



(19) 대한민국특허청(KR)

(12) 등록특허공보(B1)

(45) 공고일자 2017년09월14일

(11) 등록번호 10-1778046

(24) 등록일자 2017년09월07일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)
C09K 11/06 (2006.01) C07D 487/04 (2006.01)
C07D 487/14 (2006.01) C07F 7/02 (2006.01)
H01L 51/50 (2006.01)

(52) CPC특허분류
C09K 11/06 (2013.01)
C07D 487/04 (2013.01)

(21) 출원번호 10-2015-0115633(분할)

(22) 출원일자 2015년08월17일

심사청구일자 2015년08월17일

(65) 공개번호 10-2015-0098237

(43) 공개일자 2015년08월27일

(62) 원출원 특허 10-2009-0067370

원출원일자 2009년07월23일

심사청구일자 2013년12월27일

(56) 선행기술조사문헌

KR1020100138630 A*

KR1020100130197 A*

KR1020080109000 A*

*는 심사관에 의하여 인용된 문헌

(73) 특허권자

룸엔드하스전자재료코리아유한회사

충청남도 천안시 서북구 3공단1로 56 (백석동)

(72) 발명자

이수용

경기도 남양주시 늘을3로 65-26 1302동 702호 (호평동, 중흥S-CLASS1차아파트)

김영길

경기도 안양시 동안구 관평로138번길 12 104동 303호 (평촌동, 성원아파트)

(뒷면에 계속)

(74) 대리인

장훈

전체 청구항 수 : 총 7 항

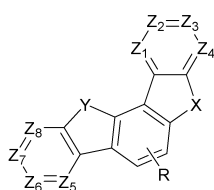
심사관 : 오세주

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

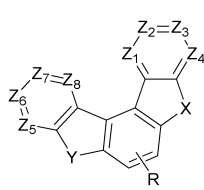
(57) 요약

본 발명은 신규한 유기 발광 화합물 및 이를 포함하고 있는 유기 전계 발광 소자에 관한 것으로, 보다 상세하게 본 발명에 따른 유기 발광 화합물은 하기 화학식 1 내지 6으로부터 선택된다.

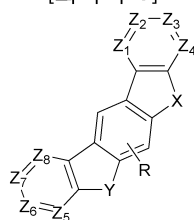
[화학식 1]



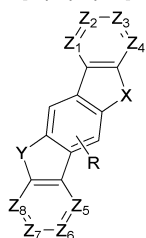
[화학식 2]



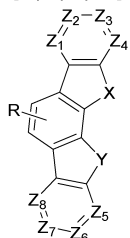
[화학식 3]



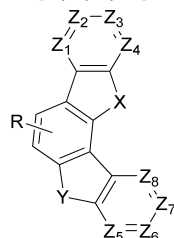
[화학식 4]



[화학식 5]



[화학식 6]



[상기 화학식 1 내지 6에서, X 및 Y는 각각 독립적으로 N(R₁), C(R₂)(R₃) 및 Si(R₄)(R₅)로부터 선택되고, 단 X 및 Y 중 반드시 하나는 N(R₁)이고, 나머지는 C(R₂)(R₃) 또는 Si(R₄)(R₅)이며; Z₁ 내지 Z₈은 각각 독립적으로 C(R₆) 및 N으로부터 선택되고, R₆은 서로 다를 수 있으며, 인접한 R₆는 서로 결합하여 환을 형성할 수 있다.]

본 발명에 따른 유기 발광 화합물은 OLED 소자에서 유기 발광 재료의 호스트 재료로 사용되어 기존 호스트 재료 (뒷면에 계속)

에 비해 발광효율이 좋고 재료의 수명특성이 뛰어나 소자의 구동수명이 매우 양호한 OLED를 제조할 수 있는 장점이 있다.

(52) CPC특허분류

C07D 487/14 (2013.01)

C07F 7/02 (2013.01)

H01L 51/50 (2013.01)

C09K 2211/1029 (2013.01)

C09K 2211/18 (2013.01)

(72) 발명자

조영준

서울특별시 성북구 동소문로34길 24 101동 1111호
(돈암동, 삼성아파트)

권혁주

서울특별시 동대문구 장안벚꽃로 167 224동 2001호
(장안동, 래미안장안2차아파트)

김봉옥

서울특별시 강남구 학동로64길 7 101동 1108호 (삼성동, 한솔아파트)

김성민

서울특별시 양천구 오목로 299 EB-1003 (목동, 목동트라팰리스)

윤승수

경기도 수원시 장안구 서부로 2066 자연과학부 화학과 (천천동, 성균관대학교자연과학캠퍼스)

명세서

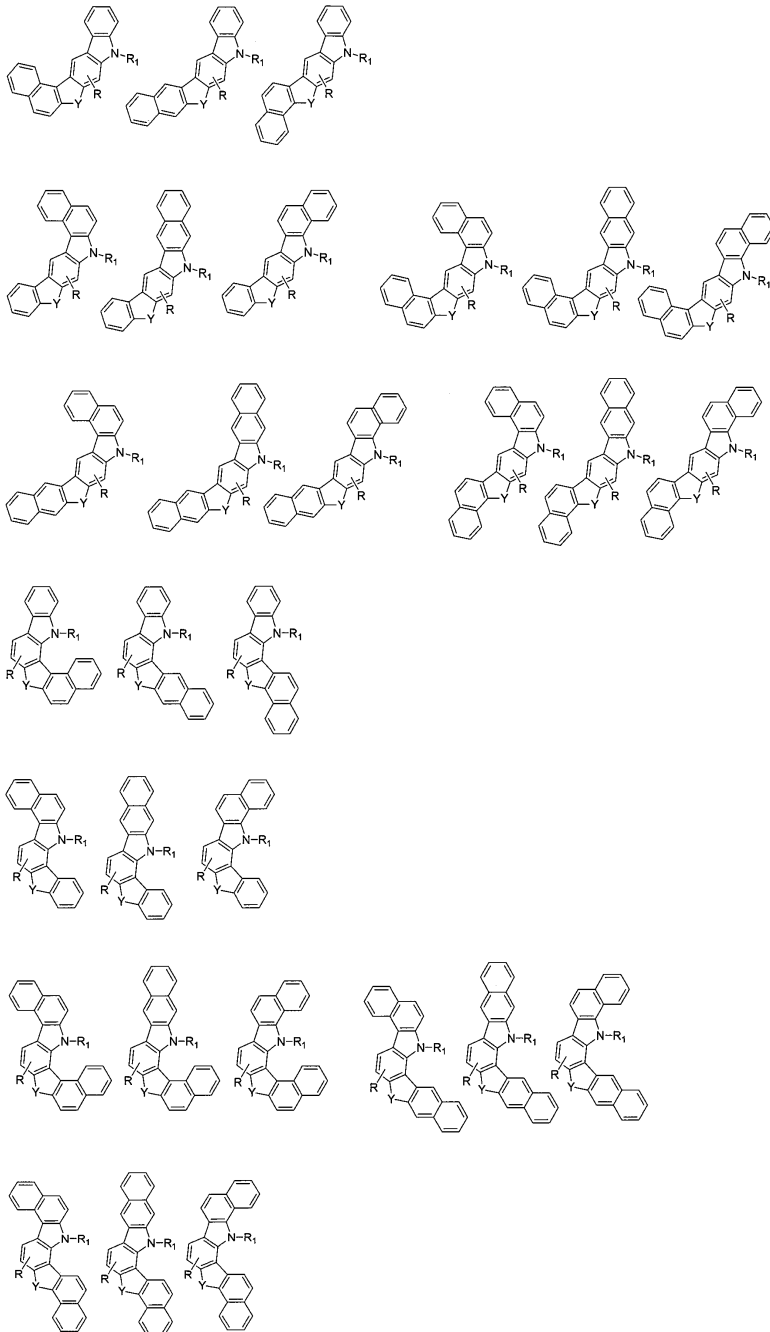
청구범위

청구항 1

삭제

청구항 2

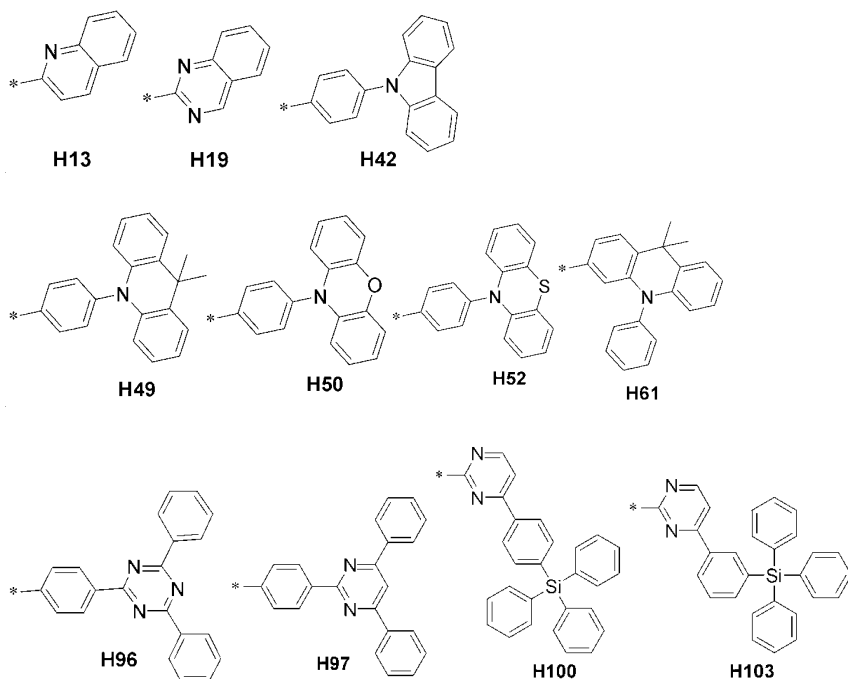
하기 화합물로부터 선택되는 유기 발광 화합물.



[상기에서,

Y는 C(R₂)(R₃)이고;

R₁은 하기 구조에서 선택되는 치환기이며;



R₂ 및 R₃은 서로 독립적으로 (C1-C30)알킬, (C3-C30)시클로알킬, 5원 내지 7원의 헤테로시클로알킬, (C2-C30)알케닐, (C2-C30)알키닐, (C6-C30)아릴 및 (C3-C30)헤테로아릴로부터 선택되고;

R은 수소, (C1-C30)알킬, 할로젠, 시아노, (C3-C30)시클로알킬, 5원 내지 7원의 헤테로시클로알킬, (C2-C30)알케닐, (C2-C30)알키닐, (C6-C30)아릴, (C3-C30)헤테로아릴, 모노 또는 디(C1-C30)알킬아미노, 모노 또는 디(C6-C30)아릴아미노, R^aR^bR^cSi-[R^a, R^b 및 R^c는 서로 독립적으로 (C1-C30)알킬 또는 (C6-C30)아릴이다.], R^dY-[Y는 O 또는 S이고, R^d는 (C1-C30)알킬 또는 (C6-C30)아릴이다.], 모노 또는 디(C6-C30)아릴보라닐, 모노 또는 디(C1-C60)알킬보라닐, 나이트로 및 하이드록시로부터 선택되며;

상기 R, R₂ 및 R₃의 알킬, 시클로알킬, 헤테로시클로알킬, 알케닐, 알키닐, 아릴, 헤테로아릴, 알킬아미노, 아릴아미노, 아릴보라닐 또는 알킬보라닐 및 R^a, R^b, R^c 및 R^d의 알킬 또는 아릴은 (C1-C30)알킬, 할로젠, 시아노, (C3-C30)시클로알킬, 5원 내지 7원의 헤테로시클로알킬, (C2-C30)알케닐, (C2-C30)알키닐, (C6-C30)아릴, (C1-C30)알콕시, (C6-C30)아릴옥시, P(=O)R^eR^f[R^e 및 R^f는 서로 독립적으로 (C1-C30)알킬 또는 (C6-C30)아릴이다.]가 치환된 (C6-C30)아릴, (C3-C30)헤테로아릴, (C6-C30)아릴이 치환된 (C3-C30)헤테로아릴, (C1-C30)알킬이 치환된 (C3-C30)헤테로아릴, (C6-C30)아르(C1-C30)알킬, (C6-C30)아릴티오, (C1-C30)알킬티오, 모노 또는 디(C1-C30)알킬아미노, 모노 또는 디(C6-C30)아릴아미노, 트리(C1-C30)알킬실릴, 디(C1-C30)알킬(C6-C30)아릴실릴, 트리(C6-C30)아릴실릴, 모노 또는 디(C6-C30)아릴보라닐, 모노 또는 디(C1-C30)알킬보라닐, 나이트로 및 하이드록시로 이루어진 군으로부터 선택되는 하나 이상의 치환기로 더 치환될 수 있고;

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

청구항 3

삭제

청구항 4

삭제

청구항 5

제 2항에 따른 유기 발광 화합물을 포함하는 것을 특징으로 하는 유기 전계 발광 소자.

청구항 6

제 5항에 있어서,

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

청구항 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, 란타넘계열금속 및 d-전이원소의 유기금속으로 이루어진 군으로부터 선택되는 하나 이상의 금속 또는 착체화합물을 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 더포함하여 백색 발광을 하는 유기 전계 발광 소자.

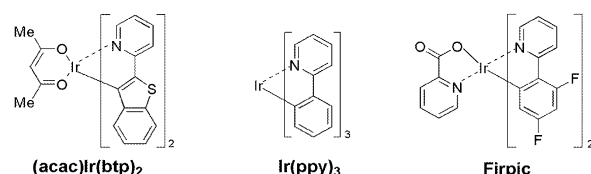
발명의 설명

기술 분야

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

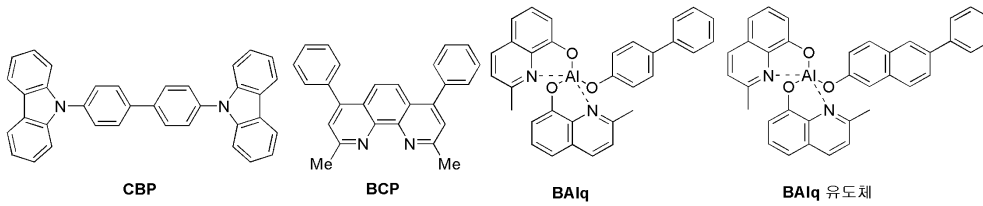
배경 기술

[0002] 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 별로는 (acac)Ir(btp)₂, Ir(ppy)₃ 및 Firpic 등의 재료가 알려져 있다. 특히, 최근 일본, 구미에서 많은 인광 재료들이 연구되어지고 있다.



[0003]

[0004] 인광 발광체의 호스트 재료로는 현재까지 CBP가 가장 널리 알려져 있으며, BCP 및 BAlq 등의 정공차단층을 적용한 고효율의 OLED가 공지되어 있으며, 일본의 파이오니어 등에서는 BAlq 유도체를 호스트로 이용한 고성능의 OLED가 공지되어 있다.



[0005] 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.

발명의 내용

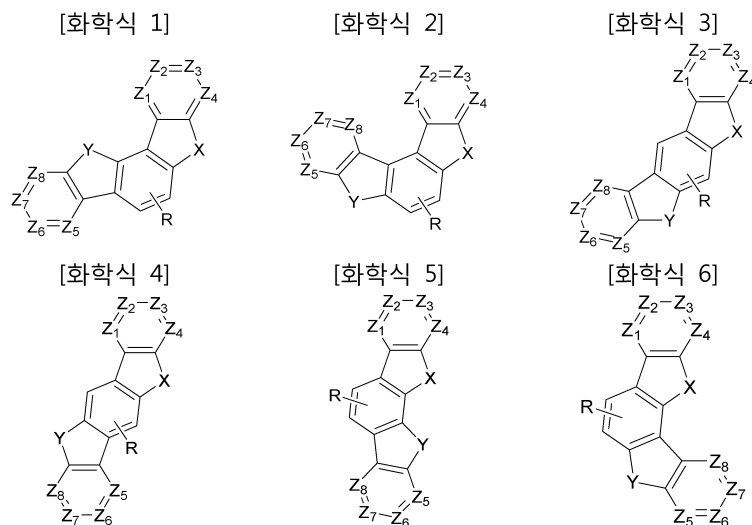
해결하려는 과제

[0007] 따라서, 본 발명자들은 상기의 종래의 문제점을 해결하기 위하여 노력한 결과, 발광 효율이 뛰어나고 수명이 획기적으로 개선된 유기 전계 발광 소자를 실현하기 위한 새로운 발광 화합물을 발명하게 되었다.

[0008] 본 발명의 목적은 상기한 문제점들을 해결하기 위하여 기존의 호스트 재료보다 발광 효율 및 소자 수명이 좋으며, 적절한 색좌표를 갖는 우수한 골격의 유기 발광 화합물을 제공하는 것이며, 또 다른 목적으로서 상기 유기 발광 화합물을 발광 재료로서 채용하는 고효율 및 장수명의 유기 전계 발광 소자를 제공하는 것이다.

과제의 해결 수단

[0009] 본 발명은 하기 화학식 1 내지 6으로 표시되는 유기 발광 화합물 및 이를 포함하는 유기 전계 발광 소자에 관한 것으로서, 본 발명에 따른 유기 발광 화합물은 기존 호스트 재료에 비해 발광효율이 좋고 재료의 수명특성이 뛰어나 소자의 구동수명이 매우 양호한 OLED를 제조할 수 있는 장점이 있다.



[0010] [상기 화학식 1 내지 6에서,

[0011] X 및 Y는 각각 독립적으로 $N(R_1)$, $C(R_2)(R_3)$ 및 $Si(R_4)(R_5)$ 로부터 선택되고, 단 X 및 Y 중 반드시 하나는 $N(R_1)$ 이

고, X나머지는 $C(R_2)(R_3)$ 또는 $Si(R_4)(R_5)$ 이며;

[0013] Z_1 내지 Z_8 은 각각 독립적으로 $C(R_6)$ 및 N으로부터 선택되고, R_6 은 서로 다를 수 있으며, 인접한 R_6 은 서로 결합하여 환을 형성할 수 있으며;

[0014] R_1 내지 R_5 는 서로 독립적으로 (C1-C30)알킬, (C3-C30)시클로알킬, 5원 내지 7원의 헤테로시클로알킬, (C2-C30)알케닐, (C2-C30)알키닐, (C6-C30)아릴 및 (C3-C30)헤테로아릴로부터 선택되며;

[0015] R 및 R_6 는 서로 독립적으로 수소, (C1-C30)알킬, 할로젠, 시아노, (C3-C30)시클로알킬, 5원 내지 7원의 헤테로시클로알킬, (C2-C30)알케닐, (C2-C30)알키닐, (C6-C30)아릴, (C3-C30)헤테로아릴, 모노 또는 디(C1-C30)알킬아미노, 모노 또는 디(C6-C30)아릴아미노, $R^a R^b R^c Si-[R^a, R^b \text{ 및 } R^c \text{는 서로 독립적으로 (C1-C30)알킬 또는 (C6-C30)아릴이다.}]$, $R^d Y-[Y \text{는 O 또는 S이고, } R^d \text{는 (C1-C30)알킬 또는 (C6-C30)아릴이다.}]$, 모노 또는 디(C6-C30)아릴보라닐, 모노 또는 디(C1-C60)알킬보라닐, 나이트로 및 하이드록시로부터 선택되며;

[0016] 상기 R 및 R_1 내지 R_6 의 알킬, 시클로알킬, 헤테로시클로알킬, 알케닐, 알키닐, 아릴, 헤테로아릴, 알킬아미노, 아릴아미노, 아릴보라닐 또는 알킬보라닐 및 R^a, R^b, R^c 및 R^d 의 알킬 또는 아릴은 (C1-C30)알킬, 할로젠, 시아노, (C3-C30)시클로알킬, 5원 내지 7원의 헤테로시클로알킬, (C2-C30)알케닐, (C2-C30)알키닐, (C6-C30)아릴, (C1-C30)알콕시, (C6-C30)아릴옥시, $P(=O)R^e R^f R^g$ 및 R^f 는 서로 독립적으로 (C1-C30)알킬 또는 (C6-C30)아릴이다.]가 치환된 (C6-C30)아릴, (C3-C30)헤테로아릴, (C6-C30)아릴이 치환된 (C3-C30)헤테로아릴, (C1-C30)알킬이 치환된 (C3-C30)헤테로아릴, (C6-C30)아르(C1-C30)알킬, (C6-C30)아릴티오, (C1-C30)알킬티오, 모노 또는 디(C1-C30)알킬아미노, 모노 또는 디(C6-C30)아릴아미노, 트리(C1-C30)알킬실릴, 디(C1-C30)알킬(C6-C30)아릴실릴, 트리(C6-C30)아릴실릴, 모노 또는 디(C6-C30)아릴보라닐, 모노 또는 디(C1-C30)알킬보라닐, 나이트로 및 하이드록시로 이루어진 군으로부터 선택되는 하나 이상의 치환기로 더 치환될 수 있으며;

[0017] 상기 헤테로시클로알킬 및 헤테로아릴은 B, N, O, S, $P(=O)$, Si 및 P로부터 선택된 하나 이상의 헤테로원자를 포함한다.]

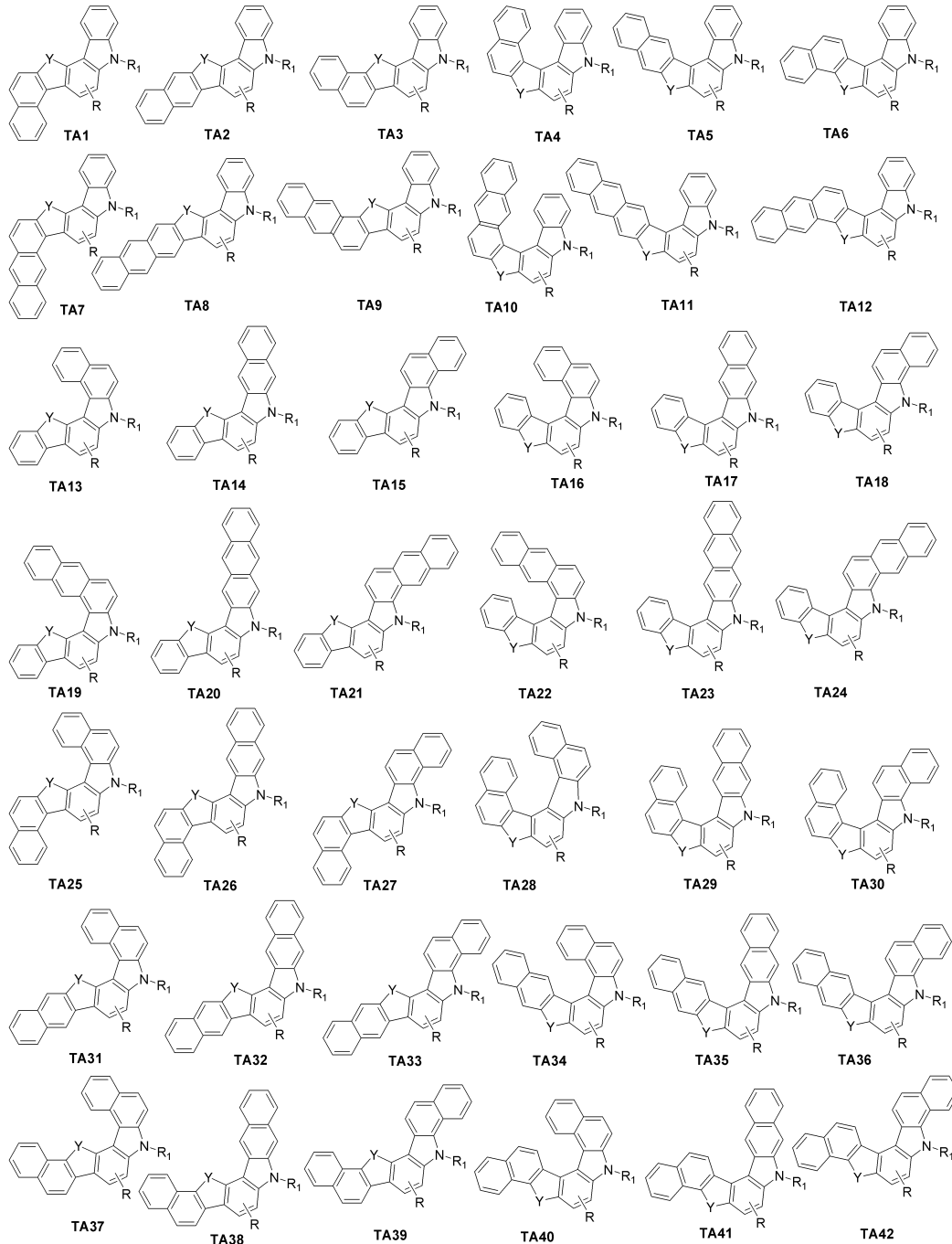
[0018] 또한, 본 발명에 기재되어 있는 “(C1-C30)알킬, 트리(C1-C30)알킬실릴, 디(C1-C30)알킬(C6-C30)아릴실릴, (C6-C30)아르(C1-C30)알킬, (C1-C30)알킬옥시, (C1-C30)알킬티오” 등의 알킬은 탄소수 1 내지 20개로 제한될 수 있고, 탄소수 1 내지 10개로 제한될 수 있다. “(C6-C30)아릴, 디(C1-C30)알킬(C6-C30)아릴실릴, 트리(C6-C30)아릴실릴, (C6-C30)아르(C1-C30)알킬, (C6-C30)아릴옥시, (C6-C30)아릴티오” 등의 아릴은 탄소수 6 내지 20개로 제한될 수 있고, 탄소수 6 내지 12개로 제한될 수 있다. “(C3-C30)헤테로아릴”의 헤테로아릴은 탄소수 4 내지 20개로 제한될 수 있고, 탄소수 4 내지 12개로 제한될 수 있다. “(C3-C30)시클로알킬”의 시클로알킬은 탄소수 3 내지 20개로 제한될 수 있고, 탄소수 3 내지 7개로 제한될 수 있다. “(C2-C30)알케닐 또는 알키닐”의 알케닐 또는 알키닐은 탄소수 2 내지 20개로 제한될 수 있고, 탄소수 2 내지 10개로 제한될 수 있다.

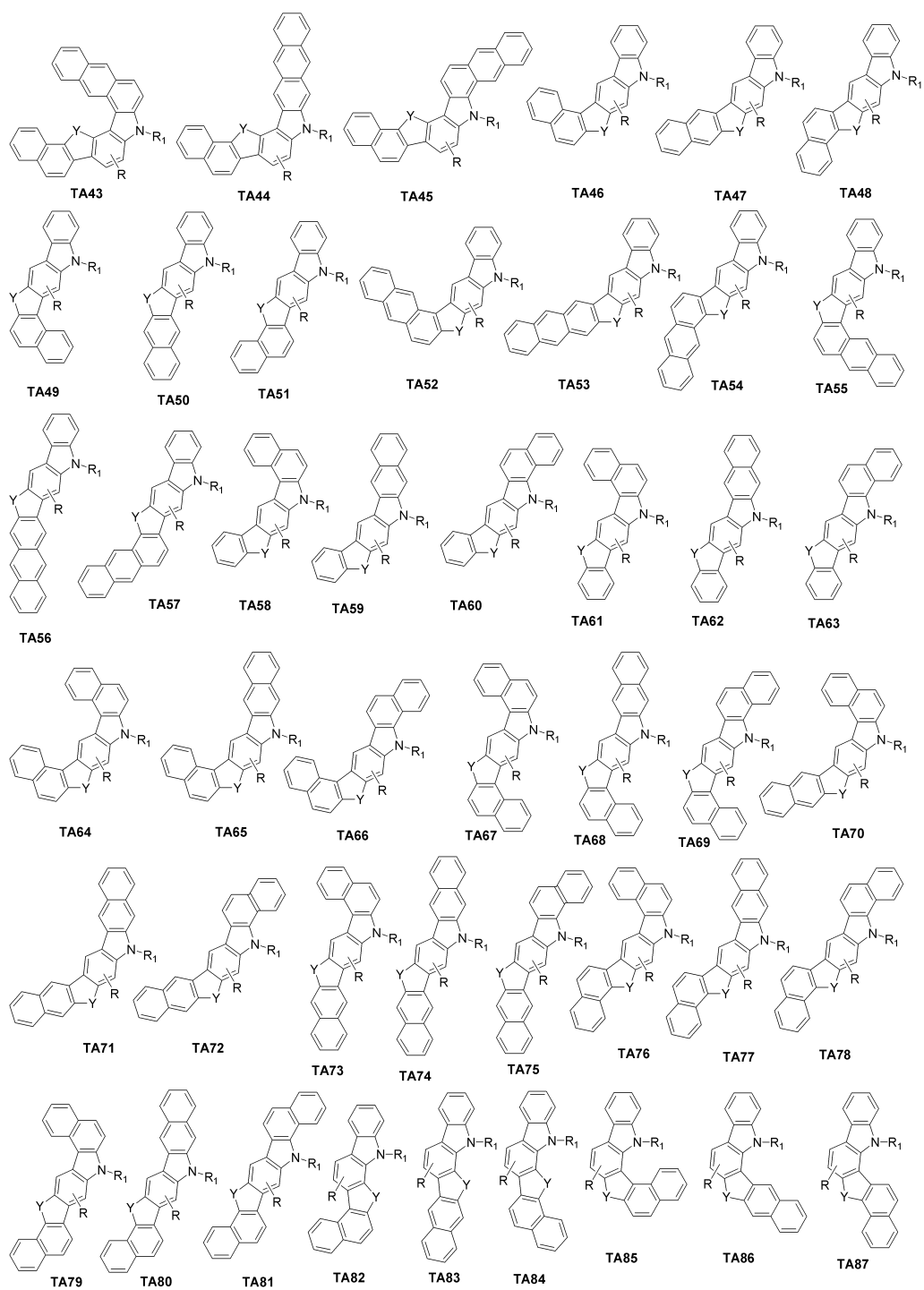
[0019] 본 발명에 기재된 「알킬」은 탄소 원자 및 수소 원자만으로 구성된 직쇄 또는 분지쇄의 포화된 1가 탄화수소 라디칼 또는 그의 조합물을 포함한다. 본 발명에 기재된 「시클로알킬」은 단일 고리계 뿐만 아니라 아다만틸 또는 바이시클로알킬과 같은 여러 고리계 탄화수소도 포함한다.

[0020] 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, 인덴일(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, 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, 트리

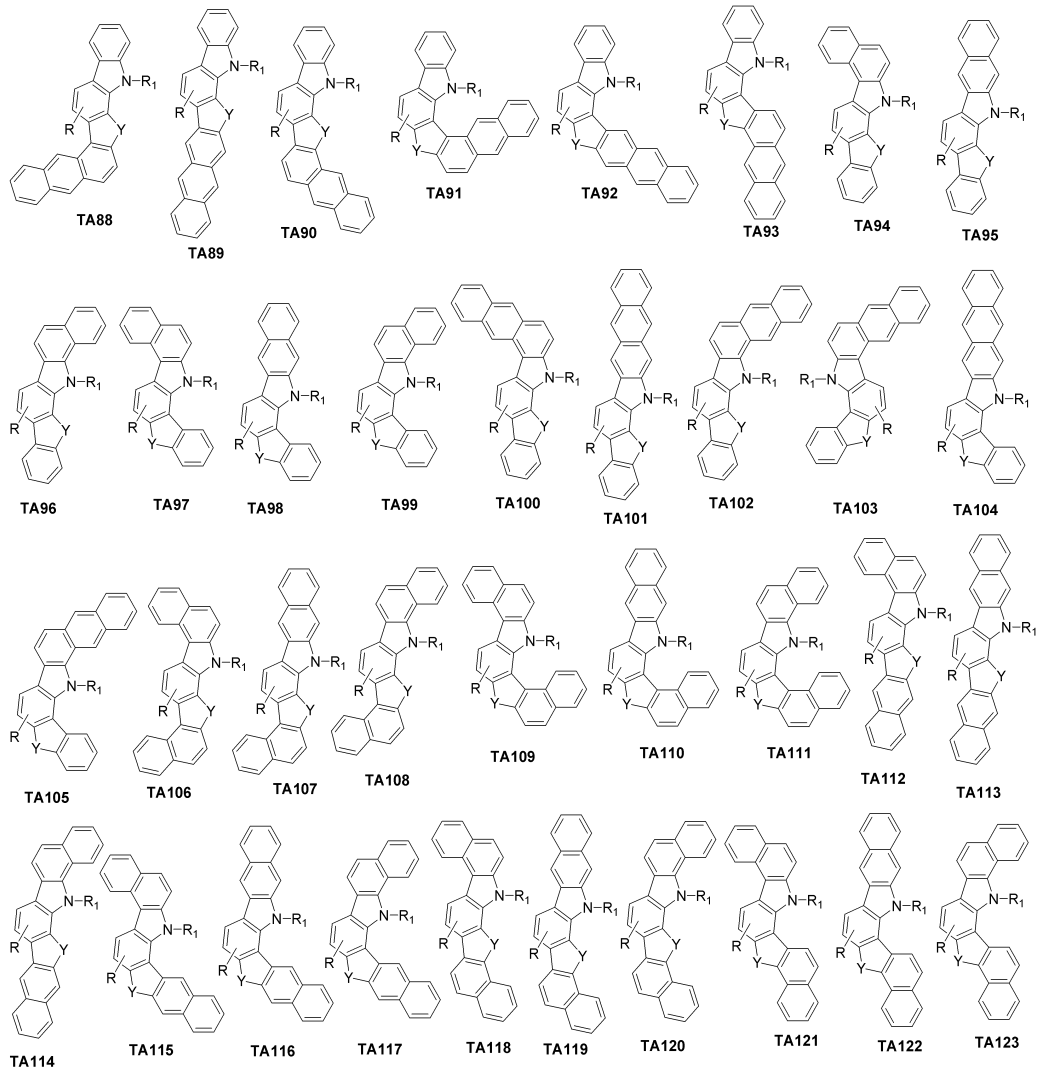
아진일, 테트라진일, 트리아졸릴, 테트라졸릴, 퓨라진일, 피리딜, 피라진일, 피리미딘일, 피리다진일 등의 단환 헤테로아릴, 벤조퓨란일, 벤조티오펜일, 이소벤조퓨란일, 벤조이미다졸릴, 벤조티아졸릴, 벤조이소티아졸릴, 벤조이속사졸릴, 벤조옥사졸릴, 이소인돌릴, 인돌릴, 인다졸릴, 벤조티아디아졸릴, 퀴놀릴, 이소퀴놀릴, 신놀리닐, 퀴나졸리닐, 퀴녹살리닐, 카바졸릴, 페난트리딘일, 벤조디옥솔릴 등의 다환식 헤테로아릴 및 이들의 상응하는 N-옥사이드(예를 들어, 피리딜 N-옥사이드, 퀴놀릴 N-옥사이드), 이들의 4차 염 등을 포함하지만, 이에 한정되지 않는다.

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





[0023]

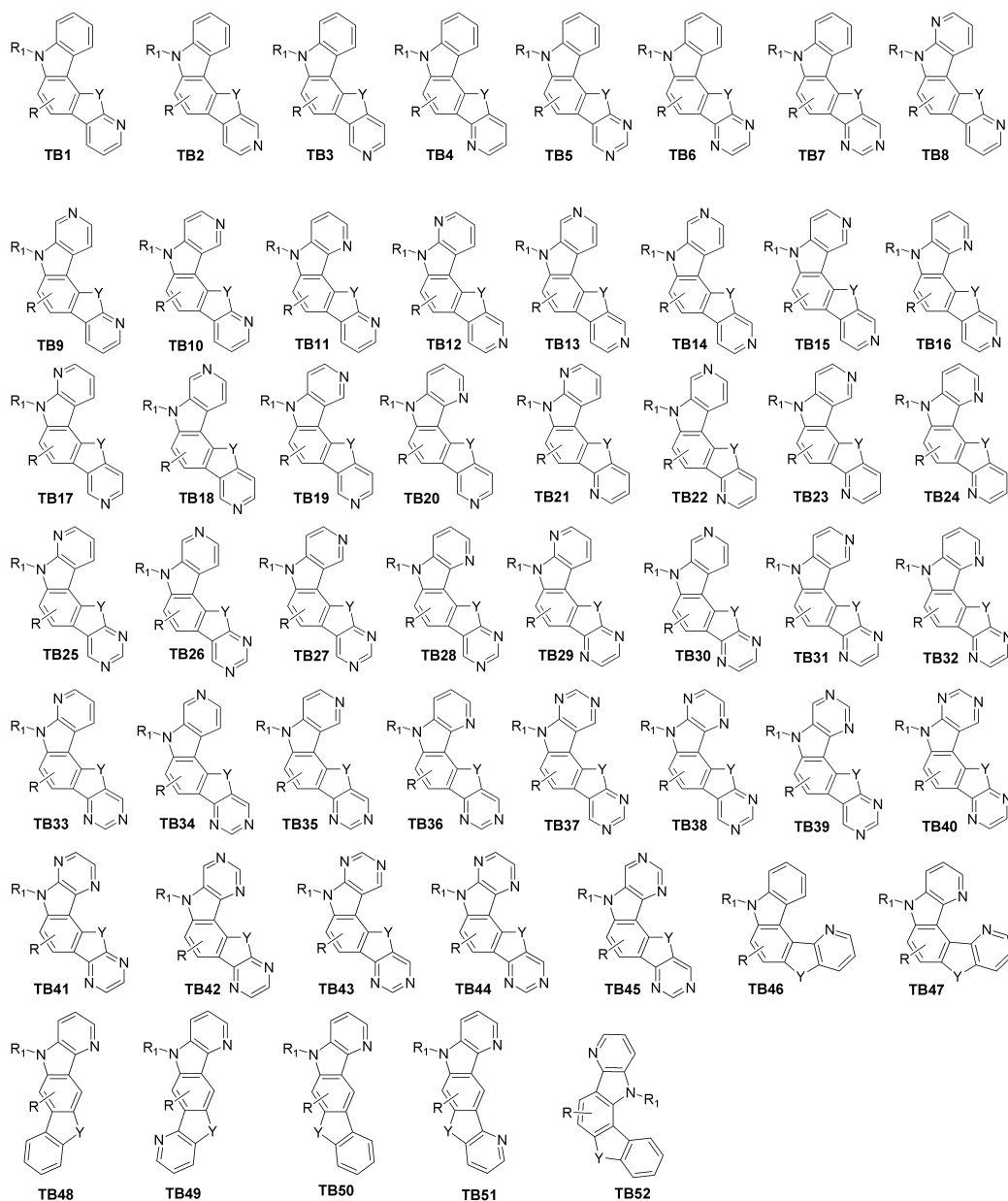


[0024]

[0025]

[상기 Y는 $C(R_2)(R_3)$ 또는 $Si(R_4)(R_5)$ 이며; R, R_1 내지 R_5 는 상기 화학식 1 내지 6에서의 정의와 동일하다.]

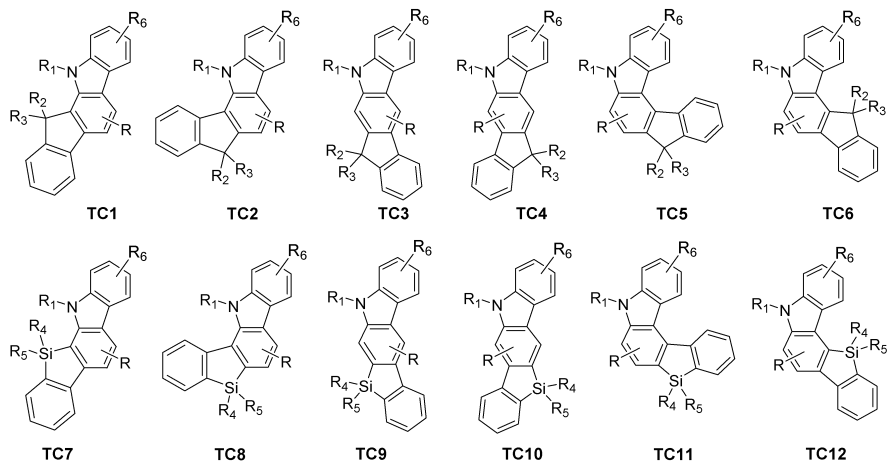
[0026] 또한, 본 발명의 유기 발광 화합물은 하기 구조의 화합물로 예시될 수 있다.



[0027]

[0028] [상기 Y는 C(R₂)(R₃) 또는 Si(R₄)(R₅)이며; R, R₁ 내지 R₅는 상기 화학식 1 내지 6에서의 정의와 동일하다.]

[0029] 또한, 본 발명의 유기 발광 화합물은 하기 구조의 화합물로 예시될 수 있다.



[0030]

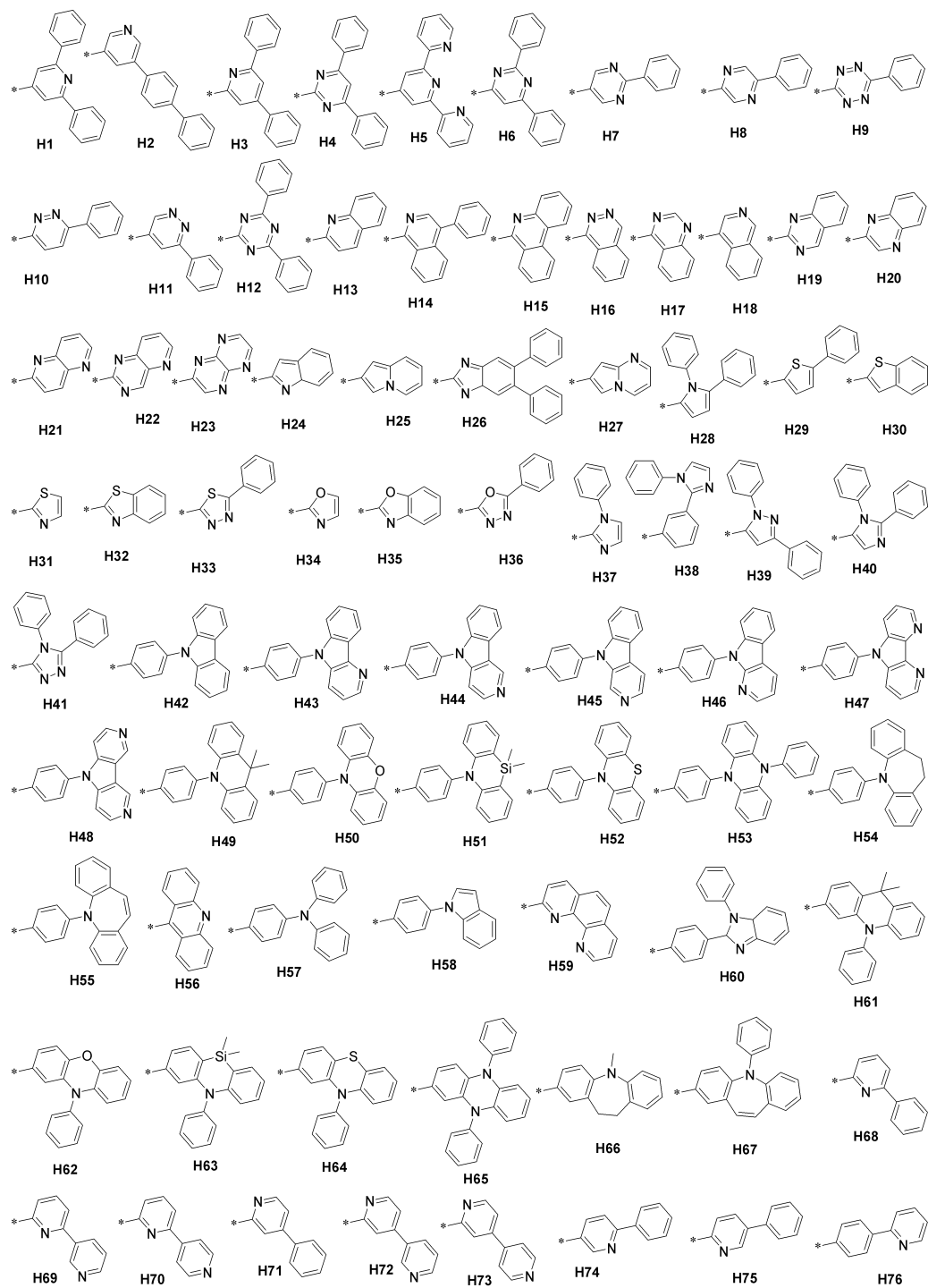
[0031] [상기 R, R₁ 내지 R₆는 상기 화학식 1 내지 6에서의 정의와 동일하다.]

[0032]

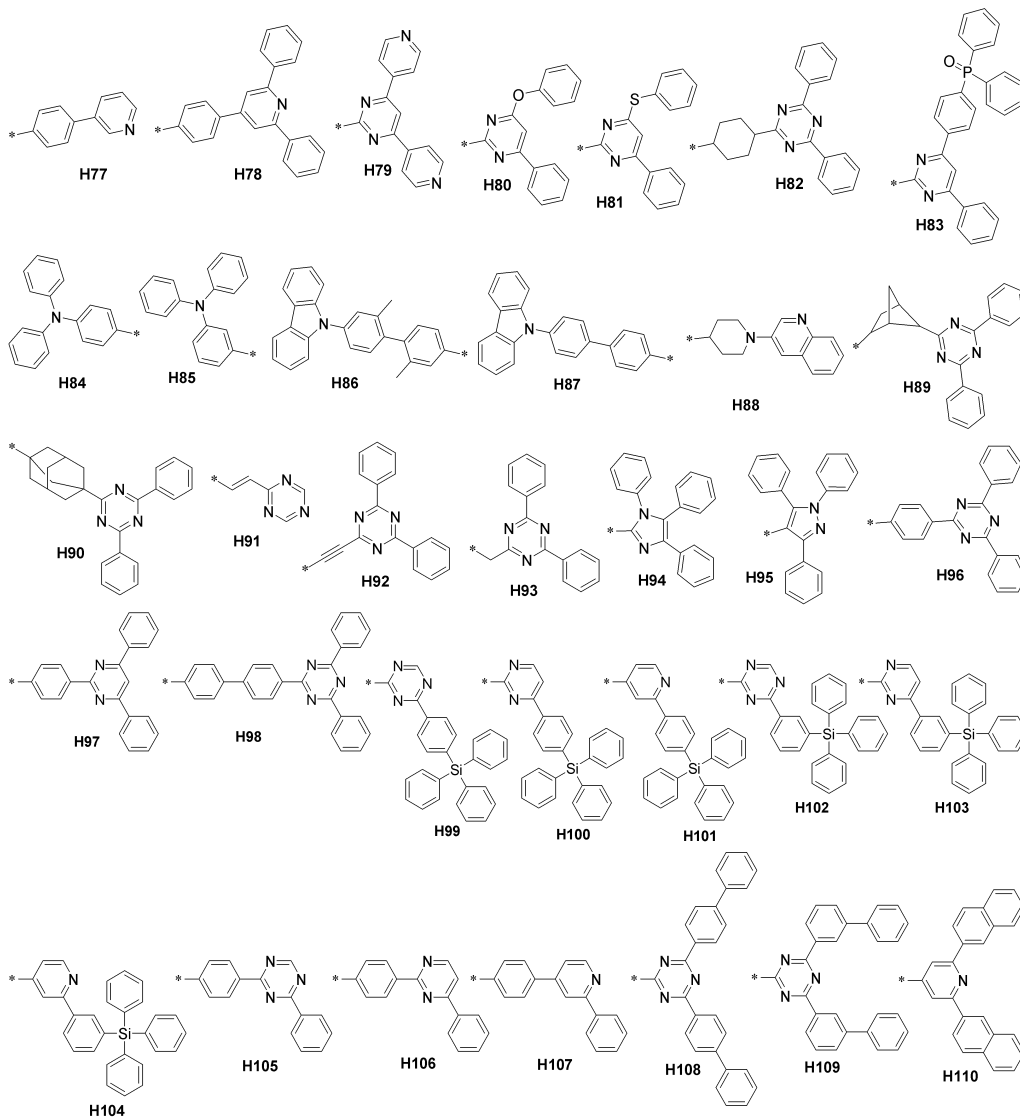
더욱 구체적으로, 상기 R 및 R₂ 내지 R₅는 서로 독립적으로 수소, 할로젠, 메틸, 에틸, 프로필, 부틸, 펜틸, 헥실, 에틸헥실, 헵틸, 옥틸 등의 알킬, 페닐, 나프틸, 플루오레닐, 바이페닐, 페난트릴, 터페닐, 피레닐, 퍼틸레닐, 스피로바이플루오레닐, 플루오란테닐, 크리세닐, 트리페닐레닐 등의 아릴로부터 선택되어지나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0033]

더욱 구체적으로, 상기 R₁ 및 R₆는 서로 독립적으로 페닐, 1-나프틸, 2-나프틸이거나, 하기 구조에서 선택되는 치환기이나, 이에 한정되지는 않는다.



[0034]



[0035]

[0036]

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 발광 소자에 있어서, 상기 유기물층은 상기 화학식 1 내지 6에서 선택되는 유기 발광 화합물을 하나 이상 포함하는 것을 특징으로 한다.

[0037]

본 발명에 따른 유기 전계 발광 소자는 상기 유기물층이 발광층을 포함하며, 상기 발광층은 상기 화학식 1 내지 6에서 선택되는 유기 발광 화합물 하나 이상을 발광 호스트로 하여 하나 이상의 인광 도판트를 포함하며, 상기 발광 도판트는 특별히 제한되지 않는다.

[0038]

본 발명의 유기 전계 발광 소자에 있어서, 상기 화학식 1 내지 6에서 선택되는 유기 발광 화합물 하나 이상을 포함하고, 동시에 아릴아민계 화합물 또는 스티릴아릴아민계 화합물로 이루어진 군으로부터 선택된 하나 이상의 화합물을 더 포함할 수 있다.

[0039]

또한, 본 발명의 유기 발광 소자에 있어서, 유기물층에 상기 화학식 1 내지 6에서 선택되는 유기 발광 화합물 하나 이상 이외에 1족, 2족, 4주기, 5주기 전이금속, 란타넘계열금속 및 d-전이원소의 유기금속으로 이루어진 군 으로부터 선택되는 하나 이상의 금속 또는 착체화합물을 더 포함할 수도 있고, 상기 유기물층은 발광층 및 전하 생성층을 포함할 수 있다.

[0040]

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

발명의 효과

[0041]

본 발명에 따른 유기 발광 화합물은 OLED 소자에서 유기 발광 재료의 호스트 재료로 사용되어 기존 호스트 재료

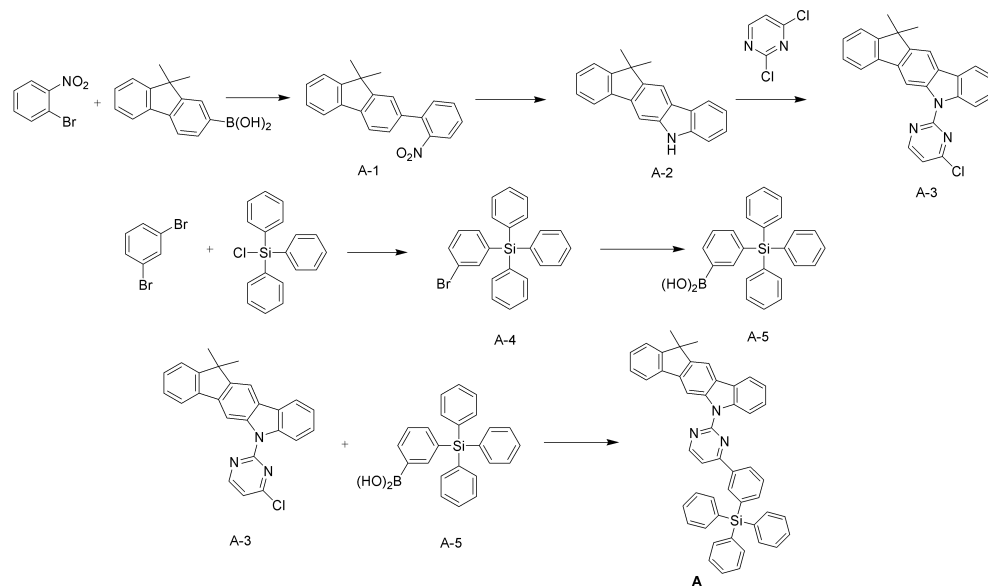
에 비해 발광효율이 좋고 재료의 수명특성이 뛰어나 소자의 구동수명이 매우 양호한 OLED를 제조할 수 있는 장점이 있다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

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

[제조예]

[제조예 1] 화합물 A의 제조



화합물 A-1의 제조

1-브로모나이트로벤젠 16g(74.25mmol), 9,9-다이메틸-9H-플루오렌-2-일보론산 23g(96.60mmol), Pd(PPh₃)₄ 4.2g(3.63mmol), 2M K₂CO₃ 수용액 111mL, EtOH 100mL 및 톨루엔 200mL를 혼합한 후 120℃로 가열시키면서 3시간 교반하였다. 반응이 끝나면 증류수로 씻어주고 EA로 추출한 뒤 유기층을 MgSO₄로 건조시킨 후 회전 증발기로 용매를 제거한 후 컬럼으로 정제하여 화합물 A-1 22g(95%)를 얻었다.

화합물 A-2의 제조

화합물 A-1 24g(76.10mmol), 트리에틸포스파이트 200mL 및 1,2-다이클로로벤젠 200mL를 혼합한 후 180℃로 가열하여 12시간 교반하였다. 반응이 끝나면 디스틸레이션(distillation) 장치를 이용해서 미반응 트리에틸포스파이트와 1,2-다이클로로벤젠을 제거한 후, 증류수로 씻어주고 EA로 추출한 뒤 유기층을 MgSO₄로 건조시켰다. 회전 증발기로 용매를 제거한 후 컬럼으로 정제하여 화합물 A-2 7g(33%)를 얻었다.

화합물 A-3의 제조

NaH(60%) 1.15g(28.90mmol)에 DMF 10mL를 가하고 실온에서 교반하였다. 화합물 A-2 6.3g(28.98mmol)를 DMF 50mL에 녹인 후 NaH가 들어있는 반응용기에 천천히 첨가하였다. 1시간동안 실온에서 교반 후, 여기에 2,4-디클로로피리미딘 4.9g(33.34mmol)를 DMF 50mL에 녹여서 천천히 첨가하였다. 5시간 반응 후 H₂O 50mL를 첨가하였다. 생성된 고체를 여과시킨 후 MC에 녹여서, 추출한 뒤 유기층을 MgSO₄로 건조시켰다. 회전 증발기로 용매를 제거한 후 컬럼으로 정제하여 화합물 A-3 4g(45%)를 얻었다.

화합물 A-4의 제조

1,3-디브로모벤젠 20g(84.77mmol)을 반응용기에 넣고 진공 상태에서 질소 분위기로 만들고, THF 500mL를 가하고 -78℃에서 10분간 교반하였다. N-BuLi(2.5M) 33.9mL(84.77mmol)를 천천히 첨가한 후 -78℃에서 1시간 동안 교

반하였다. 클로로트리페닐실란 29.9g(107.72mmol)를 THF 100mL에 녹인 후 천천히 첨가하였다. 실온에서 12시간 교반한 후, 반응이 종결되면 증류수로 씻어주고 EA로 추출한 뒤 유기층을 $MgSO_4$ 로 건조시켰다. 회전 증발기로 용매를 제거한 후 MC와 MeOH로 재결정하여 화합물 A-4 62g(63%)를 얻었다.

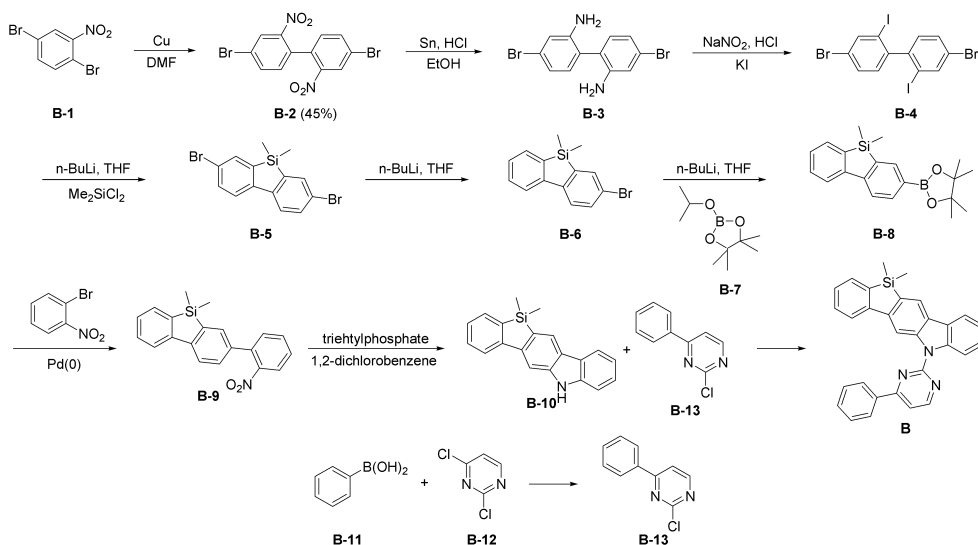
화합물 A-5의 제조

화합물 A-4 22.5g(0.10mol)을 반응용기에 넣고 진공 상태에서 질소 분위기로 만들고, THF 1.3L를 넣고 -78℃에서 10분간 교반하였다. N-BuLi (2.5M) 48.6mL(0.12mol)를 천천히 첨가한 후 -78℃에서 1시간 동안 교반하였다. 트리에틸보레이트 18mL(0.16mmol)를 천천히 첨가하였다. 실온에서 12시간 교반한 후, 반응이 종결되면 증류수로 씻어주고 EA로 추출한 뒤 유기층을 MgSO₄로 건조시켰다. 회전 증발기로 용매를 제거한 후 컬럼으로 정제하여 화합물 A-5 10g(45%)를 얻었다.

화합물 A의 제조

화합물 A-3 2.5g(6.31mmol), 화합물 A-5 3.6g(9.47mmol), $\text{Pd(PPh}_3)_4$ 730mg(0.63mmol), K_2CO_3 (2M) 19mL, EtOH 19mL 및 톨루엔 40mL를 혼합한 후 120°C로 가열시킨 후 3시간 교반하였다. 반응이 끝나면 증류수로 씻어주고 EA로 추출한 뒤 유기층을 MgSO_4 로 건조시킨 후 회전 증발기로 용매를 제거한 후 컬럼으로 정제하여 화합물 A 3.8g(88%)를 얻었다.

[제조예 2] 화합물 B의 제조



화합물 B-2의 제조

화합물 B-1 50.0g(179 mmol)을 DMF 200mL에 녹이고 구리분말 27.0g(424mmol)을 가하여 125℃에서 3시간 동안 교반하였다. 반응 혼합물을 실온으로 냉각하고 침전물을 여과하여 제거한 후 건조하였다. MeOH 500mL로 세척하여 화합물 B-2 27.1g(88%)를 얻었다.

화합물 B-3의 제조

화합물 B-2 15g(37.3mmol)를 에탄올 200mL에 녹이고 32%(w/w) HCl 수용액 120mL를 가하였다. 실온에서 주석 분말 17.6g(147mmol)를 10분동안 portion-wise하고 100℃에서 2시간동안 교반하였다. 실온으로 냉각하고 그 반응 혼합물을 얼음물에 부었다. 20%(w/w) NaOH 수용액 150mL를 사용하여 염기상태로 만들었다. 디에틸에테르로 추출하고 브린으로 세척한 후 건조한 후 에탄올로 재결정하여 화합물 B-3 9.2g(72%)을 얻었다.

화합물 B-4의 제조

0℃에서 화합물 B-3 8.5g(25mmol)이 들어있는 둥근 바닥 플라스크에 17%(w/w) HCl 수용액 85mL를 가하고 NaNO₂ 수용액[NaNO₂ 4.3g(62mmol)+ 물 15mL]을 첨가하였다. 30분 동안 교반하고 KI 수용액[KI 41.5g(250mmol)+ 물 15mL]을 가하였다. 1시간동안 실온에서 교반하고 60℃에서 3시간 동안 교반하였다. 포화된 KOH 용매로 중화시키

고 에틸아세테이트로 추출하고 포화 Na_2SO_3 로 씻어준 다음, 실리카 컬럼으로 정제하여 화합물 B-4 4g(29%)를 얻었다.

[0066] 화합물 B-5의 제조

[0067] 화합물 B-4 4g(7.1mmol)가 들어있는 둥근 바닥 플라스크에 아르곤 가스를 채우고 THF 30mL를 가하고 -78°C 로 냉각하였다. n-BuLi(2.5M in hexane) 6.2mL(15.6mmol)을 천천히 가하고 1시간동안 교반하였다. 디클로로디메틸 실란 2.0g(15.6mmol)을 가하고 12시간동안 교반하면서 천천히 실온으로 온도를 올린 후 EA로 추출하고 물로 세척하였다. 얻어진 유기층을 건조하고 실리카 컬럼으로 정제하여 화합물 B-5 2g(76%)를 얻었다.

[0068] 화합물 B-6의 제조

[0069] 화합물 B-5 2g(5.43mmol)가 들어있는 둥근 바닥 플라스크에 아르곤 가스를 채우고 THF 25mL를 가하고 -78°C 로 냉각하였다. n-BuLi(2.5M in hexane) 2.2mL(5.43mmol)을 천천히 가하고 1시간동안 교반하였다. 1M HCl 20mL를 가하고 2시간동안 교반하였다. 교반이 완료된 후 EA로 추출하고 물로 세척하였다. 얻어진 유기층을 건조하고 실리카 컬럼으로 정제하여 화합물 B-6 1.5g(96%)을 얻었다.

[0070] 화합물 B-8의 제조

[0071] 화합물 B-6 15g(51.9mmol)이 들어있는 둥근 바닥 플라스크에 아르곤 가스를 채우고 THF 300mL를 가하고 -78°C 로 냉각하였다. n-BuLi(2.5M in hexane) 20.8mL(51.9mmol)을 천천히 가하고 1시간동안 교반하였다. 화합물 B-7 335mg(62.3mmol)을 가하고 12시간동안 교반하면서 천천히 실온으로 온도를 올린 후 EA로 추출하고 물로 세척하였다. 얻어진 유기층을 건조하고 실리카 컬럼으로 정제하여 화합물 B-8 12g(69%)을 얻었다.

[0072] 화합물 B-9의 제조

[0073] 화합물 B-8 12g(35.7mmol)이 들어있는 둥근 바닥 플라스크에 2-브로모나이트로벤젠 8.65g(42.8mmol)과 $\text{Pd}(\text{PPh}_3)_4$ 1.24g(1.07mmol)을 넣고 아르곤 가스를 채웠다. 톨루엔 120mL과 에탄올 60mL, 2M K_2CO_3 60mL를 넣고 4시간동안 환류교반하였다. 실온으로 냉각하고 EA로 추출하고 물로 세척하였다. 얻어진 유기층을 건조하고 실리카 컬럼으로 정제하여 화합물 B-9 9.5g(80%)를 얻었다.

[0074] 화합물 B-10의 제조

[0075] 화합물 B-9 9.5g(28.7mmol)이 들어있는 둥근 바닥 플라스크에 아르곤 가스를 채우고 트리에틸포스파이트 100mL와 1,2-디클로로벤젠 500mL를 가하고 12시간 동안 환류교반하였다. 실온으로 냉각하고 EA로 추출하고 물로 세척하였다. 얻어진 유기층을 건조하고 실리카 컬럼으로 정제하여 화합물 B-10 7.2g(84%)를 얻었다.

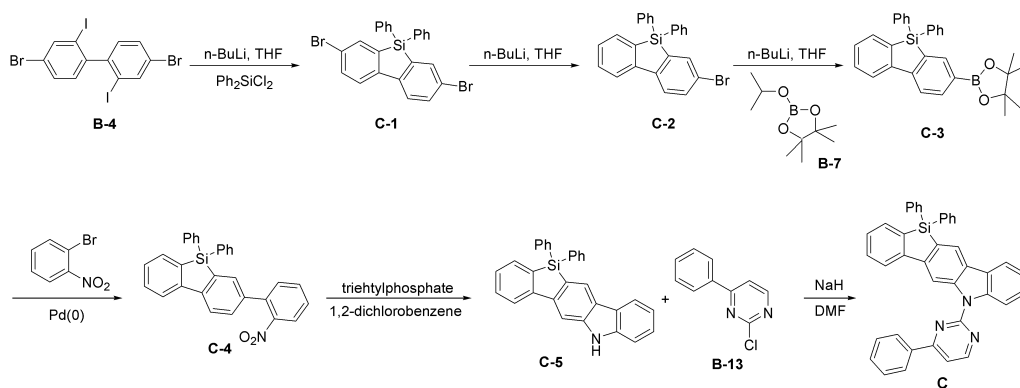
[0076] 화합물 B-13의 제조

[0077] 화합물 B-12 10g(67.1mmol)이 들어있는 둥근 바닥 플라스크에 화합물 B-11 9.8g(80.5mmol)과 $\text{Pd}(\text{PPh}_3)_4$ 2.33g(2.01mmol)을 넣고 아르곤 가스를 채웠다. 톨루엔 240mL과 에탄올 120mL, 2M K_2CO_3 120 mL를 넣고 4시간동안 환류교반하였다. 실온으로 냉각하고 EA로 추출하고 물로 세척하였다. 얻어진 유기층을 건조하고 실리카 컬럼으로 정제하여 화합물 B-13 11g(86%)를 얻었다.

[0078] 화합물 B의 제조

[0079] NaH 288mg(12mmol)과 DMF 100mL가 들어있는 둥근 바닥 플라스크에 화합물 B-10 3.0g(10.0mmol)을 DMF 200mL에 녹인 혼합물을 천천히 첨가하고 1시간동안 교반하였다. 화합물 B-13 1.5g(10mmol)을 DMF 200mL에 녹여서 천천히 가하고 12시간동안 실온에서 교반하였다. 반응혼합물을 여과하고 물과 MeOH로 씻고 건조하여 화합물 B 2.1g(46%)를 얻었다.

[0080] [제조예 3] 화합물 C의 제조



[0081]

[0082] 화합물 C-1의 제조

[0083] 화합물 B-4를 출발물질로 하여 디클로로디메틸실란 대신에 디클로로디페닐실란을 사용하는 것을 제외하고는 제조예 2의 화합물 B-5를 제조하는 방법과 동일한 방법으로 화합물 C-1 1.7g(50%)를 얻었다.

[0084] 화합물 C의 제조

[0085] 화합물 C-1을 출발물질로 하여 제조예 2의 화합물 B-6, B-8, B-9, B-10 및 B를 제조하는 방법과 동일한 방법으로 화합물 C 347mg(55%)를 얻었다.

[0086] 상기 제조예 1 내지 3의 방법을 이용하여 유기 발광 화합물(TA, TB 및 TC)을 제조하였으며, 표 1 내지 표 4에 제조된 유기 발광 화합물들의 치환기, ¹H NMR 및 MS/FAB를 나타내었다.

[0087] [표 1]

TC4

화합물	R ₁	R ₂	R ₃	R ₆	¹ H NMR(CDCl ₃ , 200 MHz)	MS/FAB	
						found	calculated
TC4-1	H1	메틸	메틸	페닐	δ = 1.72(6H, s), 7.05(2H, m), 7.24(1H, m), 7.41~7.52(8H, m), 7.54(5H, s), 7.61(1H, m), 7.77(1H, m), 8(1H, m), 8.09(1H, m), 8.12(1H, s), 8.18(1H, m), 8.3(4H, m)	588.74	588.26
TC4-4	H4	메틸	메틸	페닐	δ = 1.72(6H, s), 7.24(1H, m), 7.41~7.44(4H, m), 7.51~7.52(8H, m), 7.54(1H, s), 7.61(1H, m), 7.77~7.79(5H, m), 8(1H, m), 8.09(1H, m), 8.12(1H, s), 8.18(1H, m), 8.63(1H, s)	589.73	589.25
TC4-12	H12	메틸	메틸	페닐	δ = 1.72(6H, s), 7.24(1H, m), 7.41~7.44(4H, m), 7.51~7.52(8H, m), 7.54(1H, s), 7.61(1H, m), 7.77(1H, m), 8(1H, m), 8.09(1H, m), 8.12(1H, s), 8.18(1H, m), 8.28(4H, m)	590.71	590.25
TC4-19	H19	페닐	페닐	H	δ = 7.11(4H, m), 7.24~7.26(4H, m), 7.33(5H, m), 7.44(1H, m), 7.5(1H, s), 7.61(1H, m), 7.8(1H, m), 7.94(1H, m), 8.05(2H, s), 8.05~8.09(2H, m), 8.16(1H, m), 8.55(1H, m), 9.74(1H, m)	535.64	535.20
TC4-26	H26	페닐	페닐	H	δ = 2.2(1H, m), 6.01(1H, s), 6.43(1H, s), 7.11~7.17(8H, m), 7.24~7.26(4H, m), 7.33(7H, m), 7.4~7.44(5H, m), 7.5(1H, s), 7.61(1H, m), 8.05(1H, s), 8.09~8.11(2H, m), 8.55(1H, m)	675.82	675.27
TC4-32	H32	페닐	페닐	H	δ = 7.11(4H, m), 7.24~7.26(4H, m), 7.33(5H, m), 7.44(1H, m), 7.5(1H, s), 7.53(2H, m), 7.61(1H, m), 7.94(1H, m), 8.01(1H, m), 8.05(1H, s), 8.09(1H, m), 8.18(1H, m), 8.55(1H, m)	540.68	540.17
TC4-36	H36	페닐	페닐	페닐	δ = 7.11(4H, m), 7.24~7.26(3H, m), 7.33(4H, m), 7.41~7.44(3H, m), 7.5(1H, s), 7.51~7.52(6H, m), 7.61(1H, m), 7.77(1H, m), 8(1H, m), 8.05(3H, s), 8.05~8.09(1H, m), 8.18(1H, m)	627.73	627.23
TC4-41	H41	메틸	메틸	페닐	δ = 1.72(2H, s), 7.24(1H, m), 7.41~7.52(12H, m), 7.54(1H, s), 7.58~7.61(3H, m), 7.77(1H, m), 8(1H, m), 8.09(1H, m), 8.12(1H, s), 8.18(1H, m), 8.28(2H, m)	578.70	578.25
TC4-42	H42	메틸	메틸	페닐	δ = 1.72(2H, s), 7.24~7.33(4H, m), 7.41~7.52(7H, m), 7.54(1H, s), 7.61~7.63(6H, m), 7.77(1H, m), 7.94~8(2H, m), 8.09(1H, m), 8.12(2H, s), 8.18(1H, m), 8.55(1H, m)	600.75	600.26
TC4-44	H44	메틸	메틸	페닐	δ = 1.72(2H, s), 7.24~7.25(2H, m), 7.33(1H, m), 7.41~7.44(2H, m), 7.51~7.52(5H, m), 7.54(1H, s), 7.61~7.62(5H, m), 7.77(1H, m), 7.94~8(2H, m), 8.09(1H, m), 8.12(1H, s), 8.18(1H, m), 8.43(1H, m), 8.55(1H, m), 9.34(1H, m)	601.74	601.25
TC4-48	H48	메틸	메틸	페닐	δ = 1.72(6H, s), 7.24(1H, m), 7.41~7.44(2H, m), 7.51~7.52(6H, m), 7.54(1H, s), 7.61~7.62(5H, m), 7.77(1H, m), 8(1H, m), 8.09(1H, m), 8.12(1H, s), 8.18(1H, m), 8.43(2H, m), 9.34(2H, m)	602.73	602.25

[0088]

TC4-49	H49	페닐	페닐	H	$\delta = 1.72(6H, s), 6.55(2H, m), 6.63(2H, m), 6.73(2H, m), 7.02\sim 7.05(4H, m), 7.11(4H, m), 7.24\sim 7.26(4H, m), 7.33\sim 7.37(7H, m), 7.44(1H, m), 7.5(1H, s), 7.61(1H, m), 7.94(1H, m), 8.05(1H, s), 8.09(1H, m), 8.55(1H, m)$	690.87	690.30
TC4-54	H54	페닐	페닐	H	$\delta = 2.88(4H, m), 6.58\sim 6.63(4H, m), 6.76(2H, m), 7.02\sim 7.04(4H, m), 7.11(4H, m), 7.24\sim 7.26(4H, m), 7.33\sim 7.37(7H, m), 7.44(1H, m), 7.5(1H, s), 7.61(1H, m), 7.94(1H, m), 8.05(1H, s), 8.09(1H, m), 8.55(1H, m)$	676.84	676.29
TC4-58	H58	메틸	메틸	페닐	$\delta = 1.72(6H, s), 6.52(1H, m), 6.87(1H, m), 7.24(1H, m), 7.33(1H, m), 7.41\sim 7.44(2H, m), 7.51\sim 7.52(4H, m), 7.54(1H, s), 7.6\sim 7.62(6H, m), 7.77(1H, m), 7.93\sim 8(3H, m), 8.09(1H, m), 8.12(1H, s), 8.18(1H, m)$	550.69	550.24
TC4-64	H64	메틸	메틸	페닐	$\delta = 1.72(6H, s), 6.63(2H, m), 6.81(1H, m), 6.97\sim 7(2H, m), 7.07(1H, m), 7.16\sim 7.24(7H, m), 7.41\sim 7.44(2H, m), 7.51\sim 7.52(4H, m), 7.54(1H, s), 7.61(1H, m), 7.77(1H, m), 8(1H, m), 8.09(1H, m), 8.12(1H, s), 8.18(1H, m)$	632.81	632.23
TC4-70	H70	페닐	페닐	H	$\delta = 7.11(4H, m), 7.24\sim 7.26(4H, m), 7.32\sim 7.33(6H, m), 7.44(1H, m), 7.5(1H, s), 7.61(1H, m), 7.72(1H, m), 7.86(1H, m), 7.94(1H, m), 8.05(1H, s), 8.09(1H, m), 8.5\sim 8.55(3H, m), 8.78(2H, m)$	561.67	561.22
TC4-79	H79	메틸	메틸	페닐	$\delta = 1.72(6H, s), 7.24(1H, m), 7.41\sim 7.44(2H, m), 7.51\sim 7.52(4H, m), 7.54(1H, s), 7.61(1H, m), 7.77(1H, m), 7.99\sim 8(5H, m), 8.09(1H, m), 8.12(1H, s), 8.18(1H, m), 8.75(5H, m)$	591.70	591.24
TC4-83	H83	메틸	메틸	H	$\delta = 1.72(6H, s), 7.24\sim 7.25(2H, m), 7.33(1H, m), 7.41\sim 7.51(10H, m), 7.54(1H, s), 7.61(1H, m), 7.77\sim 7.83(10H, m), 7.94(1H, m), 8.09(1H, m), 8.12(1H, s), 8.55(1H, m), 8.63(1H, s)$	713.80	713.26
TC4-86	H86	메틸	메틸	H	$\delta = 1.72(6H, s), 2.59(6H, s), 7.24\sim 7.33(6H, m), 7.44\sim 7.5(4H, m), 7.54(1H, s), 7.61\sim 7.67(6H, m), 7.94(2H, m), 8.09(1H, m), 8.12(2H, s), 8.55(2H, m)$	628.80	628.29
TC4-89	H89	메틸	메틸	페닐	$\delta = 1.72(6H, s), 1.88\sim 1.91(4H, m), 2.3\sim 2.33(2H, m), 3.22(1H, m), 3.7(1H, m), 7.24(1H, m), 7.39\sim 7.44(5H, m), 7.51\sim 7.52(8H, m), 7.54(1H, s), 7.61(1H, m), 7.77(1H, m), 8.09(1H, m), 8.12(1H, s), 8.27\sim 8.28(5H, m)$	670.84	670.31
TC4-91	H91	메틸	메틸	페닐	$\delta = 1.72(6H, s), 5.6(1H, m), 6.9(1H, m), 7.24(1H, m), 7.41\sim 7.44(4H, m), 7.51\sim 7.52(8H, m), 7.54(1H, s), 7.61(1H, m), 8(1H, m), 8.09(1H, m), 8.12(1H, s), 8.18\sim 8.2(2H, m), 8.28(4H, m)$	616.75	616.26
TC4-93	H93	메틸	메틸	페닐	$\delta = 1.72(6H, s), 5.11(2H, s), 7.24(1H, m), 7.39\sim 7.44(5H, m), 7.51\sim 7.52(8H, m), 7.54(1H, s), 7.61(1H, m), 7.77(1H, m), 8.09(1H, m), 8.12(1H, s), 8.27\sim 8.28(5H, m)$	604.74	604.26
TC4-96	H96	메틸	메틸	H	$\delta = 1.72(6H, s), 7.24\sim 7.25(2H, m), 7.33(1H, m), 7.41\sim 7.44(3H, m), 7.51(4H, m), 7.54(1H, s), 7.61(1H, m), 7.68(2H, m), 7.79(2H, m), 7.94(1H, m), 8.09(1H, m), 8.12(1H, s), 8.28(4H, m), 8.55(1H, m)$	590.71	590.25
TC4-97	H97	메틸	메틸	페닐	$\delta = 1.72(6H, s), 7.24(1H, m), 7.41\sim 7.44(4H, m), 7.51\sim 7.52(8H, m), 7.54(1H, s), 7.61(1H, m), 7.68(2H, m), 7.77\sim 7.79(7H, m), 8(1H, m), 8.09(1H, m), 8.12(1H, s), 8.18(1H, m), 8.23(1H, s)$	665.82	665.28

[0089]

TC4-98	H98	메틸	메틸	H	$\delta = 1.72(6H, s), 7.24\sim 7.25(4H, m), 7.33(1H, m), 7.41\sim 7.44(3H, m), 7.51(4H, m), 7.54(1H, s), 7.61(1H, m), 7.68(2H, m), 7.79\sim 7.85(4H, m), 7.94(1H, m), 8.09(1H, m), 8.12(1H, s), 8.28(4H, m), 8.55(1H, m)$	666.81	666.28
TC4-99	H99	메틸	메틸	H	$\delta = 1.72(6H, s), 7.24\sim 7.29(2H, m), 7.37(6H, m), 7.44\sim 7.52(10H, m), 7.54(1H, s), 7.55(3H, m), 7.61\sim 7.63(2H, m), 7.89(2H, m), 8.09\sim 8.12(2H, m), 8.59(1H, s), 8.85(1H, s)$	696.91	696.27
TC4-100	H100	메틸	메틸	H	$\delta = 1.72(6H, s), 7.24\sim 7.29(2H, m), 7.37(6H, m), 7.44\sim 7.52(10H, m), 7.54(1H, s), 7.55(3H, m), 7.61\sim 7.63(2H, m), 7.89(2H, m), 7.96(1H, m), 8.09\sim 8.12(2H, m), 8.57(1H, m), 8.85(1H, s)$	695.92	695.28
TC4-101	H101	메틸	메틸	H	$\delta = 1.72(6H, s), 7.24\sim 7.31(3H, m), 7.37(6H, m), 7.44\sim 7.5(9H, m), 7.54(1H, s), 7.55(5H, m), 7.61\sim 7.63(2H, m), 8.09\sim 8.12(2H, m), 8.38\sim 8.4(3H, m), 8.85(1H, s)$	694.94	694.28
TC4-102	H102	메틸	메틸	H	$\delta = 1.72(6H, s), 7.24\sim 7.29(2H, m), 7.37\sim 7.5(15H, m), 7.54(1H, s), 7.55(3H, m), 7.61\sim 7.63(3H, m), 7.76(1H, m), 8.09\sim 8.12(2H, m), 8.38(1H, m), 8.59(1H, s), 8.85(1H, s)$	696.91	696.27
TC4-103	H103	메틸	메틸	H	$\delta = 1.72(6H, s), 7.24\sim 7.29(2H, m), 7.37\sim 7.5(15H, m), 7.54(1H, s), 7.55(3H, m), 7.61\sim 7.63(3H, m), 7.76(1H, m), 7.89(1H, m), 7.96(1H, m), 8.09\sim 8.12(2H, m), 8.57(1H, m), 8.85(1H, s)$	695.92	695.28
TC4-104	H104	메틸	메틸	H	$\delta = 1.72(6H, s), 7.24\sim 7.31(3H, m), 7.37(6H, m), 7.44\sim 7.5(10H, m), 7.54(1H, s), 7.55(3H, m), 7.61\sim 7.64(3H, m), 8.09\sim 8.12(2H, m), 8.27(1H, m), 8.38\sim 8.4(2H, m), 8.85(1H, s)$	694.94	694.28
TC4-105	H105	메틸	메틸	H	$\delta = 1.72(6H, s), 7.24\sim 7.29(2H, m), 7.41\sim 7.51(5H, m), 7.54(1H, s), 7.61\sim 7.68(4H, m), 7.79(2H, m), 8.09\sim 8.12(2H, m), 8.28(2H, m), 8.31(1H, s), 8.85(1H, s)$	514.62	514.22
TC4-106	H106	메틸	메틸	H	$\delta = 1.72(6H, s), 7.24\sim 7.29(2H, m), 7.41\sim 7.51(5H, m), 7.54(1H, s), 7.56\sim 7.68(5H, m), 7.79(4H, m), 8.09\sim 8.12(2H, m), 8.54(1H, m), 8.85(1H, s)$	513.63	513.22
TC4-107	H107	메틸	메틸	H	$\delta = 1.72(6H, s), 7.24\sim 7.29(2H, m), 7.44\sim 7.5(3H, m), 7.54(3H, s), 7.61\sim 7.68(4H, m), 7.79(2H, m), 8(1H, m), 8.09\sim 8.12(2H, m), 8.3(2H, m), 8.44(1H, m), 8.6(1H, m), 8.85(1H, s)$	512.64	512.23
TC4-108	H108	메틸	메틸	H	$\delta = 1.72(6H, s), 7.24\sim 7.29(6H, m), 7.41\sim 7.52(12H, m), 7.54(1H, s), 7.61\sim 7.63(2H, m), 7.85(4H, m), 8.09\sim 8.12(2H, m), 8.85(1H, s)$	666.81	666.28
TC4-109	H109	메틸	메틸	H	$\delta = 1.72(6H, s), 7.24\sim 7.29(2H, m), 7.41\sim 7.52(14H, m), 7.54(1H, s), 7.57\sim 7.63(4H, m), 7.7\sim 7.75(4H, m), 8.09\sim 8.12(2H, m), 8.63(1H, s), 8.85(1H, s)$	665.82	665.28
TC4-110	H110	메틸	메틸	H	$\delta = 1.72(6H, s), 7.05(2H, m), 7.24\sim 7.29(2H, m), 7.44\sim 7.5(2H, m), 7.54(1H, s), 7.59\sim 7.63(6H, m), 7.95\sim 8(6H, m), 8.09\sim 8.12(2H, m), 8.38(2H, m), 8.85(3H, s)$	612.76	612.26

[0091] [표 2]

<div></div>						
화합물	R ₁	R ₄	R ₅	¹ H NMR(CDCl ₃ , 200 MHz)	MS/FAB	
					found	calculated
TC10-3	H3	페닐	페닐	δ = 7.11(1H, m), 7.25(1H, m), 7.33(2H, m), 7.37~7.47(19H, m), 7.61(1H, m), 7.72(1H, s), 7.89(2H, s), 7.89~7.94(1H, m), 8.3(2H, m), 8.55~8.6(2H, m)	652.86	652.23
TC10-5	H5	페닐	페닐	δ = 7.14(2H, m), 7.25(1H, m), 7.33~7.37(6H, m), 7.46~7.55(7H, m), 7.61(1H, m), 7.7(2H, m), 7.72(1H, s), 7.89(2H, s), 7.89~7.94(1H, m), 8.15(2H, m), 8.53~8.55(3H, m), 9.3(2H, m)	654.83	654.22
TC10-6	H6	페닐	페닐	δ = 7.25(1H, m), 7.32(1H, s), 7.33~7.55(19H, m), 7.61(1H, m), 7.72(1H, s), 7.79(2H, m), 7.89(2H, s), 7.89~7.94(1H, m), 8.28(2H, m), 8.55(1H, m)	653.84	653.23
TC10-11	H11	페닐	페닐	δ = 7.25(1H, m), 7.33~7.55(16H, m), 7.61(1H, m), 7.72(1H, s), 7.84(1H, m), 7.89(2H, s), 7.89~7.94(1H, m), 8.05(2H, m), 8.55(1H, m), 8.98(1H, m)	577.75	577.20
TC10-14	H14	페닐	페닐	δ = 7.25(1H, m), 7.33(2H, m), 7.37~7.46(18H, m), 7.61(1H, m), 7.72(1H, s), 7.76(1H, m), 7.89(2H, s), 7.89~7.94(2H, m), 8.43(1H, s), 8.55(1H, m)	626.82	626.22
TC10-28	H28	페닐	페닐	δ = 6.47(1H, m), 6.58(1H, m), 7.25(1H, m), 7.33(2H, m), 7.37(4H, m), 7.41(1H, m), 7.45~7.51(15H, m), 7.72(1H, s), 7.79(2H, m), 7.89(2H, s), 7.89~7.94(1H, m), 8.55(1H, m)	640.85	640.23
TC10-33	H33	페닐	페닐	δ = 7.25(1H, m), 7.33~7.55(16H, m), 7.61(1H, m), 7.72(1H, s), 7.89(2H, s), 7.89~7.94(1H, m), 8.03(2H, m), 8.55(1H, m)	583.78	583.15
TC10-40	H40	페닐	페닐	δ = 7.25(1H, m), 7.33~7.37(6H, m), 7.4(1H, s), 7.41(1H, m), 7.45~7.51(15H, m), 7.72(1H, s), 7.89(2H, s), 7.89~7.94(1H, m), 8.28(2H, m), 8.55(1H, m)	641.83	641.23
TC10-52	H52	페닐	페닐	δ = 6.63(2H, m), 6.97(2H, m), 7.16~7.25(7H, m), 7.33~7.37(8H, m), 7.46~7.55(7H, m), 7.61(1H, m), 7.72(1H, s), 7.89(2H, s), 7.89~7.94(1H, m), 8.55(1H, m)	696.93	696.21
TC10-60	H60	페닐	페닐	δ = 3.3(1H, m), 3.9(1H, s), 5.78(1H, m), 6.07(1H, m), 6.41(1H, m), 6.79(1H, m), 6.94(2H, m), 7.23~7.27(7H, m), 7.33~7.37(6H, m), 7.46~7.55(7H, m), 7.61(1H, m), 7.72(1H, s), 7.86(1H, m), 7.89(2H, s), 7.89~7.94(1H, m), 8.55(1H, m)	693.91	693.26
TC10-63	H63	페닐	페닐	δ = 0.66(6H, s), 6.63(2H, m), 6.73~6.74(3H, m), 6.81(1H, m), 7.08(1H, m), 7.2~7.37(12H, m), 7.46~7.55(7H, m), 7.61(1H, m), 7.72(1H, s), 7.89(2H, s), 7.89~7.94(1H, m), 8.55(1H, m)	723.02	722.26

[0092]

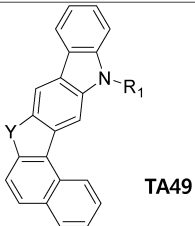
TC10-72	H72	페닐	페닐	$\delta = 7.25(1H, m), 7.33\sim 7.37(6H, m), 7.46\sim 7.61(10H, m), 7.72(1H, s), 7.89(2H, s), 7.89\sim 7.94(1H, m), 8.4\sim 8.47(3H, m), 8.55(1H, m), 8.7(1H, m), 9.24(1H, m)$	577.75	577.20
TC10-77	H77	페닐	페닐	$\delta = 7.25(1H, m), 7.33\sim 7.37(6H, m), 7.46\sim 7.61(9H, m), 7.68(2H, m), 7.72(1H, s), 7.79(2H, m), 7.89(2H, s), 7.89\sim 7.94(1H, m), 8.42(1H, m), 8.55(1H, m), 8.7(1H, m), 9.24(1H, m)$	576.76	576.20
TC10-80	H80	페닐	페닐	$\delta = 6.95\sim 7.01(3H, m), 7.25(1H, m), 7.28\sim 7.41(18H, m), 7.56(1H, s), 7.61(1H, m), 7.72(1H, s), 7.79(2H, m), 7.89(2H, s), 7.89\sim 7.94(1H, m), 8.55(1H, m)$	669.84	669.22
TC10-82	H82	페닐	페닐	$\delta = 1.73(4H, m), 1.88(4H, m), 2.72(1H, m), 3.64(1H, m), 7.33(1H, m), 7.37(4H, m), 7.41\sim 7.51(17H, m), 7.72(1H, s), 7.89(2H, s), 8.17(1H, m), 8.28(4H, m)$	736.98	736.30
TC10-88	H88	페닐	페닐	$\delta = 1.94(2H, m), 2.96(2H, m), 3.7(1H, m), 7.1(1H, m), 7.33\sim 7.46(18H, m), 7.72(1H, s), 7.86(1H, m), 7.89(2H, s), 7.89\sim 7.9(1H, m), 8.17(1H, m), 8.48(1H, m)$	633.85	633.26
TC10-92	H92	페닐	페닐	$\delta = 7.25(1H, m), 7.33\sim 7.55(19H, m), 7.61(1H, m), 7.72(1H, s), 7.89(2H, s), 7.89\sim 7.94(1H, m), 8.28(4H, m), 8.55(1H, m)$	678.85	678.22
TC10-94	H94	페닐	페닐	$\delta = 7.25(1H, m), 7.33(2H, m), 7.37(4H, m), 7.41(2H, m), 7.45(1H, m), 7.46\sim 7.51(18H, m), 7.72(1H, s), 7.79(2H, m), 7.89(2H, s), 7.89\sim 7.94(1H, m), 8.55(1H, m)$	717.93	717.26
TC10-99	H99	페닐	페닐	$\delta = 7.29\sim 7.37(12H, m), 7.46\sim 7.55(19H, m), 7.61\sim 7.63(2H, m), 7.72(1H, s), 7.89(4H, s), 8.12(1H, m), 8.59(1H, s)$	837.13	836.28
TC10-100	H100	페닐	페닐	$\delta = 7.29\sim 7.37(12H, m), 7.46\sim 7.55(19H, m), 7.61\sim 7.63(2H, m), 7.72(1H, s), 7.89(4H, s), 7.96(1H, m), 8.12(1H, m), 8.57(1H, m)$	836.14	835.28
TC10-101	H101	페닐	페닐	$\delta = 7.29\sim 7.37(13H, m), 7.45\sim 7.55(20H, m), 7.61\sim 7.63(2H, m), 7.72(1H, s), 7.89(2H, s), 8.12(1H, m), 8.38\sim 8.4(3H, m)$	835.15	834.29
TC10-102	H102	페닐	페닐	$\delta = 7.29\sim 7.42(30H, m), 7.61\sim 7.63(3H, m), 7.72(1H, s), 7.76(1H, m), 7.89(2H, s), 8.12(1H, m), 8.38(1H, m), 8.59(1H, s)$	837.13	836.28
TC10-103	H103	페닐	페닐	$\delta = 7.29\sim 7.42(30H, m), 7.61\sim 7.63(3H, m), 7.72(1H, s), 7.76(1H, m), 7.89(3H, s), 7.96(1H, m), 8.12(1H, m), 8.57(1H, m)$	836.14	835.28
TC10-104	H104	페닐	페닐	$\delta = 7.29\sim 7.37(13H, m), 7.45\sim 7.55(19H, m), 7.61\sim 7.64(3H, m), 7.72(1H, s), 7.89(2H, s), 8.12(1H, m), 8.27(1H, m), 8.38\sim 8.4(2H, m)$	835.15	834.29
TC10-105	H105	페닐	페닐	$\delta = 7.29(1H, m), 7.33\sim 7.46(16H, m), 7.61\sim 7.68(4H, m), 7.72(1H, s), 7.79(2H, m), 7.89(2H, s), 8.12(1H, m), 8.28(2H, m), 8.31(1H, s)$	654.83	654.22
TC10-106	H106	페닐	페닐	$\delta = 7.29(1H, m), 7.33(1H, m), 7.37(4H, m), 7.41(1H, m), 7.46(4H, m), 7.5\sim 7.55(11H, m), 7.72(1H, s), 7.79(4H, m), 7.89(2H, s), 8.12(1H, m), 8.54(1H, m)$	653.84	653.23
TC10-107	H107	페닐	페닐	$\delta = 7.29\sim 7.37(6H, m), 7.46\sim 7.55(11H, m), 7.61\sim 7.68(4H, m), 7.72(1H, s), 7.79(2H, m), 7.89(2H, s), 8(1H, m), 8.12(1H, m), 8.3(2H, m), 8.44(1H, m), 8.6(1H, m)$	652.86	652.23
TC10-108	H108	페닐	페닐	$\delta = 7.25(4H, m), 7.29(1H, m), 7.33\sim 7.46(23H, m), 7.61\sim 7.63(2H, m), 7.72(1H, s), 7.85(4H, m), 7.89(2H, s), 8.12(1H, m)$	807.02	806.29

TC10-109	H109	페닐	페닐	$\delta = 7.29(1H, m), 7.33(1H, m), 7.37(4H, m), 7.41(2H, m), 7.46(4H, m), 7.48\sim 7.52(18H, m), 7.7(2H, m), 7.72(1H, s), 7.75(2H, m), 7.89(2H, s), 8.12(1H, m), 8.63(1H, s)$	806.04	805.29
TC10-110	H110	페닐	페닐	$\delta = 7.05(2H, m), 7.29\sim 7.37(6H, m), 7.46\sim 7.63(14H, m), 7.72(1H, s), 7.89(2H, s), 7.95\sim 8(6H, m), 8.12(1H, m), 8.38(2H, m), 8.85(2H, m)$	752.97	752.26

[0093]

[0094]

[0095] [표 3]

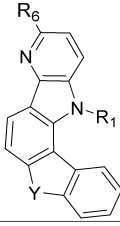
<div style="text-align: center;">  <p>TA49</p> </div>							
화합물	R ₁	Y	R ₄	R ₅	¹ H NMR(CDCl ₃ , 200 MHz)	MS/FAB	
						found	calculated
TC49-1	H1	SiR ₄ R ₅	페닐	페닐	δ = 7.05(2H, m), 7.25(1H, m), 7.33~7.37(5H, m), 7.46~7.47(6H, m), 7.54~7.55(8H, m), 7.66(1H, m), 7.72(1H, s), 7.89(1H, s), 7.94(1H, m), 8.08(1H, m), 8.14(1H, m), 8.3(4H, m), 8.55(2H, m)	702.91	702.25
TC49-4	H4	SiR ₄ R ₅	페닐	페닐	δ = 7.25(1H, m), 7.33~7.55(19H, m), 7.66(1H, m), 7.72(1H, s), 7.79(4H, m), 7.89(1H, s), 7.94(1H, m), 8.08(1H, m), 8.14(1H, m), 8.55(2H, m), 8.63(1H, s)	703.90	703.24
TC49-5	H5	SiR ₄ R ₅	페닐	페닐	δ = 7.14(2H, m), 7.25(1H, m), 7.33~7.37(5H, m), 7.46(4H, m), 7.55(4H, m), 7.66~7.7(3H, m), 7.72(1H, s), 7.89(1H, s), 7.94(1H, m), 8.08(1H, m), 8.14~8.15(3H, m), 8.53~8.55(4H, m), 9.3(2H, m)	704.89	704.24
TC49-12	H12	SiR ₄ R ₅	페닐	페닐	δ = 7.25(1H, m), 7.33~7.55(19H, m), 7.66(1H, m), 7.72(1H, s), 7.89(1H, s), 7.94(1H, m), 8.08(1H, m), 8.14(1H, m), 8.28(4H, m), 8.55(2H, m)	704.89	704.24
TC49-14	H14	SiR ₄ R ₅	페닐	페닐	δ = 7.25(1H, m), 7.33(1H, m), 7.37~7.46(19H, m), 7.66(1H, m), 7.72(1H, s), 7.76(1H, m), 7.89(1H, s), 7.92~7.94(2H, m), 8.08(1H, m), 8.14(1H, m), 8.43(1H, s), 8.55(2H, m)	676.88	676.23
TC49-42	H42	SiR ₄ R ₅	페닐	페닐	δ = 7.25~7.37(9H, m), 7.46~7.55(9H, m), 7.62~7.66(6H, m), 7.72(1H, s), 7.89(1H, s), 7.94(2H, m), 8.08~8.14(3H, m), 8.55(3H, m)	714.93	714.25
TC49-99	H99	SiR ₄ R ₅	페닐	페닐	δ = 7.29(1H, m), 7.37(10H, m), 7.46~7.55(20H, m), 7.63~7.66(2H, m), 7.72(1H, s), 7.89(3H, s), 8.08~8.14(3H, m), 8.55(1H, m), 8.59(1H, s)	887.19	886.29
TC49-100	H100	SiR ₄ R ₅	페닐	페닐	δ = 7.29(1H, m), 7.37(10H, m), 7.46~7.55(20H, m), 7.63~7.66(2H, m), 7.72(1H, s), 7.89(3H, s), 7.96(1H, m), 8.08~8.14(3H, m), 8.55~8.57(2H, m)	886.20	885.30
TC49-101	H101	SiR ₄ R ₅	페닐	페닐	δ = 7.29~7.31(2H, m), 7.37(10H, m), 7.45~7.55(21H, m), 7.63~7.66(2H, m), 7.72(1H, s), 7.89(1H, s), 8.08~8.14(3H, m), 8.38~8.4(3H, m), 8.55(1H, m)	885.21	884.30
TC49-102	H102	SiR ₄ R ₅	페닐	페닐	δ = 7.29(1H, m), 7.37~7.55(29H, m), 7.61~7.66(3H, m), 7.72(1H, s), 7.76(1H, m), 7.89(1H, s), 8.08~8.14(3H, m), 8.38(1H, m), 8.55(1H, m), 8.59(1H, s)	887.18	886.29
TC49-103	H103	SiR ₄ R ₅	페닐	페닐	δ = 7.29(1H, m), 7.37~7.55(29H, m), 7.61~7.66(3H, m), 7.72(1H, s), 7.76(1H, m), 7.89(2H, s), 7.96(1H, m), 8.08~8.14(3H, m), 8.55~8.57(2H, m)	886.20	885.30

[0096]

TC49-104	H104	SiR ₄ R ₅	페닐	페닐	$\delta = 7.29\sim 7.31(2H, m), 7.37(10H, m), 7.45\sim 7.55(20H, m), 7.63\sim 7.66(3H, m), 7.72(1H, s), 7.89(1H, s), 8.08\sim 8.14(3H, m), 8.27(1H, m), 8.38\sim 8.4(2H, m), 8.55(1H, m)$	885.21	884.30
TC49-105	H105	SiR ₄ R ₅	페닐	페닐	$\delta = 7.29(1H, m), 7.37\sim 7.55(16H, m), 7.63\sim 7.68(4H, m), 7.72(1H, s), 7.79(2H, m), 7.89(1H, s), 8.08\sim 8.14(3H, m), 8.28(2H, m), 8.31(1H, s), 8.55(1H, m)$	704.89	704.24
TC49-106	H106	SiR ₄ R ₅	페닐	페닐	$\delta = 7.29(1H, m), 7.37\sim 7.56(17H, m), 7.63\sim 7.68(4H, m), 7.72(1H, s), 7.79(4H, m), 7.89(1H, s), 8.08\sim 8.14(3H, m), 8.54\sim 8.55(2H, m)$	703.90	703.24
TC49-107	H107	SiR ₄ R ₅	페닐	페닐	$\delta = 7.29(1H, m), 7.37(4H, m), 7.46\sim 7.55(12H, m), 7.63\sim 7.68(4H, m), 7.72(1H, s), 7.79(2H, m), 7.89(1H, s), 8(1H, m), 8.08\sim 8.14(3H, m), 8.3(2H, m), 8.44(1H, m), 8.55\sim 8.6(2H, m)$	702.91	702.25
TC49-108	H108	SiR ₄ R ₅	페닐	페닐	$\delta = 7.25\sim 7.29(5H, m), 7.37\sim 7.55(23H, m), 7.63\sim 7.66(2H, m), 7.72(1H, s), 7.85(4H, m), 7.89(1H, s), 8.08\sim 8.14(3H, m), 8.55(1H, m)$	857.08	856.30
TC10-103	H103	SiR ₄ R ₅	페닐	페닐	$\delta = 7.29\sim 7.42(30H, m), 7.61\sim 7.63(3H, m), 7.72(1H, s), 7.76(1H, m), 7.89(3H, s), 7.96(1H, m), 8.12(1H, m), 8.57(1H, m)$	836.14	835.28
TC10-104	H104	SiR ₄ R ₅	페닐	페닐	$\delta = 7.29\sim 7.37(13H, m), 7.45\sim 7.55(19H, m), 7.61\sim 7.64(3H, m), 7.72(1H, s), 7.89(2H, s), 8.12(1H, m), 8.27(1H, m), 8.38\sim 8.4(2H, m)$	835.15	834.29
TC10-105	H105	SiR ₄ R ₅	페닐	페닐	$\delta = 7.29(1H, m), 7.33\sim 7.46(16H, m), 7.61\sim 7.68(4H, m), 7.72(1H, s), 7.79(2H, m), 7.89(2H, s), 8.12(1H, m), 8.28(2H, m), 8.31(1H, s)$	654.83	654.22
TC10-106	H106	SiR ₄ R ₅	페닐	페닐	$\delta = 7.29(1H, m), 7.33(1H, m), 7.37(4H, m), 7.41(1H, m), 7.46(4H, m), 7.5\sim 7.55(11H, m), 7.72(1H, s), 7.79(4H, m), 7.89(2H, s), 8.12(1H, m), 8.54(1H, m)$	653.84	653.23
TC10-107	H107	SiR ₄ R ₅	페닐	페닐	$\delta = 7.29\sim 7.37(6H, m), 7.46\sim 7.55(11H, m), 7.61\sim 7.68(4H, m), 7.72(1H, s), 7.79(2H, m), 7.89(2H, s), 8(1H, m), 8.12(1H, m), 8.3(2H, m), 8.44(1H, m), 8.6(1H, m)$	652.86	652.23
TC10-108	H108	SiR ₄ R ₅	페닐	페닐	$\delta = 7.25(4H, m), 7.29(1H, m), 7.33\sim 7.46(23H, m), 7.61\sim 7.63(2H, m), 7.72(1H, s), 7.85(4H, m), 7.89(2H, s), 8.12(1H, m)$	807.02	806.29
TC10-109	H109	SiR ₄ R ₅	페닐	페닐	$\delta = 7.29(1H, m), 7.33(1H, m), 7.37(4H, m), 7.41(2H, m), 7.46(4H, m), 7.48\sim 7.52(18H, m), 7.7(2H, m), 7.72(1H, s), 7.75(2H, m), 7.89(2H, s), 8.12(1H, m), 8.63(1H, s)$	806.04	805.29
TC10-110	H110	SiR ₄ R ₅	페닐	페닐	$\delta = 7.05(2H, m), 7.29\sim 7.37(6H, m), 7.46\sim 7.63(14H, m), 7.72(1H, s), 7.89(2H, s), 7.95\sim 8(6H, m), 8.12(1H, m), 8.38(2H, m), 8.85(2H, m)$	752.97	752.26

[0097]

[0098] [표 4]

<div><div>TB52</div></div>								
화합물	R ₁	Y	R ₂	R ₃	R ₆	¹ H NMR(CDCl ₃ , 200 MHz)	MS/FAB	
							found	calculated
TB52-1	H1	CR ₂ R ₃	메틸	메틸	페닐	δ = 7.05(2H, m), 7.25(1H, m), 7.33~7.37(5H, m), 7.46~7.47(6H, m), 7.54~7.55(8H, m), 7.66(1H, m), 7.72(1H, s), 7.89(1H, s), 7.94(1H, m), 8.08(1H, m), 8.14(1H, m), 8.3(4H, m), 8.55(2H, m)	702.91	702.25
TB52-99	H99	CR ₂ R ₃	메틸	메틸	H	δ = 7.25(1H, m), 7.33~7.55(19H, m), 7.66(1H, m), 7.72(1H, s), 7.79(4H, m), 7.89(1H, s), 7.94(1H, m), 8.08(1H, m), 8.14(1H, m), 8.55(2H, m), 8.63(1H, s)	703.90	703.24
TB52-100	H100	CR ₂ R ₃	메틸	메틸	H	δ = 7.14(2H, m), 7.25(1H, m), 7.33~7.37(5H, m), 7.46(4H, m), 7.55(4H, m), 7.66~7.7(3H, m), 7.72(1H, s), 7.89(1H, s), 7.94(1H, m), 8.08(1H, m), 8.14~8.15(3H, m), 8.53~8.55(4H, m), 9.3(2H, m)	704.89	704.24
TB52-104	H104	CR ₂ R ₃	페닐	페닐	H	δ = 7.25(1H, m), 7.33~7.55(19H, m), 7.66(1H, m), 7.72(1H, s), 7.89(1H, s), 7.94(1H, m), 8.08(1H, m), 8.14(1H, m), 8.28(4H, m), 8.55(2H, m)	704.89	704.24
TB52-106	H106	CR ₂ R ₃	페닐	페닐	H	δ = 7.25(1H, m), 7.33(1H, m), 7.37~7.46(19H, m), 7.66(1H, m), 7.72(1H, s), 7.76(1H, m), 7.89(1H, s), 7.92~7.94(2H, m), 8.08(1H, m), 8.14(1H, m), 8.43(1H, s), 8.55(2H, m)	676.88	676.23

[0099]

[0100] [실시예 1] 본 발명에 따른 유기 발광 화합물을 이용한 OLED 소자 제작

[0101] 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 기판을 설치하고, 진공 증착 장비 내의 셀에4,4',4"-tris(N,N-(2-naphthyl)-phenylamino)triphenylamine (2-TNATA)을 넣고, 챔버 내의 진공도가 10⁻⁶ torr에 도달할 때까지 배기시킨 후, 셀에 전류를 인가하여 2-TNATA를 증발시켜 ITO 기판 상에 60 nm 두께의 정공주입층을 증착하였다.

[0102] 이어서, 진공 증착 장비 내의 다른 셀에 N,N'-bis(α-naphthyl)-N,N'-diphenyl-4,4'-diamine (NPB)을 넣고, 셀에 전류를 인가하여 NPB를 증발시켜 정공주입층 위에 20 nm 두께의 정공전달층을 증착하였다.

[0103] 진공 증착 장비 내의 한쪽 셀에 호스트 재료로 10⁻⁶ torr하에서 진공 승화 정제된 본 발명에 따른 화합물(예 : 화합물 TC10-19)을 넣고, 다른쪽 셀에는 발광 도판트(예 : 화합물 (piq)₂Ir(acac)[bis-(1-phenylisoquinolyl)iridium(III)acetylacetonate])를 각각 넣은 후, 두 물질을 다른 속도로 증발시켜 4 내지 10mol%로 도핑함으로써 상기 정공 전달층 위에 30 nm 두께의 발광층을 증착하였다.

[0104] 이어서 전자전달층으로써 tris(8-hydroxyquinoline)-aluminum(III) (Alq)를 20 nm 두께로 증착한 다음, 전자주입층으로 화합물 lithium quinolate (Liq)를 1 내지 2 nm 두께로 증착한 후, 다른 진공 증착 장비를 이용하여 Al 음극을 150 nm의 두께로 증착하여 OLED를 제작하였다.

[0105] [실시예 2] 본 발명에 따른 유기 발광 화합물을 이용한 OLED 소자의 제조

[0106] 호스트 재료로서 본 발명에 따른 화합물(예 : 화합물 TC10-12)을 이용하고, 상기 발광층 위에 정공차단층으로 비스(2-메틸-8-퀴놀리네이트)(p-페닐페놀레이트)알루미늄(III) (BALq)을 5 nm의 두께로 증착시키고 그 외의 나머지는 실시예 1과 동일한 방법으로 OLED를 제작하였다.

[0107] [실시예 3] 본 발명에 따른 유기 발광 화합물을 이용한 OLED 소자의 제조

[0108] 호스트 재료로서 본 발명에 따른 화합물(예 : 화합물 **TC10-97**)을 이용하고, 발광 도판트로서 유기 이리듐 착물 ($\text{Ir(ppy)}_3[\text{tris(2-phenylpyridine)iridium}]$)을 이용한 것 외에는, 실시예 1과 동일한 방법으로 OLED소자를 제작하였다.

[실시예 4] 본 발명에 따른 유기 발광 화합물을 이용한 OLED 소자의 제조

[0110] 호스트 재료로서 본 발명에 따른 화합물(예 : 화합물 **TC4-105**)을 이용하고, 상기 발광층 위에 정공차단층으로 비스(2-메틸-8-퀴놀리네이트)(*p*-페닐페놀레이트)알루미늄(III) (BALq)을 5 nm의 두께로 증착시키고 그 외의 나머지는 실시예 3과 동일한 방법으로 OLED를 제작하였다.

[0111] [비교예 1 및 2] 종래의 발광 재료를 이용한 OLED 소자 제작

[0112] 진공 증착 장비 내의 다른 셀에 발광 호스트 재료로서 본 발명에 따른 유기 발광 화합물 대신에 4,4'-디(9H-카바졸-9-일)비페닐(CBP)을 넣은 것 이외에는 실시예 2 및 실시예 4와 동일한 방법으로 OLED 소자를 제작하였다.

[0113] 상기 실시예 1 내지 4와 비교예 1 및 2에서 제조된 본 발명에 따른 유기 발광 화합물과 종래의 발광 화합물을 함유하는 OLED 소자의 전력 효율을 각각 $1,000 \text{ cd/m}^2$ 에서 측정하여 하기 표 5에 나타내었다.

[0114] [표 5]

No.	호스트	도판트	정공차단층	구동전압(V) @1,000 cd/m^2	전력효율(lm/W) @1,000 cd/m^2	발광색
실 시 예 1	1 TC10-19	$(\text{piq})_2\text{Ir(acac)}$	-	6.6	3.2	적색
	2 TC10-108	$(\text{piq})_2\text{Ir(acac)}$	-	6.4	3.4	적색
	3 TC4-102	$(\text{piq})_2\text{Ir(acac)}$	-	6.6	3.4	적색
	4 TC10-60	$(\text{piq})_2\text{Ir(acac)}$	-	6.7	3.1	적색
	5 TC4-12	$(\text{piq})_2\text{Ir(acac)}$	-	6.4	3.8	적색
	6 TC4-59	$(\text{piq})_2\text{Ir(acac)}$	-	6.3	4.2	적색
실 시 예 2	7 TC10-12	$(\text{piq})_2\text{Ir(acac)}$	BALq	6.9	3.3	적색
	8 TC10-83	$(\text{piq})_2\text{Ir(acac)}$	BALq	7.0	3.0	적색
	9 TC10-100	$(\text{piq})_2\text{Ir(acac)}$	BALq	6.8	3.4	적색
	10 TA49-103	$(\text{piq})_2\text{Ir(acac)}$	BALq	6.9	3.3	적색
실 시 예 3	11 TC10-97	Ir(ppy)_3	-	6.2	13.5	녹색
	12 TC10-52	Ir(ppy)_3	-	6.1	14.8	녹색
	13 TC4-103	Ir(ppy)_3	-	6.4	14.0	녹색
	14 TC4-106	Ir(ppy)_3	-	6.1	14.1	녹색
	15 TC10-4	Ir(ppy)_3	-	6.3	13.4	녹색
	16 TC4-82	Ir(ppy)_3	-	6.5	13.7	녹색
실 시 예 4	17 TC4-105	Ir(ppy)_3	BALq	6.6	13.1	녹색
	18 TC4-96	Ir(ppy)_3	BALq	6.8	13.0	녹색
	19 TC10-106	Ir(ppy)_3	BALq	6.8	12.7	녹색
	20 TC4-50	Ir(ppy)_3	BALq	6.9	13.2	녹색
비교예1	CBP	$(\text{piq})_2\text{Ir(acac)}$	BALq	7.5	2.6	적색
비교예2	CBP	Ir(ppy)_3	BALq	7.5	10.5	녹색

[0115]

[0116] 상기 표 5에 나타난 바와 같이, 본 발명에서 개발한 유기 발광 화합물들의 발광 특성이 종래의 재료 대비 우수한 특성을 보이는 것을 확인할 수 있었다. 또한 본 발명에 따른 유기 발광 화합물을 적색 또는 녹색 발광용 호스트 재료로 사용한 소자는 발광특성이 뛰어날 뿐만 아니라 구동전압을 강하시켜줌으로써 전력효율의 상승을 유도하여 소비전력을 개선시킬 수 있었다. 상기 표 5에 나타난 바와 같이, 본 발명에서 개발한 유기 발광 화합물들의 발광 특성이 종래의 재료 대비 우수한 특성을 보이는 것을 확인할 수 있었다. 또한 본 발명에 따른 유기 발광 화합물을 적색 또는 녹색 발광용 호스트 재료로 사용한 소자는 발광특성이 뛰어날 뿐만 아니라 구동전압을 강하시켜줌으로써 전력효율의 상승을 유도하여 소비전력을 개선시킬 수 있었다.

专利名称(译)	标题：有机电致发光化合物和含有它的有机电致发光器件		
公开(公告)号	KR101778046B1	公开(公告)日	2017-09-14
申请号	KR1020150115633	申请日	2015-08-17
[标]申请(专利权)人(译)	罗门哈斯电子材料有限公司		
申请(专利权)人(译)	룸엔드하스전자재료코리아유한회사		
当前申请(专利权)人(译)	룸엔드하스전자재료코리아유한회사		
[标]发明人	LEE SOO YONG 이수용 KIM YOUNG GIL 김영길 CHO YOUNG JUN 조영준 KWON HYUCK JOO 권혁주 KIM BONG OK 김봉옥 KIM SUNG MIN 김성민 YOON SEUNG SOO 윤승수		
发明人	이수용 김영길 조영준 권혁주 김봉옥 김성민 윤승수		
IPC分类号	C09K11/06 C07D487/04 C07D487/14 C07F7/02 H01L51/50		
CPC分类号	C09K11/06 C07D487/04 C07D487/14 C07F7/02 H01L51/50 C09K2211/1029 C09K2211/18		
代理人(译)	张本勋		
其他公开文献	KR1020150098237A		
外部链接	Espacenet		

摘要(译)

本发明涉及一种新型有机电致发光化合物，以及包含该化合物的有机电致发光器件。更具体地，本发明的有机电致发光化合物选自以下化学式1至6.在上述化学式1至6中，X和Y各自独立地选自N (R 1)，C (R 2) (R 3)) 和Si (R 4) (R 5)，则X或Y之间的一个应为N (R 1)，另一个应为C (R 2) (R 3) 或Si (R 4) (R 5)，Z1至Z8各自独立选自C (R 6) 和N，R6可以相互不同，并且相邻的R6可以通过相互组合形成环。当根据本发明的有机电致发光化合物用作OLED器件中的有机发光材料的主体材料时，与常规的主体材料相比，有机电致发光化合物显示出良好的发光效率和优异的使用寿命特性，因此，可以有利地用于制造具有非常好的操作耐久性的OLED .COPYRIGHT KIPO 2015

