



(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 공개특허공보(A)

(11) 공개번호 10-2019-0091410
(43) 공개일자 2019년08월06일

- (51) 국제특허분류(Int. Cl.)
H01L 51/00 (2006.01) H01L 51/50 (2006.01)
- (52) CPC특허분류
H01L 51/0074 (2013.01)
H01L 51/0059 (2013.01)
- (21) 출원번호 10-2018-0146236
- (22) 출원일자 2018년11월23일
심사청구일자 2019년02월19일
- (30) 우선권주장
1020180009993 2018년01월26일 대한민국(KR)

- (71) 출원인
삼성디스플레이 주식회사
경기도 용인시 기흥구 삼성로 1 (농서동)
- (72) 발명자
미야케, 히데오
일본 가나가와켄 요코하마시 츠루미쿠 수가사와초 2-7 주식회사 삼성 일본 연구소내
우에노, 마사츠구
일본 가나가와켄 요코하마시 츠루미쿠 수가사와초 2-7 주식회사 삼성 일본 연구소내
(뒷면에 계속)
- (74) 대리인
특허법인 고려

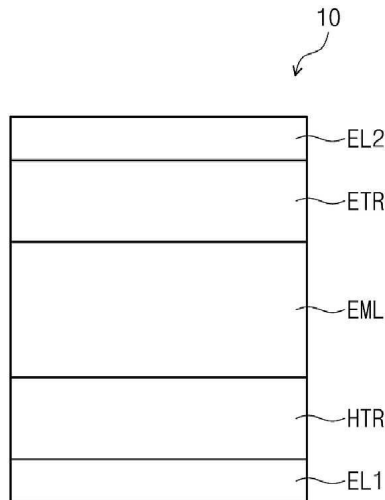
전체 청구항 수 : 총 20 항

(54) 발명의 명칭 유기 전계 발광 소자 및 유기 전계 발광 소자용 모노아민 화합물

(57) 요약

일 실시예의 유기 전계 발광 소자는 제1 전극, 제1 전극 상에 배치된 정공 수송 영역, 정공 수송 영역 상에 배치된 발광층, 발광층 상에 배치된 전자 수송 영역 및 전자 수송 영역 상에 배치된 제2 전극을 포함하고, 정공 수송 영역은 화학식 1로 표시되는 모노아민 화합물을 포함하여 높은 발광 효율을 나타낼 수 있다.

대표도 - 도1



(52) CPC특허분류

H01L 51/0073 (2013.01)

H01L 51/5056 (2013.01)

H01L 51/5072 (2013.01)

H01L 51/5088 (2013.01)

H01L 51/5096 (2013.01)

(72) 발명자

진, 시우란

일본 가나가와켄 요코하마시 츠루미쿠 수가사와쵸
2-7 주식회사 삼성 일본 연구소내

타카다, 이치노리

일본 가나가와켄 요코하마시 츠루미쿠 수가사와쵸
2-7 주식회사 삼성 일본 연구소내

우노, 타쿠야

일본 가나가와켄 요코하마시 츠루미쿠 수가사와쵸
2-7 주식회사 삼성 일본 연구소내

이토이, 히로아키

일본 가나가와켄 요코하마시 츠루미쿠 수가사와쵸
2-7 주식회사 삼성 일본 연구소내

명세서

청구범위

청구항 1

제1 전극;

상기 제1 전극 상에 제공된 정공 수송 영역;

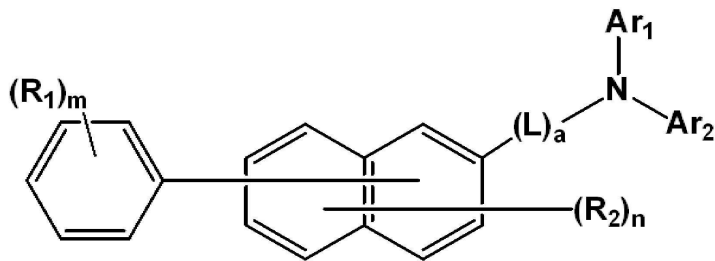
상기 정공 수송 영역 상에 제공된 발광층;

상기 발광층 상에 제공된 전자 수송 영역; 및

상기 전자 수송 영역 상에 제공된 제2 전극을 포함하고,

상기 정공 수송 영역은 하기 화학식 1로 표시되는 모노아민 화합물을 포함하는 것인 유기 전계 발광 소자:

[화학식 1]



상기 화학식 1에서,

Ar₁ 및 Ar₂는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 10 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 3 이상 20 이하의 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기이며,

L은 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아틸렌기, 또는 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아틸렌기이며,

R₁은 수소 원자, 중수소 원자, 할로젠 원자, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 20 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 3 이상 20 이하의 시클로알킬기, 또는 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기이고,

R₂는 수소 원자, 중수소 원자, 할로젠 원자, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 20 이하의 알킬기 또는 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 3 이상 20 이하의 시클로알킬기이고,

a는 0 이상 3 이하의 정수이고,

m은 0 이상 1 이하의 정수이고,

n은 0 이상 6 이하의 정수이며,

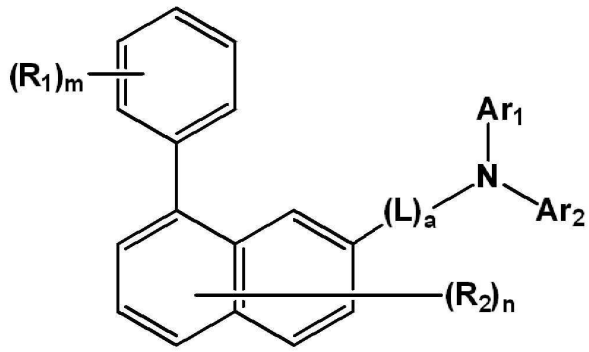
Ar₁ 및 Ar₂에서, 어느 하나가 3-디벤조푸라닐기인 경우, 나머지 하나가 9-페난트릴기인 경우는 제외된다.

청구항 2

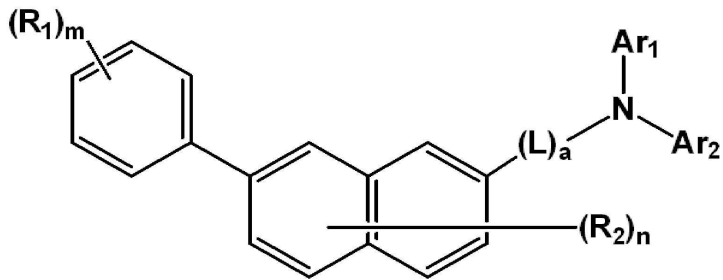
제1항에 있어서,

상기 화학식 1은 하기 화학식 2 내지 화학식 8 중 어느 하나로 표시되는 것인 유기 전계 발광 소자:

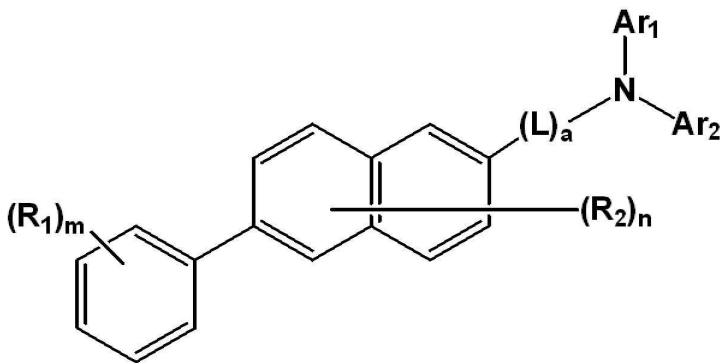
[화학식 2]



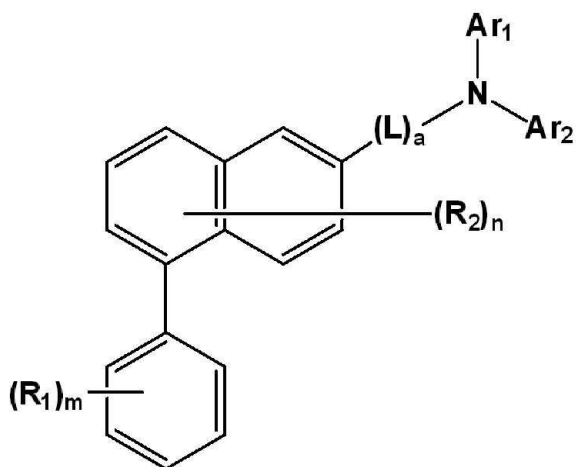
[화학식 3]



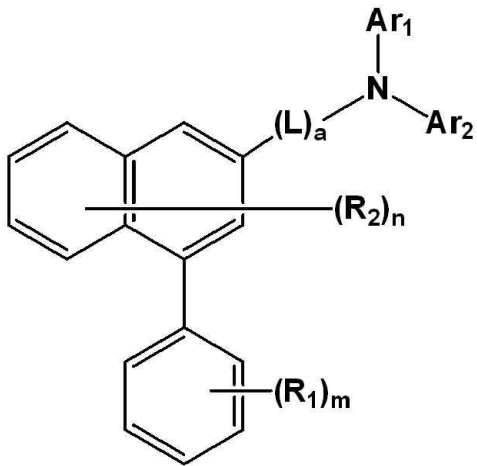
[화학식 4]



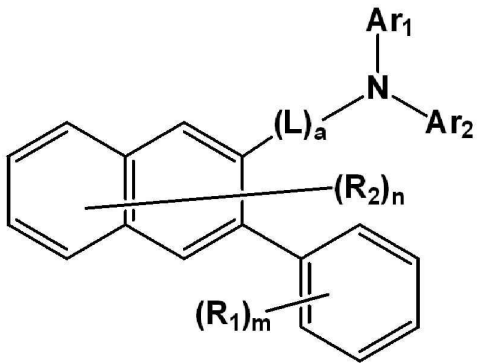
[화학식 5]



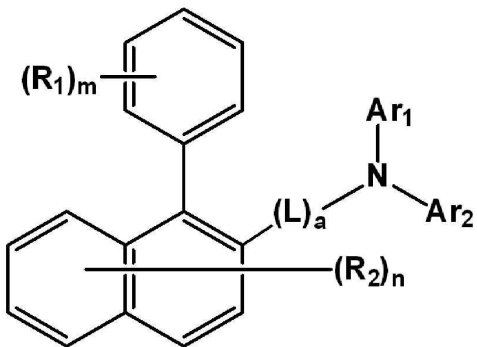
[화학식 6]



[화학식 7]



[화학식 8]



상기 화학식 2 내지 8에서,

Ar₁, Ar₂, L, R₁, R₂, a, m, 및 n은 화학식 1에서 정의한 바와 동일하다.

청구항 3

제1항에 있어서,

L은 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 12 이하의 아릴렌기인 것인 유기 전계 발광 소자.

청구항 4

제3항에 있어서,

L은 치환 또는 비치환된 페닐렌기인 것인 유기 전계 발광 소자.

청구항 5

제1항에 있어서,

Ar₁ 및 Ar₂는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 12 이하의 아릴기인 것인 유기 전계 발광 소자.

청구항 6

제5항에 있어서,

Ar₁ 및 Ar₂는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 페닐기, 치환 또는 비치환된 비페닐기, 치환 또는 비치환된 나프틸렌기 또는 치환 또는 비치환된 플루오레닐기인 것인 유기 전계 발광 소자.

청구항 7

제1항에 있어서,

Ar₁ 및 Ar₂는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 5 이상 12 이하의 헤테로아릴기인 유기 전계 발광 소자.

청구항 8

제7항에 있어서,

Ar₁ 및 Ar₂는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 디벤조퓨란기, 치환 또는 비치환된 디벤조티오펜기 또는 치환 또는 비치환된 카바졸기인 유기 전계 발광 소자.

청구항 9

제1항에 있어서,

R₂는 수소 원자 또는 중수소 원자인 유기 전계 발광 소자.

청구항 10

제1항에 있어서,

상기 정공 수송 영역은 복수의 층을 갖는 다층 구조를 가지고,

상기 복수의 층 중 상기 발광층과 접하는 층이 상기 화학식 1로 표시되는 모노아민 화합물을 포함하는 것인 유기 전계 발광 소자.

청구항 11

제1항에 있어서,

상기 정공 수송 영역은

상기 제1 전극 상에 배치된 정공 주입층;

상기 정공 주입층 상에 배치된 정공 수송층; 및

상기 정공 수송층 상에 배치된 전자 저지층을 포함하고,

상기 전자 저지층이 상기 화학식 1로 표시되는 모노아민 화합물을 포함하는 것인 유기 전계 발광 소자.

청구항 12

제1항에 있어서,

상기 전자 수송 영역은

상기 발광층 상에 제공된 정공 저지층;

상기 정공 저지층 상에 제공된 전자 수송층; 및

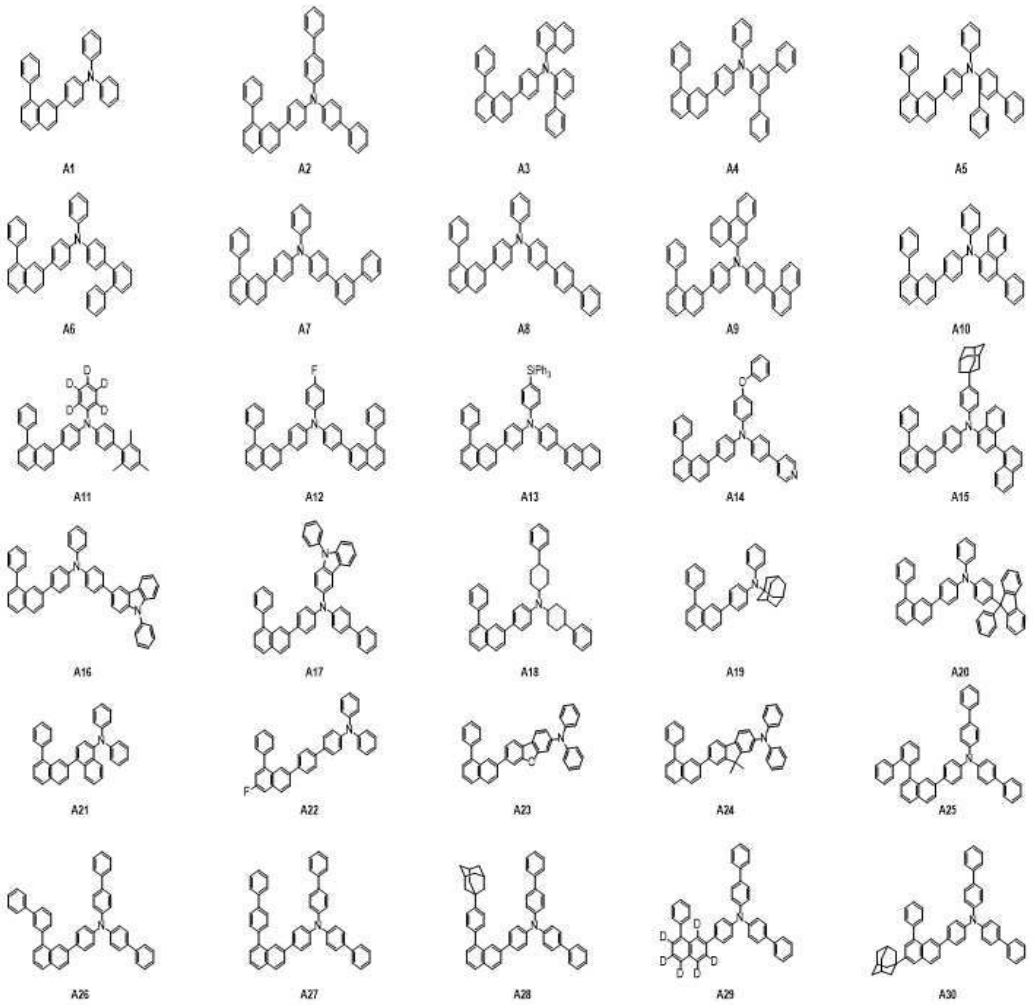
상기 전자 수송층 상에 제공된 전자 주입층을 포함하는 것인 유기 전계 발광 소자.

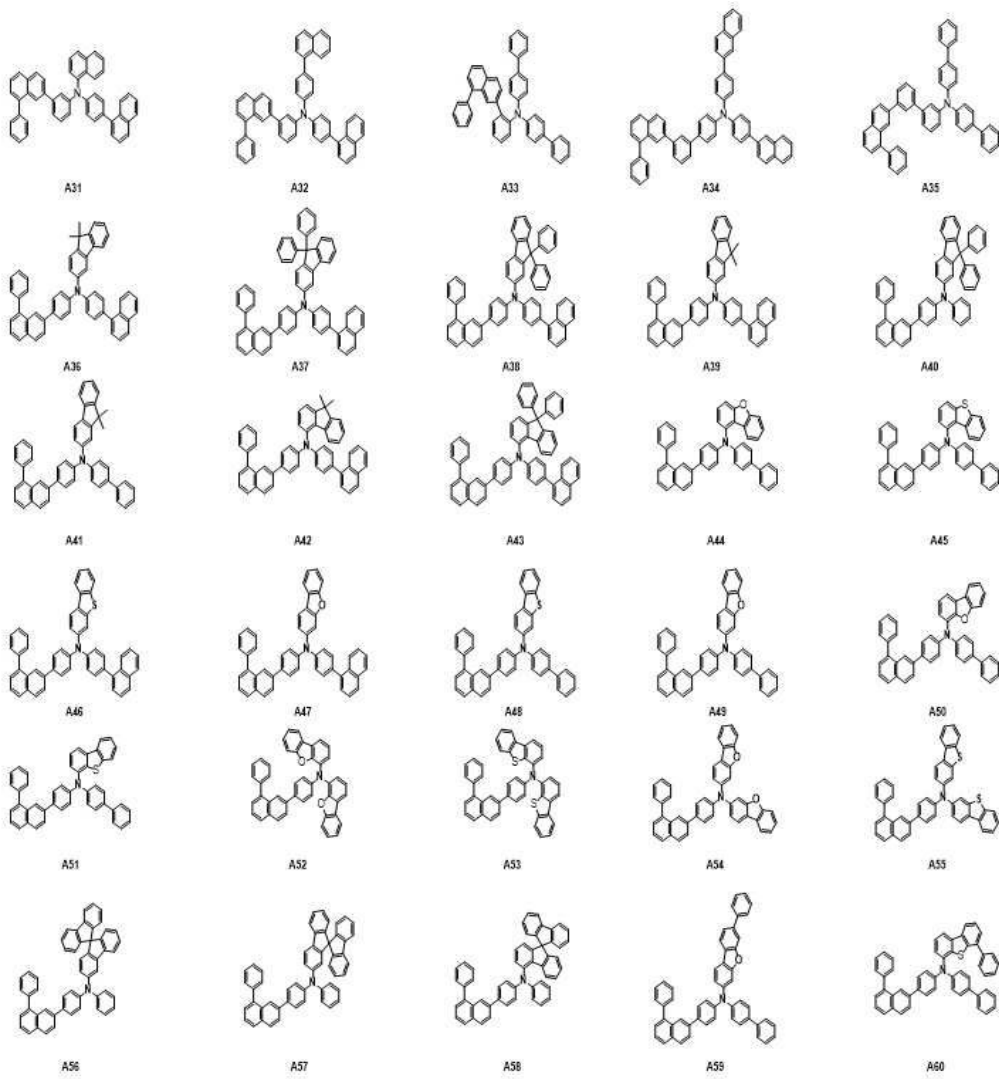
청구항 13

제1항에 있어서,

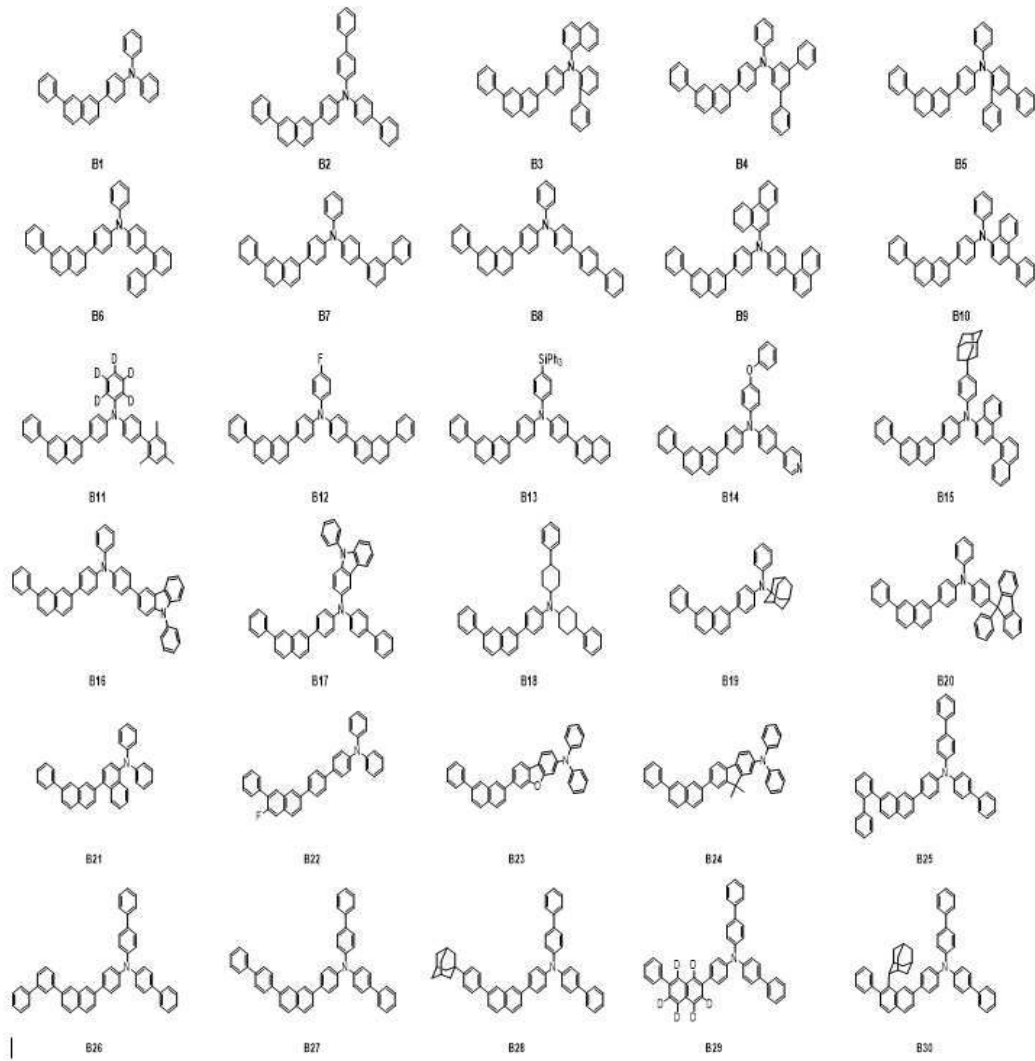
상기 화학식 1로 표시되는 모노아민 화합물은 하기 화합물군 1 내지 화합물군 7에 표시된 화합물들 중 선택되는 적어도 하나인 것인 유기 전계 발광 소자:

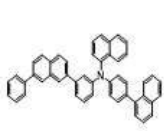
[화합물군 1]





[화합물군 2]

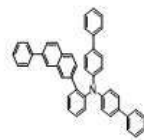




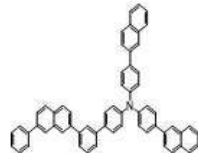
B31



B32



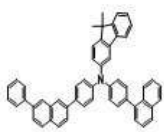
B33



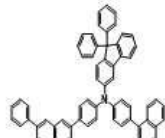
B34



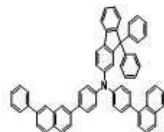
B35



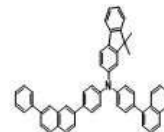
B36



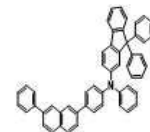
B37



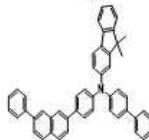
B38



B39



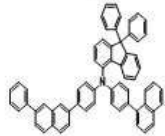
B40



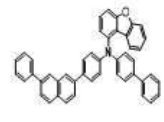
B41



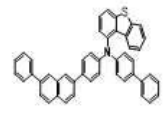
B42



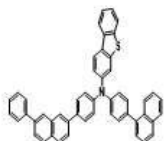
B43



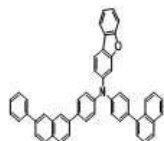
B44



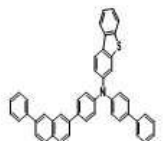
B45



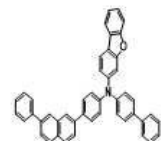
B46



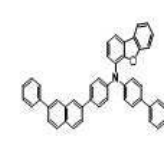
B47



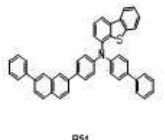
B48



B49



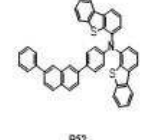
B50



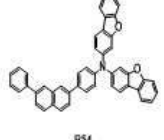
B51



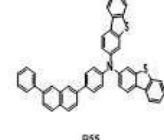
B52



B53



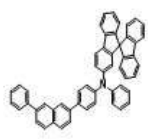
B54



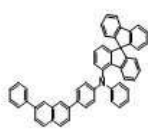
B55



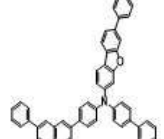
B56



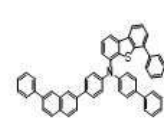
B57



B58

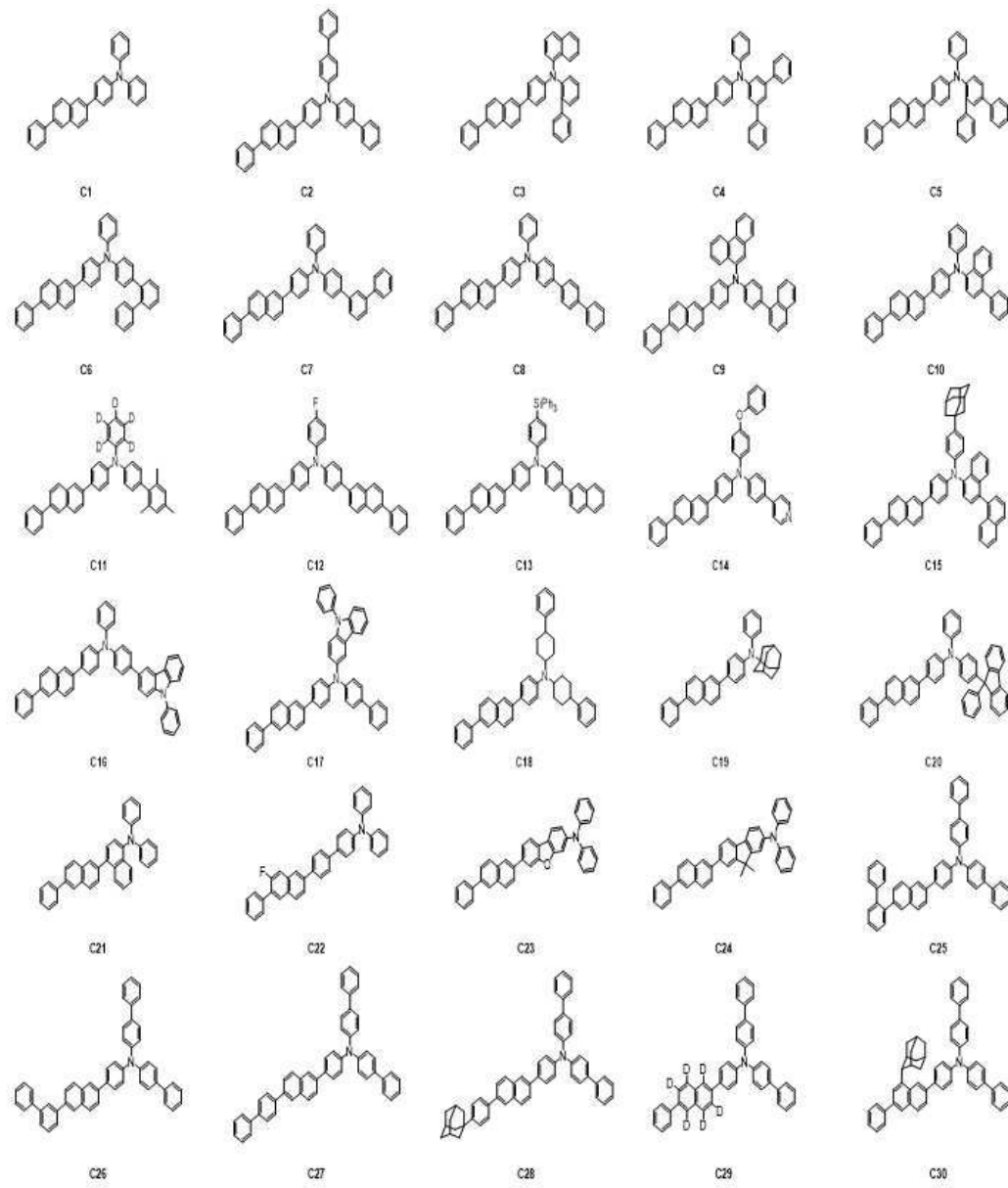


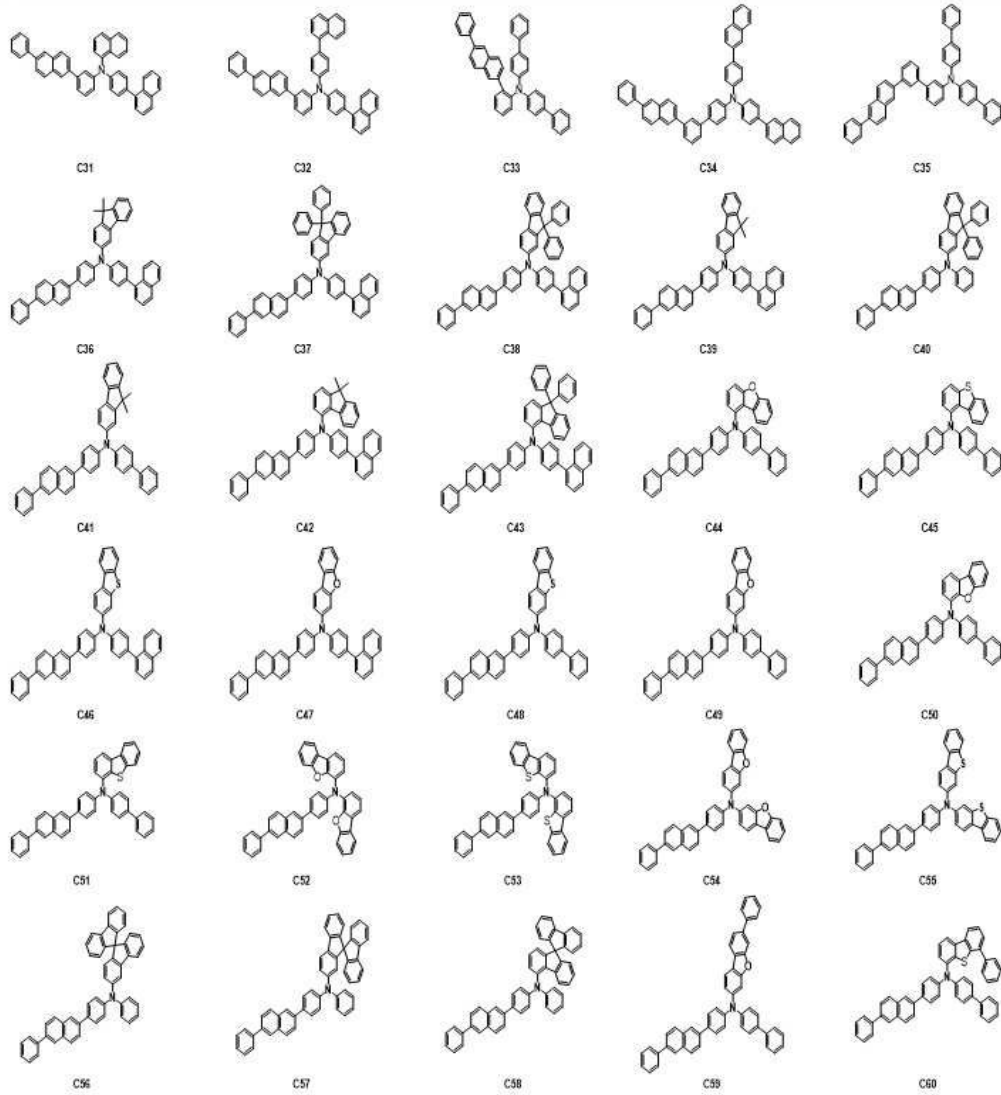
B59



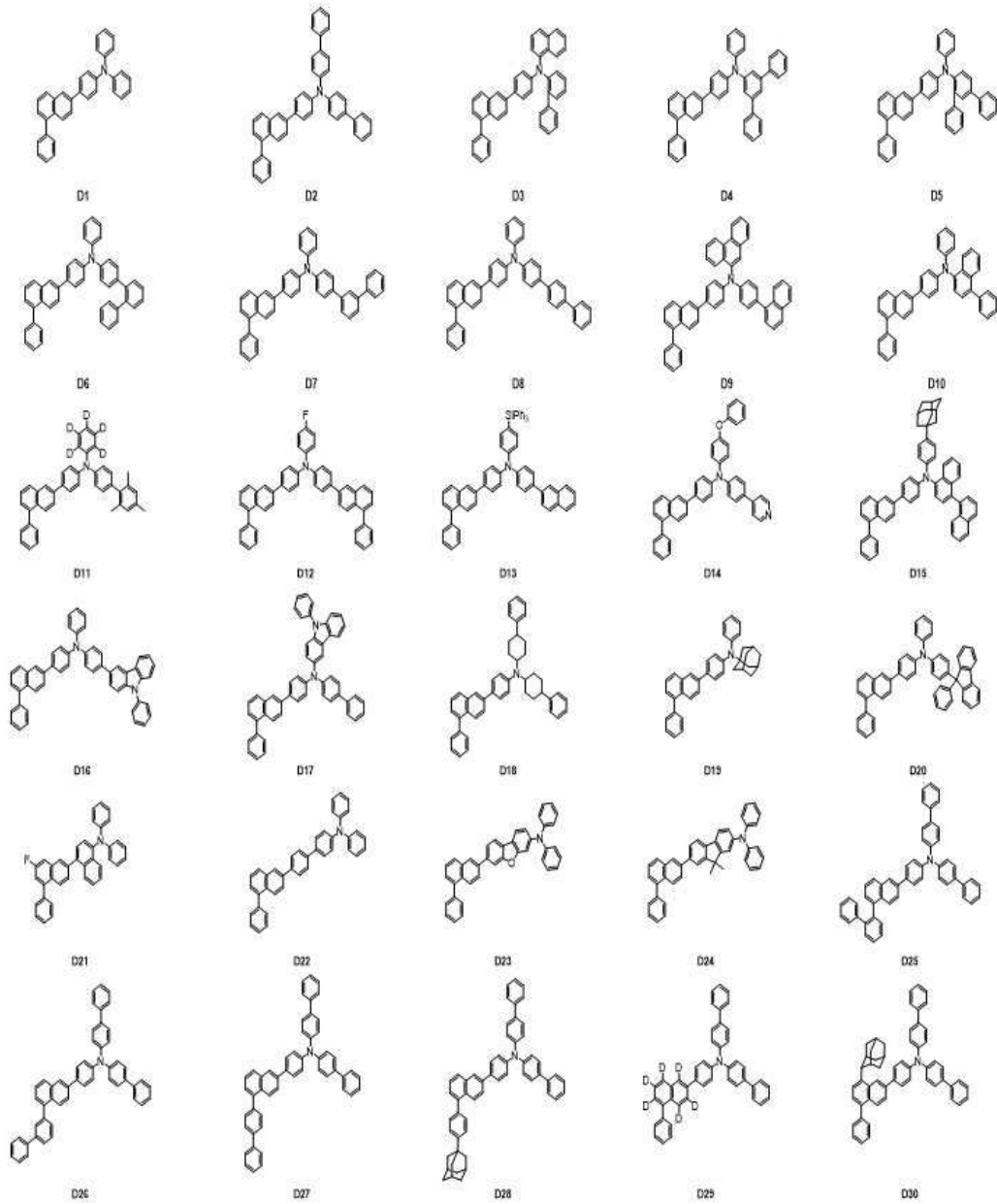
B60

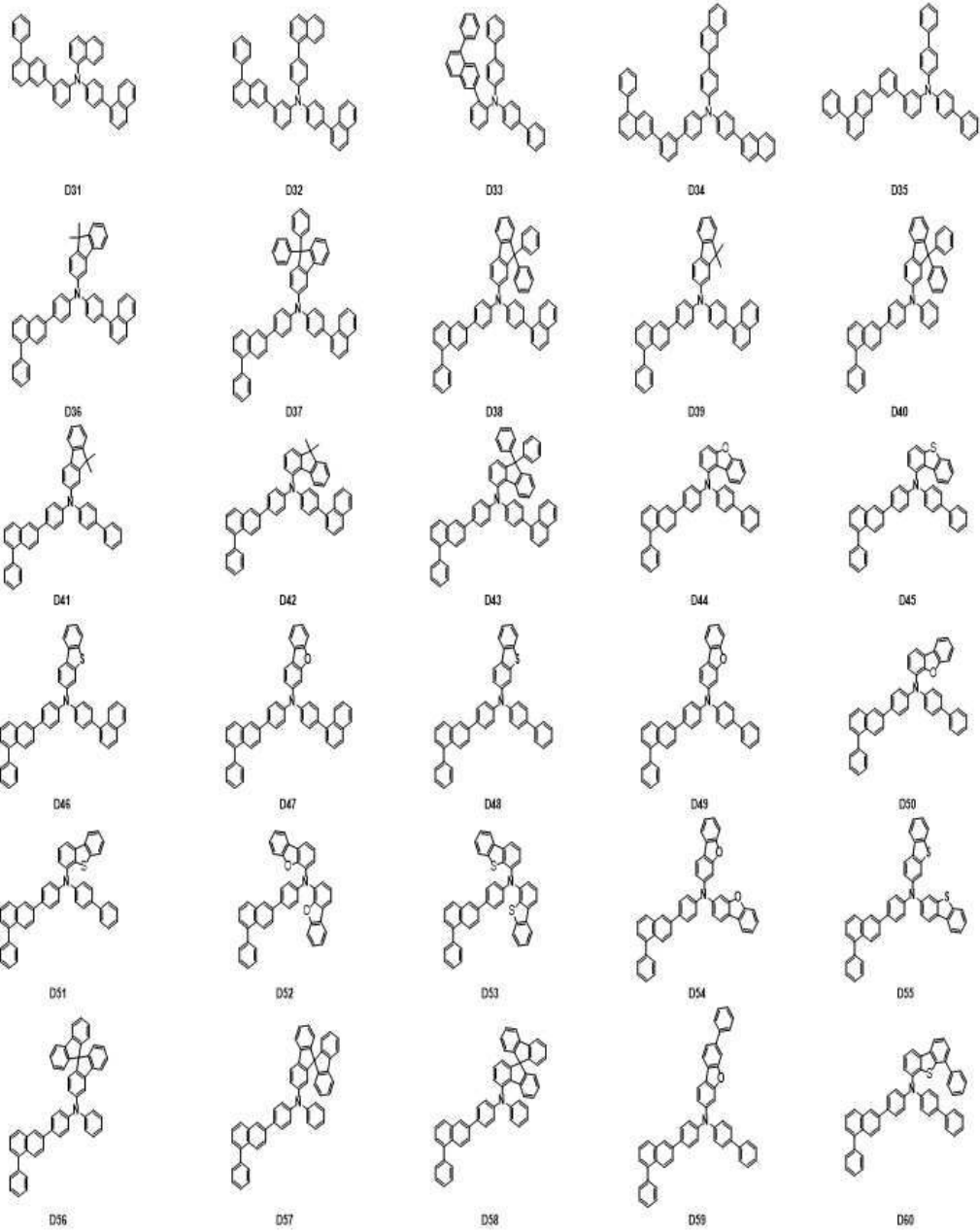
[화합물군 3]



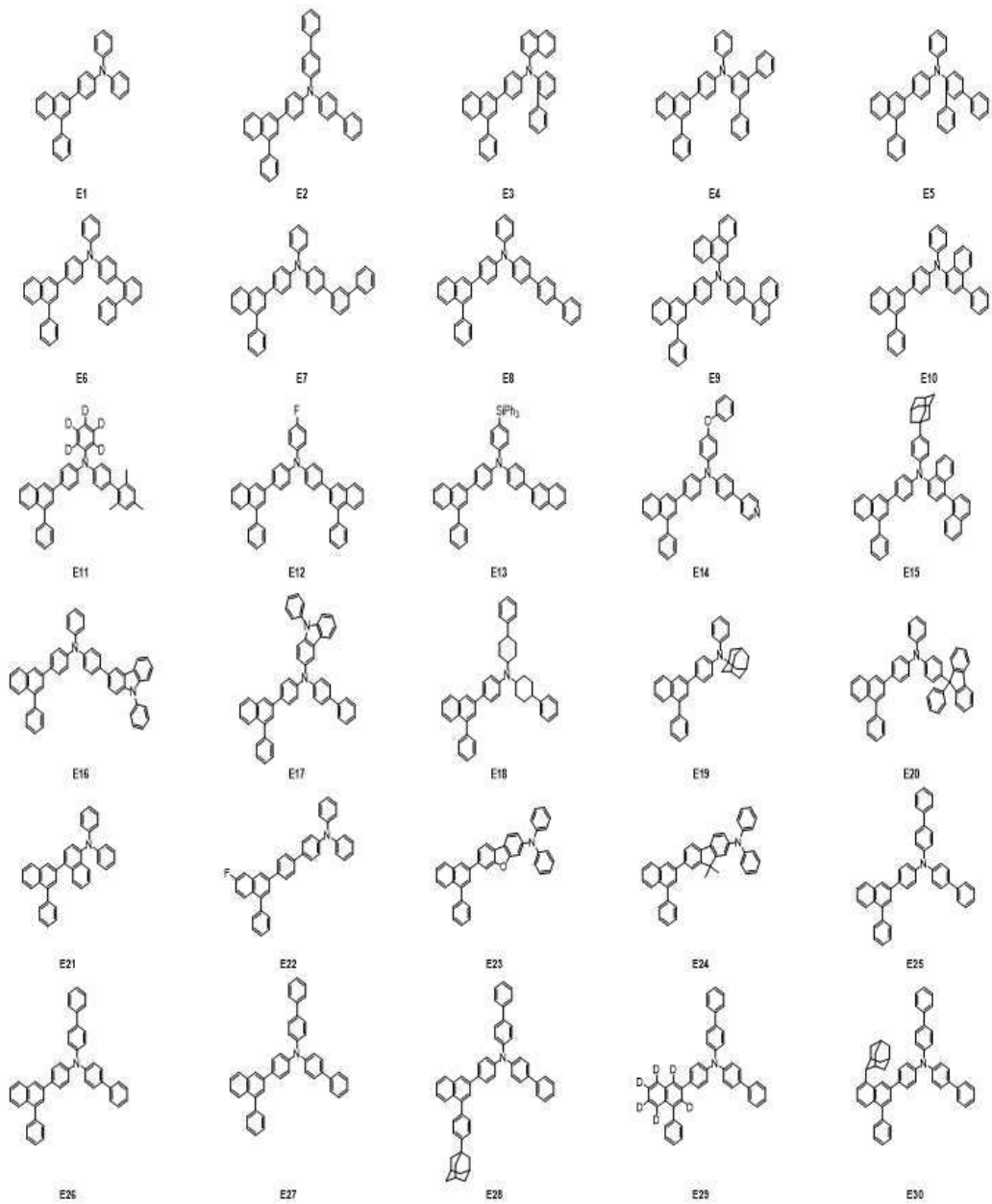


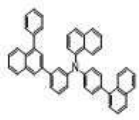
[화합물군 4]





[화합물군 5]





E31



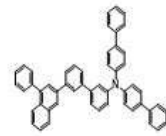
E32



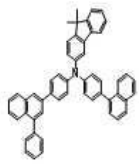
E33



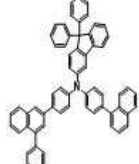
E34



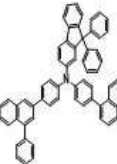
E35



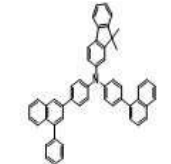
E36



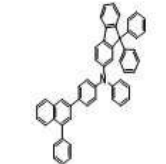
E37



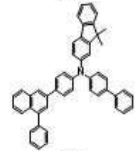
E38



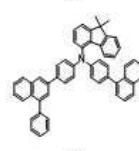
E39



E40



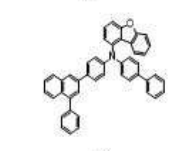
E41



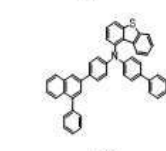
E42



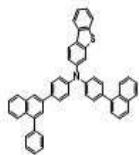
E43



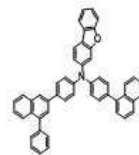
E44



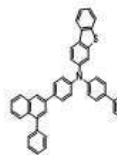
E45



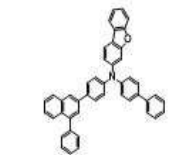
E46



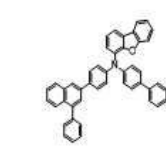
E47



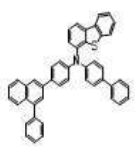
E48



E49



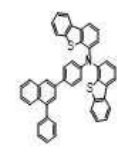
E50



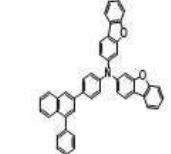
E51



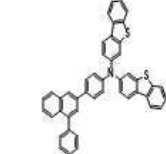
E52



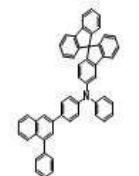
E53



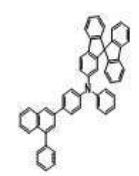
E54



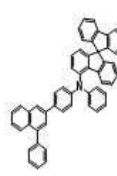
E55



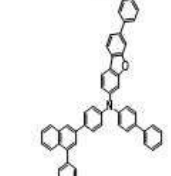
E56



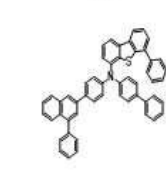
E57



E58

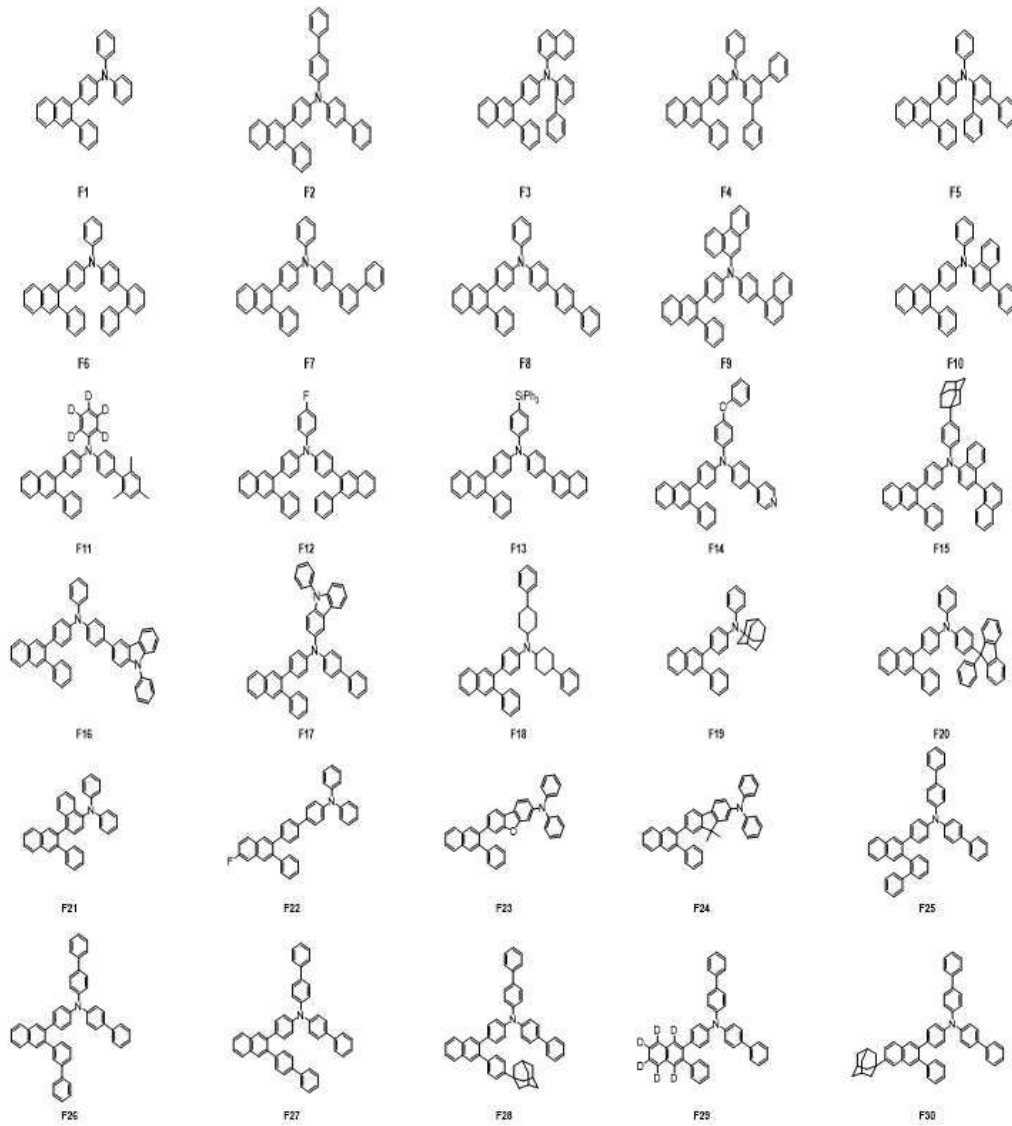


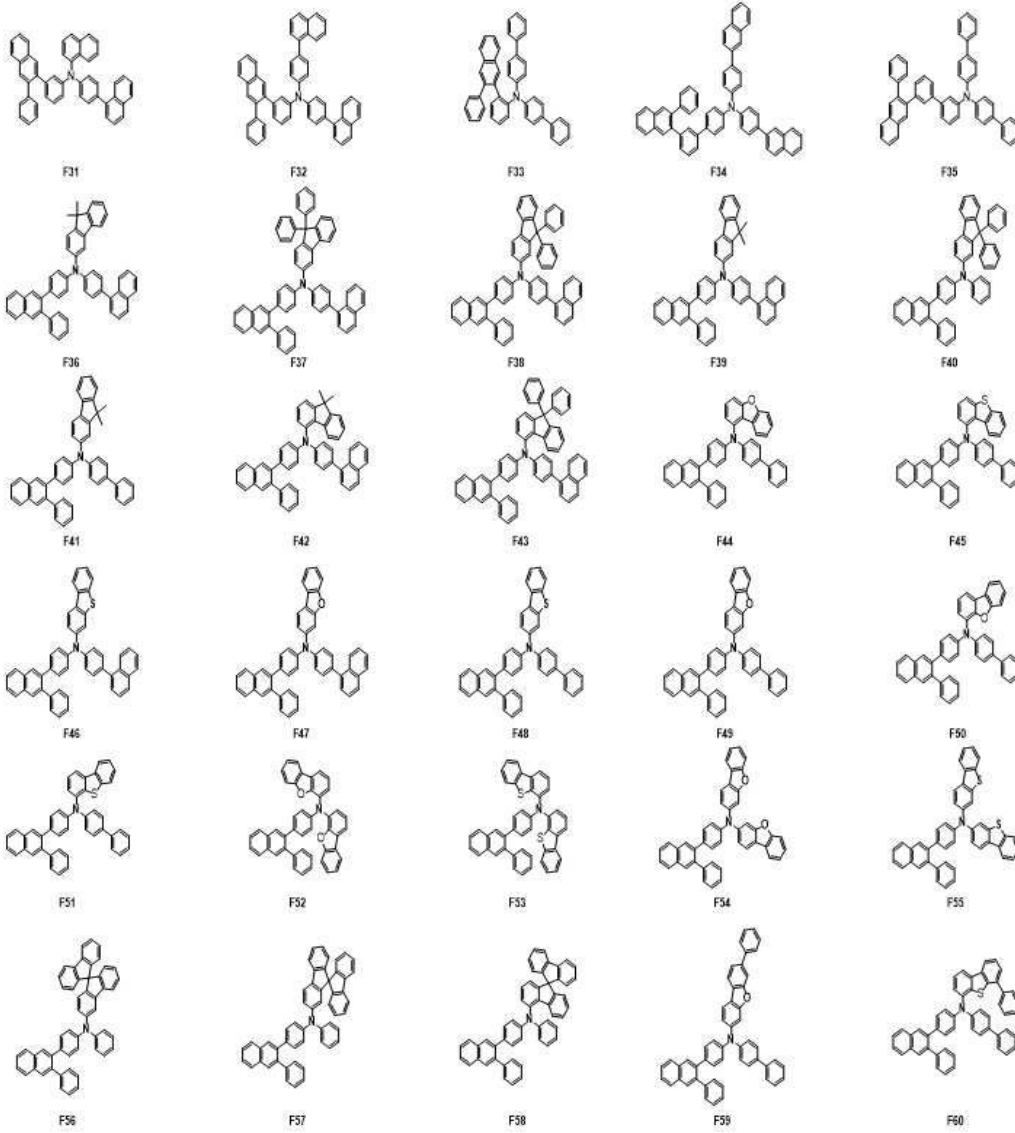
E59



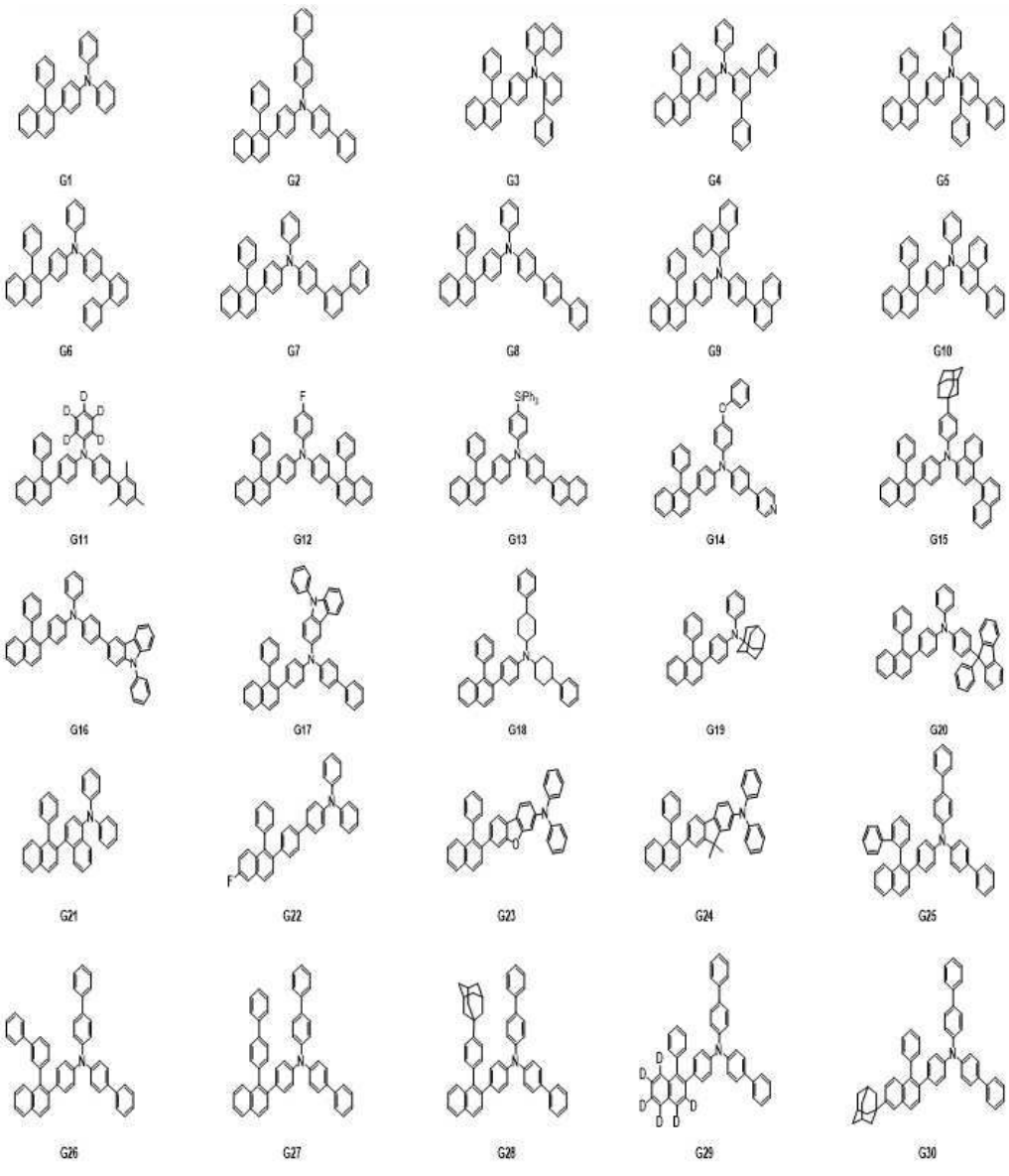
E60

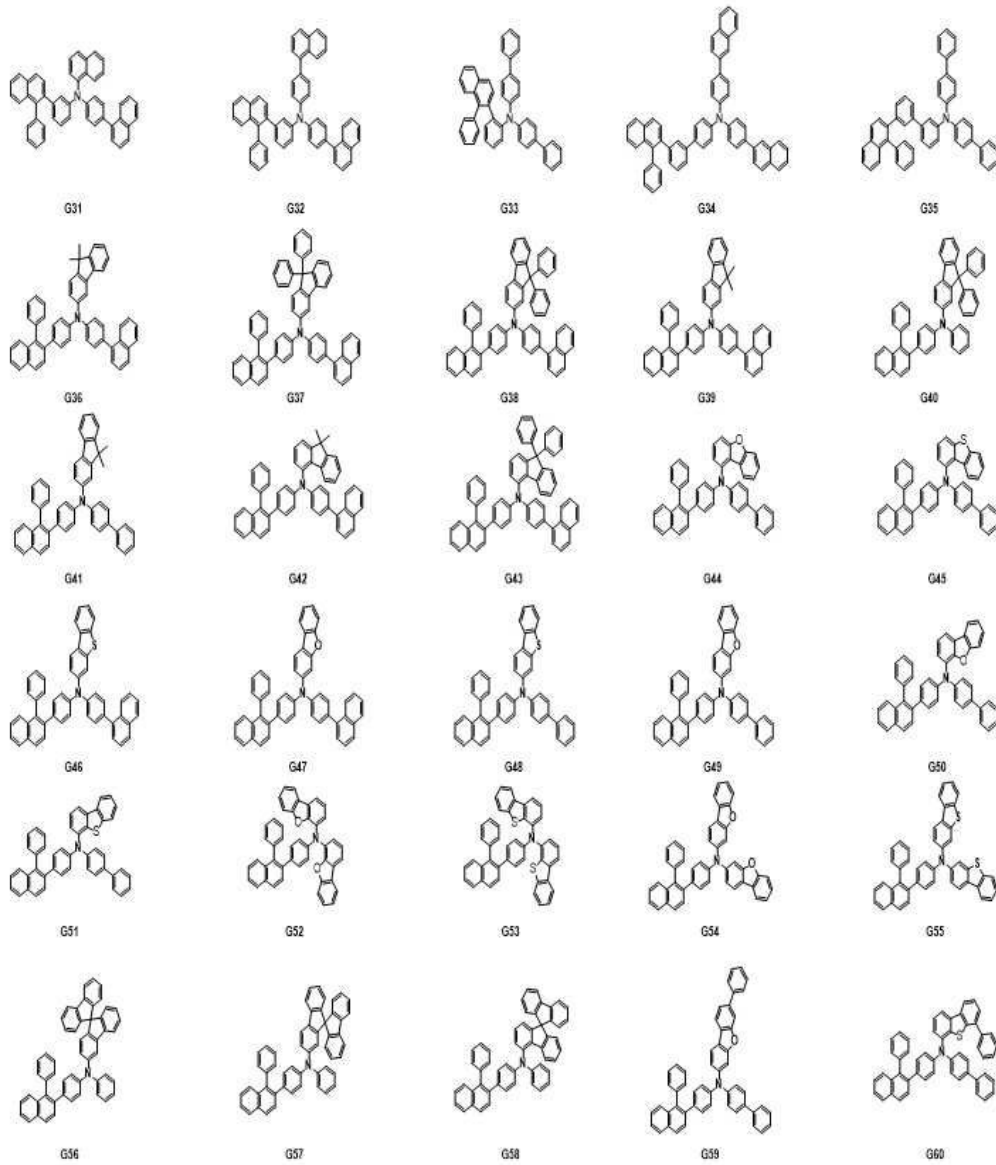
[화합물군 6]





[화합물군 7]

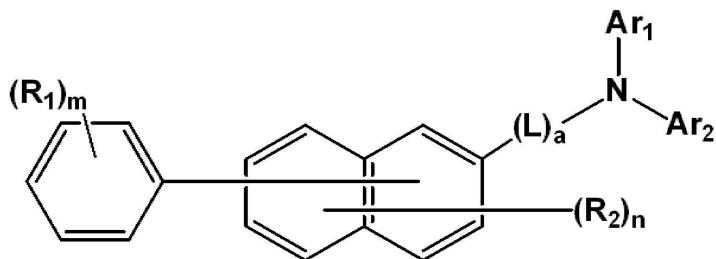




청구항 14

하기 화학식 1로 표시되는 모노아민 화합물:

[화학식 1]



상기 화학식 1에상기 화학식 1에서,

Ar₁ 및 Ar₂는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 10 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 3 이상 20 이하의 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기이며,

L은 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴렌기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴렌기이며,

R₁은 수소 원자, 중수소 원자, 할로겐 원자, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 20 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 3 이상 20 이하의 시클로알킬기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기이고,

R₂는 수소 원자, 중수소 원자, 할로겐 원자, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 20 이하의 알킬기 또는 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 3 이상 20 이하의 시클로알킬기이고,

a는 0 이상 3 이하의 정수이고,

m은 0 이상 1 이하의 정수이고,

n은 0 이상 6 이하의 정수이며,

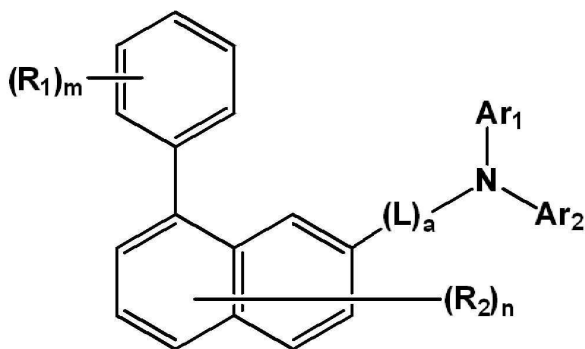
Ar₁ 및 Ar₂에서, 어느 하나가 3-디벤조푸라닐기인 경우, 나머지 하나가 9-페난트릴기인 경우는 제외된다.

청구항 15

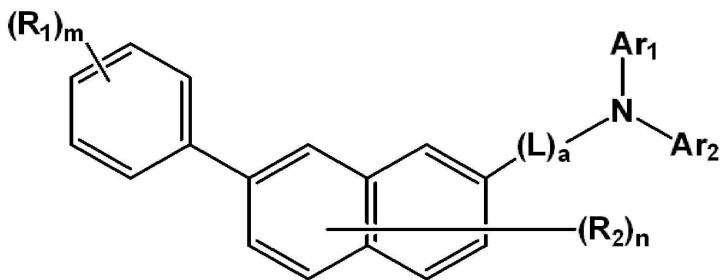
제14항에 있어서,

상기 화학식 1은 하기 화학식 2 내지 화학식 8 중 어느 하나로 표시되는 것인 모노아민 화합물:

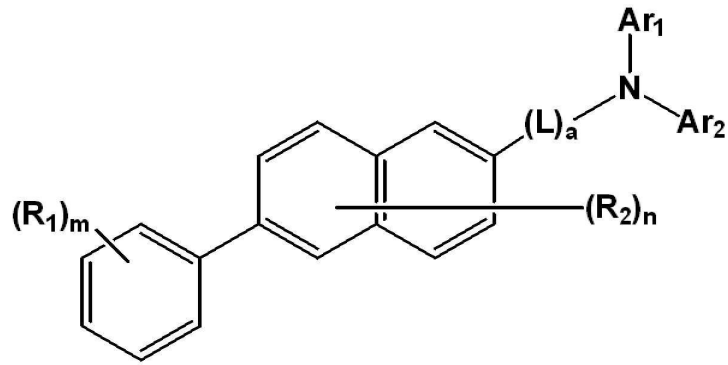
[화학식 2]



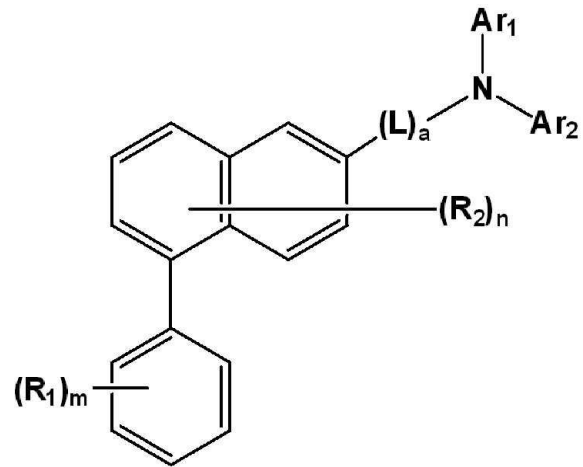
[화학식 3]



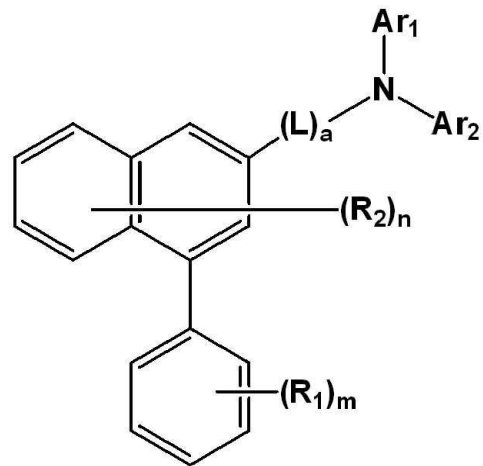
[화학식 4]



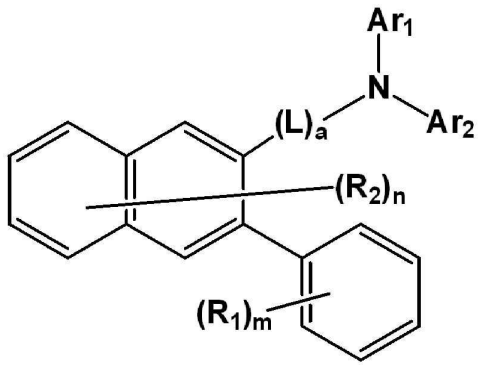
[화학식 5]



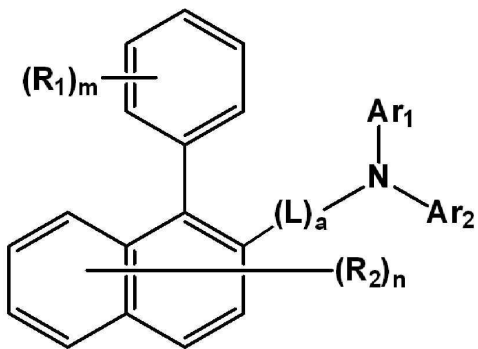
[화학식 6]



[화학식 7]



[화학식 8]



상기 화학식 2 내지 8에서,

Ar₁, Ar₂, L, R₁, R₂, a, m, 및 n은 화학식 1에서 정의한 바와 동일하다.

청구항 16

제14항에 있어서,

L은 치환 또는 비치환된 페닐렌기인 것인 모노아민 화합물.

청구항 17

제14항에 있어서,

Ar₁ 및 Ar₂는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 12 이하의 아릴기인 것인 모노아민 화합물.

청구항 18

제14항에 있어서,

Ar₁ 및 Ar₂는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 5 이상 12 이하의 헤테로아릴기인 것인 모노아민 화합물.

청구항 19

제14항에 있어서,

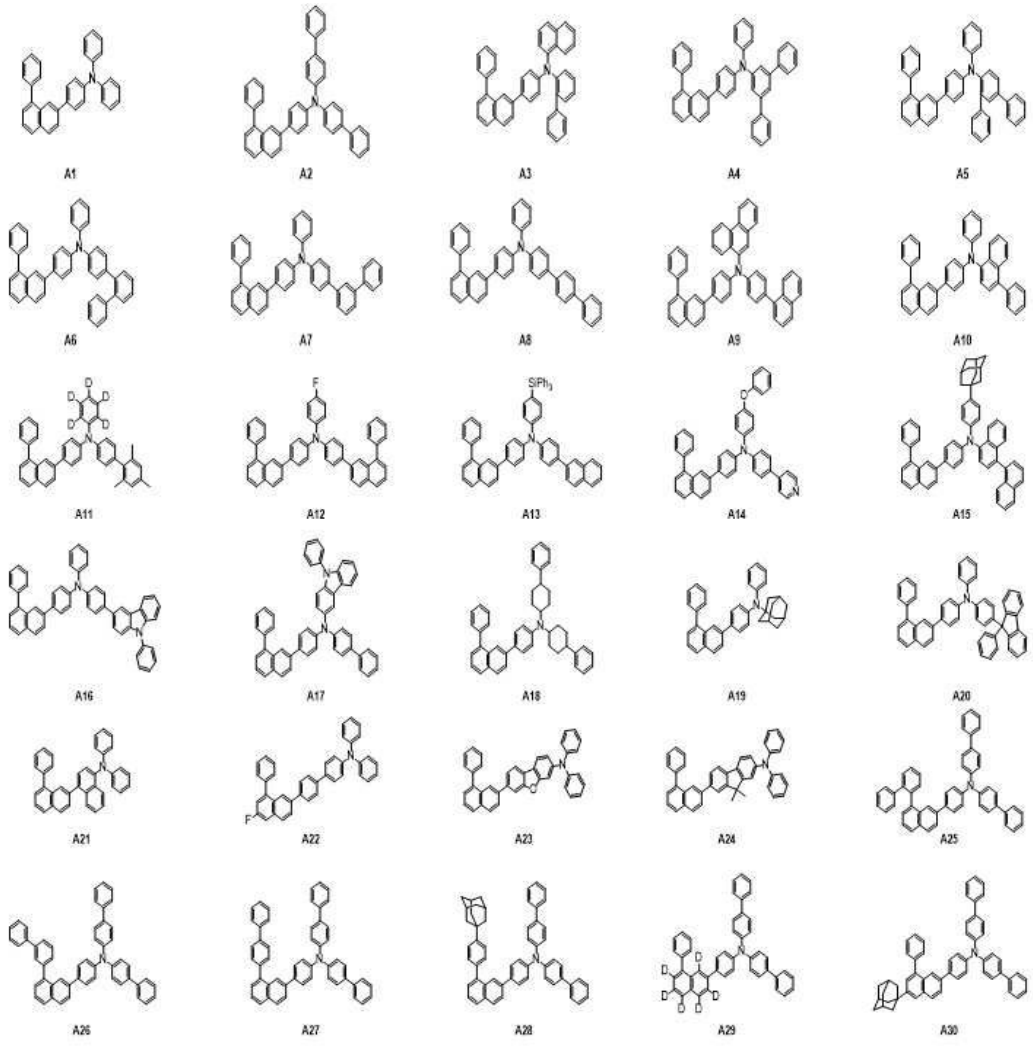
R₂는 수소 원자 또는 중수소 원자인 것인 모노아민 화합물.

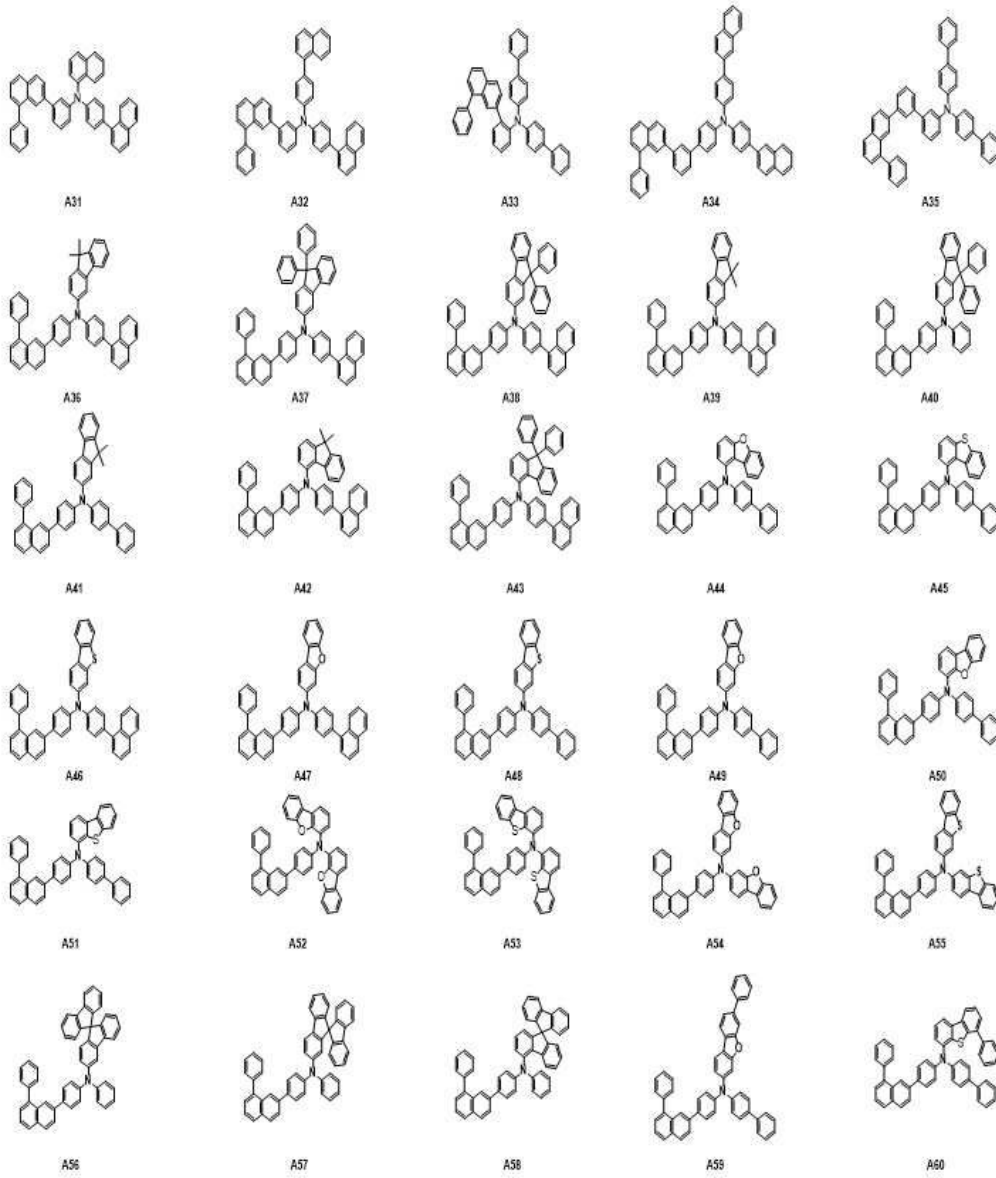
청구항 20

제14항에 있어서,

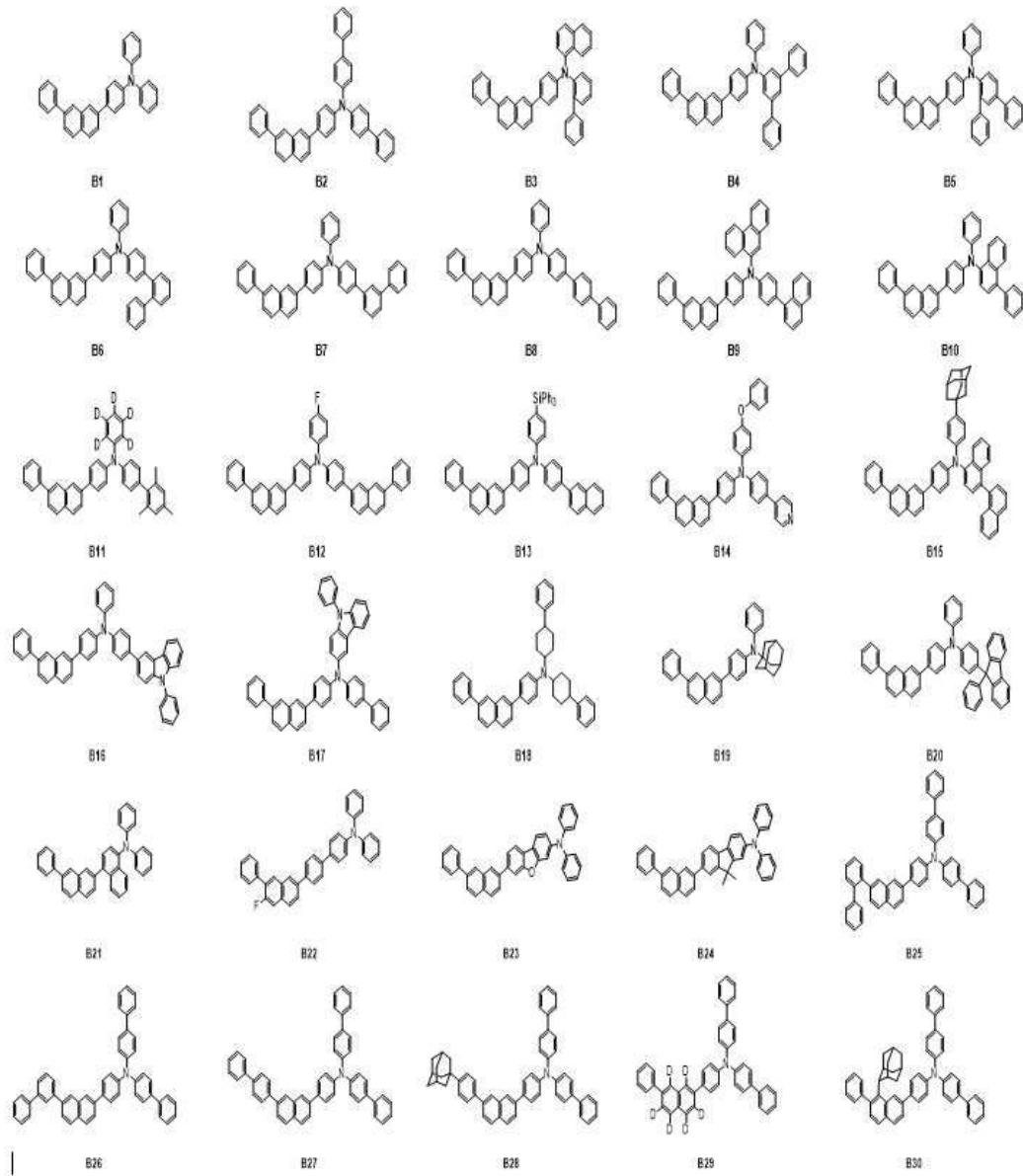
상기 화학식 1로 표시되는 모노아민 화합물은 하기 화합물군 1 내지 화합물군 7에 표시된 화합물들 중 선택되는 적어도 어느 하나인 것인 모노아민 화합물:

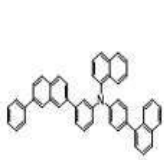
[화합물군 1]



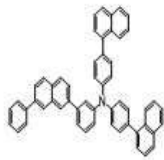


[화합물군 2]

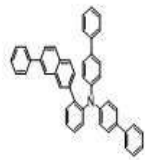




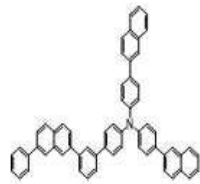
B31



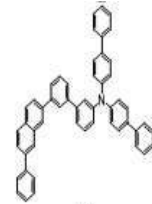
B32



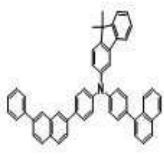
B33



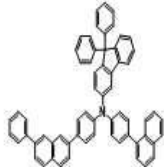
B34



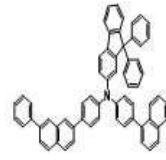
B35



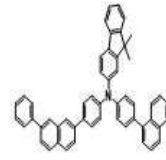
B36



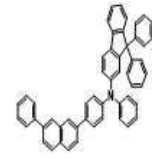
B37



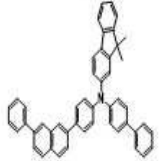
B38



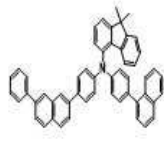
B39



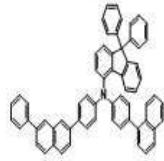
B40



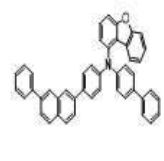
B41



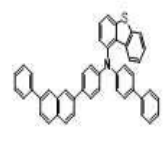
B42



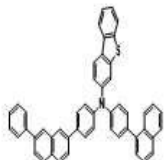
B43



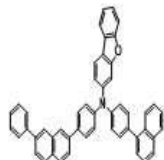
B44



B45



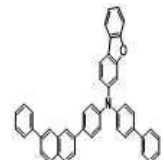
B46



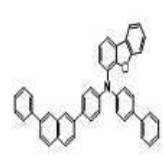
B47



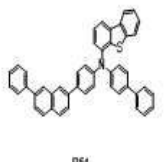
B48



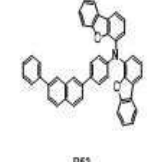
B49



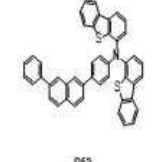
B50



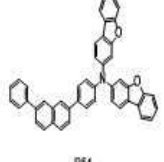
B51



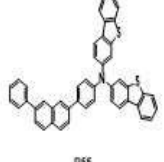
B52



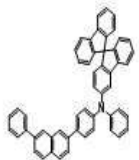
B53



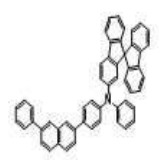
B54



B55



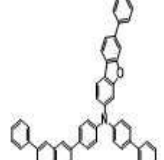
B56



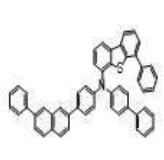
B57



B58

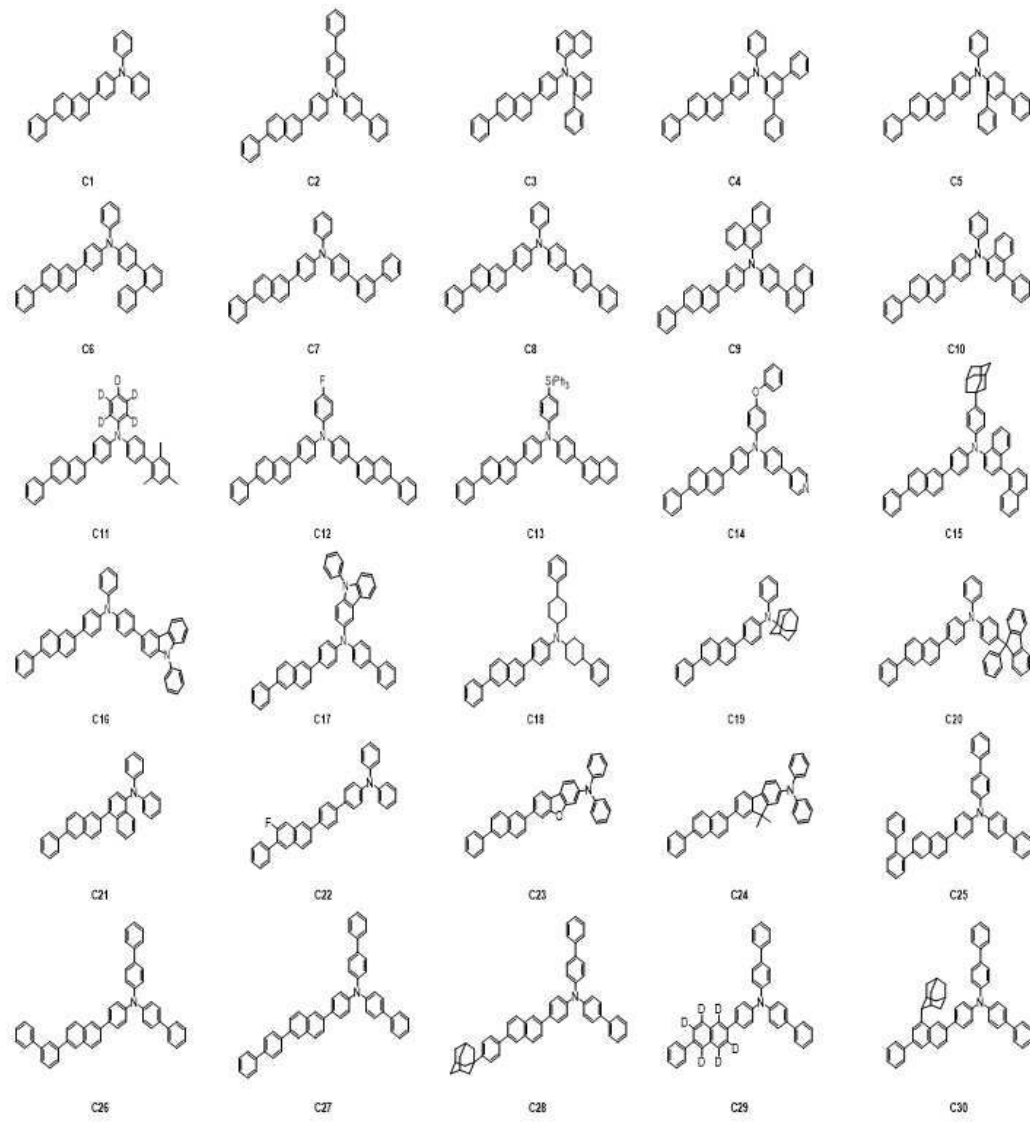


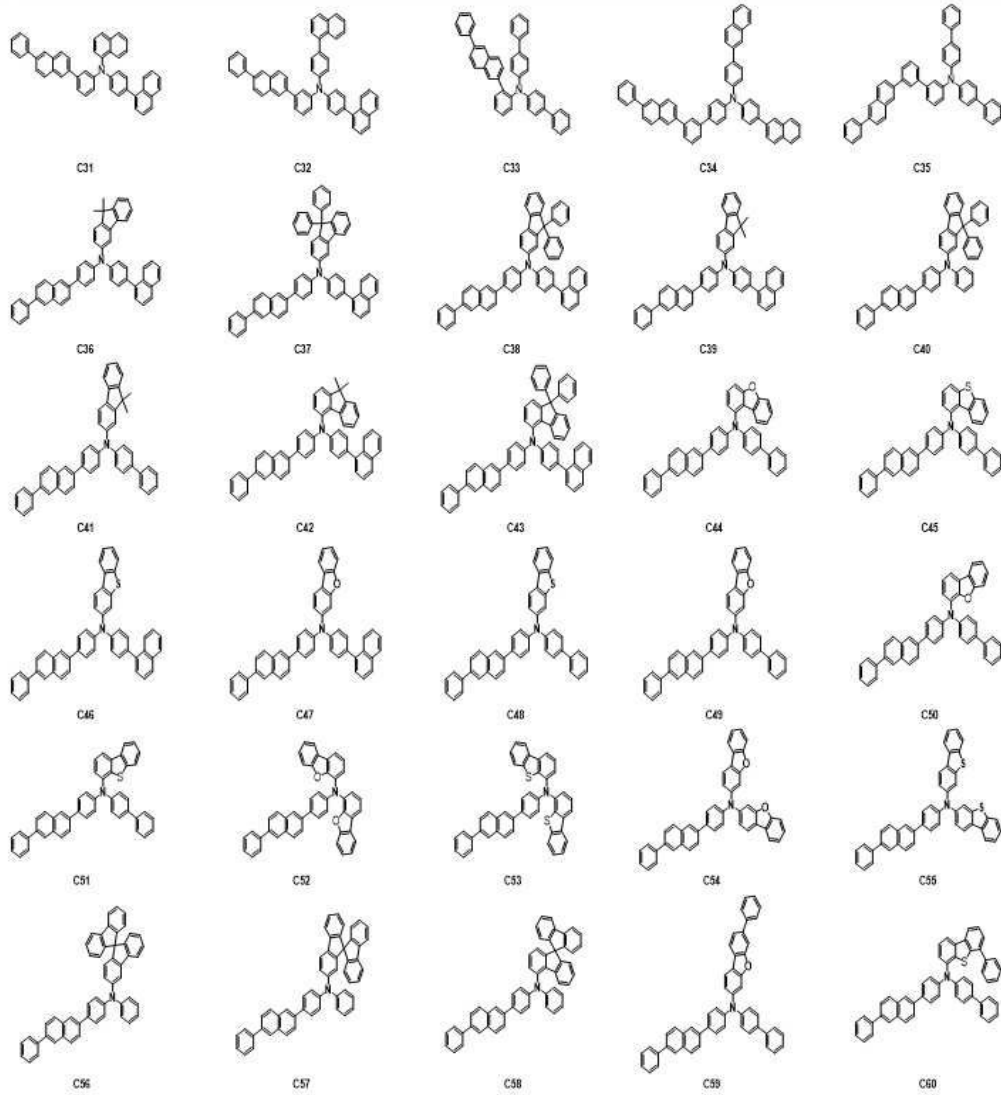
B59



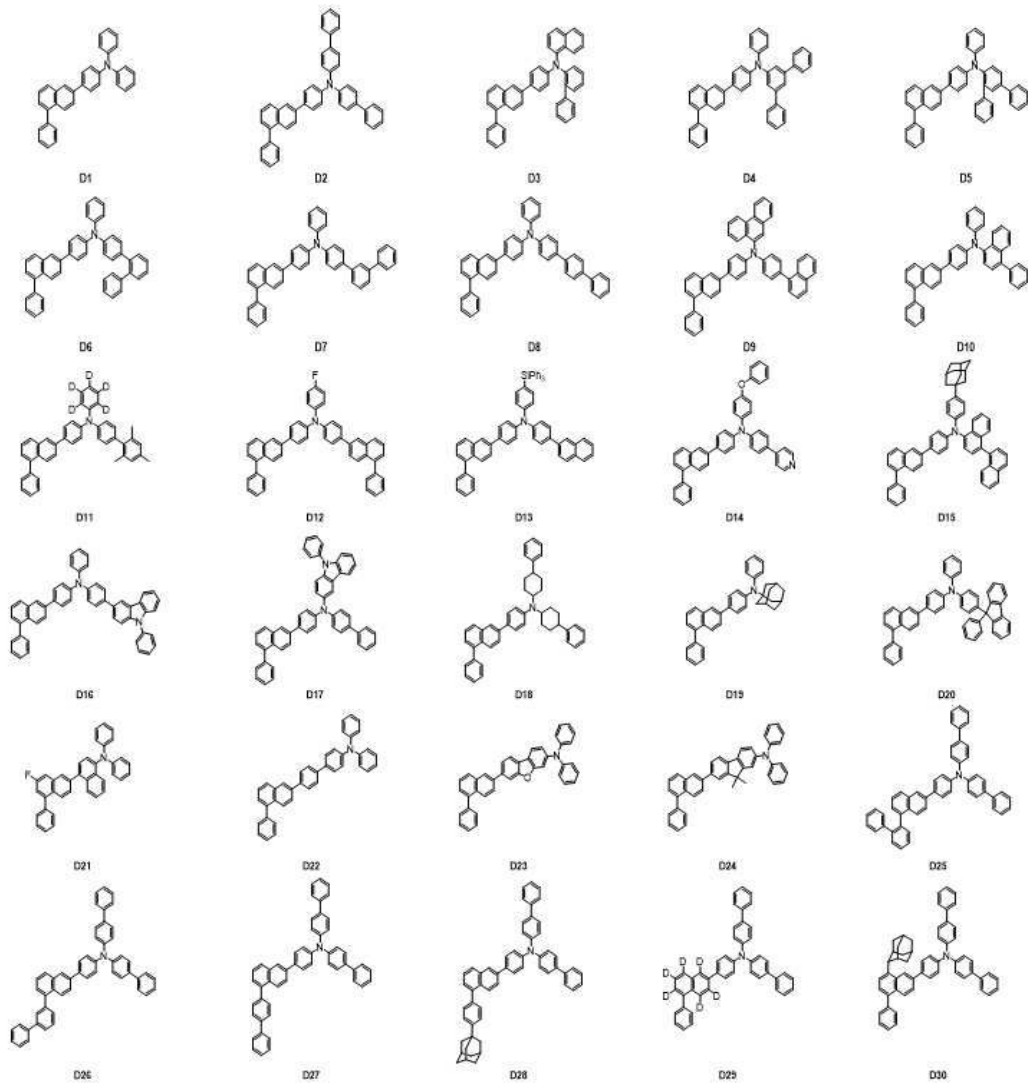
B60

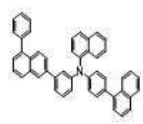
[화합물군 3]



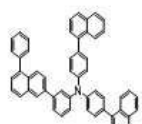


[화합물군 4]





D31



D32



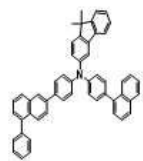
D33



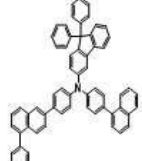
D34



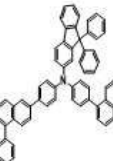
D35



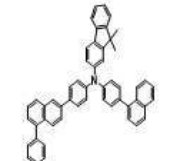
D36



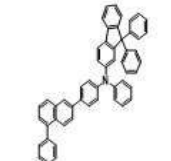
D37



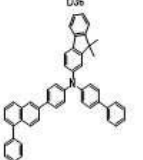
D38



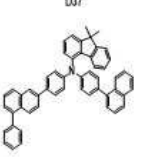
D39



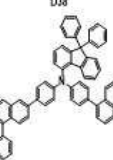
D40



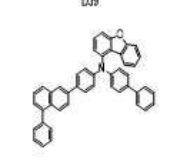
D41



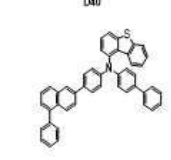
D42



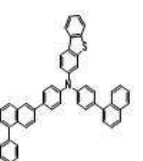
D43



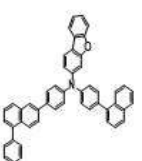
D44



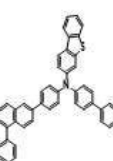
D45



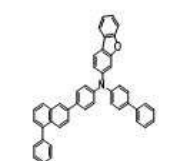
D46



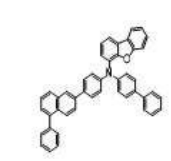
D47



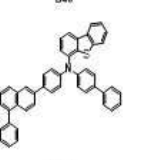
D48



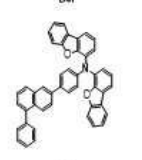
D49



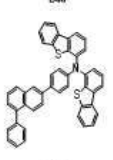
D50



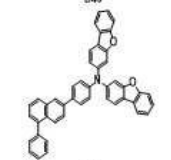
D51



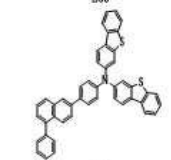
D52



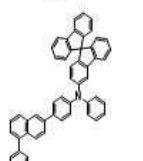
D53



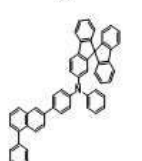
D54



D55



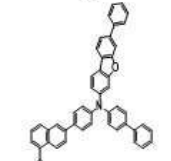
D56



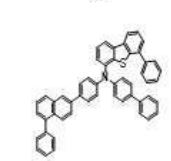
D57



D58

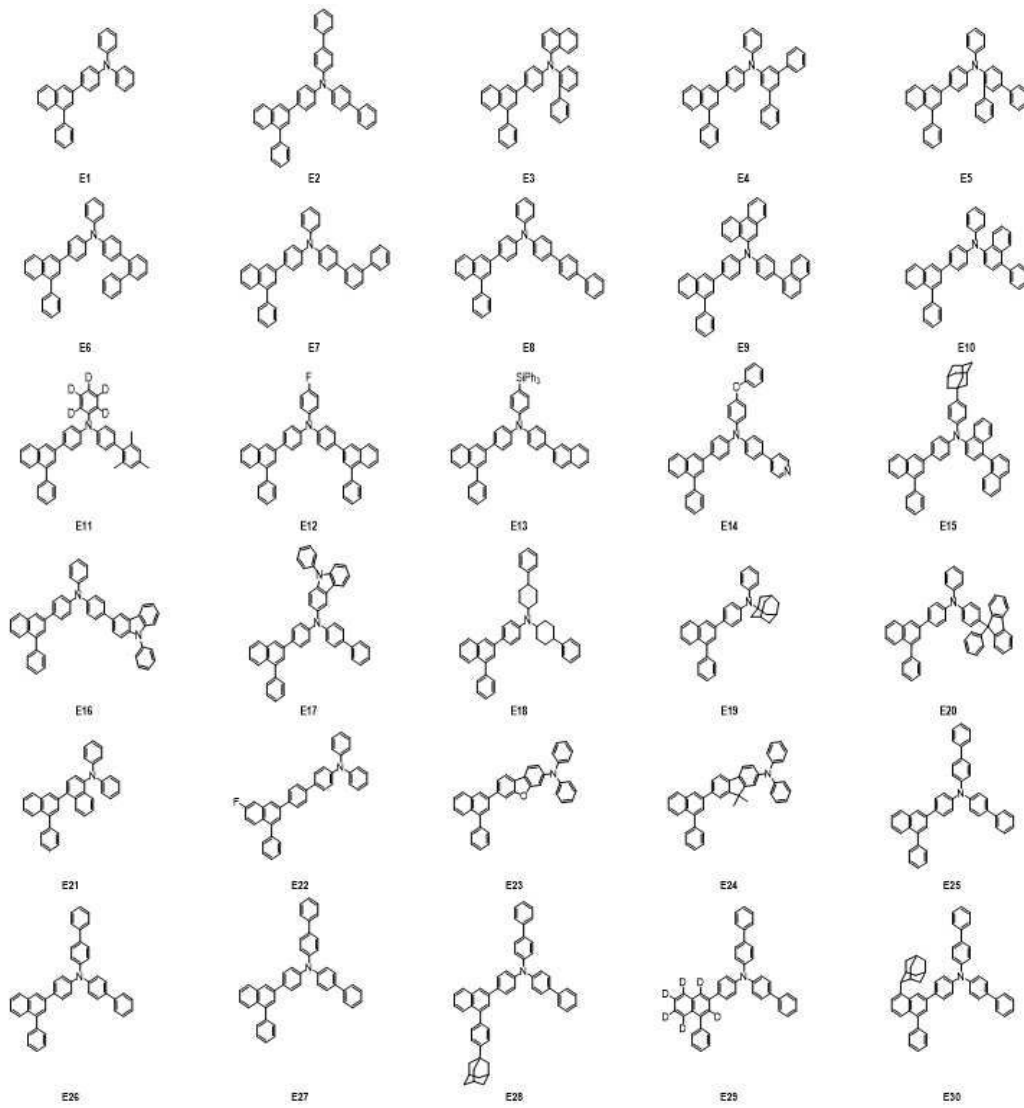


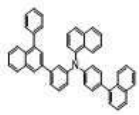
D59



D60

[화합물군 5]





E31



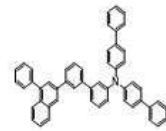
E32



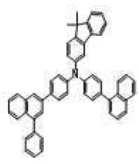
E33



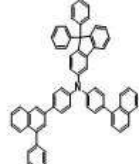
E34



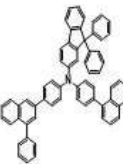
E35



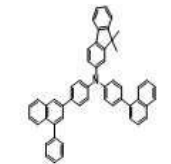
E36



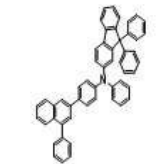
E37



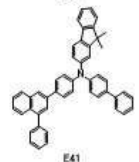
E38



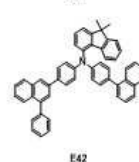
E39



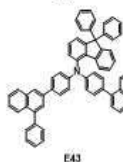
E40



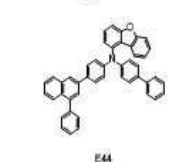
E41



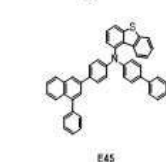
E42



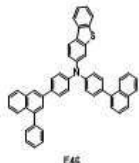
E43



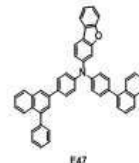
E44



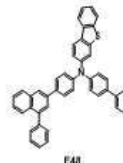
E45



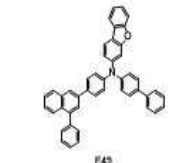
E46



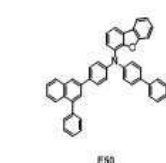
E47



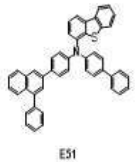
E48



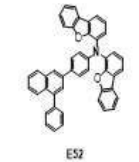
E49



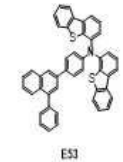
E50



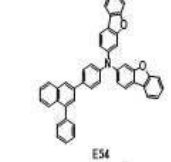
E51



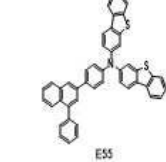
E52



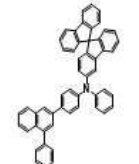
E53



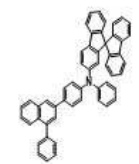
E54



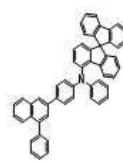
E55



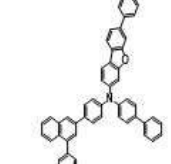
E56



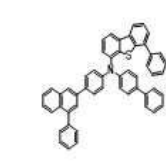
E57



E58

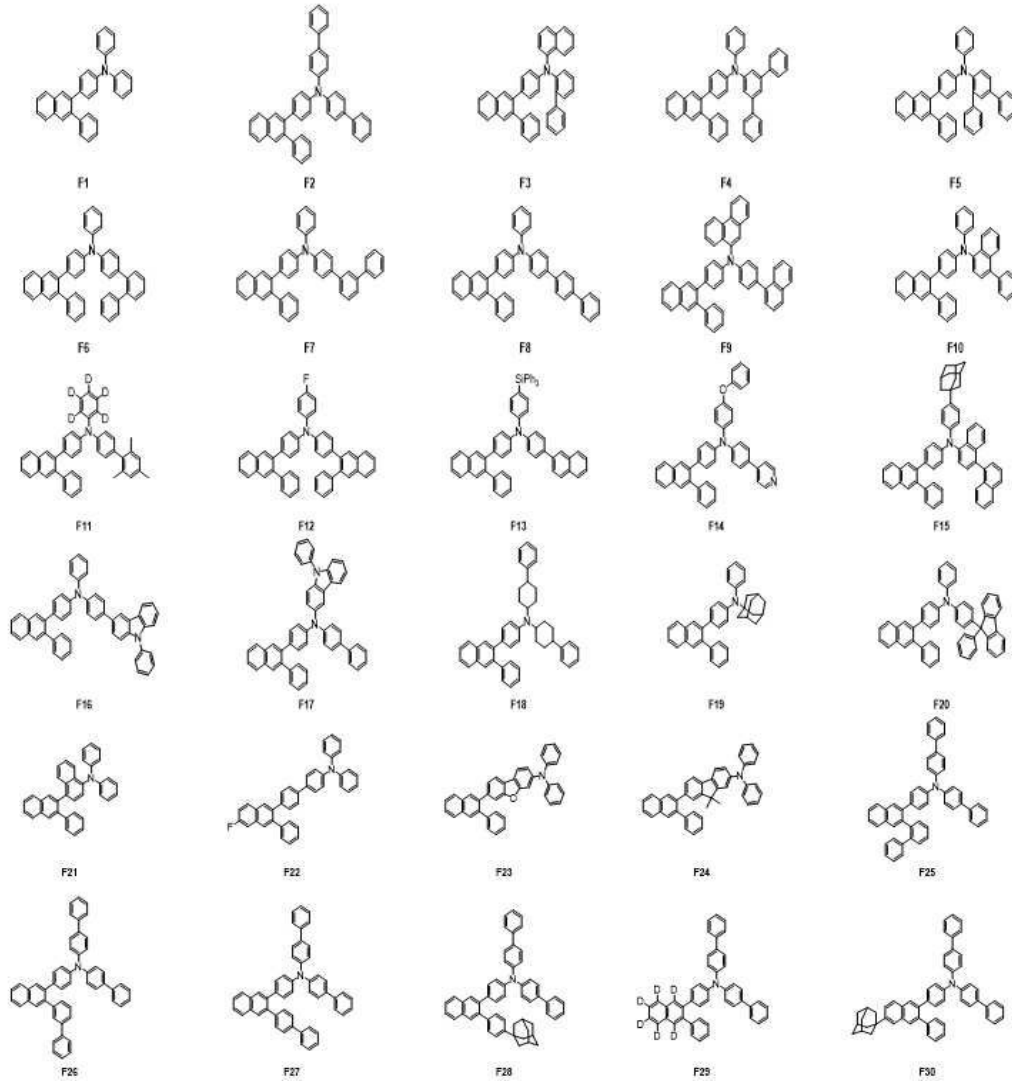


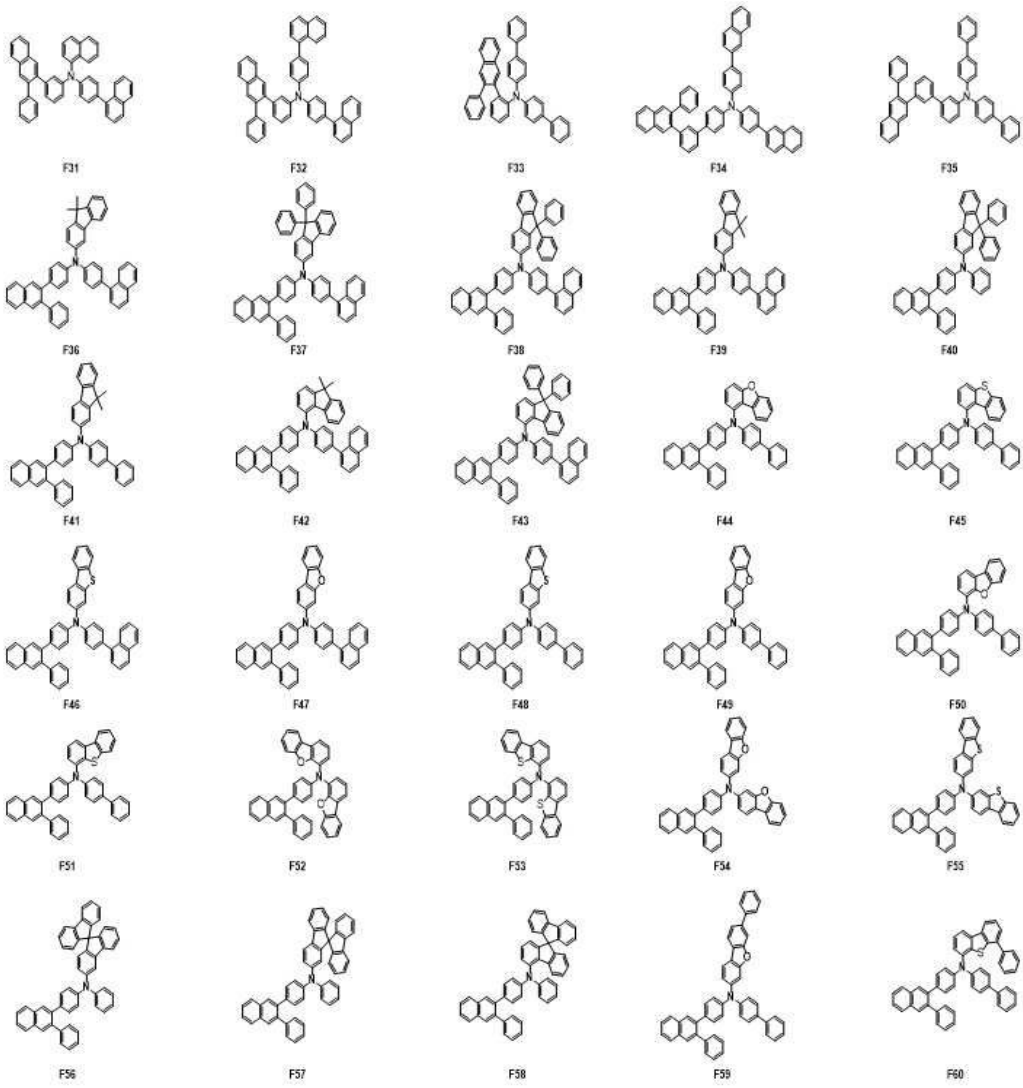
E59



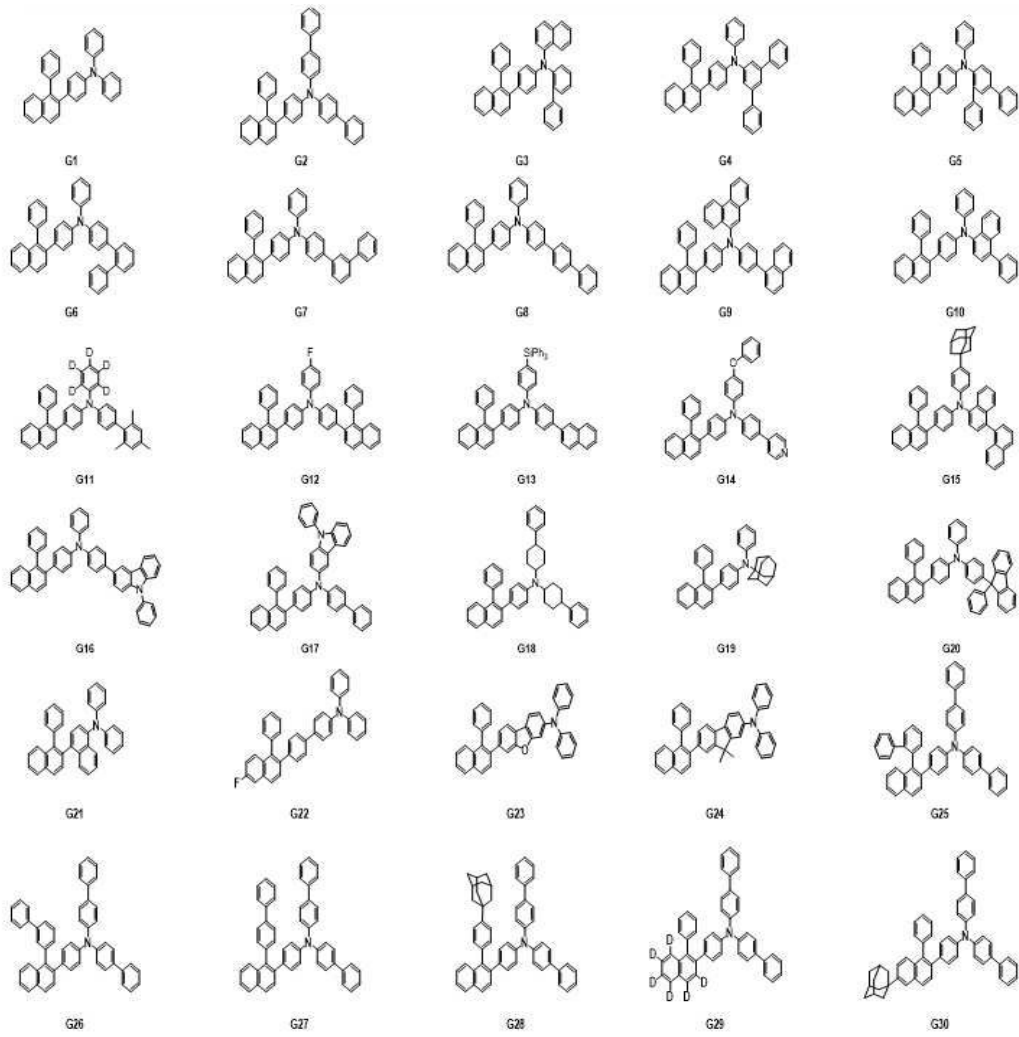
E60

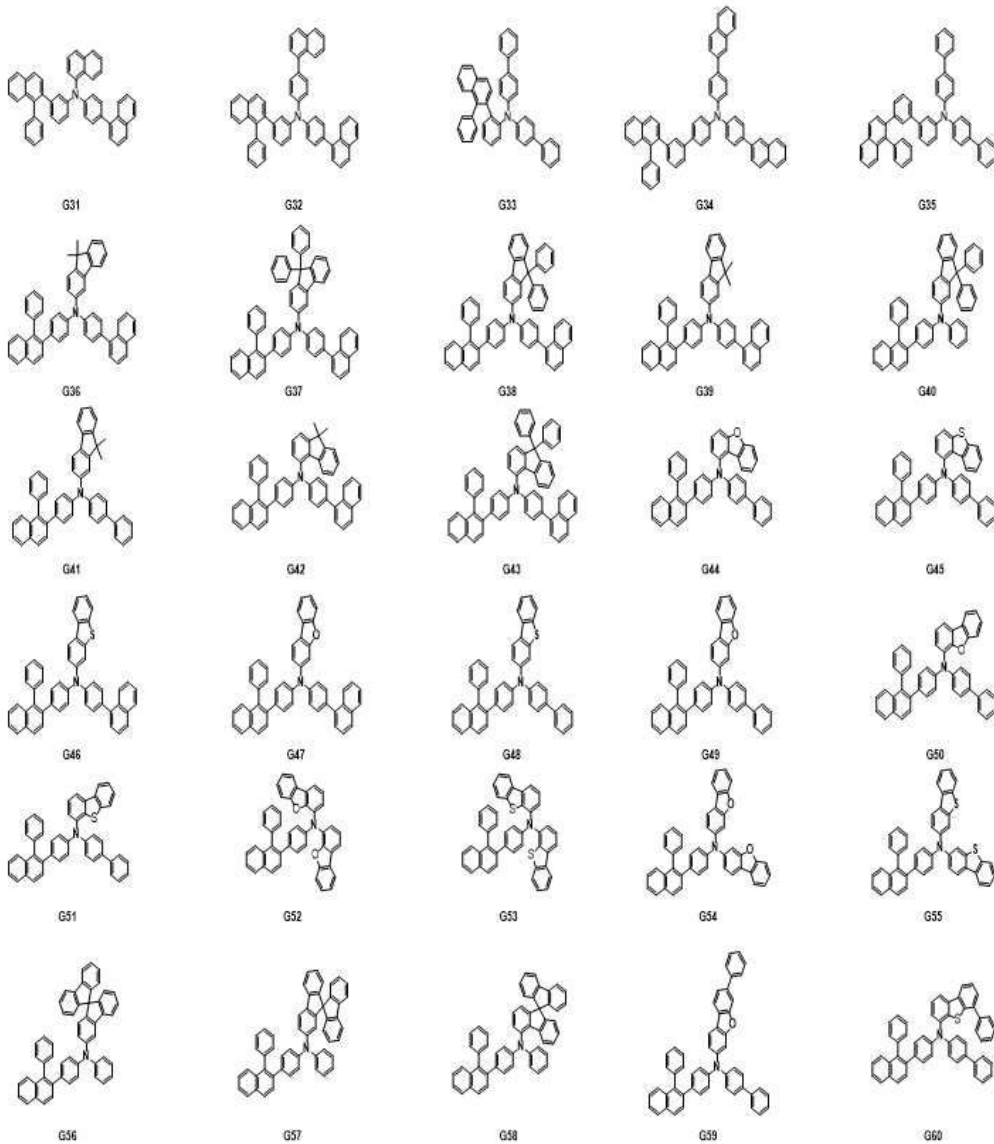
[화합물군 6]





[화합물군 7]





발명의 설명

기술 분야

[0001] 본 발명은 유기 전계 발광 소자 및 유기 전계 발광 소자용 모노아민 화합물에 관한 것이다.

배경 기술

[0002] 최근, 영상 표시 장치로서, 유기 전계 발광 표시 장치(Organic Electroluminescence Display)의 개발이 왕성하게 이루어져 왔다. 유기 전계 발광 표시 장치는 액정 표시 장치 등과는 다르게, 제1 전극 및 제2 전극으로부터 주입된 정공 및 전자를 발광층에 있어서 재결합시킴으로써, 발광층에 있어서 유기 화합물을 포함하는 발광 재료를 발광시켜서 표시를 실현하는 소위 자발광형의 표시 장치이다.

[0003] 유기 전계 발광 소자를 표시 장치에 응용함에 있어서는, 유기 전계 발광 소자의 저 구동 전압화, 고 발광 효율화 및 장수명화가 요구되고 있으며, 이를 안정적으로 구현할 수 있는 유기 전계 발광 소자용 재료 개발이 지속적으로 요구되고 있다.

발명의 내용

해결하려는 과제

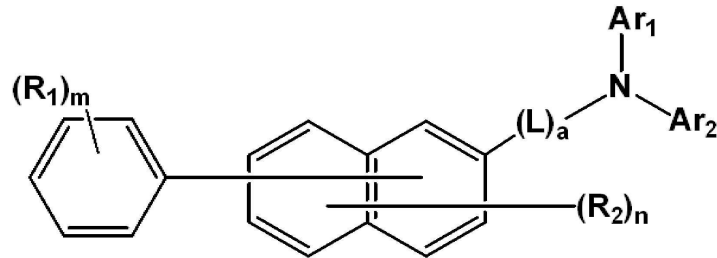
[0004] 본 발명은 유기 전계 발광 소자 및 유기 전계 발광 소자용 아민 화합물을 제공하는 것을 일 목적으로 하며, 보

다 구체적으로 고효율의 유기 전계 발광 소자 및 유기 전계 발광 소자의 정공 수송 영역에 포함되는 아민 화합물을 제공하는 것을 일 목적으로 한다.

과제의 해결 수단

[0005] 본 발명의 일 실시예는 제1 전극, 제1 전극 상에 제공된 정공 수송 영역, 정공 수송 영역 상에 제공된 발광층, 발광층 상에 제공된 전자 수송 영역 및 전자 수송 영역 상에 제공된 제2 전극을 포함하고, 정공 수송 영역이 하기 화학식 1로 표시되는 모노아민 화합물을 포함하는 유기 전계 발광 소자를 제공한다.

[0006] [화학식 1]



[0007]

[0008] 화학식 1에서, Ar₁ 및 Ar₂는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 10 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 3 이상 20 이하의 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기이며, L은 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아틸렌기, 또는 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아틸렌기이며, R₁은 수소 원자, 중수소 원자, 할로젠 원자, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 20 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 3 이상 20 이하의 시클로알킬기, 또는 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기이고, R₂는 수소 원자, 중수소 원자, 할로젠 원자, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 20 이하의 알킬기 또는 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 3 이상 20 이하의 시클로알킬기이고, a는 0 이상 3 이하의 정수이고, m은 0 이상 1 이하의 정수이고, n은 0 이상 6 이하의 정수이며, Ar₁ 및 Ar₂에서, 어느 하나가 3-디벤조플라닐기인 경우, 나머지 하나가 9-페난트릴기인 경우는 제외된다.

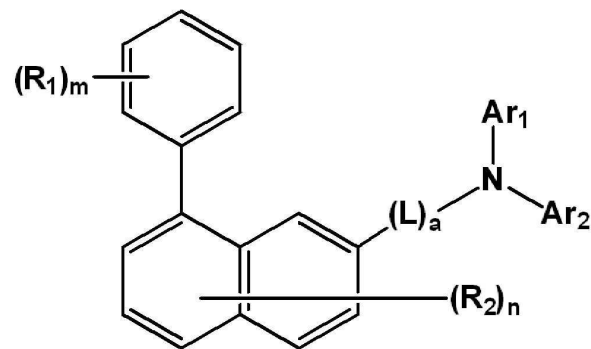
[0009] 정공 수송 영역은 복수의 층을 갖는 다층 구조를 가지고, 상기 복수의 층 중 상기 발광층과 접하는 층이 전술한 본 발명의 일 실시예에 따른 모노아민 화합물을 포함하는 것일 수 있다.

[0010] 정공 수송 영역은 제1 전극 상에 배치된 정공 주입층, 정공 주입층 상에 배치된 정공 수송층, 및 정공 수송층 상에 배치된 전자 저지층을 포함하고, 전자 저지층이 전술한 본 발명의 일 실시예에 따른 모노아민 화합물을 포함하는 것일 수 있다.

[0011] 전자 수송 영역은 발광층 상에 제공된 정공 저지층, 정공 저지층 상에 제공된 전자 수송층, 및 전자 수송층 상에 제공된 전자 주입층을 포함할 수 있다.

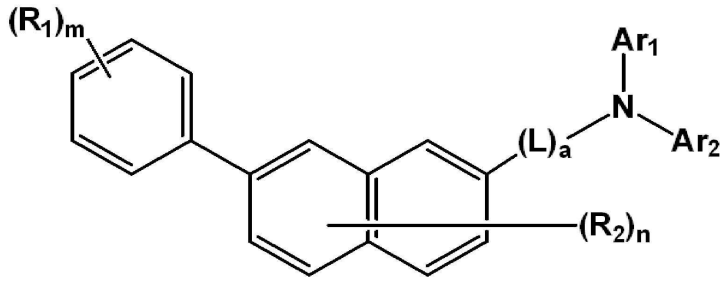
[0012] 화학식 1은 하기 화학식 2 내지 화학식 8 중 어느 하나로 표시될 수 있다.

[0013] [화학식 2]



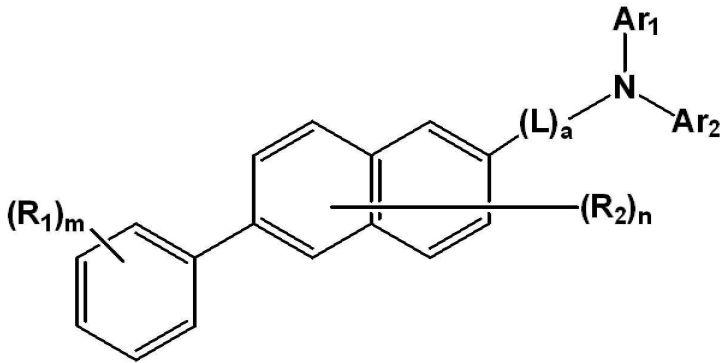
[0014]

[0015] [화학식 3]



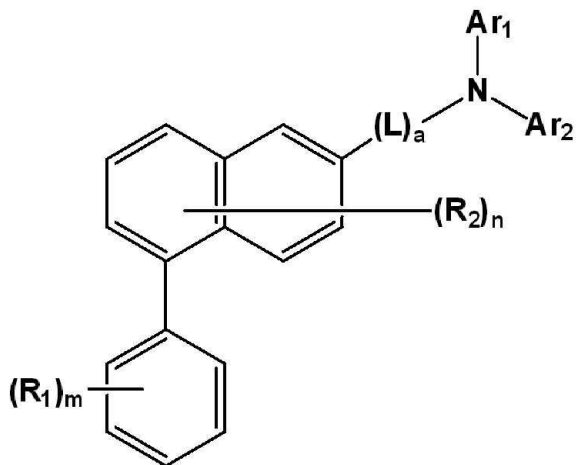
[0016]

[0017] [화학식 4]



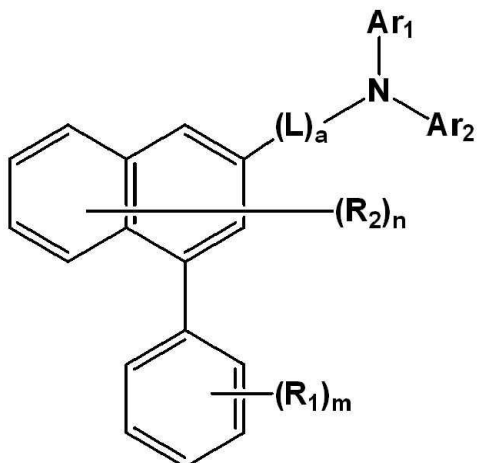
[0018]

[0019] [화학식 5]



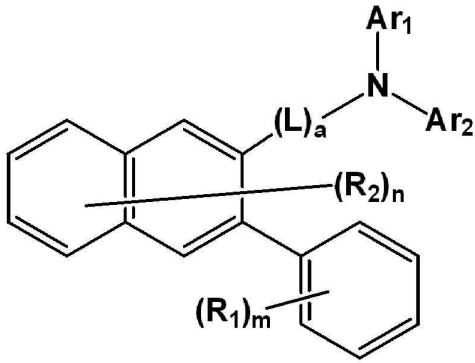
[0020]

[0021] [화학식 6]



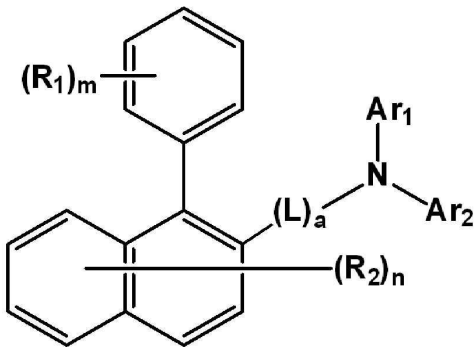
[0022]

[0023] [화학식 7]



[0024]

[0025] [화학식 8]



[0026]

[0027] 화학식 2 내지 8에서, Ar₁, Ar₂, L, R₁, R₂, a, m, 및 n은 화학식 1에서 정의한 바와 동일하다.

[0028] L은 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 12 이하의 아릴렌기일 수 있다.

[0029] L은 치환 또는 비치환된 페닐렌기일 수 있다.

[0030] Ar₁ 및 Ar₂는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 12 이하의 아릴기일 수 있다.

[0031] Ar₁ 및 Ar₂는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 페닐기, 치환 또는 비치환된 비페닐기, 치환 또는 비치환된 나프틸렌기 또는 치환 또는 비치환된 플루오레닐기일 수 있다.

[0032] Ar₁ 및 Ar₂는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 5 이상 12 이하의 헤테로아릴기일 수 있다.

[0033] Ar₁ 및 Ar₂는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 디벤조퓨란기, 치환 또는 비치환된 디벤조티오펜기 또는 치환 또는 비치환된 카바졸기일 수 있다.

[0034] 본 발명의 일 실시예는 상기 화학식 1로 표시되는 모노아민 화합물을 제공한다.

발명의 효과

[0035] 본 발명의 일 실시예에 따른 유기 전계 발광 소자는 효율이 우수하다.

[0036] 본 발명의 일 실시예에 따른 모노아민 화합물은 유기 전계 발광 소자의 정공 수송 영역의 재료로서 사용될 수 있고, 이를 사용함으로써 유기 전계 발광 소자의 효율 및 수명 향상이 가능하다.

[0037] 본 발명의 일 실시예에 따른 모노아민 화합물은 유기 전계 발광 소자의 정공 수송 영역의 재료로서 사용될 수 있고, 이를 사용함으로써 유기 전계 발광 소자의 저구동 전압화 효과가 있다.

도면의 간단한 설명

[0038] 도 1은 본 발명의 일 실시예에 따른 유기 전계 발광 소자를 개략적으로 나타낸 단면도이다.

도 2는 본 발명의 일 실시예에 따른 유기 전계 발광 소자를 개략적으로 나타낸 단면도이다.

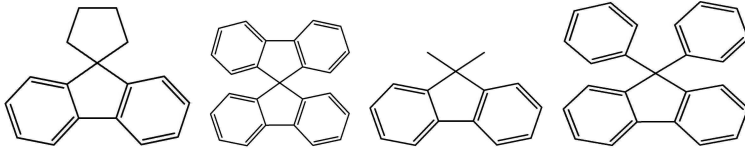
도 3은 본 발명의 일 실시예에 따른 유기 전계 발광 소자를 개략적으로 나타낸 단면도이다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

- [0039] 이상의 본 발명의 목적들, 다른 목적들, 특징들 및 이점들은 첨부된 도면 및 이하의 바람직한 실시예들을 통해서 쉽게 이해될 것이다. 그러나 본 발명은 여기서 설명되는 실시예들에 한정되지 않고 다른 형태로 구체화될 수도 있다. 오히려, 여기서 소개되는 실시예들은 개시된 내용이 철저하고 완전해질 수 있도록 그리고 통상의 기술자에게 본 발명의 사상이 충분히 전달될 수 있도록 하기 위해 제공되는 것이다.
- [0040] 각 도면을 설명하면서 유사한 참조부호를 유사한 구성요소에 대해 사용하였다. 첨부된 도면에 있어서, 구조물들의 치수는 본 발명의 명확성을 위하여 실제보다 확대하여 도시한 것이다. 제1, 제2 등의 용어는 다양한 구성요소들을 설명하는데 사용될 수 있지만, 상기 구성요소들은 상기 용어들에 의해 한정되어서는 안 된다. 상기 용어들은 하나의 구성요소를 다른 구성요소로부터 구별하는 목적으로만 사용된다. 예를 들어, 본 발명의 권리 범위를 벗어나지 않으면서 제1 구성요소는 제2 구성요소로 명명될 수 있고, 유사하게 제2 구성요소도 제1 구성요소로 명명될 수 있다. 단수의 표현은 문맥상 명백하게 다르게 뜻하지 않는 한, 복수의 표현을 포함한다.
- [0041] 본 명세서에서, "포함하다" 또는 "가지다" 등의 용어는 명세서 상에 기재된 특징, 숫자, 단계, 동작, 구성요소, 부품 또는 이들을 조합한 것이 존재함을 지정하려는 것이지, 하나 또는 그 이상의 다른 특징들이나 숫자, 단계, 동작, 구성요소, 부분품 또는 이들을 조합한 것들의 존재 또는 부가 가능성을 미리 배제하지 않는 것으로 이해되어야 한다. 또한, 층, 막, 영역, 판 등의 부분이 다른 부분 "상에" 있다고 할 경우, 이는 다른 부분 "바로 위에" 있는 경우뿐만 아니라 그 중간에 또 다른 부분이 있는 경우도 포함한다. 반대로 층, 막, 영역, 판 등의 부분이 다른 부분 "하부에" 있다고 할 경우, 이는 다른 부분 "바로 아래에" 있는 경우뿐만 아니라 그 중간에 또 다른 부분이 있는 경우도 포함한다.
- [0042] 먼저, 도 1 내지 도 3을 참조하여 본 발명의 일 실시예에 따른 유기 전계 발광 소자에 대하여 설명한다.
- [0043] 도 1은 본 발명의 일 실시예에 따른 유기 전계 발광 소자를 개략적으로 나타낸 단면도이다. 도 2는 본 발명의 일 실시예에 따른 유기 전계 발광 소자를 개략적으로 나타낸 단면도이다. 도 3은 본 발명의 일 실시예에 따른 유기 전계 발광 소자를 개략적으로 나타낸 단면도이다.
- [0044] 도 1 내지 도 3을 참조하면, 본 발명의 일 실시예에 따른 유기 전계 발광 소자(10)는 제1 전극(EL1), 정공 수송 영역(HTR), 발광층(EML), 전자 수송 영역(ETR) 및 제2 전극(EL2)을 포함한다.
- [0045] 정공 수송 영역(HTR)은 본 발명의 일 실시예에 따른 모노아민 화합물을 포함한다. 이하, 본 발명의 일 실시예에 따른 모노아민 화합물을 자세히 설명한 후, 유기 전계 발광 소자(10) 각 층에 대해 설명하도록 한다.
- [0046] 본 명세서에서, "치환 또는 비치환된"은 중수소 원자, 할로겐 원자, 시아노기, 니트로기, 실릴기, 붕소기, 포스핀기, 알킬기, 알케닐기, 아릴기 및 헤테로 고리기로 이루어진 군에서 선택되는 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환된 것을 의미할 수 있다. 또한, 상기 예시된 치환기 각각은 치환 또는 비치환된 것일 수 있다. 예를 들어, 비페닐기는 아릴기로 해석될 수도 있고, 페닐기로 치환된 페닐기로 해석될 수도 있다.
- [0047] 본 명세서에서, 할로겐 원자의 예로는 불소 원자, 염소 원자, 브롬 원자 또는 요오드 원자가 있다.
- [0048] 본 명세서에서, 알킬기는 직쇄, 분지쇄 또는 고리형일 수 있다. 알킬기의 탄소수는 1 이상 30 이하, 1 이상 20 이하, 1 이상 10 이하 또는 1 이상 4 이하이다. 알킬기의 예로는 메틸기, 에틸기, n-프로필기, 이소프로필기, n-부틸기, s-부틸기, t-부틸기, i-부틸기, 2-에틸부틸기, 3, 3-디메틸부틸기, n-펜틸기, i-펜틸기, 네오펜틸기, t-펜틸기, 시클로펜틸기, 1-메틸펜틸기, 3-메틸펜틸기, 2-에틸펜틸기, 4-메틸-2-펜틸기, n-헥실기, 1-메틸헥실기, 2-에틸헥실기, 2-부틸헥실기, 시클로헥실기, 4-메틸시클로헥실기, 4-t-부틸시클로헥실기, n-헵틸기, 1-메틸헵틸기, 2,2-디메틸헵틸기, 2-에틸헵틸기, 2-부틸헵틸기, n-옥틸기, t-옥틸기, 2-에틸옥틸기, 2-부틸옥틸기, 2-헥실옥틸기, 3,7-디메틸옥틸기, 시클로옥틸기, n-노닐기, n-데실기, 아다만틸기, 2-에틸데실기, 2-부틸데실기, 2-헥실데실기, 2-옥틸데실기, n-운데실기, n-도데실기, 2-에틸도데실기, 2-부틸도데실기, 2-헥실도데실기, 2-옥틸도데실기, n-트리데실기, n-테트라데실기, n-펜타데실기, n-헥사데실기, 2-에틸헥사데실기, 2-부틸헥사데실기, 2-헥실헥사데실기, 2-옥틸헥사데실기, n-헵타데실기, n-옥타데실기, n-노나데실기, n-이코실기, 2-에틸이코실기, 2-부틸이코실기, 2-헥실이코실기, 2-옥틸이코실기, n-헨이코실기, n-도코실기, n-트리코실기, n-테트라코실기, n-펜타코실기, n-헥사코실기, n-헵타코실기, n-옥타코실기, n-노나코실기, 및 n-트리아콘틸기 등을 들 수 있지만, 이들에 한정되지 않는다.

[0049] 본 명세서에서, 아릴기는 방향족 탄화수소 고리로부터 유도된 임의의 작용기 또는 치환기를 의미한다. 아릴기는 단환식 아릴기 또는 다환식 아릴기일 수 있다. 아릴기의 고리 형성 탄소수는 6 이상 30 이하, 6 이상 20 이하, 또는 6 이상 12 이하일 수 있다. 아릴기의 예로는 페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 안트라세닐기, 페난트릴기, 비페닐기, 터페닐기, 퀴터페닐기, 퀴크페닐기, 섹시페닐기, 비페닐렌기, 트리페닐렌기, 피레닐기, 벤조 플루오란테닐기, 크리세닐기 등을 예시할 수 있지만, 이들에 한정되지 않는다.

[0050] 본 명세서에서, 플루오레닐기는 치환될 수 있고, 치환기 2개가 서로 결합하여 스피로 구조를 형성할 수도 있다. 플루오레닐기가 치환되는 경우의 예시는 하기와 같다. 다만, 이에 의하여 한정되는 것은 아니다.



[0051]

[0052] 본 명세서에서, 헤테로아릴기는 헤테로 원자로 O, N, P, Si 및 S 중 1개 이상을 포함하는 헤테로아릴기일 수 있다. 헤테로아릴기가 헤테로 원자를 2개 포함할 경우, 2개의 헤테로 원자는 서로 동일할 수도 있고, 상이할 수도 있다. 헤테로아릴기의 고리 형성 탄소수는 2 이상 30 이하 또는 5 이상 12 이하이다. 헤테로아릴기는 단환식 헤테로아릴기 또는 다환식 헤테로아릴기일 수 있다. 다환식 헤테로아릴기는 예를 들어, 2환 또는 3환 구조를 갖는 것일 수 있다. 헤테로아릴기의 예로는 티오펜기, 퓨란기, 피롤기, 이미다졸기, 티아졸기, 옥사졸기, 옥사디아졸기, 트리아졸기, 피리딘기, 비피리딘기, 피리미딘기, 트리아진기, 트리아졸기, 아크리딜기, 피리다진기, 피라지닐기, 퀴놀린기, 퀴나졸린기, 퀴녹살린기, 페녹사진기, 프탈라진기, 피리도 피리미딘기, 피리도 피라진기, 피라지노 피라진기, 이소퀴놀린기, 인돌기, 카바졸기, N-아릴카바졸기, N-헤테로아릴카바졸기, N-알킬카바졸기, 벤조옥사졸기, 벤조이미다졸기, 벤조티아졸기, 벤조카바졸기, 벤조티오펜기, 디벤조티오펜기, 티에노티오펜기, 벤조퓨란기, 페난트릴렌기, 티아졸기, 이소옥사졸기, 옥사디아졸기, 티아디아졸기, 페노티아진기, 디벤조실롤기 및 디벤조퓨란기 등이 있으나, 이들에 한정되지 않는다.

[0053] 본 명세서에서, 실릴기는 알킬 실릴기 및 아릴 실릴기를 포함한다. 실릴기의 예로는 트리메틸실릴기, 트리에틸실릴기, t-부틸디메틸실릴기, 비닐디메틸실릴기, 프로필디메틸실릴기, 트리페닐실릴기, 디페닐실릴기, 페닐실릴기 등이 있으나, 이들에 한정되지 않는다.

[0054] 본 명세서에서, 붕소기는 알킬 붕소기 및 아릴 붕소기를 포함한다. 붕소기의 예로는 트리메틸붕소기, 트리에틸붕소기, t-부틸디메틸붕소기, 트리페닐붕소기, 디페닐붕소기, 페닐붕소기 등이 있으나, 이들에 한정되지 않는다.

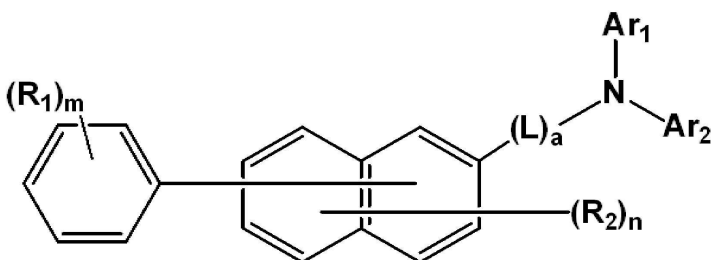
[0055] 본 명세서에서, 알케닐기는 직쇄 또는 분지쇄일 수 있다. 탄소수는 특별히 한정되지 않으나, 2 이상 30 이하, 2 이상 20 이하 또는 2 이상 10 이하이다. 알케닐기의 예로는 비닐기, 1-부테닐기, 1-펜테닐기, 1,3-부타디에닐 아릴기, 스티레닐기, 스티릴비닐기 등이 있으나, 이들에 한정되지 않는다.

[0056] 본 명세서에서, 아릴렌기는 2가기인 것을 제외하고는 전술한 아릴기에 관한 설명이 적용된다.

[0057] 본 명세서에서, 헤테로아릴렌기는 2가기인 것을 제외하고는 전술한 헤테로아릴기에 관한 설명이 적용된다.

[0058] 본 발명의 일 실시예에 따른 모노아민 화합물은 하기 화학식 1로 표시된다.

[0059] [화학식 1]



[0060]

[0061] 화학식 1에서, Ar₁ 및 Ar₂는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 10 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 3 이상 20 이하의 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이

하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기이다.

[0062] 화학식 1에서, L은 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴렌기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴렌기이다.

[0063] 화학식 1에서, R₁은 수소 원자, 중수소 원자, 할로겐 원자, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 20 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 3 이상 20 이하의 시클로알킬기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기이다.

[0064] 화학식 1에서, R₂는 수소 원자, 중수소 원자, 할로겐 원자, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 20 이하의 알킬기 또는 치환 또는 비치환된 고리형성 탄소수 3 이상 20 이하의 시클로알킬기이다. 한편, R₂는 아릴기 및 헤테로아릴기가 아니다. R₂가 아릴기 및 헤테로아릴기인 경우, 나프탈렌 골격측에 HOMO (Highest Occupied Molecular Orbital)가 크게 분포하게되고, 이에 따라 아민기측의 전자 밀도가 상대적으로 감소해 장수명을 유도하는 아민기의 특성을 유지가 어려워 유기 전계 발광 소자의 수명이 저하될 수 있다. R₂가 아릴기 및 헤테로아릴기가 아니라는 것은 R₂가 아릴기 및 헤테로아릴기가 아닌 경우 및 R₂가 아릴기 및 헤테로아릴기로 치환되지 않은 경우를 모두 포함할 수 있다.

[0065] 화학식 1에서, a는 0 이상 3 이하의 정수이다. 한편, a가 2 이상일 경우, 복수의 L은 서로 동일하거나 상이하다.

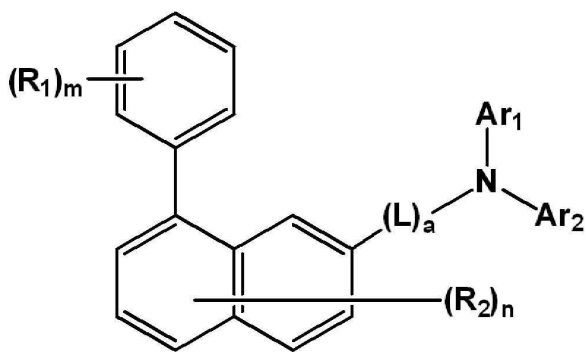
[0066] 화학식 1에서, m은 0 이상 1 이하의 정수이다.

[0067] 화학식 1에서, n은 0 이상 6 이하의 정수이다. 한편, n이 2 이상일 경우, 복수의 R₂는 서로 동일하거나 상이하다.

[0068] 화학식 1에서, Ar₁ 및 Ar₂에서, 어느 하나가 3-디벤조퓨라닐기인 경우, 나머지 하나가 9-페난트릴기인 경우는 제외된다. 즉, Ar₁이 3-디벤조퓨라닐기인 경우 Ar₂는 9-페난트릴기는 아니고, Ar₂가 3-디벤조퓨라닐기인 경우 Ar₁은 9-페난트릴기는 아니며, 질소원자에 3-디벤조퓨라닐기 및 9-페난트릴기가 동시에 치환되는 경우는 제외된다. 질소원자에 3-디벤조퓨라닐기 및 9-페난트릴기가 동시에 치환되는 경우, 분자 스택킹(stackings)이 강하고, 증착 온도가 높으므로 열분해가 일어날 수 있고, 이에 따라 유기 전계 발광 소자의 특성이 저하될 수 있다.

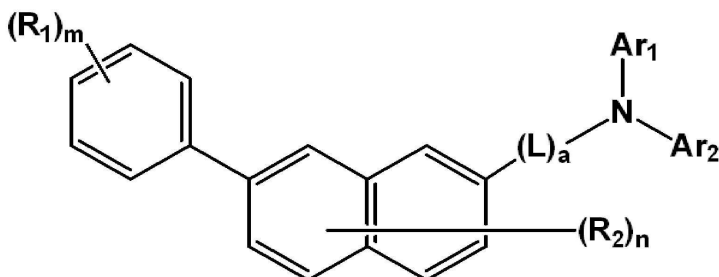
[0069] 일 실시예에서, 화학식 1은 하기 화학식 2 내지 화학식 8 중 어느 하나로 표시될 수 있다.

[0070] [화학식 2]



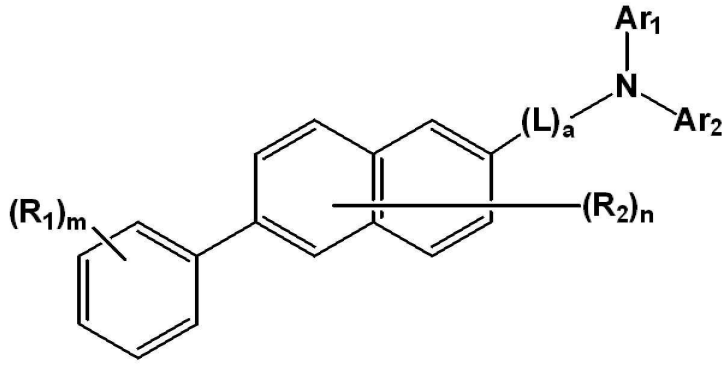
[0071]

[0072] [화학식 3]



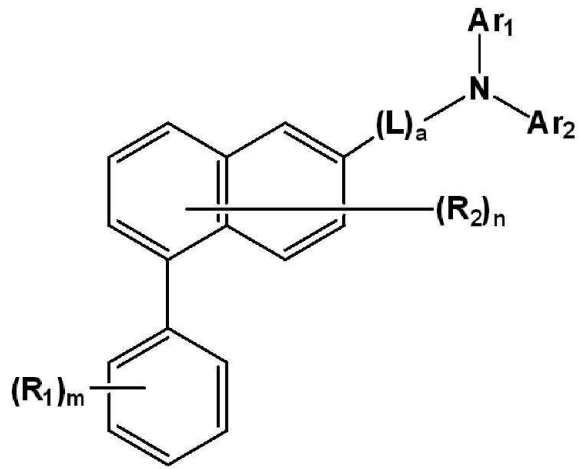
[0073]

[0074] [화학식 4]



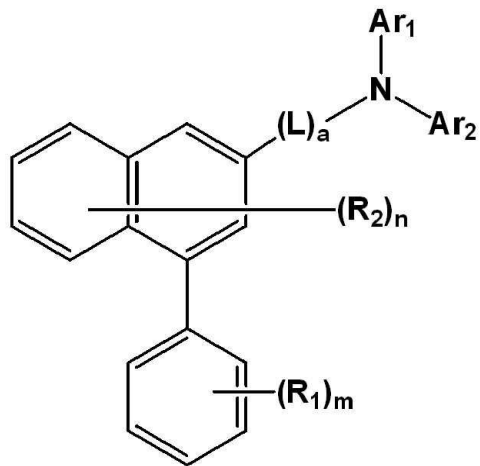
[0075]

[0076] [화학식 5]



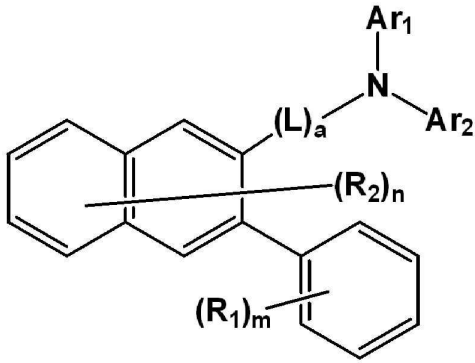
[0077]

[0078] [화학식 6]



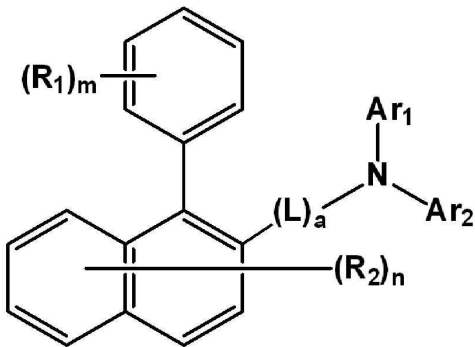
[0079]

[0080] [화학식 7]



[0081]

[0082] [화학식 8]



[0083]

[0084] 화학식 2 내지 8에서, Ar₁, Ar₂, L, R₁, R₂, a, m, 및 n은 화학식 1에서 정의한 바와 동일하다.

[0085] 화학식 1에서, m은 1이고 L은 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 12 이하의 아릴렌기일 수 있다. L은 예를 들어, 치환 또는 비치환된 페닐렌기일 수 있다. 다만, 이에 의하여 한정되는 것은 아니다.

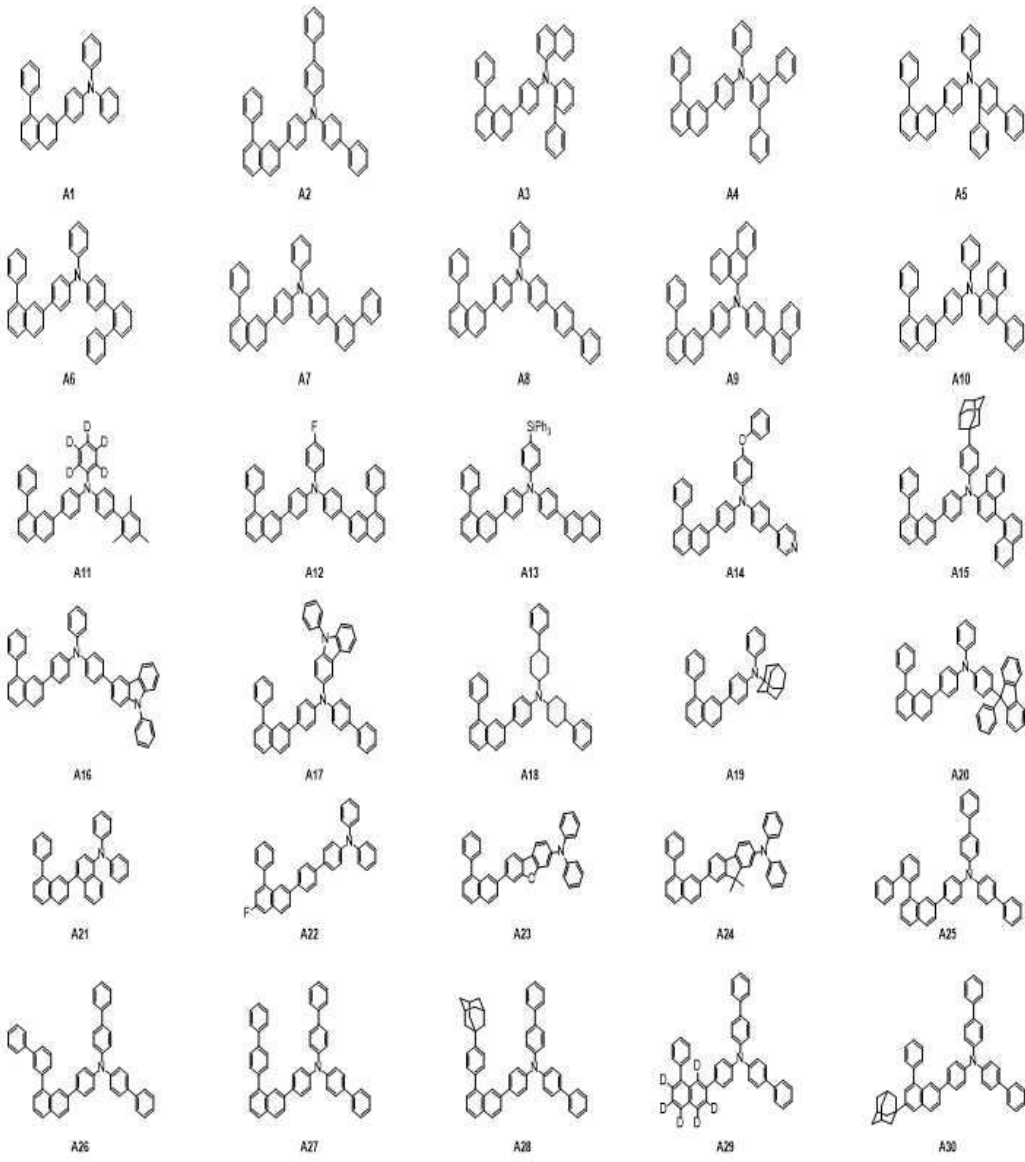
[0086] 화학식 1에서, Ar₁ 및 Ar₂는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 12 이하의 아릴기일 수 있다. Ar₁ 및 Ar₂는 예를 들어, 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 페닐기, 치환 또는 비치환된 비페닐기, 치환 또는 비치환된 나프틸렌기 또는 치환 또는 비치환된 플루오레닐기일 수 있다. 다만, 이에 의하여 한정되는 것은 아니다.

[0087] 화학식 1에서, Ar₁ 및 Ar₂는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 5 이상 12 이하의 헤테로아릴기일 수 있다. Ar₁ 및 Ar₂는 예를 들어, 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 디벤조퓨란기, 치환 또는 비치환된 디벤조티오펜기 또는 치환 또는 비치환된 카바졸기일 수 있다. 다만, 이에 의하여 한정되는 것은 아니다.

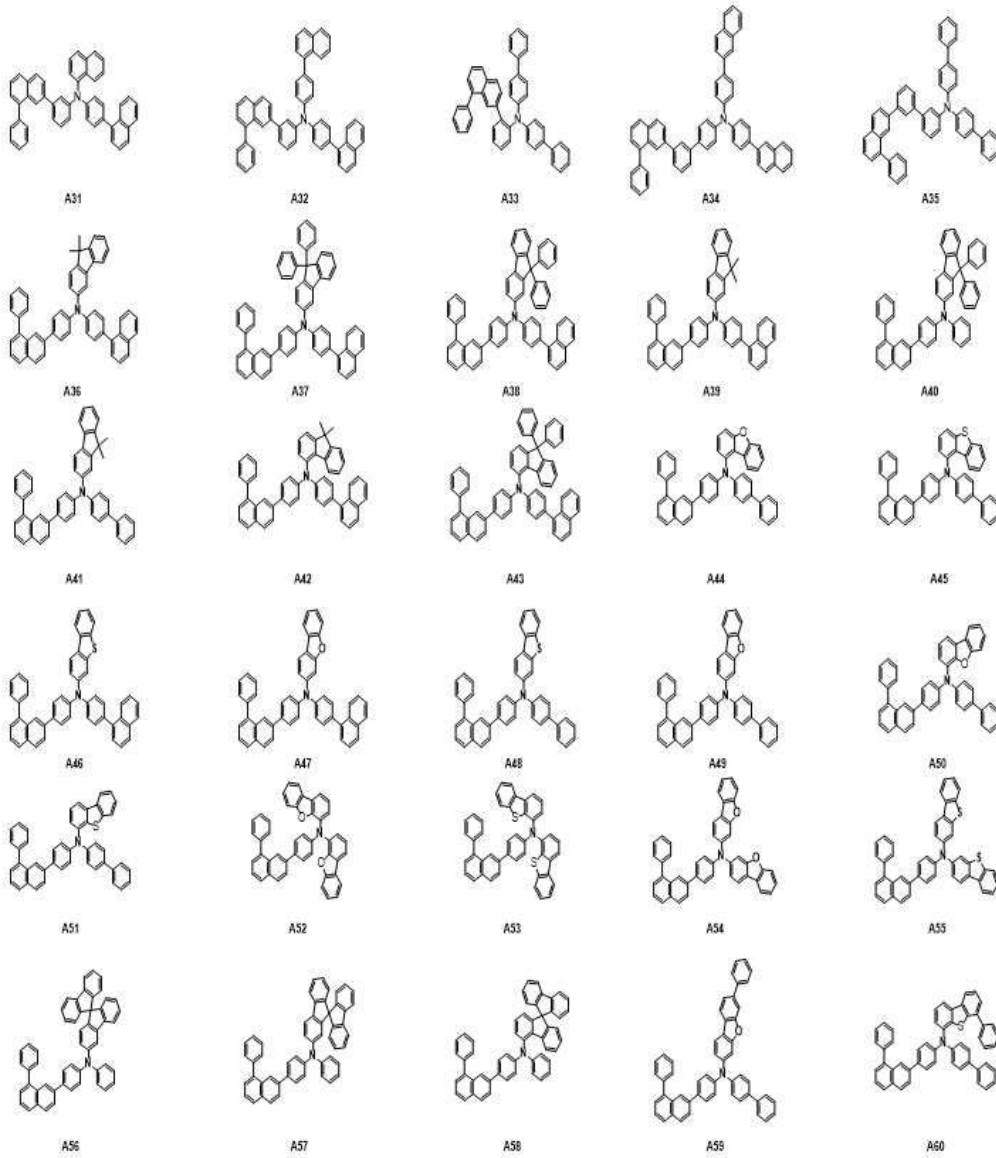
[0088] 화학식 1에서, R₂는 수소 원자 또는 중수소 원자일 수 있다.

[0089] 발명의 일 실시예에 따른 화학식 1로 표시되는 모노아민 화합물은 하기 화합물군 1 내지 화합물군 7에 표시된 화합물들 중 선택되는 어느 하나일 수 있다. 다만, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0090] [화합물군 1]

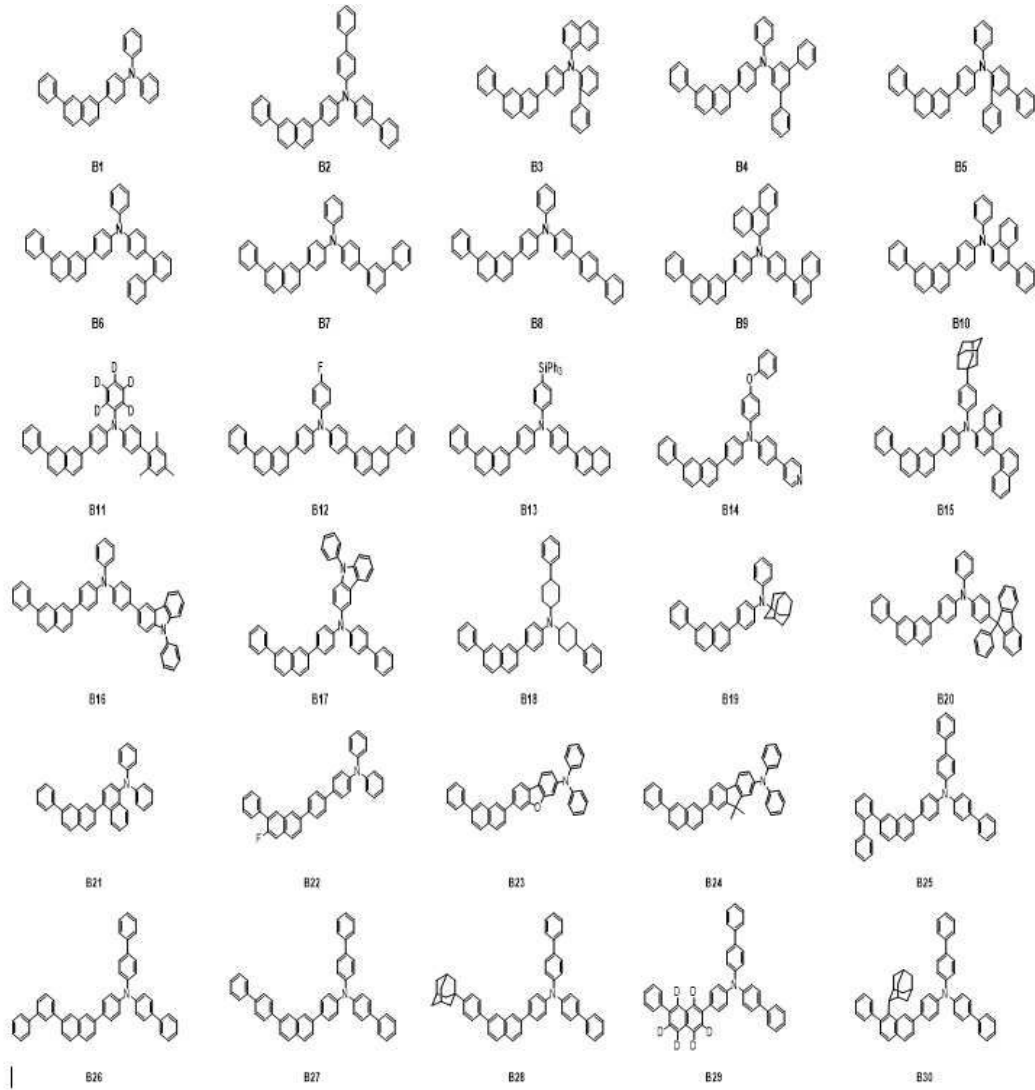


[0091]

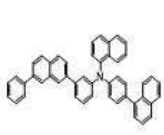


[0092]

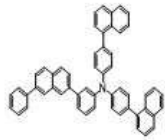
[0093] [화합물군 2]



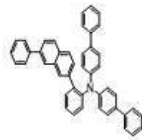
[0094]



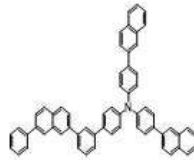
B31



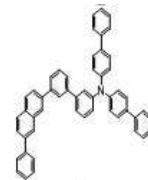
B32



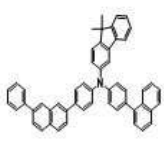
B33



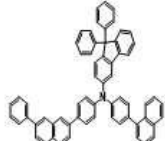
B34



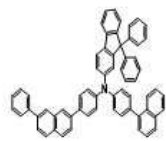
B35



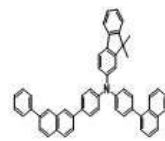
B36



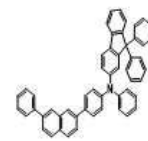
B37



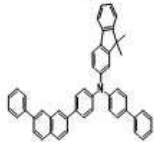
B38



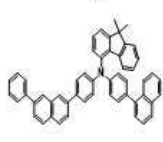
B39



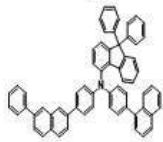
B40



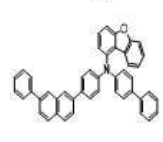
B41



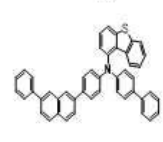
B42



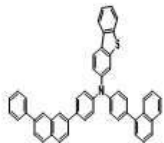
B43



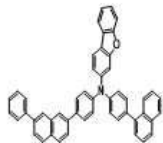
B44



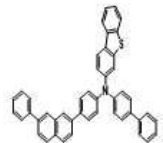
B45



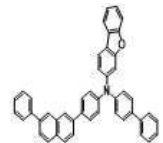
B46



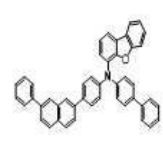
B47



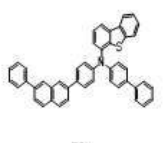
B48



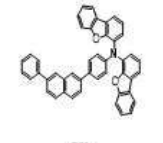
B49



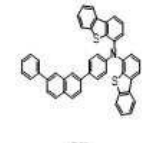
B50



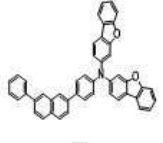
B51



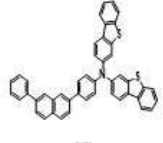
B52



B53



B54



B55



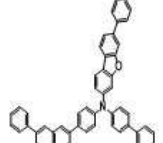
B56



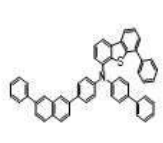
B57



B58



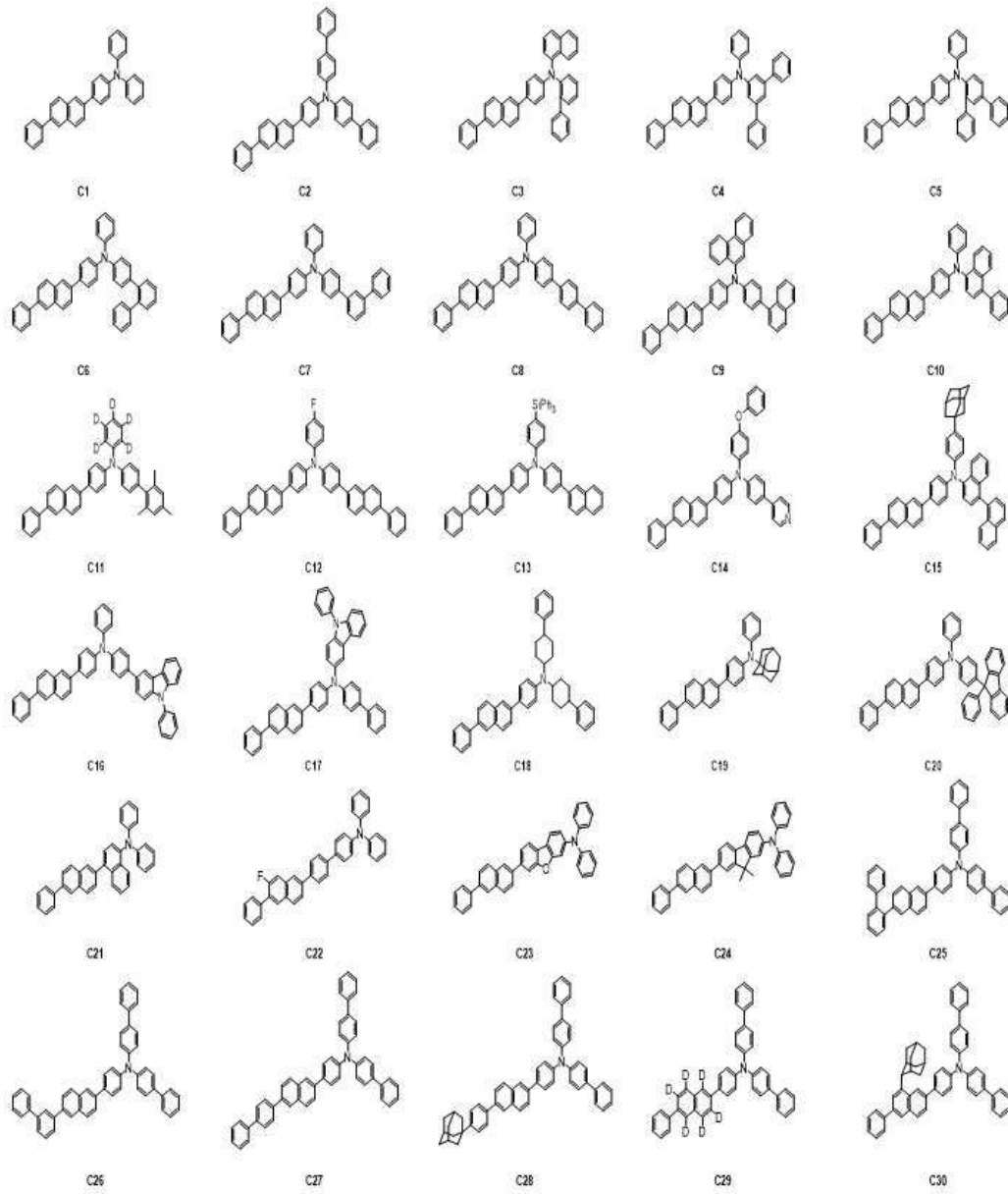
B59



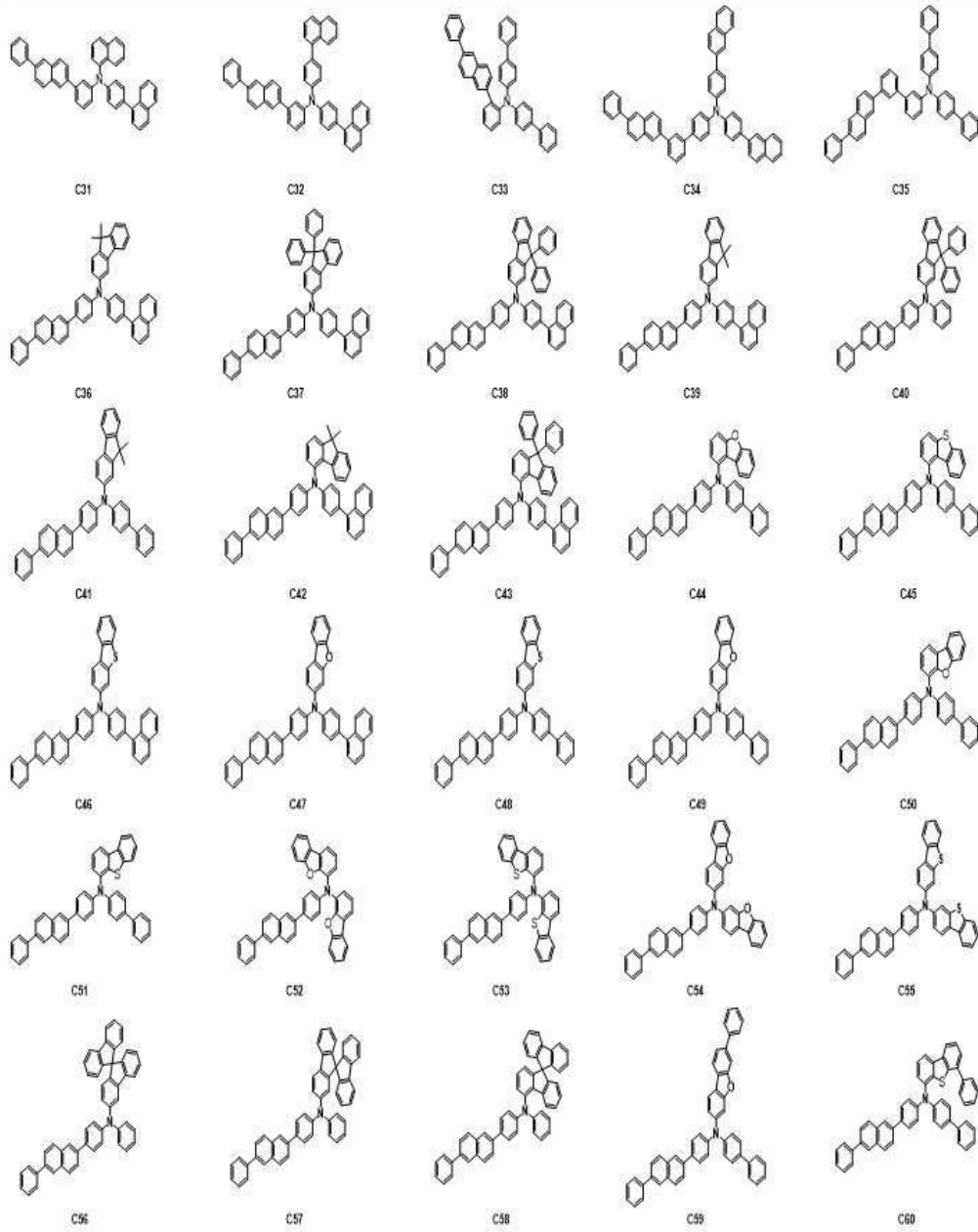
B60

[0095]

[0096] [화합물군 3]

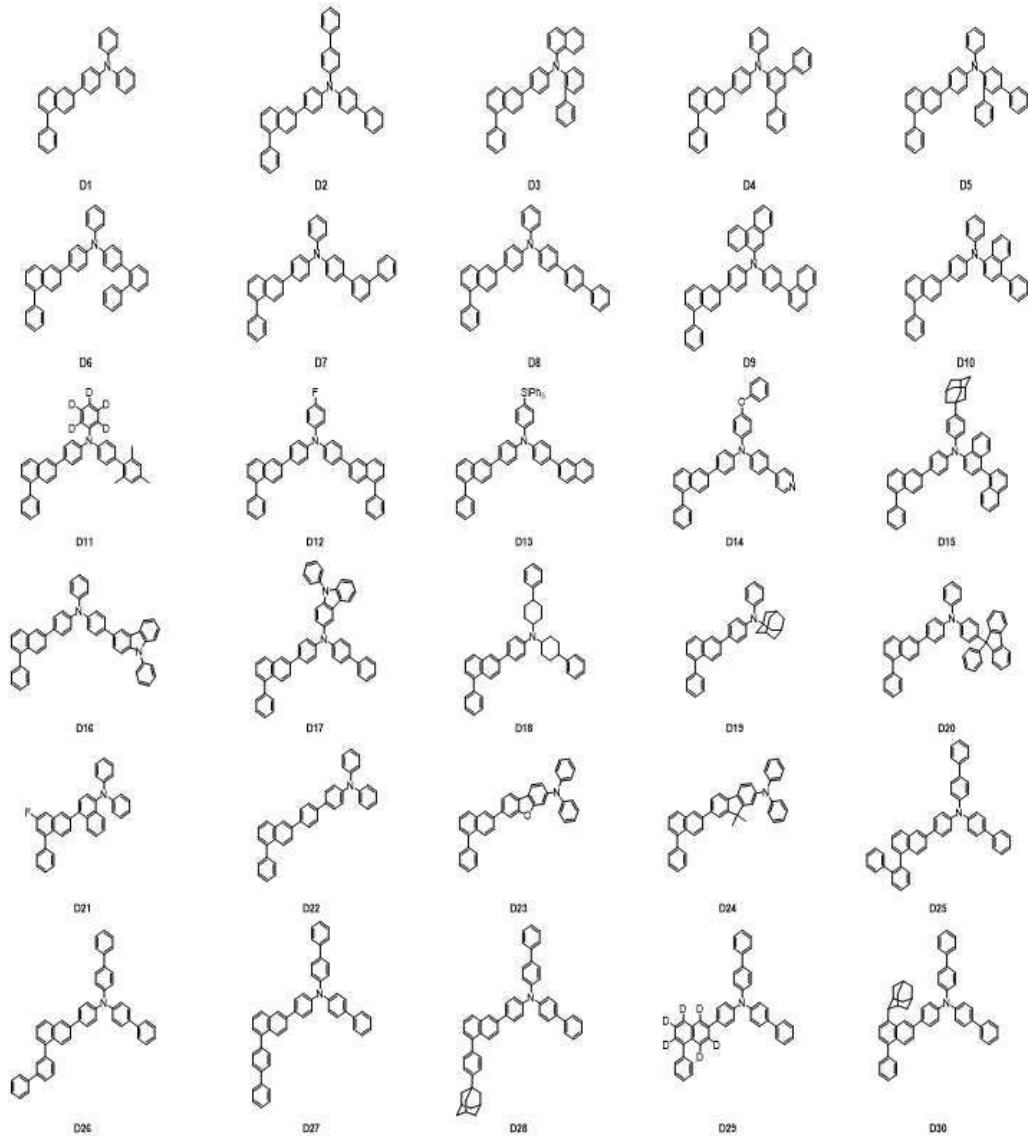


[0097]

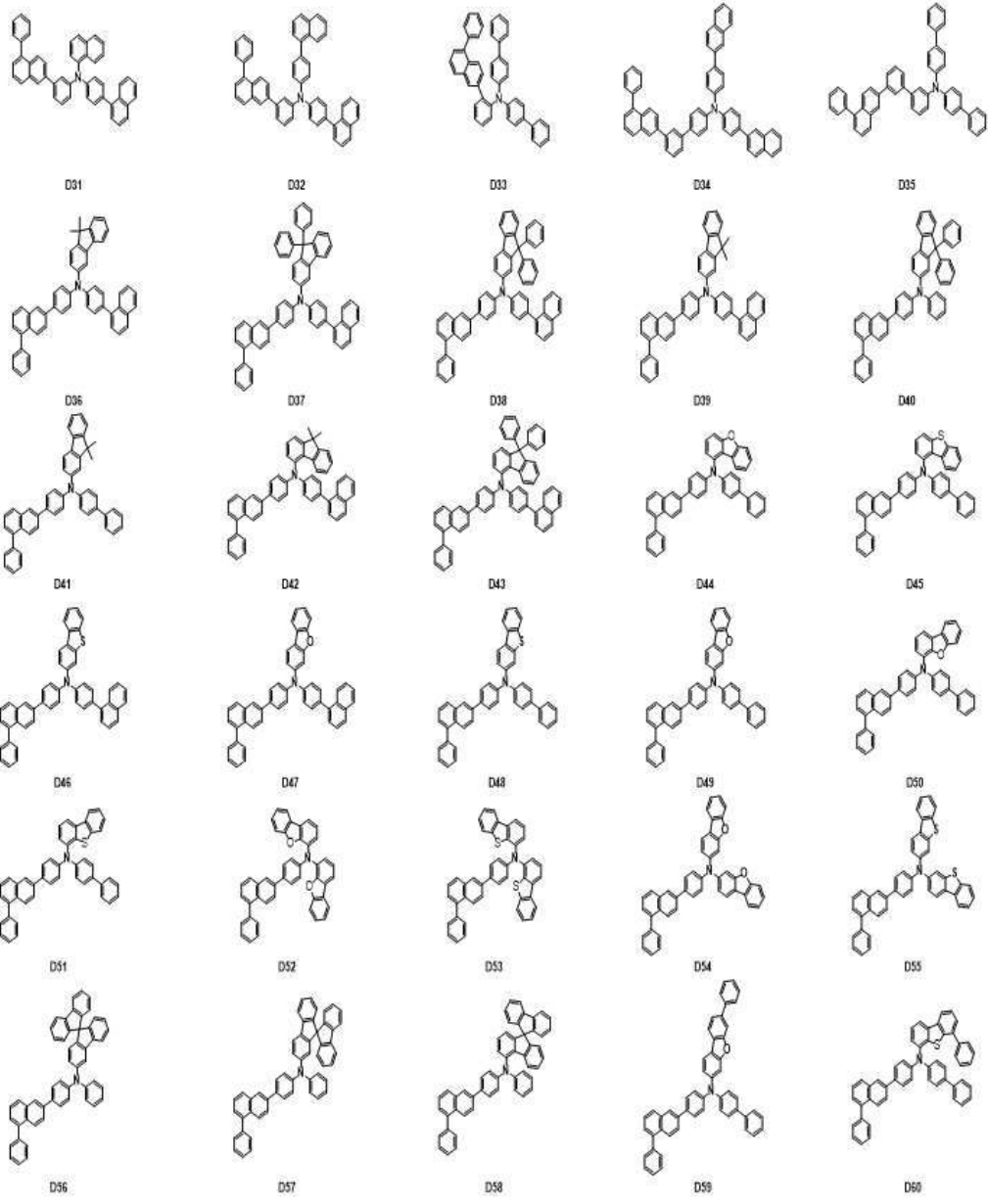


[0098]

[0099] [화합물군 4]

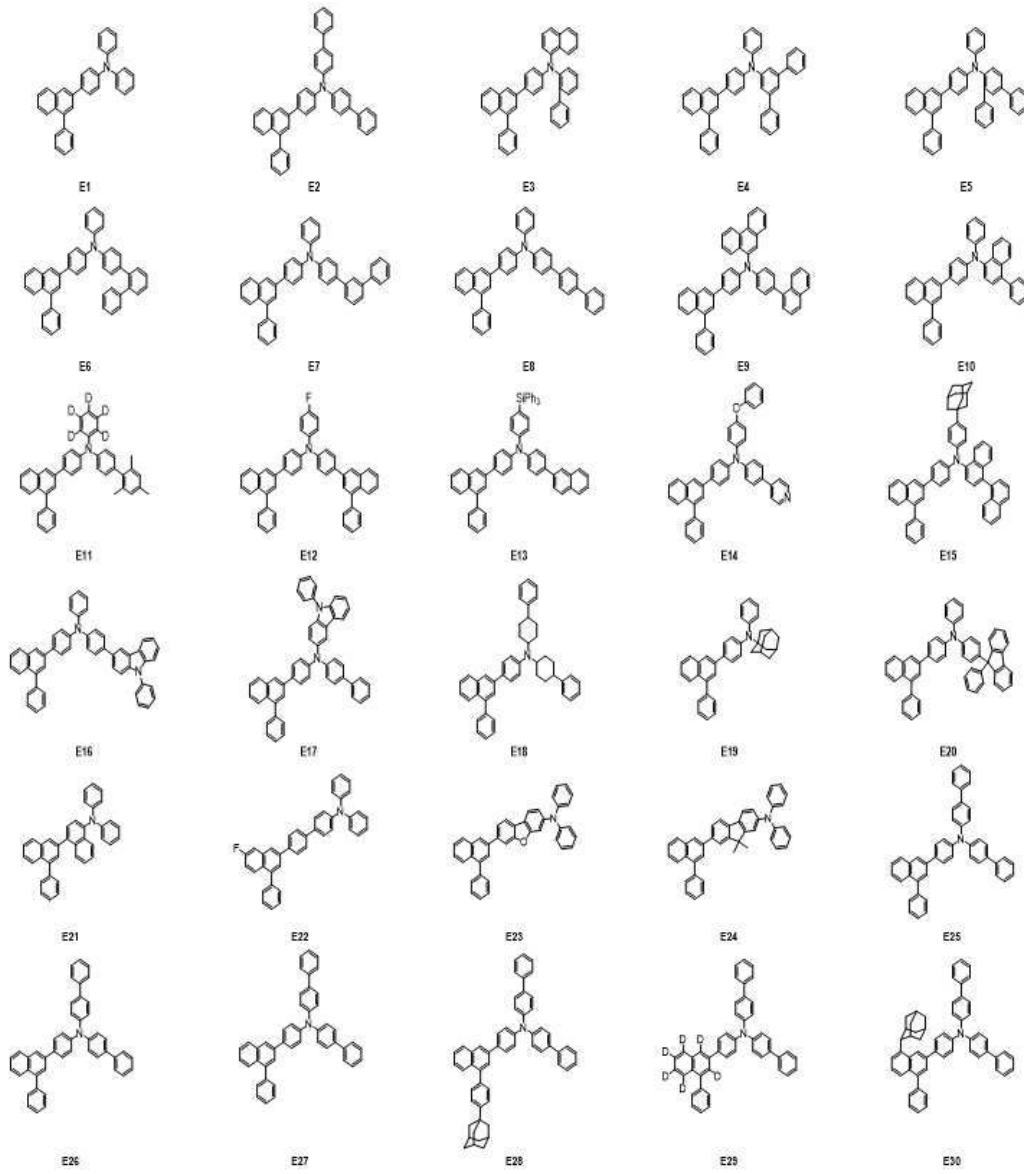


[0100]

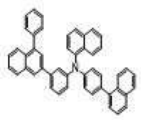


[0101]

[0102] [화합물군 5]



[0103]



E31



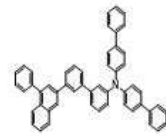
E32



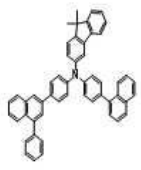
E33



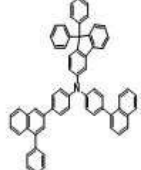
E34



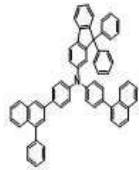
E35



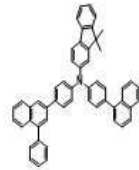
E36



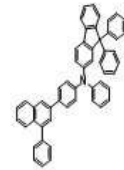
E37



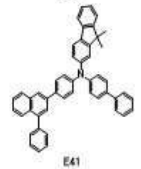
E38



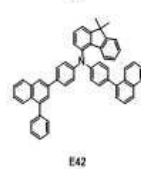
E39



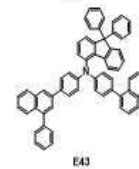
E40



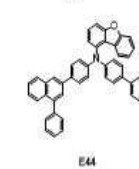
E41



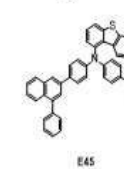
E42



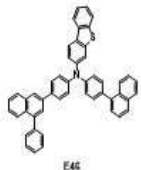
E43



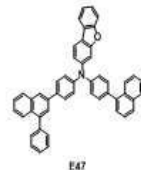
E44



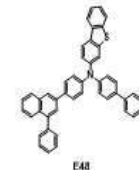
E45



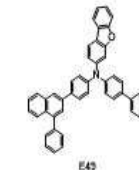
E46



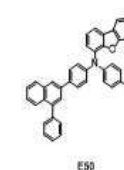
E47



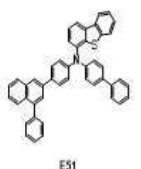
E48



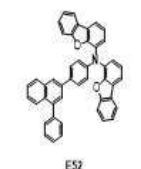
E49



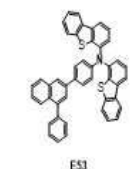
E50



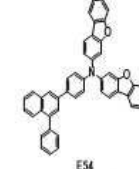
E51



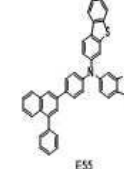
E52



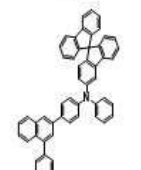
E53



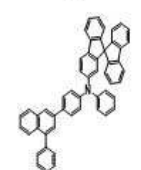
E54



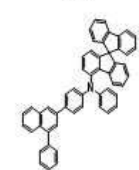
E55



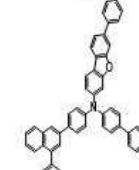
E56



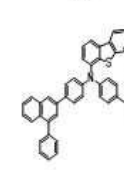
E57



E58



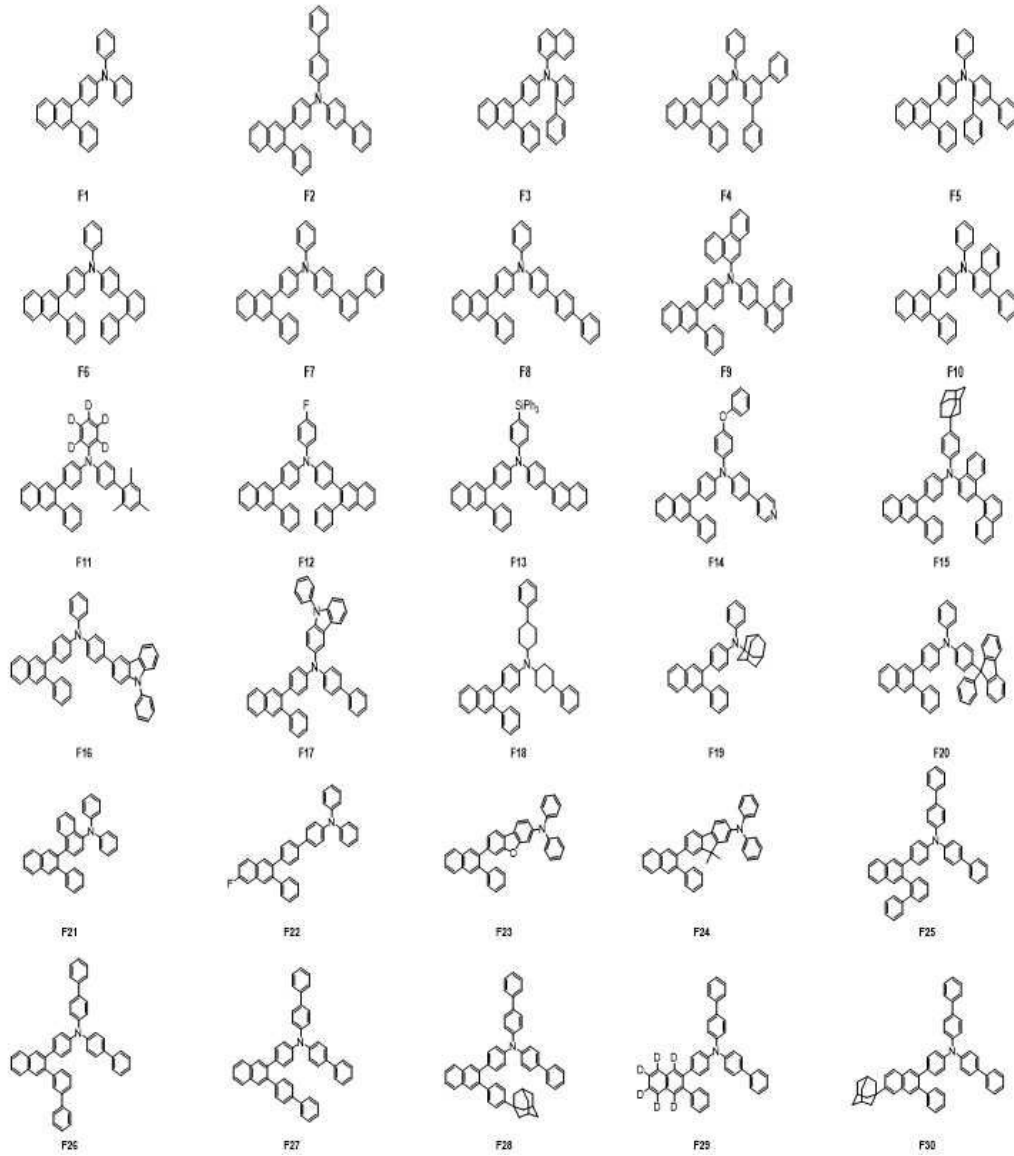
E59



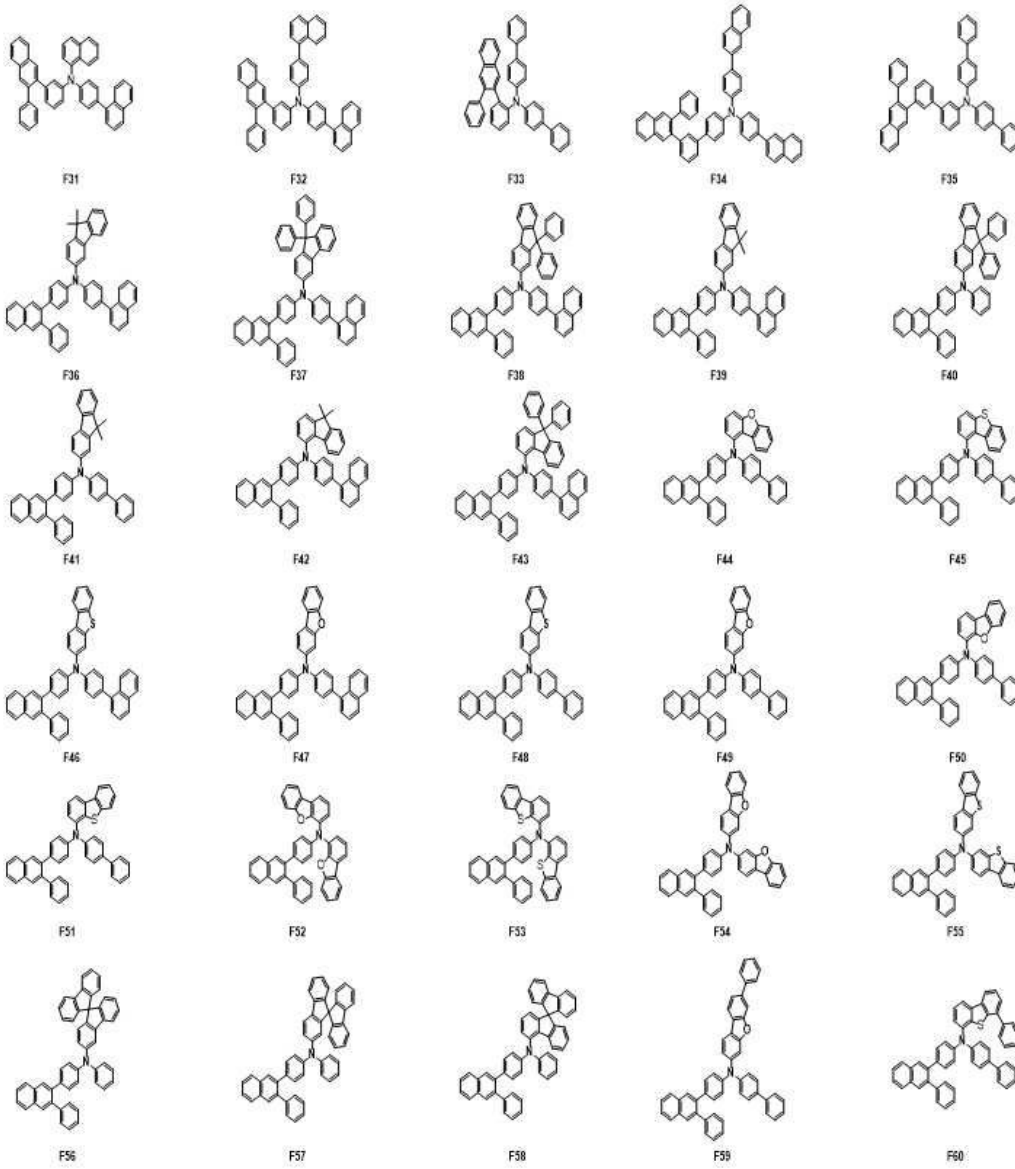
E60

[0104]

[0105] [화합물군 6]

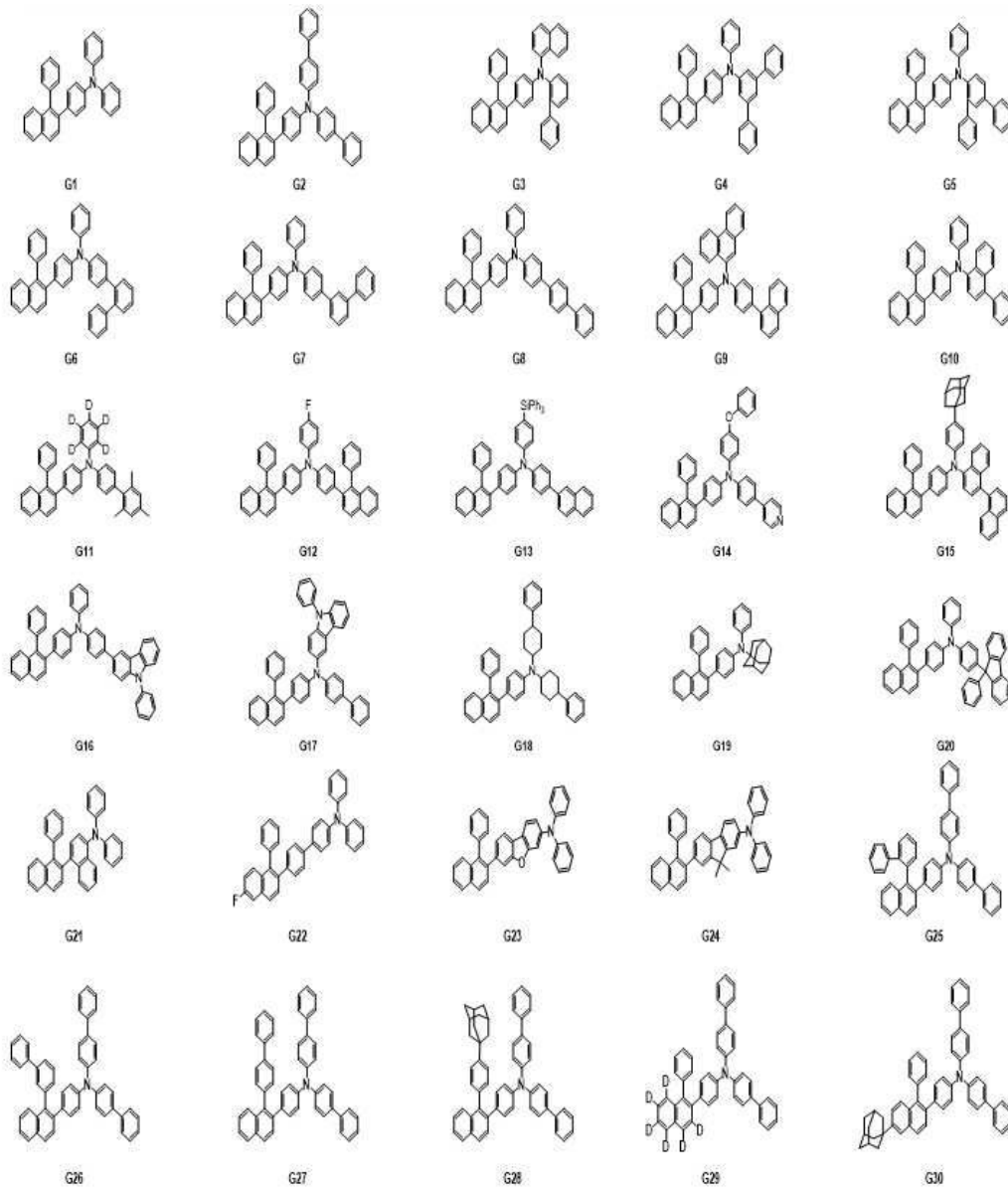


[0106]

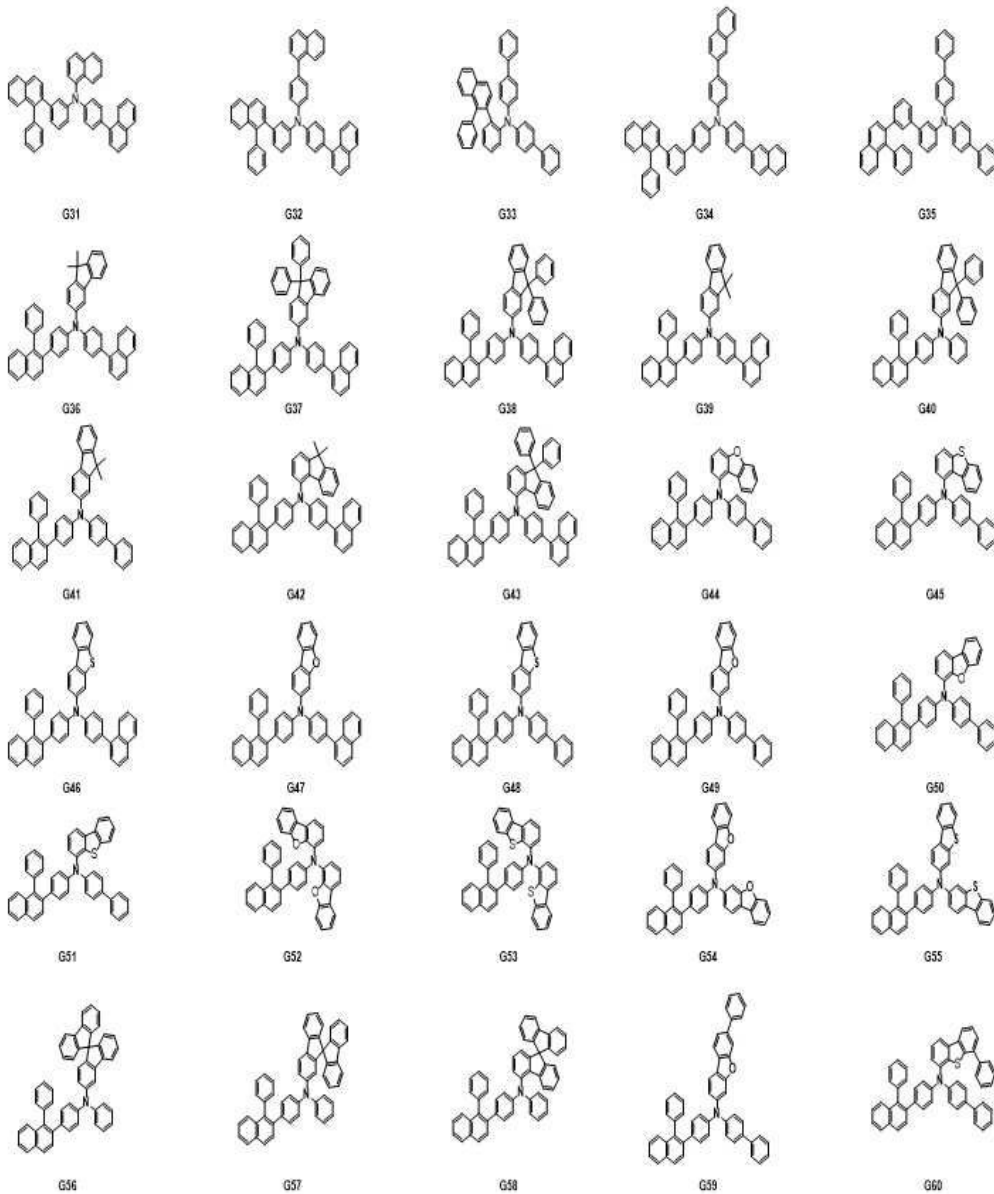


[0107]

[0108] [화합물군 7]



[0109]



[0110]

[0111] 본 발명의 일 실시예에 따른 모노아민 화합물은 축합 고리 및 열 내성, 전하 내성이 높은 페닐나프틸기를 포함하고, 이로 인해 유기 전계 발광 소자에 적용할 경우, 장수명화에 기여할 수 있다. 페닐나프틸기의 부피로 인해 분자의 대칭성이 저하되어 결정화가 억제됨으로써 막질을 향상시킬 수 있기 때문에 고효율화에도 기여할 수 있다.

[0112] 다시 도 1 내지 도 3을 참조하여, 본 발명의 일 실시예에 따른 유기 전계 발광 소자에 대하여 설명한다. 본 발명의 일 실시예에 따른 유기 전계 발광 소자는 모노아민 화합물을 포함한다. 예를 들어, 정공 수송 영역(HTR)은 화학식 1로 표시되는 모노아민 화합물을 포함한다.

[0113] 이하에서는 앞서 설명한 본 발명의 일 실시예에 따른 모노아민 화합물과의 차이점을 위주로 구체적으로 설명하고, 설명되지 않은 부분은 앞서 설명한 본 발명의 일 실시예에 따른 모노아민 화합물에 따른다.

[0114] 제1 전극(EL1)은 도전성을 갖는다. 제1 전극(EL1)은 화소 전극 또는 양극일 수 있다. 제1 전극(EL1)은 투과형 전극, 반투과형 전극 또는 반사형 전극일 수 있다. 제1 전극(EL1)이 투과형 전극인 경우, 제1 전극(EL1)은 투명 금속 산화물, 예를 들어, ITO(indium tin oxide), IZO(indium zinc oxide), ZnO(zinc oxide), ITZO(indium tin zinc oxide) 등을 포함할 수 있다. 제1 전극(EL1)이 반투과형 전극 또는 반사형 전극인 경우, 제1 전극(EL1)은 Ag, Mg, Cu, Al, Pt, Pd, Au, Ni, Nd, Ir, Cr, Li, Ca, LiF/Ca, LiF/Al, Mo, Ti 또는 이들의 화합물이나 혼합물(예를 들어, Ag와 Mg의 혼합물)을 포함할 수 있다. 또는 상기 물질로 형성된 반사막이나 반투과막 및 ITO(indium tin oxide), IZO(indium zinc oxide), ZnO(zinc oxide), ITZO(indium tin zinc oxide) 등으로

형성된 투명 도전막을 포함하는 복수의 층 구조일 수 있다. 예를 들어, 제1 전극(EL1)은 ITO/Ag/ITO의 3층 구조를 가질 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

- [0115] 제1 전극(EL1)의 두께는 약 1000Å 내지 약 10000Å, 예를 들어, 약 1000Å 내지 약 3000Å일 수 있다.
- [0116] 정공 수송 영역(HTR)은 제1 전극(EL1) 상에 제공된다. 정공 수송 영역(HTR)은 정공 주입층(HIL), 정공 수송층(HTL), 정공 버퍼층 및 전자 저지층(EBL) 중 적어도 하나를 포함할 수 있다.
- [0117] 정공 수송 영역(HTR)은 전술한 바와 같이 본 발명의 일 실시예에 따른 모노아민 화합물을 포함한다.
- [0118] 정공 수송 영역(HTR)은 단일 물질로 이루어진 단일층, 복수의 서로 다른 물질로 이루어진 단일층 또는 복수의 서로 다른 물질로 이루어진 복수의 층을 갖는 다층 구조를 가질 수 있다.
- [0119] 예를 들어, 정공 수송 영역(HTR)은 정공 주입층(HIL) 또는 정공 수송층(HTL)의 단일층의 구조를 가질 수도 있고, 정공 주입 물질과 정공 수송 물질로 이루어진 단일층 구조를 가질 수도 있다. 또한, 정공 수송 영역(HTR)은, 복수의 서로 다른 물질로 이루어진 단일층의 구조를 갖거나, 제1 전극(EL1)으로부터 차례로 적층된 정공 주입층(HIL)/정공 수송층(HTL), 정공 주입층(HIL)/정공 수송층(HTL)/정공 버퍼층, 정공 주입층(HIL)/정공 버퍼층, 정공 수송층(HTL)/정공 버퍼층 또는 정공 주입층(HIL)/정공 수송층(HTL)/전자 저지층(EBL)의 구조를 가질 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0120] 전술한 바와 같이, 정공 수송 영역(HTR)은 복수의 층을 갖는 다층 구조를 가질 수 있고, 복수의 층 중 발광층(EML)과 접하는 층이 화학식 1로 표시되는 모노아민 화합물을 포함하는 것일 수 있다. 예를 들어, 정공 수송 영역(HTR)은 제1 전극(EL1) 상에 배치된 정공 주입층(HIL), 정공 주입층(HIL) 상에 배치된 정공 수송층(HTL), 및 정공 수송층(HTL) 상에 배치된 전자 저지층(EBL)을 포함하고, 전자 저지층(EBL)이 화학식 1로 표시되는 모노아민 화합물을 포함하는 것일 수 있다. 다만, 이에 의하여 한정되는 것은 아니며, 예를 들어, 정공 수송 영역(HTR)은 정공 주입층(HIL) 및 정공 수송(HTL)을 포함하고, 정공 수송층(HTL)이 화학식 1로 표시되는 모노아민 화합물을 포함하는 것일 수 있다.
- [0121] 정공 수송 영역(HTR)은 화학식 1로 표시되는 모노아민 화합물을 1종 또는 2종 이상 포함할 수 있다. 예를 들어, 정공 수송 영역(HTR)은 전술한 화합물군 1에 표시된 화합물들 중 선택되는 적어도 하나를 포함할 수 있다.
- [0122] 정공 수송 영역(HTR)은, 진공 증착법, 스핀 코팅법, 캐스트법, LB법(Langmuir-Blodgett), 잉크젯 프린팅법, 레이저 프린팅법, 레이저 열전사법(Laser Induced Thermal Imaging, LITI) 등과 같은 다양한 방법을 이용하여 형성될 수 있다.
- [0123] 정공 주입층(HIL)은 예를 들어, 구리프탈로시아닌(copper phthalocyanine) 등의 프탈로시아닌(phthalocyanine) 화합물; DNTPD(N,N'-diphenyl-N,N'-bis-[4-(phenyl-m-tolyl-amino)-phenyl]-biphenyl-4,4'-diamine), m-MTDATA(4,4',4"-tris(3-methylphenylphenylamino) triphenylamine), TDATA(4,4',4"-Tris(N,N'-diphenylamino)triphenylamine), 2-TNATA(4,4',4"-tris(N,-(2-naphthyl)-N-phenylamino)-triphenylamine), PEDOT/PSS(Poly(3,4-ethylenedioxythiophene)/Poly(4-styrenesulfonate)), PANI/DBSA(Polyaniline/Dodecylbenzenesulfonic acid), PANI/CSA(Polyaniline/Camphor sulfonic acid), PANI/PSS((Polyaniline)/Poly(4-styrenesulfonate)), NPD(N,N'-di(naphthalene-1-yl)-N,N'-diiphenylbenzidine), 트리페닐아민을 포함하는 폴리테트라케톤(TPAPEK), 4-Isopropyl-4'-methyldiphenyliodonium Tetrakis(pentafluorophenyl)borate], HAT-CN(dipyrazino[2,3-f: 2',3'-h] quinoxaline-2,3,6,7,10,11-hexacarbonitrile) 등을 포함할 수 있다.
- [0124] 정공 수송층(HTL)은 예를 들어, N-페닐카바졸, 폴리비닐카바졸 등의 카바졸계 유도체, 플루오렌(fluorine)계 유도체, TPD(N,N'-bis(3-methylphenyl)-N,N'-diphenyl-[1,1-biphenyl]-4,4'-diamine), TCTA(4,4',4"-tris(N-carbazolyl)triphenylamine) 등과 같은 트리페닐아민계 유도체, NPD(N,N'-di(naphthalene-1-yl)-N,N'-diiphenylbenzidine), TAPC(4,4'-Cyclohexylidene bis[N,N-bis(4-methylphenyl)benzenamine]), HMTPD(4,4'-Bis[N,N'-(3-tolyl)amino]-3,3'-dimethylbiphenyl) 등을 포함할 수도 있다.
- [0125] 전자 저지층(EBL)은 전술한 바와 같이, 화학식 1로 표시되는 모노아민 화합물을 포함할 수 있다. 다만, 이에 의하여 한정되는 것은 아니며, 전자 저지층(EBL)은 당 기술분야에 알려진 일반적인 재료를 포함할 수 있다. 전자 저지층(EBL)은 예를 들어, N-페닐카바졸, 폴리비닐카바졸 등의 카바졸계 유도체, 플루오렌(fluorine)계 유도체, TPD(N,N'-bis(3-methylphenyl)-N,N'-diphenyl-[1,1-biphenyl]-4,4'-diamine), TCTA(4,4',4"-tris(N-carbazolyl)triphenylamine) 등과 같은 트리페닐아민계 유도체, NPD(N,N'-di(naphthalene-1-yl)-N,N'-

diplienyl-benzidine), TAPC(4,4'-Cyclohexylidene bis[N,N-bis(4-methylphenyl)benzenamine]), HMPD(4,4'-Bis[N,N'-(3-tolyl)amino]-3,3'-dimethylbiphenyl) 또는 mCP 등을 포함할 수 있다.

[0126] 정공 수송 영역(HTR)의 두께는 약 100Å 내지 약 10000Å, 예를 들어, 약 100Å 내지 약 5000Å일 수 있다. 정공 주입층(HIL)의 두께는, 예를 들어, 약 30Å 내지 약 1000Å이고, 정공 수송층(HTL)의 두께는 약 30Å 내지 약 1000Å 일 수 있다. 예를 들어, 전자 저지층(EBL)의 두께는 약 10Å 내지 약 1000Å일 수 있다. 정공 수송 영역(HTR), 정공 주입층(HIL), 정공 수송층(HTL) 및 전자 저지층(EBL)의 두께가 전술한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 실질적인 구동 전압 상승 없이 만족스러운 정도의 정공 수송 특성을 얻을 수 있다.

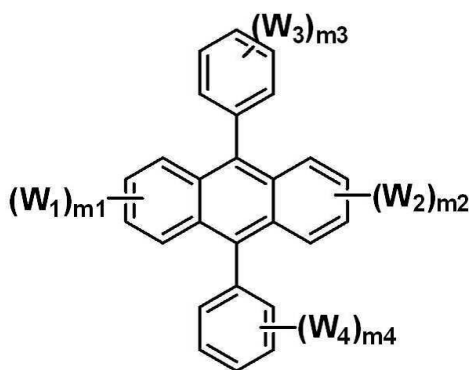
[0127] 정공 수송 영역(HTR)은 앞서 언급한 물질 외에, 도전성 향상을 위하여 전하 생성 물질을 더 포함할 수 있다. 전하 생성 물질은 정공 수송 영역(HTR) 내에 균일하게 또는 불균일하게 분산되어 있을 수 있다. 전하 생성 물질은 예를 들어, p-도펀트(dopant)일 수 있다. p-도펀트는 퀴논(quinone) 유도체, 금속 산화물 및 시아노(cyano)기 함유 화합물 중 하나일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다. 예를 들어, p-도펀트의 비제한적인 예로는, TCNQ(Tetracyanoquinodimethane) 및 F4-TCNQ(2,3,5,6-tetrafluoro-tetracyanoquinodimethane) 등과 같은 퀴논 유도체, 텅스텐 산화물 및 몰리브덴 산화물 등과 같은 금속 산화물 등을 들 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0128] 전술한 바와 같이, 정공 수송 영역(HTR)은 정공 버퍼층 및 전자 저지층(EBL) 중 적어도 하나를 더 포함할 수 있다. 정공 버퍼층은 발광층(EML)에서 방출되는 광의 파장에 따른 공진 거리를 보상하여 광 방출 효율을 증가시킬 수 있다. 정공 버퍼층에 포함되는 물질로는 정공 수송 영역(HTR)에 포함될 수 있는 물질을 사용할 수 있다. 전자 저지층(EBL)은 전자 수송 영역(ETR)으로부터 정공 수송 영역(HTR)으로의 전자 주입을 방지하는 역할을 하는 층이다.

[0129] 발광층(EML)은 정공 수송 영역(HTR) 상에 제공된다. 발광층(EML)은 예를 들어 약 100Å 내지 약 1000Å 또는, 약 100Å 내지 약 600Å의 두께를 갖는 것일 수 있다. 발광층(EML)은 단일 물질로 이루어진 단일층, 복수의 서로 다른 물질로 이루어진 단일층 또는 복수의 서로 다른 물질로 이루어진 복수의 층을 갖는 다층 구조를 가질 수 있다.

[0130] 발광층(EML)의 재료로서는, 공지의 발광 재료를 사용할 수 있고, 특히 한정되는 것은 아니지만, 플루오란텐(fluoranthene) 유도체, 피렌(pyrene) 유도체, 아릴아세틸렌(arylacetylene) 유도체, 안트라센(anthracene) 유도체, 플루오렌(flourene) 유도체, 페릴렌(perylene) 유도체, 크리센(chrysene) 유도체 등으로부터 선택된다. 바람직하게는, 피렌 유도체, 페릴렌 유도체, 안트라센 유도체를 들 수 있다. 예를 들어, 발광층(EML)의 호스트 재료로서, 하기 화학식 10으로 표시되는 안트라센 유도체를 사용할 수도 있다.

[0131] [화학식 10]



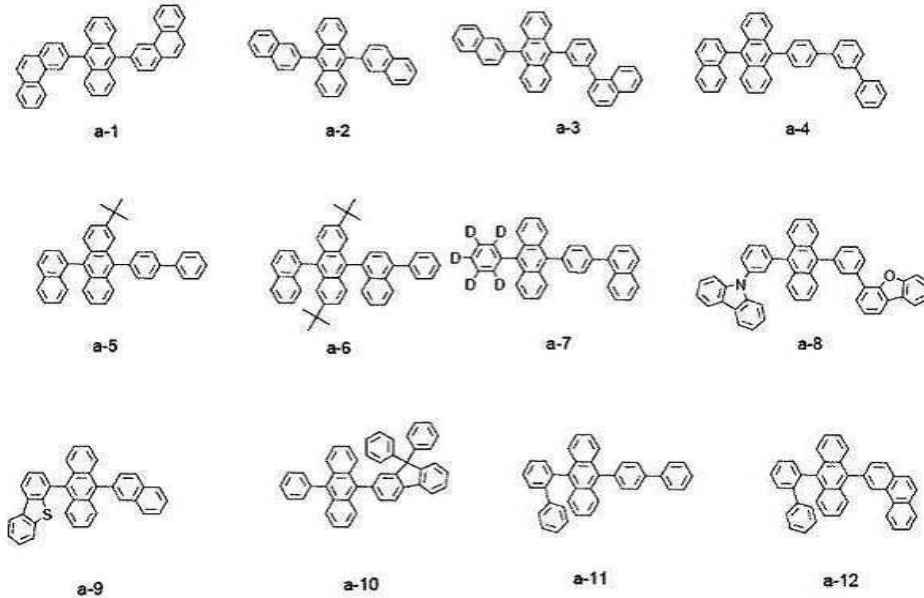
[0132]

[0133] 화학식 10에서, W₁ 내지 W₄는 각각 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 할로겐 원자, 치환 또는 비치환된 실릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 이상 20 이하의 알킬기, 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 6 이상 30 이하의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 고리 형성 탄소수 2 이상 30 이하의 헤테로아릴기이거나 인접하는 기와 서로 결합하여 고리를 형성할 수 있고, m₁ 및 m₂는 각각 독립적으로 0 이상 4 이하의 정수이며, m₃ 및 m₄는 각각 독립적으로 0 이상 5 이하의 정수이다.

[0134] m₁이 1일 경우, W₁은 수소 원자가 아닐 수 있고, m₂가 1일 경우, W₂는 수소 원자가 아닐 수 있으며, m₃가 1일 경우, W₃은 수소 원자가 아닐 수 있고, m₄가 1일 경우, W₄는 수소 원자가 아닐 수 있다.

[0135] m1이 2 이상일 경우, 복수의 W₁은 서로 동일하거나 상이하다. m2가 2 이상일 경우, 복수의 W₂는 서로 동일하거나 상이하다. m3이 2 이상일 경우, 복수의 W₃은 서로 동일하거나 상이하다. m4가 2 이상일 경우, 복수의 W₄는 서로 동일하거나 상이하다.

[0136] 화학식 10으로 표시되는 화합물은 일 예로서, 하기 구조식으로 나타난 화합물을 들 수 있다. 단, 상기 화학식 10으로 표시되는 화합물이 이하에 한정되는 것은 아니다.



[0137]

[0138] 발광층(EML)은 예를 들어, 스피로-DPVBi(spiro-DPVBi), 스피로-6P(spiro-6P, 2,2',7,7'-tetrakis(biphenyl-4-yl)-9,9'-spirobifluorene(spiro-sexiphenyl)), DSB(distyryl-benzene), DSA(distyryl-arylene), PFO(Polyfluorene)계 고분자 및 PPV(poly(p-phenylene vinylene)계 고분자로 이루어진 군에서 선택된 어느 하나를 포함하는 형광 물질을 포함하는 것일 수도 있다.

[0139] 발광층(EML)은 도펀트를 더 포함할 수 있고, 도펀트는 공지의 재료를 사용할 수 있다. 예를 들어, 스티릴유도체 (예를 들면, 1,4-bis[2-(3-N-ethylcarbazoyl)vinyl]benzene(BCzVB), 4-(di-p-tolylamino)-4'-[(di-p-tolylamino)styryl]stilbene(DPAVB), N-(4-((E)-2-(6-((E)-4-(diphenylamino)styryl)naphthalen-2-yl)vinyl)phenyl)-N-phenylbenzenamine(N-BDAVBi)), 페틸렌 및 그 유도체 (예를 들면, 2,5,8,11-tetra-t-butylperylene(TBP)), 피렌 및 그 유도체 (예를 들면, 1,1-dipyrene, 1,4-dipyrenylbenzene, 1,4-Bis(N,N-Diphenylamino)pyrene, 1,6-Bis(N,N-Diphenylamino)pyrene), 2,5,8,11-Tetra-t-butylperylene(TBP), TPBi(1,3,5-tris(N-phenylbenzimidazole-2-yl)benzene) 등을 도펀트로 사용할 수 있다.

[0140] 발광층(EML)은 예를 들어, Alq₃(tris(8-hydroxyquinolino)aluminum), CBP(4,4'-bis(N-carbazoyl)-1,1'-biphenyl), PVK(poly(N-vinylcarbazole), ADN(9,10-di(naphthalene-2-yl)anthracene), TCTA(4,4',4'-Tris(carbazol-9-yl)-triphenylamine), TPBi(1,3,5-tris(N-phenylbenzimidazole-2-yl)benzene), TBADN(3-tert-butyl-9,10-di(naphth-2-yl)anthracene), DSA(distyrylarylene), CDBP(4,4'-bis(9-carbazoyl)-2,2'-dimethyl-biphenyl), MADN(2-Methyl-9,10-bis(naphthalen-2-yl)anthracene), DPEPO(bis[2-(diphenylphosphino)phenyl]ether oxide), CP1(Hexaphenyl cyclotriphosphazene), UGH2 (1,4-Bis(triphenylsilyl)benzene), DPSiO₃ (Hexaphenylcyclotrisiloxane), DPSiO₄ (Octaphenylcyclotetra siloxane) 또는 PPF(2,8-Bis(diphenylphosphoryl)dibenzofuran) 등을 포함하는 것일 수도 있다.

[0141] 전자 수송 영역(ETR)은 발광층(EML) 상에 제공된다. 전자 수송 영역(ETR)은, 정공 저지층(HBL), 전자 수송층(ETL) 및 전자 주입층(EIL) 중 적어도 하나를 포함할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0142] 전자 수송 영역(ETR)은 단일 물질로 이루어진 단일층, 복수의 서로 다른 물질로 이루어진 단일층 또는 복수의 서로 다른 물질로 이루어진 복수의 층을 갖는 다층 구조를 가질 수 있다.

[0143] 예를 들어, 전자 수송 영역(ETR)은 전자 주입층(EIL) 또는 전자 수송층(ETL)의 단일층의 구조를 가질 수도

있고, 전자 주입 물질과 전자 수송 물질로 이루어진 단일층 구조를 가질 수도 있다. 또한, 전자 수송 영역(ETR)은, 복수의 서로 다른 물질로 이루어진 단일층의 구조를 갖거나, 발광층(EML)으로부터 차례로 적층된 전자 수송층(ETL)/전자 주입층(EIL), 정공 저지층(HBL)/전자 수송층(ETL)/전자 주입층(EIL) 구조를 가질 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다. 전자 수송 영역(ETR)의 두께는 예를 들어, 약 1000Å 내지 약 1500Å인 것일 수 있다.

[0144] 전자 수송 영역(ETR)은, 진공 증착법, 스핀 코팅법, 캐스트법, LB법(Langmuir-Blodgett), 잉크젯 프린팅법, 레이저 프린팅법, 레이저 열전사법(Laser Induced Thermal Imaging, LITI) 등과 같은 다양한 방법을 이용하여 형성될 수 있다.

[0145] 전자 수송 영역(ETR)이 전자 수송층(ETL)을 포함할 경우, 전자 수송 영역(ETR)은 Alq₃(Tris(8-hydroxyquinolino)aluminum), 1,3,5-tri[(3-pyridyl)-phen-3-yl]benzene, 2,4,6-tris(3'-(pyridin-3-yl)biphenyl-3-yl)-1,3,5-triazine, DPEPO(bis[2-(diphenylphosphino)phenyl]ether oxide), 2-(4-(N-phenylbenzimidazolyl-1-yl)phenyl)-9,10-dinaphthylanthracene, TPBi(1,3,5-Tri(1-phenyl-1H-benzo[d]imidazol-2-yl)phenyl), BCP(2,9-Dimethyl-4,7-diphenyl-1,10-phenanthroline), Bphen(4,7-Diphenyl-1,10-phenanthroline), TAZ(3-(4-Biphenyl)-4-phenyl-5-tert-butylphenyl-1,2,4-triazole), NTAZ(4-(Naphthalen-1-yl)-3,5-diphenyl-4H-1,2,4-triazole), tBu-PBD(2-(4-Biphenyl)-5-(4-tert-butylphenyl)-1,3,4-oxadiazole), BA1q(Bis(2-methyl-8-quinolinolato-N1,O8)-(1,1'-Biphenyl-4-olato)aluminum), Beq₂(berylliumbis(benzoquinolin-10-olate), ADN(9,10-di(naphthalene-2-yl)anthracene) 및 이들의 혼합물을 포함할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다. 전자 수송층(ETL)들의 두께는 약 100Å 내지 약 1000Å, 예를 들어 약 150Å 내지 약 500Å일 수 있다. 전자 수송층(ETL)들의 두께가 전술한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 실질적인 구동 전압 상승없이 만족스러운 정도의 전자 수송 특성을 얻을 수 있다.

[0146] 전자 수송 영역(ETR)이 전자 주입층(EIL)을 포함할 경우, 전자 수송 영역(ETR)은 LiF, LiQ(Lithium quinolate), Li₂O, BaO, NaCl, CsF, Yb와 같은 란타넘족 금속, 또는 RbCl, RbI와 같은 할로겐화 금속 등이 사용될 수 있으나 이에 한정되는 것은 아니다. 전자 주입층(EIL)은 또한 전자 수송 물질과 절연성의 유기 금속염(organo metal salt)이 혼합된 물질로 이루어질 수 있다. 유기 금속염은 에너지 밴드 갭(energy band gap)이 대략 4eV 이상의 물질이 될 수 있다. 구체적으로 예를 들어, 유기 금속염은 금속 아세테이트(metal acetate), 금속 벤조에이트(metal benzoate), 금속 아세토아세테이트(metal acetoacetate), 금속 아세틸아세토네이트(metal acetylacetonate) 또는 금속 스테아레이트(stearate)를 포함할 수 있다. 전자 주입층(EIL)들의 두께는 약 1Å 내지 약 100Å, 약 3Å 내지 약 90Å일 수 있다. 전자 주입층(EIL)들의 두께가 전술한 바와 같은 범위를 만족할 경우, 실질적인 구동 전압 상승 없이 만족스러운 정도의 전자 주입 특성을 얻을 수 있다.

[0147] 전자 수송 영역(ETR)은 앞서 언급한 바와 같이, 정공 저지층(HBL)을 포함할 수 있다. 정공 저지층(HBL)은 예를 들어, BCP(2,9-dimethyl-4,7-diphenyl-1,10-phenanthroline), Bphen(4,7-diphenyl-1,10-phenanthroline), 또는 DPEPO(bis[2-(diphenylphosphino)phenyl]ether oxide) 등을 포함할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0148] 제2 전극(EL2)은 전자 수송 영역(ETR) 상에 제공된다. 제2 전극(EL2)은 공통 전극 또는 음극일 수 있다. 제2 전극(EL2)은 투과형 전극, 반투과형 전극 또는 반사형 전극일 수 있다. 제2 전극(EL2)이 투과형 전극인 경우, 제2 전극(EL2)은 투명 금속 산화물, 예를 들어, ITO(indium tin oxide), IZO(indium zinc oxide), ZnO(zinc oxide), ITZO(indium tin zinc oxide) 등으로 이루어질 수 있다.

[0149] 제2 전극(EL2)이 반투과형 전극 또는 반사형 전극인 경우, 제2 전극(EL2)은 Ag, Mg, Cu, Al, Pt, Pd, Au, Ni, Nd, Ir, Cr, Li, Ca, LiF/Ca, LiF/Al, Mo, Ti 또는 이들을 포함하는 화합물이나 혼합물(예를 들어, Ag와 Mg의 혼합물)을 포함할 수 있다. 또는 상기 물질로 형성된 반사막이나 반투과막 및 ITO(indium tin oxide), IZO(indium zinc oxide), ZnO(zinc oxide), ITZO(indium tin zinc oxide) 등으로 형성된 투명 도전막을 포함하는 복수의 층 구조일 수 있다.

[0150] 도시하지는 않았으나, 제2 전극(EL2)은 보조 전극과 연결될 수 있다. 제2 전극(EL2)이 보조 전극과 연결되면, 제2 전극(EL2)의 저항을 감소시킬 수 있다.

[0151] 유기 전계 발광 소자(10)에서, 제1 전극(EL1)과 제2 전극(EL2)에 각각 전압이 인가됨에 따라 제1 전극(EL1)으로부터 주입된 정공(hole)은 정공 수송 영역(HTR)을 거쳐 발광층(EML)으로 이동되고, 제2 전극(EL2)로부터 주입된 전자가 전자 수송 영역(ETR)을 거쳐 발광층(EML)으로 이동된다. 전자와 정공은 발광층(EML)에서 재결합하여 여

기자(exciton)를 생성하며, 여기자가 여기 상태에서 바닥 상태로 떨어지면서 발광하게 된다.

[0152] 유기 전계 발광 소자(10)가 전면 발광형일 경우, 제1 전극(EL1)은 반사형 전극이고, 제2 전극(EL2)은 투과형 전극 또는 반투과형 전극일 수 있다. 유기 전계 발광 소자(10)가 배면 발광형일 경우, 제1 전극(EL1)은 투과형 전극 또는 반투과형 전극이고, 제2 전극(EL2)은 반사형 전극일 수 있다.

[0153] 본 발명의 일 실시예에 따른 유기 전계 발광 소자(10)는 화학식 1로 표시되는 모노아민 화합물을 포함하는 것을 특징으로 하며, 이로 인해 고효율화 및 장수명화를 구현할 수 있다. 또한, 저구동 전압화 효과도 있다.

[0154] 이하, 구체적인 실시예 및 비교예를 통해 본 발명을 보다 구체적으로 설명한다. 하기 실시예는 본 발명의 이해를 돕기 위한 예시에 불과하며, 본 발명의 범위가 이에 한정되는 것은 아니다.

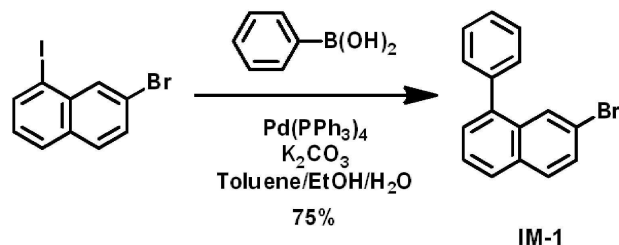
[0155] (합성예)

[0156] 본 발명의 일 실시예에 따른 모노아민 화합물은 예를 들어, 하기와 같이 합성할 수 있다. 다만, 본 발명의 일 실시예에 따른 모노아민 화합물의 합성 방법이 이에 한정되는 것은 아니다.

[0157] 1. 화합물 A4의 합성

[0158] 본 발명의 일 실시예에 따른 모노아민 화합물인 화합물 A4는 예를 들어, 하기 반응에 의해 합성될 수 있다.

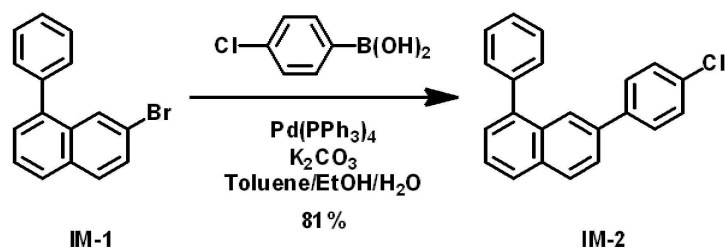
[0159] (중간체 IM-1의 합성)



[0160]

[0161] Ar 분위기하, 1 L의 3구 flask에, 7-bromo-1-iodonaphthalene 25.00 g (75.1 mmol), phenylboronic acid 10.07 g (1.1 equiv, 82.6 mmol), K₂CO₃ 31.13 g (3.0 equiv, 225.2 mmol), Pd(PPh₃)₄ 4.34 g (0.05 eq, 3.8 mmol), 및 Toluene/EtOH/H₂O (4/2/1)의 혼합 용액 525 mL를 차례로 더해, 80℃에서 가열 교반하였다. 실온까지 공랭 후, 반응 용액을 Toluene으로 추출하였다. 수층을 제거해, 유기층을 포화 식염수로 세정한 후, MgSO₄로 건조하였다. MgSO₄의 여별과 유기층의 농축을 실시하고, 획득한 조생성물을 silica gel column chromatography(전개층에는 Hexane과 Toluene의 혼합 용매를 사용)로 정제해, 중간체 IM-1 (15.95 g, 수율 75%)을 얻었다. FAB-MS를 측정해, 질량 수 m/z = 283이 분자 ion peak로서 관측된 것에 의해 중간체 IM-1을 확인했다.

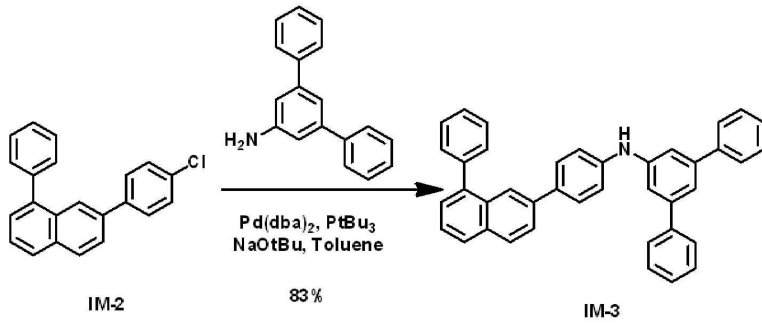
[0162] (중간체 IM-2의 합성)



[0163]

[0164] Ar 분위기하, 1 L의 3구 flask에, IM-1 13.00 g (45.9 mmol), 4-chlorophenylboronic acid 7.90 g (1.1 equiv, 50.5 mmol), K₂CO₃ 19.04 g (3.0 equiv, 60.7 mmol), Pd(PPh₃)₄ 2.65 g (0.05 eq, 2.3 mmol), 및 Toluene/EtOH/H₂O (4/2/1)의 혼합 용액 321 mL를 차례로 더해, 80℃에서 가열 교반하였다. 실온까지 공랭 후, 반응 용액을 Toluene으로 추출하였다. 수층을 제거해, 유기층을 포화 식염수로 세정한 후, MgSO₄로 건조하였다. MgSO₄의 여별과 유기층의 농축을 실시하고, 획득한 조생성물을 silica gel column chromatography(전개층에는 Hexane과 Toluene의 혼합 용매를 사용)로 정제해, 중간체 IM-2 (11.71 g, 수율 81%)를 얻었다. FAB-MS를 측정해, 질량 수 m/z = 314가 분자 ion peak로서 관측된 것에 의해 중간체 IM-2를 확인했다.

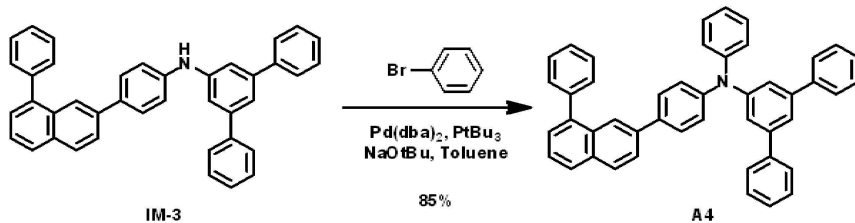
[0165] (중간체 IM-3의 합성)



[0166]

[0167] Ar 분위기하, 300 mL의 3구 flask에, IM-2 10.00 g (31.8 mmol), Pd(dba)₂ 0.55 g (0.03 equiv, 1.0 mmol), NaOtBu 3.05 g (1.0 equiv, 31.8 mmol), Toluene 159 mL, 3,5-diphenylaniline 8.57 g (1.1 equiv, 34.9 mmol) 및 tBu₃P 0.64 g (0.1 equiv, 3.2 mmol)을 차례로 더하고, 가열 환류 교반하였다. 실온까지 공랭 후, 반응 용매에 물을 더해 유기층을 분취하였다. 수층에 Toluene을 더해 유기층을 추가로 추출하고, 유기층을 합쳐서 식염수로 세정한 후, MgSO₄로 건조하였다. MgSO₄의 여별과 유기층의 농축을 실시하고, 획득한 조생성물을 silica gel column chromatography(전개층에는 Hexane과 Toluene의 혼합 용매를 사용)로 정제해, 화합물 IM-3 (13.81 g, 수율 83%)을 얻었다. FAB-MS를 측정해, 질량 수 m/z = 523이 분자 ion peak로서 관측된 것에 의해 화합물 IM-3을 확인했다.

[0168] (화합물 A4의 합성)



[0169]

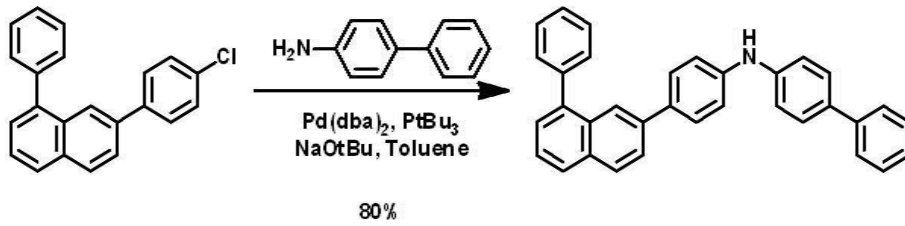
[0170] Ar 분위기하, 300 mL의 3구 flask에, IM-3 8.00 g (15.3 mmol), Pd(dba)₂ 0.26 g (0.03 equiv, 0.5 mmol), NaOtBu 2.94 g (2.0 equiv, 30.6 mmol), Toluene 76 mL, bromobenzene 2.64 g (1.1 equiv, 16.8 mmol) 및 tBu₃P 0.31 g (0.1 equiv, 1.5 mmol)을 차례로 더하고, 가열 환류 교반하였다. 실온까지 공랭 후, 반응 용매에 물을 더해 유기층을 분취하였다. 수층에 Toluene을 더해 유기층을 추가로 추출하고, 유기층을 합쳐서 식염수로 세정한 후, MgSO₄로 건조하였다. MgSO₄의 여별과 유기층의 농축을 실시하고, 획득한 조생성물을 silica gel column chromatography(전개층에는 Hexane과 Toluene의 혼합 용매를 사용)로 정제해, 화합물 A4 (7.79 g, 수율 85%)를 얻었다.

[0171] FAB-MS를 측정해, 질량 수 m/z = 599가 분자 ion peak로서 관측된 것에 의해 화합물 A4를 확인했다.

[0173] 2. 화합물 A17의 합성

[0174] 본 발명의 일 실시예에 따른 모노아민 화합물인 화합물 A17은 예를 들어, 하기 반응에 의해 합성될 수 있다.

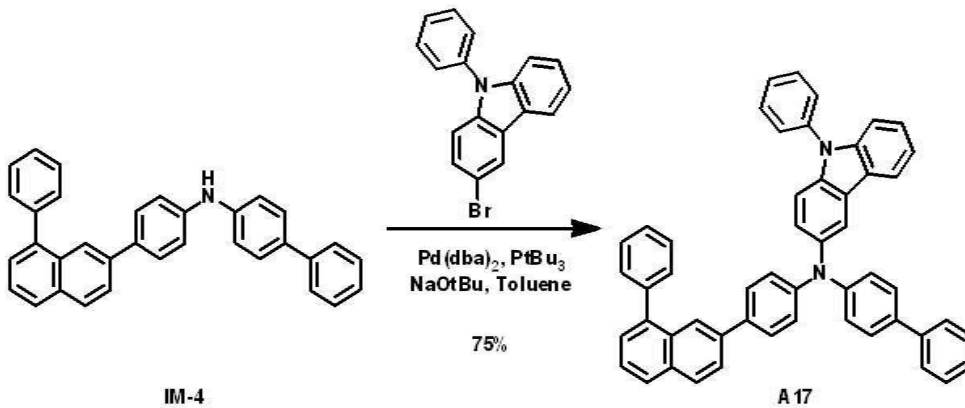
[0175] (중간체 IM-4의 합성)



[0176] **IM-2** **IM-4**

[0177] Ar 분위기하, 300 mL의 3구 flask에, IM-2 10.00 g (31.8 mmol), Pd(dba)₂ 0.55 g (0.03 equiv, 1.0 mmol), NaOtBu 3.05 g (1.0 equiv, 31.8 mmol), Toluene 159 mL, p-biphenylamine 5.91 g (1.1 equiv, 34.9 mmol) 및 tBu₃P 0.64 g (0.1 equiv, 3.2 mmol)을 차례로 더하고, 가열 환류 교반하였다. 실온까지 공랭 후, 반응 용매에 물을 더해 유기층을 분취하였다. 수층에 Toluene을 더해 유기층을 추가로 추출하고, 유기층을 합쳐서 식염수로 세정한 후, MgSO₄로 건조하였다. MgSO₄의 여별과 유기층의 농축을 실시하고, 획득한 조생성물을 silica gel column chromatography(전개층에는 Hexane과 Toluene의 혼합 용매를 사용)로 정제해, 화합물 IM-4 (11.37 g, 수율 80%)를 얻었다. FAB-MS를 측정해, 질량 수 m/z =447이 분자 ion peak로서 관측된 것에 의해 화합물 IM-4를 확인했다.

[0178] (화합물 A17의 합성)



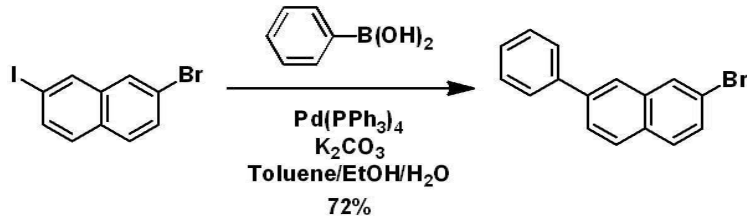
[0179] **IM-4** **A 17**

[0180] Ar 분위기하, 300 mL의 3구 flask에, IM-4 8.00 g (17.9 mmol), Pd(dba)₂ 0.31 g (0.03 equiv, 0.5 mmol), NaOtBu 3.44 g (2.0 equiv, 35.7 mmol), Toluene 89 mL, 3-bromo-9-phenyl-9 H-carbazole 6.33 g (1.1 equiv, 19.7 mmol) 및 tBu₃P 0.36 g (0.1 equiv, 1.8 mmol)을 차례로 더하고, 가열 환류 교반하였다. 실온까지 공랭 후, 반응 용매에 물을 더해 유기층을 분취하였다. 수층에 Toluene을 더해 유기층을 추가로 추출하고, 유기층을 합쳐서 식염수로 세정한 후, MgSO₄로 건조하였다. MgSO₄의 여별과 유기층의 농축을 실시하고, 획득한 조생성물을 silica gel column chromatography(전개층에는 Hexane과 Toluene의 혼합 용매를 사용)로 정제해, 화합물 A17 (9.23 g, 수율 75%)을 얻었다. FAB-MS를 측정해, 질량 수 m/z = 688이 분자 ion peak로서 관측된 것에 의해 화합물 A17을 확인했다.

[0182] 3. 화합물 B13의 합성

[0183] 본 발명의 일 실시예에 따른 모노아민 화합물인 화합물 B13은 예를 들어, 하기 반응에 의해 합성될 수 있다.

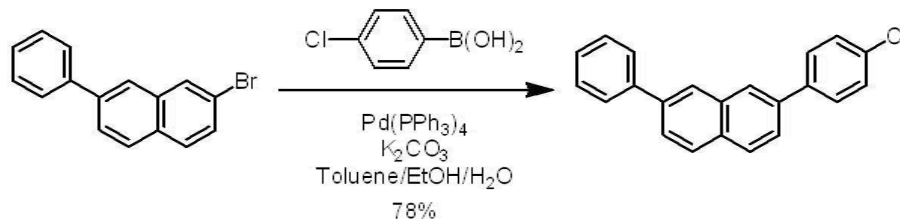
[0184] (중간체 IM-5의 합성)



[0185]

[0186] Ar 분위기하, 1 L의 3구 flask에, 7-bromo-2-iodonaphthalene 25.00 g (75.1 mmol), phenylboronic acid 10.07 g (1.1 equiv, 82.6 mmol), K₂CO₃ 31.13 g (3.0 equiv, 225.2 mmol), Pd(PPh₃)₄ 4.34 g (0.05 eq, 3.8 mmol), 및 Toluene/EtOH/H₂O (4/2/1)의 혼합 용액 525 mL를 차례로 더해, 80°C에서 가열 교반하였다. 실온까지 공랭 후, 반응 용액을 Toluene으로 추출하였다. 수층을 제거해, 유기층을 포화 식염수로 세정한 후, MgSO₄로 건조하였다. MgSO₄의 여별과 유기층의 농축을 실시하고, 획득한 조생성물을 silica gel column chromatography(전개층에는 Hexane과 Toluene의 혼합 용매를 사용)로 정제해, 중간체 IM-5 (15.31 g, 수율 72%)를 얻었다. FAB-MS를 측정해, 질량 수 m/z = 283이 분자 ion peak로서 관측된 것에 의해 중간체 IM-5를 확인했다.

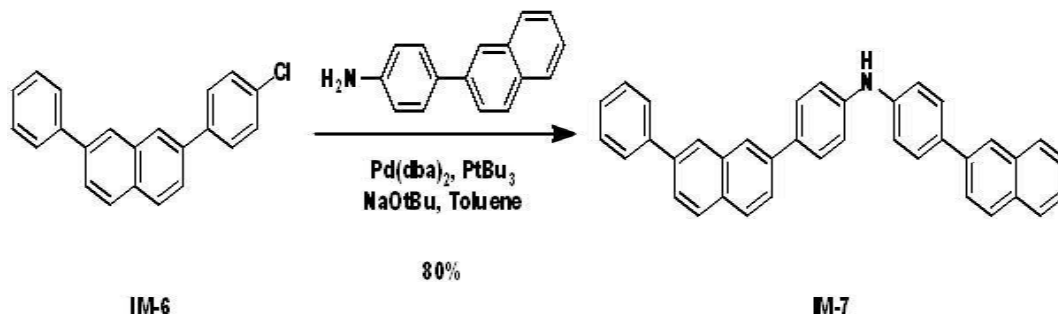
[0187] (중간체 IM-6의 합성)



[0188]

[0189] Ar 분위기하, 1 L의 3구 flask에, IM-5 13.00 g (45.9 mmol), 4-chlorophenylboronic acid 7.90 g (1.1 equiv, 50.5 mmol), K₂CO₃ 19.04 g (3.0 equiv, 60.7 mmol), Pd(PPh₃)₄ 2.65 g (0.05 eq, 2.3 mmol), 및 Toluene/EtOH/H₂O (4/2/1)의 혼합 용액 321 mL를 차례로 더해, 80°C에서 가열 교반하였다. 실온까지 공랭 후, 반응 용액을 Toluene으로 추출하였다. 수층을 제거해, 유기층을 포화 식염수로 세정한 후, MgSO₄로 건조하였다. MgSO₄의 여별과 유기층의 농축을 실시하고, 획득한 조생성물을 silica gel column chromatography(전개층에는 Hexane과 Toluene의 혼합 용매를 사용)로 정제해, 중간체 IM-6 (11.27 g, 수율 78%)을 얻었다. FAB-MS를 측정해, 질량 수 m/z = 314가 분자 ion peak로서 관측된 것에 의해 중간체 IM-6을 확인했다.

[0190] (중간체 IM-7의 합성)

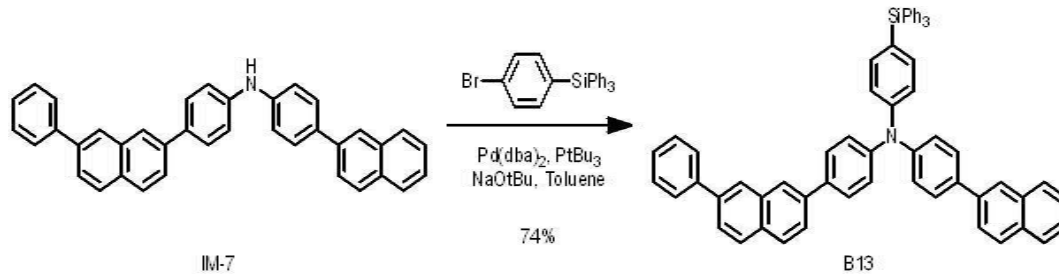


[0191]

[0192] Ar 분위기하, 300 mL의 3구 flask에, IM-6 10.00 g (31.8 mmol), Pd(dba)₂ 0.55 g (0.03 equiv, 1.0 mmol), NaOtBu 3.05 g (1.0 equiv, 31.8 mmol), Toluene 159 mL, 4-(naphthalen-2-yl)aniline 7.66 g (1.1 equiv, 34.9 mmol) 및 tBu₃P 0.64 g (0.1 equiv, 3.2 mmol)을 차례로 더하고, 가열 환류 교반하였다. 실온까지 공랭 후, 반응 용매에 물을 더해 유기층을 분취하였다. 수층에 Toluene을 더해 유기층을 추가로 추출하고, 유기층을 합쳐서 식염수로 세정한 후, MgSO₄로 건조하였다. MgSO₄의 여별과 유기층의 농축을 실시하고, 획득한 조생성물을

silica gel column chromatography(전개층에는 Hexane과 Toluene의 혼합 용매를 사용)로 정제해, 화합물 IM-7 (12.65 g, 수율 80%)을 얻었다. FAB-MS를 측정해, 질량 수 $m/z = 497$ 이 분자 ion peak로서 관측된 것에 의해 화합물 IM-7을 확인했다.

[0193] (화합물 B13의 합성)



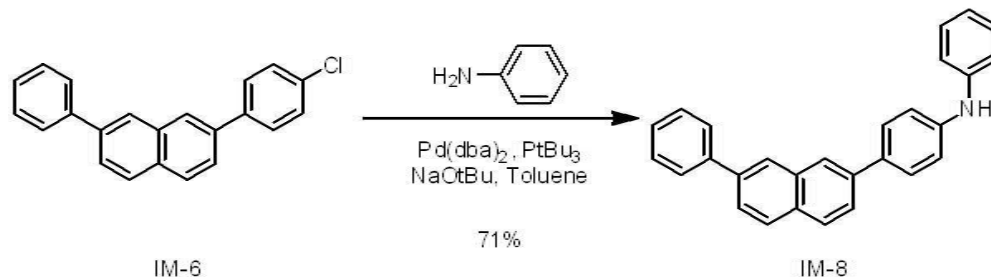
[0194]

[0195] Ar 분위기하, 300 mL의 3구 flask에, IM-7 8.00 g (16.1 mmol), Pd(dba)₂ 0.27 g (0.03 equiv, 0.5 mmol), NaOtBu 3.09 g (2.0 equiv, 32.2 mmol), Toluene 80 mL, 1-bromo-4-triphenylsilylbenzene 7.35 g (1.1 equiv, 17.7 mmol) 및 tBu₃P 0.33 g (0.1 equiv, 1.6 mmol)을 차례로 더하고, 가열 환류 교반하였다. 실온까지 공랭 후, 반응 용매에 물을 더해 유기층을 분취하였다. 수층에 Toluene을 더해 유기층을 추가로 추출하고, 유기층을 합쳐서 식염수로 세정한 후, MgSO₄로 건조하였다. MgSO₄의 여별과 유기층의 농축을 실시하고, 획득한 조생성물을 silica gel column chromatography(전개층에는 Hexane과 Toluene의 혼합 용매를 사용)로 정제해, 화합물 B13 (9.90 g, 수율 74%)을 얻었다. FAB-MS를 측정해, 질량 수 $m/z = 832$ 가 분자 ion peak로서 관측된 것에 의해 화합물 B13을 확인했다.

[0197] 4. 화합물 B20의 합성

[0198] 본 발명의 일 실시예에 따른 모노아민 화합물인 화합물 B20은 예를 들어, 하기 반응에 의해 합성될 수 있다.

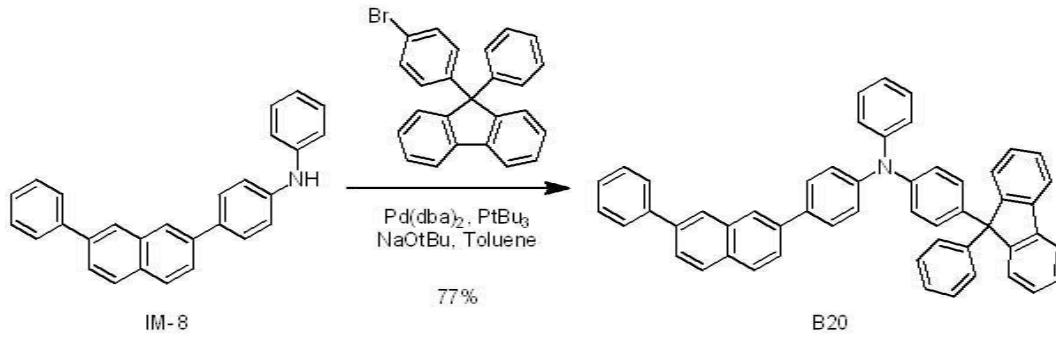
[0199] (중간체 IM-8의 합성)



[0200]

[0201] Ar 분위기하, 300 mL의 3구 flask에, IM-6 10.00 g (31.8 mmol), Pd(dba)₂ 0.55 g (0.03 equiv, 1.0 mmol), NaOtBu 3.05 g (1.0 equiv, 31.8 mmol), Toluene 159 mL, aniline 3.25 g (1.1 equiv, 34.9 mmol) 및 tBu₃P 0.64 g (0.1 equiv, 3.2 mmol)을 차례로 더하고, 가열 환류 교반하였다. 실온까지 공랭 후, 반응 용매에 물을 더해 유기층을 분취하였다. 수층에 Toluene을 더해 유기층을 추가로 추출하고, 유기층을 합쳐서 식염수로 세정한 후, MgSO₄로 건조하였다. MgSO₄의 여별과 유기층의 농축을 실시하고, 획득한 조생성물을 silica gel column chromatography(전개층에는 Hexane과 Toluene의 혼합 용매를 사용)로 정제해, 화합물 IM-8 (8.38 g, 수율 71%)을 얻었다. FAB-MS를 측정해, 질량 수 $m/z = 371$ 이 분자 ion peak로서 관측된 것에 의해 화합물 IM-8을 확인했다.

[0202] (화합물 B20의 합성)



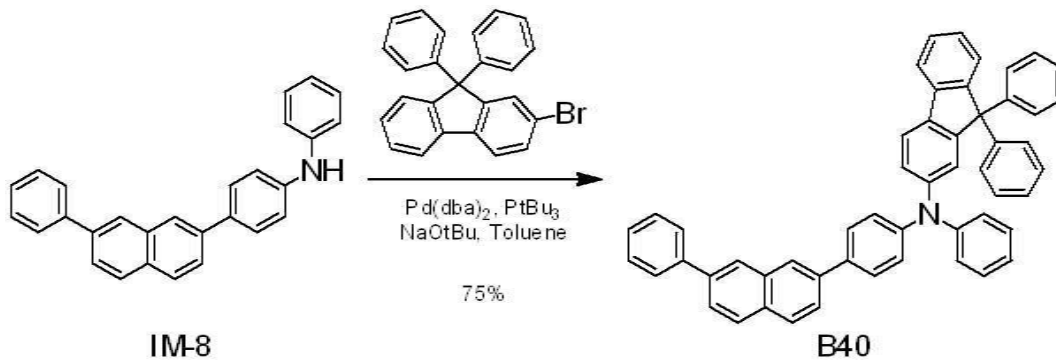
[0203]

[0204] Ar 분위기하, 300 mL의 3구 flask에, IM-8 8.00 g (21.5 mmol), Pd(dba)₂ 0.37 g (0.03 equiv, 0.6 mmol), NaOtBu 4.14 g (2.0 equiv, 43.1 mmol), Toluene 108 mL, 9-(4-bromophenyl)-9-phenyl-9 H-fluorene 9.41 g (1.1 equiv, 23.7 mmol) 및 tBu₃P 0.44 g (0.1 equiv, 2.1 mmol)을 차례로 더하고, 가열 환류 교반하였다. 실온까지 공랭 후, 반응 용매에 물을 더해 유기층을 분취하였다. 수층에 Toluene을 더해 유기층을 추가로 추출하고, 유기층을 합쳐서 식염수로 세정한 후, MgSO₄로 건조하였다. MgSO₄의 여별과 유기층의 농축을 실시하고, 획득한 조생성물을 silica gel column chromatography(전개층에는 Hexane과 Toluene의 혼합 용매를 사용)로 정제해, 화합물 B20 (11.41 g, 수율 77%)을 얻었다. FAB-MS를 측정해, 질량 수 m/z = 687이 분자 ion peak로서 관측된 것에 의해 화합물 B20을 확인했다.

[0206] 5. 화합물 B40의 합성

[0207] 본 발명의 일 실시예에 따른 모노아민 화합물인 화합물 B40은 예를 들어, 하기 반응에 의해 합성될 수 있다.

[0208] (화합물 B40의 합성)



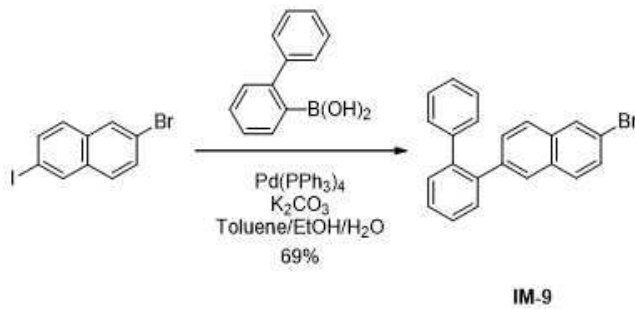
[0209]

[0210] Ar 분위기하, 300 mL의 3구 flask에, IM-8 8.00 g (21.5 mmol), Pd(dba)₂ 0.37 g (0.03 equiv, 0.6 mmol), NaOtBu 4.14 g (2.0 equiv, 43.1 mmol), Toluene 108 mL, 2-bromo-9,9-diphenyl-9 H-fluorene 9.41 g (1.1 equiv, 23.7 mmol) 및 tBu₃P 0.44 g (0.1 equiv, 2.1 mmol)을 차례로 더하고, 가열 환류 교반하였다. 실온까지 공랭 후, 반응 용매에 물을 더해 유기층을 분취하였다. 수층에 Toluene을 더해 유기층을 추가로 추출하고, 유기층을 합쳐서 식염수로 세정한 후, MgSO₄로 건조하였다. MgSO₄의 여별과 유기층의 농축을 실시하고, 획득한 조생성물을 silica gel column chromatography(전개층에는 Hexane과 Toluene의 혼합 용매를 사용)로 정제해, 화합물 B40 (11.42 g, 수율 75%)을 얻었다. FAB-MS를 측정해, 질량 수 m/z = 687이 분자 ion peak로서 관측된 것에 의해 화합물 B40을 확인했다.

[0212] 6. 화합물 C25의 합성

[0213] 본 발명의 일 실시예에 따른 모노아민 화합물인 화합물 C25은 예를 들어, 하기 반응에 의해 합성될 수 있다.

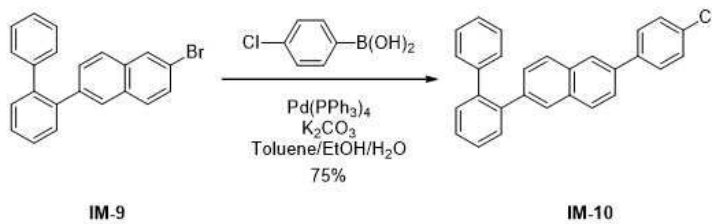
[0214] (중간체 IM-9의 합성)



[0215]

[0216] Ar 분위기하, 1 L의 3구 flask에, 2-bromo-6-iodonaphthalene 25.00 g (75.1 mmol), 2-biphenylboronic acid 16.35 g (1.1 equiv, 82.6 mmol), K₂CO₃ 31.13 g (3.0 equiv, 225.2 mmol), Pd(PPh₃)₄ 4.34 g (0.05 eq, 3.8 mmol), 및 Toluene/EtOH/H₂O (4/2/1)의 혼합 용액 525 mL를 차례로 더해, 80°C에서 가열 교반하였다. 실온까지 공랭 후, 반응 용액을 Toluene으로 추출하였다. 수층을 제거해, 유기층을 포화 식염수로 세정한 후, MgSO₄로 건조하였다. MgSO₄의 여별과 유기층의 농축을 실시하고, 획득한 조생성물을 silica gel column chromatography(전개층에는 Hexane과 Toluene의 혼합 용매를 사용)로 정제해, 중간체 IM-9 (18.61 g, 수율 69%)를 얻었다. FAB-MS를 측정해, 질량 수 m/z = 359가 분자 ion peak로서 관측된 것에 의해 중간체 IM-9를 확인했다.

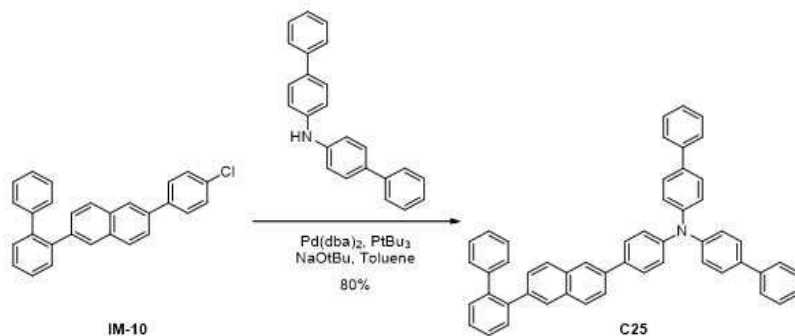
[0217] (중간체 IM-10의 합성)



[0218]

[0219] Ar 분위기하, 1 L의 3구 flask에, IM-9 15.00 g (41.8 mmol), 4-chlorophenylboronic acid 7.18 g (1.1 equiv, 45.9 mmol), K₂CO₃ 17.31 g (3.0 equiv, 125.3 mmol), Pd(PPh₃)₄ 2.41 g (0.05 eq, 3.8 mmol), 및 Toluene/EtOH/H₂O (4/2/1)의 혼합 용액 525 mL를 차례로 더해, 80°C에서 가열 교반하였다. 실온까지 공랭 후, 반응 용액을 Toluene으로 추출하였다. 수층을 제거해, 유기층을 포화 식염수로 세정한 후, MgSO₄로 건조하였다. MgSO₄의 여별과 유기층의 농축을 실시하고, 획득한 조생성물을 silica gel column chromatography(전개층에는 Hexane과 Toluene의 혼합 용매를 사용)로 정제해, 중간체 IM-10 (12.24 g, 수율 75%)을 얻었다. FAB-MS를 측정해, 질량 수 m/z = 390이 분자 ion peak로서 관측된 것에 의해 중간체 IM-10을 확인했다.

[0220] (화합물 C25의 합성)



[0221]

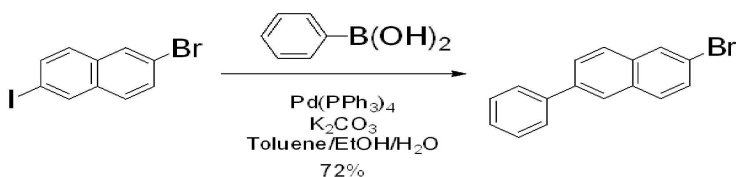
[0222] Ar 분위기하, 300 mL의 3구 flask에, IM-10 10.00 g (25.6 mmol), Pd(dba)₂ 0.44 g (0.03 equiv, 0.6 mmol), NaOtBu 4.92 g (2.0 equiv, 51.2 mmol), Toluene 128 mL, bis(4-biphenyl)amine 9.04 g (1.1 equiv, 28.1

mmol) 및 $t\text{Bu}_3\text{P}$ 0.52 g (0.1 equiv, 2.6 mmol)을 차례로 더하고, 가열 환류 교반하였다. 실온까지 공랭 후, 반응 용매에 물을 더해 유기층을 분취하였다. 수층에 Toluene을 더해 유기층을 추가로 추출하고, 유기층을 합쳐서 식염수로 세정한 후, MgSO_4 로 건조하였다. MgSO_4 의 여별과 유기층의 농축을 실시하고, 획득한 조생성물을 silica gel column chromatography(전개층에는 Hexane과 Toluene의 혼합 용매를 사용)로 정제해, 화합물 C25 (13.83 g, 수율 80%)를 얻었다. FAB-MS를 측정해, 질량 수 $m/z = 675$ 가 분자 ion peak로서 관측된 것에 의해 화합물 C25를 확인했다.

[0224] 7. 화합물 C51의 합성

[0225] 본 발명의 일 실시예에 따른 모노아민 화합물인 화합물 C51은 예를 들어, 하기 반응에 의해 합성될 수 있다.

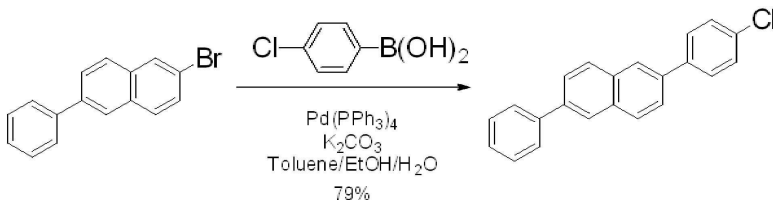
[0226] (중간체 IM-11의 합성)



[0227]

[0228] Ar 분위기하, 1 L의 3구 flask에, 2-bromo-6-iodonaphthalene 25.00 g (75.1 mmol), phenylboronic acid 10.07 g (1.1 equiv, 82.6 mmol), K_2CO_3 31.13 g (3.0 equiv, 225.2 mmol), $\text{Pd}(\text{PPh}_3)_4$ 4.34 g (0.05 eq, 3.8 mmol), 및 Toluene/EtOH/ H_2O (4/2/1)의 혼합 용액 525 mL를 차례로 더해, 80°C에서 가열 교반하였다. 실온까지 공랭 후, 반응 용액을 Toluene으로 추출하였다. 수층을 제거해, 유기층을 포화 식염수로 세정한 후, MgSO_4 로 건조하였다. MgSO_4 의 여별과 유기층의 농축을 실시하고, 획득한 조생성물을 silica gel column chromatography(전개층에는 Hexane과 Toluene의 혼합 용매를 사용)로 정제해, 중간체 IM-11 (15.31 g, 수율 72%)을 얻었다. FAB-MS를 측정해, 질량 수 $m/z = 283$ 이 분자 ion peak로서 관측된 것에 의해 중간체 IM-11을 확인했다.

[0229] (중간체 IM-12의 합성)

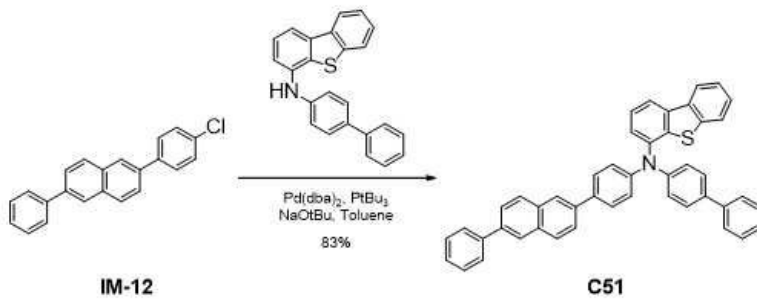


[0230]

[0231] Ar 분위기하, 1 L의 3구 flask에, IM-11 13.00 g (45.9 mmol), 4-chlorophenylboronic acid 7.90 g (1.1 equiv, 50.5 mmol), K_2CO_3 19.04 g (3.0 equiv, 60.7 mmol), $\text{Pd}(\text{PPh}_3)_4$ 2.65 g (0.05 eq, 2.3 mmol), 및 Toluene/EtOH/ H_2O (4/2/1)의 혼합 용액 321 mL를 차례로 더해, 80°C에서 가열 교반하였다. 실온까지 공랭 후, 반응 용액을 Toluene으로 추출하였다. 수층을 제거해, 유기층을 포화 식염수로 세정한 후, MgSO_4 로 건조하였다. MgSO_4 의 여별과 유기층의 농축을 실시하고, 획득한 조생성물을 silica gel column chromatography(전개층에는 Hexane과 Toluene의 혼합 용매를 사용)로 정제해, 중간체 IM-12 (11.42 g, 수율 79%)를 얻었다.

[0232] FAB-MS를 측정해, 질량 수 $m/z = 314$ 가 분자 ion peak로서 관측된 것에 의해 중간체 IM-12를 확인했다.

[0233] (화합물 C51의 합성)



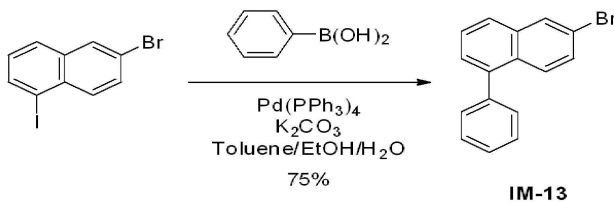
[0234]

[0235] Ar 분위기하, 300 mL의 3구 flask에, IM-12 8.00 g (25.4 mmol), Pd(dba)₂ 0.44 g (0.03 equiv, 0.8 mmol), NaOtBu 4.88 g (2.0 equiv, 50.8 mmol), Toluene 128 mL, N-([1,1'-biphenyl]-4-yl)dibenzothiophen-4-amine 9.82 g (1.1 equiv, 28.0 mmol) 및 tBu₃P 0.51 g (0.1 equiv, 2.5 mmol)을 차례로 더하고, 가열 환류 교반하였다. 실온까지 공랭 후, 반응 용매에 물을 더해 유기층을 분취하였다. 수층에 Toluene을 더해 유기층을 추가로 추출하고, 유기층을 합쳐서 식염수로 세정한 후, MgSO₄로 건조하였다. MgSO₄의 여별과 유기층의 농축을 실시하고, 획득한 조생성물을 silica gel column chromatography(전개층에는 Hexane과 Toluene의 혼합 용매를 사용)로 정제해, 화합물 C51 (13.28 g, 수율 83%)을 얻었다. FAB-MS를 측정해, 질량 수 m/z = 629가 분자 ion peak로서 관측된 것에 의해 화합물 C51을 확인했다.

[0237] 8. 화합물 D12의 합성

[0238] 본 발명의 일 실시예에 따른 모노아민 화합물인 화합물 D12은 예를 들어, 하기 반응에 의해 합성될 수 있다.

[0239] (중간체 IM-13의 합성)

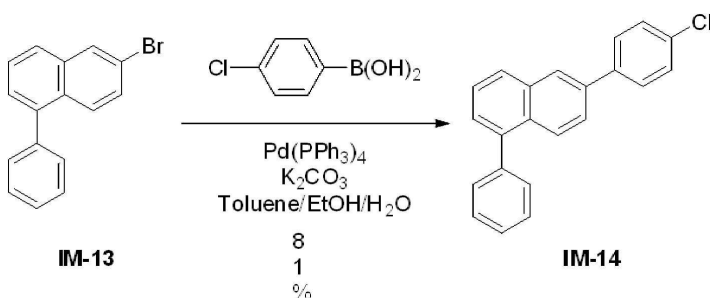


[0240]

[0241] Ar 분위기하, 1 L의 3구 flask에, 2-bromo-5-iodonaphthalene 25.00 g (75.1 mmol), phenylboronic acid 10.07 g (1.1 equiv, 82.6 mmol), K₂CO₃ 31.13 g (3.0 equiv, 225.2 mmol), Pd(PPh₃)₄ 4.34 g (0.05 eq, 3.8 mmol), 및 Toluene/EtOH/H₂O (4/2/1)의 혼합 용액 525 mL를 차례로 더해, 80°C에서 가열 교반하였다. 실온까지 공랭 후, 반응 용액을 Toluene으로 추출하였다. 수층을 제거해, 유기층을 포화 식염수로 세정한 후, MgSO₄로 건조하였다. MgSO₄의 여별과 유기층의 농축을 실시하고, 획득한 조생성물을 silica gel column chromatography(전개층에는 Hexane과 Toluene의 혼합 용매를 사용)로 정제해, 중간체 IM-13 (15.95 g, 수율 75%)을 얻었다.

[0242] FAB-MS를 측정해, 질량 수 m/z = 283이 분자 ion peak로서 관측된 것에 의해 중간체 IM-13을 확인했다.

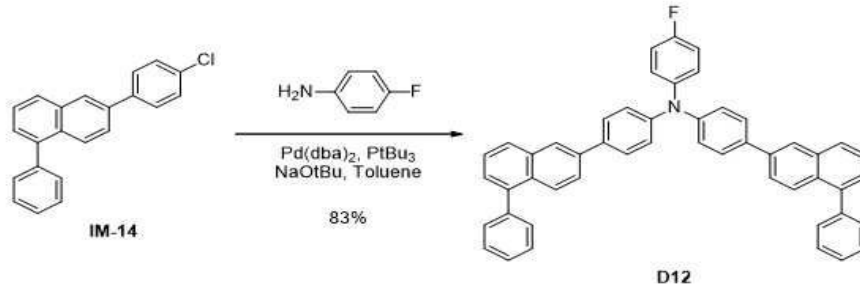
[0243] (중간체 IM-14의 합성)



[0244]

[0245] Ar 분위기하, 1 L의 3구 flask에, IM-13 13.00 g (45.9 mmol), 4-chlorophenylboronic acid 7.90 g (1.1 equiv, 50.5 mmol), K_2CO_3 19.04 g (3.0 equiv, 60.7 mmol), $Pd(PPh_3)_4$ 2.65 g (0.05 eq, 2.3 mmol), 및 Toluene/EtOH/H₂O (4/2/1)의 혼합 용액 321 mL를 차례로 더해, 80°C에서 가열 교반하였다. 실온까지 공랭 후, 반응 용액을 Toluene으로 추출하였다. 수층을 제거해, 유기층을 포화 식염수로 세정한 후, $MgSO_4$ 로 건조하였다. $MgSO_4$ 의 여별과 유기층의 농축을 실시하고, 획득한 조생성물을 silica gel column chromatography(전개층에는 Hexane과 Toluene의 혼합 용매를 사용)로 정제해, 중간체 IM-14 (11.71 g, 수율 81%)를 얻었다. FAB-MS를 측정해, 질량 수 $m/z = 314$ 가 분자 ion peak로서 관측된 것에 의해 중간체 IM-14를 확인했다.

[0246] (화합물 D12의 합성)



[0247]

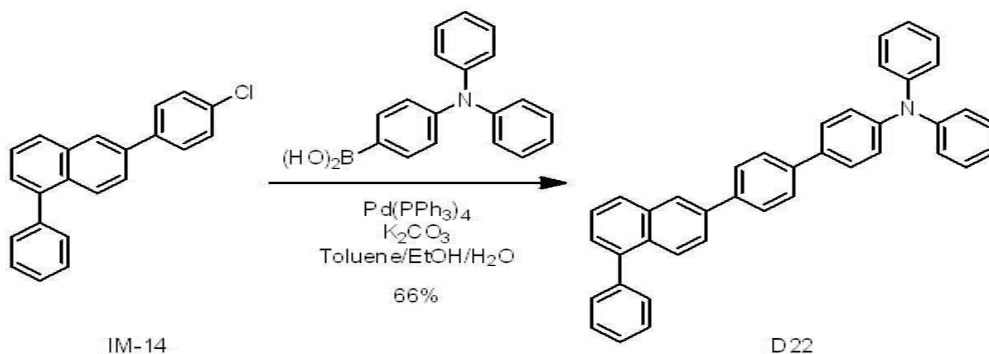
[0248] Ar 분위기하, 300 mL의 3구 flask에, IM-14 9.35 g (2.2 equiv, 29.7 mmol), $Pd(dba)_2$ 0.23 g (0.03 equiv, 0.4 mmol), NaOtBu 2.59 g (2.0 equiv, 27.0 mmol), Toluene 67 mL, 4-fluoroaniline 1.5 g (13.5 mmol) 및 tBu_3P 0.27 g (0.1 equiv, 1.3 mmol)을 차례로 더하고, 가열 환류 교반하였다. 실온까지 공랭 후, 반응 용매에 물을 더해 유기층을 분취하였다. 수층에 Toluene을 더해 유기층을 추가로 추출하고, 유기층을 합쳐서 식염수로 세정한 후, $MgSO_4$ 로 건조하였다. $MgSO_4$ 의 여별과 유기층의 농축을 실시하고, 획득한 조생성물을 silica gel column chromatography(전개층에는 Hexane과 Toluene의 혼합 용매를 사용)로 정제해, 화합물 D12 (7.48 g, 수율 83%)를 얻었다.

[0249] FAB-MS를 측정해, 질량 수 $m/z = 667$ 이 분자 ion peak로서 관측된 것에 의해 화합물 D12를 확인했다.

[0251] 9. 화합물 D22의 합성

[0252] 본 발명의 일 실시예에 따른 모노아민 화합물인 화합물 D22은 예를 들어, 하기 반응에 의해 합성될 수 있다.

[0253] (화합물 D22의 합성)



[0254]

[0255] Ar 분위기하, 1 L의 3구 flask에, IM-14 10.00 g (31.8 mmol), (4-(diphenylamino)phenyl)boronic acid 10.10 g (1.1 equiv, 34.9 mmol), K_2CO_3 13.17 g (3.0 equiv, 95.3 mmol), $Pd(PPh_3)_4$ 1.84 g (0.05 eq, 1.6 mmol), 및 Toluene/EtOH/H₂O (4/2/1)의 혼합 용액 222 mL를 차례로 더해, 80°C에서 가열 교반하였다. 실온까지 공랭 후, 반응 용액을 Toluene으로 추출하였다. 수층을 제거해, 유기층을 포화 식염수로 세정한 후, $MgSO_4$ 로 건조하였다. $MgSO_4$ 의 여별과 유기층의 농축을 실시하고, 획득한 조생성물을 silica gel column chromatography(전개층

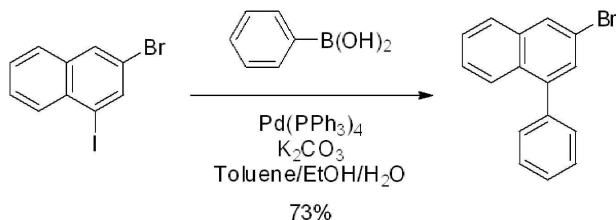
에는 Hexane과 Toluene의 혼합 용매를 사용)로 정제해, 화합물 D22 (10.98 g, 수율 66%)를 얻었다.

[0256] FAB-MS를 측정해, 질량 수 $m/z = 523$ 이 분자 ion peak로서 관측된 것에 의해 화합물 D22를 확인했다.

[0258] 10. 화합물 E3의 합성

[0259] 본 발명의 일 실시예에 따른 모노아민 화합물인 화합물 E3은 예를 들어, 하기 반응에 의해 합성될 수 있다.

[0260] (중간체 IM-15의 합성)

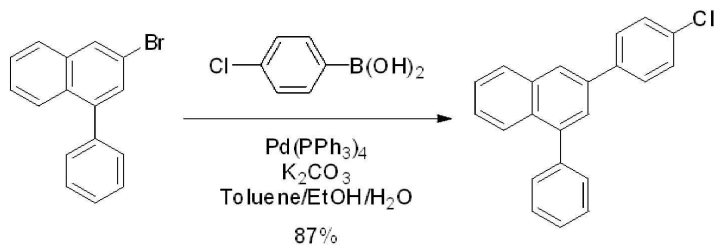


[0261]

[0262] Ar 분위기하, 1 L의 3구 flask에, 3-bromo-1-iodonaphthalene 25.00 g (75.1 mmol), phenylboronic acid 10.07 g (1.1 equiv, 82.6 mmol), K_2CO_3 31.13 g (3.0 equiv, 225.2 mmol), $Pd(PPh_3)_4$ 4.34 g (0.05 eq, 3.8 mmol), 및 Toluene/EtOH/ H_2O (4/2/1)의 혼합 용액 525 mL를 차례로 더해, 80°C에서 가열 교반하였다. 실온까지 공랭 후, 반응 용액을 Toluene으로 추출하였다. 수층을 제거해, 유기층을 포화 식염수로 세정한 후, $MgSO_4$ 로 건조하였다. $MgSO_4$ 의 여별과 유기층의 농축을 실시하고, 획득한 조생성물을 silica gel column chromatography(전개층에는 Hexane과 Toluene의 혼합 용매를 사용)로 정제해, 중간체 IM-15 (15.52 g, 수율 73%)를 얻었다.

[0263] FAB-MS를 측정해, 질량 수 $m/z = 283$ 이 분자 ion peak로서 관측된 것에 의해 중간체 IM-15를 확인했다.

[0264] (중간체 IM-16의 합성)

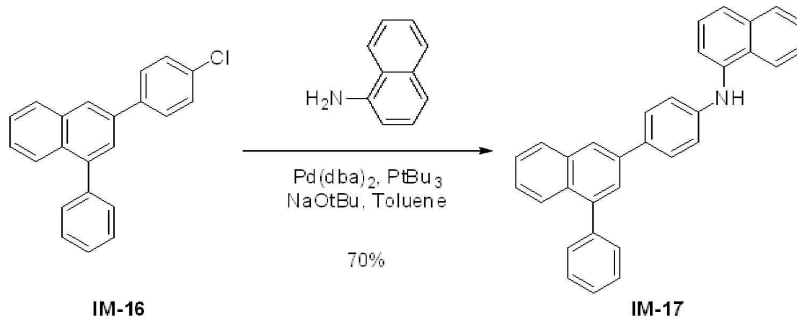


[0265]

[0266] Ar 분위기하, 1 L의 3구 flask에, IM-15 13.00 g (45.9 mmol), 4-chlorophenylboronic acid 7.90 g (1.1 equiv, 50.5 mmol), K_2CO_3 19.04 g (3.0 equiv, 60.7 mmol), $Pd(PPh_3)_4$ 2.65 g (0.05 eq, 2.3 mmol), 및 Toluene/EtOH/ H_2O (4/2/1)의 혼합 용액 321 mL를 차례로 더해, 80°C에서 가열 교반하였다. 실온까지 공랭 후, 반응 용액을 Toluene으로 추출하였다. 수층을 제거해, 유기층을 포화 식염수로 세정한 후, $MgSO_4$ 로 건조하였다. $MgSO_4$ 의 여별과 유기층의 농축을 실시하고, 획득한 조생성물을 silica gel column chromatography(전개층에는 Hexane과 Toluene의 혼합 용매를 사용)로 정제해, 중간체 IM-16 (12.57 g, 수율 87%)을 얻었다.

[0267] FAB-MS를 측정해, 질량 수 $m/z = 314$ 가 분자 ion peak로서 관측된 것에 의해 중간체 IM-16을 확인했다.

[0268] (중간체 IM-17의 합성)

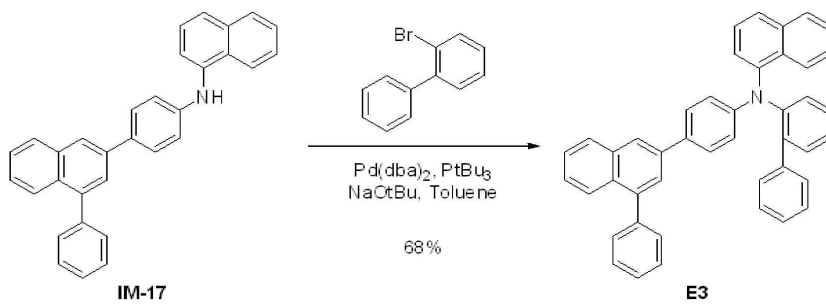


[0269]

[0270] Ar 분위기하, 300 mL의 3구 flask에, IM-16 10.00 g (31.8 mmol), Pd(dba)₂ 0.55 g (0.03 equiv, 1.0 mmol), NaOtBu 3.05 g (1.0 equiv, 31.8 mmol), Toluene 159 mL, 1-naphthylamine 5.00 g (1.1 equiv, 34.9 mmol) 및 tBu₃P 0.64 g (0.1 equiv, 3.2 mmol)을 차례로 더하고, 가열 환류 교반하였다. 실온까지 공랭 후, 반응 용매에 물을 더해 유기층을 분취하였다. 수층에 Toluene을 더해 유기층을 추가로 추출하고, 유기층을 합쳐서 식염수로 세정한 후, MgSO₄로 건조하였다. MgSO₄의 여별과 유기층의 농축을 실시하고, 획득한 조생성물을 silica gel column chromatography(전개층에는 Hexane과 Toluene의 혼합 용매를 사용)로 정제해, 화합물 IM-17 (9.37 g, 수율 70%)을 얻었다.

[0271] FAB-MS를 측정해, 질량 수 m/z = 421이 분자 ion peak로서 관측된 것에 의해 화합물 IM-17을 확인했다.

[0272] (화합물 E3의 합성)



[0273]

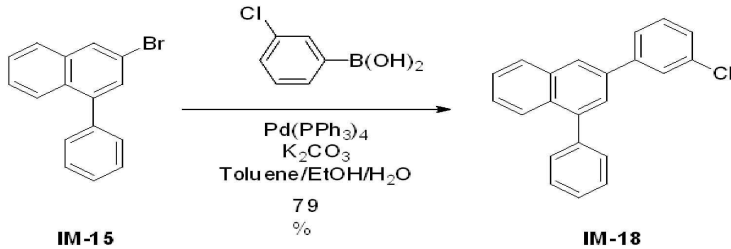
[0274] Ar 분위기하, 300 mL의 3구 flask에, IM-17 8.00 g (19.0 mmol), Pd(dba)₂ 0.33 g (0.03 equiv, 0.6 mmol), NaOtBu 3.65 g (2.0 equiv, 38.0 mmol), Toluene 95 mL, 2-bromobiphenyl 4.87 g (1.1 equiv, 20.9 mmol) 및 tBu₃P 0.39 g (0.1 equiv, 1.9 mmol)을 차례로 더하고, 가열 환류 교반하였다. 실온까지 공랭 후, 반응 용매에 물을 더해 유기층을 분취하였다. 수층에 Toluene을 더해 유기층을 추가로 추출하고, 유기층을 합쳐서 식염수로 세정한 후, MgSO₄로 건조하였다. MgSO₄의 여별과 유기층의 농축을 실시하고, 획득한 조생성물을 silica gel column chromatography(전개층에는 Hexane과 Toluene의 혼합 용매를 사용)로 정제해, 화합물 E3 (7.40 g, 수율 68%)을 얻었다.

[0275] FAB-MS를 측정해, 질량 수 m/z = 573이 분자 ion peak로서 관측된 것에 의해 화합물 E3을 확인했다.

[0277] 11. 화합물 E32의 합성

[0278] 본 발명의 일 실시예에 따른 모노아민 화합물인 화합물 E32은 예를 들어, 하기 반응에 의해 합성될 수 있다.

[0279] (중간체 IM-18의 합성)

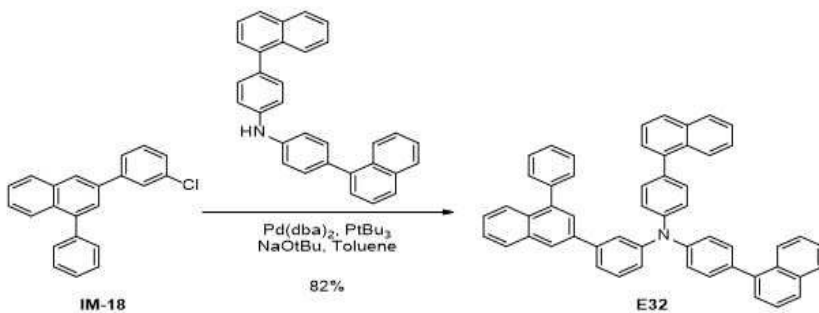


[0280]

[0281] Ar 분위기하, 1 L의 3구 flask에, IM-15 13.00 g (45.9 mmol), 3-chlorophenylboronic acid 7.90 g (1.1 equiv, 50.5 mmol), K₂CO₃ 19.04 g (3.0 equiv, 60.7 mmol), Pd(PPh₃)₄ 2.65 g (0.05 eq, 2.3 mmol), 및 Toluene/EtOH/H₂O (4/2/1)의 혼합 용액 321 mL를 차례로 더해, 80°C에서 가열 교반하였다. 실온까지 공랭 후, 반응 용액을 Toluene으로 추출하였다. 수층을 제거해, 유기층을 포화 식염수로 세정한 후, MgSO₄로 건조하였다. MgSO₄의 여별과 유기층의 농축을 실시하고, 획득한 조생성물을 silica gel column chromatography(전개층에는 Hexane과 Toluene의 혼합 용매를 사용)로 정제해, 중간체 IM-18 (11.42 g, 수율 79%)을 얻었다.

[0282] FAB-MS를 측정해, 질량 수 m/z = 314가 분자 ion peak로서 관측된 것에 의해 중간체 IM-18을 확인했다.

[0283] (화합물 E32의 합성)



[0284]

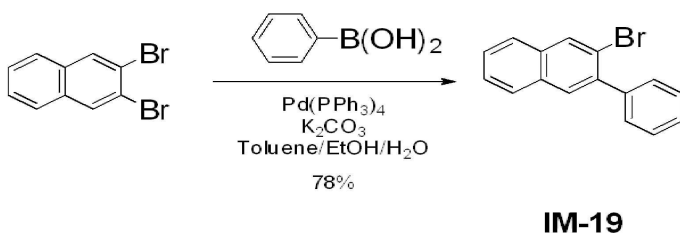
[0285] Ar 분위기하, 300 mL의 3구 flask에, IM-18 10.00 g (31.8 mmol), Pd(dba)₂ 0.55 g (0.03 equiv, 1.0 mmol), NaOtBu 6.11 g (2.0 equiv, 63.5 mmol), Toluene 158 mL, bis(4-(naphthalen-1-yl)phenyl)amine 14.73 g (1.1 equiv, 34.9 mmol) 및 tBu₃P 0.64 g (0.1 equiv, 3.2 mmol)을 차례로 더하고, 가열 환류 교반하였다. 실온까지 공랭 후, 반응 용매에 물을 더해 유기층을 분취하였다. 수층에 Toluene을 더해 유기층을 추가로 추출하고, 유기층을 합쳐서 식염수로 세정한 후, MgSO₄로 건조하였다. MgSO₄의 여별과 유기층의 농축을 실시하고, 획득한 조생성물을 silica gel column chromatography(전개층에는 Hexane과 Toluene의 혼합 용매를 사용)로 정제해, 화합물 E32 (18.23 g, 수율 82%)를 얻었다.

[0286] FAB-MS를 측정해, 질량 수 m/z = 699가 분자 ion peak로서 관측된 것에 의해 화합물 E32를 확인했다.

[0288] 12. 화합물 F46의 합성

[0289] 본 발명의 일 실시예에 따른 모노아민 화합물인 화합물 F46은 예를 들어, 하기 반응에 의해 합성될 수 있다.

[0290] (중간체 IM-19의 합성)

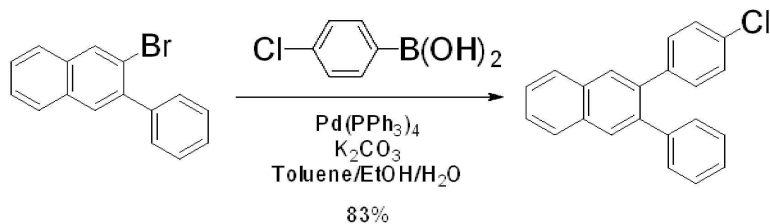


[0291]

[0292] Ar 분위기하, 1 L의 3구 flask에, 2,3-dibromonaphthalene 25.00 g (87.4 mmol), phenylboronic acid 11.73 g (1.1 equiv, 96.2 mmol), K₂CO₃ 36.2 g (3.0 equiv, 262.3 mmol), Pd(PPh₃)₄ 5.05 g (0.05 eq, 3.4 mmol), 및 Toluene/EtOH/H₂O (4/2/1)의 혼합 용액 612 mL를 차례로 더해, 80℃에서 가열 교반하였다. 실온까지 공랭 후, 반응 용액을 Toluene으로 추출하였다. 수층을 제거해, 유기층을 포화 식염수로 세정한 후, MgSO₄로 건조하였다. MgSO₄의 여별과 유기층의 농축을 실시하고, 획득한 조생성물을 silica gel column chromatography(전개층에는 Hexane과 Toluene의 혼합 용매를 사용)로 정제해, 중간체 IM-19 (19.31 g, 수율 78%)를 얻었다.

[0293] FAB-MS를 측정해, 질량 수 m/z = 283이 분자 ion peak로서 관측된 것에 의해 중간체 IM-19를 확인했다.

[0294] (중간체 IM-20의 합성)



IM-19

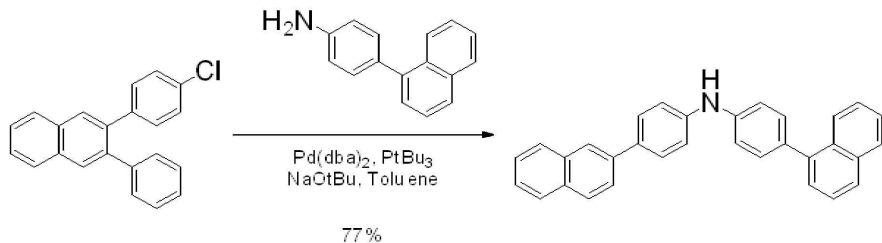
IM-20

[0295]

[0296] Ar 분위기하, 1 L의 3구 flask에, IM-19 13.00 g (45.9 mmol), 4-chlorophenylboronic acid 7.90 g (1.1 equiv, 50.5 mmol), K₂CO₃ 19.04 g (3.0 equiv, 60.7 mmol), Pd(PPh₃)₄ 2.65 g (0.05 eq, 2.3 mmol), 및 Toluene/EtOH/H₂O (4/2/1)의 혼합 용액 321 mL를 차례로 더해, 80℃에서 가열 교반하였다. 실온까지 공랭 후, 반응 용액을 Toluene으로 추출하였다. 수층을 제거해, 유기층을 포화 식염수로 세정한 후, MgSO₄로 건조하였다. MgSO₄의 여별과 유기층의 농축을 실시하고, 획득한 조생성물을 silica gel column chromatography(전개층에는 Hexane과 Toluene의 혼합 용매를 사용)로 정제해, 중간체 IM-20 (12.00 g, 수율 83%)을 얻었다.

[0297] FAB-MS를 측정해, 질량 수 m/z = 314가 분자 ion peak로서 관측된 것에 의해 중간체 IM-20을 확인했다.

[0298] (중간체 IM-21의 합성)



IM-20

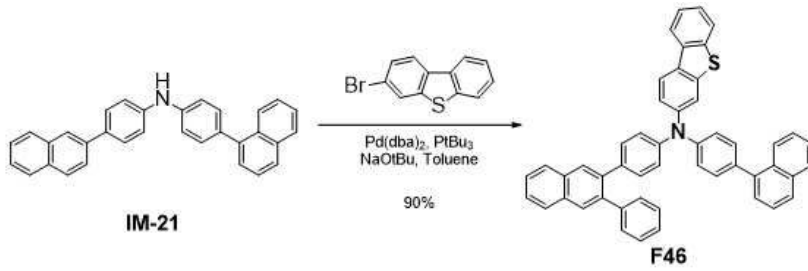
IM-21

[0299]

[0300] Ar 분위기하, 300 mL의 3구 flask에, IM-20 10.00 g (31.8 mmol), Pd(dba)₂ 0.55 g (0.03 equiv, 1.0 mmol), NaOtBu 3.05 g (1.0 equiv, 31.8 mmol), Toluene 159 mL, 4-(naphthalen-1-yl)aniline 7.66 g (1.1 equiv, 34.9 mmol) 및 tBu₃P 0.64 g (0.1 equiv, 3.2 mmol)을 차례로 더하고, 가열 환류 교반하였다. 실온까지 공랭 후, 반응 용매에 물을 더해 유기층을 분취하였다. 수층에 Toluene을 더해 유기층을 추가로 추출하고, 유기층을 합쳐서 식염수로 세정한 후, MgSO₄로 건조하였다. MgSO₄의 여별과 유기층의 농축을 실시하고, 획득한 조생성물을 silica gel column chromatography(전개층에는 Hexane과 Toluene의 혼합 용매를 사용)로 정제해, 화합물 IM-21 (10.31 g, 수율 77%)을 얻었다.

[0301] FAB-MS를 측정해, 질량 수 m/z = 421이 분자 ion peak로서 관측된 것에 의해 화합물 IM-21을 확인했다.

[0302] (화합물 F46의 합성)



[0303]

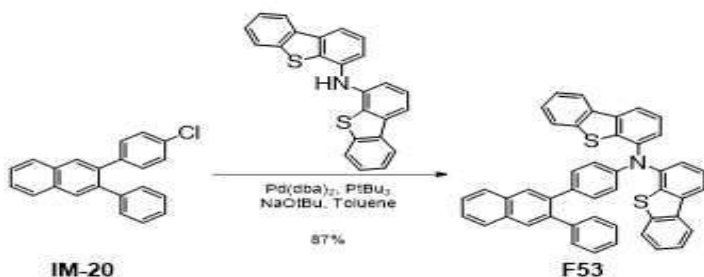
[0304] Ar 분위기하, 300 mL의 3구 flask에, IM-21 8.00 g (19.0 mmol), Pd(dba)₂ 0.33 g (0.03 equiv, 0.6 mmol), NaOtBu 3.65 g (2.0 equiv, 38.0 mmol), Toluene 95 mL, 3-bromo-dibenzothiophen 5.49 g (1.1 equiv, 20.9 mmol) 및 tBu₃P 0.39 g (0.1 equiv, 1.9 mmol)을 차례로 더하고, 가열 환류 교반하였다. 실온까지 공랭 후, 반응 용매에 물을 더해 유기층을 분취하였다. 수층에 Toluene을 더해 유기층을 추가로 추출하고, 유기층을 합쳐서 식염수로 세정한 후, MgSO₄로 건조하였다. MgSO₄의 여별과 유기층의 농축을 실시하고, 획득한 조생성물을 silica gel column chromatography(전개층에는 Hexane과 Toluene의 혼합 용매를 사용)로 정제해, 화합물 F46 (11.61 g, 수율 90%)을 얻었다.

[0305] FAB-MS를 측정해, 질량 수 m/z = 679가 분자 ion peak로서 관측된 것에 의해 화합물 F46을 확인했다.

[0307] 13. 화합물 F53의 합성

[0308] 본 발명의 일 실시예에 따른 모노아민 화합물인 화합물 F53은 예를 들어, 하기 반응에 의해 합성될 수 있다.

[0309] (화합물 F53의 합성)



[0310]

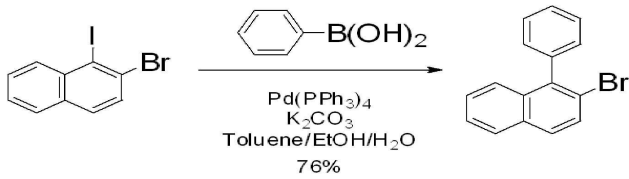
[0311] Ar 분위기하, 300 mL의 3구 flask에, IM-20 8.00 g (23.4 mmol), Pd(dba)₂ 0.40 g (0.03 equiv, 0.7 mmol), NaOtBu 4.50 g (2.0 equiv, 46.8 mmol), Toluene 117 mL, bis(dibenzothiophen-4-yl)amine 9.82 g (1.1 equiv, 25.7 mmol) 및 tBu₃P 0.47 g (0.1 equiv, 2.3 mmol)을 차례로 더하고, 가열 환류 교반하였다. 실온까지 공랭 후, 반응 용매에 물을 더해 유기층을 분취하였다. 수층에 Toluene을 더해 유기층을 추가로 추출하고, 유기층을 합쳐서 식염수로 세정한 후, MgSO₄로 건조하였다. MgSO₄의 여별과 유기층의 농축을 실시하고, 획득한 조생성물을 silica gel column chromatography(전개층에는 Hexane과 Toluene의 혼합 용매를 사용)로 정제해, 화합물 F53 (13.44 g, 수율 87%)을 얻었다.

[0312] FAB-MS를 측정해, 질량 수 m/z = 659가 분자 ion peak로서 관측된 것에 의해 화합물 F53을 확인했다.

[0314] 14. 화합물 G54의 합성

[0315] 본 발명의 일 실시예에 따른 모노아민 화합물인 화합물 G54은 예를 들어, 하기 반응에 의해 합성될 수 있다.

[0316] (중간체 IM-22의 합성)



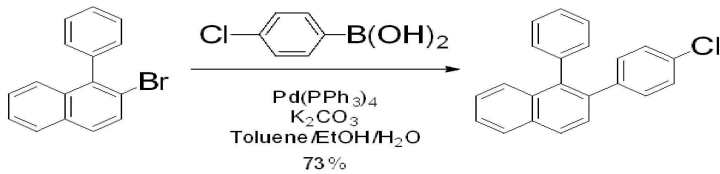
[0317]

IM-22

[0318] Ar 분위기하, 1 L의 3구 flask에, 2-bromo-1-iodo-naphthalene 25.00 g (75.1 mmol), phenylboronic acid 10.07 g (1.1 equiv, 82.6 mmol), K₂CO₃ 31.1 g (3.0 equiv, 225.2 mmol), Pd(PPh₃)₄ 4.34 g (0.05 eq, 3.8 mmol), 및 Toluene/EtOH/H₂O (4/2/1)의 혼합 용액 525 mL를 차례로 더해, 80℃에서 가열 교반하였다. 실온까지 공랭 후, 반응 용액을 Toluene으로 추출하였다. 수층을 제거하고, 유기층을 포화 식염수로 세정한 후, MgSO₄로 건조하였다. MgSO₄의 여별과 유기층의 농축을 실시하고, 획득한 조생성물을 silica gel column chromatography (전개층에는 Hexane과 Toluene의 혼합 용매를 사용)로 정제해, 중간체 IM-22 (16.16 g, 수율 76%)를 얻었다.

[0319] FAB-MS를 측정해, 질량 수 m/z = 283이 분자 ion peak로서 관측된 것에 의해 중간체 IM-22를 확인했다.

[0320] (중간체 IM-23의 합성)



[0321]

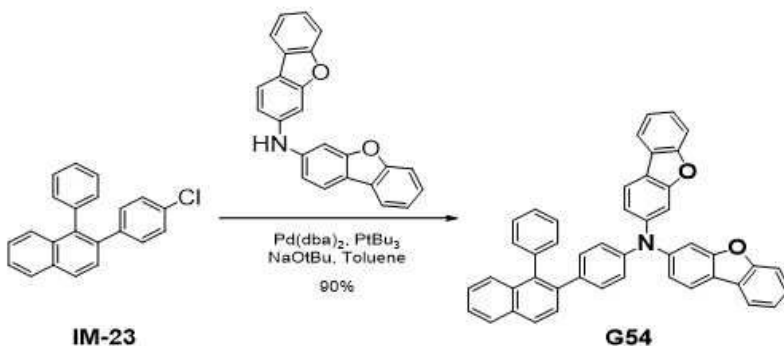
IM-22

IM-23

[0322] Ar 분위기하, 1 L의 3구 flask에, IM-22 13.00 g (45.9 mmol), 4-chlorophenylboronic acid 7.90 g (1.1 equiv, 50.5 mmol), K₂CO₃ 19.04 g (3.0 equiv, 60.7 mmol), Pd(PPh₃)₄ 2.65 g (0.05 eq, 2.3 mmol), 및 Toluene/EtOH/H₂O (4/2/1)의 혼합 용액 321 mL를 차례로 더해, 80℃에서 가열 교반하였다. 실온까지 공랭 후, 반응 용액을 Toluene으로 추출하였다. 수층을 제거해, 유기층을 포화 식염수로 세정한 후, MgSO₄로 건조하였다. MgSO₄의 여별과 유기층의 농축을 실시하고, 획득한 조생성물을 silica gel column chromatography(전개층에는 Hexane과 Toluene의 혼합 용매를 사용)로 정제해, 중간체 IM-23 (10.55 g, 수율 73%)을 얻었다.

[0323] FAB-MS를 측정해, 질량 수 m/z = 314가 분자 ion peak로서 관측된 것에 의해 중간체 IM-23을 확인했다.

[0324] (화합물 G54의 합성)



[0325]

[0326] Ar 분위기하, 300 mL의 3구 flask에, IM-23 8.00 g (25.4 mmol), Pd(dba)₂ 0.44 g (0.03 equiv, 0.8 mmol), NaOtBu 4.88 g (2.0 equiv, 50.8 mmol), Toluene 127 mL, bis(dibenzofuran-3-yl)amine 9.77 g (1.1 equiv, 28.0 mmol) 및 tBu₃P 0.51 g (0.1 equiv, 2.5 mmol)을 차례로 더하고, 가열 환류 교반하였다. 실온까지 공랭 후, 반응 용매에 물을 더해 유기층을 분취하였다. 수층에 Toluene을 더해 유기층을 추가로 추출하고, 유기층을

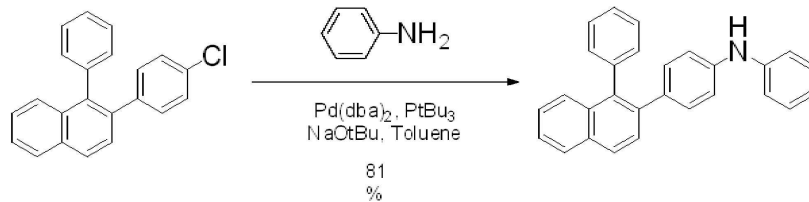
합쳐서 식염수로 세정한 후, MgSO₄로 건조하였다. MgSO₄의 여별과 유기층의 농축을 실시하고, 획득한 조생성물을 silica gel column chromatography(전개층에는 Hexane과 Toluene의 혼합 용매를 사용)로 정제해, 화합물 G54 (14.4 g, 수율 90%)를 얻었다.

[0327] FAB-MS를 측정해, 질량 수 m/z = 627이 분자 ion peak로서 관측된 것에 의해 화합물 G54를 확인했다.

[0329] 15. 화합물 G58의 합성

[0330] 본 발명의 일 실시예에 따른 모노아민 화합물인 화합물 G58은 예를 들어, 하기 반응에 의해 합성될 수 있다.

[0331] (중간체 IM-24의 합성)



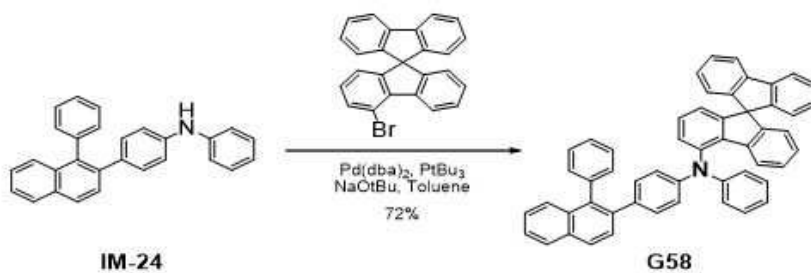
[0332] **IM-23**

IM-24

[0333] Ar 분위기하, 300 mL의 3구 flask에, IM-23 10.00 g (31.8 mmol), Pd(dba)₂ 0.55 g (0.03 equiv, 1.0 mmol), NaOtBu 3.05 g (1.0 equiv, 31.8 mmol), Toluene 159 mL, aniline 3.25 g (1.1 equiv, 34.9 mmol) 및 tBu₃P 0.64 g (0.1 equiv, 3.2 mmol)을 차례로 더하고, 가열 환류 교반하였다. 실온까지 공랭 후, 반응 용매에 물을 더해 유기층을 분취하였다. 수층에 Toluene을 더해 유기층을 추가로 추출하고, 유기층을 합쳐서 식염수로 세정한 후, MgSO₄로 건조하였다. MgSO₄의 여별과 유기층의 농축을 실시하고, 획득한 조생성물을 silica gel column chromatography(전개층에는 Hexane과 Toluene의 혼합 용매를 사용)로 정제해, 화합물 IM-24 (9.56 g, 수율 81%)를 얻었다.

[0334] FAB-MS를 측정해, 질량 수 m/z = 371이 분자 ion peak로서 관측된 것에 의해 화합물 IM-24를 확인했다.

[0335] (화합물 G58의 합성)



[0336]

[0337] Ar분위기하, 300 mL의 3구 flask에, IM-24 8.00 g (21.5 mmol), Pd(dba)₂ 0.37 g (0.03 equiv, 0.6 mmol), NaOtBu 4.14 g (2.0 equiv, 43.1 mmol), Toluene 108 mL, 4-bromo-9,9'-spirobifluorene 9.36 g (1.1 equiv, 23.7 mmol) 및 tBu₃P 0.44 g (0.1 equiv, 2.2 mmol)을 차례로 더하고, 가열 환류 교반하였다. 실온까지 공랭 후, 반응 용매에 물을 더해 유기층을 분취하였다. 수층에 Toluene을 더해 유기층을 추가로 추출하고, 유기층을 합쳐서 식염수로 세정한 후, MgSO₄로 건조하였다. MgSO₄의 여별과 유기층의 농축을 실시하고, 획득한 조생성물을 silica gel column chromatography(전개층에는 Hexane과 Toluene의 혼합 용매를 사용)로 정제해, 화합물 G58 (10.63 g, 수율 72%)을 얻었다.

[0338] FAB-MS를 측정해, 질량 수 m/z = 685가 분자 ion peak로서 관측된 것에 의해 화합물 G58을 확인했다.

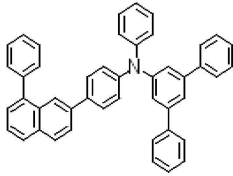
[0340] 진술한 합성에는 일 예시이며, 반응 조건은 필요에 따라 변경될 수 있다. 또한, 본 발명의 일 실시예에 따른 화합물은 당 기술분야에 알려져 있는 방법 및 재료를 이용하여 다양한 치환기를 가지도록 합성될 수 있다. 화학식 1로 표시되는 코어 구조에 다양한 치환체를 도입함으로써 유기 전계 발광 소자에 사용되기에 적합한 특성을 가

질 수 있다.

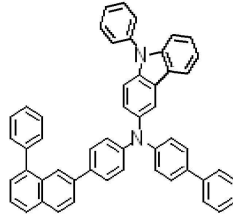
[0342] (소자 작성예)

[0343] 상술한 화합물 A4, A17, B13, B20, B40, C25, C51, D12, D22, E3, E32, F46, F53, G54 및 G58를 전자 저지층 재료로 사용하여 실시예 1 내지 15의 유기 전계 발광 소자를 제작하였다.

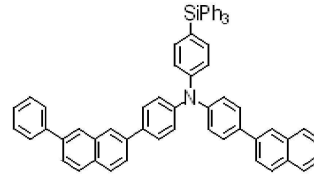
[0344] [실시예 화합물]



A4

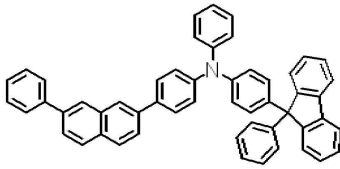


A17

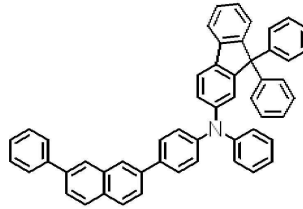


B13

[0345]

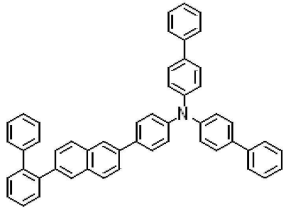


B20

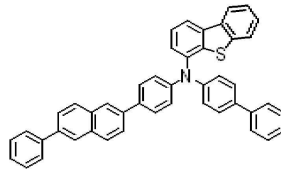


B40

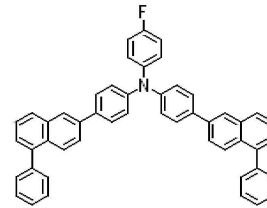
[0346]



C25

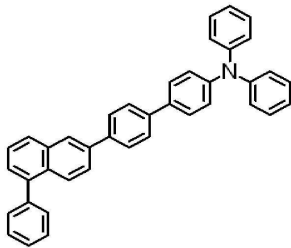


C51

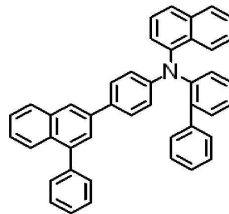


D12

[0347]

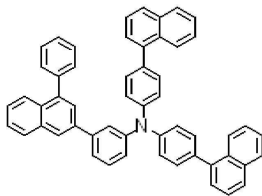


D22

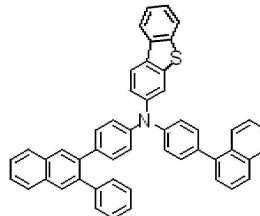


E3

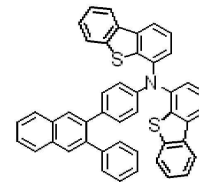
[0348]



E32

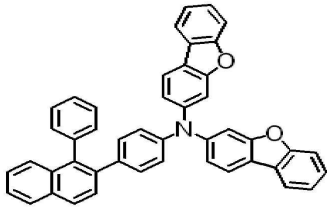


F46

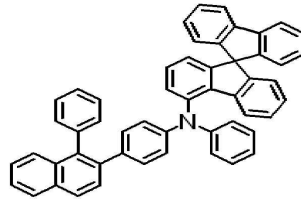


F53

[0349]



G54



G58

[0350]

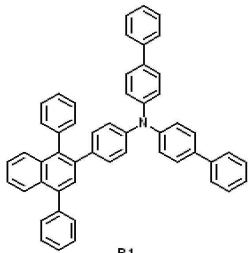
[0351]

하기 비교예 화합물 R-1 내지 R-8를 전자 저지층 재료로 사용하여 비교예 1 내지 8의 유기 전계 발광 소자를 제작하였다.

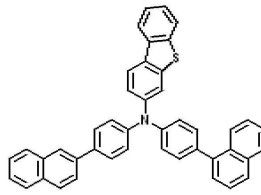
[0352]

[비교예 화합물]

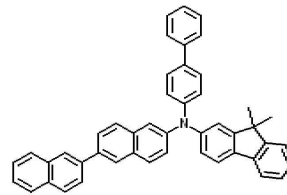
[0353]



R1

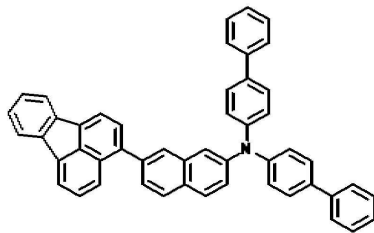


R2

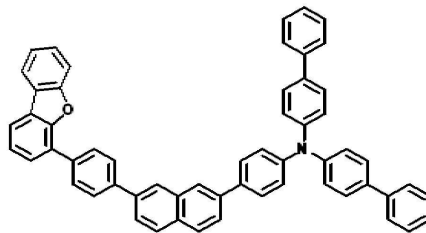


R3

[0354]

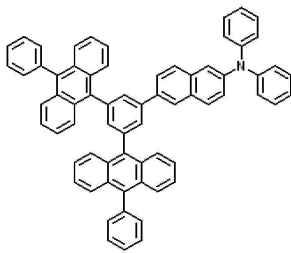


R4

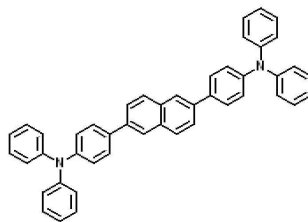


R5

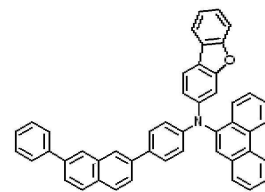
[0355]



R6



R7

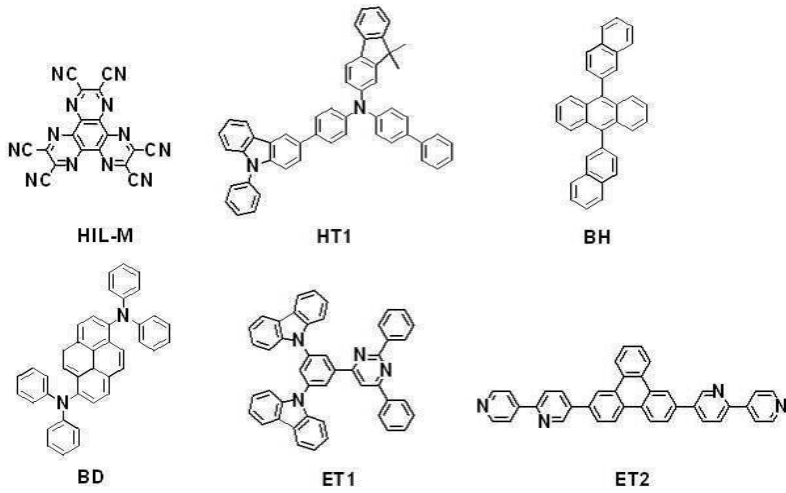


R8

[0356]

[0358]

실시에 1 내지 15 및 비교예 1 내지 8의 유기 전계 발광 소자는 ITO로 150nm의 제1 전극을 형성하고, HT1에 HIL-M을 2%로 도핑한 10nm 두께의 정공 주입층을 형성하고, HT1으로 120nm 두께의 정공 수송층을 형성하고, 실시에 화합물 또는 비교예 화합물로 10nm 두께의 전자 저지층을 형성하고, BH에 BD를 2% 도핑한 30nm 두께의 발광층을 형성하고, ET1으로 10nm 두께의 정공 저지층을 형성하고, ET2로 20nm 두께의 전자 수송층을 형성하고, LiF로 1nm 두께의 전자 주입층을 형성하고, 마그네슘(Mg)과 은(Ag)을 9:1(부피비)로 공증착하여 120nm 두께의 제2 전극을 형성하였다. 각 층은 모두 진공 증착법으로 형성하였다.



[0359]

[0360]

실시예 1 내지 15 및 비교예 1 내지 8에 따른 유기 전계 발광 소자의 전압, 반감수명, 발광효율 및 색좌표를 하기 표 1에 나타낸다.

표 1

[0361]

	전자저지층	전압 (V)	수명 LT50(h)	발광효율 (cd/A)	색좌표 CIE(x,y)
실시예 1	실시예 화합물 A4	4.8	5.5	189	0.141, 0.051
실시예 2	실시예 화합물 A17	4.6	5.5	190	0.142, 0.051
실시예 3	실시예 화합물 B13	4.7	5.6	196	0.141, 0.051
실시예 4	실시예 화합물 B20	4.6	5.5	195	0.141, 0.052
실시예 5	실시예 화합물 B40	4.6	5.4	197	0.142, 0.052
실시예 6	실시예 화합물 C25	4.6	5.4	199	0.142, 0.051
실시예 7	실시예 화합물 C51	4.8	5.4	196	0.141, 0.051
실시예 8	실시예 화합물 D12	4.8	5.5	188	0.142, 0.052
실시예 9	실시예 화합물 D22	4.7	5.4	190	0.142, 0.051
실시예 10	실시예 화합물 E3	4.8	5.6	184	0.141, 0.052
실시예 11	실시예 화합물 E32	4.8	5.6	189	0.141, 0.052
실시예 12	실시예 화합물 F46	4.7	5.3	193	0.141, 0.051
실시예 13	실시예 화합물 F53	4.8	5.5	192	0.141, 0.051
실시예 14	실시예 화합물 G54	4.8	5.6	197	0.141, 0.052
실시예 15	실시예 화합물 G58	4.8	5.6	185	0.142, 0.052
비교예 1	비교예 화합물 R1	5.0	4.9	167	0.140, 0.052
비교예 2	비교예 화합물 R2	5.2	3.8	165	0.141, 0.053
비교예 3	비교예 화합물 R3	5.1	4.0	167	0.142, 0.051
비교예 4	비교예 화합물 R4	5.3	4.2	163	0.139, 0.049
비교예 5	비교예 화합물 R5	5.1	5.0	168	0.140, 0.050
비교예 6	비교예 화합물 R6	5.5	3.5	155	0.137, 0.047
비교예 7	비교예 화합물 R7	4.9	5.0	157	0.143, 0.053
비교예 8	비교예 화합물 R8	4.9	4.9	169	0.142, 0.052

[0362]

발광효율은 10mA/cm²에서 측정된 값이며, 반감 수명은 1.0mA/cm²에서의 값이다.

[0363]

상기 표 1을 참조하면, 실시예 1 내지 15은 비교예 1 내지 8 대비 저구동전압화, 장수명화 및 고효율화되었다. 본 발명의 일 실시예에 따른 모노아민 화합물은 치환된 β- 페닐나프틸기를 포함함으로써 저구동전압화, 장수명화 및 고효율화가 달성되었다. 열 및 전하에 대한 내성이 뛰어난 나프틸기를 도입함으로써 아민의 특성을 유지하면서, 소자의 장수명화가 실현되었다. 또한, 나프틸기에 페닐기가 치환되어 있음에 따라 부피가 커지고, 분자의 대칭성이 저화되어 결정화가 억제되어, 결과적으로 막질을 향상시킬 수 있기 때문에 효율도 향상되었다.

[0364]

실시예 1, 2, 8 내지 11, 14 및 15는 특히 소자의 효율이 향상됨을 확인할 수 있다. 화합물 A4, A17, D12, D22, E3, E32, G54 및 G58는 나프틸기의 α 위치에 치환기를 포함하여, α 위치에 결합한 치환기와 다른쪽의

α' 위치에 치환하는 수소 원자 사이에 입체 전자적 반발이 생기므로, 나프틸기에 치환된 페닐기와 나프틸기 골격이 서로 뒤틀림으로써 분자 전체의 평면성이 저하되어 결정성이 억제됨과 더불어, 정공 수송성이 개선되어, 발광층 내에서의 정공과 전자의 재결합 확률이 향상했기 때문이라고 판단된다.

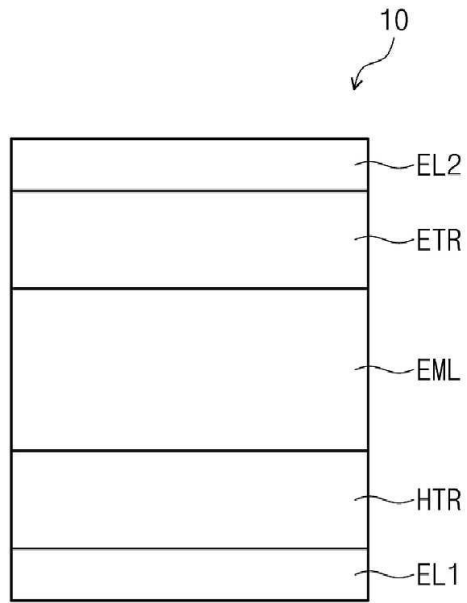
- [0365] 실시예 3 내지 7, 12 및 13는 특히 소자 수명이 향상했다. 화합물 B13, B20, B40, C25, C51, F46, 및 F53는 나프틸기의 \hat{a} 위치에 치환기를 포함하여, \hat{a} 위치에 결합한 치환기와 나프틸기가 평면에 가까운 입체 구조를 취함으로써, 아민 주변의 공역이 비국재화되어 라디칼 상태가 안정화되기 때문에 수명이 향상되었다.
- [0366] 비교예 1은 실시예와 비교해 특히 소자 수명이 저하되는 결과를 보였다. R1은 본 발명의 일 실시예와 유사하게 링커를 통해 나프틸기의 \hat{a} 위치에 아민기가 결합되어 있지만, 나프틸기에 2개의 페닐기가 치환되고 있어, 나프틸기에 HOMO 궤도가 크게 분포하게 되고, 상대적으로 아민기측의 전자 밀도가 작아짐으로써, 장수명을 유도하는 아민의 특성을 유지 어려워진 것으로 판단된다.
- [0367] 비교예 2는 나프틸기를 포함하는 아민 화합물이지만 페닐나프틸기를 포함하고 있지 않기 때문에 전하 내성이 낮으며, 막질이 충분하지 않아 소자 수명이 짧고 효율이 낮다.
- [0368] 비교예 3, 및 4는 본 발명의 일 실시예와 유사하게 링커를 통해 나프틸기의 \hat{a} 위치에 아민기가 결합되어 있는 화합물이지만, 나프틸기에 페닐기가 아닌 다환 방향족기가 결합하고 있어 다환 방향족 고리기의 영향으로 분자 스택킹(stackings)이 매우 강하고, 증착 온도가 높기 때문에 열 분해가 쉽게 일어난 것으로 판단되며, 이에 따라 실시예와 비교해 발광 효율 및 수명이 모두 저하되는 결과를 보였다.
- [0369] 비교예 6은 본 발명의 일 실시예와 유사하게 링커를 통해 나프틸기의 \hat{a} 위치에 아민기가 결합되어 있는 화합물이지만, 페닐기에 2개의 치환기를 포함하여 분자 스택킹(stackings)이 매우 강하고, 증착 온도가 높기 때문에 열 분해가 쉽게 일어나 실시예와 비교해 발광 효율 및 수명이 모두 저하되는 결과를 보였다.
- [0370] 비교예 5 및 7은 실시예와 비교해 특히 발광 효율이 저하되는 결과를 보였다. 비교예 화합물 R5는 나프틸기의 치환된 페닐기에 헤테로고리인 디벤조퓨란(dibenzofuran) 고리가 치환되어 있고, 비교예 화합물 R7은 디아민 화합물이므로 캐리어 밸런스가 무너진 것으로 판단된다.
- [0371] 비교예 8은 실시예와 비교해 발광 효율 및 수명이 모두 저하되는 결과를 보였다. 비교예 화합물 R8은 질소원자에 3-디벤조퓨라닐기(3-dibenzofuranly) 및 9-페난트릴기(9-phenanthlyl)를 동시에 결합하여 열 분해가 쉽게 일어난 것으로 판단된다. 즉, 분자 스택킹(stackings)이 매우 강해질 수 있는 9-페난트릴기(9-phenanthlyl)이 질소에 결합하고, 동시에 분자 전체에 평면성이 높아지는 3-디벤조퓨라닐기(3-dibenzofuranly)가 결합하여 분자 스택킹이 증강되고, 증착 온도가 상승함에 따라 분자의 열 분해가 쉽게 발생하여 소자의 효율 및 수명이 저하되는 것으로 판단된다.
- [0372] 본 발명의 일 실시예에 따른 모노아민 화합물은 정공 수송 영역에 사용되어 유기 전계 발광 소자의 저구동 전압화, 고효율화 및 장수명화에 기여한다.
- [0373] 이상, 본 발명의 실시예를 설명하였지만, 본 발명이 속하는 기술분야에서 통상의 지식을 가진 자는 본 발명이 그 기술적 사상이나 필수적인 특징으로 변경하지 않고서 다른 구체적인 형태로 실시될 수 있다는 것을 이해할 수 있을 것이다. 그러므로 이상에서 기술한 실시예는 모든 면에서 예시적인 것이며 한정적인 것이 아닌 것으로 이해해야만 한다.

부호의 설명

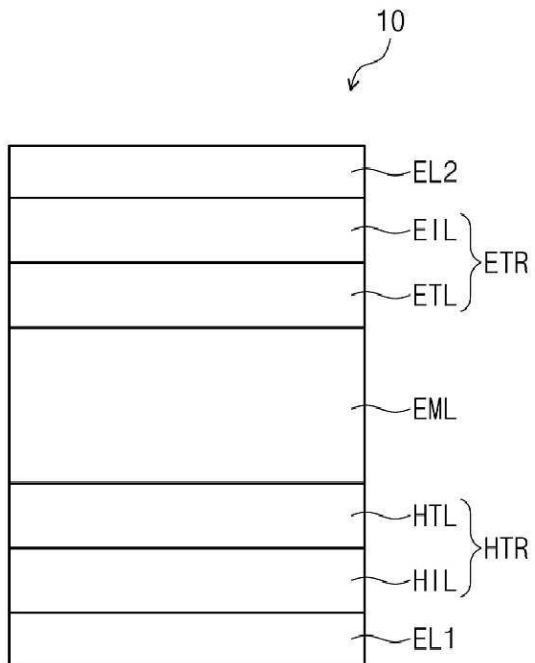
- [0375] 10: 유기 전계 발광 소자 EL1: 제1 전극
- HTR: 정공 수송 영역 HIL: 정공 주입층
- HTL: 정공 수송층 EML: 발광층
- ETR: 전자 수송 영역 ETL: 전자 수송층
- EIL: 전자 주입층 EL2: 제2 전극

도면

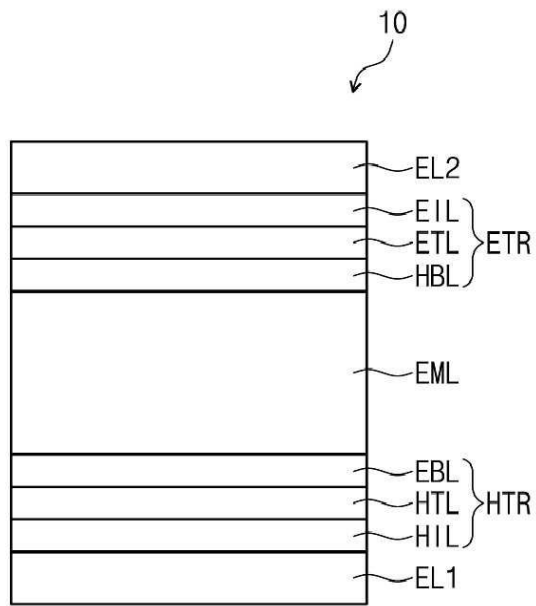
도면1



도면2



도면3



专利名称(译)	用于有机电致发光器件和有机电致发光器件的单胺化合物		
公开(公告)号	KR1020190091410A	公开(公告)日	2019-08-06
申请号	KR1020180146236	申请日	2018-11-23
[标]申请(专利权)人(译)	三星显示有限公司		
申请(专利权)人(译)	三星显示器有限公司		
发明人	미야케, 히데오 우에노, 마사츠크 진, 시우란 타카다, 이치노리 우노, 타쿠야 이토이, 히로아키		
IPC分类号	H01L51/00 H01L51/50		
CPC分类号	H01L51/0074 H01L51/0059 H01L51/0073 H01L51/5056 H01L51/5072 H01L51/5088 H01L51/5096		
优先权	1020180009993 2018-01-26 KR		
其他公开文献	KR102078171B1		
外部链接	Espacenet		

摘要(译)

实施方式的有机电致发光器件包括第一电极，设置在第一电极上的空穴传输区，设置在空穴传输区上的发光层，设置在发光层上的电子传输区以及设置在电子传输区上的第二电极。包括电极在内的空穴传输区域可以包括由式(1)表示的单胺化合物，可以显示出高的发光效率。

