



**(19) 대한민국특허청(KR)**  
**(12) 공개특허공보(A)**

(11) 공개번호 10-2012-0030941  
 (43) 공개일자 2012년03월29일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)  
*C09K 11/06* (2006.01) *H01L 51/50* (2006.01)  
 (21) 출원번호 10-2011-0092141  
 (22) 출원일자 2011년09월09일  
 심사청구일자 없음  
 (30) 우선권주장  
 1020100092223 2010년09월20일 대한민국(KR)

(71) 출원인  
**룸엔드하스전자재료코리아유한회사**  
 충남 천안시 백석동 736  
 (72) 발명자  
**안희춘**  
 서울특별시 노원구 상계8동 주공아파트 1002-407  
**이수현**  
 경기도 수원시 장안구 조원동 한일타운 104-501  
 (뒷면에 계속)  
 (74) 대리인  
**김중관, 권오식, 박창희**

전체 청구항 수 : 총 10 항

(54) 발명의 명칭 **신규한 유기 발광 화합물 및 이를 채용하고 있는 유기 전계 발광 소자**

**(57) 요약**

본 발명은 신규한 유기 발광 화합물 및 이를 포함하고 있는 유기 전계 발광 소자에 관한 것으로, 본 발명에 따른 유기 발광 화합물은 기존 재료에 비해 발광 효율이 좋고 재료의 수명특성이 뛰어나 소자의 구동수명이 매우 우수할 뿐만 아니라 전력효율의 상승을 유도하여 소비전력이 개선된 OLED 소자를 제조할 수 있는 장점이 있다.

(72) 발명자

**양수진**

경기도 남양주시 와부읍 덕소로 177, 102동 905호  
(백산아파트)

**신효남**

경기도 성남시 분당구 동판교로 275, 2단지 더이지  
더원 204-701 (삼평동, 봇들마을)

**문두현**

경기도 화성시 병점중앙로 204, 104동 101호 (진안  
동, 월드메르디앙)

**김영길**

경기도 수원시 장안구 율전동 284-25 304

**이효정**

경기도 화성시 석우동 예당마을 우미린테일풍경채  
아파트 117-1301

**조영준**

경기도 성남시 분당구 동판교로 275, 2단지 더이지  
더원 204-701 (삼평동, 봇들마을)

**권혁주**

서울특별시 강남구 삼성동 힐스테이트 105-2003

**이경주**

서울특별시 마포구 새창로8길 72, 210동 1001호 (도  
화동, 현대홈타운)

**김봉욱**

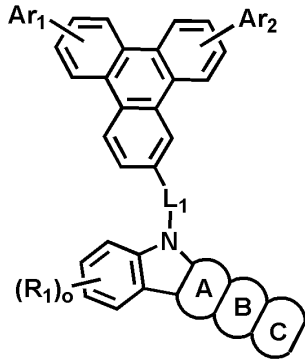
서울특별시 강남구 삼성동 힐스테이트아파트  
208-401

특허청구의 범위

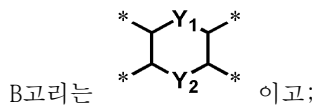
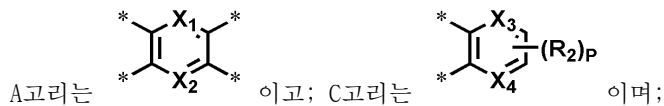
청구항 1

하기 화학식 1로 표시되는 유기 발광 화합물.

[화학식 1]



[상기 화학식 1에서,



X<sub>1</sub> 내지 X<sub>4</sub>는 서로 독립적으로 CR<sub>3</sub> 또는 N이고;

Y<sub>1</sub> 및 Y<sub>2</sub>는 서로 독립적으로 단일결합, -O-, -S-, -C(R<sub>11</sub>)(R<sub>12</sub>)-, -Si(R<sub>13</sub>)(R<sub>14</sub>)- 또는 -N(R<sub>15</sub>)-이고, 단 Y<sub>1</sub> 및 Y<sub>2</sub>가 동시에 단일결합인 경우는 제외하며;

R<sub>1</sub> 내지 R<sub>3</sub>는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된 (C2-C30)헤테로아릴, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬, 치환 또는 비치환된 5원 내지 7원의 헤테로시클로알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아르(C1-C30)알킬, (C3-C30)시클로알킬이 하나 이상 융합된 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된 방향족 고리가 하나 이상 융합된 5원 내지 7원의 헤테로시클로알킬, 치환 또는 비치환된 방향족 고리가 하나 이상 융합된 (C3-C30)시클로알킬, -NR<sub>16</sub>R<sub>17</sub>, -SiR<sub>18</sub>R<sub>19</sub>R<sub>20</sub>, -SR<sub>21</sub>, -OR<sub>22</sub>, 시아노, 나이트로 또는 하이드록시이거나, 인접한 치환체와 융합고리를 포함하거나 포함하지 않는 치환 또는 비치환된 (C3-C30)알킬렌 또는 치환 또는 비치환된 (C3-C30)알케닐렌으로 연결되어 방향족 고리 및 단일환 또는 다환의 방향족 고리를 형성할 수 있으며, 상기 형성된 방향족 고리 및 단일환 또는 다환의 방향족 고리의 탄소 원자는 질소, 산소 및 황으로부터 선택되는 하나 이상의 헤테로원자로 치환될 수 있으며;

R<sub>11</sub> 내지 R<sub>22</sub>는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된 (C2-C30)헤테로아릴, 치환 또는 비치환된 5원 내지 7원의 헤테로시클로알킬, 또는 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬이거나, 인접한 치환체와 융합고리를 포함하거나 포함하지 않는 치환 또는 비치환된 (C3-C30)알킬렌 또는 치환 또는 비치환된 (C3-C30)알케닐렌으로 연결되어 방향족 고리 및 단일환 또는 다환의 방향족 고리를 형성할 수 있으며, 상기 형성된 방향족 고리 및 단일환 또는 다환의 방향족 고리의 탄소 원자는 질소, 산소 및 황으로부터 선택되는 하나 이상의 헤테로원자로 치환될 수 있고;

L<sub>1</sub>은 단일결합, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴렌, 치환 또는 비치환된 (C2-C30)헤테로아릴렌, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬렌, -L<sub>2</sub>-L<sub>3</sub>- 또는 -L<sub>3</sub>-L<sub>2</sub>- 이고;

L<sub>2</sub>는 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴렌이고;

L<sub>3</sub>는 치환 또는 비치환된 (C2-C30)헤테로아릴렌이고;

Ar<sub>1</sub> 및 Ar<sub>2</sub>은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로겐, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (C2-C30)헤테로아릴이고;

o는 1 내지 4의 정수이고, o가 2 이상의 정수인 경우 각각의 R<sub>1</sub>은 서로 동일하거나 상이할 수 있고;

p는 1 내지 2의 정수이고, p가 2인 경우 각각의 R<sub>2</sub>는 서로 동일하거나 상이할 수 있으며;

상기 헤테로시클로알킬, 헤테로아릴렌 및 헤테로아릴은 B, N, O, S, P(=O), Si 및 P로부터 선택된 하나 이상의 헤테로원자를 포함한다.]

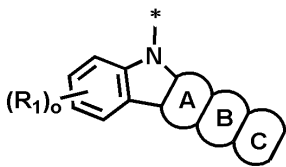
### 청구항 2

제 1항에 있어서,

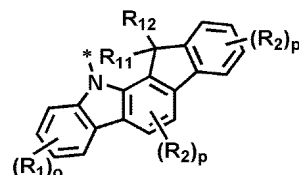
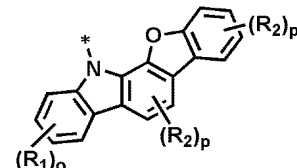
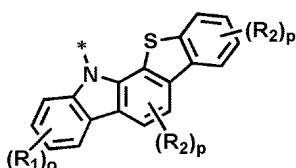
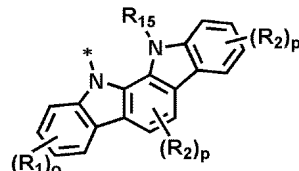
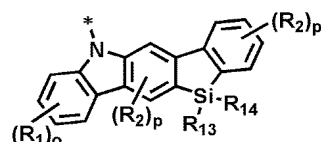
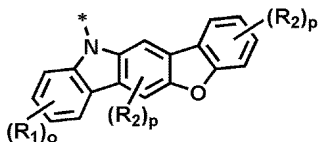
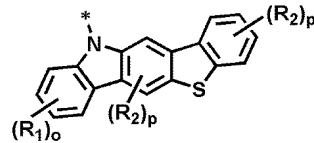
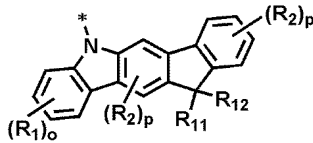
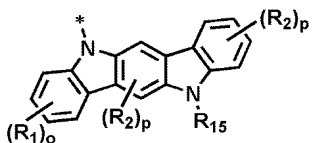
상기 R<sub>1</sub> 내지 R<sub>3</sub>, L<sub>1</sub>, L<sub>2</sub>, L<sub>3</sub>, Ar<sub>1</sub>, Ar<sub>2</sub> 및 R<sub>11</sub> 내지 R<sub>22</sub>에 더 치환되는 치환기는 서로 독립적으로 중수소, 할로겐, (C1-C30)알킬, 할로겐이 치환된 (C1-C30)알킬, (C6-C30)아릴, (C2-C30)헤테로아릴, (C6-C30)알킬이 치환된 (C2-C30)헤테로아릴, (C6-C30)아릴이 치환된 (C2-C30)헤테로아릴, (C3-C30)시클로알킬, 5원 내지 7원의 헤테로시클로알킬, 트리(C1-C30)알킬실릴, 트리(C6-C30)아릴실릴, 디(C1-C30)알킬(C6-C30)아릴실릴, (C1-C30)알킬디(C6-C30)아릴실릴, (C2-C30)알케닐, (C2-C30)알키닐, 시아노, N-카바졸릴, 디(C1-C30)알킬아미노, 디(C6-C30)아릴아미노, (C1-C30)알킬(C6-C30)아릴아미노, 디(C6-C30)아릴보로닐, 디(C1-C30)알킬보로닐, (C1-C30)알킬(C6-C30)아릴보로닐, (C6-C30)아르(C1-C30)알킬, (C1-C30)알킬(C6-C30)아릴, 카르복실, 니트로 및 히드록시인 것을 특징으로 하는 유기 발광 화합물.

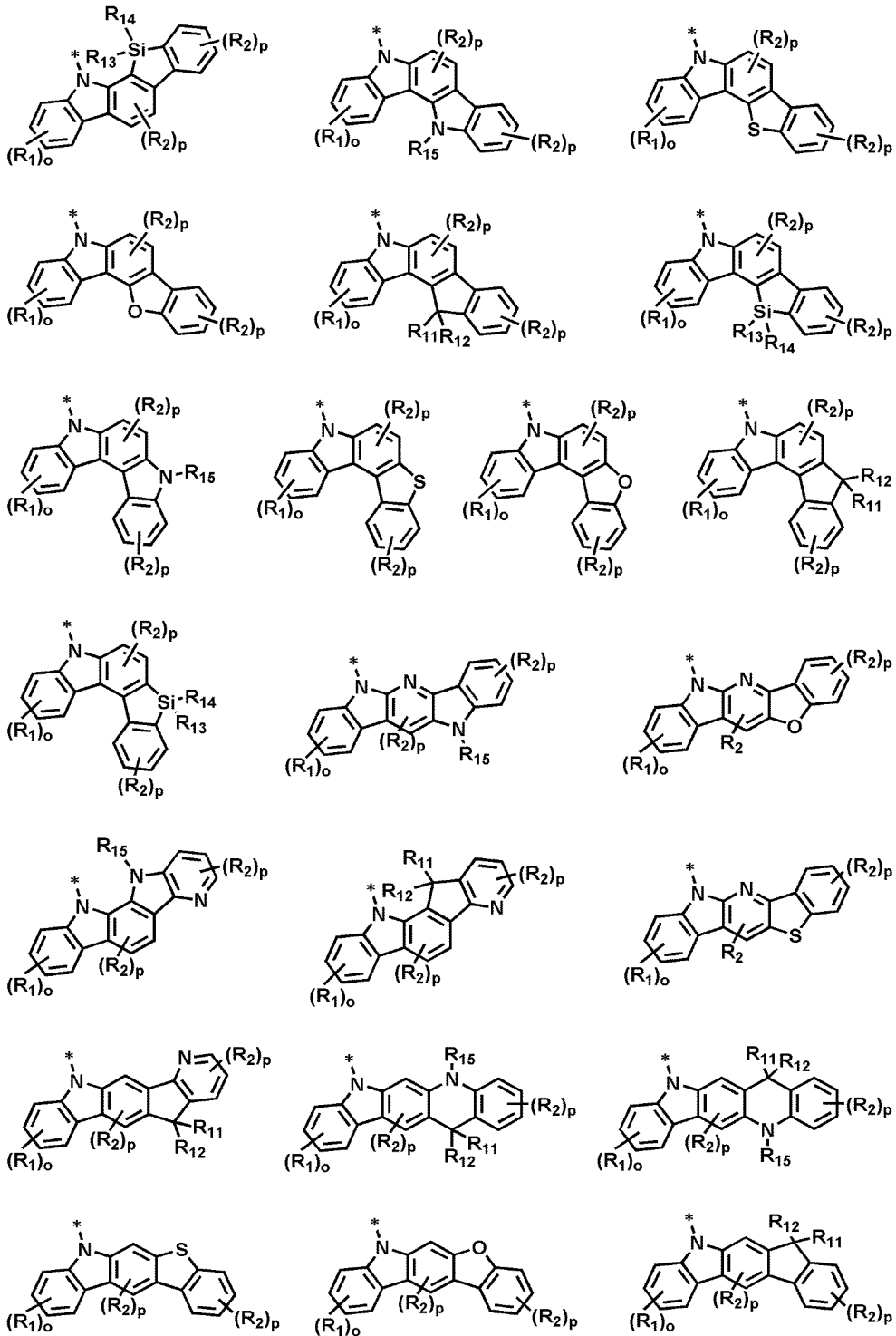
### 청구항 3

제 1항에 있어서,



상기 은 하기 구조에서 선택되는 것을 특징으로 하는 유기 발광 화합물.



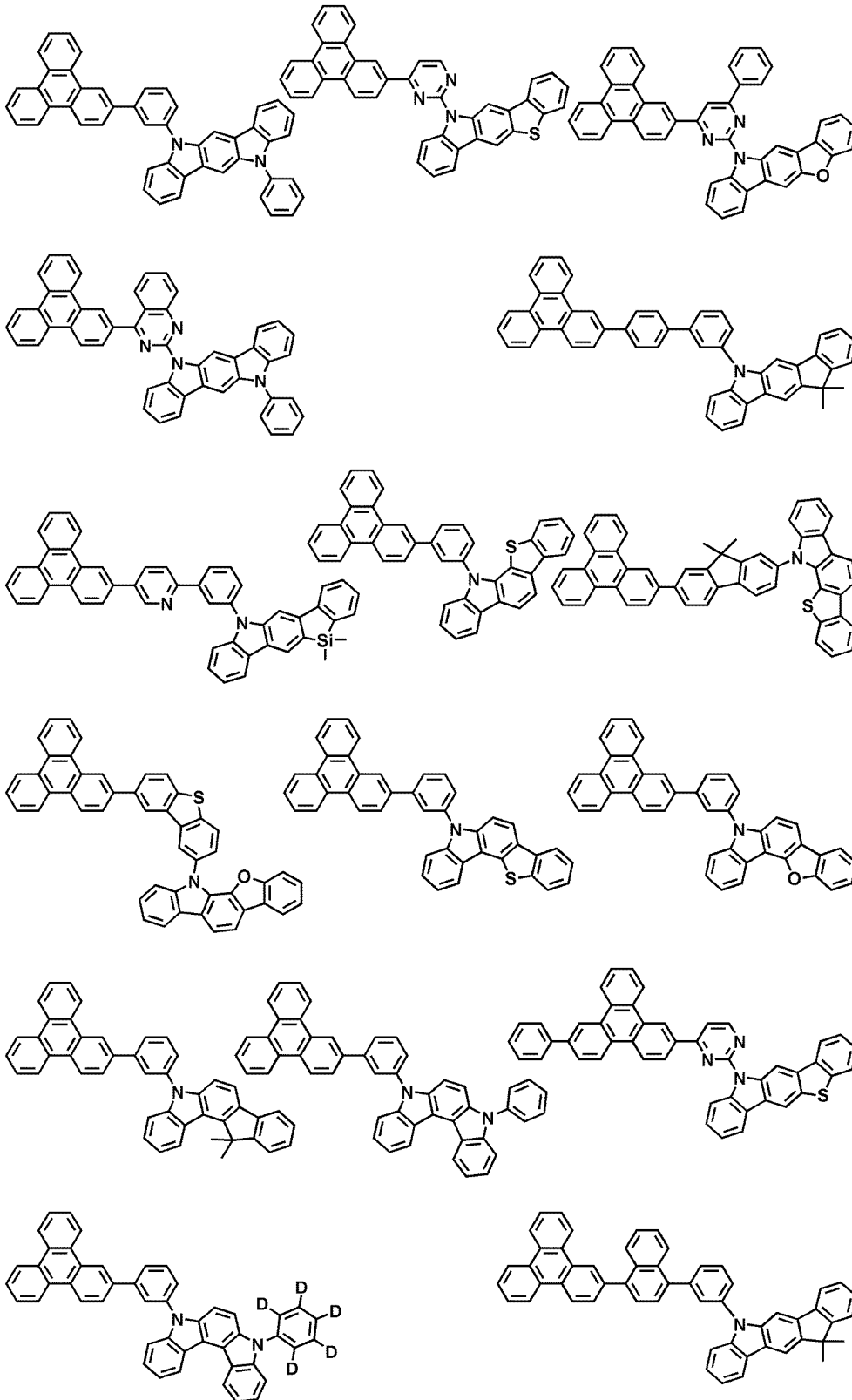


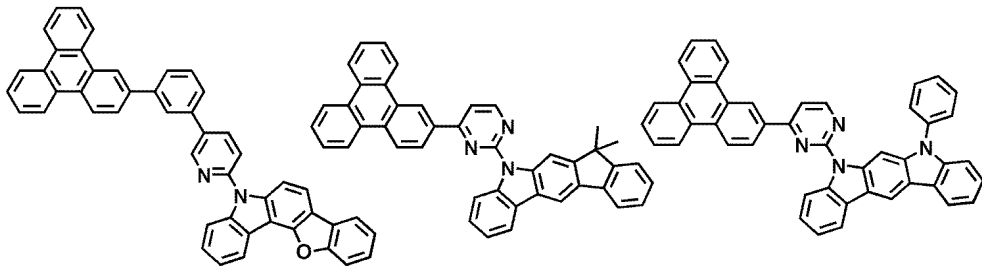
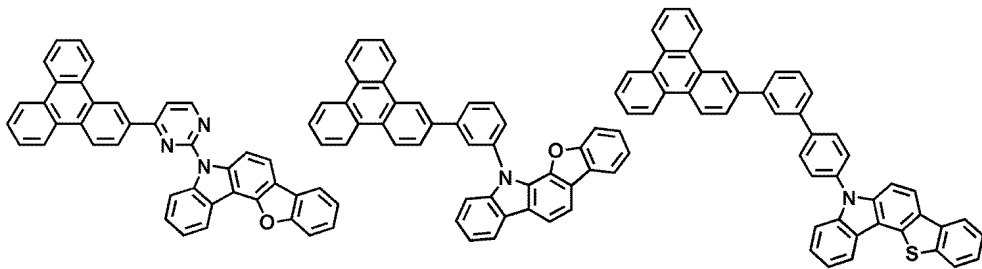
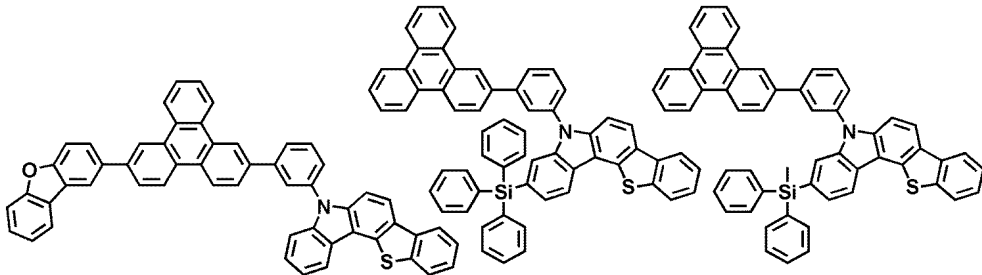
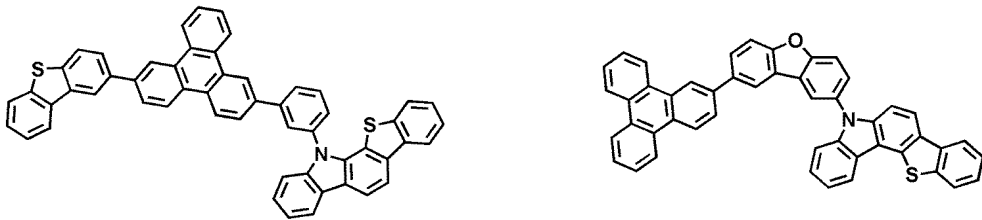
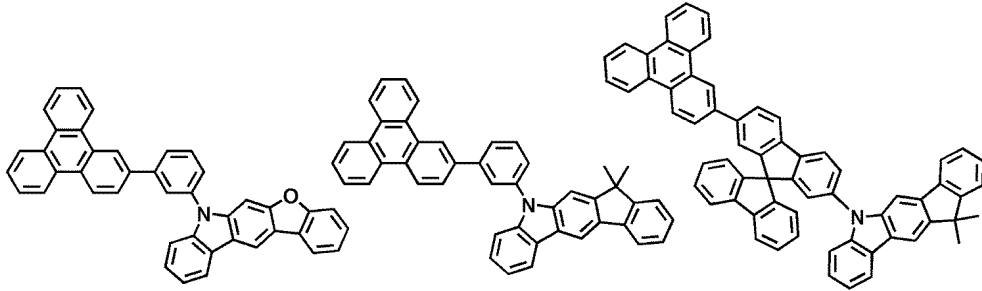
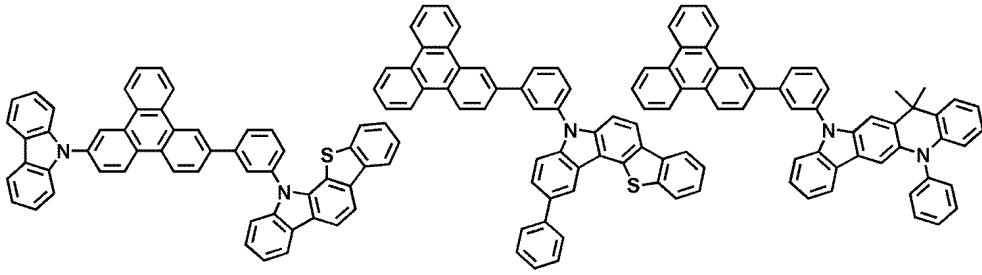
[상기 구조에서,  $R_1$ ,  $R_2$ ,  $R_{11}$  내지  $R_{15}$ , o 및 p는 청구항 제1항의 화학식 1에서의 정의와 동일하다.]

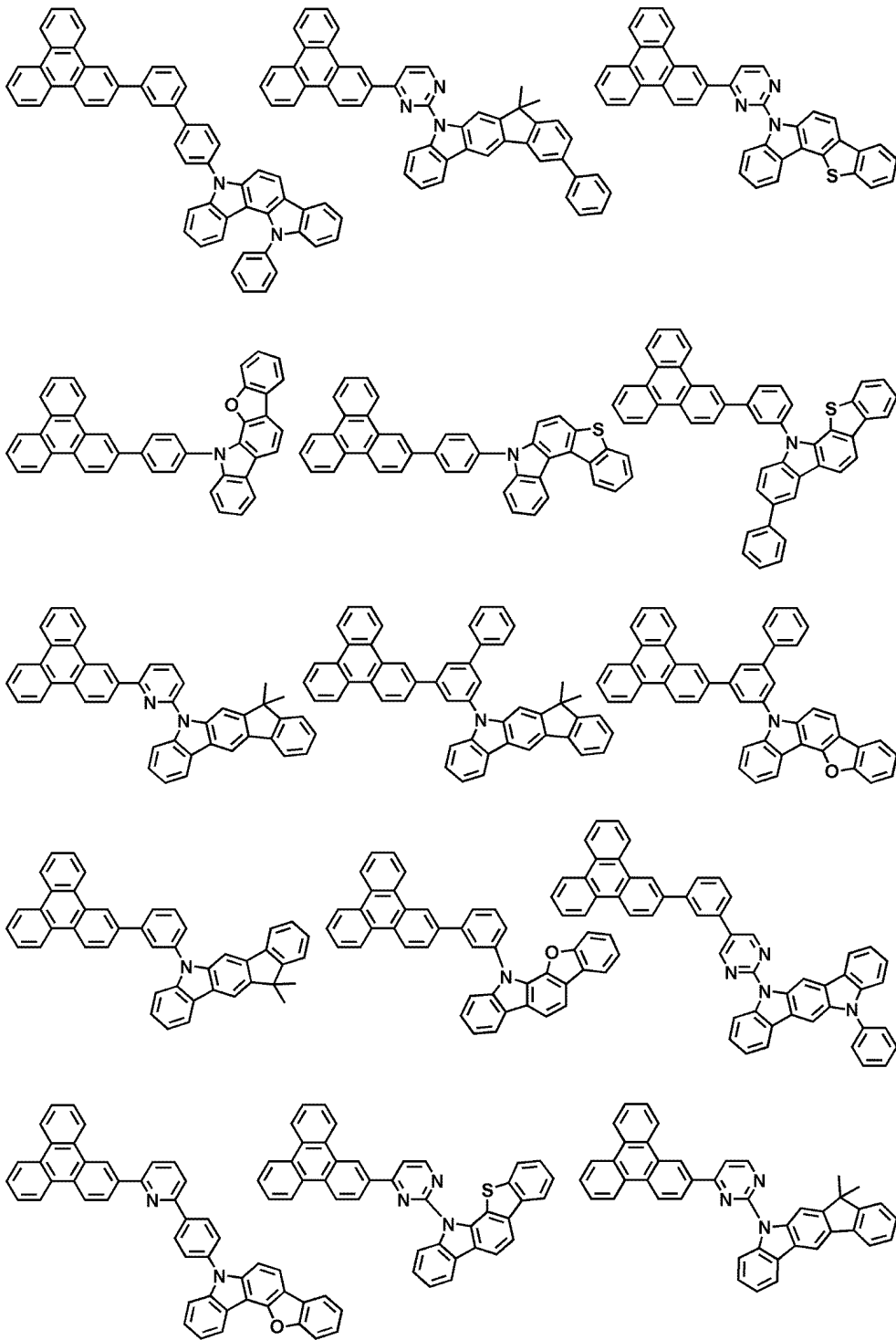
청구항 4

제 3항에 있어서,

하기 화합물로부터 선택되는 것을 특징으로 하는 유기 발광 화합물.







**청구항 5**

제 1항 내지 제 4항에서 선택되는 어느 한 항에 따른 유기 발광 화합물을 포함하는 것을 특징으로 하는 유기 전계 발광 소자.

**청구항 6**

제 5항에 있어서,

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

**청구항 7**

제 6항에 있어서,

상기 유기물층에 아릴아민계 화합물 또는 스티릴아릴아민계 화합물로 이루어진 군으로부터 선택된 하나 이상의 아민계 화합물을 더 포함하는 것을 특징으로 하는 유기 전계 발광 소자.

**청구항 8**

제 6항에 있어서,

상기 유기물층에 1족, 2족, 4주기, 5주기 전이금속, 란타게열금속 및 d-전이원소의 유기금속으로 이루어진 군으로부터 선택되는 하나 이상의 금속을 더 포함하는 것을 특징으로 하는 유기 전계 발광 소자.

**청구항 9**

제 6항에 있어서,

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

**청구항 10**

제 6항에 있어서,

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

**명세서**

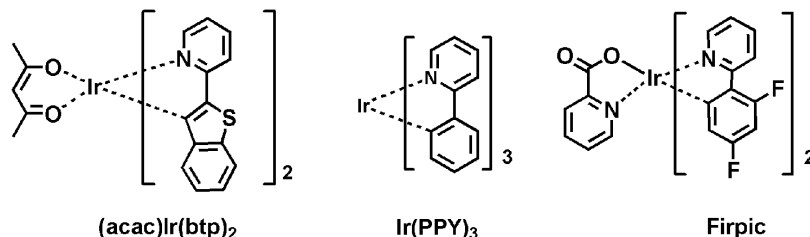
**기술분야**

[0001] 본 발명은 신규한 유기 발광 화합물 및 이를 포함하고 있는 유기 전계 발광 소자 에 관한 것이다.

**배경기술**

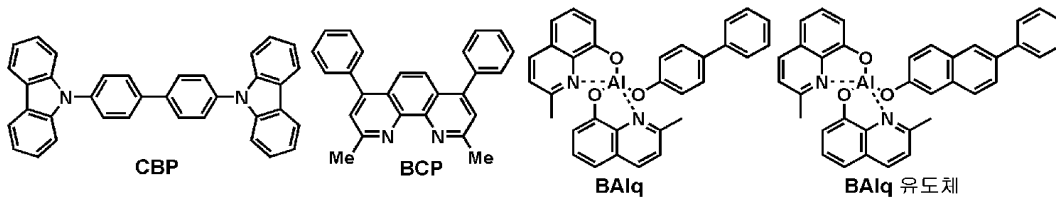
[0002] 표시 소자 중, 전기 발광 소자(electroluminescence device: EL device)는 자체 발광형 표시 소자로서 시야각 이 넓고 콘트라스트가 우수할 뿐만 아니라 응답속도가 빠르다는 장점을 가지고 있으며, 1987년 이스트만 코닥 (Eastman Kodak)사에서는 발광층 형성용 재료로서 저분자인 방향족 디아민과 알루미늄 착물을 이용하고 있는 유기 EL 소자를 처음으로 개발하였다[Appl. Phys. Lett. 51, 913, 1987].

[0003] OLED에서 발광 효율을 결정하는 가장 중요한 요인은 발광 재료이다. 발광 재료로는 현재까지 형광 재료가 널리 사용되고 있으나, 전기발광의 메커니즘 상 인광 재료의 개발은 이론적으로 4배까지 발광 효율을 개선시킬 수 있는 가장 좋은 방법 중 하나이다. 현재까지 이리듐(III)착물 계열이 인광 발광 재료로 널리 알려져 있으며, 각 RGB 별로 (acac)Ir(btp)<sub>2</sub>, Ir(ppy)<sub>3</sub> 및 Firpic 등의 재료가 알려져 있다. 특히, 최근 일본, 구미에서 많은 인 광 재료들이 연구되어지고 있다.



[0004]

[0005] 한편, 인광 발광체의 호스트 재료로는 현재까지 CBP가 가장 널리 알려져 있으며, BCP 및 BA1q 등의 정공차단층을 적용한 고효율의 OLED가 공지되어 있으며, 일본의 파이오니어 등에서는 BA1q 유도체를 호스트로 이용한 고성능의 OLED가 공지되어 있다.



[0006]

[0007]

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

[0008]

한편 한국특허공개공보 제KR2010-0056490호에는 트리페닐렌에 카바졸, 다이벤조퓨란, 다이벤조싸이오펜 등이 치환된 유기 전기 발광 소재용 화합물을 언급하고 있다. 상기 문헌에는 카바졸에 벤조싸이오펜, 인돌, 인덴, 벤조퓨란 등의 고리가 융합된 5환 구조의 헤테로아릴기가 트리페닐렌과 결합된 화합물을 개시하고 있지 않다.

### 선행기술문헌

#### 특허문헌

[0009]

(특허문헌 0001) 한국특허공개공보 제KR2010-0056490호 (2010.05.27)

#### 비특허문헌

[0010]

(비특허문헌 0001) Appl. Phys. Lett. 51, 913, 1987

### 발명의 내용

#### 해결하려는 과제

[0011]

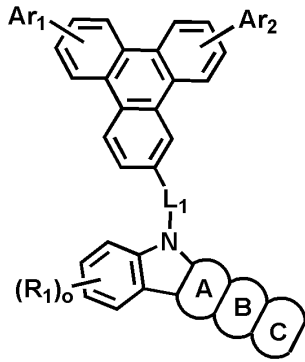
따라서 본 발명의 목적은 첫째로, 상기한 문제점들을 해결하기 위하여 기존의 재료보다 발광 효율 및 소자 수명이 좋으며, 적절한 색좌표를 갖는 우수한 골격의 유기 발광 화합물을 제공하는 것이며 둘째로, 상기 유기 발광 화합물을 발광 재료로서 채용하는 고효율 및 장수명의 유기 전기 발광 소자를 제공하는 것이다.

#### 과제의 해결 수단

[0012]

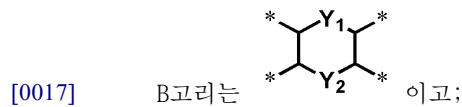
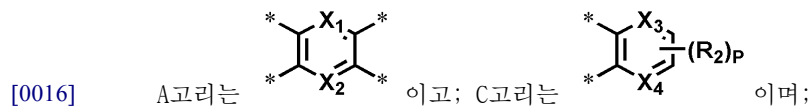
본 발명은 하기 화학식 1로 표시되는 유기 발광 화합물 및 이를 포함하는 유기 전기 발광 소자에 관한 것으로서, 본 발명에 따른 유기 발광 화합물은 기존 재료에 비해 발광 효율이 좋고 재료의 수명특성이 뛰어난 소자의 구동수명이 매우 우수할 뿐만 아니라 전력효율의 상승을 유도하여 소비전력이 개선된 OLED 소자를 제조할 수 있는 장점이 있다.

[0013] [화학식 1]



[0014]

[0015] [상기 화학식 1에서,



[0018] X<sub>1</sub> 내지 X<sub>4</sub>는 서로 독립적으로 CR<sub>3</sub> 또는 N이고;

[0019] Y<sub>1</sub> 및 Y<sub>2</sub>는 서로 독립적으로 단일결합, -O-, -S-, -C(R<sub>11</sub>)(R<sub>12</sub>)-, -Si(R<sub>13</sub>)(R<sub>14</sub>)- 또는 -N(R<sub>15</sub>)-이고, 단 Y<sub>1</sub> 및 Y<sub>2</sub>가 동시에 단일결합인 경우는 제외하며;

[0020] R<sub>1</sub> 내지 R<sub>3</sub>는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된 (C2-C30)헤테로아릴, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬, 치환 또는 비치환된 5원 내지 7원의 헤테로시클로알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아르(C1-C30)알킬, (C3-C30)시클로알킬이 하나 이상 융합된 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된 방향족 고리가 하나 이상 융합된 5원 내지 7원의 헤테로시클로알킬, 치환 또는 비치환된 방향족 고리가 하나 이상 융합된 (C3-C30)시클로알킬, -NR<sub>16</sub>R<sub>17</sub>, -SiR<sub>18</sub>R<sub>19</sub>R<sub>20</sub>, -SR<sub>21</sub>, -OR<sub>22</sub>, 시아노, 나이트로 또는 하이드록시이거나, 인접한 치환체와 융합고리를 포함하거나 포함하지 않는 치환 또는 비치환된 (C3-C30)알킬렌 또는 치환 또는 비치환된 (C3-C30)알케닐렌으로 연결되어 치환족 고리 및 단일환 또는 다환의 방향족 고리를 형성할 수 있으며, 상기 형성된 치환족 고리 및 단일환 또는 다환의 방향족 고리의 탄소 원자는 질소, 산소 및 황으로부터 선택되는 하나 이상의 헤테로원자로 치환될 수 있으며;

[0021] R<sub>11</sub> 내지 R<sub>22</sub>는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된 (C2-C30)헤테로아릴, 치환 또는 비치환된 5원 내지 7원의 헤테로시클로알킬, 또는 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬이거나, 인접한 치환체와 융합고리를 포함하거나 포함하지 않는 치환 또는 비치환된 (C3-C30)알킬렌 또는 치환 또는 비치환된 (C3-C30)알케닐렌으로 연결되어 치환족 고리 및 단일환 또는 다환의 방향족 고리를 형성할 수 있으며, 상기 형성된 치환족 고리 및 단일환 또는 다환의 방향족 고리의 탄소 원자는 질소, 산소 및 황으로부터 선택되는 하나 이상의 헤테로원자로 치환될 수 있고;

[0022] L<sub>1</sub>은 단일결합, 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴렌, 치환 또는 비치환된 (C2-C30)헤테로아릴렌, 치환 또는 비치환된 (C3-C30)시클로알킬렌, -L<sub>2</sub>-L<sub>3</sub>- 또는 -L<sub>3</sub>-L<sub>2</sub>- 이고;

[0023] L<sub>2</sub>는 치환 또는 비치환된 (C6-C30)아릴렌이고;

[0024] L<sub>3</sub>는 치환 또는 비치환된 (C2-C30)헤테로아릴렌이고;

[0025] Ar<sub>1</sub> 및 Ar<sub>2</sub>은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 치환 또는 비치환된 (C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된

(C6-C30)아릴, 또는 치환 또는 비치환된 (C2-C30)헤테로아릴이고;

[0026] o는 1 내지 4의 정수이고, o가 2 이상의 정수인 경우 각각의 R<sub>1</sub>은 서로 동일하거나 상이할 수 있고;

[0027] p는 1 내지 2의 정수이고, p가 2인 경우 각각의 R<sub>2</sub>는 서로 동일하거나 상이할 수 있으며;

[0028] 상기 헤테로시클로알킬, 헤테로아릴렌 및 헤테로아릴은 B, N, O, S, P(=O), Si 및 P로부터 선택된 하나 이상의 헤테로원자를 포함한다.]

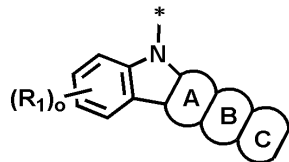
[0029] 본 발명에 기재된 「알킬」, 「알콕시」 및 그 외 「알킬」부분을 포함하는 치환체는 직쇄 또는 분쇄 형태를 모두 포함하고, 「시클로알킬」은 단일 고리계 뿐만 아니라 치환 또는 비치환된 아다만틸 또는 치환 또는 비치환된 (C7-C30)바이시클로알킬과 같은 여러 고리계 탄화수소도 포함한다. 본 발명에 기재된 「아릴」은 하나의 수소 제거에 의해서 방향족 탄화수소로부터 유도된 유기 라디칼로, 각 고리에 적절하게는 4 내지 7개, 바람직하게는 5 또는 6개의 고리원자를 포함하는 단일 또는 융합고리계를 포함하며, 다수개의 아릴이 단일결합으로 연결되어 있는 형태까지 포함한다. 구체적인 예로 페닐, 나프틸, 비페닐, 안트릴, 인데닐(indenyl), 플루오레닐, 페난트릴, 트리페닐레닐, 피렌일, 페릴렌일, 크라이세닐, 나프타세닐, 플루오란텐일 등을 포함하지만, 이에 한정되지 않는다. 상기 나프틸은 1-나프틸 및 2-나프틸을 포함하며, 안트릴은 1-안트릴, 2-안트릴 및 9-안트릴을 포함하며, 페난트릴은 1-페난트릴, 2-페난트릴, 3-페난트릴, 4-페난트릴, 9-페난트릴을 포함하며, 나프타세닐은 1-나프타세닐, 2-나프타세닐, 9-나프타세닐을 포함하며, 피렌일은 1-피렌일, 2-피렌일, 4-피렌일을 포함하며, 비페닐은 2-비페닐, 3-비페닐, 4-비페닐을 포함하며, 터페닐은 p-터페닐-4-일, p-터페닐-2-일, m-터페닐-4-일, m-터페닐-3-일, m-터페닐-2-일을 포함하며, 플루오레닐은 1-플루오레닐, 2-플루오레닐, 3-플루오레닐, 4-플루오레닐 및 9-플루오레닐을 모두 포함한다. 본 발명에 기재된 「헤테로아릴」은 방향족 고리 골격 원자로서 B, N, O, S, P(=O), Si 및 P로부터 선택되는 1 내지 4개의 헤테로원자를 포함하고, 나머지 방향족 고리 골격 원자가 탄소인 아릴 그룹을 의미하는 것으로, 5 내지 6원 단환 헤테로아릴, 및 하나 이상의 벤젠 환과 축합된 다환식 헤테로아릴이며, 부분적으로 포화될 수도 있다. 또한, 본 발명에서의 헤테로아릴은 하나 이상의 헤테로아릴이 단일결합으로 연결된 형태도 포함한다. 상기 헤테로아릴기는 고리내 헤테로원자가 산화되거나 사원화되어, 예를 들어 N-옥사이드 또는 4차 염을 형성하는 2가 아릴 그룹을 포함한다. 구체적인 예로 퓨릴, 티오펜일, 피롤릴, 이미다졸릴, 피라졸릴, 티아졸릴, 티아디아졸릴, 이소티아졸릴, 이속사졸릴, 옥사졸릴, 옥사디아졸릴, 트리아진일, 테트라진일, 트리아졸릴, 퓨라잔일, 피리디일, 피라진일, 피리미딘일, 피리다진일 등의 단환 헤테로아릴, 벤조퓨란일, 벤조티오펜일, 이소벤조퓨란일, 벤조이미다졸릴, 벤조티아졸릴, 벤조이소티아졸릴, 벤조이속사졸릴, 벤조옥사졸릴, 이소인돌릴, 인돌릴, 인다졸릴, 벤조티아디아졸릴, 퀴놀릴, 이소퀴놀릴, 신놀리닐, 쿠나졸리닐, 퀴녹살리닐, 카바졸릴, 아크리디닐, 페난트리딘일, 페난트롤리닐, 페녹사지닐, 페나지닐, 페노티아지닐, 벤조디옥솔릴, 다이벤조퓨란일, 다이벤조티오펜일 등의 다환식 헤테로아릴 및 이들의 상응하는 N-옥사이드(예를 들어, 피리디일 N-옥사이드, 퀴놀릴 N-옥사이드), 이들의 4차 염 등을 포함하지만, 이에 한정되지 않는다.

[0030] 상기 피롤릴은 1-피롤릴, 2-피롤릴, 3-피롤릴을 포함하며, 피리디일은 2-피리디일, 3-피리디일, 4-피리디일을 포함하며, 인돌릴은 1-인돌릴, 2-인돌릴, 3-인돌릴, 4-인돌릴, 5-인돌릴, 6-인돌릴, 7-인돌릴을 포함하며, 이소인돌릴은 1-이소인돌릴, 2-이소인돌릴, 3-이소인돌릴, 4-이소인돌릴, 5-이소인돌릴, 6-이소인돌릴, 7-이소인돌릴을 포함하며, 퓨릴은 2-퓨릴, 3-퓨릴을 포함하며, 벤조퓨란일은 2-벤조퓨란일, 3-벤조퓨란일, 4-벤조퓨란일, 5-벤조퓨란일, 6-벤조퓨란일, 7-벤조퓨란일을 포함하며, 이소벤조퓨란일은 1-이소벤조퓨란일, 3-이소벤조퓨란일, 4-이소벤조퓨란일, 5-이소벤조퓨란일, 6-이소벤조퓨란일을 포함하며, 퀴놀릴은 3-퀴놀릴, 4-퀴놀릴, 5-퀴놀릴, 6-퀴놀릴, 7-퀴놀릴, 8-퀴놀릴을 포함하며, 이소퀴놀릴은 1-이소퀴놀릴, 3-이소퀴놀릴, 4-이소퀴놀릴, 5-이소퀴놀릴, 6-이소퀴놀릴, 7-이소퀴놀릴, 8-이소퀴놀릴기를 포함하며, 퀴녹살리닐은 2-퀴녹살리닐, 5-퀴녹살리닐, 6-퀴녹살리닐을 포함하며, 카바졸릴은 1-카바졸릴, 2-카바졸릴, 3-카바졸릴, 4-카바졸릴, 9-카바졸릴을 포함하며, 페난트리딘일은 1-페난트리딘일, 2-페난트리딘일, 3-페난트리딘일, 4-페난트리딘일, 6-페난트리딘일, 7-페난트리딘일, 8-페난트리딘일, 9-페난트리딘일, 10-페난트리딘일을 포함하며, 아크리디닐은 1-아크리디닐, 2-아크리디닐, 3-아크리디닐, 4-아크리디닐, 9-아크리디닐을 포함하며, 페난트롤리닐은 1,7-페난트롤린-2-일, 1,7-페난트롤린-3-일, 1,7-페난트롤린-4-일, 1,7-페난트롤린-5-일, 1,7-페난트롤린-6-일, 1,7-페난트롤린-8-일, 1,7-페난트롤린-9-일, 1,7-페난트롤린-10-일, 1,8-페난트롤린-2-일, 1,8-페난트롤린-3-일, 1,8-페난트롤린-4-일, 1,8-페난트롤린-5-일, 1,8-페난트롤린-6-일, 1,8-페난트롤린-7-일, 1,8-페난트롤린-9-일, 1,8-페난트롤린-10-일, 1,9-페난트롤린-2-일, 1,9-페난트롤린-3-일, 1,9-페난트롤린-4-일, 1,9-페난트롤린-5-일,

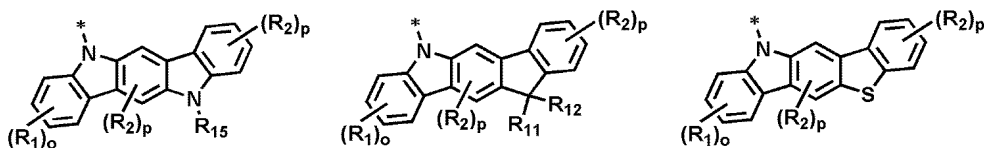
1,9-페난트롤린-6-일, 1,9-페난트롤린-7-일, 1,9-페난트롤린-8-일, 1,9-페난트롤린-10-일, 1,10-페난트롤린-2-일, 1,10-페난트롤린-3-일, 1,10-페난트롤린-4-일, 1,10-페난트롤린-5-일, 2,9-페난트롤린-1-일, 2,9-페난트롤린-3-일, 2,9-페난트롤린-4-일, 2,9-페난트롤린-5-일, 2,9-페난트롤린-6-일, 2,9-페난트롤린-7-일, 2,9-페난트롤린-8-일, 2,9-페난트롤린-10-일, 2,8-페난트롤린-1-일, 2,8-페난트롤린-3-일, 2,8-페난트롤린-4-일, 2,8-페난트롤린-5-일, 2,8-페난트롤린-6-일, 2,8-페난트롤린-7-일, 2,8-페난트롤린-9-일, 2,8-페난트롤린-10-일, 2,7-페난트롤린-1-일, 2,7-페난트롤린-3-일, 2,7-페난트롤린-4-일, 2,7-페난트롤린-5-일, 2,7-페난트롤린-6-일, 2,7-페난트롤린-8-일, 2,7-페난트롤린-9-일, 2,7-페난트롤린-10-일을 포함하며, 페나지닐은 1-페나지닐, 2-페나지닐을 포함하며, 페노티아지닐은 1-페노티아지닐, 2-페노티아지닐, 3-페노티아지닐, 4-페노티아지닐, 10-페노티아지닐을 포함하며, 페녹사지닐은 1-페녹사지닐, 2-페녹사지닐, 3-페녹사지닐, 4-페녹사지닐, 10-페녹사지닐을 포함하며, 옥사졸릴은 2-옥사졸릴, 4-옥사졸릴, 5-옥사졸릴을 포함하며, 옥사디아졸은 2-옥사디아졸릴, 5-옥사디아졸릴을 포함하며, 퓨라잔일은 3-퓨라잔일을 포함하며, 다이벤조퓨란일은 1-다이벤조퓨란일, 2-다이벤조퓨란일, 3-다이벤조퓨란일, 4-다이벤조퓨란일을 포함하며, 다이벤조티오페닐은 1-다이벤조티오페닐, 2-다이벤조티오페닐, 3-다이벤조티오페닐, 4-다이벤조티오페닐을 모두 포함한다.

[0031] 또한, 본 발명에 기재되어 있는 ‘(C1-C30)알킬’ 기는 바람직하게는 (C1-C20)알킬이고, 더 바람직하게는 (C1-C10)알킬이며, ‘(C6-C30)아릴’ 기는 바람직하게는 (C6-C20)아릴이다. ‘(C2-C30)헤테로아릴’ 기는 바람직하게는 (C2-C20)헤테로아릴이다. ‘(C3-C30)시클로알킬’ 기는 바람직하게는 (C3-C20)시클로알킬이고, 더 바람직하게는 (C3-C7)시클로알킬이다. ‘(C2-C30)알케닐 또는 알키닐’ 기는 바람직하게는 (C2-C20)알케닐 또는 알키닐이고, 더 바람직하게는 (C2-C10)알케닐 또는 알키닐이다.

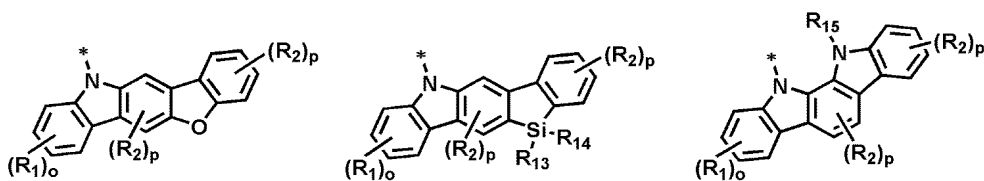
[0032] 또한 본 발명에 기재되어 있는 “치환 또는 비치환” 이라는 기재에서 ‘치환’ 은 비치환된 치환기에 더 치환되는 경우를 뜻하며, 상기 R<sub>1</sub> 내지 R<sub>3</sub>, L<sub>1</sub>, L<sub>2</sub>, L<sub>3</sub>, Ar<sub>1</sub>, Ar<sub>2</sub> 및 R<sub>11</sub> 내지 R<sub>22</sub>에 더 치환되는 치환기는 서로 독립적으로 중수소, 할로젠, (C1-C30)알킬, 할로젠이 치환된 (C1-C30)알킬, (C6-C30)아릴, (C2-C30)헤테로아릴, (C6-C30)알킬이 치환된 (C2-C30)헤테로아릴, (C6-C30)아릴이 치환된 (C2-C30)헤테로아릴, (C3-C30)시클로알킬, 5원 내지 7원의 헤테로시클로알킬, 트리(C1-C30)알킬실릴, 트리(C6-C30)아릴실릴, 디(C1-C30)알킬(C6-C30)아릴실릴, (C1-C30)알킬디(C6-C30)아릴실릴, (C2-C30)알케닐, (C2-C30)알키닐, 시아노, N-카바졸릴, 디(C1-C30)알킬아미노, 디(C6-C30)아릴아미노, (C1-C30)알킬(C6-C30)아릴아미노, 디(C6-C30)아릴보로닐, 디(C1-C30)알킬보로닐, (C1-C30)알킬(C6-C30)아릴보로닐, (C6-C30)아르(C1-C30)알킬, (C1-C30)알킬(C6-C30)아릴, 카르복실, 니트로 및 히드록시로 이루어진 군으로부터 선택되는 하나 이상인 것을 의미한다.



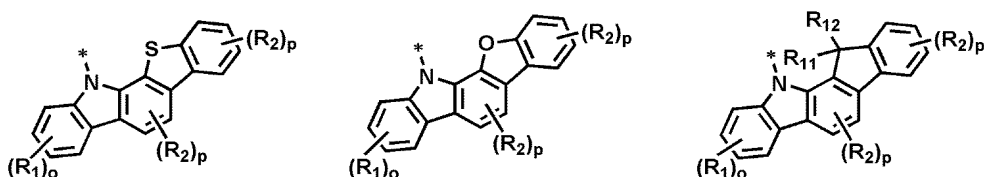
[0033] 또한 상기 화학식 1의 은 하기 구조에서 선택되나, 이에 한정되지는 않는다.



[0034]

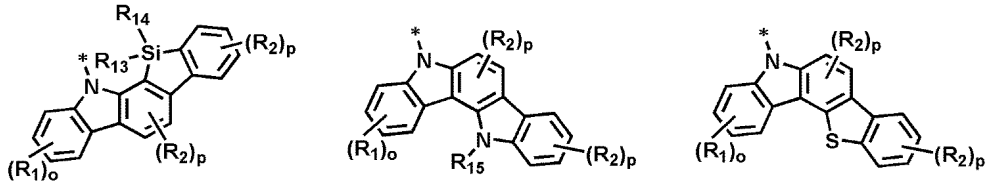


[0035]

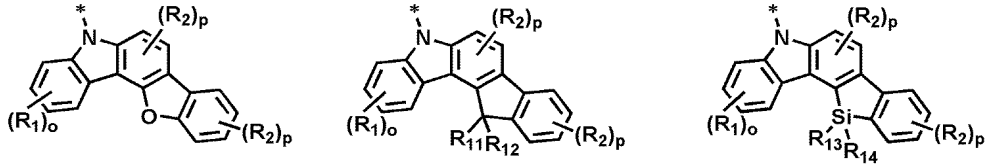


[0036]

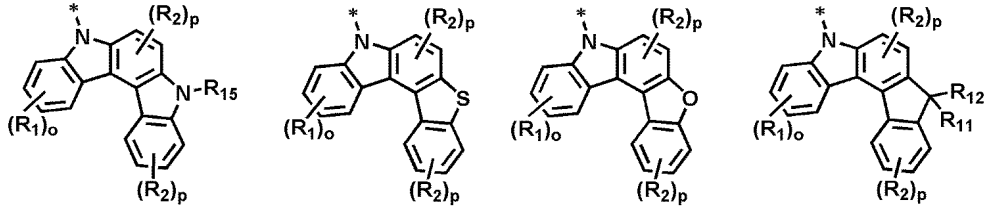
[0037]



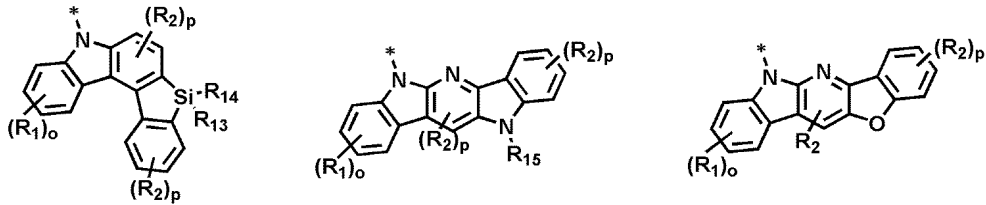
[0038]



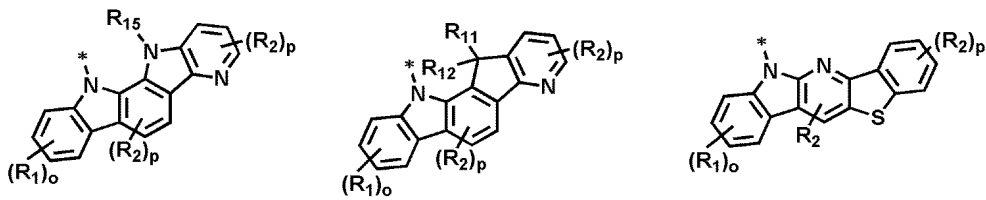
[0039]



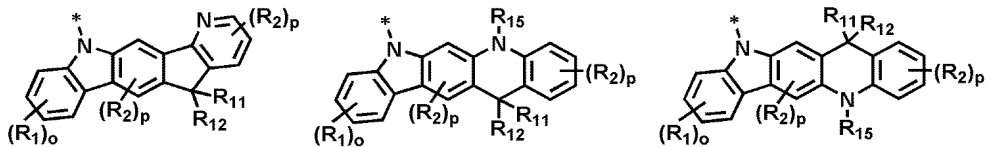
[0040]



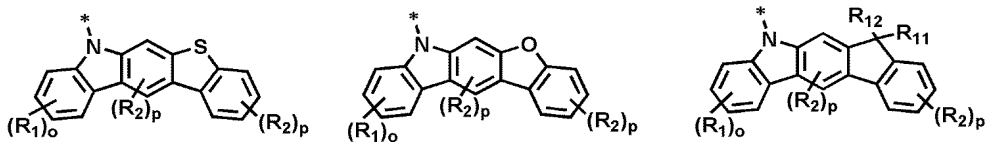
[0041]



[0042]



[0043]



[0044]

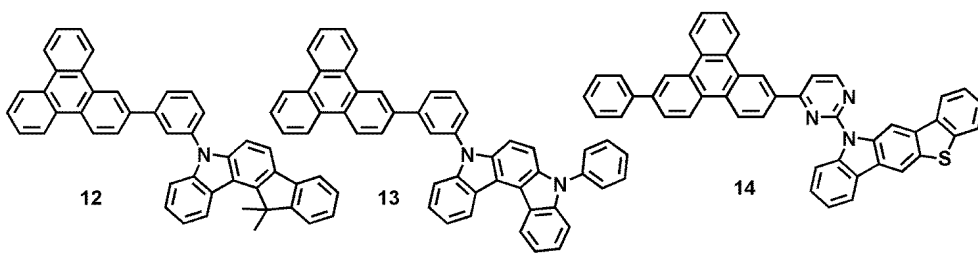
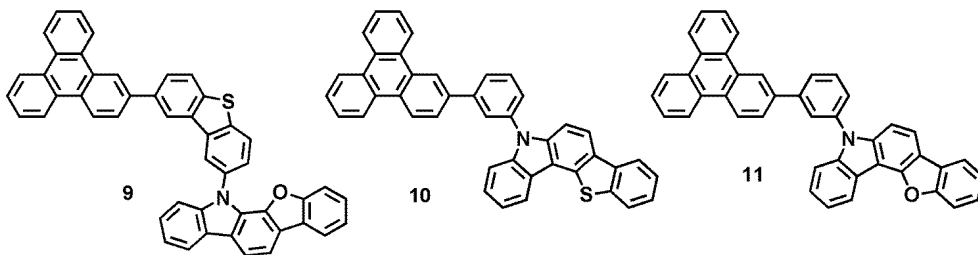
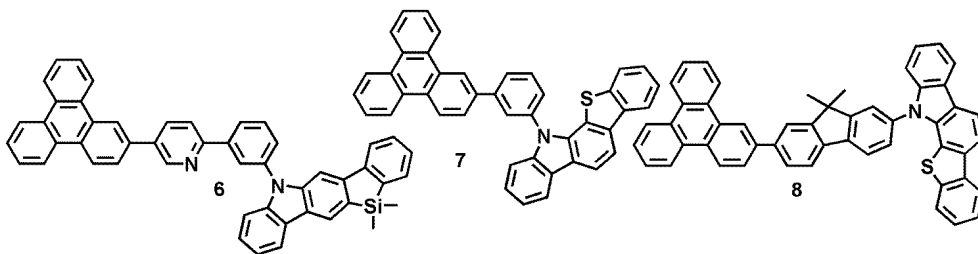
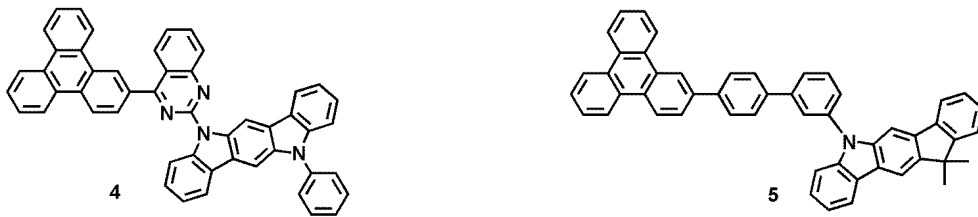
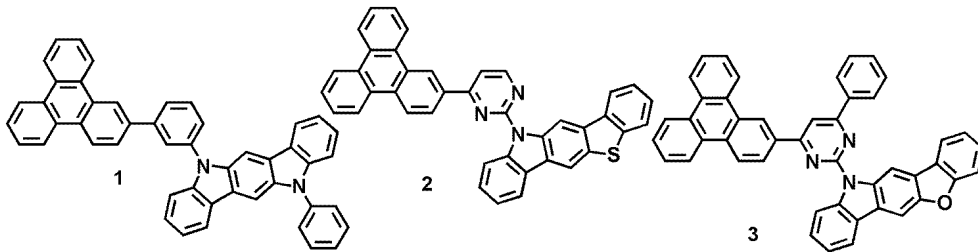
[상기 구조에서, R<sub>1</sub>, R<sub>2</sub>, R<sub>11</sub> 내지 R<sub>15</sub>, o 및 p는 상기 화학식 1에서의 정의와 동일하다.]

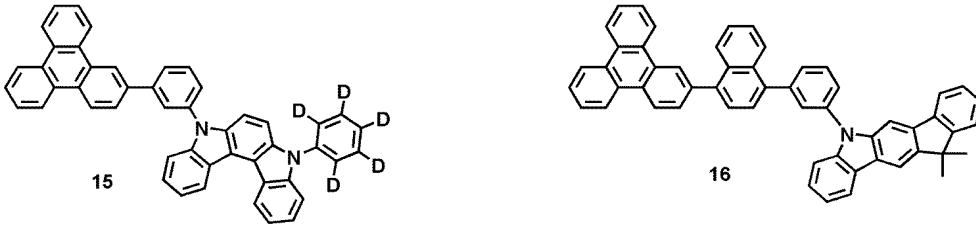
[0045]

더욱 구체적으로, 상기 X<sub>1</sub> 내지 X<sub>4</sub>는 N 또는 CR<sub>3</sub>이고; Y<sub>1</sub> 및 Y<sub>2</sub>는 각각 독립적으로 단일결합, -O-, -S-, -C(R<sub>11</sub>R<sub>12</sub>)- 또는 -N(R<sub>15</sub>)-, 단 Y<sub>1</sub> 및 Y<sub>2</sub>가 동시에 단일결합인 경우는 제외하며; L<sub>1</sub>은 단일결합, 페닐렌, 나프틸렌, 바이페닐렌, 9,9-다이페닐플루오레닐렌, 9,9-다이메틸플루오레닐렌, 다이벤조티오펜, 다이벤조퓨란 또는 스파이로플루오렌이고; Ar<sub>1</sub> 및 Ar<sub>2</sub>은 수소, 페닐, 바이페닐, 나프틸, 9,9-다이페닐플루오레닐, 9,9-다이메틸플루오레닐, 플루오란텐일, 피리딜, N-페닐카바졸일, 다이벤조티오펜 또는 다이벤조퓨란이고, 상기 Ar<sub>1</sub> 및 Ar<sub>2</sub>의 페닐, 바이페닐, 나프틸, 9,9-다이페닐플루오레닐, 9,9-다이메틸플루오레닐, 플루오란텐일, 피리딜, N-페닐카바졸일, 다이벤조티오펜 및 다이벤조퓨란은 중수소, 플루오로, 메틸, 에틸, 프로필, 부틸, 펜틸, 헥실, 헵틸,

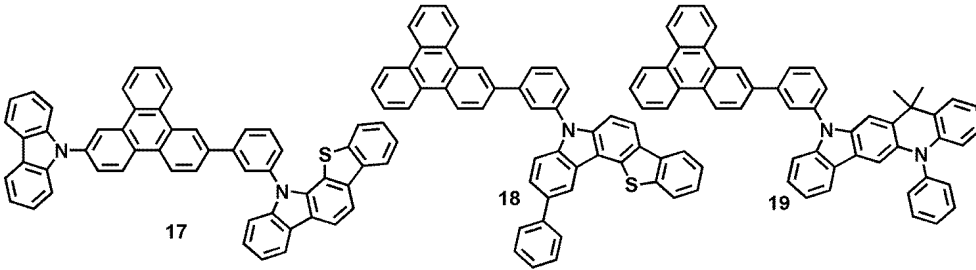
옥틸, 트리페닐실릴, 트리메틸실릴, 디페닐메틸실릴, 페닐 및 나프틸로 이루어진 군으로부터 선택되는 하나 이상의 치환체로 더 치환될 수 있고; R<sub>1</sub> 내지 R<sub>3</sub>는 서로 독립적으로 수소, 중수소, 페닐, 피리딜, 다이벤조퓨릴, 다이벤조티오펜, 트리페닐실릴 또는 디페닐메틸실릴이고; R<sub>11</sub> 내지 R<sub>22</sub>는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 메틸, 에틸, 프로필, 부틸, 펜틸, 헥실, 헵틸, 옥틸, 트리플루오로메틸, 페닐, 나프틸, 피리딜 또는 퀴놀릴이거나, 융합고리를 포함하거나 포함하지 않는 치환 또는 비치환된 (C3-C7)알킬렌 또는 치환 또는 비치환된 (C3-C7)알케닐렌으로 연결되어 융합고리를 형성할 수 있고, 상기 R<sub>11</sub> 내지 R<sub>22</sub>의 페닐은 중수소, 메틸, 에틸, 프로필, 부틸, 펜틸, 헥실, 헵틸, 옥틸, 트리플루오로메틸, 페닐 및 나프틸로 이루어진 군으로부터 선택되는 하나 이상의 치환체로 더 치환될 수 있다.

[0046] 본 발명에 따른 유기 발광 화합물은 보다 구체적으로 하기의 화합물로서 예시될 수 있으나, 하기 화합물이 본 발명을 한정하는 것은 아니다.

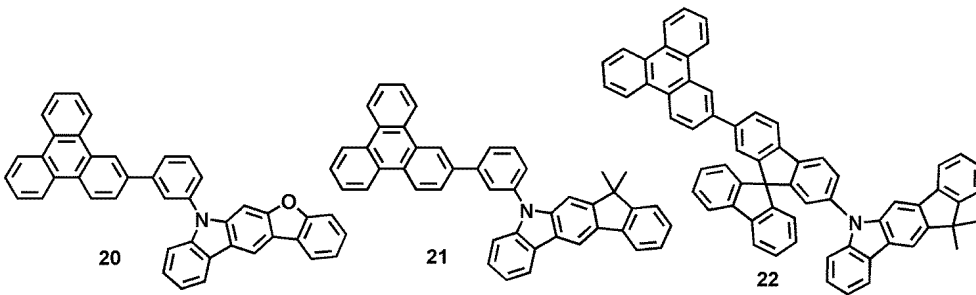




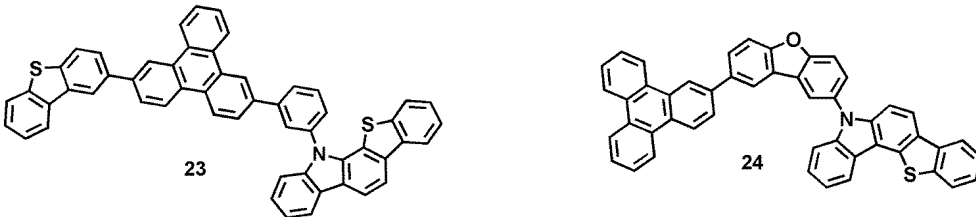
[0052]



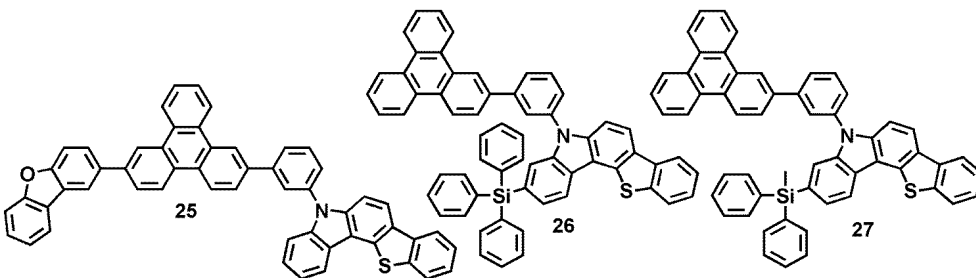
[0053]



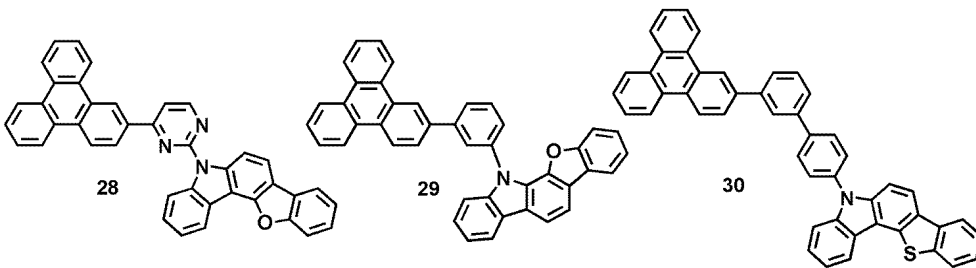
[0054]



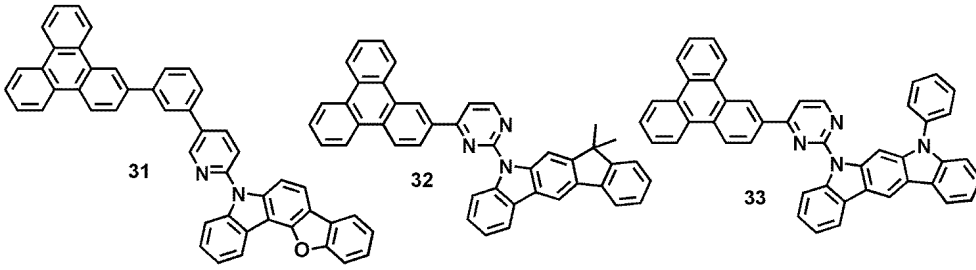
[0055]



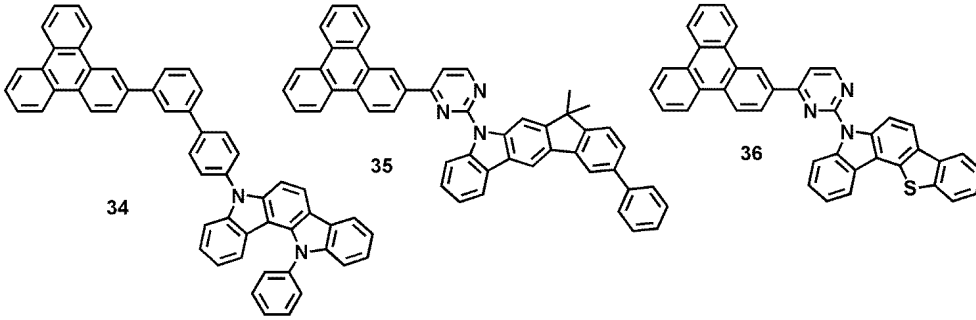
[0056]



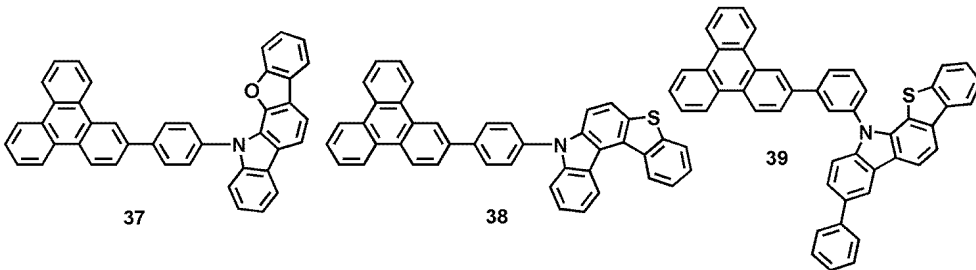
[0057]



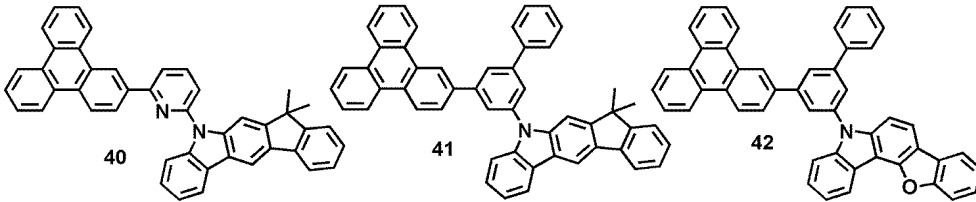
[0058]



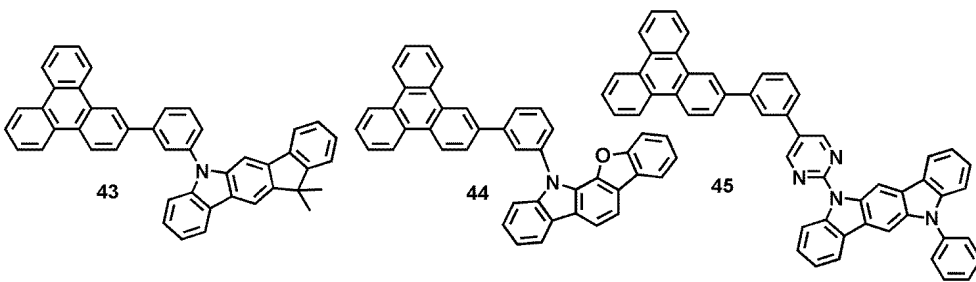
[0059]



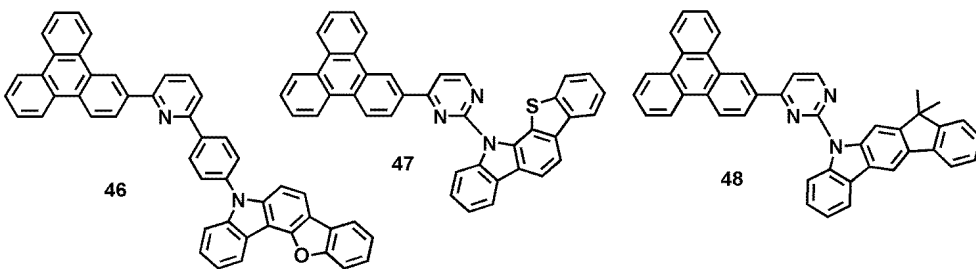
[0060]



[0061]



[0062]

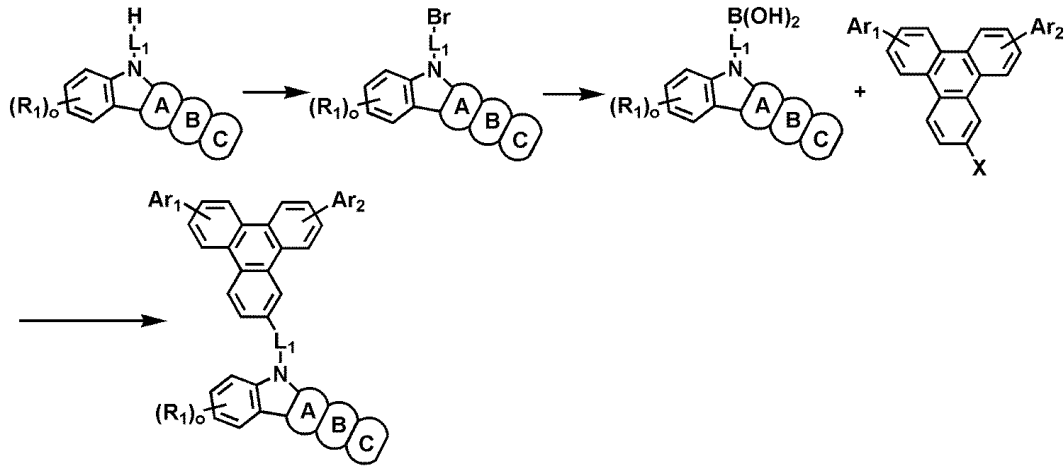


[0063]

[0064]

본 발명에 따른 유기 발광 화합물은 하기 반응식 1에 나타난 바와 같이, 제조될 수 있다.

[0065] [반응식 1]



[0066]

[0067] [상기 반응식 1에서 A고리, B고리, C고리, L<sub>1</sub>, Ar<sub>1</sub>, Ar<sub>2</sub>, R<sub>1</sub> 및 o는 상기 화학식 1에서의 정의와 동일하고; X는 할로겐이다.]

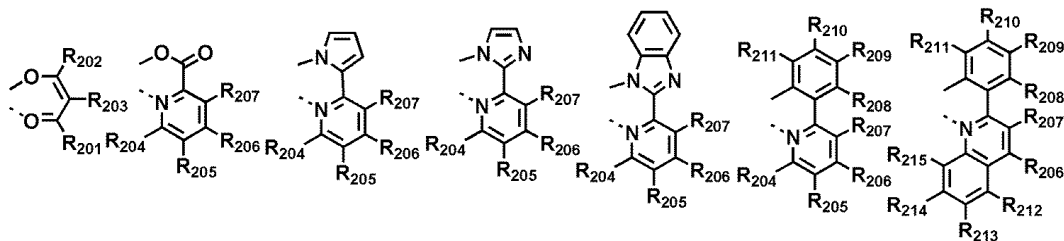
[0068] 또한, 본 발명은 유기 전계 발광 소자를 제공하며, 본 발명에 따른 유기 전계 발광 소자는 제1전극; 제2전극; 및 상기 제1전극 및 제2전극 사이에 개재되는 1층 이상의 유기물층으로 이루어진 유기 전계 발광 소자에 있어서, 상기 유기물층은 상기 화학식 1의 유기 발광 화합물을 하나 이상 포함한다. 상기 유기물층은 발광층을 포함하고, 상기 발광층에서 상기 화학식 1의 유기 발광 화합물은 호스트 물질로 사용할 수 있다. 또한 상기 화학식 1의 화합물에 다른 호스트 물질을 추가하여 사용할 수 있다.

[0069] 상기 발광층에서 상기 화학식 1의 유기발광화합물이 호스트로 사용되어질 때 하나 이상의 인광 도판트를 포함하는 것을 특징으로 한다. 본 발명의 유기 전계 발광 소자에 적용되는 인광 도판트는 특별히 제한되지는 않으나, 본 발명의 유기 전계 발광 소자에 적용되는 인광 도판트는 하기 화학식 2로 표시되는 화합물로부터 선택되는 것이 바람직하다.

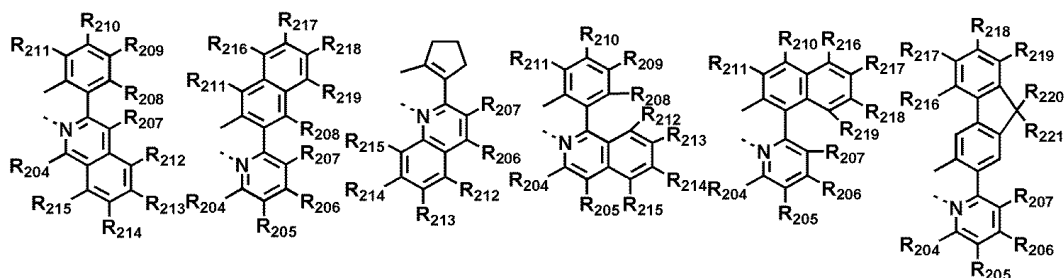
[0070] [화학식 2]



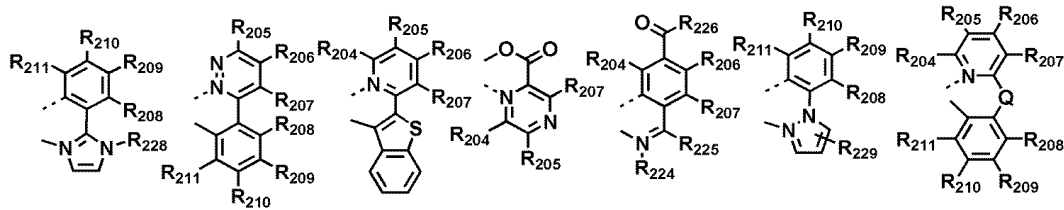
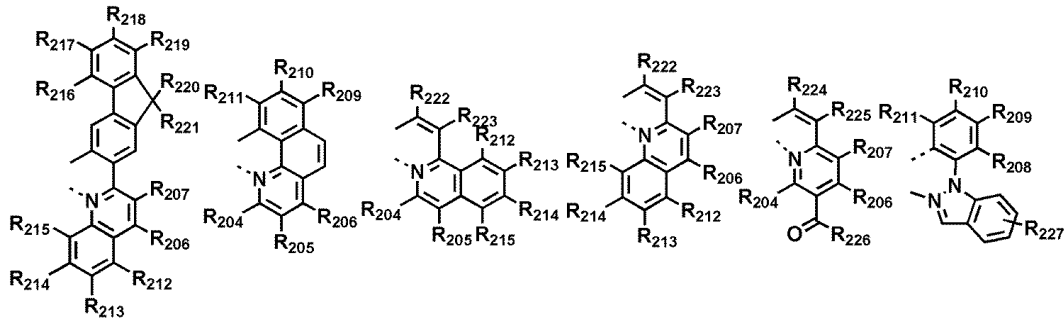
[0072] 여기서 M<sup>1</sup>은 7족, 8족, 9족, 10족, 11족, 13족, 14족, 15족 및 16족의 금속으로 이루어진 군으로부터 선택되고, 리간드 L<sup>101</sup>, L<sup>102</sup> 및 L<sup>103</sup>는 서로 독립적으로 하기 구조로부터 선택되어진다.



[0073]



[0074]



[0077] [상기 화학식 2에서,

[0078] R<sub>201</sub> 내지 R<sub>203</sub>은 서로 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠이 치환되거나 치환되지 않은 (C1-C30)알킬, (C1-C30)아릴 또는 할로젠이고;

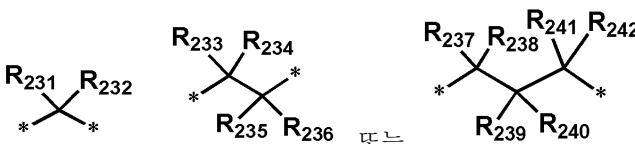
[0079] R<sub>204</sub> 내지 R<sub>219</sub>는 서로 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된(C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된(C1-C30)알콕시, 치환 또는 비치환된(C3-C30)시클로알킬, 치환 또는 비치환된(C2-C30)알케닐, 치환 또는 비치환된(C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된 모노 또는 치환 또는 비치환된 디-(C1-C30)알킬아미노, 치환 또는 비치환된 모노 또는 디-(C6-C30)아릴아미노, SF<sub>5</sub>, 치환 또는 비치환된 트리(C1-C30)알킬실릴, 치환 또는 비치환된 디(C1-C30)알킬(C6-C30)아릴실릴, 치환 또는 비치환된 트리(C6-C30)아릴실릴, 시아노 또는 할로젠이고;

[0080] R<sub>220</sub> 내지 R<sub>223</sub>는 서로 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠이 치환되거나 치환되지 않은 (C1-C30)알킬 또는 (C1-C30)알킬이 치환되거나 치환되지 않은 (C6-C30)아릴이고;

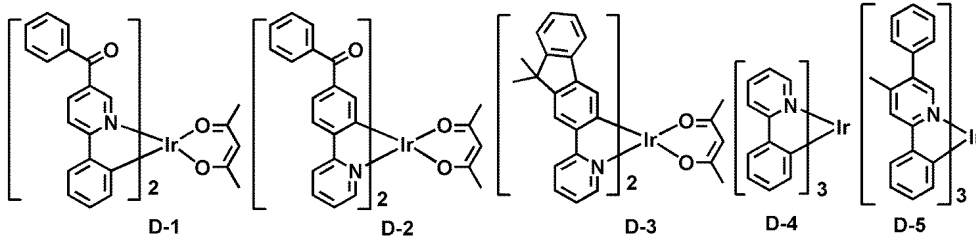
[0081] R<sub>224</sub> 및 R<sub>225</sub>는 서서로 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된(C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된(C6-C30)아릴 또는 할로젠이거나, R<sub>224</sub>와 R<sub>225</sub>는 융합고리를 포함하거나 포함하지 않는 (C3-C12)알킬렌 또는 (C3-C12)알케닐렌으로 연결되어 지환족 고리 및 단일환 또는 다환의 방향족 고리를 형성하며;

[0082] R<sub>226</sub>은 치환 또는 비치환된(C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된(C6-C30)아릴, 치환 또는 비치환된(C5-C30)헤테로아릴 또는 할로젠이고;

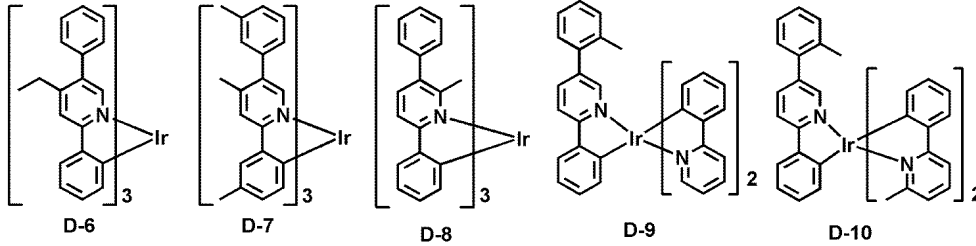
[0083] R<sub>227</sub> 내지 R<sub>229</sub>은 서로 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된(C1-C30)알킬, 치환 또는 비치환된(C6-C30)아릴 또는 할로젠이고;

[0084] Q는  이며, R<sub>231</sub> 내지 R<sub>242</sub>는 서로 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠이 치환되거나 치환되지 않은 (C1-C30)알킬, (C1-C30)알콕시, 할로젠, 치환 또는 비치환된(C6-C30)아릴, 시아노, 치환 또는 비치환된(C5-C30)시클로알킬이거나, 인접한 치환체와 알킬렌 또는 알케닐렌으로 연결되어 스피로 고리 또는 융합고리를 형성할 수 있거나, R<sub>207</sub> 또는 R<sub>208</sub>과 알킬렌 또는 알케닐렌으로 연결되어 포화 또는 불포화의 융합고리를 형성할 수 있다.]

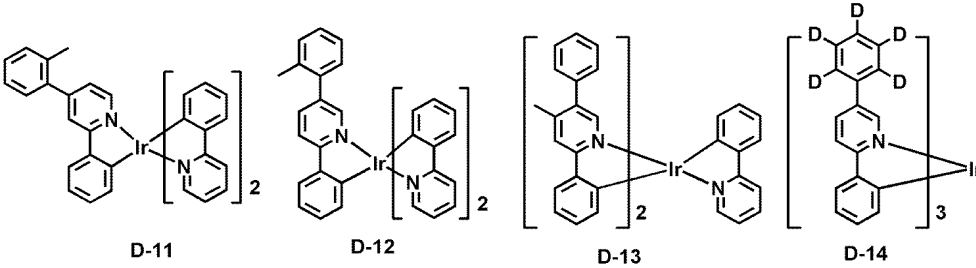
[0085] 상기 화학식 2의 도판트 화합물은 하기 구조의 화합물로 예시될 수 있으나 이에 한정하는 것은 아니다.



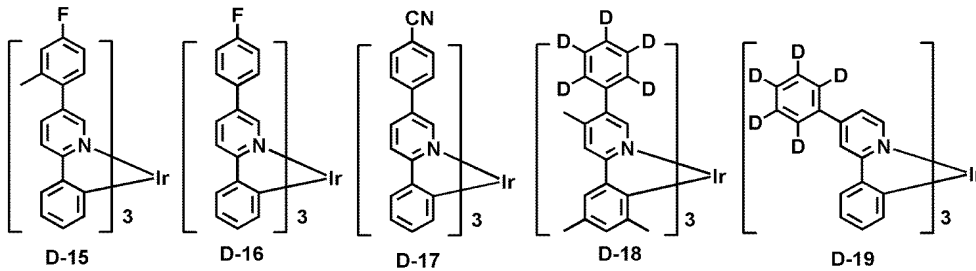
[0086]



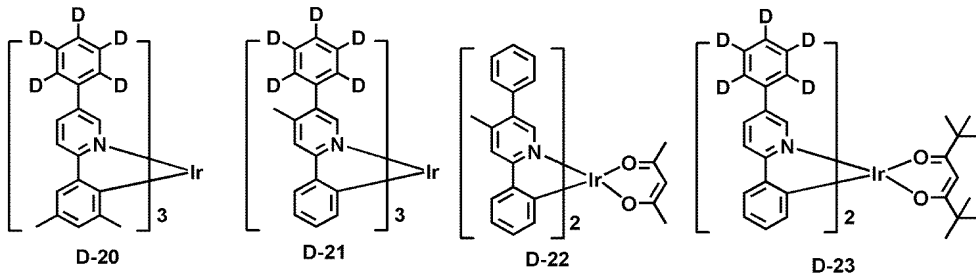
[0087]



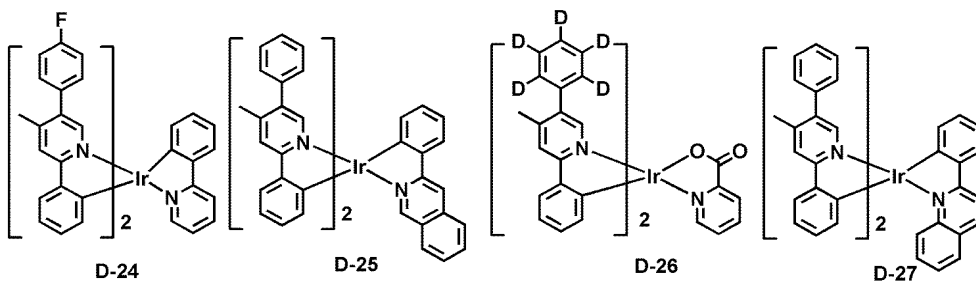
[0088]



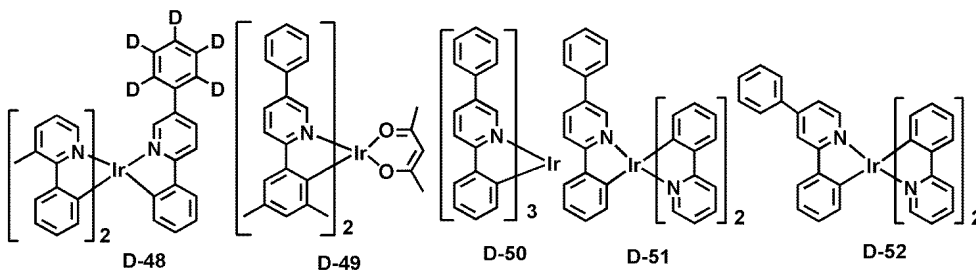
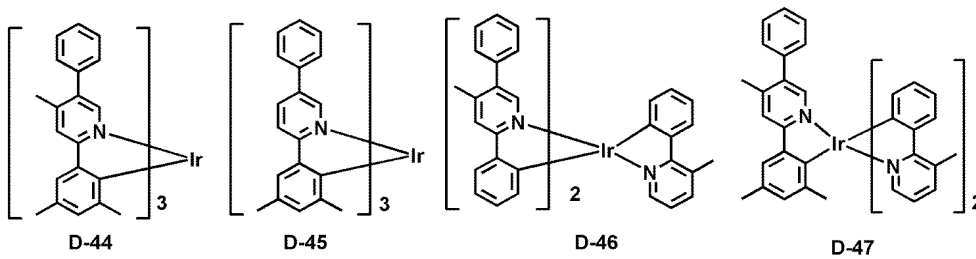
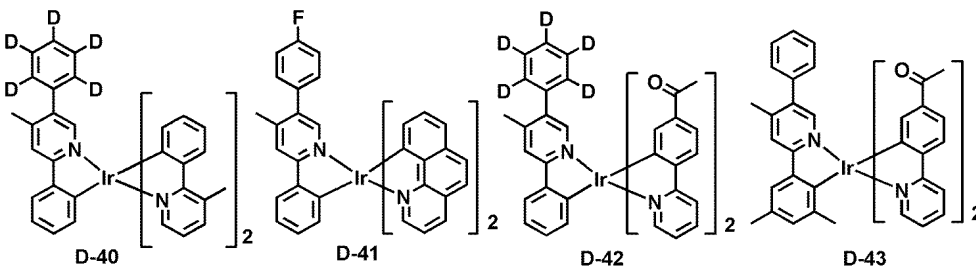
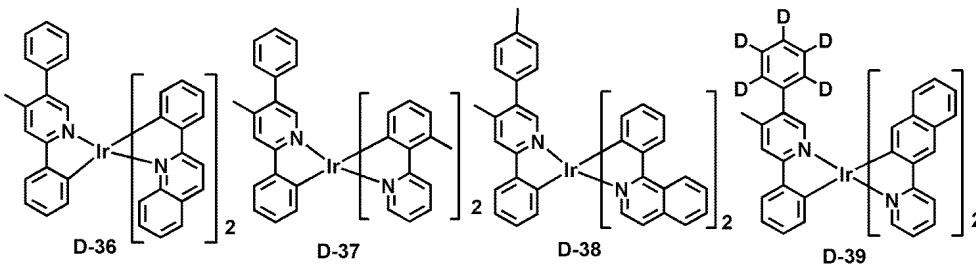
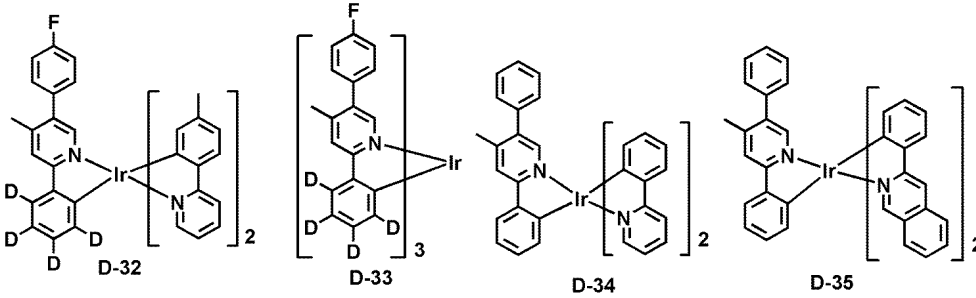
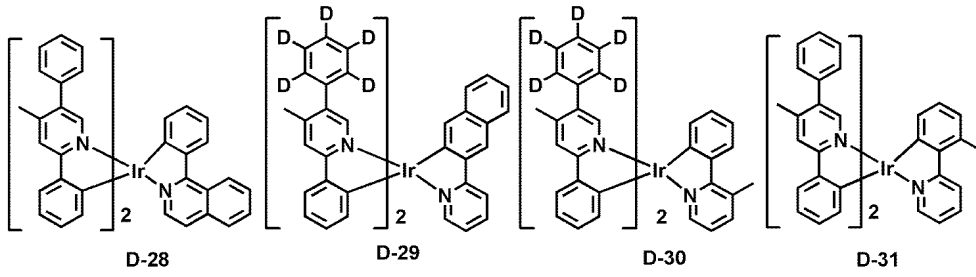
[0089]

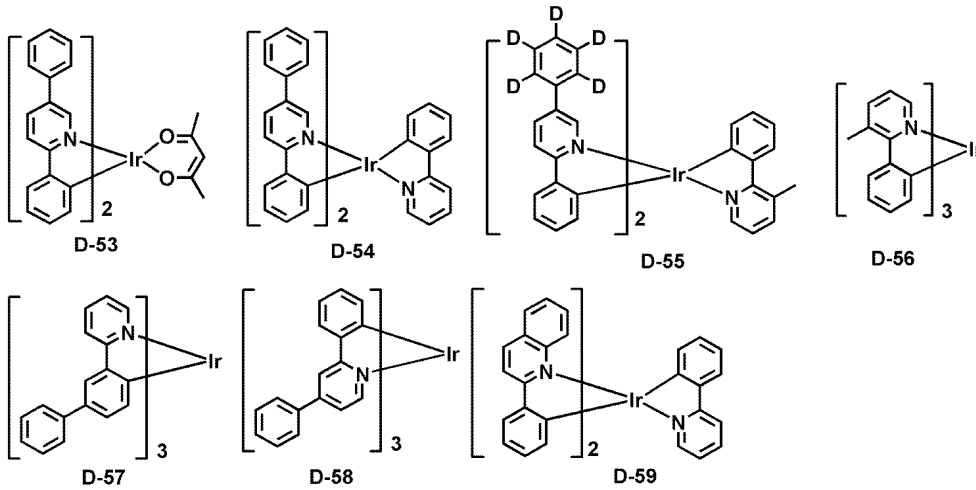


[0090]



[0091]





[0098]

[0099]

본 발명의 유기 전계 발광 소자에 있어서, 화학식 1의 유기 발광 화합물을 포함하고, 동시에 아릴아민계 화합물 또는 스티릴아릴아민계 화합물로 이루어진 군으로부터 선택된 하나 이상의 화합물을 포함할 수 있다. 상기 아릴아민계 화합물 또는 스티릴아릴아민계 화합물은 출원번호 제10-2008-0123276호, 제10-2008-0107606호 또는 제10-2008-0118428호에 예시되어 있으나, 이에 한정되지는 않는다.

[0100]

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

[0101]

또한, 상기 유기물층에 상기 유기 발광 화합물 이외에 청색, 적색 또는 녹색 발광 화합물을 포함하는 유기발광층 하나 이상을 동시에 포함하여 백색 발광을 하는 유기 전계 발광 소자를 형성할 수 있다. 상기 청색 또는 적색 발광을 하는 화합물은 출원번호 제10-2008-0123276호, 제10-2008-0107606호 또는 제10-2008-0118428호에 예시되어 있으나, 이에 한정되지는 않는다.

[0102]

본 발명의 유기 전계 발광 소자에 있어서, 한 쌍의 전극의 적어도 한쪽의 내측표면에, 칼코제나이드(chalcogenide)층, 할로겐화 금속층 및 금속 산화물층으로부터 선택되는 일층(이하, 이들을 "표면층"이라고 지칭함) 이상을 배치하는 것이 바람직하다. 구체적으로는, 발광 매체층 측의 양극 표면에 규소 및 알루미늄의 금속의 칼코제나이드(산화물을 포함한다)층을, 또한 발광매체층 측의 음극 표면에 할로겐화 금속층 또는 금속 산화물층을 배치하는 것이 바람직하다. 이것에 의해, 구동의 안정화를 얻을 수 있다. 상기 칼코제나이드로서는 예컨대  $SiO_x (1 \leq x \leq 2)$ ,  $AlO_x (1 \leq x \leq 1.5)$ ,  $SiON$ ,  $SiAlON$  등을 바람직하게 들 수 있으며, 할로겐화 금속으로서는 예컨대  $LiF$ ,  $MgF_2$ ,  $CaF_2$ , 불화 희토류 금속 등을 바람직하게 들 수 있으며, 금속 산화물로서는 예컨대  $Cs_2O$ ,  $Li_2O$ ,  $MgO$ ,  $SrO$ ,  $BaO$ ,  $CaO$  등을 바람직하게 들 수 있다.

[0103]

또한, 본 발명의 유기 전계 발광 소자에 있어서, 이렇게 제작된 한 쌍의 전극의 적어도 한쪽의 표면에 전자 전달 화합물과 환원성 도판트의 혼합 영역 또는 정공 전달 화합물과 산화성 도판트의 혼합 영역을 배치하는 것도 바람직하다. 이러한 방식으로, 전자 전달 화합물이 음이온으로 환원되므로 혼합 영역으로부터 발광 매체에 전자를 주입 및 전달하기 용이해진다. 또한, 정공 전달 화합물은 산화되어 양이온으로 되므로 혼합 영역으로부터 발광 매체에 정공을 주입 및 전달하기 용이해진다. 바람직한 산화성 도판트로서는 각종 루이스산 및 억셉터(acceptor) 화합물을 들 수 있다. 바람직한 환원성 도판트로서는 알칼리 금속, 알칼리 금속 화합물, 알칼리 토류 금속, 희토류 금속 및 이들의 혼합물을 들 수 있다. 또한 환원성 도판트층을 전하생성층으로 사용하여 두 개 이상의 발광층을 가진 백색 유기 전계 발광소자를 제작할 수도 있다.

**발명의 효과**

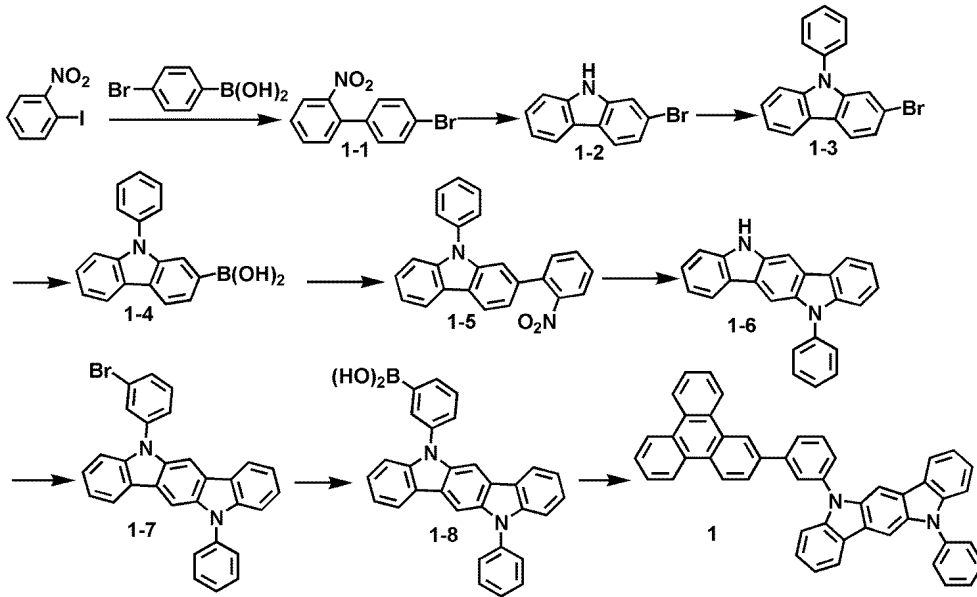
[0104]

본 발명에 따른 유기 발광 화합물은 발광 효율이 좋고 재료의 수명특성이 뛰어나 소자의 구동수명이 매우 우수한 OLED 소자를 제조할 수 있는 장점이 있다.

**발명을 실시하기 위한 구체적인 내용**

[0105] 이하에서, 본 발명의 상세한 이해를 위하여 본 발명의 대표 화합물을 들어 본 발명에 따른 유기 발광 화합물, 이의 제조방법 및 소자의 발광특성을 설명하나, 이는 단지 그 실시 양태를 예시하기 위한 것일 뿐, 본 발명의 범위를 한정하는 것은 아니다.

[0106] [제조예 1] 화합물 1의 제조



[0107]

[0108] 화합물 1-1의 제조

[0109] 2-아이오도벤젠 30g(120.4mmol), 4-브로모페닐보론산 26g(132.5mmol), Pd(PPh<sub>3</sub>)<sub>4</sub> 6.9g(6.02mmol), 2M Na<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> 150mL, 톨루엔 500mL에 넣고 100℃에서 가열하였다. 4시간 후 상온으로 냉각시키고 EA로 추출하였다. 증류수로 씻어주고 무수MgSO<sub>4</sub>로 건조시킨 후 감압 증류하고 컬럼 분리하여 화합물 1-1 28g(100.68mmol, 83.33%)을 얻었다.

[0110] 화합물 1-2의 제조

[0111] 화합물 1-1 28g(100.68mmol)을 트리에틸포스파이트 300mL에 섞고 150℃에서 6시간 동안 교반하였다. 상온으로 냉각한 뒤 감압 증류하고 EA로 추출한 후 증류수로 씻어주었다. 무수MgSO<sub>4</sub>로 건조시킨 후 감압 증류하고 컬럼 분리하여 화합물 1-2 11g(44.69mmol, 44.38%)을 얻었다.

[0112] 화합물 1-3의 제조

[0113] 화합물 1-2 30g(101.29mmol), 아이오도벤젠 41.3g(202.59mmol), CuI 9.6g(50.64mmol), Cs<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> 82.5g(253.2mmol), 톨루엔 600mL을 섞고 50℃에서 가열한 뒤, 에틸렌다이아민 6.8mL(101.29mmol)을 넣고 환류 교반하였다. 14시간 후 상온으로 냉각하고 증류수를 넣었다. EA로 추출하고 무수MgSO<sub>4</sub>로 건조한 뒤, 감압 증류하고 컬럼 분리하여 화합물 1-3 32g(85.96mmol, 84.86%)을 얻었다.

[0114] 화합물 1-4의 제조

[0115] 화합물 1-3 32g(85.96mmol)을 THF 300mL에 녹이고 -78℃에서 n-부틸리튬 37.8mL(94.55mmol, 2.5M in hexane)을 천천히 넣었다. 1시간 후 트리메틸보레이트 12.4mL(111.7mmol)을 넣었다. 상온에서 12시간 교반 후 증류수를 넣었다. EA로 추출하고 무수MgSO<sub>4</sub>로 건조한 뒤, 감압 증류하고 컬럼 분리하여 화합물 1-4 20g(59.31mmol, 69.00%)을 얻었다.

[0116] 화합물 1-5의 제조

[0117] 화합물 1-4 20g(59.31mmol), 1-브로모-2-니트로벤젠 14.3g(71.17mmol), Pd(PPh<sub>3</sub>)<sub>4</sub> 2.7g(2.37mmol), 2M Na<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> 75mL, 톨루엔 300mL, 에탄올 70mL를 섞고 환류 교반하였다. 5시간 후 상온으로 냉각하고 증류수를 넣었다. EA로 추출하고 무수MgSO<sub>4</sub>로 건조한 뒤, 감압 증류하고 컬럼 분리하여 화합물 1-5 20g(48.25mmol, 81.36%)을 얻었다.

[0118] 화합물 1-6의 제조

[0119] 화합물 1-5 20g(48.25mmol)와 트리에틸포스파이트 200mL을 혼합한 후 150℃에서 6시간동안 교반한 뒤, 상온으로 냉각하고 감압 증류하였다. EA로 추출하고 증류수로 씻어주었다. 무수MgSO<sub>4</sub> 건조하고 감압 증류한 뒤, 컬럼 분리하여 화합물 1-6 7g(18.30mmol, 37.93%)을 얻었다.

[0120] 화합물 1-7의 제조

[0121] 1L 2구-neck RBF에 화합물 1-6 19.3g(0.058mol), 1,3-디브로모벤젠 82g(0.349mol), CuI 5.5g(2.91mmol), K<sub>3</sub>PO<sub>4</sub> 25g(0.11mol), 에틸렌다이아민 4mL(0.058mol), 톨루엔 500mL를 첨가한 후 75℃로 가열시켰다. 12시간 교반시킨 후 필터하여, Cu를 제거하고, 증류수로 씻어주고 EA로 추출한 뒤 유기층을 무수MgSO<sub>4</sub>로 건조시킨 후 회전 증발기로 용매를 제거한 후 컬럼로 정제하여 화합물 1-7 20.0g(71%)를 얻었다.

[0122] 화합물 1-8의 제조

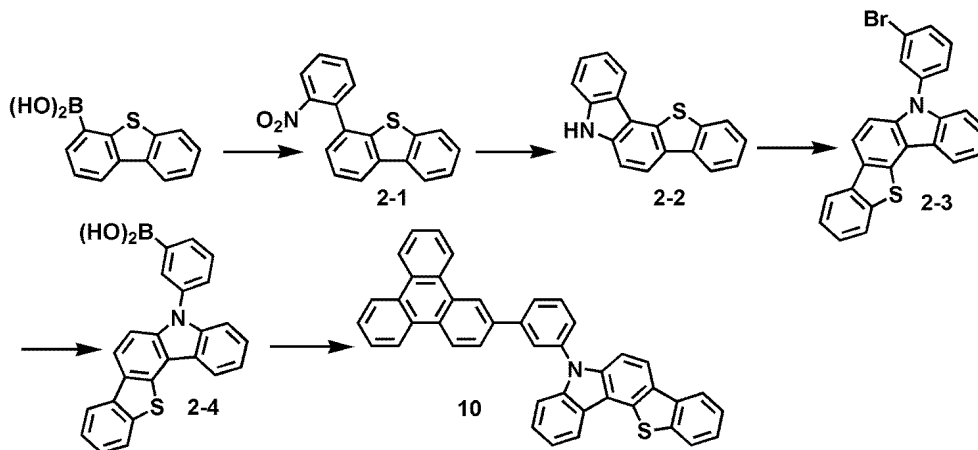
[0123] 1L RBF에 화합물 1-7 20.0g (0.041mol)을 넣고 진공 건조시킨 뒤 질소가스를 채웠다. THF 300mL를 첨가한 후 -78℃로 냉각시켰다. n-BuLi(2.5M) 24.7mL(0.061mol)을 천천히 첨가한 뒤 1시간 동안 저온을 유지하며 교반하였다. -78℃에서 B(i-pro)<sub>3</sub> 14.2mL(0.061mmol)을 첨가한 뒤 12시간 교반하였다. 반응이 종결되면 1M HCl을 첨가한 뒤 10분 뒤 증류수로 씻어주고 EA로 추출한 뒤 유기층을 무수MgSO<sub>4</sub>로 건조시킨 후 회전 증발기로 용매를 제거한 후 컬럼 정제하여 화합물 1-8 17.7g(90%)를 얻었다.

[0124] 화합물 1의 제조

[0125] 500mL 2구-RBF에 2-브로모트리페닐렌 7.2g(23.44mmol), 화합물 1-8 15.9g(35.16mmol), Pd(oAc)<sub>2</sub> 790mg(3.51mmol), P(t-Bu)<sub>3</sub> 4.7mL(7.03mmol), K<sub>3</sub>PO<sub>4</sub> (2M) 46mL(93.76mmol)넣고, 에탄올 46mL, 톨루엔 200mL를 첨가한 후 120℃로 가열시킨 후 2시간동안 교반시켰다. 반응이 끝나면 증류수로 씻어주고 EA로 추출한 뒤 유기층을 무수MgSO<sub>4</sub>로 건조시킨 후 회전 증발기로 용매를 제거한 후 컬럼 정제하여 화합물 1 6.5g(44%)를 얻었다.

[0126] MS/FAB found 635, calculated 634.77

[0127] [제조예 2] 화합물 10의 제조



[0128]

[0129] 화합물 2-1의 제조

[0130] 디벤조[b,d]티오펜-4-일보론산(dibenzo[b,d]thiophen-4-ylboronic acid) 10g(43.84mmol), 브로모니트로벤젠 8.85g(43.84mmol), 2M Na<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> 수용액 70mL, 톨루엔 200mL, 에탄올 70mL를 섞고 환류 교반하였다. 5시간 후 상온으로 냉각하고 EA로 추출하고 증류수로 씻어주었다. 무수MgSO<sub>4</sub>로 건조하고 감압 증류하였다. 컬럼분리하여 화합물 2-1 10g(32.74mmol, 74.68%)을 얻었다.

[0131] 화합물 2-2의 제조

[0132] 화합물 2-1 10g(32.74mmol)을 트리에틸포스파이트(triethylphosphite) 100mL에 섞고 150℃로 7시간 교반하였다. 상온으로 냉각하고 감압 증류하였다. EA로 재결정 하여 화합물 2-2 7g(25.60mmol, 78.19%)을 얻었다.

[0133] 화합물 2-3의 제조

[0134] 화합물 1-7과 동일한 방법으로 화합물 2-3 8.2g(19.1mmol, 75%)을 제조하였다.

[0135] 화합물 2-4의 제조

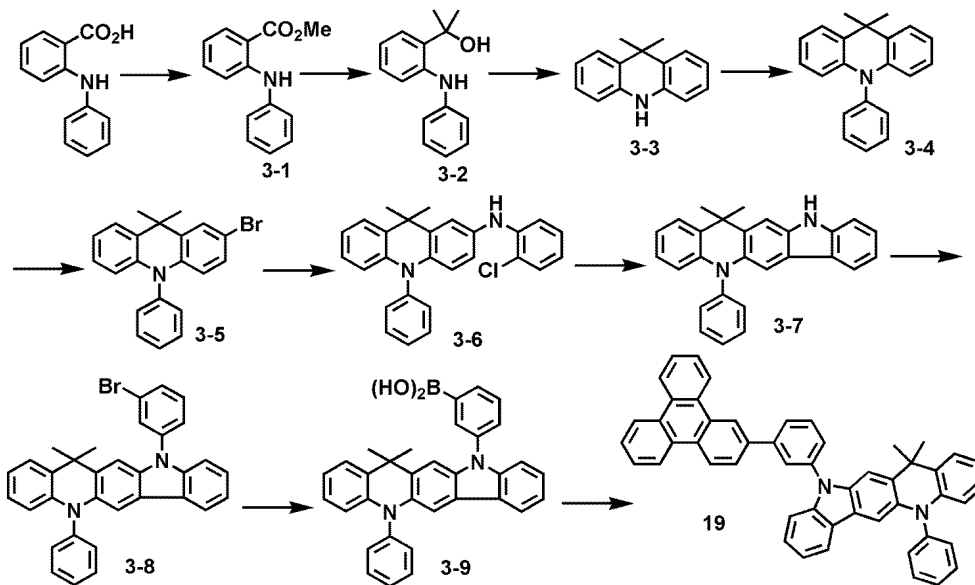
[0136] 화합물 1-8과 동일한 방법으로 화합물 2-4 4.7g(12.0mmol, 62%)을 제조하였다.

[0137] 화합물 10의 제조

[0138] 화합물 1과 동일한 방법으로 화합물 10 5.3g(9.2mmol, 67%)을 제조하였다.

[0139] MS/FAB found 576, calculated 575.72

[0140] [제조예 3] 화합물 19의 제조



[0141]

[0142] 화합물 3-1의 제조

[0143] 2-(페닐아미노)벤조산 50g(0.23mol)을 MeOH 1L에 녹이고, 얼음이 담긴 용기(ice bath)에 넣어 0℃에서 10분간 교반하였다. 0℃에서 SOCl<sub>2</sub> 60mL(0.58mol)를 천천히 첨가한 후 90℃에서 12시간 동안 환류 교반하였다. 반응이 종결되면, 증류수로 세척하고 EA로 추출하였다. 유기층을 무수MgSO<sub>4</sub>로 건조시킨 후 회전 증발기로 용매를 제거하고, EA를 전개 용매로하여 컬럼크로마토그래피로 정제하여 화합물 3-1 47g(92%)를 얻었다.

[0144] 화합물 3-2의 제조

[0145] 화합물 3-1 90g(0.3mol)를 THF 1.5L에 넣고, MeMgBr(3.0M) 462mL(1.38mol)를 천천히 첨가한 후 실온에서 12시간 동안 교반하였다. 반응이 종결되면, 증류수로 중화하고, EA로 추출하였다. 유기층을 무수MgSO<sub>4</sub>로 건조시킨 후 회전 증발기로 용매를 제거하고, EA를 전개 용매로 하여 컬럼크로마토그래피로 정제하여 화합물 3-2 80g(90%)를 얻었다.

[0146] 화합물 3-3의 제조

[0147] 화합물 3-2 80g(0.35mol)를 H<sub>3</sub>PO<sub>4</sub> 1.7L에 넣은 후 실온에서 12시간 동안 교반하였다. 반응이 종결되면, 증류수로 중화하고, 생성된 고체를 물로 씻어주면서 여과하였다. 고체를 다이클로로메탄으로 녹여서 추출하고, NaOH로 중화시켰다. 유기층을 무수MgSO<sub>4</sub>로 건조시킨 후 회전 증발기로 용매를 제거하고, 헥산으로 재결정하여 화합물 3-3 64g(87%)를 얻었다.

[0148] 화합물 3-4의 제조

[0149] 화합물 3-3 64g(0.30mol), 브로모벤젠 52.8g(0.33mol), Pd(OAc)<sub>2</sub> 1.37g(6.11mmol), P(t-Bu)<sub>3</sub> 50% 7.3mL(15.28mmol) 및 NaOt-Bu 58g(0.61mol)를 톨루엔 1.2L에 녹이고, 120℃에서 12시간 동안 교반하였다. 반응이 종결되면, 증류수로 중화하고, EA로 추출하였다. 유기층을 무수MgSO<sub>4</sub>로 건조시킨 후 회전 증발기로 용매를 제거하고, EA를 전개 용매로 하여 컬럼크로마토그래피로 정제하여 화합물 3-4 71g(81%)를 얻었다.

[0150] 화합물 3-5의 제조

[0151] 화합물 3-4 20g(0.07mol)을 DMF 800mL에 녹이고 0℃에서 10분간 교반하였다. 여기에 NBS 12.5g(0.07mol)를 DMF 350mL에 녹인 용액을 천천히 첨가한 후, 0℃에서 6시간 동안 교반하였다. 반응이 종결되면, 증류수로 중화하고, EA로 추출하였다. 유기층을 무수MgSO<sub>4</sub>로 건조시킨 후 회전 증발기로 용매를 제거하고, EA를 전개 용매로 하여 컬럼크로마토그래피로 정제하여 화합물 3-5 21g(84%)를 얻었다.

[0152] 화합물 3-6의 제조

[0153] 화합물 3-5 20g(0.054mol), 2-클로로아닐린 8.4g(0.065mol), Pd(OAc)<sub>2</sub> 370mg(1.64mmol), P(t-Bu)<sub>3</sub> 50% 3.6mL(5.49mmol) 및 Cs<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> 35.7g(0.109mol)를 톨루엔 300mL에 녹이고, 120℃에서 4시간 동안 교반하였다. 반응이 종결되면, 증류수로 중화하고, EA로 추출하였다. 유기층을 무수MgSO<sub>4</sub>로 건조시킨 후 회전 증발기로 용매를 제거하고, EA를 전개 용매로하여 컬럼크로마토그래피로 정제하여 화합물 3-6 13.6g(60%)를 얻었다.

[0154] 화합물 3-7의 제조

[0155] 화합물 3-6 12.6g(0.03mol), Pd(OAc)<sub>2</sub> 1.37mg(6.13mmol), 디-tert-부틸(메틸)포스포늄테트라플루오로보레이트 (Di-tert-butyl(methyl)phosphonium tetrafluoroborate) 3g(12.26mmol) 및 Cs<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> 50g(0.15mol)를 DMA 240mL에 녹이고, 190℃에서 4시간 동안 교반하였다. 반응이 종결되면, 증류수로 중화하고, EA로 추출하였다. 유기층을 무수MgSO<sub>4</sub>로 건조시킨 후 회전 증발기로 용매를 제거하고, EA를 전개 용매로하여 컬럼크로마토그래피로 정제하여 화합물 3-7 7g(18.7mmol, 70%)를 얻었다.

[0156] 화합물 3-8의 제조

[0157] 화합물 1-7과 동일한 방법으로 화합물 3-8 5.8g(11.0mmol, 59%)을 제조하였다.

[0158] 화합물 3-9의 제조

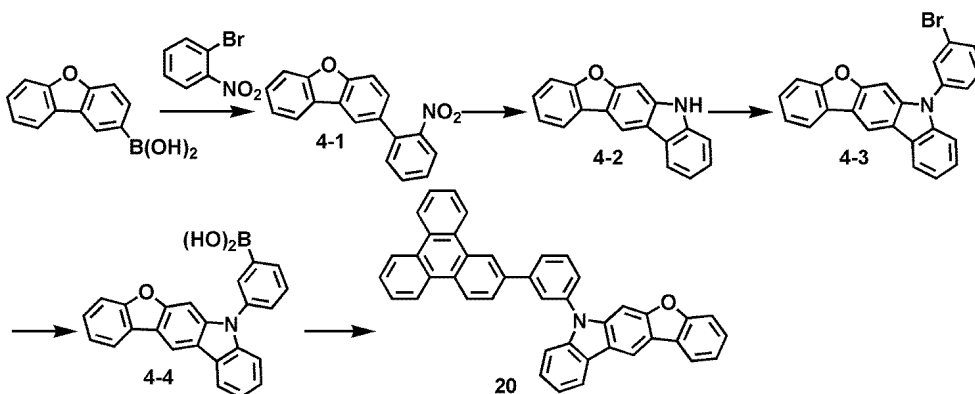
[0159] 화합물 1-8과 동일한 방법으로 화합물 3-9 3.6g(7.3mmol, 67%)을 제조하였다.

[0160] 화합물 19의 제조

[0161] 화합물 1과 동일한 방법으로 화합물 19 5.0g(9.2mmol, 69%)을 제조하였다.

[0162] MS/FAB found 677, calculated 676.84

[0163] [제조예 4] 화합물 20의 제조



[0164]

[0165] 화합물 4-1의 제조

[0166] 1-브로모-2-나이트로벤젠 16g(74.25mmol), 디벤조[b,d]퓨란-2-일보론산 23g(96.60mmol), Pd(PPh<sub>3</sub>)<sub>4</sub> 4.2g(3.63mmol), 2M K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> 수용액 111mL, EtOH 100mL 및 톨루엔 200mL를 혼합한 후 120℃로 가열시키면서 3시간 교반하였다. 반응이 끝나면 증류수로 씻어주고 EA로 추출한 뒤 유기층을 무수MgSO<sub>4</sub>로 건조시킨 후 회전 증발기로 용매를 제거한 후 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 화합물 4-1 22g(95%)를 얻었다.

[0167] 화합물 4-2의 제조

[0168] 화합물 4-1 24g(76.10mmol), 트리에틸포스파이트 200mL 및 1,2-다이클로로벤젠 200mL를 혼합한 후 180℃로 가열하여 12시간 교반하였다. 반응이 끝나면 증류(distillation) 장치를 이용해서 미반응 트리에틸포스파이트와 1,2-다이클로로벤젠을 제거한 후, 증류수로 씻어주고 EA로 추출한 뒤 유기층을 무수MgSO<sub>4</sub>로 건조시켰다. 회전 증발기로 용매를 제거한 후 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 화합물 4-2 7g(27.2mmol, 33%)를 얻었다.

[0169] 화합물 4-3의 제조

[0170] 화합물 1-7과 동일한 방법으로 화합물 4-3 8.4g(20.4mmol, 75%)을 제조하였다.

[0171] 화합물 4-4의 제조

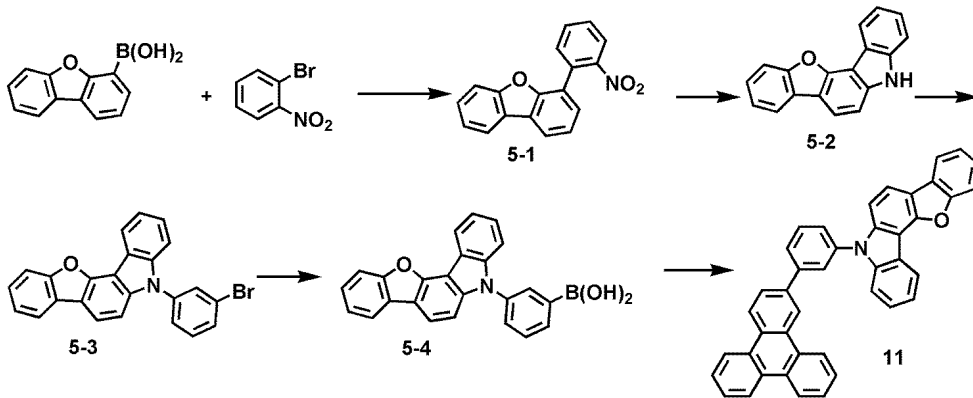
[0172] 화합물 1-8과 동일한 방법으로 화합물 4-4 4.3g(11.4mmol, 56%)을 제조하였다.

[0173] 화합물 20의 제조

[0174] 화합물 1과 동일한 방법으로 화합물 20 2.8g(5.0mmol, 42%)을 제조하였다.

[0175] MS/FAB found 560, calculated 559.65

[0176] [제조예 5] 화합물 11의 제조



[0177]

[0178] 화합물 5-1의 제조

[0179] 1-브로모-2-나이트로벤젠 39g(0.19mol), 디벤조[b,d]퓨란-4-일보론산 45g(0.21mol), Pd(PPh<sub>3</sub>)<sub>4</sub> 11.1g(0.0096mol), 2M K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> 수용액 290mL, EtOH 290mL 및 톨루엔 580mL를 혼합한 후 120℃로 가열시키면서 4시간 교반하였다. 반응이 끝나면 증류수로 씻어주고 EA로 추출한 뒤 유기층을 무수MgSO<sub>4</sub>로 건조시킨 후 회전 증발기로 용매를 제거한 후 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 화합물 5-1 47g(85%)를 얻었다.

[0180] 화합물 5-2의 제조

[0181] 화합물 5-1 47g(0.16mol), 트리에틸포스파이트 600mL 및 1,2-다이클로로벤젠 300mL를 혼합한 후 150℃로 가열하여 12시간 교반하였다. 반응이 끝나면 증류(distillation) 장치를 이용해서 미반응 트리에틸포스파이트와 1,2-다이클로로벤젠을 제거한 후, 증류수로 씻어주고 EA로 추출한 뒤 유기층을 무수MgSO<sub>4</sub>로 건조시켰다. 회전 증발기로 용매를 제거한 후 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 화합물 5-2 39g(81%)를 얻었다.

[0182] 화합물 5-3의 제조

[0183] 1L 2구-neck RBF에 화합물 5-2 15g(0.058mol), 1,3-디브로모벤젠 82g(0.349mol), CuI 5.5g(2.91mmol), K<sub>3</sub>PO<sub>4</sub> 25g(0.11mol), 에틸렌다이아민 4mL(0.058mol) 및 톨루엔 500mL를 첨가한 후 75°C로 가열시켰다. 12시간 교반시킨 후 필터하여, Cu를 제거하고, 증류수로 씻어주고 EA로 추출한 뒤 유기층을 무수MgSO<sub>4</sub>로 건조시킨 후 회전 증발기로 용매를 제거한 후 컬럼로 정제하여 화합물 5-3 17.1g(71%)를 얻었다.

[0184] 화합물 5-4의 제조

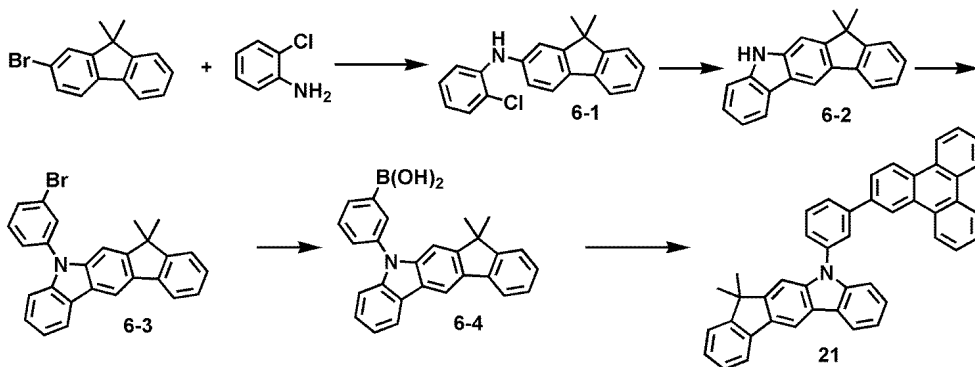
[0185] 1L RBF에 화합물 5-3 17.0g(0.041mol)을 넣고 진공 건조시킨 뒤 질소가스를 채웠다. THF 300mL를 첨가한 후 -78°C로 냉각시켰다. n-BuLi(2.5M) 24.7mL(0.061mol)을 천천히 첨가한 뒤 1시간 동안 저온을 유지하며 교반하였다. -78°C에서 B(i-pro)<sub>3</sub> 14.2mL(0.061mmol)을 첨가한 뒤 12시간 교반하였다. 반응이 종결되면 1M HCl을 첨가한 뒤 10분 뒤 증류수로 씻어주고 EA로 추출한 뒤 유기층을 무수MgSO<sub>4</sub>로 건조시킨 후 회전 증발기로 용매를 제거한 후 컬럼 정제하여 화합물 5-4 13.8g(90%)를 얻었다.

[0186] 화합물 11의 제조

[0187] 500mL 2구-RBF에 2-브로모트리페닐렌 7.2g(23.44mmol), 화합물 5-4 13.2g(35.16mmol), Pd(OAc)<sub>2</sub> 790mg(3.51mmol), P(t-Bu)<sub>3</sub> 4.7mL(7.03mmol), K<sub>3</sub>PO<sub>4</sub> (2M) 46mL(93.76mmol)넣고, 에탄올 46mL, 톨루엔 200mL를 첨가한 후 120°C로 가열시킨 후 2시간동안 교반시켰다. 반응이 끝나면 증류수로 씻어주고 EA로 추출한 뒤 유기층을 무수MgSO<sub>4</sub>로 건조시킨 후 회전 증발기로 용매를 제거한 후 컬럼 정제하여 화합물 11 5.8g(44%)를 얻었다.

[0188] MS/FAB found 559, calculated 559.19

[0189] [제조예 6] 화합물 21의 제조



[0190]

[0191] 화합물 6-1의 제조

[0192] 2-브로모-9,9-다이메틸-9H-플루오렌 80g(291mmol), 2-클로로벤젠아민 45mL(437mmol), Pd(OAc)<sub>2</sub> 2.6g(12mmol), P(t-Bu)<sub>3</sub> 12mL(24mmol), NaOt-Bu 70g(728mmol) 및 톨루엔 800mL를 혼합한 후 120°C로 가열시키면서 9시간 교반하였다. 반응이 끝나면 실온으로 식힌 후 에틸아세테이트 1.5L로 추출하여, 얻어진 유기층을 증류수 400mL로 씻어주었다. 그 후 감압하에서 용매를 제거하여 얻어진 고체를 헥산으로 씻어 필터한 후 건조하였다. 실리카겔 컬럼크로마토그래피와 재결정법으로 분리하여 화합물 6-1 70g(75%)을 얻었다.

[0193] 화합물 6-2의 제조

[0194] 화합물 6-1 70g(218mmol), Pd(OAc)<sub>2</sub> 2.4g(11mmol), PCy<sub>3</sub>HBF<sub>4</sub> 8g(22mmol), Na<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> 70g(654mmol) 및 DMA 1.2L를 혼합하고 190°C에서 3시간 동안 교반하였다. 반응이 끝나면 에틸아세테이트 1 L로 추출한 후, 얻어진 유기층을 증류수 200 mL로 씻어준 다음, 무수황산마그네슘으로 건조하고, 유기용매는 감압하에서 제거하였다. 얻어진 고체는 실리카겔 컬럼크로마토그래피와 재결정법으로 분리하여 화합물 6-2 22g(36%)을 얻었다.

[0195] 화합물 6-3의 제조

[0196] 화합물 6-2 15g(53mmol), 1,3-다이브로모벤젠 32mL(265mmol), Pd(OAc)<sub>2</sub> 1.2g(5mmol), P(t-Bu)<sub>3</sub> 30mL(64mmol), NaOt-Bu 25g(265mmol) 및 톨루엔 300mL을 혼합하고 120°C에서 24시간 동안 교반하였다. 반응이 끝나면 실온으로

식힌 후 에틸아세테이트 1.5L 로 추출하여, 얻어진 유기층을 증류수 400mL로 씻어주었다. 그 후 감압하에서 용매를 제거하여 얻어진 고체를 헥산으로 씻어 필터한 후 건조하였다. 실리카겔 컬럼크로마토그래피와 재결정법으로 분리하여 화합물 6-3 7g(30%)을 얻었다.

[0197] 화합물 6-4의 제조

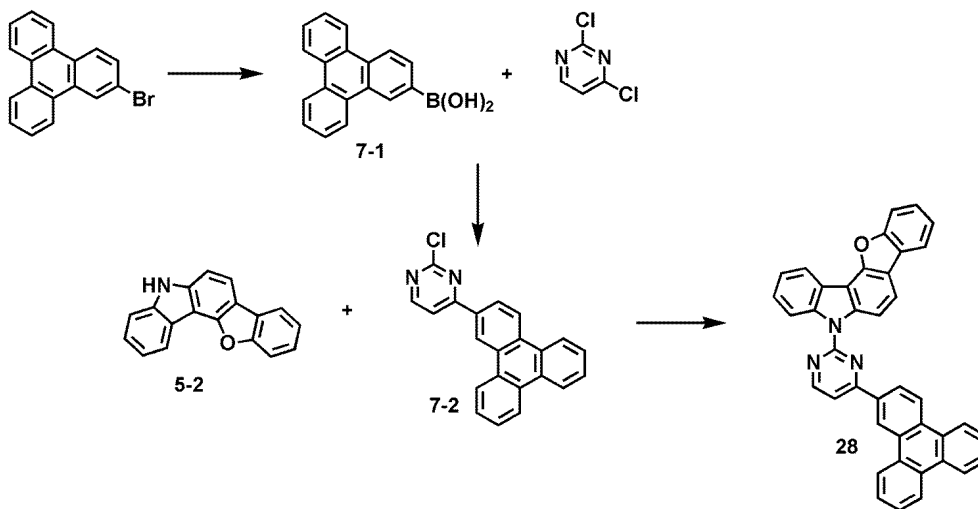
[0198] 화합물 6-3 7g(16mmol)을 THF 100mL에 녹인 후 -78℃에서 n-BuLi(2.5 M in hexane) 10mL(24mmol)를 첨가하였다. 이 혼합물을 -78℃에서 1시간 동안 교반한 후 B(Oi-Pr)<sub>3</sub> 6mL(24mmol)를 첨가하였다. 전체 반응물을 2시간 동안 교반하여준 후 염화암모늄 수용액 20mL로 반응을 종결시킨 후 에틸아세테이트 500mL로 추출하고, 얻어진 유기층을 증류수 200 mL로 씻어주었다. 유기층을 무수황산마그네슘으로 건조하고, 유기용매는 감압하에서 제거하였다. 얻어진 고체는 재결정법으로 분리하여 화합물 6-4 5g(75%)을 얻었다.

[0199] 화합물 21의 제조

[0200] 화합물 6-4 3.7g(9.2mmol), 2-브로모트리페닐렌 2.6g(8.3mmol) Pd(OAc)<sub>2</sub> 94mg(0.4mmol), P(t-Bu)<sub>3</sub> 0.4mL(0.8mmol), Cs<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> 8.2g(25mmol), 톨루엔 30mL, EtOH 15mL 및 증류수 15mL를 혼합하고, 이 혼합물을 120℃에서 16시간 동안 교반하였다. 반응물을 실온으로 식힌 후 에틸아세테이트 200mL로 추출하고, 얻어진 유기층을 증류수 50mL로 씻어주고, 유기용매를 감압하에서 제거하였다. 얻어진 고체는 Hexane으로 씻어 필터한 후 건조하였다. 얻어진 고체는 실리카겔 컬럼크로마토그래피와 재결정법으로 분리하여 화합물 21 1.1g(22%)을 얻었다.

[0201] MS/FAB found 585, calculated 585.25

[0202] [제조예 7] 화합물 28의 제조



[0203]

[0204] 화합물 7-1의 제조

[0205] 2-브로모트리페닐렌 63.7(207.4mmol)을 THF 1.5L에 녹이고 -78℃로 냉각시켰다. 10분 후 n-BuLi(2.5M in hexane) 125mL(311mmol)을 천천히 첨가하고 1시간동안 교반시켰다. 트리에틸보레이트 67mL(311mmol)을 천천히 첨가한 후 24시간동안 교반시켰다. 반응이 끝나면 1M HCl을 첨가하고 에틸아세테이트로 추출하고 무수황산마그네슘을 이용하여 잔여 수분을 제거한 뒤 건조시키고 Hexane으로 재결정하여 화합물 7-1 31.8g(55%)를 얻었다.

[0206] 화합물 7-2의 제조

[0207] 플라스크에 2,4-다이클로로피리미딘 9.7g(65.1mmol), 화합물 7-1 17.72g(65.1mmol), Pd(PPh<sub>3</sub>)<sub>4</sub> 3.76g(3.25mmol), Na<sub>2</sub>CO<sub>3</sub> 20.7g(195.3mmol) 및 DME 1.5L를 넣어 녹인 후 120℃에서 7시간동안 교반하였다. 반응 후 증류수를 천천히 넣어 반응을 종결시킨 후 에틸아세테이트로 유기층을 추출하고 무수황산마그네슘을 이용하여 잔여 수분을 제거한 뒤 건조시키고 컬럼 분리하여 화합물 7-2 4g(20%)을 얻었다.

[0208] 화합물 28의 제조

[0209] 플라스크에 NaH 651g(19.3mmol)을 DMF 100mL에 녹여 교반시켰다. 화합물 5-2 4g(15.4mmol)을 DMF에 녹인 후

상기 NaH용액에 첨가하여 1시간 동안 교반시켰다(반응물A). 화합물 7-2 4.4g(12.9mmol)을 DMF에 녹인 후 교반시키고 1시간 동안 교반시킨 반응물(반응물A)을 첨가하고 실온에서 24시간 교반시켰다. 반응이 끝나면 생성된 고체를 거른 후, 에틸아세테이트로 씻어주고 컬럼크로마토그래피로 정제하여 화합물 28 3.5g(48%)를 얻었다.

[0210] MS/FAB found 561, calculated 561.18

[0211] [실시에 1] 본 발명에 따른 유기 발광 화합물을 이용한 OLED 소자 제작

[0212] 본 발명의 발광 재료를 이용한 구조의 OLED 소자를 제작하였다. 우선, OLED용 글래스(삼성-코닝사 제조)로부터 얻어진 투명전극 ITO 박막(15 Ω/□)을, 트리클로로에틸렌, 아세톤, 에탄올, 증류수를 순차적으로 사용하여 초음파 세척을 실시한 후, 이소프로판올에 넣어 보관한 후 사용하였다. 다음으로, 진공 증착 장비의 기관 폴더에 ITO 기관을 설치하고, 진공 증착 장비 내의 셀에 2-TNATA [4,4',4"-tris(N,N-(2-naphthyl)-phenylamino)triphenylamine]을 넣고, 챔버 내의 진공도가 10<sup>-6</sup> torr에 도달할 때까지 배기시킨 후, 셀에 전류를 인가하여 2-TNATA를 증발시켜 ITO 기관 상에 60 nm 두께의 정공주입층을 증착하였다. 이어서, 진공 증착 장비 내의 다른 셀에 N,N'-다이(4-바이페닐)-N,N'-다이(4-바이페닐)-4,4'-다이아미노바이페닐(N,N'-di(4-biphenyl)-N,N'-di(4-biphenyl)-4,4'-diaminobiphenyl)을 넣고, 셀에 전류를 인가하여 증발시켜 정공주입층 위에 20 nm 두께의 정공전달층을 증착하였다. 정공주입층, 정공전달층을 형성시킨 후, 그 위에 발광층을 다음과 같이 증착시켰다. 진공 증착 장비 내의 한쪽 셀에 호스트로서 본 발명에 따른 화합물 10을 넣고, 또 다른 셀에는 11-(4,6-다이페닐-1,3,5-트리아진-2-일)-12-페닐-11,12-다이하이드로인돌로[2,3-a]카바졸 (11-(4,6-diphenyl-1,3,5-triazin-2-yl)-12-phenyl-11,12-dihydroindolo[2,3-a]carbazole)을 넣은 후 두 물질을 같은 속도로 증발시켜 호스트로 사용하였다. 도판트로는 D-5을 넣은 후 15중량%으로 호스트에 도핑함으로써 상기 정공전달층 위에 30 nm 두께의 발광층을 증착하였다. 이어서 상기 발광층 위에 전자전달층으로써 Alq [tris(8-hydroxyquinoline)-aluminum(III)]를 20 nm 두께로 증착한 다음, 전자주입층으로써 Liq [lithium quinolate]를 2 nm 두께로 증착한 후, 다른 진공 증착 장비를 이용하여 Al 음극을 150 nm의 두께로 증착하여 OLED소자를 제작하였다.

[0213] 재료 별로 각 화합물은 10<sup>-6</sup> torr 하에서 진공 승화 정제하여 OLED 발광재료로 사용하였다.

[0214] 그 결과, 4.7 V의 전압에서 1.6 mA/cm<sup>2</sup>의 전류가 흘렀으며, 685 cd/m<sup>2</sup>의 녹색발광이 확인되었다.

[0215] [실시에 2] 본 발명에 따른 유기발광화합물을 이용한 OLED 소자 제작

[0216] 발광층에서 호스트 재료로서 본 발명에 따른 화합물 11을 이용하고 도판트로 D-34를 이용한 것 외에는, 실시예 1과 동일한 방법으로 OLED소자를 제작하였다.

[0217] 그 결과, 5.6 V의 전압에서 5.3 mA/cm<sup>2</sup>의 전류가 흘렀으며, 2190 cd/m<sup>2</sup>의 녹색발광이 확인되었다.

[0218] [실시에 3] 본 발명에 따른 유기발광화합물을 이용한 OLED 소자 제작

[0219] 발광층에서 호스트 재료로서 본 발명에 따른 화합물 21을 이용하고 도판트로 D-34를 이용한 것 외에는, 실시예 1과 동일한 방법으로 OLED소자를 제작하였다.

[0220] 그 결과, 5.2 V의 전압에서 3.0 mA/cm<sup>2</sup>의 전류가 흘렀으며, 1240 cd/m<sup>2</sup>의 녹색발광이 확인되었다.

[0221] [실시에 4] 본 발명에 따른 유기발광화합물을 이용한 OLED 소자 제작

[0222] 발광층에서 호스트 재료로서 본 발명에 따른 화합물 28을 단일호스트로 이용한 것 외에는, 실시예 1과 동일한 방법으로 OLED소자를 제작하였다.

[0223] 그 결과, 6.4 V의 전압에서 10.6 mA/cm<sup>2</sup>의 전류가 흘렀으며, 4520 cd/m<sup>2</sup>의 녹색발광이 확인되었다.

[0224] [비교예 1] 종래의 발광 재료를 이용한 OLED 소자의 발광 특성

[0225] 진공 증착 장비 내의 한쪽 셀에 호스트 재료로서 본 발명의 화합물 대신 CBP(4,4'-bis(carbazol-9-yl)biphenyl)을 이용하고, 도판트를 D-4를 이용하고, 정공차단층으로 비스(2-메틸-8-퀴놀리네이트)(p-페닐페놀레이트)알루미늄(III) (BA1q)를 사용한 것을 제외하고는 실시예 1과 동일한 방법으로 OLED소자를 제작하였다.

[0226] 그 결과, 7.5 V의 전압에서  $3.8 \text{ mA/cm}^2$ 의 전류가 흘렀으며,  $1000 \text{ cd/m}^2$ 의 녹색발광이 확인되었다.

[0227] 본 발명에 따른 유기 발광 화합물을 발광용 호스트 재료로 사용한 소자는 발광특성이 뛰어난 뿐만 아니라 구동 전압을 강하시켜줌으로써 전력효율의 상승을 유도하여 소비전력을 개선시킬 수 있었다.

专利名称(译)	本发明涉及一种新型有机发光化合物和使用该化合物的有机电致发光器件。		
公开(公告)号	<a href="#">KR1020120030941A</a>	公开(公告)日	2012-03-29
申请号	KR1020110092141	申请日	2011-09-09
[标]申请(专利权)人(译)	罗门哈斯电子材料有限公司		
申请(专利权)人(译)	룸엔드하스전자재료코리아유한회사		
当前申请(专利权)人(译)	룸엔드하스전자재료코리아유한회사		
[标]发明人	AHN HEE CHOON 안희춘 LEE SU HYUN 이수현 YANG SOO JIN 양수진 SHIN HYO NIM 신호님 MOON DOO HYEON 문두현 KIM YOUNG GIL 김영길 LEE HYO JUNG 이효정 CHO YOUNG JUN 조영준 KWON HYUCK JOO 권혁주 LEE KYUNG JOO 이경주 KIM BONG OK 김봉옥		
发明人	안희춘 이수현 양수진 신호님 문두현 김영길 이효정 조영준 권혁주 이경주 김봉옥		
IPC分类号	C09K11/06 H01L51/50		
CPC分类号	Y02B20/181 C07F15/0033 C09K2211/185 H01L51/0072 H01L51/0085		
代理人(译)	李昌勋		
优先权	1020100092223 2010-09-20 KR		
外部链接	<a href="#">Espacenet</a>		

摘要(译)

本发明涉及新型有机电致发光化合物和使用该化合物的有机电致发光器件。并且根据本发明的有机发光化合物具有以下优点：与先前存在的材料相比，具有改善的功耗并且发光效率优异的OLED器件与材料的寿命特性良好并且驱动耐久性优异。器件非常出色，可以制造出引起功率效率的上升。

