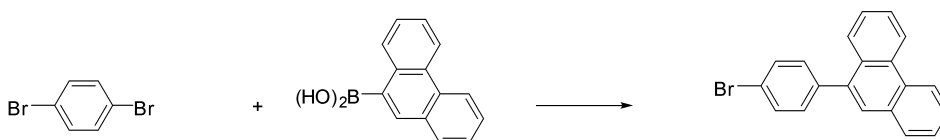
[0120] [중간체 1-6](3.6 g, 0.014 mol)에 [중간체 1-7](6.6 g, 0.014 mol)를 넣고 합성에 1-(5)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 [화합물 1] 3.4g (수율 72%)을 얻었다.

[0121] H-NMR (200 MHz, CDCl<sub>3</sub>): δ ppm, 1H(8.93/d, 8.55/d, 8.42/d, 8.12/d, 8.08/d, 8.04/d, 7.94/d, 7.93/d, 7.88/m, 7.82/m, 7.74/m, 7.61/m) 2H(7.75/d, 7.55/m, 1.98/s) 4H(7.25/d)

[0122] LC/MS: m/z=471 [(M+1)<sup>+</sup>]

[0123] 합성예 2 : [화합물 19]의 합성

[0124] (1) [중간체 19-1]의 합성

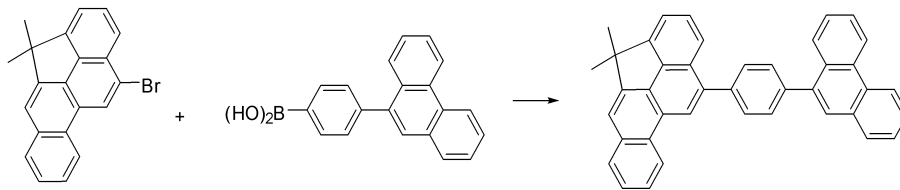


[0125]

[0126] [중간체 19-1]

[0127] 1,4-dibromobenzene(5.0 g, 0.021 mol)에 phenanthren-9-ylboronic acid(5.5 g, 0.0250 mol), Pd(pph<sub>3</sub>)<sub>4</sub>(0.8 g, 0.0007 mol), potassium carbonate(3.9 g, 0.028 mol)에 THF 100 mL를 넣고 65 °C에서 18시간 교반하여 반응시켰다. 반응 종료 후 냉각하여 H<sub>2</sub>O : MC에 층분리 후 컬럼정제(n-Hexane :MC)하여 [중간체 19-1]을3.9g(72%)수득하였다.(m/z=333.2)

[0128] (2) [화합물 19]의 합성



[0129]

[0130] [화합물 19]

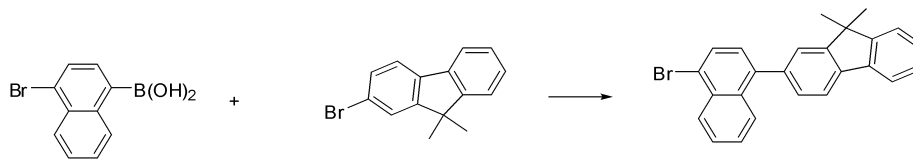
[0131] [중간체 1-5](5.0 g, 0.014 mol)에 [중간체 1-7](2.6 g, 0.010 mol)를 넣고 합성예 1-(6)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 [화합물 19] 3.9g (수율 75%)을 얻었다.

[0132] H-NMR (200MHz,  $CDCl_3$ ):  $\delta$  ppm, 1H(7.94/d, 7.74/m) 2H(7.93/s, 7.75/d, 1.98/s) 3H(8.93/d, 8.12/d, 7.88/m, 7.82/m) 4H(7.25/d)

[0133] LC/MS:  $m/z=521 [(M+1)^+]$

[0134] 합성예 3 : [화합물 41]의 합성

[0135] (1) [중간체 41-1]의 합성

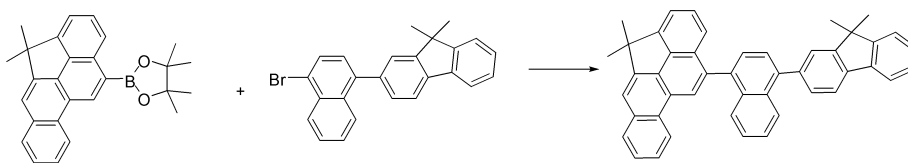


[0136]

[0137] [중간체 41-1]

[0138] 4-bromonaphthalen-1-ylboronic acid(5.0 g, 0.020 mol)에 2-bromo-9,9-dimethyl-9H-fluorene(2.2 g, 0.008 mol)를 넣고 합성예1-(6)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 [중간체 41-1] 3.5g (수율 77%)을 얻었다.( $m/z=458$ )

[0139] (2) [화합물 41]의 합성



[0140]

[0141] [화합물 41]

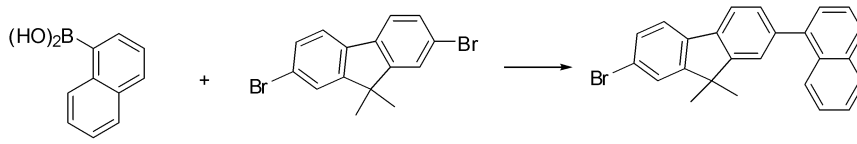
[0142] [중간체 1-7] (5.0 g, 0.010 mol)에 [중간체 41-1](3.9 g, 0.010 mol)를 넣고 합성예 1-(6)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 [화합물 41] 3.2g (수율 68%)을 얻었다.

[0143] H-NMR (200MHz,  $CDCl_3$ ):  $\delta$  ppm, 1H(8.93/d, 8.12/d, 7.94/d, 7.88/m, 7.87/d, 7.82/m, 7.77/s, 7.74/m, 7.63/d, 7.55/d, 7.38/m, 7.28/m) 2H(8.55/d, 8.01/d, 7.93/d, 7.75/d, 7.55/m, 1.98/s, 1.72/s)

[0144] LC/MS:  $m/z= 587[(M+1)^+]$

[0145] 합성예 4 : [화합물 43]의 합성

[0146] (1) [중간체 43-1]의 합성



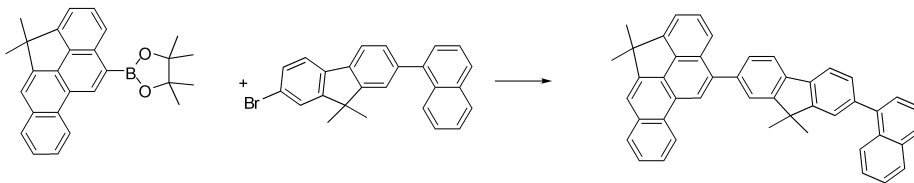
[0147]

[0148]

[중간체 43-1]

[0149] 2,7-dibromo-9,9-dimethyl-9H-fluorene(3.5 g, 0.010mol)에 naphthalen-1-ylboronic acid(1.9 g, 0.011 mol)를 넣고 합성예 1-(6)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 [중간체 43-1] 3.8g (수율 71%)을 얻었다.(m/z=539)

[0150] (2) [화합물 43]의 합성



[0151]

[0152]

[화합물 43]

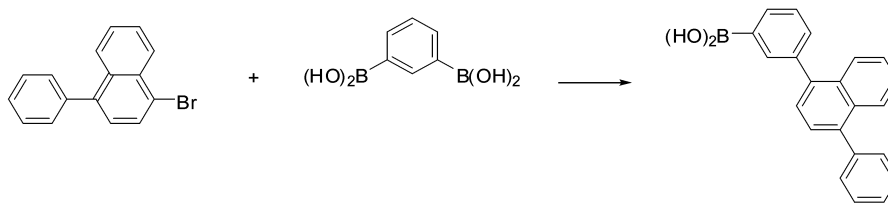
[0153] [중간체 1-7] (5.0 g, 0.013 mol)에 [중간체 43-1](5.0 g, 0.009 mol)를 넣고 합성예 1-(6)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 [화합물 43] 3.9g (수율 74%)을 얻었다.

[0154] H-NMR (200MHz,  $CDCl_3$ ):  $\delta$  ppm, 1H(8.93/d, 8.55/d, 8.42/d, 8.12/d, 8.08/d, 8.04/d, 7.94/d, 7.93/d, 7.88/m, 7.82/m, 7.74/m, 7.61/m) 2H(7.93/d, 7.77/s, 7.75/d, 7.63/d, 7.55/m, 1.98/s, 1.72/s)

[0155] LC/MS: m/z=587 [(M+1)<sup>+</sup>]

[0156] 합성예 5 : [화합물 51]의 합성

[0157] (1) [중간체 51-1]의 합성



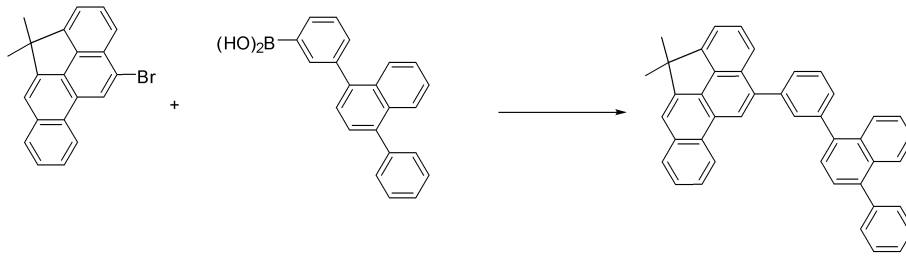
[0158]

[0159]

[중간체 51-1]

[0160] 1-bromo-4-phenylnaphthalene(2.8 g, 0.010 mol)에 1,3-phenylenediboronic acid(2.8 g, 0.017 mol)를 넣고 합성예 1-(6)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 [중간체 51-1] 3.8g (수율 70%)을 얻었다.(m/z=324.18)

[0161] (2) [화합물 51]의 합성



[화합물 51]

[0162]

[0163]

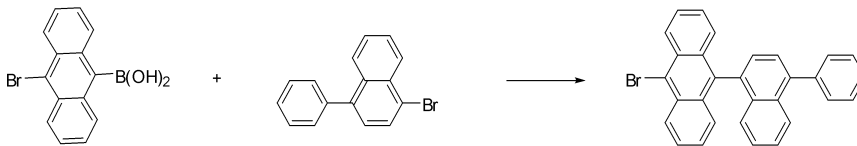
[0164] [중간체 1-5](5.0 g, 0.014 mol)에 3-(4-phenylnaphthalen-1-yl)phenyl boronic acid(5.4 g, 0.0168 mol)를 넣고 합성에 1-(6)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 [화합물 51] 3.8g (수율 76%)을 얻었다.

[0165] H-NMR (200MHz,  $CDCl_3$ ):  $\delta$  ppm, 1H(8.93/d, 8.12/d, 7.94/d, 7.93/s, 7.88/m, 7.82/m, 7.74/m, 7.70/s, 7.57/m, 7.41/m) 2H(8.55/d, 8.01/d, 7.79/d, 7.75/d, 7.55/m, 7.51/m, 7.48/d, 1.98/s )

[0166] LC/MS:  $m/z=547 [(M+1)^+]$

[0167] 합성예 6 : [화합물 73]의 합성

[0168] (1) [중간체 73-1]의 합성



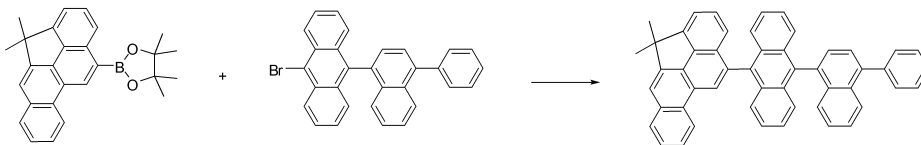
[중간체 73-1]

[0169]

[0170]

[0171] 10-bromoanthracen-9-ylboronic acid (3.0 g, 0.010 mol)에 1-bromo-4-phenylnaphthalene(2.3 g, 0.008 mol)를 넣고 합성에 1-(6)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 [중간체 73-1] 3.7g (수율 75%)을 얻었다.( $m/z=459.38$ )

[0172] (2) [화합물 73]의 합성



[화합물 73]

[0173]

[0174]

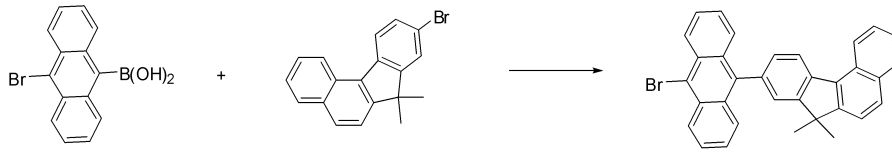
[0175] [중간체 41-1](5.0 g, 0.013 mol)에 9-bromo-10-(4-phenylnaphthalen-1-yl)anthracene(4.59 g, 0.010 mol)를 넣고 합성에 1-(6)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 [화합물 73] 3.6g (수율 65%)을 얻었다.

[0176] H-NMR (200MHz,  $CDCl_3$ ):  $\delta$  ppm, 1H(8.93/d, 8.12/d, 7.94/d, 7.93/s, 7.88/m, 7.82/m, 7.74/m, 7.41/m ) 2H(8.55/d, 8.01/d, 7.79/d, 7.75/d, 7.55/m, 7.51/m, 1.98/s ) 4H(7.91/d ,7.39/m )

[0177] LC/MS:  $m/z= 647[(M+1)^+]$

[0178] 합성예 7 : [화합물 97]의 합성

[0179] (1) [중간체 97-1]의 합성

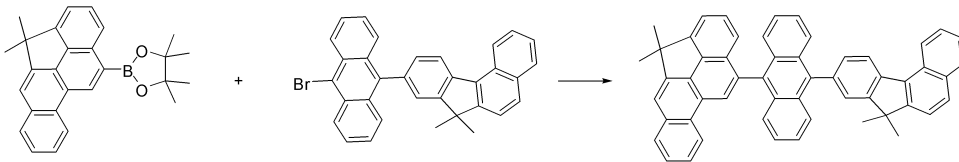


[0180]

[0181] [중간체 97-1]

[0182] 10-bromoanthracen-9-ylboronic acid(3.0 g, 0.010 mol)에 9-bromo-7,7-dimethyl-7H-benzo[c]fluorene(2.6 g, 0.008 mol)를 넣고 합성예 1-(6)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 [중간체 97-1] 3.7g (수율 75%)을 얻었다.(m/z=499.44).

[0183] (2) [화합물 97]의 합성



[0184]

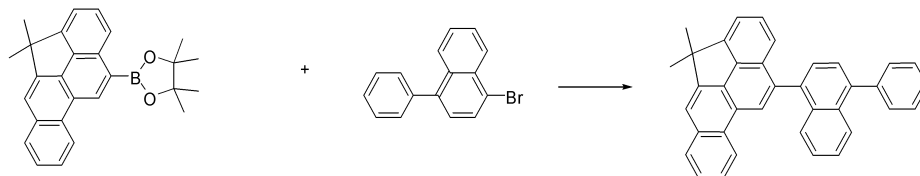
[0185] [화합물 97]

[0186] [중간체 41-1](5.0 g, 0.013 mol)에 [중간체 97-1](5.4 g, 0.010 mol)를 넣고 합성예 1-(6)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 [화합물 97] 3.6g (수율 65%)을 얻었다.

[0187] H-NMR (200MHz,  $CDCl_3$ ):  $\delta$  ppm, 1H(8.93/d, 8.52/d, 8.15/d, 8.12/d, 8.09/d, 7.98/d, 7.94/d, 7.93/d, 7.88/m, 7.83/d, 7.82/m, 7.74/m, 7.69/d, 7.54/m, 7.51/m, 7.14/m ) 2H(7.75/d, 1.98/s, 1.78/s ) 4H(7.91/d, 7.39/m )

[0188] LC/MS: m/z= 687[(M+1)<sup>+</sup>]

[0189] 합성예 8 : [화합물 15]의 합성



[0190]

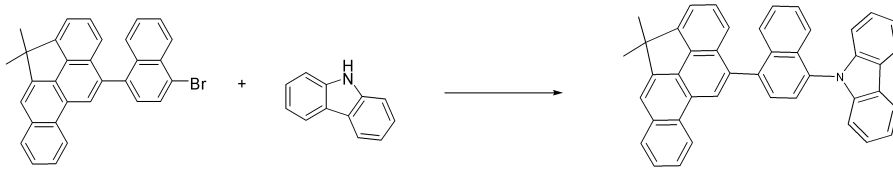
[0191] [화합물 15]

[0192] [중간체 41-1](5.0 g, 0.013 mol)에 1-bromo-4-phenylnaphthalene(2.8 g, 0.010 mol)를 넣고 합성예 1-(6)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 [화합물 15] 4.0g (수율 77%)을 얻었다.

[0193] H-NMR (200MHz,  $CDCl_3$ ):  $\delta$  ppm, 1H(8.93/d, 8.12/d, 7.94/d, 7.93/s, 7.88/m, 7.82/m, 7.74/m, 7.41/m) 2H(8.55/d, 8.01/d, 7.79/d, 7.75/d, 7.55/m, 7.51/m, 1.98/s)

[0194] LC/MS: m/z=471[(M+1)<sup>+</sup>]

[0195] 합성예 9 : [화합물 110]의 합성



[0196]

[0197] [화합물 110]

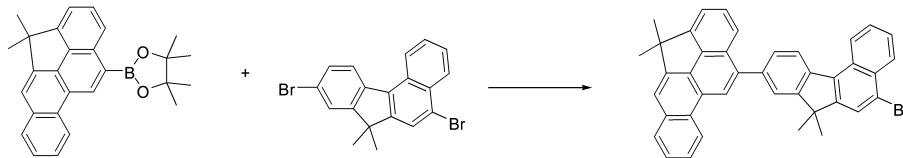
[0198] 1-(4-bromonaphthalen-1-yl)-8,8-dimethyl-8H-cyclopenta[def]chrysene(5.0 g, 0.011 mol)에 9H-carbazole(2.2 g, 0.013 mol), Pd(dba)<sub>2</sub>(0.5 g, 0.0006 mol), sodium-tert-butoxide(2.1 g, 0.022 mol)에 톨루엔 100 mL를 넣고 95 °C에서 4시간 교반하여 반응시켰다. 반응 종료 후 냉각하여 H<sub>2</sub>O : MC에 층분리 후 컬럼 정제(n-Hexane:MC)하여 [화합물 110]를 4.9(8%)수득하였다.

[0199] H-NMR (200MHz, CDCl<sub>3</sub>): δ ppm, 1H(8.93/d, 8.08/d, 7.95/d, 7.93/d, 7.88/m, 7.82/m, 7.74/m, 7.63/d, 7.50/m, 7.40/d, 7.33/m, 7.29/m, 7.25/m) 2H(8.55/d, 8.12/d, 7.94/d, 7.75/d, 7.55/m, 1.98/s)

[0200] LC/MS: m/z=560[(M+1)<sup>+</sup>]

[0201] 실시예 10 : [화합물 124]의 합성

[0202] (1) [중간체 124-1]의 합성

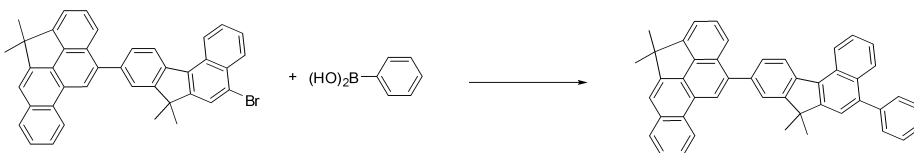


[0203]

[0204] [중간체 124-1]

[0205] [중간체 41-1](5.0 g, 0.013 mol)에 5,9-dibromo-7,7-dimethyl-7H-benzo[c]fluorene(40 g, 0.010 mol)를 넣고 합성예 1-(6)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 [중간체 124-1] 3.8g (수율 68%)을 얻었다.(m/z=589)

[0206] (2) [화합물 124]의 합성



[0207]

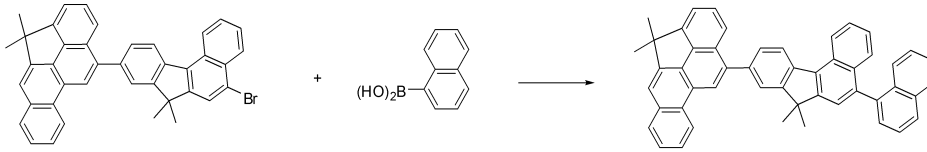
[0208] [화합물 124]

[0209] [중간체 124-1](5.0 g, 0.008 mol)에 phenylboronic-acid(1.2 g, 0.010 mol) 를 넣고 합성예 1-(6)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 [화합물 124] 3.7g (수율 79%)을 얻었다.

[0210] H-NMR (200MHz, CDCl<sub>3</sub>): δ ppm, 1H(8.93/d, 8.56/d, 8.52/d, 8.15/d, 8.12/d, 7.99/s, 7.94/d, 7.93/d, 7.88/m, 7.83/s, 7.82/m, 7.74/m, 7.69/d, 7.54/m, 7.41/m ) 2H(7.79/d, 7.75/d, 1.98/s, 1.78/s) 3H(7.51/m)

[0211] LC/MS: m/z=587[(M+1)<sup>+</sup>]

[0212] 합성예 11 : [화합물 125]의 합성



[0213]  
[0214] [화합물 125]

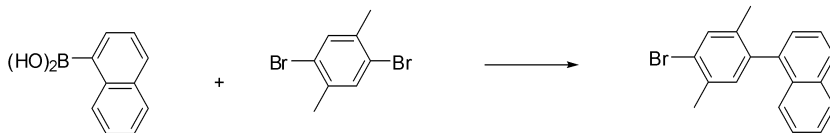
[0215] [중간체 125-1](5.0 g, 0.008 mol)에 naphthalen-1-ylboronic acid(1.7 g, 0.010 mol)를 넣고 합성예 1-(6)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 [화합물 125] 3.9g (수율 79%)을 얻었다.

[0216] H-NMR (200MHz,  $CDCl_3$ ):  $\delta$  ppm, 1H(8.93/d, 8.56/d, 8.55/d, 8.52/d, 8.42/d, 8.15/d, 8.12/d, 8.08/d, 8.04/d, 7.99/s, 7.94/d, 7.93/d, 7.88/m, 7.83/s, 7.82/m, 7.74/m, 7.69/d, 7.61/m, 7.54/m, 7.51/m) 2H(7.75/d, 7.55/m, 1.98/s, 1.78/s)

[0217] LC/MS:  $m/z=627[(M+1)^+]$

[0218] 실시예 12 : [화합물 149]의 합성

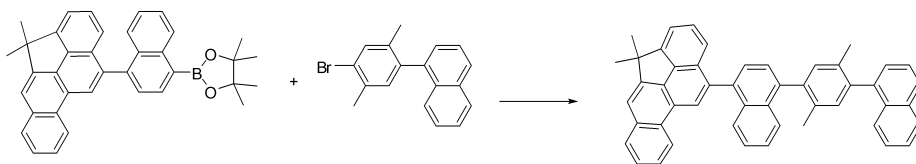
[0219] (1) [중간체 149-1]의 합성



[0220]  
[0221] [중간체 149-1]

[0222] naphthalen-1-ylboronic acid(1.7 g, 0.010 mol)에 1,4-dibromo-2,5-dimethylbenzene(2.4 g, 0.008 mol)를 넣고 합성예 1-(6)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 [중간체 149-1] 3.1g (수율 68%)을 얻었다. ( $m/z=311.22$ )

[0223] (2) [화합물 149]의 합성



[0224]  
[0225] [화합물 149]

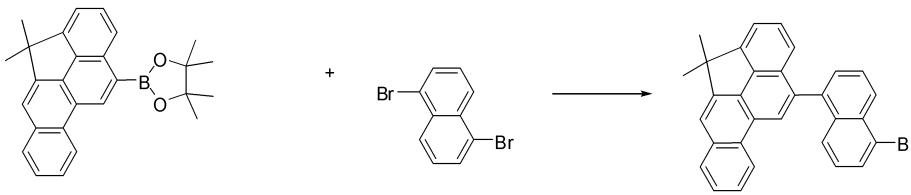
[0226] [중간체 3-3](5.0 g, 0.010 mol)에 [중간체 12-1](2.4 g, 0.008 mol)를 넣고 합성예 1-(6)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 [화합물 149] 4.1g (수율 72%)을 얻었다.

[0227] H-NMR (200MHz,  $CDCl_3$ ):  $\delta$  ppm, 1H(8.93/d, 8.42/d, 8.12/d, 8.08/d, 8.04/d, 7.94/d, 7.93/s, 7.88/m, 7.82/m, 7.74/m, 7.61/m) 2H(8.01/d, 7.75/s, 7.73/s, 2.59/s, 1.98/s) 3H(8.55/d) 4H(7.55/m)

[0228] LC/MS:  $m/z=625[(M+1)^+]$

[0229] 실시예 13 : [화합물 176]의 합성

[0230] (1) [중간체 176-1]의 합성

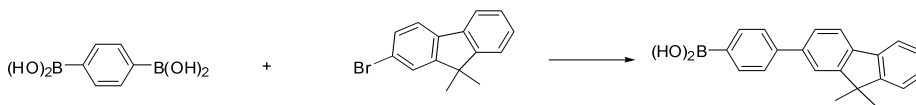


[0231]

[0232] [중간체 176-1]

[0233] [중간체 41-1](5.0 g, 0.013 mol)에 1,5-dibromonaphthalene(2.9 g, 0.010 mol)를 넣고 합성에 1-(6)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 [중간체 176-1] 3.4g(수율 73%)을 얻었다.(m/z=473)

[0234] (2) [중간체 176-2]의 합성

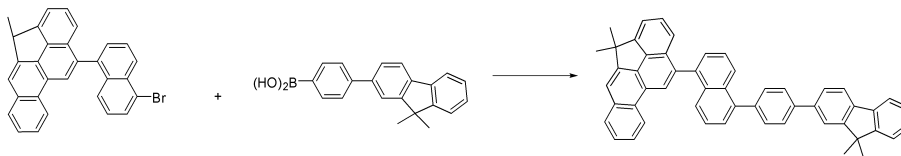


[0235]

[0236] [중간체 176-2]

[0237] 1,4-phenylenediboric acid(2.3 g, 0.014 mol)에 2-bromo-9,9-dimethyl-9H-fluorene(2.2 g, 0.008 mol)를 넣고 합성에 1-(6)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 [중간체 176-2] 4.2g (수율 75%)을 얻었다.(m/z=314.19)

[0238] (3) [화합물 176]의 합성



[0239]

[0240] [화합물 176]

[0241] [중간체 176-1](5.0 g, 0.011 mol)에 [중간체 176-2](5.0 g, 0.010 mol)를 넣고 합성에 1-(6)에서 사용된 동일한 방법으로 합성하여 [화합물 176] 3.8g (수율 72%)을 얻었다.

[0242] H-NMR (200MHz, CDCl<sub>3</sub>): δ ppm, 1H(8.93/d, 8.12/d, 7.94/d, 7.93/s, 7.93/d, 7.88/m, 7.87/d, 7.82/m, 7.77/s, 7.74/m, 7.63/d, 7.55/d, 7.38/m, 7.28/m) 2H(8.51/d, 8.42/d, 7.75/d, 7.61/m, 1.98/s, 1.72/s) 4H(7.25/d)

[0243] LC/MS: m/z=663[(M+1)<sup>+</sup>]

[0244] 소자 실시예 1

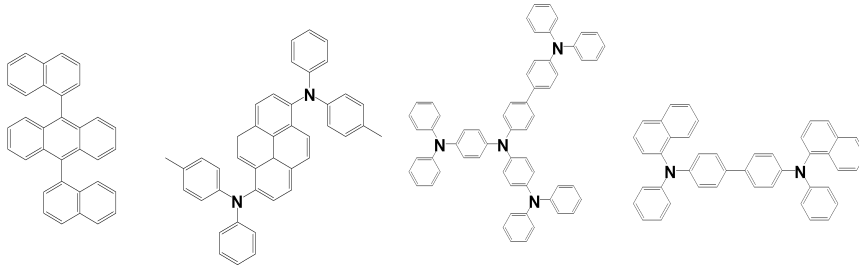
[0245] ITO로 코팅된 유리기판 위에 CuPc를 80 nm, α-NPD를 30 nm를 성막한 후, [화합물 1] + [화합물 B] 6%를 혼합하여 25 nm, 증착속도 0.1m/sec로 성막한 다음에 Alq<sub>3</sub>를 40 nm, LiF을 1 nm, Al을 120 nm의 순서로 성막하여 유기전계발광소자를 제조하였다. 이때, 각 물질의 증착속도는 CuPc, α-NPD, Alq<sub>3</sub>는 0.1 nm/sec, LiF는 0.01 nm/sec, Al은 0.5 nm/sec로 하였다.

[0246] 소자 실시예 2 내지 27

[0247] 상기 [화합물 1] 대신 하기 [표 1]에 기재된 화합물을 사용한 것을 제외하고는 실시예 1과 동일한 방법으로 실시예 2 내지 27의 유기전계발광소자를 제조하였다.

[0248] 소자 비교예 1

[0249] 비교예를 위한 유기발광다이오드 소자는 상기 실시예의 소자구조에서 발명에 의해 제조된 화합물 대신 일반적으로 형광호스트 물질로 많이 사용되고 있는 화합물 A(ADN)를 사용한 점을 제외하고 동일하게 제작하였으며 상기 화합물 A(ADN), 화합물 B, TPD232, NPB의 구조는 아래와 같다.



[0250]

[0251]

[화합물 A]

[화합물 B]

TPD232

NPB

[0252] 이하, 상기 소자실시예 1 내지 27과 소자비교예 1에 따라 제조된 유기전계발광소자의 특성을 비교한 결과를 하기 [표 1]에 나타내었다.

[0253] [표 1]

구분	발광HOST	구동전압(V) (1000cd/m <sup>2</sup> )	발광휘도 (cd/m <sup>2</sup> )	발광효율 (cd/A)	(CIE(x, y))
소자실시예 1	화합물1	5.1	745	6.1	(0.13, 0.10)
소자실시예 2	화합물19	5.3	722	6.1	(0.13, 0.12)
소자실시예 3	화합물41	5.1	751	6.4	(0.14, 0.11)
소자실시예 4	화합물43	5.5	711	6.1	(0.14, 0.13)
소자실시예 5	화합물51	5.3	774	6.5	(0.14, 0.11)
소자실시예 6	화합물73	5.1	811	6.5	(0.13, 0.09)
소자실시예 7	화합물97	5.5	800	6.1	(0.15, 0.10)
소자실시예 8	화합물15	5.3	788	6.7	(0.15, 0.11)
소자실시예 9	화합물110	5.4	744	6.6	(0.14, 0.11)
소자실시예10	화합물124	5.1	735	6.1	(0.15, 0.10)
소자실시예11	화합물125	5.1	711	6.5	(0.14, 0.13)
소자실시예12	화합물149	5.1	745	6.1	(0.14, 0.13)
소자실시예13	화합물176	5.3	722	6.1	(0.13, 0.12)
소자실시예14	화합물3	5.1	745	6.0	(0.13, 0.12)
소자실시예15	화합물7	5.4	756	6.4	(0.14, 0.11)
소자실시예16	화합물23	5.5	757	6.2	(0.15, 0.13)
소자실시예17	화합물27	5.3	742	6.3	(0.15, 0.13)
소자실시예18	화합물31	5.2	733	6.5	(0.14, 0.11)
소자실시예19	화합물35	5.2	713	6.1	(0.15, 0.12)
소자실시예20	화합물45	5.1	725	6.7	(0.13, 0.12)
소자실시예21	화합물150	5.3	745	6.4	(0.14, 0.11)
소자실시예22	화합물153	5.4	748	6.2	(0.14, 0.12)
소자실시예23	화합물155	5.2	775	6.1	(0.15, 0.12)
소자실시예24	화합물160	5.5	745	6.2	(0.15, 0.12)
소자실시예25	화합물163	5.7	727	6.4	(0.14, 0.11)
소자실시예26	화합물164	5.1	723	6.3	(0.15, 0.13)
소자실시예27	화합물165	5.0	755	6.1	(0.15, 0.12)
소자비교예 1	화합물A	6.5	557	4.0	(0.14, 0.13)

[0254]

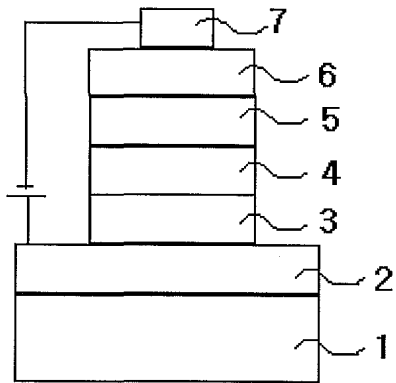
[0255] [구동전압 및 발광효율 측정]

[0256] 실시예 및 비교예에 따른 유기전계발광소자(기관크기 : 25×25 mm<sup>2</sup> / 증착면적 : 2×2 mm<sup>2</sup>)를 IVL 측정셋트(CS-2000+지그+IVL 프로그램)에 고정한 후 전류를 1mA/m<sup>2</sup>씩 상승시키며 증착면의 발광 휘도(cd/m<sup>2</sup>), 구동전압(V), 발광효율(cd/A)을 측정하여 상기 [표 1]에 나타내었다.

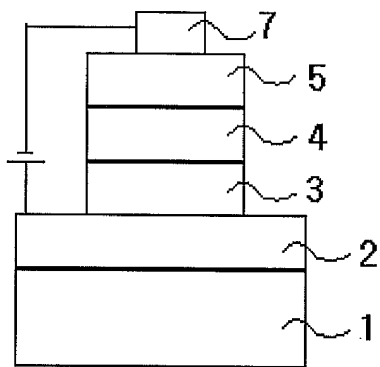
[0257] 상기 실시예 1 내지 27과 비교예 1 및 [표 1]의 결과로부터, 본 발명에 따른 화합물은 형광 발광재료로 쓰이는 [화합물 A]에 비해 구동전압 및 발광효율 등이 우수한 특성을 보이므로, 표시소자, 디스플레이 소자 및 조명 등에 유용하게 사용될 수 있음을 알 수 있다.

도면

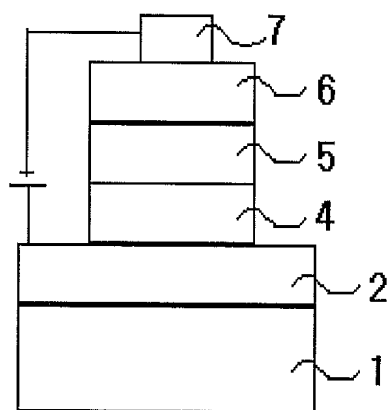
도면1



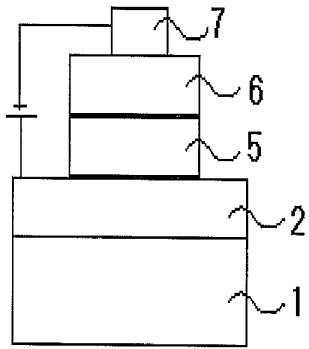
도면2



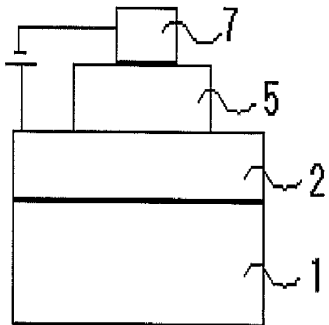
도면3



도면4



도면5



专利名称(译)	标题：有机发光化合物和含有它的有机电致发光器件		
公开(公告)号	<a href="#">KR101627693B1</a>	公开(公告)日	2016-06-07
申请号	KR1020140039916	申请日	2014-04-03
[标]申请(专利权)人(译)	株式会社P&H技术		
申请(专利权)人(译)	(注)皮恩扎HI TECH		
当前申请(专利权)人(译)	(注)皮恩扎HI TECH		
[标]发明人	HYUN SEO YONG 현서용 JUNG SUNG OUK 정성욱		
发明人	현서용 정성욱		
IPC分类号	C09K11/06 C07C13/62 H01L51/50		
CPC分类号	C09K11/06 Y02B20/181		
其他公开文献	KR1020150115229A		
外部链接	<a href="#">Espacenet</a>		

摘要(译)

本发明涉及用于有机电致发光器件的有机电致发光化合物，其特征在于由以下化学式1表示，并且当其用作发光层中的主体化合物时，发光性质如驱动电压，可以实现优异的有机电致发光器件。 [化学式1]

