



(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 공개특허공보(A)

(11) 공개번호 10-2016-0072388
(43) 공개일자 2016년06월23일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)
C09K 11/06 (2006.01) *C07D 319/24* (2006.01)
H01L 51/50 (2006.01)
(21) 출원번호 10-2014-0179755
(22) 출원일자 2014년12월12일
심사청구일자 2014년12월12일

(71) 출원인
주식회사 엠비케이
경기도 성남시 중원구 갈마치로 176 (상대원동)
(72) 발명자
현승학
경기 성남시 중원구 갈마치로 176
이대균
경기 성남시 중원구 갈마치로 176
(뒷면에 계속)
(74) 대리인
특허법인 대아

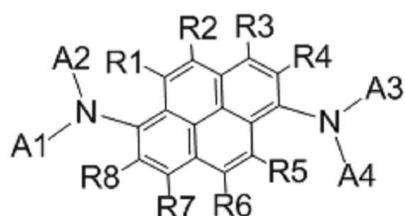
전체 청구항 수 : 총 34 항

(54) 발명의 명칭 유기 발광 화합물, 잉크 조성물, 유기 발광 소자 및 전자 기기

(57) 요 약

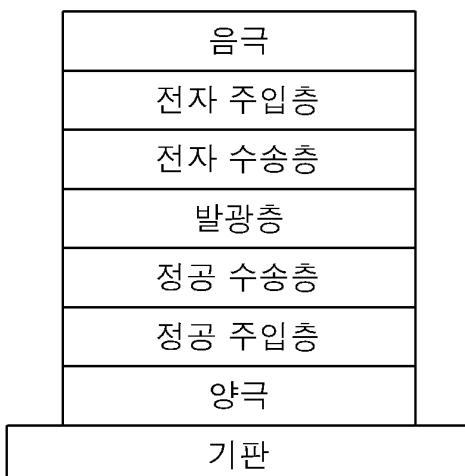
하기 화학식 1로 표시되는 방향족 아민 화합물인 유기 발광 화합물이 제공된다.

[화학식 1]



상기 식에서, R1 내지 R8 및 A1 내지 A4는 전술하여 정의된 바와 같다.

대 표 도 - 도1



(72) 발명자
강지승
경기 성남시 중원구 갈마치로 176
안도환
경기 성남시 중원구 갈마치로 176
이재성
경기 성남시 중원구 갈마치로 176

안중복
경기 성남시 중원구 갈마치로 176
박노길
경기 성남시 중원구 갈마치로 176
문봉석
경기 성남시 중원구 갈마치로 176

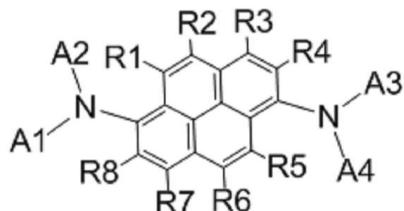
명세서

청구범위

청구항 1

하기 화학식 1로 표시되는 방향족 아민 화합물인 유기 발광 화합물:

[화학식 1]



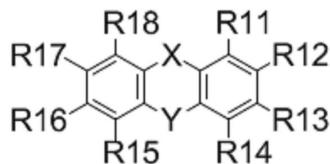
상기 화학식 1에서,

R1 내지 R8은, 각각 독립적으로, 수소, 중수소, 할로겐, 치환 또는 비치환된 C1~C30의 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3~C10의 사이클로알킬기, 치환 또는 비치환된 실릴기, 시아노기, 또는 치환 또는 비치환된 C6~C30의 아릴기이고,

A1 내지 A4는, 각각 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C6~C30의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C3~C30의 헤테로아릴기이고,

단, 상기 A1 내지 A4 중 적어도 하나가 하기 화학식 2로 표시되는 헤테로아릴기이고,

[화학식 2]



상기 화학식 2에서,

X 및 Y는, 각각 독립적으로, 산소 원자 또는 황 원자이고,

R11 내지 R18 중 하나는 상기 화학식 1 중 N과 연결되는 부분이고, 그 나머지는, 각각 독립적으로, 수소 원자, 할로겐 원자, 치환 또는 비치환된 C1~C30의 알킬기, 치환 또는 비치환된 C2~C30의 알케닐기, 치환 또는 비치환된 C2~C30의 알키닐기, 치환 또는 비치환된 실릴기, 시아노기, 치환 또는 비치환된 C6~C30의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C4~C30의 헤테로아릴기이고,

상기 R11 내지 R18 중 인접하는 둘이 서로 연결되어 치환 또는 비치환된 C4~C30의 사이클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6~C30의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C4~C30의 헤테로아릴기를 형성할 수 있고,

상기 치환된 경우의 추가적인 치환기는 중수소, 할로겐 원자, C1~C30의 알킬기, C3~C50의 사이클로알킬기, C2~C30의 알케닐기, C3~C50의 사이클로알케닐기, C2~C30의 알키닐기, C5~C50의 사이클로알키닐기, 시아노기, 실릴기, C1~C20의 알콕시기, C6~C60의 아릴기, C3~C60의 헤테로아릴기 및 C7~C60의 아릴알킬기 및 이들의 조합으로 이루어진 군에서 선택된 하나를 포함한다.

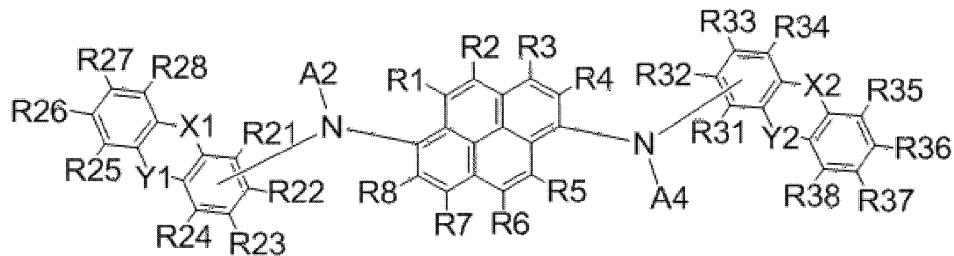
청구항 2

제1항에 있어서,

상기 유기 발광 화합물이 하기 화학식 3으로 표시되는 방향족 아민 화합물인

유기 발광 화합물:

[화학식 3]



상기 화학식 3에서,

X1, X2, Y1 및 Y2는, 각각 독립적으로, 산소 원자 또는 황 원자이고,

R21 내지 R28 및 R31 내지 R38 중 하나는 상기 화학식 1 중 N과 연결되는 부분이고; 그 나머지는, 각각 독립적으로, 수소 원자, 할로겐 원자, 치환 또는 비치환된 C1~C30의 알킬기, 치환 또는 비치환된 C2~C30의 알케닐기, 치환 또는 비치환된 C2~C30의 알키닐기, 치환 또는 비치환된 실릴기, 시아노기, 치환 또는 비치환된 C6~C30의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C4~C30의 헤테로아릴기이고,

상기 R21 내지 R28 및 R31 내지 R38 중 인접하는 둘이 서로 연결되어 치환 또는 비치환된 C4~C30의 사이클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6~C30의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C4~C30의 헤테로아릴기를 형성할 수 있고,

R1 내지 R8, A2 및 A4는 상기 화학식 1에서 정의된 바와 같다.다.

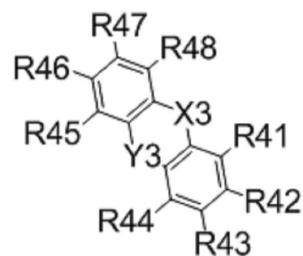
청구항 3

제2항에 있어서,

A2 및 A4가 하기 화학식 4로 표시되는

유기 발광 화합물:

[화학식 4]



상기 화학식 4에서,

X3 및 Y3은, 각각 독립적으로, 산소 원자 또는 황 원자이고,

R41 내지 R48 중 하나는 상기 화학식 1 중 N과 연결되는 부분이고; 그 나머지는, 각각 독립적으로, 수소 원자, 할로겐 원자, 치환 또는 비치환된 C1~C30의 알킬기, 치환 또는 비치환된 C2~C30의 알케닐기, 치환 또는 비치환된 C2~C30의 알키닐기, 치환 또는 비치환된 실릴기, 시아노기, 치환 또는 비치환된 C6~C30의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C4~C30의 헤테로아릴기이고,

상기 R21 내지 R28 및 R31 내지 R38 중 인접하는 둘이 서로 연결되어 치환 또는 비치환된 C4~C30의 사이클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6~C30의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C4~C30의 헤테로아릴기를 형성할 수 있고,

있다.

청구항 4

제1항에 있어서,
R1 내지 R8이 수소 원자인
유기 발광 화합물.

청구항 5

제1항 내지 제3항 중 어느 한 항에 있어서,
R2가 치환 또는 비치환된 C1~C20의 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3~C10의 사이클로알킬기, 치환 또는 비치환된 실릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C6~C30의 아릴기이고,
R1, R3, R4, R5, R6, R7 및 R8이 수소 원자인
유기 발광 화합물.

청구항 6

제1항 내지 제3항 중 어느 한 항에 있어서,
R2 및 R6은, 각각 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C1~C20의 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3~C10의 사이클로알킬기, 치환 또는 비치환된 실릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C6~C30의 아릴기이고,
R1, R3, R4, R5, R7 및 R8이 수소 원자인
유기 발광 화합물.

청구항 7

제1항 내지 제3항 중 어느 한 항에 있어서,
R3이 치환 또는 비치환된 C1~C20의 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3~C10의 사이클로알킬기, 치환 또는 비치환된 실릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C6~C30의 아릴기이고,
R1, R2, R4, R5, R6, R7 및 R8이 수소 원자인
유기 발광 화합물.

청구항 8

제1항 내지 제3항 중 어느 한 항에 있어서,
R3 및 R7이, 각각 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C1~C20의 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3~C10의 사이클로알킬기, 치환 또는 비치환된 실릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C6~C30의 아릴기이고,
R1, R2, R4, R5, R6 및 R8이 수소 원자인
유기 발광 화합물.

청구항 9

제1항에 있어서,

상기 화학식 2에서, X 및 Y가 산소 원자인

유기 발광 화합물.

청구항 10

제2항에 있어서,

상기 화학식 3에서, X1, X2, Y1 및 Y2가 산소 원자인

유기 발광 화합물.

청구항 11

제3항에 있어서,

상기 화학식 4에서, X3 및 Y3이 산소 원자인

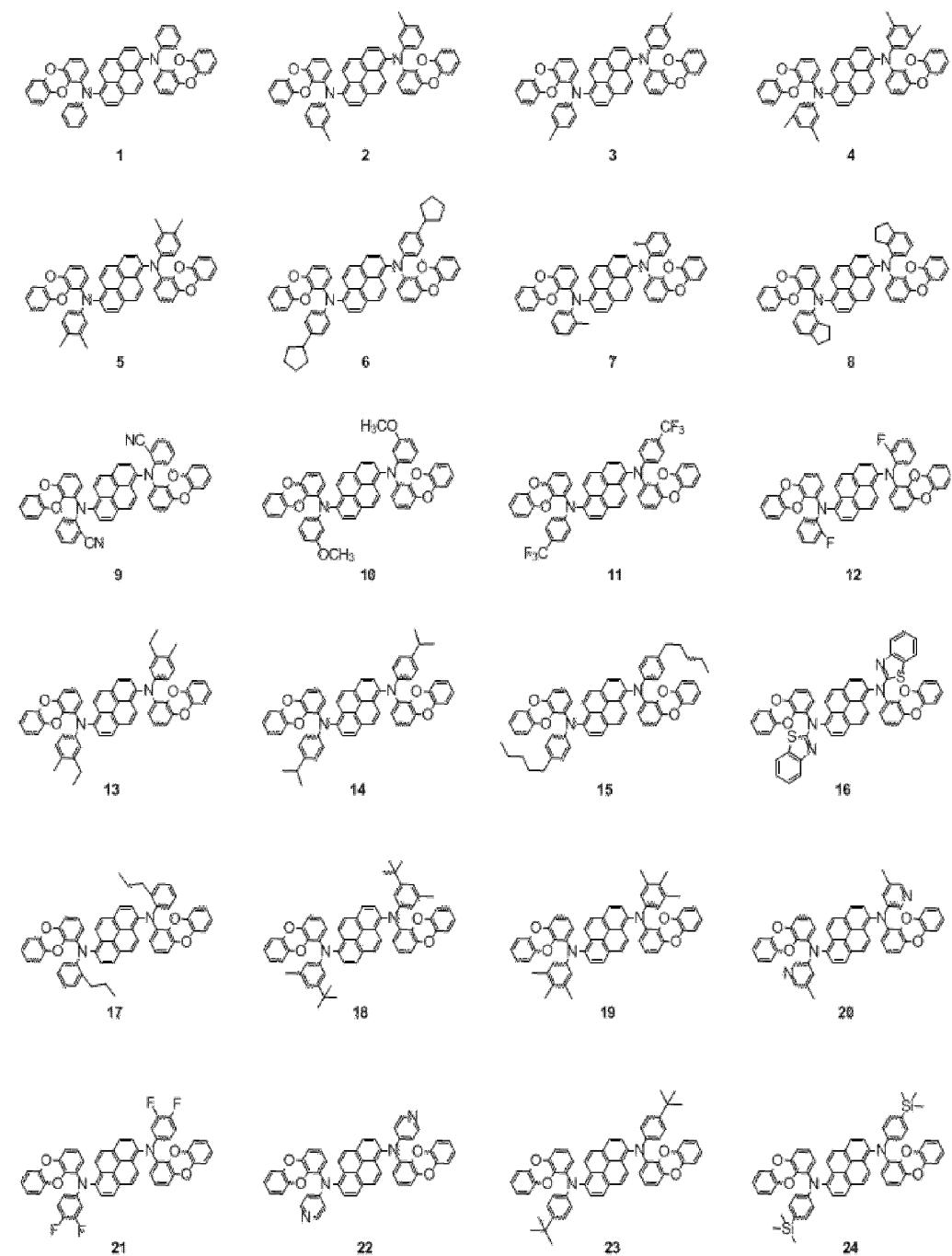
유기 발광 화합물.

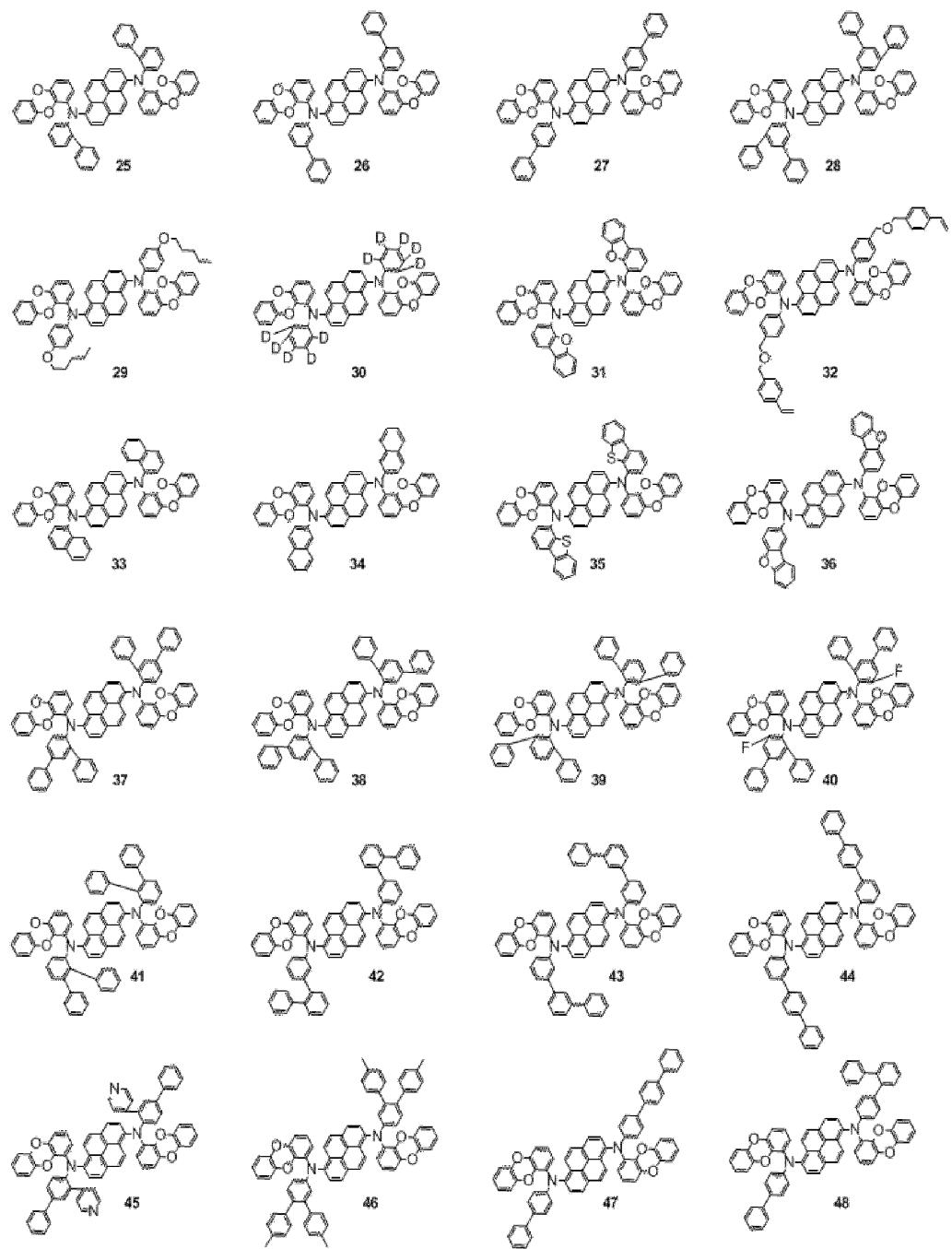
청구항 12

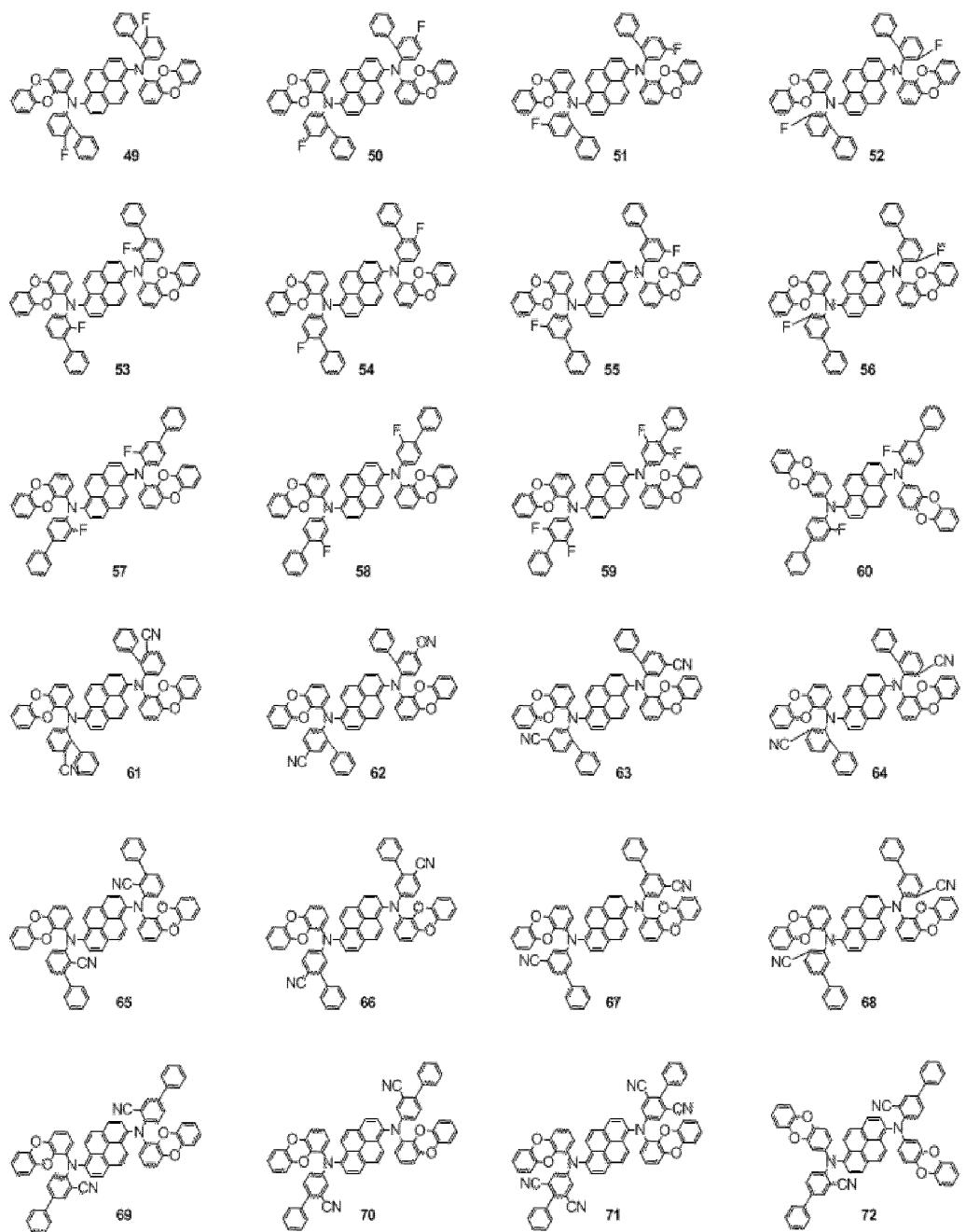
제1항에 있어서,

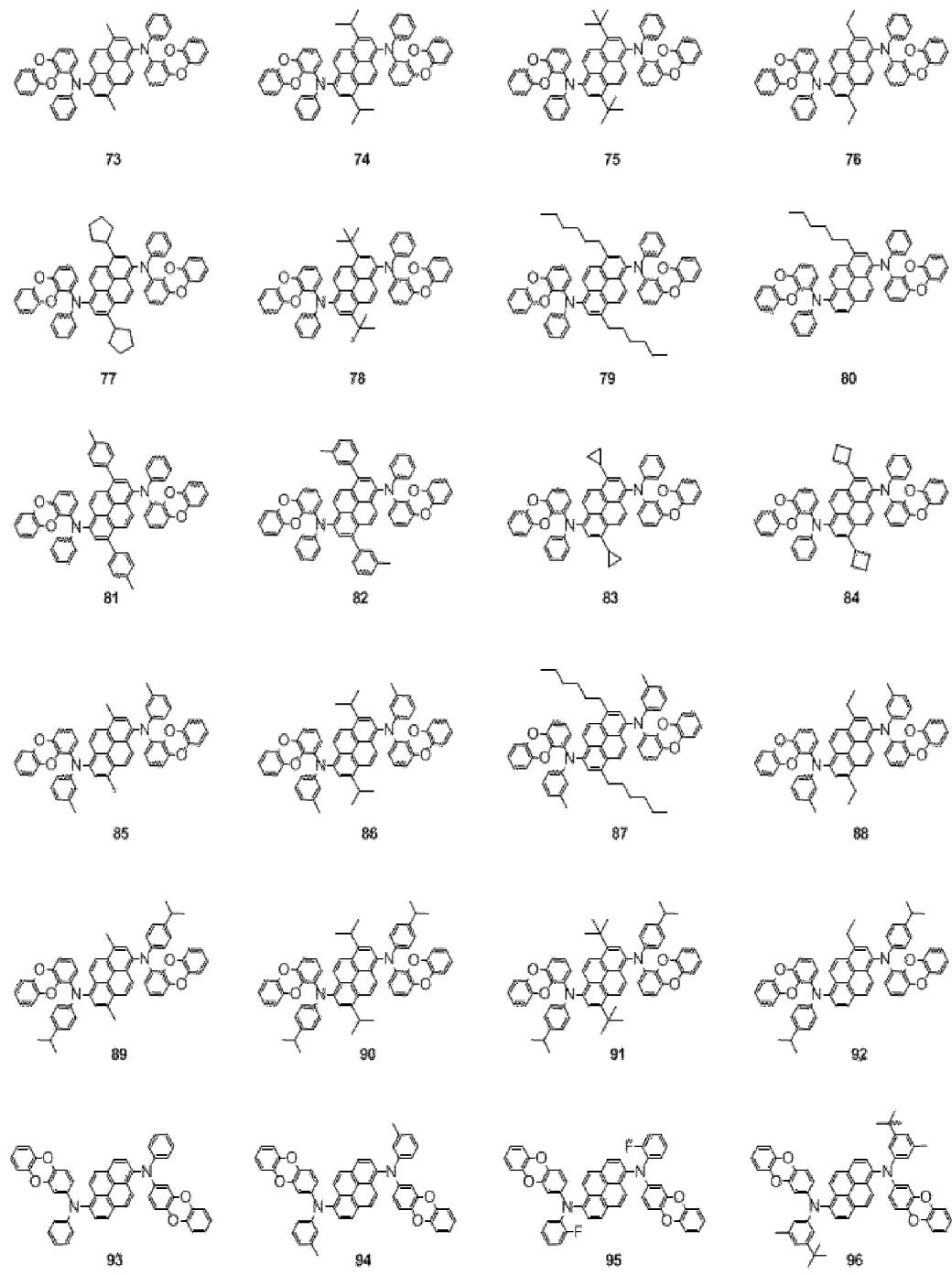
상기 유기 발광 화합물은 하기 1 내지 144 중의 어느 하나의 화합물인

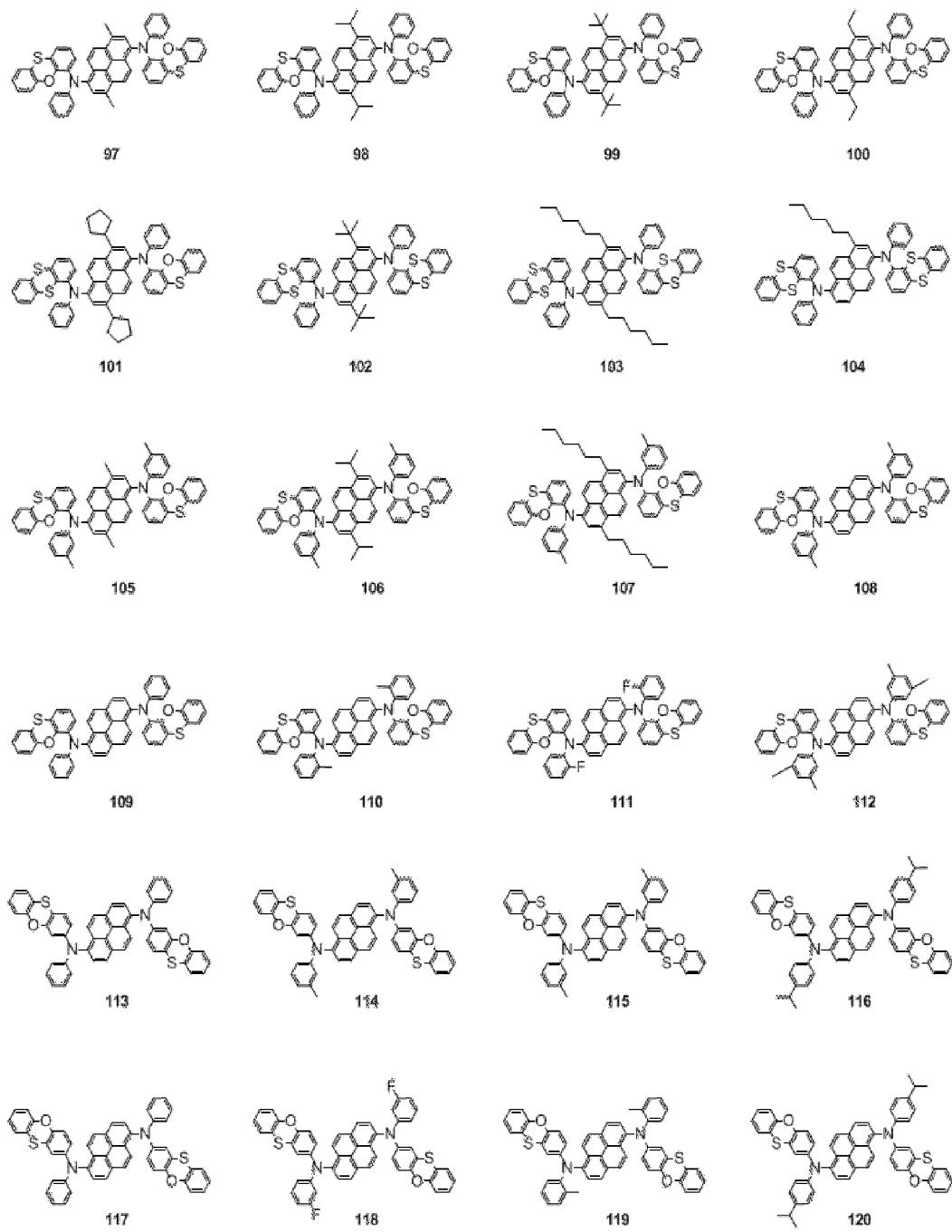
유기 발광 화합물.

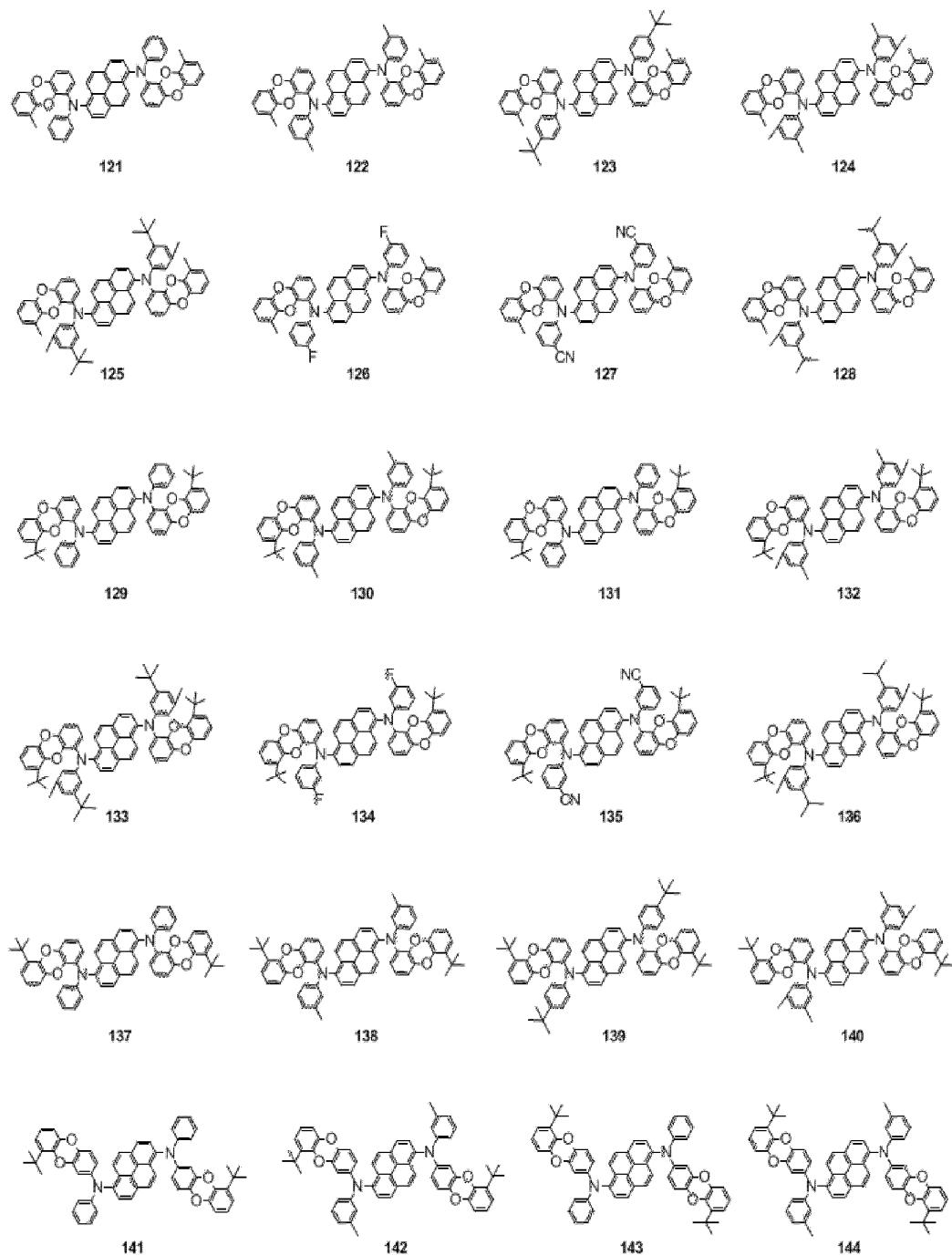












청구항 13

제1항에 있어서,

상기 유기 발광 화합물이 유기 발광 소자용 발광 재료인

유기 발광 화합물.

청구항 14

제1항에 있어서,

상기 유기 발광 화합물이 유기 발광 소자용 도핑 재료인
유기 발광 화합물.

청구항 15

제1항 내지 제3항 중 어느 한 항에 따른 유기 발광 화합물의 적어도 1종을 포함하는 잉크 조성물.

청구항 16

제15항에 있어서,
상기 잉크 조성물은 용매를 더 포함하는 용액 또는 혼탁액인
잉크 조성물.

청구항 17

제15항에 있어서,
상기 잉크 조성물은 안료 또는 염료를 더 포함하는
잉크 조성물.

청구항 18

제15항에 있어서,
상기 잉크 조성물은 인광 도판트 또는 형광 도판트를 더 포함하는
잉크 조성물.

청구항 19

제1 전극; 1층 이상의 유기박막층을 포함하는 유기막 및 제2 전극이 적층된 구조를 포함하고,
상기 유기박막층은 발광층을 포함하고,
상기 유기박막층 중 적어도 1층이 제1항에 따른 유기 발광 화합물을 적어도 1종 포함하는 유기 발광 소자.

청구항 20

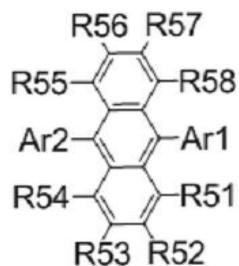
제19항에 있어서,
상기 발광층이 제1항에 따른 유기 발광 화합물을 적어도 1종 포함하는
유기 발광 소자.

청구항 21

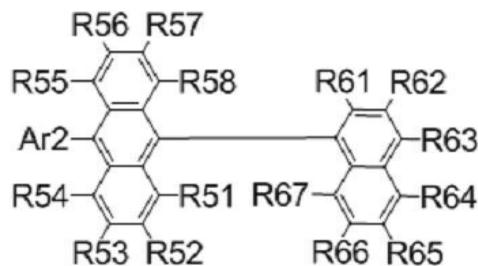
제20항에 있어서,
상기 발광층은 하기 화학식 5 내지 화학식 10으로 표시되는 안트라센 화합물 중 어느 하나를 더 포함하는

유기 발광 소자:

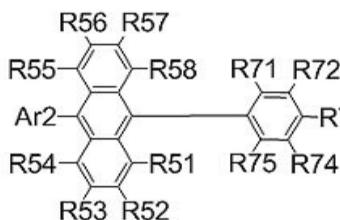
[화학식 5]



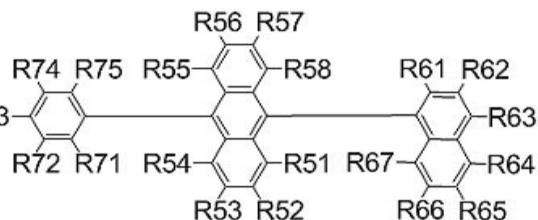
[화학식 6]



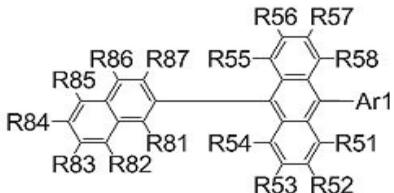
[화학식 7]



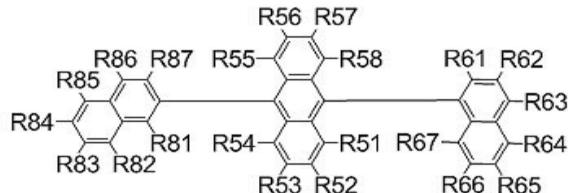
[화학식 8]



[화학식 9]



[화학식 10]



상기 화학식 5 내지 화학식 10에 있어서,

Ar1 및 Ar2는, 각각 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C6~C50의 아릴기, 치환 또는 비치환된 C6~C50의 헤테로아릴기이고, 상기 사이클로알킬기, 아릴기 및 상기 헤테로아릴기는, 각각, 단일 고리, 복수의 고리가 융합되거나 축합된 축합고리 및 이들의 조합으로 이루어진 군으로부터 선택된 하나를 포함하고,

R51 내지 R58, R61 내지 R67, R71 내지 R75, 및 R81 내지 R87은, 각각 독립적으로, 수소 원자, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1~C50의 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6~C50의 아릴기, 치환 또는 비치환된 C6~C50의 헤테로아릴기, C1~C50의 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C7~C50의 아르알킬기, 치환 또는 비치환된 C6~C50의 아릴옥시, 치환 또는 비치환된 실릴기, 할로겐 원자 또는 시아노기이고, 상기 사이클로알킬기, 아릴기 및 상기 헤�테로아릴기는, 각각, 단일 고리, 복수의 고리가 융합되거나 축합된 축합 고리 및 이들의 조합으로 이루어진 군으로부터 선택된 하나를 포함하고,

상기 치환된 경우의 추가적인 치환기는 중수소, 할로겐 원자, C1~C30의 알킬기, C3~C50의 사이클로알킬기, C2~C30의 알케닐기, C3~C50의 사이클로알케닐기, C2~C30의 알키닐기, C5~C50의 사이클로알키닐기, 시아노기, 실릴기, C1~C20의 알콕시기, C6~C60의 아릴기, C3~C60의 헤테로아릴기 및 C7~C60의 아릴알킬기 및 이들의 조합으로 이루어진 군에서 선택된 하나를 포함한다.

청구항 22

제21항에 있어서,

상기 Ar1 및 Ar2가, 각각 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C10~C50의 아릴기의 축합 고리기인

유기 발광 소자.

청구항 23

제21항에 있어서,

상기 Ar1 및 Ar2 중 어느 하나가 치환 또는 비치환된 C5~C50의 아릴기의 단일 고리기이고, 다른 하나가 치환 또는 비치환된 C10~C50의 아릴기의 축합 고리기인

유기 발광 소자.

청구항 24

제21항에 있어서,

상기 Ar1이 나프틸기, 페난트릴기, 벤조 안트릴기 또는 디벤조푸라닐기이고, Ar2가 페닐기, 또는 단일 고리기 또는 축합 고리기가 치환된 페닐기인

유기 발광 소자.

청구항 25

제21항에 있어서,

상기 Ar1이 치환 또는 비치환된 C8~C50의 아릴기의 축합 고리기이고, Ar2가 페닐기인

유기 발광 소자.

청구항 26

제21항에 있어서,

상기 Ar1 및 Ar2가, 각각 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C5~C50의 아릴기의 단일 고리기인

유기 발광 소자.

청구항 27

제21항에 있어서,

상기 Ar1 및 Ar2가, 각각 독립적으로, 치환 또는 비치환된 페닐기인

유기 발광 소자.

청구항 28

제21항에 있어서,

상기 Ar1이 페닐기이고, Ar2가 C6~C50의 아릴기의 단일 고리기 또는 축합 고리기로 치환된 페닐기인

유기 발광 소자.

청구항 29

제21항에 있어서,

상기 Ar1 및 Ar2가, 각각 독립적으로, C6~C50의 아릴기의 단일 고리기 또는 축합 고리기로 치환된 페닐기인 유기 발광 소자.

청구항 30

제19항에 있어서,

상기 유기박막층은 정공수송층, 정공주입층, 정공차단층, 전자수송층, 전자주입층 및 전자차단층으로 이루어진 군으로부터 선택된 적어도 하나를 포함하는

유기 발광 소자.

청구항 31

제30에 있어서,

상기 정공수송층, 상기 정공주입층, 상기 정공차단층, 상기 전자수송층, 상기 전자주입층 또는 상기 전자차단층이 제1항에 따른 유기 발광 화합물을 1종 이상 포함하는

유기 발광 소자.

청구항 32

제19항에 있어서,

상기 유기박막층은 제1항에 따른 유기 발광 화합물을 적어도 1종 포함하는 잉크 조성물을 용액 공정에 의해 도포하고 건조시켜 성막하여 제조된

유기 발광 소자.

청구항 33

제19항에 따른 유기 발광 소자를 포함하는 전자 기기.

청구항 34

제33에 있어서,

상기 전자 기기는: 유기 집적 회로 (O-IC), 유기 전계-효과 트랜지스터 (O-FET), 유기 박막 트랜지스터 (O-TFT), 유기 발광 트랜지스터 (O-LET), 유기 태양 전지 (O-SC), 유기 광학 검출기, 유기 광수용체, 유기 전계-켄치 소자 (O-FQD), 발광 전기화학 전지 (LEC), 유기 레이저 다이오드 (O-레이저) 또는 유기 발광 소자 (OLED)인

전자 기기.

발명의 설명

기술 분야

[0001] 유기 발광 화합물, 잉크 조성물, 유기 발광 소자 및 전자 기기에 관한 것이다.

배경 기술

- [0002] 전기 발광 소자(electroluminescence device: EL device)는 자체 발광형 표시 소자로서 응답 속도가 빠르고, 시야각이 넓다는 장점을 가지고 있다. 1987년 이스트만 코닥(Eastman Kodak)사는 발광층 재료로서 저분자 방향족 디아민과 알루미늄 착물을 이용한 유기EL 소자를 처음으로 개발하였다[Appl. Phys. Lett. 51, 913, 1987].
- [0003] OLED에서 발광 효율을 결정하는 가장 중요한 요인은 발광 재료인데, 발광 재료 중 인광 재료는 이론적으로 형광 재료 대비 4배까지 발광 효율을 개선시킬 수 있다. 현재까지 이리듐(III)착물 계열과 카바졸 계열의 재료들이 인광 발광 재료로 널리 알려져 있으며, 최근 새로운 인광 재료들이 연구되고 있다.
- [0004] 유기 전계 발광 현상의 원리는, 음극과 양극 사이에 유기물 층이 있을 때 두 전극 사이에 전압을 걸어주면 음극과 양극으로부터 각각 전자와 정공이 유기물 층으로 주입된다. 유기물 층으로 주입된 전자와 정공은 재결합하여 엑시톤 (exciton)을 형성하고, 이 엑시톤이 다시 바닥 상태로 떨어지면서 빛이 나게 된다. 이러한 원리를 이용하는 유기 발광 소자는 일반적으로 음극과 양극 및 그 사이에 위치한 유기박막층, 예컨대 정공주입층, 정공수송층, 발광층, 전자수송층을 포함하는 유기물 층으로 구성될 수 있다.
- [0005] 유기 발광 소자에서 사용되는 재료로는 순수 유기물 또는 유기물과 금속이 착물을 이루는 착화합물이 대부분을 차지하고 있으며, 용도에 따라 정공주입 재료, 정공수송 재료, 발광 재료, 전자수송 재료, 전자주입 재료 등으로 구분될 수 있다. 여기서, 정공주입 재료나 정공수송 재료로는 p-타입의 성질을 가지는 유기 재료, 즉 쉽게 산화가 되고 산화시에 전기화학적으로 안정한 상태를 가지는 유기물이 주로 사용되고 있다. 한편, 전자주입 재료나 전자수송 재료로는 n-타입 성질을 가지는 유기 재료, 즉 쉽게 환원이 되고 환원시에 전기화학적으로 안정한 상태를 가지는 유기물이 주로 사용되고 있다. 발광층 재료로는 p-타입 성질과 n-타입 성질을 동시에 가진 재료, 즉 산화와 환원 상태에서 모두 안정한 형태를 갖는 재료가 바람직하며, 엑시톤이 형성되었을 때 이를 빛으로 전환하는 발광 효율이 높은 재료가 바람직하다. 따라서, 당 기술 분야에서는 상기와 같은 요건을 갖춘 새로운 유기 재료의 개발이 요구되고 있다.

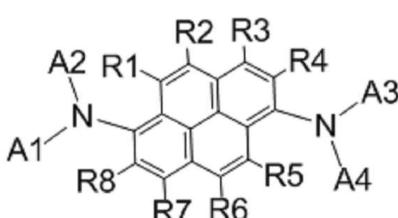
발명의 내용

해결하려는 과제

- [0006] 본 발명의 일 구현예는 적절한 에너지 준위, 전기화학적 안정성 및 열적 안정성을 가지는 신규한 유기 발광 화합물을 제공한다.
- [0007] 본 발명의 다른 구현예는 상기 유기 발광 화합물을 포함하는 잉크 조성물을 제공한다.
- [0008] 본 발명의 또 다른 구현예는 상기 유기 발광 화합물을 포함하는 유기 발광 소자를 제공한다.
- [0009] 본 발명의 또 다른 구현예는 상기 유기 발광 소자를 적용한 전자 기기를 제공한다.

과제의 해결 수단

- [0010] 본 발명의 일 구현예에서, 하기 화학식 1로 표시되는 방향족 아민 화합물인 유기 발광 화합물을 제공한다.
- [0011] [화학식 1]



[0012]

[0013]

[0014]

상기 화학식 1에서,

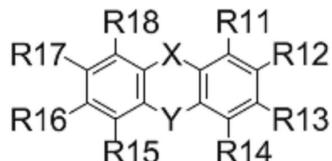
R1 내지 R8은, 각각 독립적으로, 수소, 중수소, 할로겐, 치환 또는 비치환된 C1~C30의 알킬기, 치환 또는 비치

환된 C3~C10의 사이클로알킬기, 치환 또는 비치환된 실릴기, 시아노기, 또는 치환 또는 비치환된 C6~C30의 아릴기이고,

[0015] A1 내지 A4는, 각각 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C6~C30의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C3~C30의 헤테로아릴기이고,

[0016] 단, 상기 A1 내지 A4 중 적어도 하나가 하기 화학식 2로 표시되는 헤테로아릴기이고,

[0017] [화학식 2]



[0018]

[0019] 상기 화학식 2에서,

[0020] X 및 Y는, 각각 독립적으로, 산소 원자 또는 황 원자이고,

[0021] R11 내지 R18 중 하나는 상기 화학식 1 중 N과 연결되는 부분이고, 그 나머지는, 각각 독립적으로, 수소 원자, 할로겐 원자, 치환 또는 비치환된 C1~C30의 알킬기, 치환 또는 비치환된 C2~C30의 알케닐기, 치환 또는 비치환된 C2~C30의 알키닐기, 치환 또는 비치환된 실릴기, 시아노기, 치환 또는 비치환된 C6~C30의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C4~C30의 헤테로아릴기이고,

[0022] 상기 R11 내지 R18 중 인접하는 둘이 서로 연결되어 치환 또는 비치환된 C4~C30의 사이클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6~C30의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C4~C30의 헤테로아릴기를 형성할 수 있고,

[0023] 상기 치환된 경우의 추가적인 치환기는 중수소, 할로겐 원자, C1~C30의 알킬기, C3~C50의 사이클로알킬기, C2~C30의 알케닐기, C3~C50의 사이클로알케닐기, C2~C30의 알키닐기, C5~C50의 사이클로알키닐기, 시아노기, 실릴기, C1~C20의 알콕시기, C6~C60의 아릴기, C3~C60의 헤테로아릴기 및 C7~C60의 아릴알킬기 및 이들의 조합으로 이루어진 군에서 선택된 하나를 포함한다.

[0024] 본 발명의 다른 구현예에서, 상기 유기 발광 화합물의 적어도 1종을 포함하는 잉크 조성물을 제공한다.

[0025] 본 발명의 또 다른 구현예에서, 제1 전극; 1층 이상의 유기박막층을 포함하는 유기막 및 제2 전극이 적층된 구조를 포함하고, 상기 유기박막층은 발광층을 포함하고, 상기 유기박막층 중 적어도 1층이 상기 유기 발광 화합물을 적어도 1종 포함하는 유기 발광 소자를 제공한다.

[0026] 본 발명의 또 다른 구현예에서, 상기 유기 발광 소자를 포함하는 전자 기기를 제공한다.

발명의 효과

[0027] 상기 유기 발광 화합물은 유기 발광 소자에서 사용 가능한 물질에 요구되는 조건, 예컨대 적절한 에너지 준위, 전기화학적 안정성 및 열적 안정성 등을 모두 우수하게 만족시킬 수 있으며, 치환기에 따라 유기 발광 소자에서 요구되는 다양한 역할을 할 수 있다.

도면의 간단한 설명

[0028] 도 1은 일 구현예에 따른 상기 유기 발광 소자의 구조를 개략적으로 나타낸 도면이다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

[0029] 이하, 본 발명의 구현예를 상세히 설명하기로 한다. 다만, 이는 예시로서 제시되는 것으로, 이에 의해 본 발명이 제한되지는 않으며 본 발명은 후술할 청구항의 범주에 의해 정의될 뿐이다.

[0030] 본 명세서에서 "치환"된 경우는 별도의 정의가 없는 한, 중수소, 할로겐 원자, C1~C30의 알킬기, C3~C50의 사이클로알킬기, C2~C30의 알케닐기, C3~C50의 사이클로알케닐기, C2~C30의 알키닐기, C5~C50의 사이클로알키닐기,

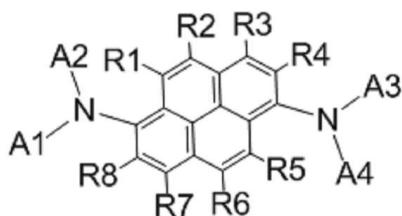
시아노기, 실릴기, C1~C20의 알콕시기, C6~C60의 아릴기, C3~C60의 헤테로아릴기 및 C7~C60의 아릴알킬기 및 이들의 조합으로 이루어진 군에서 선택된 치환기로 치환된 경우를 포함한다.

[0031] 본 명세서에서 "이들의 조합"이란 별도의 정의가 없는 한, 둘 이상의 치환기가 연결기로 결합되어 있거나, 둘 이상의 치환기가 축합하여 결합되어 있는 것을 의미한다.

[0032] 본 명세서에서 "헤테로"란 별도의 정의가 없는 한, 하나의 화합물 또는 치환기 내에 헤테로 원자를 포함함을 의미하고, 상기 헤테로 원자는 N, O, S, P 및 이들의 조합으로 이루어진 군에서 선택된 하나일 수 있다. 예를 들어, 상기 하나의 화합물 또는 치환기 내에 헤테로 원자를 1 내지 3 포함하고, 나머지는 탄소인 경우를 의미할 수 있다.

[0033] 본 발명의 일 구현예에서, 신규한 하기 화학식 1로 표시되는 방향족 아민 화합물인 유기 발광 화합물을 제공한다.

[0034] [화학식 1]



[0035]

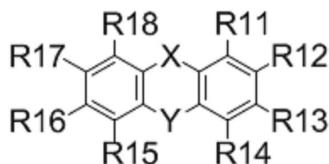
[0036] 상기 화학식 1에서,

[0037] R1 내지 R8은, 각각 독립적으로, 수소, 중수소, 할로겐, 치환 또는 비치환된 C1~C30의 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3~C10의 사이클로알킬기, 치환 또는 비치환된 실릴기, 시아노기, 또는 치환 또는 비치환된 C6~C30의 아릴기이고,

[0038] A1 내지 A4는, 각각 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C6~C30의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C3~C30의 헤테로아릴기이고,

[0039] 단, 상기 A1 내지 A4 중 적어도 하나가 하기 화학식 2로 표시되는 헤테로아릴기이고,

[0040] [화학식 2]



[0041]

[0042] 상기 화학식 2에서,

[0043] X 및 Y는, 각각 독립적으로, 산소 원자 또는 황 원자이고,

[0044] R11 내지 R18 중 하나는 상기 화학식 1 중 N과 연결되는 부분이고, 그 나머지는, 각각 독립적으로, 수소 원자, 할로겐 원자, 치환 또는 비치환된 C1~C30의 알킬기, 치환 또는 비치환된 C2~C30의 알케닐기, 치환 또는 비치환된 C2~C30의 알키닐기, 치환 또는 비치환된 실릴기, 시아노기, 치환 또는 비치환된 C6~C30의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C4~C30의 헤테로아릴기이고,

[0045]

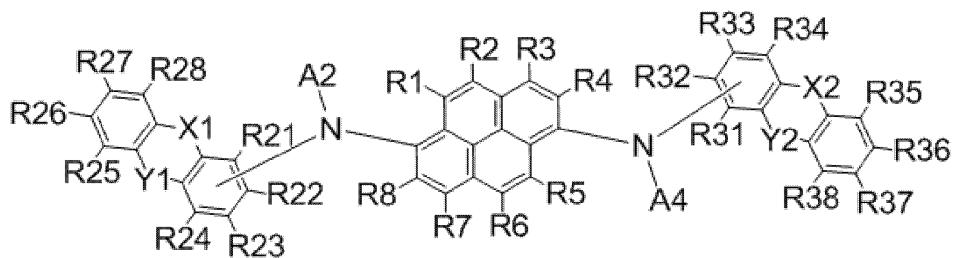
상기 R11 내지 R18 중 인접하는 둘이 서로 연결되어 치환 또는 비치환된 C4~C30의 사이클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6~C30의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C4~C30의 헤테로아릴기를 형성할 수 있고,

[0046]

상기 정의된 기가 치환된 경우의 추가적인 치환기는 중수소, 할로겐 원자, C1~C30의 알킬기, C3~C50의 사이클로알킬기, C2~C30의 알케닐기, C3~C50의 사이클로알케닐기, C2~C30의 알키닐기, C5~C50의 사이클로알키닐기, 시아노기, 실릴기, C1~C20의 알콕시기, C6~C60의 아릴기, C3~C60의 헤테로아릴기 및 C7~C60의 아릴알킬기 및 이들의 조합으로 이루어진 군에서 선택된 하나를 포함한다.

일 구현 예에서, 상기 유기 별광 화합물이 하기 화학식 3으로 표시되는 방향족 아민 화합물일 수 있다.

[화학식 3]



상기 화학식 3에서,

X_1 , X_2 , Y_1 및 Y_2 는, 각각 독립적으로, 산소 원자 또는 황 원자이고,

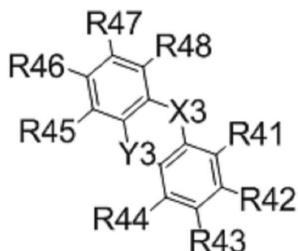
R21 내지 R28 및 R31 내지 R38 중 하나는 상기 화학식 1 중 N과 연결되는 부분이고; 그 나머지는, 각각 독립적으로, 수소 원자, 할로겐 원자, 치환 또는 비치환된 C1~C30의 알킬기, 치환 또는 비치환된 C2~C30의 알케닐기, 치환 또는 비치환된 C2~C30의 알키닐기, 치환 또는 비치환된 실릴기, 시아노기, 치환 또는 비치환된 C6~C30의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C4~C30의 헤테로아릴기이고,

상기 R21 내지 R28 및 R31 내지 R38 중 인접하는 둘이 서로 연결되어 치환 또는 비치환된 C4~C30의 사이클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6~C30의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C4~C30의 헤테로아릴기를 형성할 수 있고,

R1 내지 R8, A2 및 A4는 상기 화학식 1에서 전술하여 정의된 바와 같다.

구체적으로, 상기 화학식 3으로 표시되는 방향족 아민 화합물인 유기 발광 화합물에서, A2 및 A4가 하기 화학식 4로 표시될 수 있다.

[화학식 4]



X3 및 Y3은, 각각 독립적으로, 산소 원자 또는 황 원자이고,

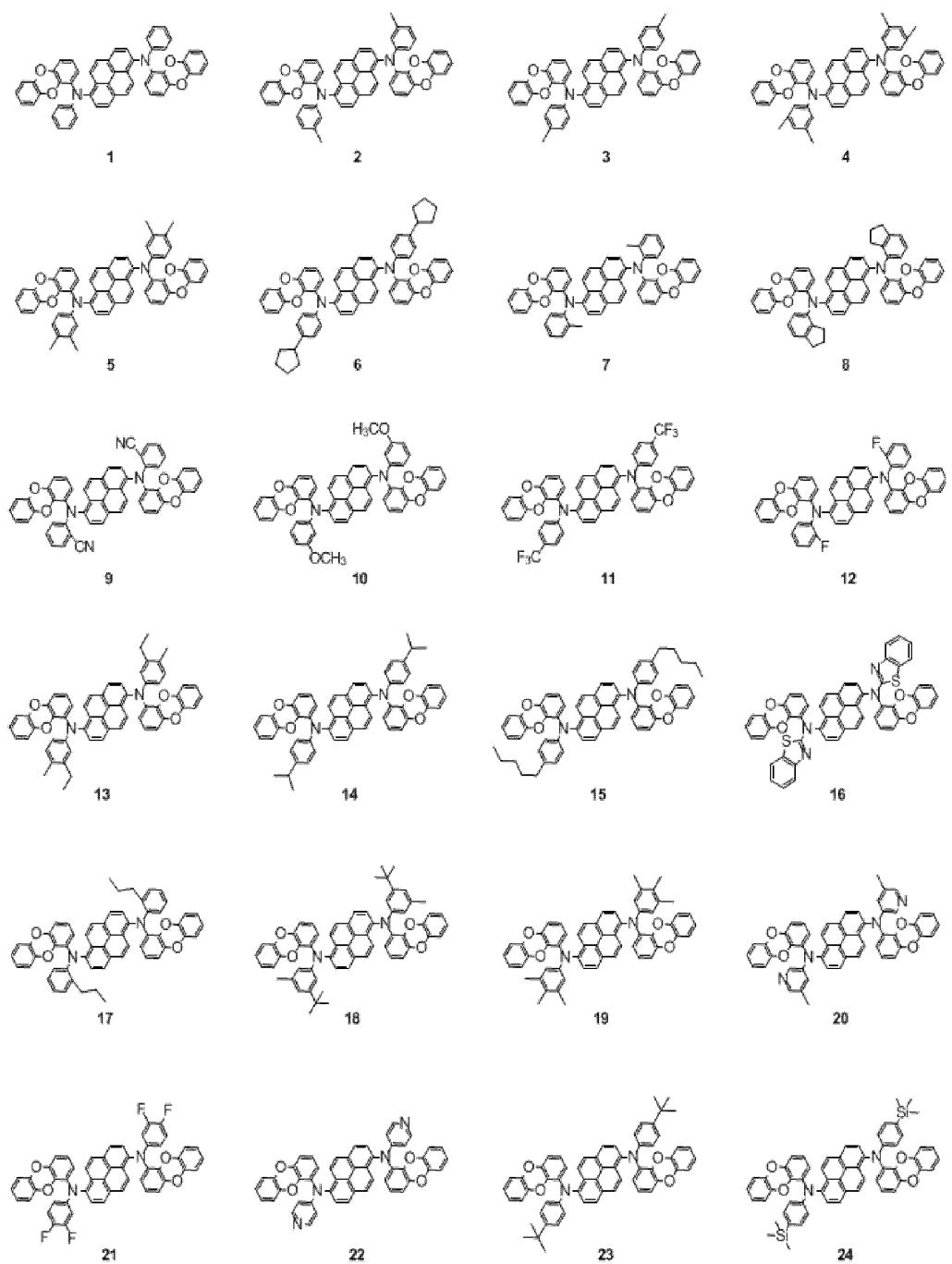
R41 내지 R48 중 하나는 상기 화학식 1 중 N과 연결되는 부분이고; 그 나머지는, 각각 독립적으로, 수소 원자, 할로겐 원자, 치환 또는 비치환된 C1~C30의 알킬기, 치환 또는 비치환된 C2~C30의 알케닐기, 치환 또는 비치환된 C2~C30의 알키닐기, 치환 또는 비치환된 실릴기, 시아노기, 치환 또는 비치환된 C6~C30의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C4~C30의 헤테로아릴기이고,

상기 R21 내지 R28 및 R31 내지 R38 중 인접하는 둘이 서로 연결되어 치환 또는 비치환된 C4~C30의 사이클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6~C30의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C4~C30의 헤테로아릴기를 형성할 수 있다.

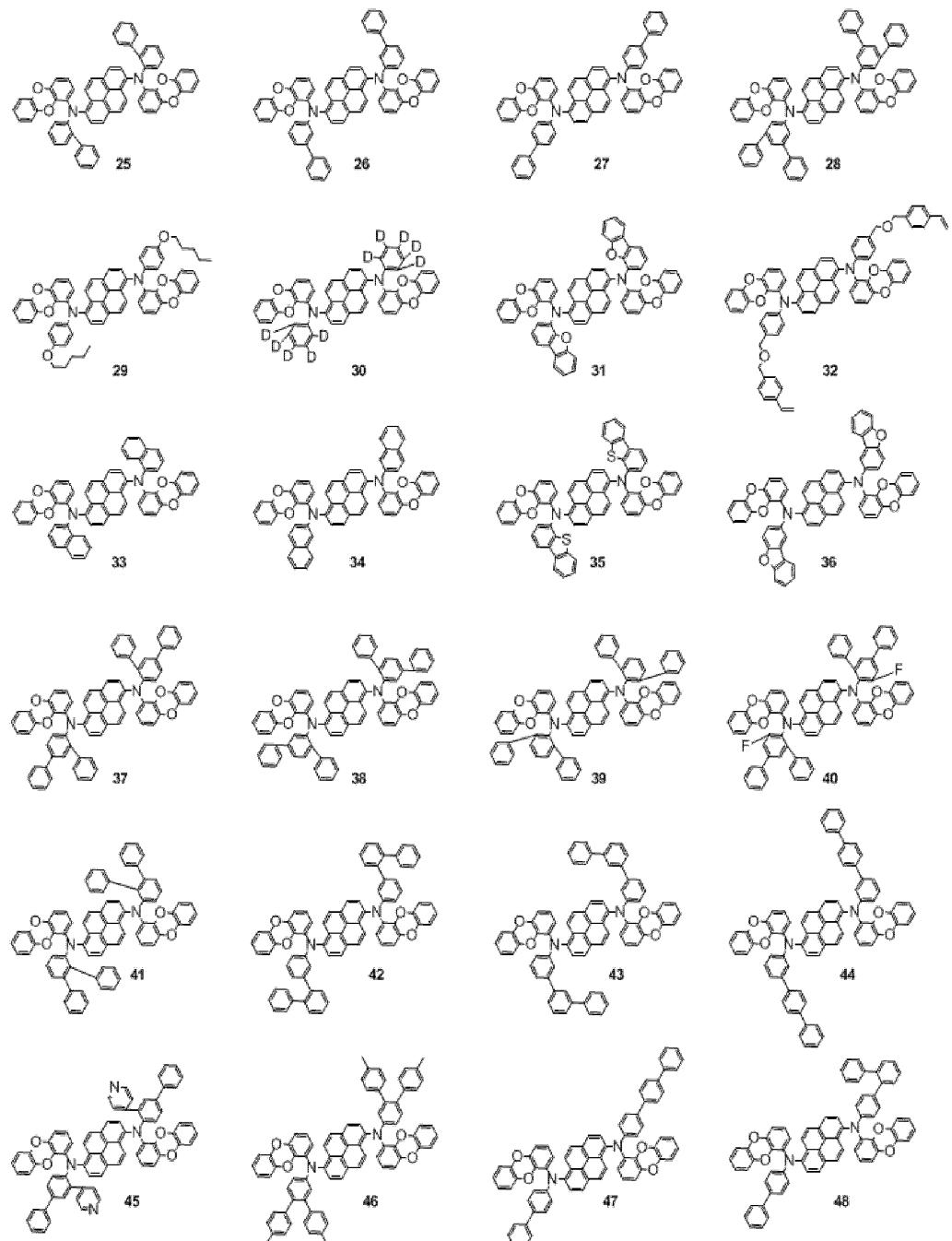
다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 1로 표시되는 방향족 아민 화합물인 유기 발광 화합물에서, R1 내지 R8이 수소 원자일 수 있다.

- [0062] 또 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 1 또는 상기 화학식 3으로 표시되는 방향족 아민 화합물인 유기 발광 화합물에서: R2가 치환 또는 비치환된 C1~C20의 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3~C10의 사이클로알킬기, 치환 또는 비치환된 실릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C6~C30의 아릴기이고; R1, R3, R4, R5, R6, R7 및 R8이 수소 원자일 수 있다.
- [0063] 또 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 1 또는 상기 화학식 3으로 표시되는 방향족 아민 화합물인 유기 발광 화합물에서: R2 및 R6은, 각각 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C1~C20의 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3~C10의 사이클로알킬기, 치환 또는 비치환된 실릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C6~C30의 아릴기이고; R1, R3, R4, R5, R7 및 R8이 수소 원자일 수 있다.
- [0064] 또 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 1 또는 상기 화학식 3으로 표시되는 방향족 아민 화합물인 유기 발광 화합물에서: R3이 치환 또는 비치환된 C1~C20의 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3~C10의 사이클로알킬기, 치환 또는 비치환된 실릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C6~C30의 아릴기이고; R1, R2, R4, R5, R6, R7 및 R8이 수소 원자일 수 있다.
- [0065] 또 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 1 또는 상기 화학식 3으로 표시되는 방향족 아민 화합물인 유기 발광 화합물에서: R3 및 R7이, 각각 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C1~C20의 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3~C10의 사이클로알킬기, 치환 또는 비치환된 실릴기, 또는 치환 또는 비치환된 C6~C30의 아릴기이고; R1, R2, R4, R5, R6 및 R8이 수소 원자일 수 있다.
- [0066] 또 다른 구현예에 따르면, 상기 방향족 아민 화합물인 유기 발광 화합물 중 상기 화학식 2로 표시되는 기에서, X 및 Y가 산소 원자일 수 있다.
- [0067] 또 다른 구현예에 따르면, 상기 화학식 3으로 표시되는 방향족 아민 화합물인 유기 발광 화합물에서, X1, X2, Y1 및 Y2가 산소 원자일 수 있다.
- [0068] 또 다른 구현예에 따르면, 상기 방향족 아민 화합물인 유기 발광 화합물 중 상기 화학식 4로 표시되는 기에서, X3 및 Y3이 산소 원자일 수 있다.
- [0069] 예를 들어, 상기 유기 발광 화합물은 하기 표 1에 기재된 1 내지 144 중의 어느 하나의 화합물 (이하, 화합물 1 등이라 함)일 수 있다.

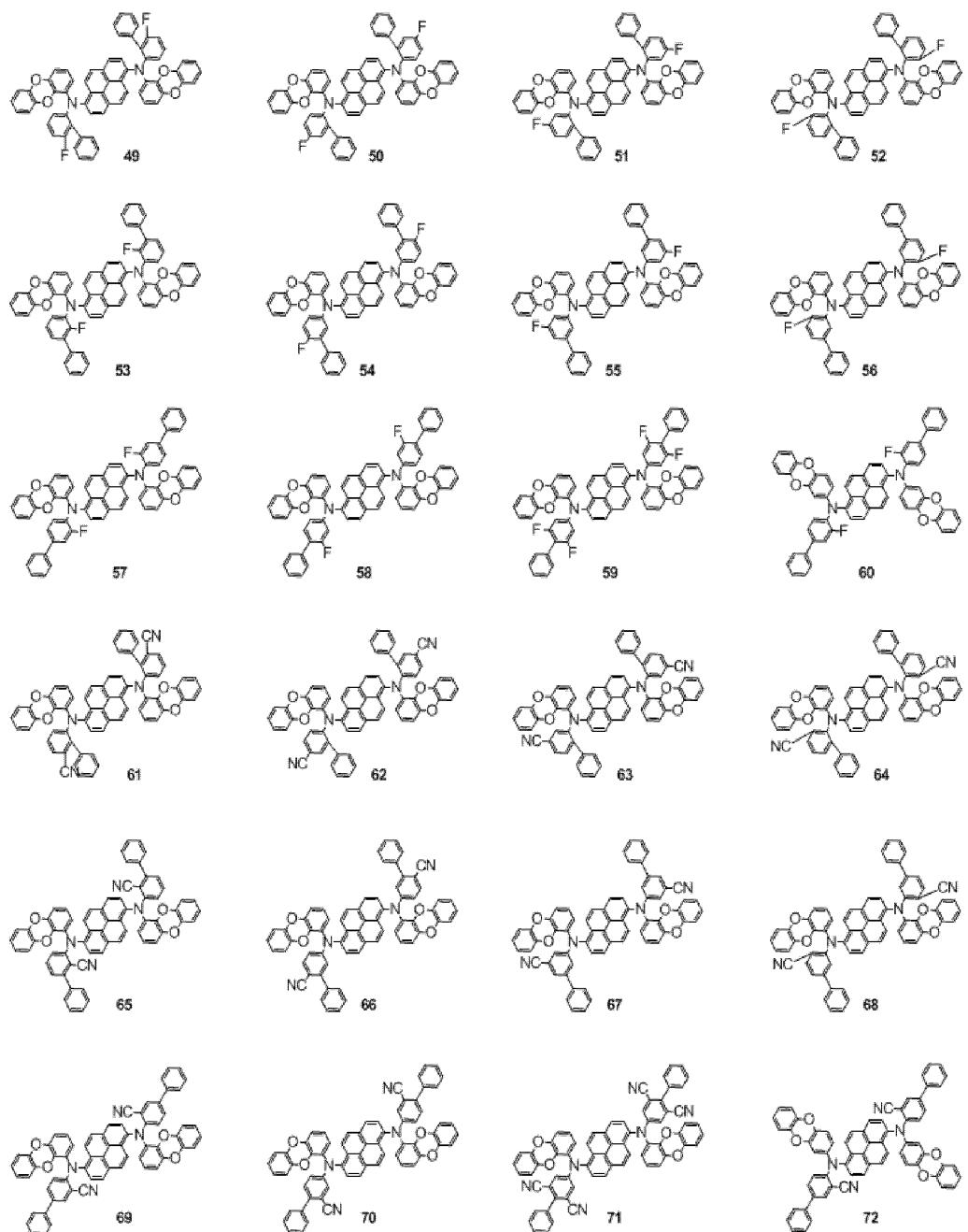
豆 1



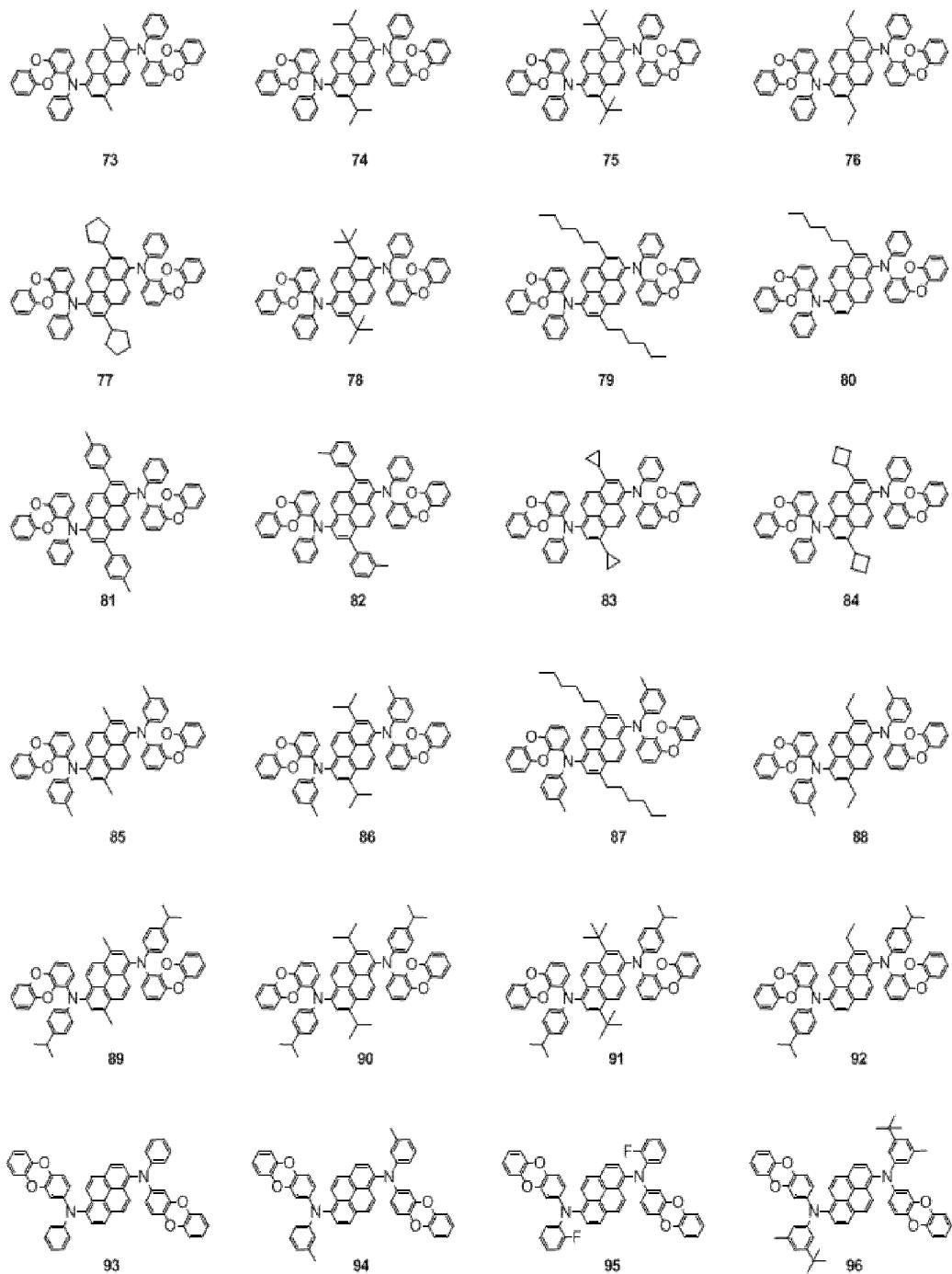
[0070]



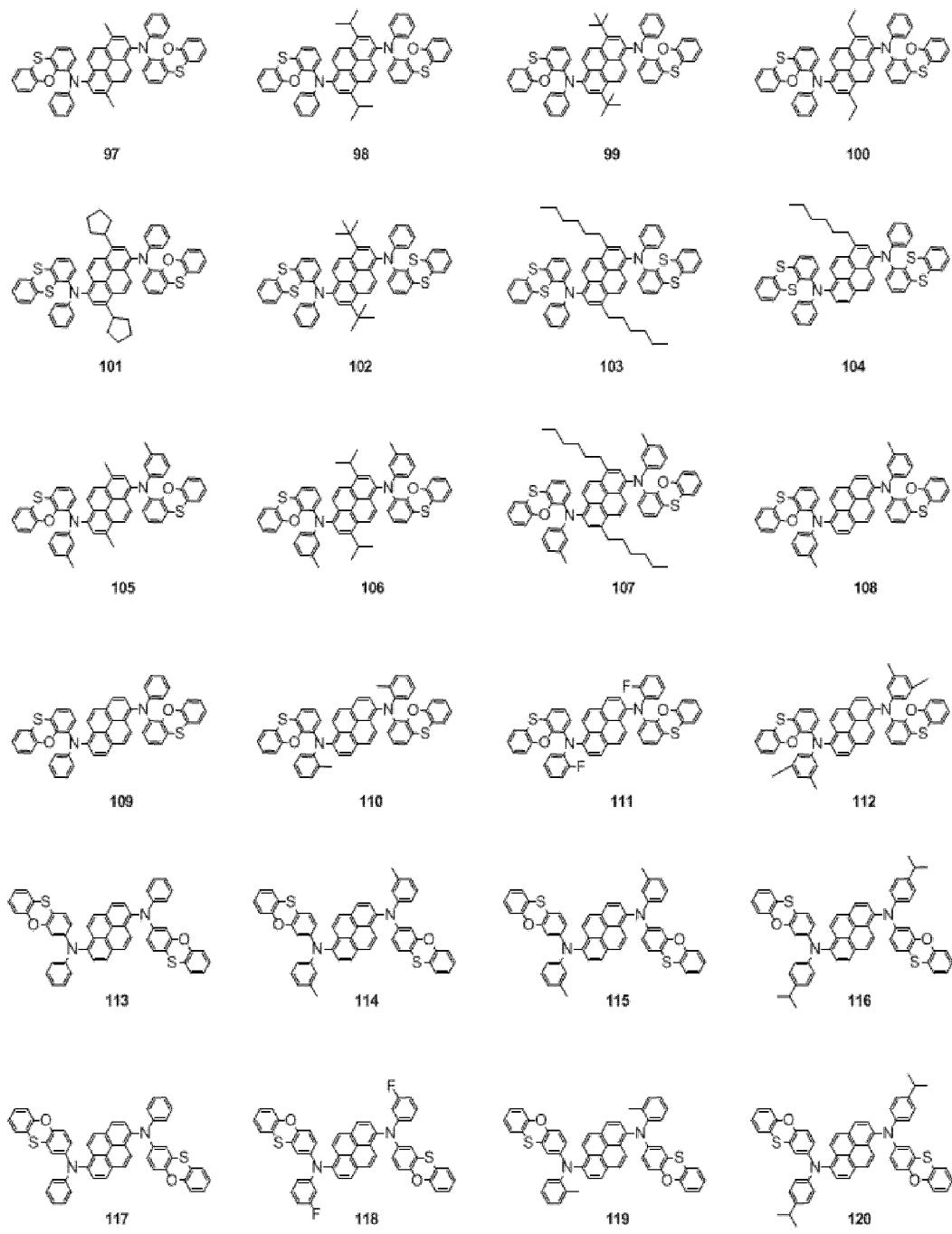
[0071]



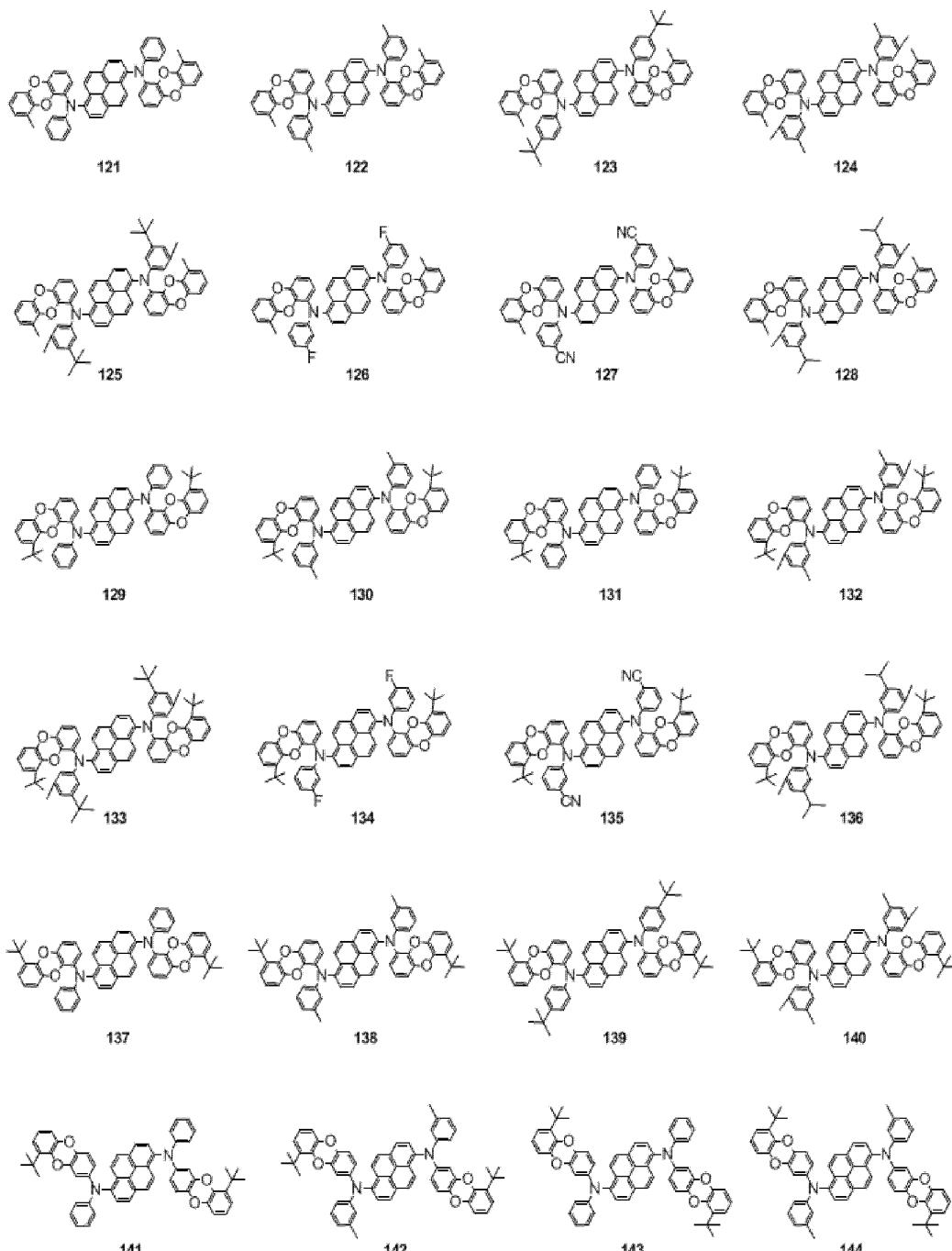
[0072]



[0073]

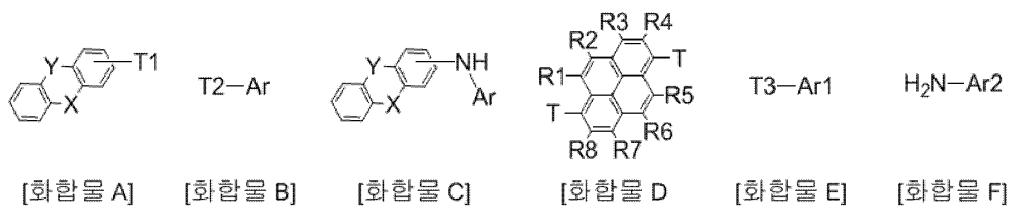


[0074]



[0075]

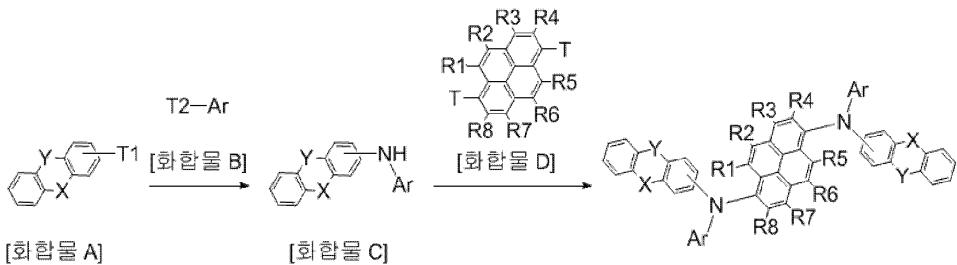
상기 유기 발광 화합물은, 예를 들어, 하기 화합물 A, 화합물 B, 화합물 C, 화합물 D, 화합물 E 및 화합물 F를 하기 반응식 1 또는 반응식 2에 의해 반응시켜 합성할 수 있다.



[0077]

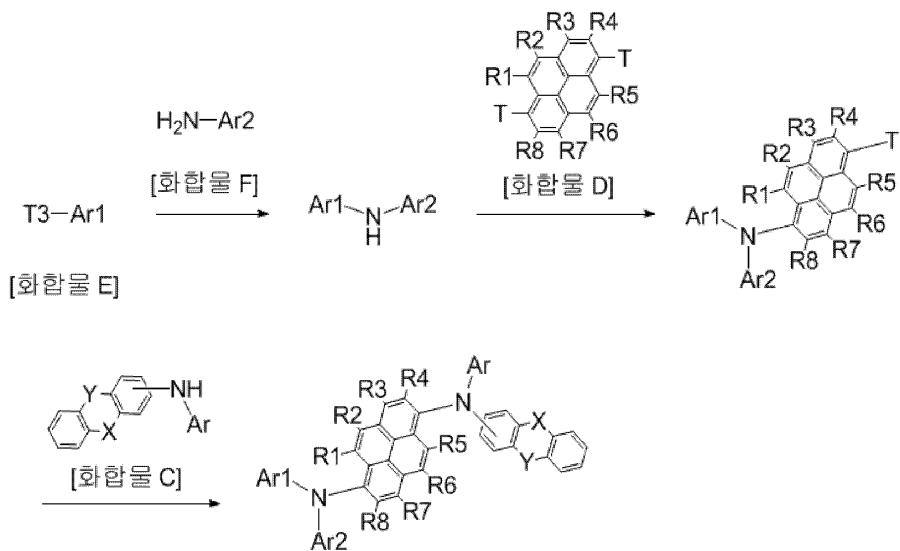
[0078] 상기 화합물 A, 화합물 B, 화합물 C, 화합물 D, 화합물 E 및 화합물 F 중, T1, T2, T3, T는 각각 독립적으로, NH₂, Cl, Br 또는 I 이고, R1, R2, R3, R4, R5, R6, R7 및 R8은 상기 화학식 1에서 정의된 바와 같고, Ar, Ar1 및 Ar2는 상기 화학식 1에서 A1 내지 A4에 대하여 정의된 바와 같다.

[0079] [반응식 1]



[0080]

[0081] [반응식 2]



[0082]

[0083] 상기 화합물 1 내지 144는 상기 반응식 1에 의해 모두 합성될 수 있다.

[0084] 상기 화합물 1 내지 144 이외에도 치환기를 적절히 대체하여 상기 화학식 1로 표시되는 방향족 아민 화합물을 다양하게 합성할 수 있다.

[0085]

상기 유기 발광 화합물은 유기 발광 소자용 발광 재료로서 사용될 수 있다.

[0086]

상기 유기 발광 화합물이 유기 발광 소자용 도핑 재료로서 사용될 수 있다.

[0087]

본 발명의 다른 구현예에서, 상기 방향족 아민 화합물의 유기 발광 화합물의 적어도 1종을 포함하는 잉크 조성물을 제공한다.

[0088]

상기 잉크 조성물은 용매를 포함하는 용액 또는 혼탁액일 수 있고, 상기 용매는, 예를 들어, 아니솔, 디메틸 아닐, 크실렌, o-크시렌, m-크시렌, p-크시렌, 틀루엔, 메시틸렌, 메틸 벤조에이트, 다이옥산, 테트라하이드로 퓨란, 메틸 테트라하이드로 퓨란, 테트라하이드로 퓨란, 테트랄린, 베라트롤, 클로로벤젠, N-메틸 피롤리돈, N,N-

디메틸포름아마이드, 디메틸су 폭사이드 및 이들의 조합으로 이루어진 군으로부터 선택된 하나를 포함할 수 있다.

[0089] 상기 잉크 조성물을 도포한 뒤 용매를 제거하여 성막함으로써 유기 발광 소자에 적용되는 유기박막층을 형성할 수 있다.

[0090] 상기 잉크 조성물은 안료 또는 염료를 더 포함할 수 있다.

[0091] 상기 잉크 조성물은 인광 도판트 또는 형광 도판트를 더 포함할 수 있다.

[0092] 본 발명의 또 다른 구현예에서, 제1 전극; 1층 이상의 유기박막층을 포함하는 유기막 및 제2 전극이 적층된 구조를 포함하고, 상기 유기박막층은 발광층을 포함하고, 상기 유기박막층 중 적어도 1층이 상기 방향족 아민 화합물인 유기 발광 화합물을 적어도 1종 포함하는 유기 발광 소자를 제공한다.

[0093] 상기 유기 발광 소자의 유기박막층에 포함되는 상기 방향족 아민 화합물인 유기 발광 화합물은 상기 화학식 1로 표시되는 화합물이고, 그에 대한 상세한 설명은 전술한 바와 같다.

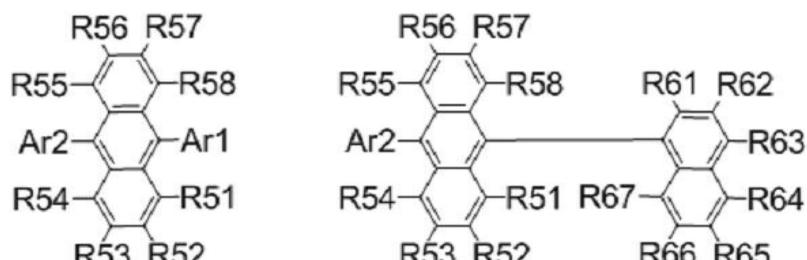
[0094] 상기 유기박막층은 유기 박막층을 형성하거나 적층하는 공지된 제조 방법에 따라서 제조될 수 있거나, 또는, 상기 유기박막층은 전술한 바와 같이, 상기 잉크 조성물을 이용하여 용액 공정으로 성막하여 제조될 수 있다.

[0095] 일 구현예에서, 상기 유기박막층이 발광층을 포함하고, 상기 발광층이 상기 유기 발광 화합물을 포함할 수 있고, 상기 유기 발광 화합물은 발광층 중 인광 호스트, 형광 호스트, 인광 도판트, 또는 형광 도판트 재료로서 포함될 수 있다.

[0096] 상기 발광층은 상기 화학식 1로 표시되는 화합물, 이외에, 추가적으로, 공지된 재료의 인광 호스트, 형광 호스트, 인광 도판트, 또는 형광 도판트 재료를 더 포함할 수 있다.

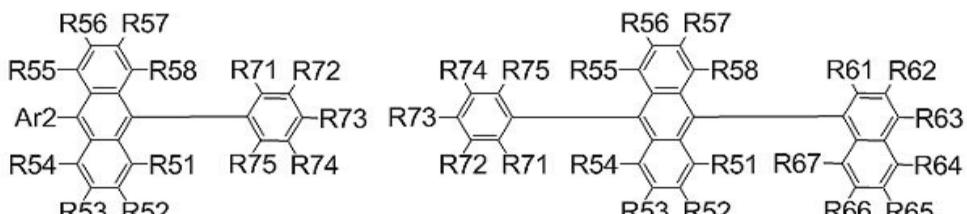
[0097] 예를 들어, 상기 발광층은 하기 화학식 5 내지 화학식 10으로 표시되는 안트라센 화합물 중 어느 하나를 더 포함할 수 있다.

[0098] [화학식 5] [화학식 6]



[0099]

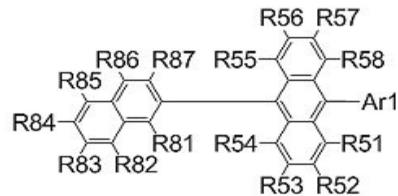
[0100] [화학식 7] [화학식 8]



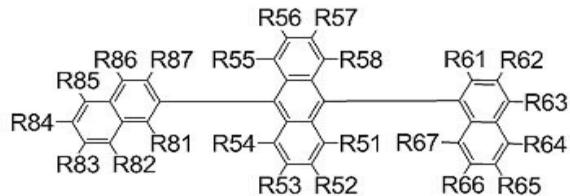
[0101]

[0102]

[화학식 9]



[화학식 10]



[0103]

상기 화학식 5 내지 화학식 10에 있어서,

[0104]

Ar1 및 Ar2는, 각각 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C6~C50의 아릴기, 치환 또는 비치환된 C6~C50의 헤테로아릴기이고, 상기 사이클로알킬기, 아릴기 및 상기 헤테로아릴기는, 각각, 단일 고리, 복수의 고리가 융합되거나 축합된 축합고리 및 이들의 조합으로 이루어진 군으로부터 선택된 하나를 포함하고,

[0105]

R51 내지 R58, R61 내지 R67, R71 내지 R75, 및 R81 내지 R87은, 각각 독립적으로, 수소 원자, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1~C50의 알킬기, 치환 또는 비치환된 C6~C50의 아릴기, 치환 또는 비치환된 C6~C50의 헤테로아릴기, C1~C50의 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C7~C50의 아르알킬기, 치환 또는 비치환된 C6~C50의 아릴옥시, 치환 또는 비치환된 실릴기, 할로겐 원자 또는 시아노기이고, 상기 사이클로알킬기, 아릴기 및 상기 헤테로아릴기는, 각각, 단일 고리, 복수의 고리가 융합되거나 축합된 축합 고리 및 이들의 조합으로 이루어진 군으로부터 선택된 하나를 포함하고,

[0106]

상기 치환된 경우의 추가적인 치환기는 중수소, 할로겐 원자, C1~C30의 알킬기, C3~C50의 사이클로알킬기, C2~C30의 알케닐기, C3~C50의 사이클로알케닐기, C2~C30의 알키닐기, C5~C50의 사이클로알키닐기, 시아노기, 실릴기, C1~C20의 알콕시기, C6~C60의 아릴기, C3~C60의 헤테로아릴기 및 C7~C60의 아릴알킬기 및 이들의 조합으로 이루어진 군에서 선택된 하나를 포함한다.

[0107]

구체적으로, 상기 화학식 5 내지 화학식 10으로 표시되는 안트라센 화합물에서, 상기 Ar1 및 Ar2가, 각각 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C10~C50의 아릴기의 축합 고리기일 수 있다.

[0108]

더욱 구체적으로, 상기 화학식 5 내지 화학식 10으로 표시되는 안트라센 화합물에서, 상기 Ar1 및 Ar2 중 어느 하나가 치환 또는 비치환된 C5~C50의 아릴기의 단일 고리기이고, 다른 하나가 치환 또는 비치환된 C10~C50의 아릴기의 축합 고리기일 수 있다.

[0109]

예를 들어, 상기 Ar1이 나프틸기, 폐난트릴기, 벤조 안트릴기 또는 디벤조푸라닐기이고, Ar2가 폐닐기, 또는 단일 고리기 또는 축합 고리기가 치환된 폐닐기일 수 있다.

[0110]

다른 예를 들어, 상기 Ar1이 치환 또는 비치환된 C8~C50의 아릴기의 축합 고리기이고, Ar2가 폐닐기일 수 있다.

[0111]

또 다른 예를 들어, 상기 Ar1 및 Ar2가, 각각 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C5~C50의 아릴기의 단일 고리기일 수 있다.

[0112]

또 다른 예를 들어, 상기 Ar1 및 Ar2가, 각각 독립적으로, 치환 또는 비치환된 폐닐기일 수 있다.

[0113]

또 다른 예를 들어, 상기 Ar1 및 Ar2가, 각각 독립적으로, 치환 또는 비치환된 폐닐기일 수 있다.

[0114]

또 다른 예를 들어, 상기 Ar1이 폐닐기이고, Ar2가 C6~C50의 아릴기의 단일 고리기 또는 축합 고리기로 치환된 폐닐기일 수 있다.

[0115]

또 다른 예를 들어, 상기 Ar1 및 Ar2가, 각각 독립적으로, C6~C50의 아릴기의 단일 고리기 또는 축합 고리기로 치환된 폐닐기일 수 있다.

[0116]

상기 유기박막층은 필요한 용도에 따라서 적절히 정공수송층, 정공주입층, 정공차단층, 전자수송층, 전자주입층 및 전자차단층으로 이루어진 군으로부터 선택된 하나 이상을 포함할 수 있다.

[0117]

상기 정공수송층, 정공주입층, 정공차단층, 전자수송층, 전자주입층 및 전자차단층은, 각각, 공지된 물질을 사

용하여 형성되거나, 상기 화학식 1로 표시되는 유기 발광 화합물을 1종 이상 포함할 수 있다.

[0118] 도 1은 일 구현예에 따른 상기 유기 발광 소자의 구조를 개략적으로 나타낸 도면이다.

[0119] 본 발명의 또 다른 구현예에서, 상기 유기 발광 소자를 포함하는 전자 기기를 제공한다.

[0120] 상기 유기 발광 소자는 다양한 응용분야에 적용될 수 있다. 예를 들어, 상기 유기 발광 소자가 적용된 상기 전자 기기는 유기 접적 회로 (O-IC), 유기 전계-효과 트랜지스터 (O-FET), 유기 박막 트랜지스터 (O-TFT), 유기 발광 트랜지스터 (O-LET), 유기 태양 전지 (O-SC), 유기 광학 겸출기, 유기 광수용체, 유기 전계-켄치 소자 (O-FQD), 발광 전기화학 전지 (LEC), 유기 레이저 다이오드 (O-레이저) 또는 유기 발광 소자 (OLED)일 수 있다.

[0121] 이하 본 발명의 실시예 및 비교예를 기재한다. 그러한 하기한 실시예는 본 발명의 일 실시예일뿐 본 발명이 하기한 실시예에 한정되는 것은 아니다.

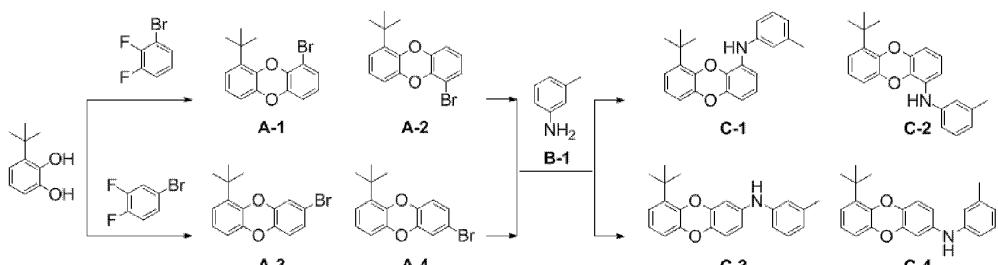
[0122] (실시예)

[0123] 이하에서, 반응예 및 비교예를 구체적으로 예시하지만, 본 발명이 하기의 합성예 및 실시예로 한정되는 것은 아니다. 이하의 반응예에서 중간체 화합물은 최종 생성물의 번호에 일련번호를 추가하는 방식으로 표기한다. 예를 들어, 화합물 1은 화합물 [1]로 상기 화합물의 중간체 화합물은 [1-1] 등으로 표기한다. 본 명세서에서 화합물의 번호는 상기 표 1에 기재된 화학식의 번호로서 표기한다. 예를 들어, 표 1에서 1로 표시된 화합물은 화합물 1로 표기한다.

[0124] 합성예 1: 중간체 화합물 [C-1], [C-2], [C-3] 및 [C-4]의 제조

[0125] 하기 반응식 3에 따라 화합물 [C-1], 화합물 [C-2], 화합물 [C-3] 및 화합물 [C-4]을 합성하였다.

[0126] [반응식 3]



[0127]

[0128] 중간체 화합물 [A-1] 및 [A-2]의 제조

[0129] 0.5L 반응 플라스크에 질소 분위기에서 3-터트-부틸벤젠-1,2-디올 3.0g (18.0mmol), 1-브로모-2,3-디플루오로벤젠 7.0g(36.1mmol), 탄산세슘 11.8g(36.1mmol), 무수 N-메틸피롤리돈 0.1L를 가하고 190°C에서 4시간 교반하였다. 반응이 종료 후, 온도를 낮춘 뒤, 톨루엔과 증류수를 첨가하여 충분리하고, 얻어진 유기층을 감압 증류하였다. 이 혼합물을 컬럼크로마토그래피 방법을 이용, 정제하여 중간체 화합물 [A-1] 0.8g(14wt%), [A-2] 1.4g(25wt%)를 분리, 제조하였다.

[0130] 중간체 화합물 [C-1] 및 [C-2]의 제조

[0131] 0.5L 반응 플라스크에 질소 분위기에서 화합물 [A-1] 3.0g(9.4mmol), 화합물 [B-1] 1.1g(10.3mmol), 팔라듐아세테이트 20mg(0.1mmol), 소듐터트부토사이드 1.5g(15.5mmol), 톨루엔 40mL, 트리터트부틸포스핀(50% 톨루엔 용액) 0.1mL(0.2mmol)를 가하고 5시간 동안 환류 교반하였다. 상온으로 냉각하고 증류수 50mL, 에틸아세테이트

50mL 가하여 충분리하고, 얻어진 유기층을 감압 증류하였다. 이 혼합물을 컬럼크로마토그래피 방법을 이용, 정제하여 중간체 화합물 [C-1] 1.9g(62wt%), [C-2] 2.1g(68wt%)를 분리, 제조하였다.

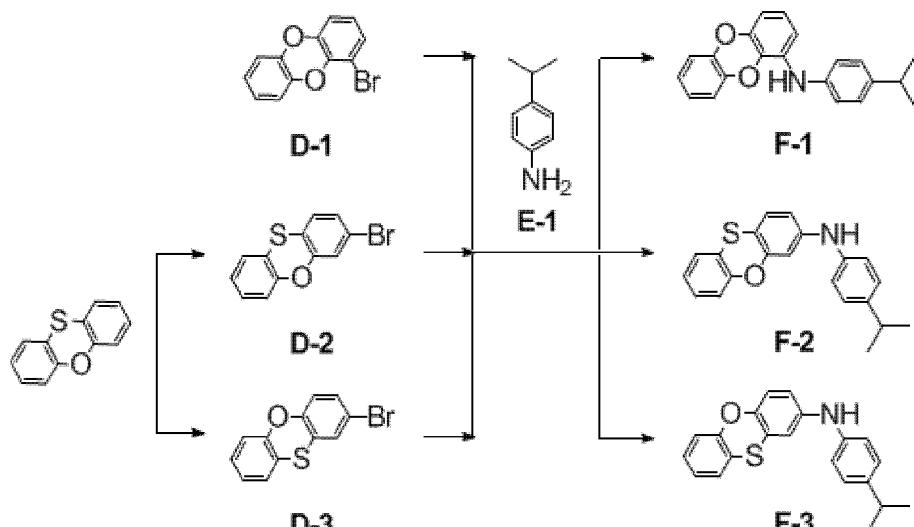
[0132] 중간체 화합물 [C-3] 및 [C-4]의 제조

[0133] 중간체 화합물 [A-3] 및 [A-4]를 사용하여, 중간체 화합물 [C-1] 및 [C-2]의 제조방법과 같은 방법으로 진행하여, 중간체 화합물 [C-3] 2.2g(71wt%), [C-4] 2.4g(75wt%)를 분리, 제조하였다.

[0134] 합성예 2: 중간체 화합물 [F-1], [F-2] 및 [F-3]의 제조

[0135] 하기 반응식 4에 따라 화합물 [F-1], 화합물 [F-2] 및 화합물 [F-3]을 합성하였다.

[0136] [반응식 4]



[0137]

[0138] 중간체 화합물 [D-2] 및 [D-3]의 제조

[0139] 0.5L 반응 플라스크에 질소 분위기에서 페노사이아탄 10g (49.9mmol), 무수 메틸렌클로라이드 0.2L를 가하고 0 °C에서 교반하였다. N-브로모석신이미드 8.89g (49.9mmol)을 천천히 가하고 실온으로 온도를 올리면서 교반하였다. 반응이 종료 후, 증류수 0.2L를 가하고 분리된 유기층을 감압 증류하였다. 생성된 고체는 메탄올을 사용하여 세척하며 여과하였다. 여과된 고체를 컬럼크로마토그래피 방법을 이용, 정제하여 중간체 화합물 [D-2] 1.9g(14wt%), 중간체 화합물 [D-3] 4.3g(31wt%)를 분리, 제조하였다.

[0140] 중간체 화합물 [F-1]의 제조

[0141] 0.5L 반응 플라스크에 질소 분위기에서 화합물 [D-1] 5.0g(19.0mmol), 화합물 [E-1] 2.8g(20.9mmol), 팔라듐아세테이트 50mg(0.2mmol), 소듐터트부톡사이드 3.0g(31.4mmol), 톨루엔 100mL, 트리터트부틸포스핀(50% 톨루엔 용액) 0.2mL(0.4mmol)를 가하고 5시간 동안 환류 교반하였다. 상온으로 냉각하고 증류수 100mL, 에틸아세테이트 200mL 가하여 충분리하고, 얻어진 유기층을 감압 증류하였다. 이 혼합물을 컬럼크로마토그래피 방법을 이용, 정제하여 중간체 화합물 [F-1] 4.9g(82wt%)를 제조하였다.

[0142] 중간체 화합물 [F-2]의 제조

[0143] 화합물 [D-2]를 사용하여, 화합물 [F-1]의 제조방법과 같은 방법으로 진행하여, 중간체 화합물 [F-2] 4.6g(77wt%)를 제조하였다.

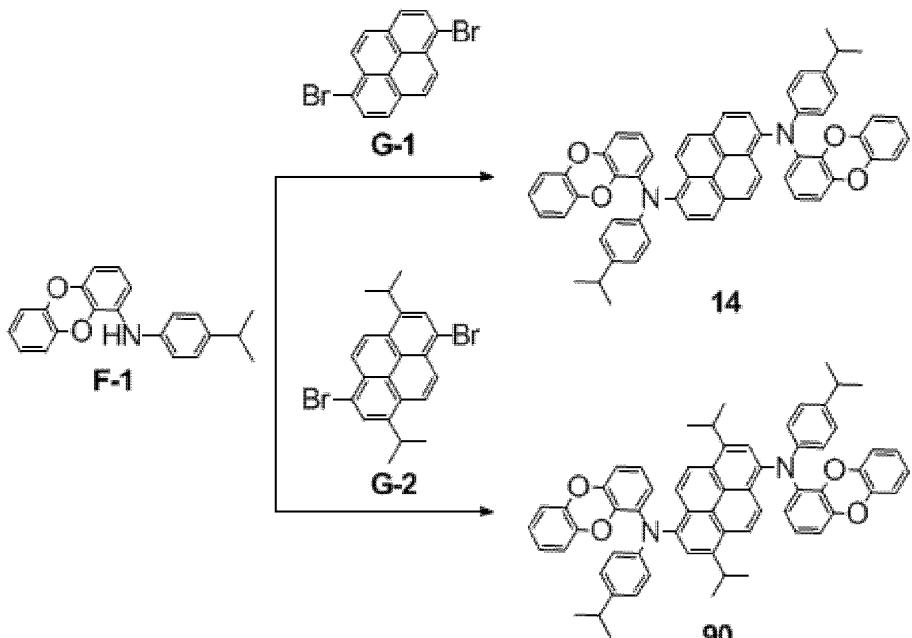
[0144] 중간체 화합물 [F-3]의 제조

화합물 [D-3]를 사용하여, 화합물 [F-1]의 제조방법과 같은 방법으로 진행하여, 중간체 화합물 [F-3] 4.2g(71wt%)를 제조하였다.

[0146] 실시예 1-2: 화합물 [14] 및 [90]의 제조

하기 반응식 5에 따라 화합물 [14] 및 [90]을 합성하였다.

[반응식 5]



[0149]

[0150] 화합물 [14]의 제조

0.5L 반응 플라스크에 질소 분위기에서 화합물 [F-1] 11.0g(34.7mmol), 화합물 [G-1] 5.0g(13.9mmol), 팔라듐 아세테이트 0.2g(0.7mmol), 소듐터트부톡사이드 10.0g(104.2mmol), 툴루엔 100mL, 트리터트부틸포스핀(50% 툴루엔 용액) 0.3mL(1.4mmol)를 천천히 가하고 12시간 동안 환류 교반하였다. 상온으로 냉각하고 중류수 100mL, 에틸아세테이트 200mL 가하여 충분리하고, 얻어진 유기층을 감압 증류하였다. 이 혼합물을 컬럼크로마토그래피 방법을 이용, 정제하여 목적화합물 [14] 8.2g(71wt%)를 제조하였다.

[0152]

MS/FAB, $C_{58}H_{44}N_2O_4 = 832.98$, found $m/z = 833(M^+)$

[0153] 화합물 [90]의 제조

화합물 [F-1] 8.9g(28.1mmol), 화합물 [G-2] 5.0g(11.3mmol), 팔라듐아세테이트 0.1g(0.6mmol), 소듐터트부톡사이드 8.1g(84.4mmol), 툴루엔 100mL, 트리터트부틸포스핀(50% 툴루엔 용액) 0.2mL(1.1mmol)를 사용하여, 화합물 [14]의 제조방법과 같은 방법으로 진행하여, 목적화합물 [90] 5.7g(55wt%)를 제조하였다.

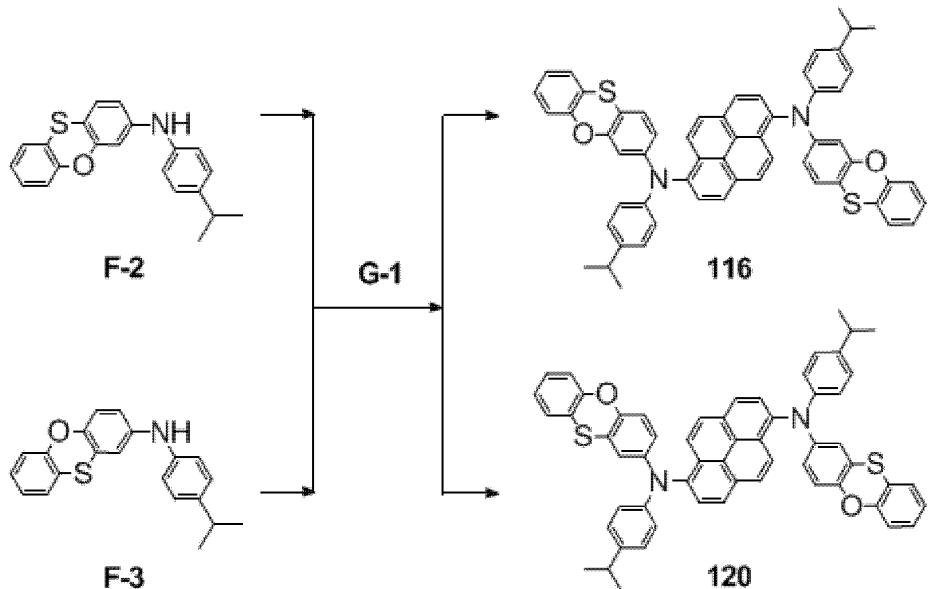
[0155]

MS/FAB, $C_{6}H_{56}N_2O_4 = 917.14$, found $m/z = 917(M^+)$

[0156] 실시예 3-4: 화합물 [116] 및 [120]의 제조

[0157] 하기 반응식 6에 따라 화합물 [116] 및 [120]을 합성하였다.

[0158] [반응식 6]



[0159]

[0160] 화합물 [116]의 제조

[0161] 화합물 [F-2] 11.6g(34.7mmol)를 사용하여, 화합물 [14]의 제조방법과 같은 방법으로 진행하여, 목적화합물 [116] 7.6g(63wt%)를 제조하였다.

[0162] MS/FAB, $C_{58}H_{44}N_2O_2S_2$ = 865.11, found m/z = 865(M^+)

[0163] 화합물 [120]의 제조

[0164] 화합물 [F-3] 11.6g(34.7mmol)를 사용하여, 화합물 [14]의 제조방법과 같은 방법으로 진행하여, 목적화합물 [120] 7.1g(59wt%)를 제조하였다.

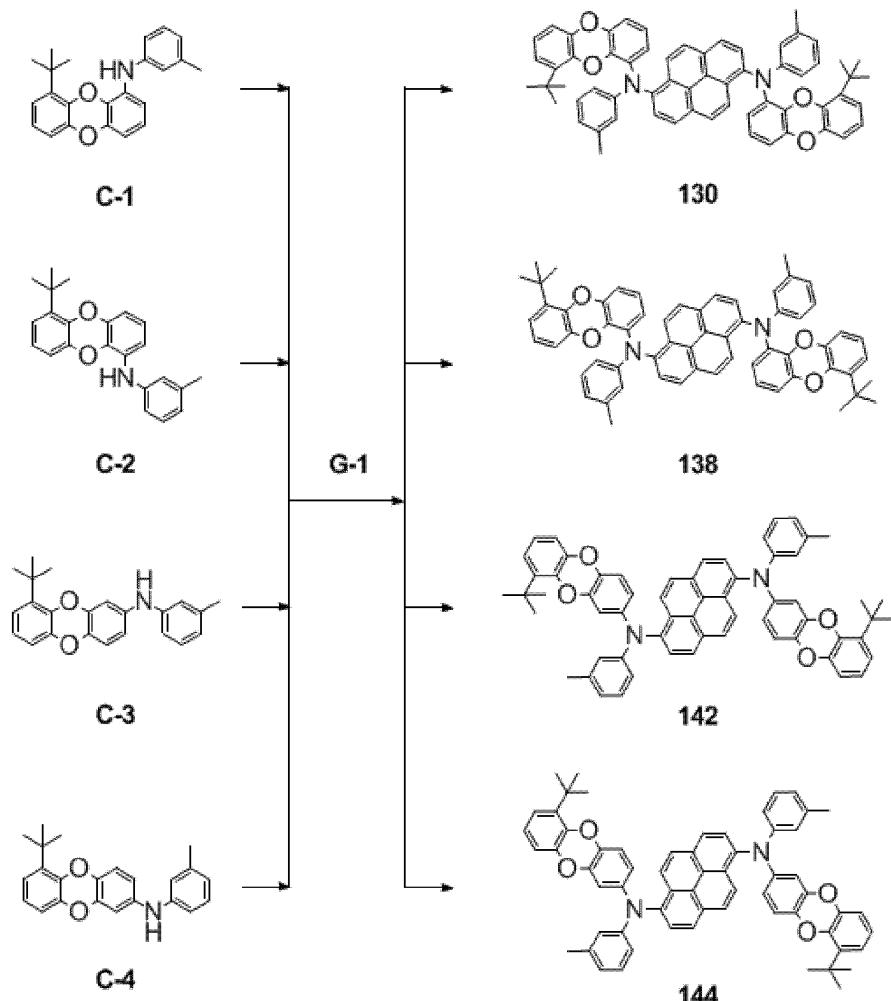
[0165] MS/FAB, $C_{58}H_{44}N_2O_2S_2$ = 865.11, found m/z = 865(M^+)

[0166] 실시예 5-8: 화합물 [130], [138], [142] 및 [144]의 제조

[0167] 하기 반응식 7에 따라 화합물 [130], [138], [142] 및 [144]을 합성하였다.

[0168]

[반응식 7]



[0169]

화합물 [130]의 제조

화합물 [C-1] 12.0g(34.7mmol)를 사용하여, 화합물 [14]의 제조방법과 같은 방법으로 진행하여, 목적화합물 [130] 5.9g(48wt%)를 제조하였다.

[0172]

MS/FAB, $C_{62}H_{52}N_2O_4$ = 889.09, found m/z = 888(M^+)

[0173]

화합물 [138]의 제조

화합물 [C-2] 12.0g(34.7mmol)를 사용하여, 화합물 [14]의 제조방법과 같은 방법으로 진행하여, 목적화합물 [138] 8.3g(67wt%)를 제조하였다.

[0175]

MS/FAB, $C_{62}H_{52}N_2O_4$ = 889.09, found m/z = 888(M^+)

[0176]

화합물 [142]의 제조

화합물 [C-3] 12.0g(34.7mmol)를 사용하여, 화합물 [14]의 제조방법과 같은 방법으로 진행하여, 목적화합물 [142] 7.3g(8.2wt%)를 제조하였다.

[0178] MS/FAB, $C_{62}H_{52}N_2O_4$ = 889.09, found m/z = 889(M^+)

[0179] **화합물 [144]의 제조**

[0180] 화합물 [C-4] 12.0g(34.7mmol)를 사용하여, 화합물 [14]의 제조방법과 같은 방법으로 진행하여, 목적화합물 [144] 8.8g(71wt%)를 제조하였다.

[0181] MS/FAB, $C_{62}H_{52}N_2O_4$ = 889.09, found m/z = 888(M^+)

[0182] **실시예 9-10: 화합물 [72] 및 [93]의 제조**

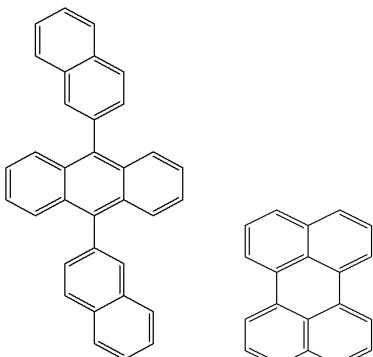
[0183] 상기 합성예 1에서 치환기만 대체한 적절한 화합물을 사용하여 중간체 화합물인 2차 아민을 만들고, 이를 사용하여 합성예 3의 방법과 동일한 방법으로 화합물 [72] 및 화합물 [93]을 제조하였다.

[0184] **비교예 1: 유기전계발광소자의 제조**

[0185] 하기 화학식 a로 표시되는 화합물 a를 형광 청색 호스트로 사용하고, 하기 화학식 b로 표시되는 화합물 b를 형광 청색 도판트로 사용하고, 2-TNATA(4,4',4"-tris(N-naphthalen-2-yl)-N-phenylamino)-triphenylamine)을 정공주입층 물질로 사용하고, α -NPD(N,N'-di(naphthalene-1-yl)-N,N'-diphenylbenzidine)을 정공수송층 물질로 사용하여, 다음과 같은 구조를 갖는 유기발광소자를 제작하였다: ITO/2-TNATA(80nm)/ α -NPD(30nm)/화합물 a + 화합물 b(30nm)/Alq3(30nm)/LiF(1nm)/Al(100nm).

[0186] 애노드는 코닝(Corning)사의 $15\Omega/cm^2$ (1000\AA) ITO 유리 기판을 50mm x 50mm x 0.7mm 크기로 잘라서 아세톤 이소프로필 알콜과 순수물 속에서 각 15분 동안 초음파 세정한 후, 30분 동안 UV 오존 세정하여 사용하였다. 상기 기판 상부에 2-TNATA를 진공 증착하여 80nm 두께의 정공주입층을 형성하였다. 상기 정공주입층 상부에, α -NPD를 진공 증착하여 30nm 두께의 정공수송층을 형성하였다. 상기 정공수송층 상부에 화학식 a로 표시되는 화합물 a 및 화학식 b로 표시되는 화합물 b(5% 도핑)를 진공 증착하여 30nm 두께의 발광층을 형성하였다. 이후, 상기 발광층 상부에 Alq3 화합물을 30nm의 두께로 진공증착하여 전자수송층을 형성하였다. 상기 전자수송층 상부에 LiF 1nm(전자주입층)과 Al 100nm(캐소드)를 순차적으로 진공증착하여, 표 1에 표시된 바와 같은 유기발광소자를 제조하였다. 이를 비교샘플 1이라고 한다.

[0187] <화학식 a> <화학식 b>



[0188]

[0189]

[0190] **실시예 11-20: 유기전계발광소자의 제조**

[0191] 상기 비교예 1에서, 발광층 형광 도판트 화합물로서 화합물 b 대신 상기 실시예 1-10에서 합성된 화합물 14, 72, 90, 93, 116, 120, 130, 138, 142 및 144를 발광층 형광 청색 도판트 화합물로 각각 이용한 것을 제외하고는 상기 비교예 1과 동일한 방법으로 ITO/2-TNATA(80nm)/ α -NPD(30nm)/[화합물a + 형광 청색 도판트 화합물

(화합물 14, 72, 90, 93, 116, 120, 130, 138, 142, 또는 144) (5wt%)] (30nm)/Alq3(30nm)/LiF(1nm)/Al(100nm)의 구조를 갖는 유기전계발광소자를 제조하였다. 이를 각각 샘플 1 내지 10이라고 한다.

[0192] 평가예 1: 비교샘플 1 및 샘플 1-10의 발광 특성 평가

비교샘플 1 및 샘플 1-10에 대하여, Keithley sourcemeter "2400", KONICA MINOLTA "CS-2000"을 이용하여 $10\text{mA}/\text{cm}^2$ 을 기준으로 발광휘도, 발광효율, 발광파크를 각각 평가하여, 그 결과를 하기 표 2에 나타내었다. 상기 샘플들은 448~461nm 범위에서 청색 발광파크값을 보여주었다.

표 2

샘플 No.	호스트 화합물 No.	도판트 화합물 No.	효율 [cd/A]	발광파크 [nm]
비교샘플 1	a	b	4.30	456, 484
1	a	14	5.45	450
2	a	72	5.81	458
3	a	90	5.66	456
4	a	93	4.97	453
5	a	116	5.53	455
6	a	120	5.39	452
7	a	130	5.70	450
8	a	138	5.68	449
9	a	142	6.12	455
10	a	144	6.20	458

상기 표 2에 보여지는 바와 같이, 샘플 1 내지 10은 비교샘플 1에 비하여 향상된 발광 특성을 나타내었다.

[0196] 평가예 2: 비교샘플 1 및 샘플 1-10의 수명 특성 평가

비교샘플 1 및 샘플 1-10에 대하여, ENC technology사의 LTS-1004AC 수명측정장치를 이용하여 700 nit를 기준으로 수명이 97%에 도달하는 시간을 각각 측정하여, 그 결과를 하기 표 3에 나타내었다.

표 3

샘플 No.	호스트 화합물 No.	도판트 화합물 No.	수명 Time[Hours]
비교샘플 1	a	b	43
1	a	14	61
2	a	72	63
3	a	90	55
4	a	93	66
5	a	116	63
6	a	120	58
7	a	130	59
8	a	138	54
9	a	142	47
10	a	144	45

상기 표 2에 보여지는 바와 같이, 샘플 1-10은 비교샘플 1에 비하여 향상된 수명 특성을 나타내었다.

[0200]

이상에서 본 발명의 바람직한 실시예들에 대하여 상세하게 설명하였지만 본 발명의 권리 범위는 이에 한정되는 것은 아니고 다음의 청구 범위에서 정의하고 있는 본 발명의 기본 개념을 이용한 당업자의 여러 변형 및 개량 형태 또한 본 발명의 권리 범위에 속하는 것이다.

도면

도면1



专利名称(译)	标题 : 有机发光化合物 , 油墨组合物 , 有机发光器件和电子器件		
公开(公告)号	KR1020160072388A	公开(公告)日	2016-06-23
申请号	KR1020140179755	申请日	2014-12-12
申请(专利权)人(译)	氛围有限公司凯		
当前申请(专利权)人(译)	氛围有限公司凯		
[标]发明人	SEUNG HAK HYUN 현승학 DAE KYUN LEE 이대균 JI SOUNG KANG 강지승 DO HWAN AHN 안도환 JEA SUNG LEE 이재성 JUNG BOK AN 안종복 NO GILL PARK 박노길 BONG SEOK MOON 문봉석		
发明人	현승학 이대균 강지승 안도환 이재성 안종복 박노길 문봉석		
IPC分类号	C09K11/06 H01L51/50 C07D319/24		
CPC分类号	C09K11/06 C07D319/24 H01L51/50 Y10S428/917		
外部链接	Espacenet		

摘要(译)

提供有机发光化合物 , 其为如下化学式1所示的芳族胺化合物。[化学式1]与上述式中的R1至R8和A1至A4所述的相同 , 并且定义相同。

