



(19) 대한민국특허청(KR)

(12) 등록특허공보(B1)

(45) 공고일자 2015년09월21일

(11) 등록번호 10-1554693

(24) 등록일자 2015년09월15일

- (51) 국제특허분류(Int. Cl.)
C09K 11/06 (2006.01) H01L 51/50 (2006.01)
- (21) 출원번호 10-2013-0004064
- (22) 출원일자 2013년01월14일
심사청구일자 2013년01월14일
- (65) 공개번호 10-2014-0091969
- (43) 공개일자 2014년07월23일
- (56) 선행기술조사문헌
KR1020050038617 A*
KR1020060115372 A*
*는 심사관에 의하여 인용된 문헌

- (73) 특허권자
가톨릭대학교 산학협력단
서울특별시 서초구 반포대로 222, 가톨릭대학교
성의교정내 (반포동)
- (72) 발명자
박종욱
서울 구로구 경인로 382, 103동 202호 (개봉동,
한마을아파트)
이재현
서울 양천구 신월로 99, 16동 306호 (신월동, 신
월시영아파트)
김범진
경기 부천시 소사구 경인로194번길 97, 가동 501
호 (십곡본동, 신세계아트빌)

- (74) 대리인
유미특허법인

전체 청구항 수 : 총 9 항

심사관 : 오세주

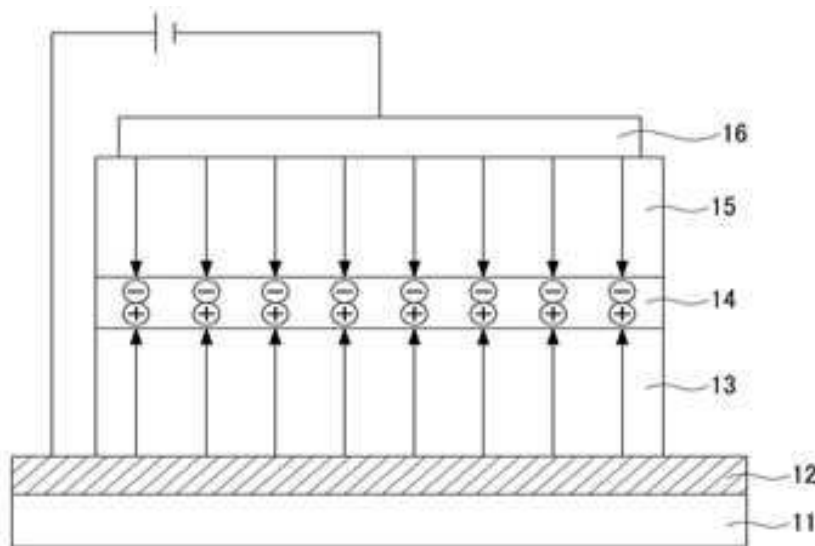
(54) 발명의 명칭 트리플 또는 멀티플 코어 구조를 포함하는 유기발광 소자용 화합물 및 이를 채용한 유기발광 소자

(57) 요약

본 발명은 분자 내 트리플 코어 또는 멀티플 코어 구조를 포함하는 유기발광 소자용 화합물, 이를 채용한 유기발광 소자, 및 표시 장치에 관한 것이다.

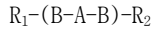
본 발명은 하기 화학식 1 또는 화학식 7로 표시되는 분자 내 트리플 코어(B-A-B) 또는 멀티플 코어(E-D-C-D-E) (뒷면에 계속)

대표도 - 도1

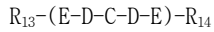


구조를 포함하는 유기발광 소자용 화합물을 제공한다. 나아가, 본 발명의 유기발광 소자용 화합물을 발광층으로 채용함으로써, 청색 발광 재료 이외에 종래 단일 코어로 이루어진 화합물을 채용한 경우보다 real white에 가까운 색좌표 값을 가질 수 있어 백색 발광재료로 적합하다.

[화학식 1]



[화학식 7]



상기 화학식에 대한 설명은 발명의 상세한 설명을 참조한다.

이 발명을 지원한 국가연구개발사업

과제고유번호	2012001846
부처명	교육과학기술부
연구관리전문기관	한국연구재단
연구사업명	중견연구자지원사업
연구과제명	분자정밀제어 융합기술을 이용한 미래형 파이전자 재료 시스템 연구
기여율	1/1
주관기관	가톨릭대학교 산학협력단
연구기간	2012.05.01~2015.04.30

명세서

청구범위

청구항 1

하기 화학식 1로 표시되는 분자 내 트리플 코어(B-A-B) 구조를 포함하는 유기발광 소자용 화합물:

[화학식 1]



상기 화학식 1에서,

A는 치환 또는 비치환된 2가의 크리센이고,

B는 치환 또는 비치환된 2가의 안트라센이며;

R₁ 및 R₂는 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C12 내지 C25 아릴기 또는 C6 내지 C18 아릴기로 치환된 C2 내지 C30 알케닐기를 치환기로 가지는 C6 아릴기이다.

(상기 "치환된"이란 적어도 하나의 수소원자가 중수소, C6 내지 C36 아릴기, C2 내지 C30 헤테로아릴기, C1 내지 C30 알콕시기, C2 내지 C30 알케닐기, C6 내지 C30 아릴옥시기, C3 내지 C40 실릴옥시기, C1 내지 C30 아실기, C2 내지 C30 아실옥시기, C2 내지 C30 헤테로아릴옥시기, C1 내지 C30 술폰닐기, C1 내지 C30 알킬티올기, C6 내지 C30 아릴티올기, C1 내지 C30 헤테로시클로티올기, C1 내지 C30 인산아마이드기, C3 내지 C40 실릴기, NRR'(여기에서, R 및 R'은 각각 독립적으로, 수소 원자, C1 내지 C30 알킬기, 및 C6 내지 C30 아릴기로 이루어진 군에서 선택되는 치환기임), 카르복실기, 할로겐기, 시아노기, 니트로기, 아조기, 및 하이드록시기로 이루어진 군에서 선택되는 치환기로 치환된 것을 의미한다)

청구항 2

삭제

청구항 3

삭제

청구항 4

삭제

청구항 5

제1항에 있어서,

상기 R₁ 및 R₂는 서로 독립적으로, 치환된 페닐, 치환된 바이페닐, 치환된 트라이페닐, 치환된 나프틸, 치환된 페난트렌 및 치환된 파이렌으로 이루어진 군에서 선택되는 유기발광 소자용 화합물.

(상기 "치환된"이란 적어도 하나의 수소원자가 중수소, C1 내지 C30 알킬기, C6 내지 C36 아릴기, C2 내지 C30 헤테로아릴기, C1 내지 C30 알콕시기, C2 내지 C30 알케닐기, C6 내지 C30 아릴옥시기, C3 내지 C40 실릴옥시기, C1 내지 C30 아실기, C2 내지 C30 아실옥시기, C2 내지 C30 헤테로아릴옥시기, C1 내지 C30 술폰닐기, C1 내지 C30 알킬티올기, C6 내지 C30 아릴티올기, C1 내지 C30 헤테로시클로티올기, C1 내지 C30 인산아마이드기, C3 내지 C40 실릴기, NRR'(여기에서, R 및 R'은 각각 독립적으로, 수소 원자, C1 내지 C30 알킬기, 및 C6 내지 C30 아릴기로 이루어진 군에서 선택되는 치환기임), 카르복실기, 할로겐기, 시아노기, 니트로기, 아조기, 및 하이드록시기로 이루어진 군에서 선택되는 치환기로 치환된 것을 의미한다)

청구항 6

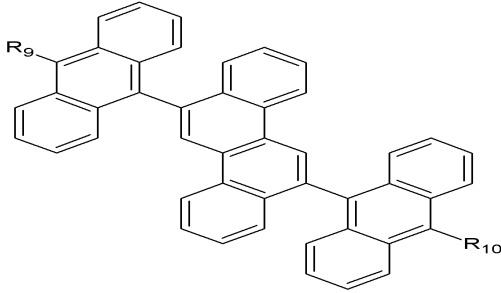
삭제

청구항 7

제1항에 있어서,

상기 화학식 1은 하기 화학식 5로 표시되는 유기발광 소자용 화합물:

[화학식 5]



상기 화학식 5에서,

R₉ 내지 R₁₀은 각각 독립적으로, 치환 또는 비치환된 C12 내지 C25 아릴기 또는 C6 내지 C18 아릴기로 치환된 C2 내지 C30 알케닐기를 치환기로 가지는 C6 아릴기이다.

(상기 "치환된"이란 적어도 하나의 수소원자가 중수소, C6 내지 C36 아릴기, C2 내지 C30 헤테로아릴기, C1 내지 C30 알콕시기, C2 내지 C30 알케닐기, C6 내지 C30 아릴옥시기, C3 내지 C40 실릴옥시기, C1 내지 C30 아실기, C2 내지 C30 아실옥시기, C2 내지 C30 헤테로아릴옥시기, C1 내지 C30 술포닐기, C1 내지 C30 알킬티올기, C6 내지 C30 아릴티올기, C1 내지 C30 헤테로시클로티올기, C1 내지 C30 인산아마이드기, C3 내지 C40 실릴기, NRR'(여기에서, R 및 R'은 각각 독립적으로, 수소 원자, C1 내지 C30 알킬기, 및 C6 내지 C30 아릴기로 이루어진 군에서 선택되는 치환기임), 카르복실기, 할로젠기, 시아노기, 니트로기, 아조기, 및 하이드록시기로 이루어진 군에서 선택되는 치환기로 치환된 것을 의미한다)

청구항 8

삭제

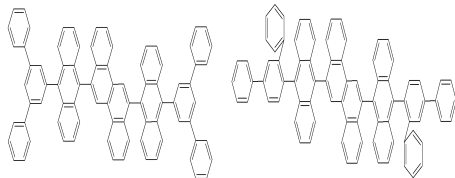
청구항 9

제7항에 있어서,

상기 화학식 5로 표시되는 화합물은 하기 화학식 5-3 내지 5-6에서 선택되는 어느 하나인 유기발광 소자용 화합물.

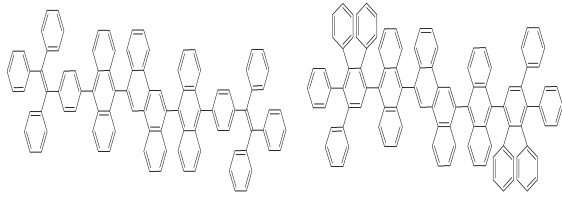
[5-3]

[5-4]



[5-5]

[5-6]



청구항 10

삭제

청구항 11

삭제

청구항 12

삭제

청구항 13

삭제

청구항 14

삭제

청구항 15

삭제

청구항 16

삭제

청구항 17

삭제

청구항 18

삭제

청구항 19

삭제

청구항 20

삭제

청구항 21

삭제

청구항 22

제1항, 제5항, 제7항 및 제9항 중 어느 한 항에 있어서,

상기 유기발광 소자용 화합물은 유기발광 소자용 백색 호스트 재료로 사용되는 유기발광 소자용 화합물.

청구항 23

양극, 음극, 및 상기 양극과 음극 사이에 게재되는 적어도 한 층 이상의 유기 박막층을 포함하는 유기발광 소자에 있어서,

상기 유기 박막층 중 적어도 한 층은 제22항에 따른 유기발광 소자용 화합물을 포함하는 유기발광 소자.

청구항 24

제23항에 있어서,

상기 유기 박막층은 발광층인 유기발광 소자.

청구항 25

제23항에 있어서,

상기 유기발광 소자용 화합물은 백색 유기발광 소자용 화합물인 유기발광 소자.

청구항 26

제25항의 유기발광 소자를 포함하는 표시 장치.

발명의 설명

기술 분야

[0001] 본 발명은 트리플 또는 멀티플 코어 구조를 포함하는 유기발광 소자용 화합물, 이를 채용한 유기발광 소자 및 표시 장치에 관한 것이다.

배경 기술

[0002] 최근 정보 통신 산업의 발달이 가속화됨에 따라 가장 중요한 분야의 하나인 디스플레이 소자 분야에 있어서 보다 고도의 성능이 요구되고 있다. 이러한 디스플레이는 발광형과 비발광형으로 나눌 수 있다.

[0003] 발광형에 속하는 디스플레이로는 음극선관(Cathode Ray Tube: CRT), 전계발광 소자(Electroluminescence Display: ELD), 전기 발광 다이오드(Light Emitting Diode: LED), 플라즈마 소자 패널(Plasma Display Panel: PDP) 등이 있다.

[0004] 비발광형 디스플레이로는 액정디스플레이(Liquid Crystal Display: LCD) 등이 있다.

[0005] 상기 발광형 및 비발광형 디스플레이는 작동 전압, 소비 전력, 밝기 즉 휘도, 콘트라스트, 응답속도, 수명 및 표시색 등의 기본 성능을 가지고 있다. 그러나, 이 중에서 현재까지 많이 쓰이고 있는 액정 디스플레이는 상기한 기본 성능 중에서 응답속도, 콘트라스트 및 시각 의존성에 대하여 문제점을 가지고 있다.

[0006] 일반적으로 ELD라고 불리는 유기 발광 다이오드(Organic LED: OLED)는 LCD, PDP, 전계 방출 디스플레이(Field Emission Display: FED) 등과 함께 대표적인 평판 표시장치 중의 하나로서, 발광을 위한 백라이트가 필요 없고, 박막 및 구부릴 수 있는 형태로 소자 제작이 가능할 뿐만 아니라, 막 제작 기술에 의한 패턴 형성과 대량 생산이 용이한 장점이 있다.

[0007] 또한, 유기발광 소자는 전기장이 적용되는 경우 양극으로부터 주입된 정공과 음극으로부터 주입된 전자의 재결합 에너지에 의해 형광성 물질이 발광하는 원리를 이용한 자발광 소자이므로 휘도 및 시야각 특성이 우수하고, 응답 속도가 빠를 뿐만 아니라, 구동 전압이 낮고, 이론적으로 가시 영역에서의 모든 색상의 발광이 가능한 장점이 있다.

[0008] 이스트만 코닥사의 탕(C. W. Tang) 등에 의한 적층형 소자에 따른 저전압 구동 유기 EL 소자의 보고(문헌 [C.W. Tang, S. A. Vanslyke, Applied Physics Letters, Volume 51, page 913, 1987] 등)가 이루어진 이래, 유기재료를 구성 재료로 하는 유기발광 소자에 관한 연구가 활발히 이루어지고 있다.

[0009] 또한, 발광 재료로서는 트리스(8-퀴놀리노라토)알루미늄 착체 등의 킬레이트 착체, 쿠마린 유도체, 테트라페닐 부타디엔 유도체, 비스스타이릴아릴렌 유도체, 옥사다이아졸 유도체 등의 발광 재료가 알려져 있고, 이들로부터는 청색에서 적색까지의 가시 영역의 발광을 얻을 수 있다고 보고되어 있어 컬러 표시 소자의 실현이 기대되고 있다[일본특허공개공보 제1996-239655호, 일본특허공개공보 제 1995-138561호, 일본특허공개공보 제

1991-200289호].

[0010] 그러나, 백색 발광재료의 경우, 단일의 발광재료로서 real white에 가까운 색좌표를 갖는 발광재료가 없다는 점에서, 백색 발광재료의 개선이 요구되고 있는 실정이다.

발명의 내용

해결하려는 과제

[0011] 상술한 문제점을 해결하기 위하여 본 발명은 분자 내 트리플 또는 멀티플 코어 형태의 구조를 포함하는 유기발광 소자용 화합물, 이를 포함하는 유기발광 소자 및 표시 장치를 제공한다.

[0012] 본 발명의 일 측면은 분자 내 트리플 또는 멀티플 코어 형태의 구조를 포함하는 유기발광 소자용 화합물을 제공하는 것이다.

[0013] 본 발명의 다른 측면은 상기 분자 내 트리플 또는 멀티플 코어 형태의 구조를 포함하는 유기발광 소자용 화합물을 발광층으로 채용한 유기발광 소자를 제공하는 것이다.

[0014] 본 발명의 또다른 측면은 상기 유기 발광 소자를 포함한 표시 장치를 제공하는 것이다.

과제의 해결 수단

[0015] 본 발명의 일 측면은 하기 화학식 1로 표시되는 분자 내 트리플 코어(B-A-B) 구조를 포함하는 유기발광 소자용 화합물을 제공할 수 있다.

[0016] [화학식 1]

[0017] $R_1-(B-A-B)-R_2$

[0018] 상기 화학식 1에서,

[0019] A는 치환 또는 비치환된 2가의 다환계 방향족 환으로서, 상기 2가의 다환계 방향족 환은 안트라센, 파이렌, 페난트렌, 트리페닐렌, 페릴렌, 펜타센, 크리센 및 플루오렌으로 이루어진 군에서 선택되는 어느 하나이며; B는 치환 또는 비치환된 1가 또는 2가의 다환계 방향족 환으로서, 상기 1가 또는 2가의 다환계 방향족 환은 안트라센, 파이렌, 페난트렌, 트리페닐렌, 페릴렌, 펜타센, 크리센 및 플루오렌으로 이루어진 군에서 선택되는 어느 하나이며; R_1 및 R_2 는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C25 아릴기, 치환 또는 비치환된 C4 내지 C25 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 아민기 및 치환 또는 비치환된 플루오렌기로 이루어진 군에서 선택되는 어느 하나일 수 있다.

[0020] 본 발명의 일 측면은 상기 A 및 B가 동일한 유기발광 소자용 화합물 또는 상기 A 및 B가 서로 상이한 유기발광 소자용 화합물을 제공할 수 있다.

[0021] 본 발명의 일 측면은 상기 A가 치환 또는 비치환된 2가의 파이렌 또는 크리센이고, 상기 B가 치환 또는 비치환된 1가 또는 2가의 안트라센인 유기발광 소자용 화합물을 제공할 수 있다.

[0022] 본 발명의 일 측면은 상기 R_1 및 R_2 가 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 페닐, 치환 또는 비치환된 바이페닐, 치환 또는 비치환된 트라이페닐, 치환 또는 비치환된 나프틸, 치환 또는 비치환된 페난트렌, 치환 또는 비치환된 파이렌, 치환 또는 비치환된 피리딘, 치환 또는 비치환된 바이피리딘, 치환 또는 비치환된 아민, 치환 또는 비치환된 트리아진 및 치환 또는 비치환된 플루오렌으로 이루어진 군에서 선택되는 유기발광 소자용 화합물을 제공할 수 있다.

[0023] 본 발명의 일 측면은 하기 화학식 7로 표시되는 분자 내 멀티플 코어(E-D-C-D-E) 구조를 포함하는 유기발광 소자용 화합물일 수 있다.

[0024] [화학식 7]

[0025] $R_{13}-(E-D-C-D-E)-R_{14}$

[0026] 상기 화학식 7에서,

[0027] C 및 D는 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 2가의 방향족 환으로서, 상기 2가의 방향족 환은 안트라센, 파

이렌, 페난트렌, 트리페닐렌, 페틸렌, 펜타센, 크리센 및 플루오렌으로 이루어진 군에서 선택되는 어느 하나이고, E는 치환 또는 비치환된 1가 또는 2가의 방향족 환으로서, 상기 1가 또는 2가의 방향족 환은 벤젠, 파이렌, 페난트렌, 및 플루오렌으로 이루어진 군에서 선택되는 어느 하나이며, R₁₃ 및 R₁₄는 서로 독립적으로, 수소원자, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C25 아릴기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C25 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 아민기 및 치환 또는 비치환된 플루오렌기로 이루어진 군에서 선택되는 어느 하나일 수 있다.

[0028] 본 발명의 일 측면은 상기 C 및 D가 동일하고, 상기 E는 상기 C 및 D와 상이한 유기발광 소자용 화합물 또는 상기 C 및 E가 동일하고, 상기 D는 상기 C 및 E와 상이한 유기발광 소자용 화합물 또는 상기 C, D, 및 E가 모두 상이한 유기발광 소자용 화합물일 수 있다.

[0029] 본 발명의 일 측면은 상기 C가 2가의 파이렌 또는 크리센이고, 상기 D가 2가의 안트라센이며, 상기 E는 1가 또는 2가의 벤젠인 유기발광 소자용 화합물일 수 있다.

[0030] 본 발명의 일 측면은 상기 R₁₃ 및 R₁₄가 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 페닐, 치환 또는 비치환된 바이페닐, 치환 또는 비치환된 트라이페닐, 치환 또는 비치환된 나프틸, 치환 또는 비치환된 페난트렌, 치환 또는 비치환된 파이렌, 치환 또는 비치환된 피리딘, 치환 또는 비치환된 바이피리딘, 치환 또는 비치환된 아민, 치환 또는 비치환된 트리아진 및 치환 또는 비치환된 플루오렌으로 이루어진 군에서 선택되는 것인 유기발광 소자용 화합물일 수 있다.

[0031] 본 발명의 일 측면은 유기발광 소자용 청색 또는 백색 호스트 재료로 사용되는 유기발광 소자용 화합물일 수 있다.

[0032] 본 발명의 다른 일 측면은 양극, 음극, 및 상기 양극과 음극 사이에 개재되는 적어도 한 층 이상의 유기 박막층을 포함하는 유기발광 소자에 있어서, 상기 유기 박막층 중 적어도 한 층은 상기 유기발광 소자용 화합물을 포함하는 유기발광 소자일 수 있다.

[0033] 본 발명의 다른 일 측면은 상기 유기 박막층이 발광층인 유기발광 소자일 수 있다.

[0034] 본 발명의 또다른 일 측면은 상기 유기발광 소자를 포함하는 표시 장치일 수 있다.

발명의 효과

[0035] 본 발명에 따라, 분자 내 트리플 또는 멀티플 코어 형태의 구조를 포함하는 화합물은 단일 코어의 화합물 대비, excimer intensity 및 excimer peak를 조절하여 real white에 가까운 색좌표를 갖는 발광재료를 용이하게 제공할 수 있으며, 입체적 장애를 유도할 수 있는 알킬기 등의 치환기를 추가 도입함으로써 Excimer 생성을 억제하여 역시 청색 발광재료로도 발광색깔을 용이하게 조절할 수도 있다.

[0036] 이에, 본 발명의 트리플 또는 멀티플 코어 형태로 결합된 구조의 화합물을 발광층으로 채용함으로써, 청색뿐만 아니라 real white에 가까운 색좌표를 갖는 유기발광 소자 및 표시 장치를 제공할 수 있다.

도면의 간단한 설명

[0037] 도 1은 본 발명의 일 측면에 따른 유기발광 소자의 단면도를 나타낸 것이다.

도 2는 본 발명의 일 측면에 따른 용액(농도: 1×10^{-5} , 용매: THF)상태의 화합물(화학식 [2-1], [2-2], [2-5], [3-1], [3-3], [5-1], [5-3])의 파장에 따른 UV 흡광도 그래프를 나타낸 것이다.

도 3은 본 발명의 일 측면에 따른 용액(농도: 1×10^{-5} , 용매: THF, 필터: 1%T attenuator)상태의 화합물(화학식 [2-1], [2-2], [2-5], [3-1], [3-3], [5-1], [5-3])의 파장에 따른 PL(photoluminescence) intensity 그래프를 나타낸 것이다.

도 4는 본 발명의 일 측면에 따른 박막(두께: 50nm)상태의 화합물(화학식 [2-1], [2-2], [2-5], [3-1], [3-3], [5-1], [5-3])의 파장에 따른 UV 흡광도 그래프를 나타낸 것이다.

도 5는 본 발명의 일 측면에 따른 박막(두께: 50nm)상태의 화합물(화학식 [2-1], [2-2], [2-5], [3-1], [3-3], [5-1], [5-3])의 파장에 따른 PL(photoluminescence) intensity 그래프를 나타낸 것이다.

도 6은 본 발명의 일 측면에 따른 화합물(화학식 [2-5])을 이용하여 제조한 박막(두께: 50nm, 필터: 430nm cut-

off)을 나타낸 것이다.

도 7은 본 발명의 일 측면에 따른 화합물(화학식 [2-1], [2-2], [2-5])을 발광층에 적용한 유기발광 소자의 normalization이 된 EL intensity-과장 그래프로, 치환기에 따른 excimer intensity의 변화를 나타낸 것이다.

도 8은 본 발명의 일 측면에 따른 화합물(화학식 [2-5], [3-3], [5-3])을 발광층에 적용한 유기발광 소자의 normalization이 된 EL intensity-과장 그래프로, 중심 코어에 따른 excimer peak의 shift를 나타낸 것이다.

도 9는 본 발명의 일 측면에 따른 화합물(화학식 [2-1], [2-2], [2-5], [3-1], [3-3], [5-1], [5-3])을 발광층에 적용한 유기발광 소자의 전압에 따른 전류 밀도/휘도 그래프를 나타낸 것이다.

도 10은 본 발명의 일 측면에 따른 화합물(화학식 [2-1], [2-2], [2-5], [3-1], [3-3], [5-1], [5-3])을 발광층에 적용한 유기발광 소자의 전류 밀도에 따른 발광 효율을 나타낸 것이다.

도 11은 본 발명의 일 측면에 따른 화합물(화학식 [2-1], [2-2], [2-5], [3-1], [3-3], [5-1], [5-3])을 발광층에 적용한 유기발광 소자의 전류 밀도에 따른 전력 효율을 나타낸 것이다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

[0038] 이하, 첨부한 도면을 참조하여 본 발명의 구현예에 대하여 본 발명이 속하는 기술분야에서 통상의 지식을 가진 자가 용이하게 실시할 수 있도록 상세히 설명한다. 그러나 본 발명은 여러 가지 상이한 형태로 구현될 수 있으며 여기에서 설명하는 구현예에 한정되지 않는다.

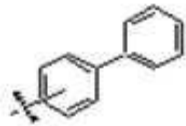
[0039] 본 명세서에서 "치환된"이란 별도의 정의가 없는 한, 적어도 하나의 수소원자가 중수소, C1 내지 C30 알킬기, C6 내지 C36 아릴기, C2 내지 C30 헤테로아릴기, C1 내지 C30 알콕시기, C2 내지 C30 알케닐기, C6 내지 C30 아릴옥시기, C3 내지 C40 실릴옥시기, C1 내지 C30 아실기, C2 내지 C30 아실옥시기, C2 내지 C30 헤테로아릴옥시기, C1 내지 C30 술포닐기, C1 내지 C30 알킬티올기, C6 내지 C30 아릴티올기, C1 내지 C30 헤테로시클로티올기, C1 내지 C30 인산아마이드기, C3 내지 C40 실릴기, NRR'(여기에서, R 및 R'은 각각 독립적으로, 수소 원자, C1 내지 C30 알킬기, 및 C6 내지 C30 아릴기로 이루어진 군에서 선택되는 치환기임), 카르복실기, 할로젠기, 시아노기, 니트로기, 아조기, 및 하이드록시기로 이루어진 군에서 선택되는 치환기로 치환된 것을 의미한다.

[0040] 또한, 본 명세서에서 "헤테로"란 별도의 정의가 없는 한, 하나의 고리 내에 N, O, S, 및 P로 이루어진 군에서 선택되는 헤테로 원자를 1 내지 3개 함유하고, 나머지는 탄소인 것을 의미한다.

[0041] 또한, 본 명세서에서 코어란 화합물의 주요 구조를 이루는 단위를 말하는 것으로, 본 명세서에서는 A, B, C, D, E로 표시된다. 본 발명의 코어는 나프탈렌을 포함하지 않는다.

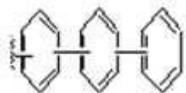
[0042] 또한, 본 명세서에서 1가의 방향족 환이란 방향족 환을 이루는 탄소 중 어느 하나가 수소가 아닌 다른 원소와 결합을 이루고 있는 것을 의미하며, 구체적으로, 페닐, 및 하기 화학식 a1 내지 a3로 이루어진 군에서 선택되는 어느 하나일 수 있다.

[0043] [화학식 a1]



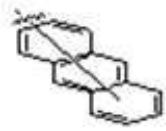
[0044]

[0045] [화학식 a2]



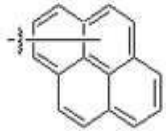
[0046]

[0047] [화학식 a3]



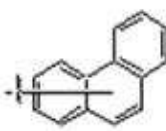
[0048]

[0049] [화학식 a4]



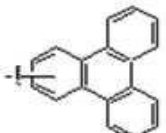
[0050]

[0051] [화학식 a5]



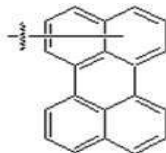
[0052]

[0053] [화학식 a6]



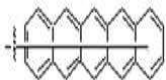
[0054]

[0055] [화학식 a7]



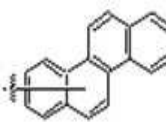
[0056]

[0057] [화학식 a8]



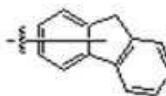
[0058]

[0059] [화학식 a9]



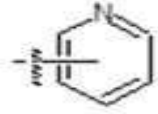
[0060]

[0061] [화학식 a10]



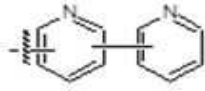
[0062]

[0063] [화학식 a11]



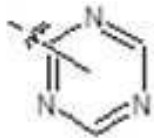
[0064]

[0065] [화학식 a12]



[0066]

[0067] [화학식 a13]

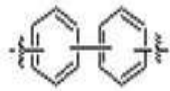


[0068]

[0069] 상기 1가의 방향족 환은 또다른 치환기로 더 치환될 수 있다.

[0070] 또한, 본 명세서에서 2가의 방향족 환이란 방향족 환을 이루는 탄소 중 어느 두 탄소가 수소가 아닌 다른 원소와 결합을 이루고 있는 것을 의미하며, 구체적으로, 페닐렌, 및 하기 화학식 b1 내지 b18로 이루어진 군에서 선택되는 어느 하나일 수 있다.

[0071] [화학식 b1]



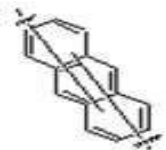
[0072]

[0073] [화학식 b2]



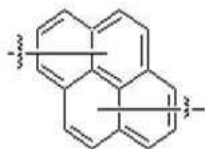
[0074]

[0075] [화학식 b3]



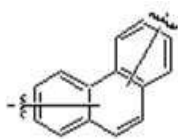
[0076]

[0077] [화학식 b4]



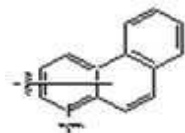
[0078]

[0079] [화학식 b5]



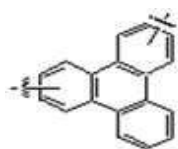
[0080]

[0081] [화학식 b6]



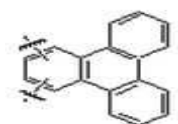
[0082]

[0083] [화학식 b7]



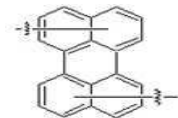
[0084]

[0085] [화학식 b8]



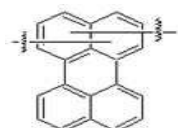
[0086]

[0087] [화학식 b9]



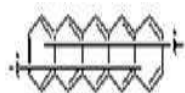
[0088]

[0089] [화학식 b10]



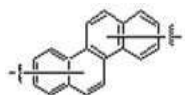
[0090]

[0091] [화학식 b11]



[0092]

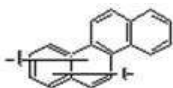
[0093] [화학식 b12]



[0094]

[0095]

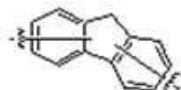
[화학식 b13]



[0096]

[0097]

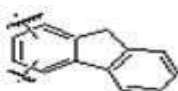
[화학식 b14]



[0098]

[0099]

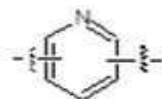
[화학식 b15]



[0100]

[0101]

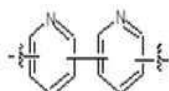
[화학식 b16]



[0102]

[0103]

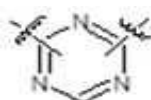
[화학식 b17]



[0104]

[0105]

[화학식 b18]



[0106]

[0107]

상기 2가의 방향족 환은 또다른 치환기로 더 치환될 수 있다.

[0108]

도면에서 여러 층 및 영역을 명확하게 표현하기 위하여 두께를 확대하여 나타내었다. 명세서 전체를 통하여 유사한 부분에 대해서는 동일한 도면 부호를 붙였다. 층, 막, 영역, 판 등의 부분이 다른 부분 "위에" 있다고 할 때, 이는 다른 부분 "바로 위에" 있는 경우 뿐만 아니라 그 중간에 또 다른 부분이 있는 경우도 포함한다. 반대로 어떤 부분이 다른 부분 "바로 위에" 있다고 할 때에는 중간에 다른 부분이 없는 것을 뜻한다.

[0109]

이하에서 본 발명을 상세하게 설명하기로 한다.

[0110]

본 발명의 일 측면은 하기 화학식 1로 표시되는 분자 내 트리플 코어 형태의 구조를 포함하는 유기발광 소자용 화합물을 제공한다.

화학식 1



[0111]

[0112]

상기 화학식 1에서,

[0113]

A는 치환 또는 비치환된 2가의 다환계 방향족 환으로서, 상기 2가의 다환계 방향족 환은 안트라센, 피이렌, 페

난트렌, 트리페닐렌, 페틸렌, 펜타센, 크리센 및 플루오렌으로 이루어진 군에서 선택되는 어느 하나일 수 있고;

[0114] B는 치환 또는 비치환된 1가 또는 2가의 다환계 방향족 환으로서, 상기 1가 또는 2가의 다환계 방향족 환은 안트라센, 파이렌, 페난트렌, 트리페닐렌, 페틸렌, 펜타센, 크리센 및 플루오렌으로 이루어진 군에서 선택되는 어느 하나일 수 있으며;

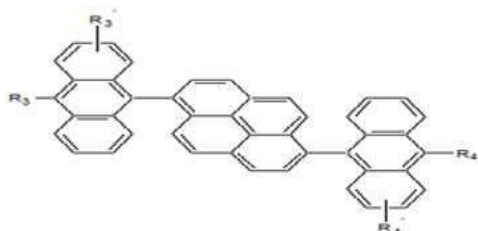
[0115] R_1 및 R_2 는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C25 아릴기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C25 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 아민기 및 치환 또는 비치환된 플루오렌기로 이루어진 군에서 선택되는 어느 하나일 수 있다.

[0116] 상기 화학식 1에서, 구체적으로 A는 치환 또는 비치환된 2가의 안트라센, 파이렌, 크리센 및 페틸렌으로 이루어진 군에서 선택되는 어느 하나일 수 있고, B는 치환 또는 비치환된 1가 또는 2가의 안트라센일 수 있다. 보다 구체적으로는 A가 2가의 파이렌 또는 크리센일 수 있고, B가 1가 또는 2가의 안트라센일 수 있다. 화학식 1의 A가 파이렌 또는 크리센, B가 안트라센인 화합물이 발광층에 적용된 유기전기소자는 그렇지 않은 화합물이 발광층에 적용된 유기전기소자에 비해 real white에 가까운 색좌표를 가질 수 있으며, B가 t-부틸기로 치환 또는 비치환된 1가 또는 2가의 안트라센인 경우 청색 발광 소자로도 사용될 수 있다. 구체적으로, 화학식 1의 A가 파이렌 또는 크리센, B가 t-부틸기로 치환된 안트라센인 화합물이 발광층에 적용된 유기전기소자는 보다 효과적인 청색 발광 소자로 사용될 수 있다.

[0117] 또한, 상기 화학식 1에서, 구체적으로 R_1 또는 R_2 는 각각 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 페닐, 치환 또는 비치환된 바이페닐, 치환 또는 비치환된 트라이페닐, 치환 또는 비치환된 나프틸, 치환 또는 비치환된 페난트렌, 치환 또는 비치환된 파이렌, 치환 또는 비치환된 피리딘, 치환 또는 비치환된 바이피리딘, 치환 또는 비치환된 아민, 치환 또는 비치환된 트리아진 및 치환 또는 비치환된 플루오렌으로 이루어진 군에서 선택될 수 있다.

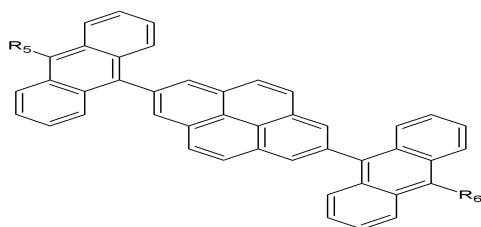
[0118] 또한, 상기 화학식 1은 구체적으로 하기 화학식 2 내지 화학식 6 중 어느 하나로 표시될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

화학식 2



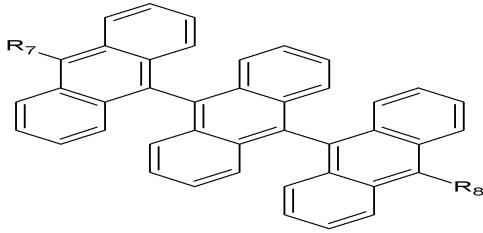
[0119]

화학식 3



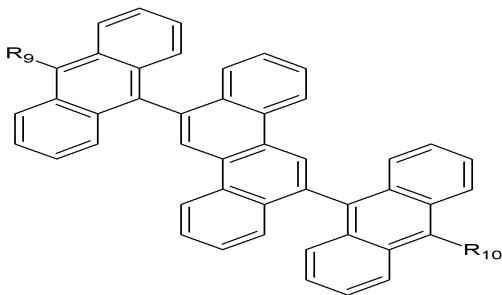
[0120]

화학식 4



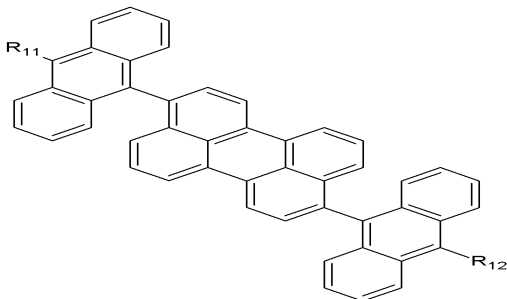
[0121]

화학식 5



[0122]

화학식 6



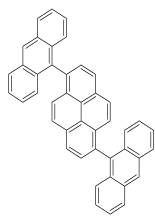
[0123]

[0124] 상기 화학식 2 내지 화학식 6에서,

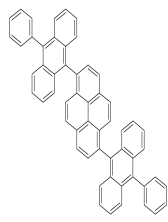
[0125] R₃ 내지 R₁₂, R₃' , 및 R₄'은 각각 독립적으로, 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C25 아릴기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C25 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 아민기 및 치환 또는 비치환된 플루오렌기로 이루어진 군에서 선택되는 어느 하나일 수 있다.

[0126] 상기 화학식 2, 3, 4, 5, 및 6으로 표시되는 화합물은 각각 하기 화학식 2-1 내지 2-14, 3-1 내지 3-12, 4-1 내지 4-11, 5-1 내지 5-12, 및 6-1 내지 6-11에서 선택되는 어느 하나일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0127] [2-1] [2-2] [2-3] [2-4]



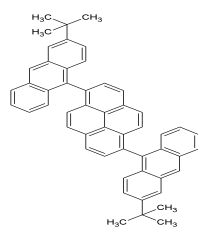
[0128]



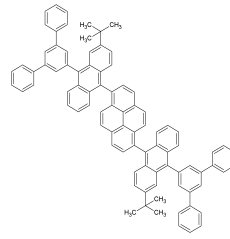
[0129]

[2-5]

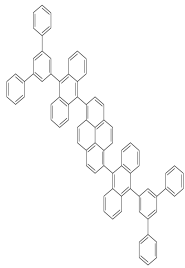
[2-6]



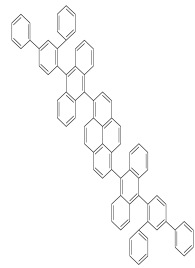
[2-7]



[2-8]



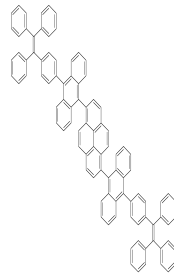
[0130]



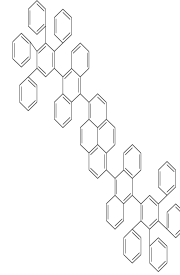
[0131]

[2-9]

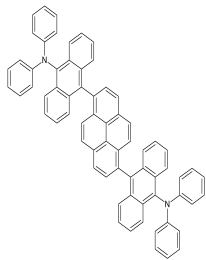
[2-10]



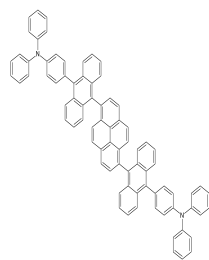
[2-11]



[2-12]



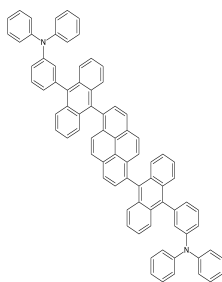
[0132]



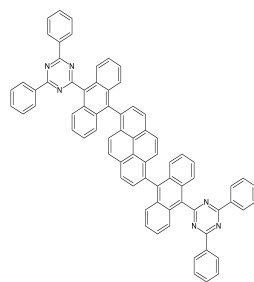
[0133]

[2-13]

[2-14]



[0134]



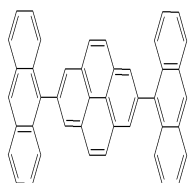
[0135]

[3-1]

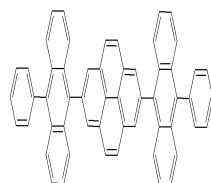
[3-2]

[3-3]

[3-4]



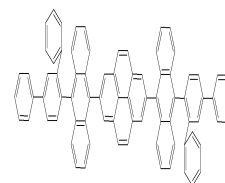
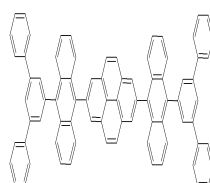
[0136]

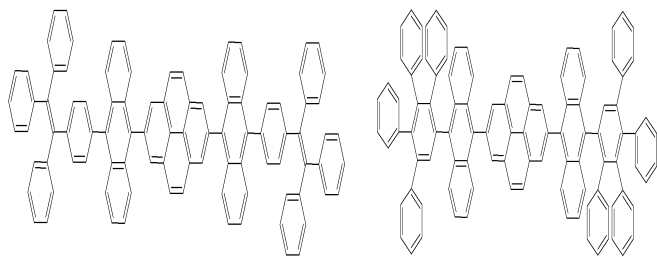


[0137]

[3-5]

[3-6]





[0138]

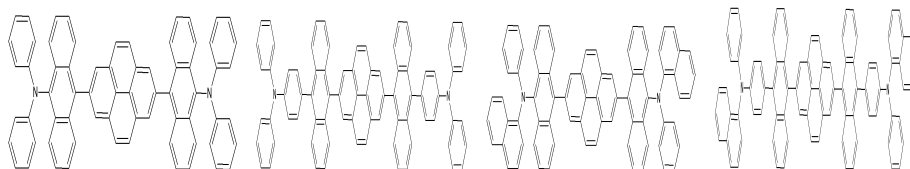
[0139]

[3-7]

[3-8]

[3-9]

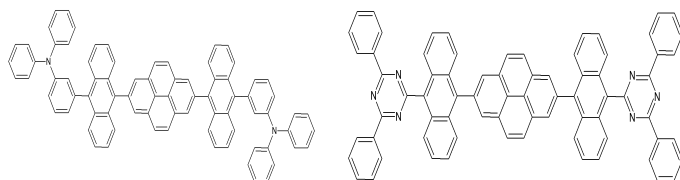
[3-10]



[0140]

[3-11]

[3-12]



[0141]

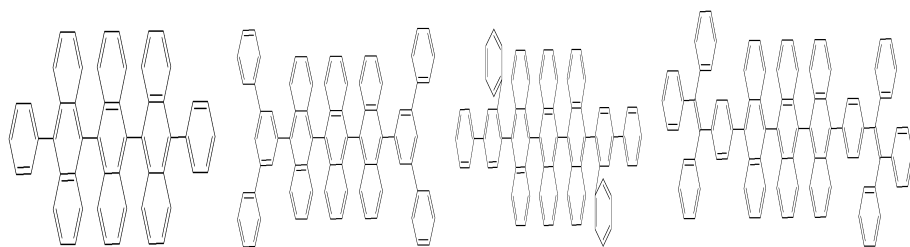
[0142]

[4-1]

[4-2]

[4-3]

[4-4]



[0143]

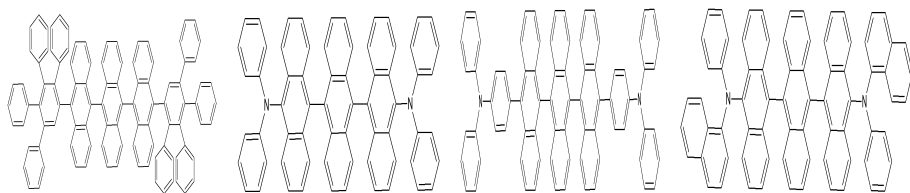
[0144]

[4-5]

[4-6]

[4-7]

[4-8]



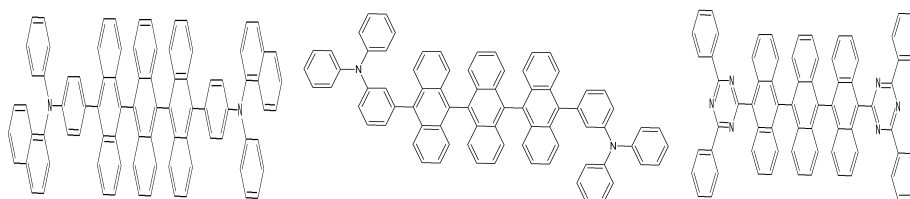
[0145]

[0146]

[4-9]

[4-10]

[4-11]



[0147]

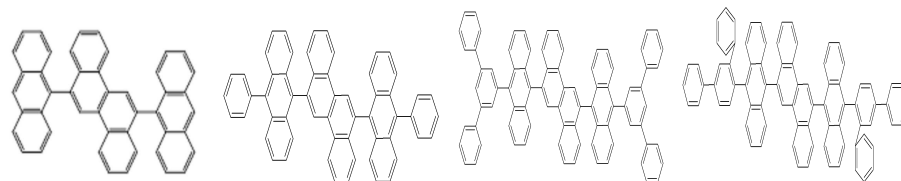
[0148]

[5-1]

[5-2]

[5-3]

[5-4]



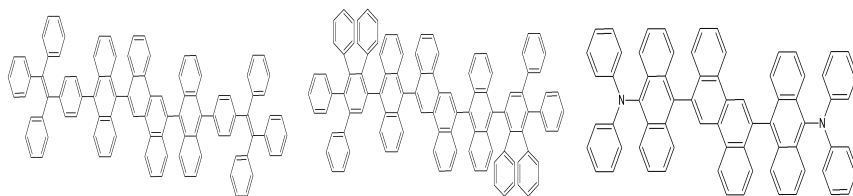
[0149]

[0150]

[5-5]

[5-6]

[5-7]



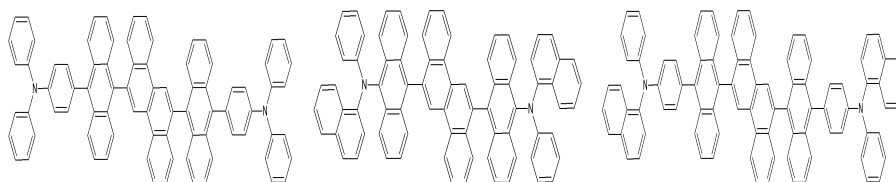
[0151]

[0152]

[5-8]

[5-9]

[5-10]

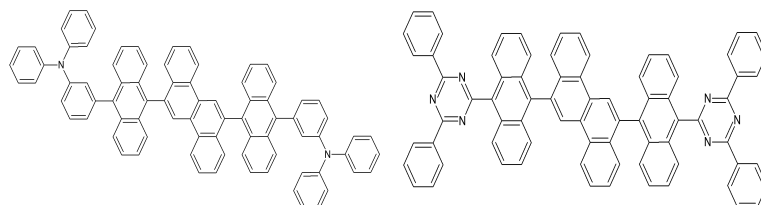


[0153]

[0154]

[5-11]

[5-12]



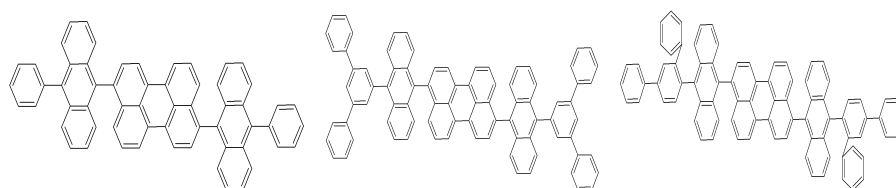
[0155]

[0156]

[6-1]

[6-2]

[6-3]



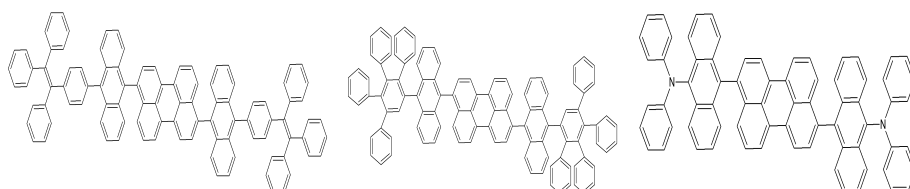
[0157]

[0158]

[6-4]

[6-5]

[6-6]



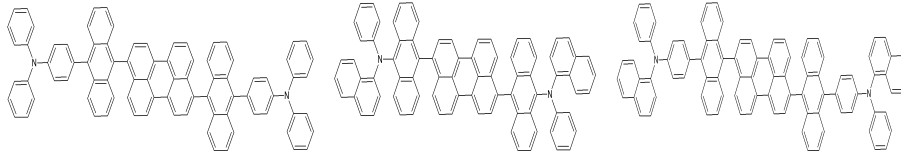
[0159]

[0160]

[6-7]

[6-8]

[6-9]

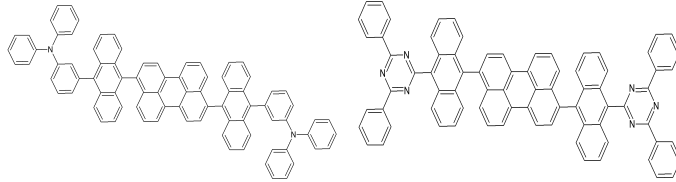


[0161]

[0162]

[6-10]

[6-11]

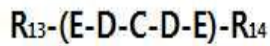


[0163]

[0164]

또한, 본 발명의 일 측면은 하기 화학식 7로 표시되는 분자 내 멀티플 코어 형태의 구조를 포함하는 유기발광 소자용 화합물을 제공한다.

화학식 7



[0165]

[0166]

상기 화학식 7에서,

[0167]

C 및 D는 서로 독립적으로, 치환 또는 비치환된 2가의 방향족 환으로서, 상기 2가의 방향족 환은 안트라센, 파이렌, 페난트렌, 트리페닐렌, 페릴렌, 펜타센, 크리센 및 플루오렌으로 이루어진 군에서 선택되는 어느 하나일 수 있고;

[0168]

E는 치환 또는 비치환된 1가 또는 2가의 방향족 환으로서, 상기 1가 또는 2가의 방향족 환은 벤젠, 파이렌, 페난트렌, 및 플루오렌으로 이루어진 군에서 선택되는 어느 하나일 수 있으며;

[0169]

R₁₃ 및 R₁₄는 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C25 아틸기, 치환 또는 비치환된 C2 내지 C25 헤테로아틸기, 치환 또는 비치환된 아민기 및 치환 또는 비치환된 플루오렌기로 이루어진 군에서 선택되는 어느 하나일 수 있다.

[0170]

상기 화학식 7에서, 구체적으로 C는 2가의 안트라센, 파이렌, 크리센 및 페릴렌으로 이루어진 군에서 선택되는 어느 하나일 수 있고, D는 2가의 안트라센일 수 있다. 보다 구체적으로 C는 2가의 파이렌 또는 크리센일 수 있고, D는 2가의 안트라센, E는 1가 또는 2가의 벤젠일 수 있다. 화학식 7의 C가 파이렌 또는 크리센, D가 안트라센, E가 벤젠인 화합물이 발광층에 적용된 유기전기소자는 그렇지 않은 화합물이 발광층에 적용된 유기전기소자에 비해 real white에 가까운 색좌표를 가질 수 있으며, D가 B가 t-부틸기로 치환된 안트라센인 경우 청색 발광 소자로도 사용될 수 있다.

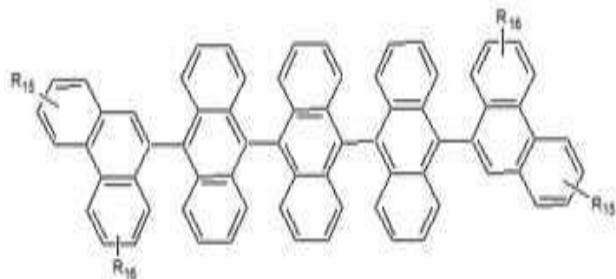
[0171]

또한, 상기 화학식 7에서, 구체적으로 R₁₃ 및 R₁₄는 각각 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 페닐, 치환 또는 비치환된 바이페닐, 치환 또는 비치환된 트라이페닐, 치환 또는 비치환된 나프틸, 치환 또는 비치환된 페난트렌, 치환 또는 비치환된 파이렌, 치환 또는 비치환된 피리딘, 치환 또는 비치환된 바이피리딘, 치환 또는 비치환된 아민, 치환 또는 비치환된 트리아진 및 치환 또는 비치환된 플루오렌으로 이루어진 군에서 선택될 수 있다.

[0172]

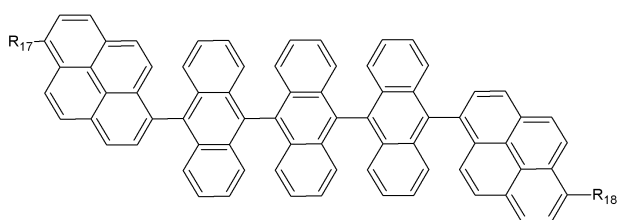
또한, 상기 화학식 7은 구체적으로 하기 화학식 8 내지 화학식 22 중 어느 하나로 표시될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

화학식 8



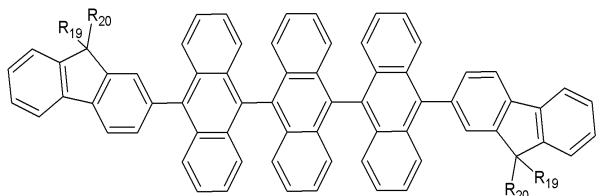
[0173]

화학식 9



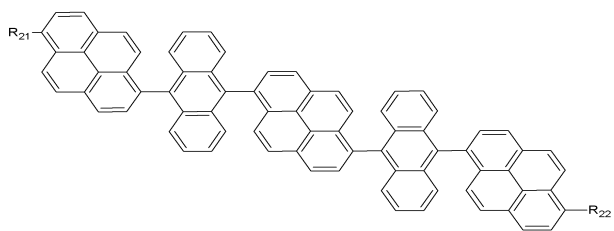
[0174]

화학식 10



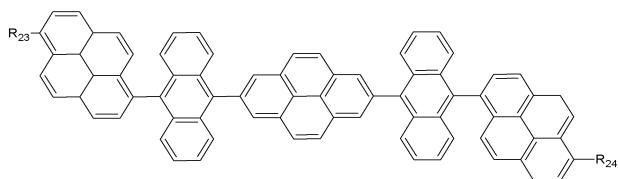
[0175]

화학식 11



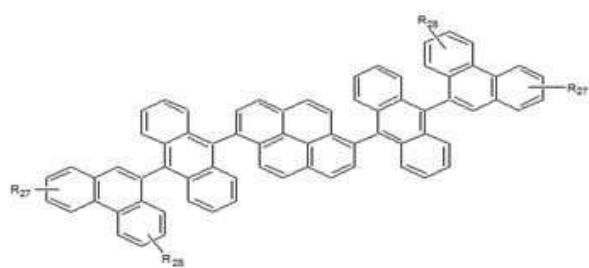
[0176]

화학식 12



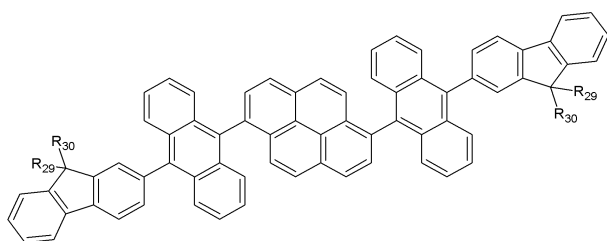
[0177]

화학식 13



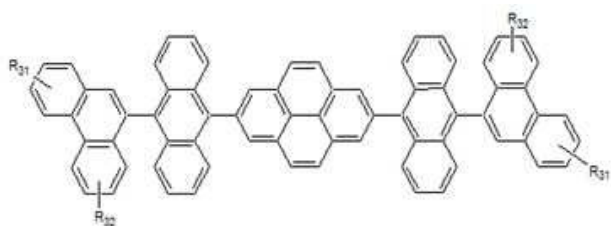
[0178]

화학식 14



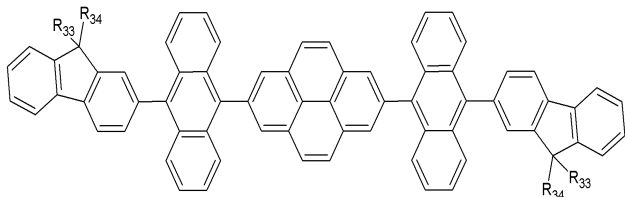
[0179]

화학식 15



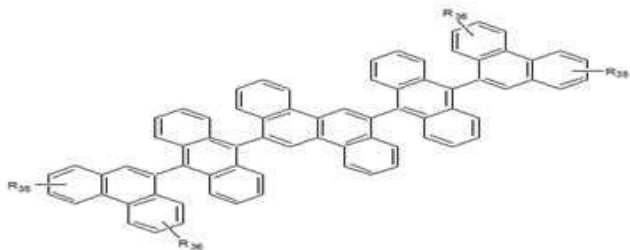
[0180]

화학식 16



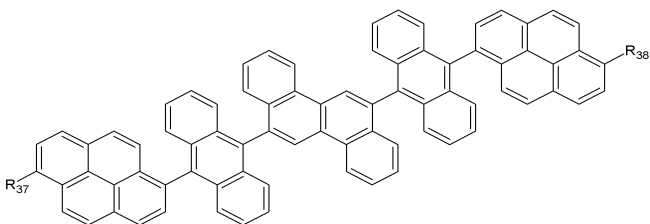
[0181]

화학식 17



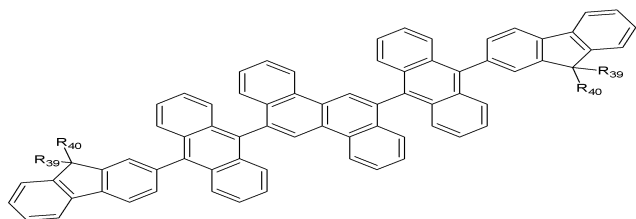
[0182]

화학식 18



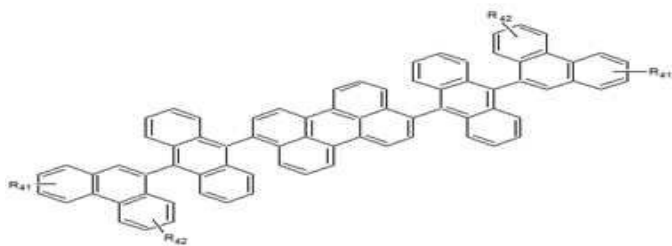
[0183]

화학식 19



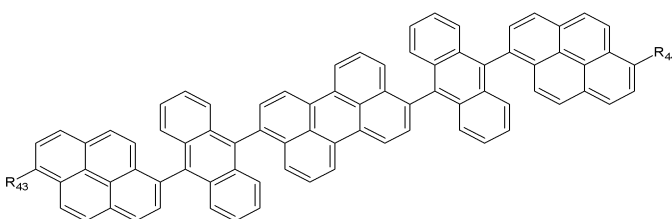
[0184]

화학식 20



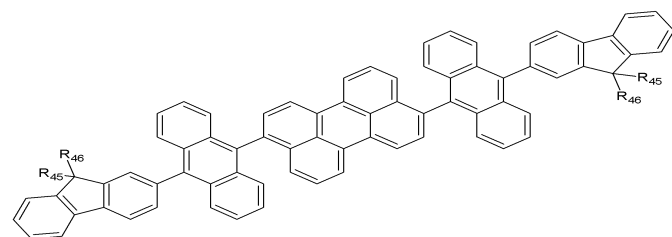
[0185]

화학식 21



[0186]

화학식 22

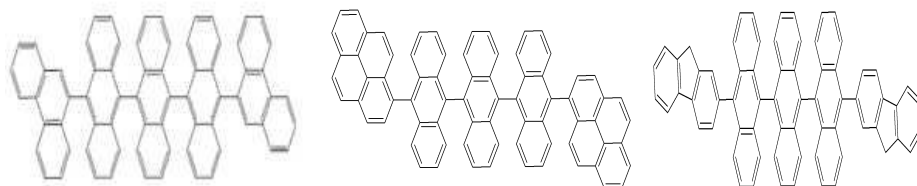


[0187]

[0188] R₁₅ 내지 R₂₄, 및 R₂₇ 내지 R₄₆은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C₆ 내지 C₂₅ 아릴기, 치환 또는 비치환된 C₂ 내지 C₂₅ 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 아민기 및 치환 또는 비치환된 플루오렌기로 이루어진 군에서 선택되는 어느 하나일 수 있다.

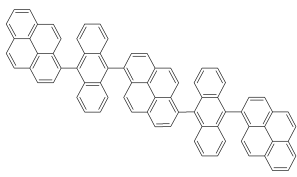
[0189] 상기 화학식 8 내지 22로 표시되는 화합물은 각각 하기 화학식 8-1 내지 화학식 22-1로 표시되는 화합물일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0190] [8-1] [9-1] [10-1]

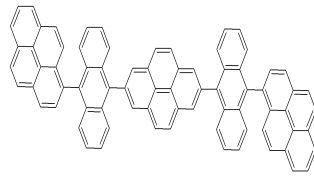


[0191]

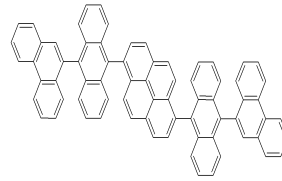
[0192] [11-1] [12-1] [13-1]



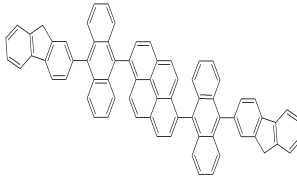
[14-1]



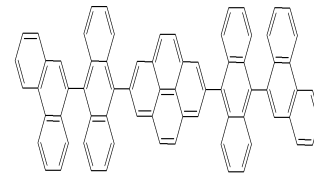
[15-1]



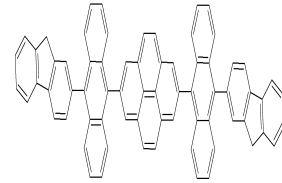
[16-1]



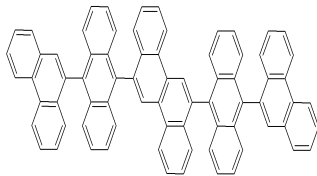
[17-1]



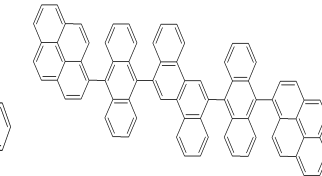
[18-1]



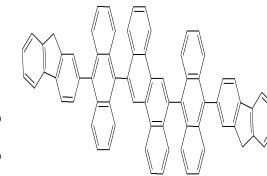
[19-1]



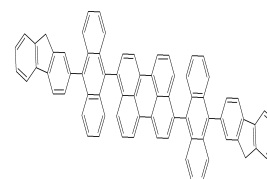
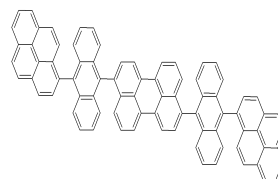
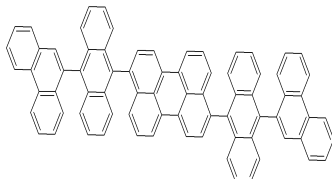
[20-1]



[21-1]



[22-1]



[0193]

[0194]

[0195]

[0196]

[0197]

[0198]

[0199]

[0200]

[0201]

[0202]

[0203]

[0204]

[0205]

[0206]

본 발명의 일 측면에 따른 유기발광 소자용 화합물은 '분자 내 트리플 또는 멀티플 코어 구조'를 포함하는 것을 특징으로 한다.

이에, 본 발명의 트리플 또는 멀티플 코어로서 선정될 수 있는 물질은 공지된 단일종의 발광재료라면 적용할 수 있으며, 본 발명은 상기 단일종의 발광재료가 동일하거나 또는 독립적으로 결합되어 트리플 또는 멀티플 코어 형태의 구조를 포함한다.

본 발명의 트리플 또는 멀티플 코어를 포함하는 물질은 단일종의 발광재료와는 달리 excimer peak를 가지는데, 트리플 또는 멀티플 코어에 치환기가 추가됨에 따라 excimer peak의 intensity가 증가하고(도 7 참고), 중심 코어의 종류에 따라 excimer peak의 shift가 일어나게 된다(도 8 참고). 따라서, 치환기의 갯수 또는 중심코어의 종류를 달리 함으로써 excimer peak의 intensity와 shift를 조절할 수 있고, 이에 의해 real white에 가까운 색좌표 값을 갖는 발광재료를 얻을 수 있다.

또한, 본 발명의 트리플 또는 멀티플 코어를 포함하는 물질은 t-부틸기 등의 알킬기를 추가 도입함으로써 청색 발광 재료로도 사용할 수 있다.

본 발명의 다른 측면은 양극, 음극, 및 상기 양극과 음극 사이에 개재되는 적어도 한 층 이상의 유기 박막층을 포함하는 유기발광 소자에 있어서, 상기 유기 박막층 중 적어도 어느 한 층은 상기한 본 발명의 일 측면에 따른 화합물을 포함하는 유기발광 소자를 제공한다.

상기 본 발명의 일 측면에 따른 화합물은 발광층인 유기 박막층에 포함될 수 있다. 또한 정공주입층, 정공수송층, 전자주입층, 전자수송층, 및 이들의 조합으로 이루어진 균에서 선택되는 유기박막층에 포함될 수 있다.

양극, 음극, 및 상기 양극과 음극 사이에 개재되는 유기 박막층을 포함하는 유기발광 소자는 양극, 발광층, 및 음극을 포함하는 가장 일반적인 소자 구성을 가질 수 있다. 뿐만 아니라, 상기 유기발광 소자의 유기 박막층으

로서 계면층, 정공수송층, 및 전자수송층을 선택적으로 더욱 포함하여 구성될 수 있다. 이 때, 상기 계면층은 정공주입층, 정공차단층, 전자주입층, 전자차단층과 같은 버퍼층을 의미하는 것이다.

[0207] 도 1은 본 발명의 일 구현예에 따른 유기광전소자의 단면도를 모식적으로 나타낸 도면이다. 도 1은 기판(11), 양극(12), 정공수송층(13), 발광층(14), 전자수송층(15), 및 음극(16)으로 구성된 유기광전소자의 구조를 나타낸다.

[0208] 도 1을 참조하여 상기 화합물을 이용하여 유기광전소자를 제조하는 방법을 설명하면 다음과 같다.

[0209] 먼저, 기판(11) 상부에 양극(12)용 물질을 코팅한다.

[0210] 여기서, 기판(11)으로는 통상적인 유기발광 소자에서 사용되는 기판을 사용하는데, 투명성, 표면 평활성, 취급 용이성, 및 방수성이 우수한 유리기판, 또는 투명 플라스틱 기판이 사용될 수 있다.

[0211] 또한, 상기 양극(12)용 물질로는 투명하고 전도성이 우수한 산화인듐주석(ITO), 산화주석(SnO₂), 산화아연(ZnO) 등이 사용될 수 있다.

[0212] 다음으로, 정공수송층(13)이 양극(12) 상부에 진공증착, 스퍼터링, 또는 스핀코팅을 이용하여 형성될 수 있고, 상기 정공수송층(13) 위에 발광층(14)이 진공 증착 또는 스핀코팅, 잉크젯 프린팅 등의 용액코팅법을 이용해 형성될 수 있다.

[0213] 또한, 전자수송층(15)이 음극(16)이 형성되기 전에 발광층(14)의 상부에 형성된다.

[0214] 이때, 상기 발광층(14), 정공수송층(13), 및 전자수송층(15)의 두께는 당분야에서 사용하는 범위로 형성하는 바, 특별히 한정하지 않지만, 상기 발광층(14)의 두께는 구체적으로 5 nm 내지 1 μm이고, 더욱 구체적으로는 10 내지 500 nm이다.

[0215] 상기 전자수송층(15)에는 통상적인 전자수송층(15) 형성용 물질을 사용하여 진공증착, 스퍼터링, 또는 스핀코팅을 이용하여 형성될 수 있다.

[0216] 상기 정공수송층(13) 및 전자수송층(15)은 운반자들을 발광층(14)으로 효율적으로 전달시켜 줌으로써, 발광층(14) 내에서 발광 결합의 확률을 높이는 역할을 한다.

[0217] 본 발명에서 사용 가능한 정공수송층(13) 형성 물질은 특별히 제한되지는 않으나, NPB(N, N-di(naphthalene-1-yl)-N, N-diphenyl-benzidine), 폴리(스티렌설포닉에시드)(PSS)층으로 도핑된 폴리(3,4-에틸렌디옥시-티오펜)(PEDOT)인 PEDOT: PSS, N,N'-비스(3-메틸페닐)-N,N-디페닐-[1,1'-비페닐]-4,4'-디아민(TPD) 등이 사용될 수 있다.

[0218] 본 발명에서 사용 가능한 전자수송층(15) 형성 물질은 특별히 제한되지는 않으나, 알루미늄 트리하이드록시퀴놀린(aluminum trihydroxyquinoline, Alq₃), 1,3,4-옥사디아졸 유도체인 2-(4-바이페닐일-5-페닐-1,3,4-옥사디아졸(2-(4-biphenyl)-5-phenyl-1,3,4-oxadiazole, PBD), 퀴놀살린 유도체인 1,3,4-트리스[(3-페닐-6-트리플루오로메틸)퀴놀살린-2-일]벤젠(1,3,4-tris[(3-phenyl-6-trifluoromethyl)quinoline-2-yl] benzene, TPQ), 및 트리아졸 유도체 등이 사용될 수 있다.

[0219] 선택적으로는, 정공 차단층(hole-blocking layer)을 진공증착 등의 방법으로 형성시켜 발광층(14)에서의 정공의 전달속도를 제한하고, 전자-정공의 결합확률을 증가시킬 수 있다.

[0220] 상기 전자수송층(15) 상에 음극(16)용 물질을 코팅한다.

[0221] 상기 음극용 물질로는 일 함수(work function)가 작은 리튬(Li), 마그네슘(Mg), 칼슘(Ca), 알루미늄(Al), F:Li, Al:Li, Ba:Li, 또는 Ca:Li 등이 사용된다.

[0222] 이하에서는 본 발명의 구체적인 실시예들을 제시한다. 다만, 하기에 기재된 실시예들은 본 발명을 구체적으로 예시하거나 설명하기 위한 것에 불과하며, 이로서 본 발명이 제한되어서는 아니 된다.

[0223] 또한, 여기에 기재되지 않은 내용은 이 기술 분야에서 숙련된 자이면 충분히 기술적으로 유추할 수 있는 것이므로 그 설명을 생략한다.

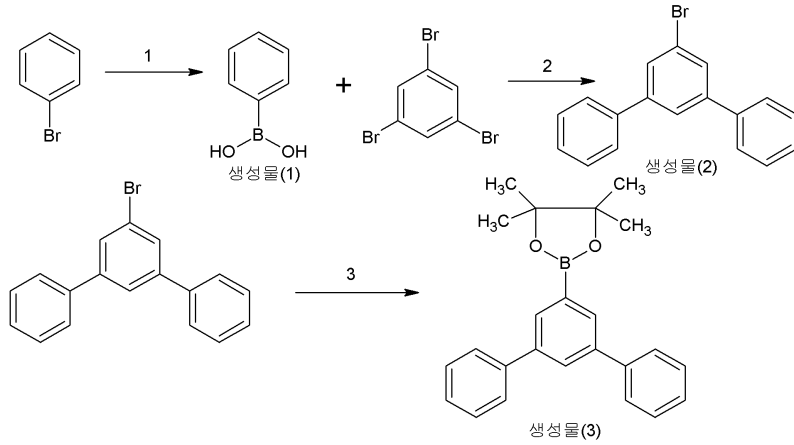
[0224] 하기 실시예 1 내지 6에서는 본 발명의 일 측면에 따른 화합물 2-1, 2-2, 2-5, 3-1, 3-5, 및 5-5를 각각 합성에

1 내지 6과 같이 제조하였다.

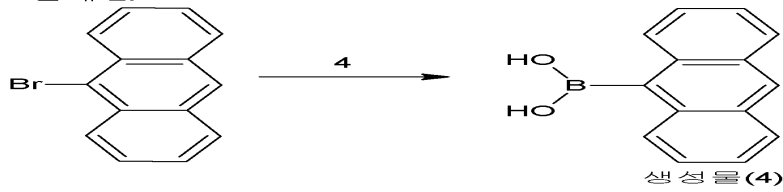
실시예 1

합성예 1. 화학식 [2-1] 및 [2-5]의 합성

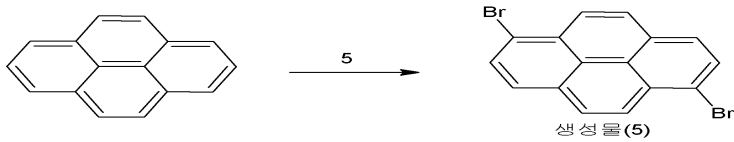
단계 1:



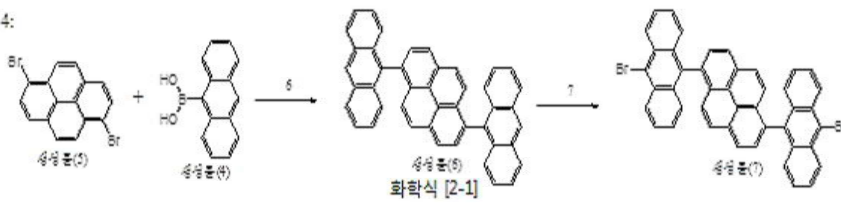
단계 2:



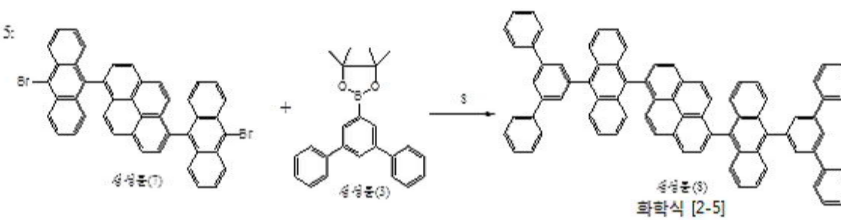
단계 3:



단계 4:



단계 5:



단계 1:

1. 페닐 보로닉 에시드(생성물(1))의 합성

브로모벤젠 10ml(0.0933mol)을 3구 둥근바닥 플라스크에 넣고 질소조건 하에서 무수 THF(Tetrahydrofuran)

100mℓ를 첨가하였다. -78℃를 유지하면서 2M n-BuLi 55.98mℓ(0.112mol)를 천천히 첨가하였다. -78℃에서 B(EtO)₃(Triethyl borate) 22.20mℓ(0.131mol)를 첨가하여 반응시켰다. 이후 반응이 완결되면 상온으로 온도를 올린 후 HCl 16.33mℓ(0.196mol)를 첨가한 후, EA(Ethyl Acetate)와 물을 이용하여 추출하였다. EA층에 있는 소량의 H₂O를 MgSO₄으로 제거하였다. 상기 EA층에 있는 생성물을 증발기를 이용하여 고체로 수득하였다. 상기 수득된 고체를 소량의 THF로 녹여 헥산으로 재침전시킨 후, 여과하였다. 이에, 백색 고체화합물(생성물(1)) 9.410g(수율 82.72%)을 수득하였다.

[0234] 2. 5'-브로모-[1,1';3',1'']터페닐 (생성물(2))의 합성

[0235] 상기 단계 1에서 합성된 생성물(1) 4.85g(19.88mmol)과 1,3,5-트리브로모벤젠 5.0g, (15.90mmol), Pd(PPh₃)₄ 0.92g를 3구 둥근바닥 플라스크에 넣고 질소조건에서 무수 톨루엔 100mℓ를 넣고 교반하였다. 여기에, 2M K₂CO₃ 10.0mℓ를 첨가하였다. 이때, 온도를 80℃ 정도로 유지하면서 교반하였다. 반응이 끝난 후 클로로포름과 H₂O를 이용하여 추출하였다. 클로로포름층에 있는 소량의 H₂O를 MgSO₄로 제거하고, 클로로포름층에 있는 생성물을 증발기를 이용하여 용매를 제거한 후 클로로포름:헥산의 1:10 혼합비율로 컬럼크로마토그래피를 통해 분리 정제하였다. 이에, 생성물(2)의 백색 고체 2.702g(수율 55.3%)을 얻었다.

[0236] 3. 4,4,5,5-테트라메틸-2-[1,1';3',1'']터페닐-5'-일-[1,3,2]디옥사보로란(생성물(3))의 합성

[0237] 상기 단계 2에서 합성된 생성물(2) 1.5g(4.85mmol)을 3구 둥근바닥 플라스크에 넣고 질소조건 하에서 무수 THF 100mℓ를 넣고 교반하였다. -78℃를 유지하면서 2M n-BuLi 2.91mℓ(5.82mol)를 천천히 첨가하였다. -78℃에서 2-이소프로폭시-4,4,5,5-테트라메틸-[1,3,2]디옥사보로란 3.48mℓ(7.28mol)를 첨가하였다. 반응이 완결되면 에틸아세테이트(EA)와 물을 이용하여 추출하였다. EA층에 있는 소량의 물을 MgSO₄로 제거하고, EA층에 있는 생성물을 용매 증발에 의해 고체로 얻었다. 상기 얻은 고체를 소량의 THF로 녹여 헥산으로 재침전 시킨 후 여과하였다. 백색 고체 화합물 (생성물(3)) 1.369g(수율 79.2%)을 얻었다.

[0238] 단계 2:

[0239] 4. 9-안트라센 브로닉 에시드(생성물(4))의 합성

[0240] 9-브로모안트라센 5g(19.44mmol)을 3구 둥근바닥 플라스크에 넣고 질소조건 하에서 무수 THF(Tetrahydrofuran) 60mℓ를 넣었다. -78℃를 유지하면서 2M n-BuLi 11.66mℓ(23.33mmol)를 천천히 첨가하였다. -78℃에서 B(EtO)₃(Triethyl borate) 4.62mℓ(27.22mmol)를 첨가하였다. 반응이 완결되면 상온으로 온도를 올린 후 HCl 3.56mℓ(42.78mmol)를 첨가한 후, EA(Ethyl Acetate)와 물을 이용하여 추출하였다. EA층에 있는 소량의 물을 MgSO₄로 제거하고, EA층에 있는 생성물을 용매 증발법에 의해 고체로 얻었다. 상기 얻은 고체를 소량의 THF로 녹여 헥산으로 재침전시킨 후, 여과하였다. 분리된 고체를 증발기를 이용하여 연한 노란색 고체(9-Athracene boronic acid, 생성물(4)) 3.699g(수율 85.7%)을 수득하였다.

[0241] 단계 3:

[0242] 5. 1,6-디브로모파이렌 (생성물(5))의 합성

[0243] 파이렌 20g(98.8mmol)을 3구 둥근바닥 플라스크에 넣고 상온에서 클로로포름 500mℓ를 넣었다. 파이렌을 녹인 후 클로로포름 500mℓ에 브롬용액(Bromine) 10mℓ를 용해시켜 한 방울씩 천천히 첨가하였다. 반응이 완결되면 아세톤 100mℓ를 첨가하여 반응을 종료한 후 증발기를 이용하여 고체로 얻었다. 상기 얻은 고체는 자일렌을 이용하여 재결정하여 정제하였다. 백색 고체(생성물(5)) 11.063g(수율 31.1%)을 수득하였다.

[0244] 단계 4:

[0245] 6. 1,6-다이안트라센-9-일-파이렌 (생성물(6), 화학식 [2-1])의 합성

[0246] 상기 단계 2에서 합성한 9-안트라센 브로닉 애시드 3.2072g(14.44mmol)와, 상기 단계 5에서 합성한 1,6-디브로모파이렌 화합물 2.0g(5.554mmol), Pd(PPh₃)₄ 1.2832g을 3구 둥근바닥 플라스크에 넣고 질소조건에서 무수 톨루엔과 무수 THF을 10:1의 비율로 섞어 100ml을 첨가하였다. 2M K₂CO₃를 첨가한 후, 반응용기의 온도를 85℃ 정도 유지하면서 교반하였다. 반응 종료 후 클로로포름과 물을 이용하여 추출하였다. 클로로포름층에 있는 녹지 않은 물질을 필터를 한 후, 클로로포름(Chloroform)으로 컬럼크로마토그래피를 통해 정제하였다. 컬럼을 통해 얻은 액체를 증발기를 이용하여 연한 노란색 고체(생성물(6), 화학식 [2-1]) 2.03g(수율 65.9%)을 수득하였다.

[0247] 7. 1,6-비스-(10-브로모-안트라센-9-일)-파이렌 (생성물(7))의 합성

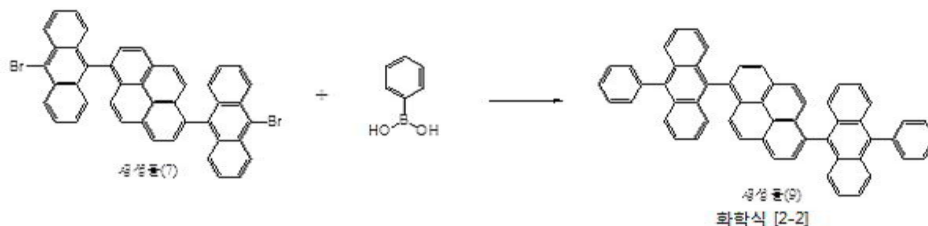
[0248] 상기 단계 4에서 합성한 1,6-다이안트라센-9-일-파이렌(생성물(6)) 0.35g(0.63mmol) 과 N-브로모숙신이미드 0.2576g(1.45mmol)을 3구 둥근바닥 플라스크에 넣고 클로로포름:다이클로로메테인(MC) 비율 1:1로 혼합하여 600 ml와 아세트산 30ml를 첨가하였다. 반응 용기의 온도를 70℃ 정도 유지하면서 교반하였다. 반응이 끝난 후 클로로포름과 물을 이용하여 추출하였다. 클로로포름층에 있는 생성물은 증발기를 이용하여 고체로 얻었으며, 얻은 고체를 클로로포름에 녹여 에탄올로 재침전시킨 후, 여과하였다. 이에, 연한 노란색 고체(생성물(7)) 0.34g(수율 75.9%)을 수득하였다.

[0249] 단계 5:

[0250] 8. 1,6-비스-(10-[1,1';3',1'']터페닐-5'-일-안트라센-9-일)-파이렌 (생성물(8), 화학식 [2-5])의 합성

[0251] 상기 단계 4에서 합성한 1,6-비스-(10-브로모-안트라센-9-일)-파이렌 0.3g(0.42mmol)와 상기 단계 1에서 합성한 4,4,5,5-테트라메틸-2-[1,1';3',1'']터페닐-5'-일-[1,3,2]디옥사보로란 0.359g(1.01mmol), Pd(OAc)₂ 0.034g, 트리사이클로헥실포스핀 0.035g을 3구 둥근바닥 플라스크에 넣고 질소조건에서 무수 톨루엔 150ml와 무수 THF 5 ml를 넣고 교반하였다. 20중량%의 (Et₄)NOH를 첨가한 후, 반응용기의 온도를 100℃정도 유지하면서 교반하였다. 반응이 끝난 후 클로로포름과 물을 이용하여 추출하고 클로로포름(Chloroform)으로 컬럼크로마토그래피를 통해 정제하였다. 이후, 얻은 액체를 증발기를 이용하여 고체로 얻었으며, 얻은 고체를 클로로포름에 재결정시킨 후, 여과하였다. 이에, 생성물(8)(화학식 [2-5]) 0.1513g(수율 35.7%)을 수득하였다. [HRMS (FAB+, m/z): calcd. For C₈₀H₅₀, 1011.3991; found, 1011.3994]

[0252] 합성예 2. 화학식 [2-2]의 합성

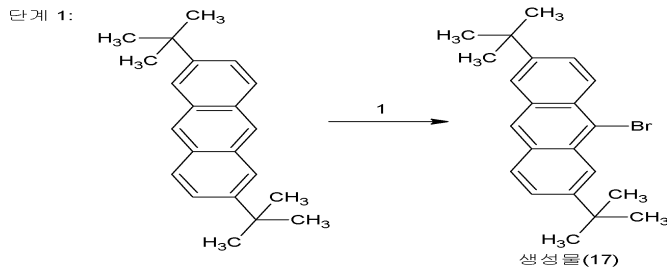


[0253]

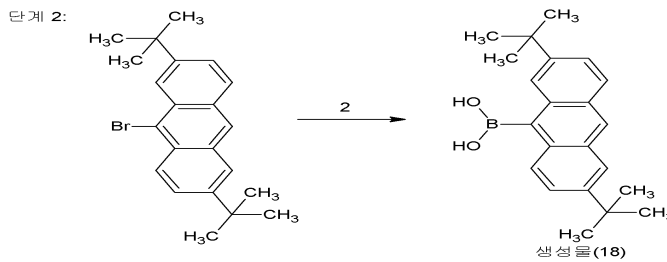
[0254] 상기 합성예 1의 단계 4에서 합성된 1,6-비스-(10-브로모-안트라센-9-일)-파이렌(생성물(7)) 0.3g(0.4199mmol)와 페닐 브로닉 애시드 0.1229g(1.008mmol), Pd(OAc)₂ 0.0344g, 트리사이클로헥실포스핀 0.0349g을 3구 둥근바닥 플라스크에 넣고 질소조건에서 무수 톨루엔 150ml와 무수 THF 5 ml를 넣고 교반하였다. 20중량%의 (Et₄)NOH를 첨가한 후, 반응용기의 온도를 100℃정도 유지하면서 교반하였다. 반응이 끝난 후 클로로포름과 물을 이용하여 추출하고 클로로포름(Chloroform)으로 컬럼크로마토그래피를 통해 정제하였다. 이후, 얻은 액체를 증발기를 이용하여 고체로 얻었으며, 얻은 고체를 클로로포름에 재결정시킨 후, 여과하였다. 이에, 생성물(9)(화학식 [2-2]) 0.1793g(수율 60.5%)을 수득하였다 [HRMS (FAB+, m/z): calcd. For C₅₆H₃₄, 706.2661; found, 706.2669]

[0255]

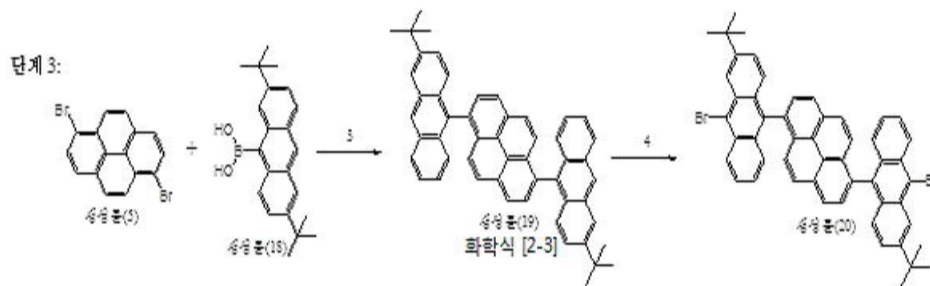
합성예 3. 화학식 [2-3] 및 [2-4]의 합성



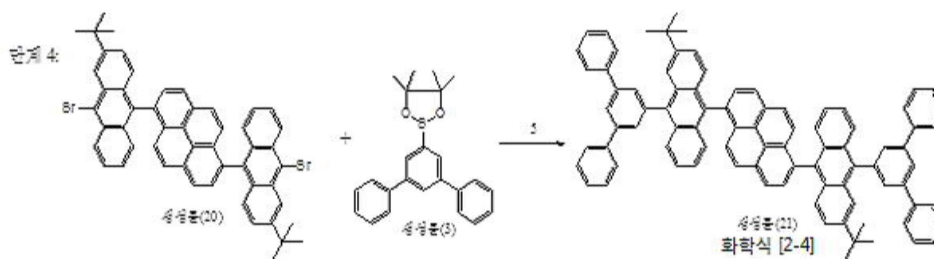
[0256]



[0257]



[0258]



[0259]

[0260]

단계 1:

[0261]

1. 9-브로모-2,6-다이-틸트-뷰틸안트라센 (생성물(17))의 합성

[0262]

2,6-다이-틸트-뷰틸안트라센 0.5g(1.72mmol) 과 N-브로모숙신이미드 0.3368g(1.89mmol)을 3구 둥근바닥 플라스크에 넣고 클로로포름 50ml와 아세트산 5ml를 첨가하였다. 반응 용기의 온도를 70℃ 정도 유지하면서 교반하였다. 반응이 끝난 후 클로로포름과 물을 이용하여 추출하였다. 클로로포름층에 있는 소량의 H₂O을 MgSO₄로 제거하고, 클로로포름층에 있는 생성물을 증발기를 이용하여 용매를 제거한 후 클로로포름:헥산의 1:10 혼합비율로 컬럼크로마토그래피를 통해 분리 정제하였다. 이에, 생성물(17)의 백색 고체 0.3812g(수율 60.5%)을 얻었다.

[0263]

단계 2:

[0264]

2. 2,6-다이-틸트-뷰틸-안트라센-9-일-브로닉 애시드(생성물(18))의 합성

[0265] 9-브로모-2,6-다이-테르트-부틸안트라센 1g(2.71mmol)을 3구 둥근바닥 플라스크에 넣고 질소조건 하에서 무수 THF(Tetrahydrofuran) 20ml를 넣었다. -78℃를 유지하면서 2M n-BuLi 1.63ml(3.25mmol)를 천천히 첨가하였다. -78℃에서 B(EtO)₃(Triethyl borate) 0.64ml(3.80mmol)를 첨가하였다. 반응이 완결되면 상온으로 온도를 올린 후 HCl 0.5ml(5.97mmol)를 첨가한 후, EA(Ethyl Acetate)와 물을 이용하여 추출하였다. EA층에 있는 소량의 물을 MgSO₄로 제거하고, EA층에 있는 생성물을 용매 증발법에 의해 고체로 얻었다. 상기 얻은 고체를 소량의 THF로 녹여 헥산으로 재침전시킨 후, 여과하였다. 분리된 고체를 증발기를 이용하여 연한 노란색 고체(9-Athracene boronic acid, 생성물(18)) 0.5699g(수율 70.3%)을 수득하였다.

[0266] 단계 3:

[0267] 3. 1,6-비스-(3-테르트-부틸-안트라센-9-일)-파이렌 (생성물(19), 화학식 [2-3])의 합성

[0268] 상기 단계 2에서 합성한 2,6-다이-테르트-부틸-안트라센-9-일-브로닉 에시드 4.8267g(14.44mmol)와, 상기 반응식1의 단계 3에서 합성한 1,6-디브로모파이렌 화합물 2.0g(5.554mmol), Pd(pph₃)₄ 1.2832g을 3구 둥근바닥 플라스크에 넣고 질소조건에서 무수 톨루엔과 무수 THF을 10:1의 비율로 섞어 100ml을 첨가하였다. 2M K₂CO₃를 첨가한 후, 반응용기의 온도를 85℃ 정도 유지하면서 교반하였다. 반응 종료 후 클로로포름과 물을 이용하여 추출하였다. 클로로포름층에 있는 녹지 않은 물질을 필터를 한 후, 클로로포름(Chloroform)으로 컬럼크로마토그래피를 통해 정제하였다. 컬럼을 통해 얻은 액체를 증발기를 이용하여 고체(생성물(19), 화학식 [2-3]) 1.48g(수율 40.9%)을 수득하였다.

[0269] 4. 1,6-비스-(10-브로모-3-테르트-부틸-안트라센-9-일)-파이렌 (생성물(20))의 합성

[0270] 1,6-비스-(3-테르트-부틸-안트라센-9-일)-파이렌 (생성물(19), 화학식 [2-3]) 0.35g(0.52mmol) 과 N-브로모숙신아미드 0.2442g(1.26mmol)을 3구 둥근바닥 플라스크에 넣고 클로로포름:다이클로로메테인(MC) 비율 1:1로 혼합하여 300ml와 아세트산 30ml를 첨가하였다. 반응 용기의 온도를 70℃ 정도 유지하면서 교반하였다. 반응이 끝난 후 클로로포름과 물을 이용하여 추출하였다. 클로로포름층에 있는 생성물은 증발기를 이용하여 고체로 얻었으며, 얻은 고체를 클로로포름에 녹여 에탄올로 재침전시킨 후, 여과하였다. 이에, 연한 노란색 고체 (생성물(20)) 0.3518g(수율 82.1%)을 수득하였다.

[0271] 단계 4:

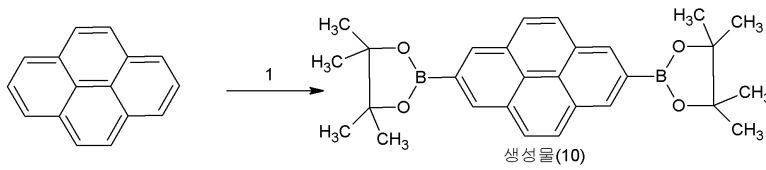
[0272] 5. 1,6-비스-(3-테르트-부틸-10-[1,1';3',1'']테페닐-5'-일-안트라센-9-일)-파이렌 (생성물(21), 화학식 [2-4])의 합성

[0273] 상기 단계 3에서 합성한 1,6-비스-(10-브로모-3-테르트-부틸-안트라센-9-일)-파이렌 0.3g(0.36mmol)와 반응식 1의 단계 1에서 합성한 4,4,5,5-테트라메틸-2-[1,1';3',1'']테페닐-5'-일-[1,3,2]디옥사보로란 0.3349g(0.94mmol), Pd(OAc)₂ 0.034g, 트리사이클로헥실포스핀 0.035g을 3구 둥근바닥 플라스크에 넣고 질소조건에서 무수 톨루엔 150ml와 무수 THF 5 ml를 넣고 교반하였다. 20중량%의 (Et₄)NOH 를 첨가한 후, 반응용기의 온도를 100℃정도 유지하면서 교반하였다. 반응이 끝난 후 클로로포름과 물을 이용하여 추출하고 클로로포름(Chloroform)으로 컬럼 크로마토그래피를 통해 정제하였다. 이후, 얻은 액체를 증발기를 이용하여 고체로 얻었으며, 얻은 고체를 클로로포름에 재결정시킨 후, 여과하였다. 생성물(21)(화학식 [2-4]) 0.0745g(수율 20.7%)을 수득하였다. [MS (FAB+, m/z): calcd. For C₃₈H₆₆, 1122; found, 1122]

[0274]

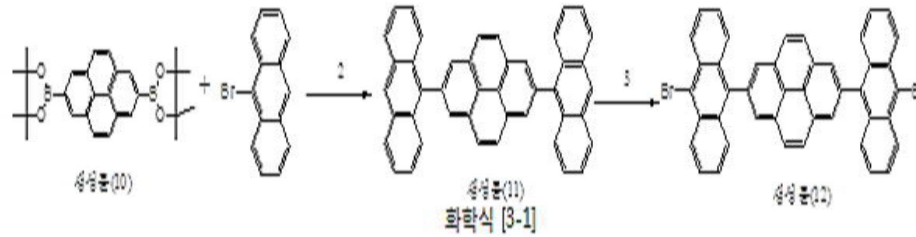
합성예 4. 화학식 [3-1] 및 [3-3]의 합성

단계 1:



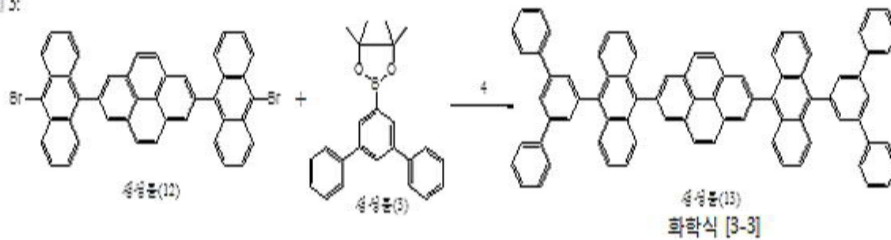
[0275]

단계 2:



[0276]

단계 3:



[0277]

[0278]

단계1:

[0279]

1. 2,7-다이-비핀-파이렌 (생성물(10))의 합성

[0280]

파이렌 4g(19.78mmol), Bis(pinacolato)diboron 5.02g, (1,5-사이클로옥타다이엔)(메톡시)이리듐(I) 다이머 0.4g, 4,4'-다이메틸-2,2'-바이피리딘 0.22g을 3구 둥근바닥 플라스크에 넣고 질소조건에서 무수 THF 240ml를 넣고 교반하였다. 온도를 80℃ 정도로 유지하면서 교반하였다. 반응이 끝난 후 MC와 H₂O를 이용하여 추출하였다. MC에 있는 소량의 H₂O를 MgSO₄로 제거하고, 클로로포름층에 있는 생성물을 증발기를 이용하여 용매를 제거한 후, MC으로 컬럼크로마토그래피를 통해 정제하였다. 컬럼을 통해 얻은 액체를 증발기를 이용하여 고체를 얻었으며, 얻은 고체를 클로로포름에 녹여 메탄올로 재침전시킨 후, 여과하였다. 이에, 하얀색 고체 (생성물(10)) 8.4455g(수율 94%)을 수득하였다.

[0281]

단계 2:

[0282]

2. 2,7-다이-안트라센-9-일-파이렌 (생성물(11), 화학식 [3-1])의 합성

[0283]

상기 단계 1에서 합성한 2,7-다이-비핀-파이렌 2.00g(4.404mmol)와 9-브로모안트라센 화합물 2.7175g(10.57mmol), Pd(PPh₃)₄ 1.0172g을 3구 둥근바닥 플라스크에 넣고 질소조건에서 무수 톨루엔과 무수 THF을 10:1의 비율로 섞어 100ml을 첨가하였다. 2M K₂CO₃를 첨가한 후, 반응용기의 온도를 100℃ 정도 유지하면서 교반하였다. 반응 종료 후 클로로포름과 물을 이용하여 추출하였다. 클로로포름층에 있는 녹지 않은 물질을 필터를 한 후, 클로로포름(Chloroform)으로 컬럼크로마토그래피를 통해 정제하였다. 컬럼을 통해 얻은 액체를 증발기를 이용하여 연한 노란색 고체(생성물(11), 화학식 [3-1]) 0.3730g(수율 15.3%)을 수득하였다.

[0284]

3. 2,7-비스-(10-브로모-안트라센-9-일)-파이렌 (생성물(12))의 합성

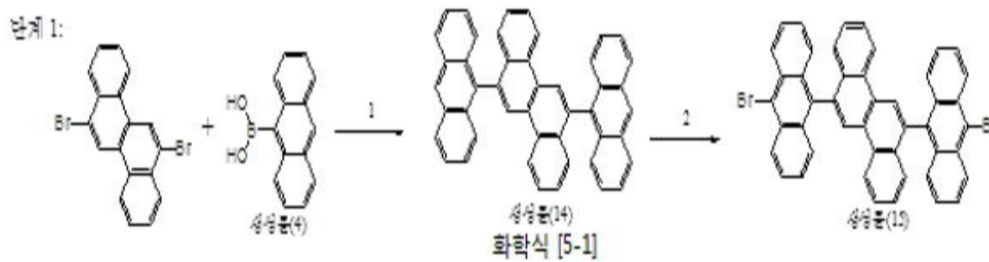
[0285] 상기 단계 2에서 합성한 2,7-다이-안트라센-9-일-파이렌 (생성물(11), 화학식 [3-1]) 0.5g(0.9014mmol) 과 N-브로모숙신이미드 0.3529g(1.983mmol)을 3구 둥근바닥 플라스크에 넣고 클로로포름:다이클로로메테인(MC) 비율 3:1로 혼합하여 600ml와 아세트산 50ml를 첨가하였다. 반응 용기의 온도를 70℃ 정도 유지하면서 교반하였다. 반응이 끝난 후 클로로포름과 물을 이용하여 추출하였다. 클로로포름층에 있는 생성물은 증발기를 이용하여 고체로 얻었으며, 얻은 고체를 클로로포름에 녹여 에탄올로 재침전시킨 후, 여과하였다. 이에, 노란색 고체 (생성물(12)) 0.4215g(수율 65.4%)을 수득하였다.

[0286] 단계 3:

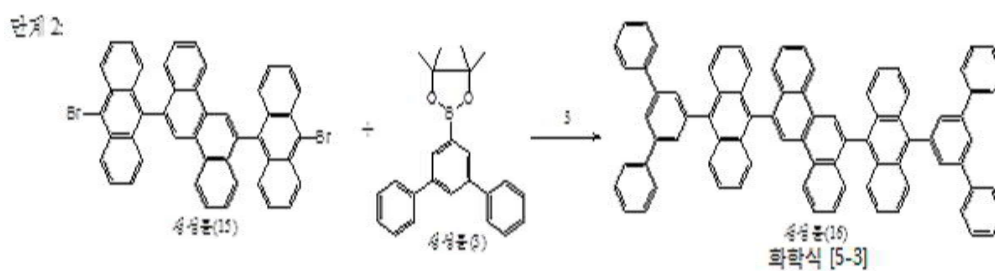
[0287] 4. 2,7-비스-(10-[1,1':3',1''] 터페닐-5'-일-안트라센-9-일)-파이렌(생성물(13), 화학식 [3-3]) 의 합성

[0288] 상기 단계 2에서 합성한 2,7-비스-(10-브로모-안트라센-9-일)-파이렌 0.15g(0.2099mmol)와 상기 합성에 1의 단계 1에서 합성한 4,4,5,5-테트라메틸-2-[1,1':3',1'']터페닐-5'-일-[1,3,2]디옥사보로란 0.1795g(0.5039mmol), Pd(OAc)₂ 0.0172g, 트리사이클로헥실포스핀 0.0177g을 3구 둥근바닥 플라스크에 넣고 질소조건에서 무수 톨루엔 80ml와 무수 THF 10 ml를 넣고 교반하였다. 20중량%의 (Et₄)NOH 를 첨가한 후, 반응용기의 온도를 100℃정도 유지하면서 교반하였다. 반응이 끝난 후 클로로포름과 물을 이용하여 추출하고 클로로포름(Chloroform)으로 컬럼 크로마토그래피를 통해 정제하였다. 이후, 얻은 액체를 증발기를 이용하여 고체로 얻었으며, 얻은 고체를 클로로포름에 재결정시킨 후, 여과하였다. 이에, 생성물(13)(화학식 [3-3]) 0.1513g(수율 35.7%)을 수득하였다. [HRMS (FAB+, m/z): calcd. For C₈₀H₅₀, 1011.3991; found, 1011.3986]

[0289] 합성에 5. 화학식 [5-1] 및 [5-3]의 합성



[0290]



[0291]

[0292] 단계 1:

[0293] 1. 6,12-다이-안트라센-9-일-크리센 (생성물(14), 화학식 [5-1])의 합성

[0294] 합성에 1의 단계 2에서 합성한 9-안트라센 브로닉 애시드 3.7384g(16.84mmol)와 6,12-다이브로모-크리센 화합물 2.5g(6.475mmol), Pd(PPh₃)₄ 1.4957g을 3구 둥근바닥 플라스크에 넣고 질소조건에서 무수 톨루엔과 무수 THF을 10:1의 비율로 섞어 200ml를 첨가하였다. 2M K₂CO₃를 첨가한 후, 반응용기의 온도를 85℃ 정도 유지하면서 교반하였다. 반응 종료 후 클로로포름과 물을 이용하여 추출하였다. 클로로포름층에 있는 녹지 않은 물질을 필터를 한 후, 클로로포름(Chloroform)으로 컬럼크로마토그래피를 통해 정제하였다. 컬럼을 통해 얻은 액체를 증발기를 이용하여 노란색 고체(생성물(14), 화학식 [5-1]) 1.1001g(수율 29.3%)을 수득하였다.

- [0295] 2. 6,12-비스-(10-브로모-안트라센-9-일)-크리센 (생성물(15))의 합성
- [0296] 상기 단계 1에서 합성한 6,12-다이-안트라센-9-일-크리센 (생성물(14), 화학식 [5-1]) 0.5g(0.8610mmol) 과 N-브로모숙신이미드 0.3678g(2.066mmol)을 3구 둥근바닥 플라스크에 넣고 클로로포름:다이클로로메테인(MC) 비율 1:1로 혼합하여 600ml와 아세트산 30ml를 첨가하였다. 반응 용기의 온도를 70℃ 정도 유지하면서 교반하였다. 반응이 끝난 후 클로로포름과 물을 이용하여 추출하였다. 클로로포름층에 있는 생성물은 증발기를 이용하여 고체로 얻었으며, 얻은 고체를 클로로포름에 녹여 에탄올로 재침전시킨 후, 여과하였다. 이에, 노란색 고체 (생성물(15)) 0.6025g(수율 94.8%)을 수득하였다.
- [0297] 단계 2:
- [0298] 3. 6,12-비스-(10-[1,1';3',1'']테페닐-5'-일-안트라센-9-일)-크리센 (생성물(16), 화학식 [5-3])의 합성
- [0299] 상기 단계 2에서 합성한 6,12-비스-(10-브로모-안트라센-9-일)-크리센 0.5g(0.6770mmol)와 상기 합성에 1의 단계 1에서 합성한 4,4,5,5-테트라메틸-2-[1,1';3',1'']테페닐-5'-일-[1,3,2]디옥사보로란 0.5789g(1.625mmol), Pd(OAc)₂ 0.0555g, 트리사이클로헥실포스핀 0.0569g을 3구 둥근바닥 플라스크에 넣고 질소조건에서 무수 톨루엔 20ml와 무수 THF 20 ml를 넣고 교반하였다. 20중량%의 (Et₄)NOH 를 첨가한 후, 반응용기의 온도를 100℃정도 유지하면서 교반하였다. 반응이 끝난 후 클로로포름과 물을 이용하여 추출하고 클로로포름(Chloroform)으로 컬럼 크로마토그래피를 통해 정제하였다. 이후, 얻은 액체를 증발기를 이용하여 고체로 얻었으며, 얻은 고체를 클로로포름에 재결정시킨 후, 여과하였다. 이에, 생성물(16)(화학식 [5-3]) 0.3065g(수율 43.6%)을 수득하였다. [HRMS (FAB+, m/z): calcd. For C₈₂H₅₂, 1037.4147; found, 1037.4148]

실시예 2

- [0300] 유기발광 소자의 제작
- [0301] 상기 실시예에서 제조된 화합물을 발광층으로 사용하여 유기발광 소자를 제조하였다. 상기 유기발광 소자는 ITO/2-TNATA(60nm)/NPB(15nm)/발광층(EML)(35nm)/Alq3(20nm)/LiF(1 nm)/Al(200nm)의 순서 및 두께로 제작하였다.
- [0302] 세척된 ITO 기판에, 정공주입층(Hole injection layer)으로서 2-TNATA(4,4',4"-트리스(N-(2-나프틸)-N-페닐-아미노)-트리페닐아민)를 사용하였으며, 정공수송층(Hole transporting layer)으로서, NPB(N,N'-비스(나프탈렌-1-일)-N,N'-비스(페닐)벤지딘)와 발광층에는 실시예 1에서 제조된 화학식 [2-1]로 표시되는 화합물을 사용하였다.
- [0303] 또한 전자수송층(Electron-transporting layer)으로는 Alq3(8-히드록시퀴놀린 알루미늄)를 사용하였다.
- [0304] 증착방법(10⁻⁶ Torr 이하의 압력)의 진공상태에서 1Å/s의 속도로 각각의 두께로 제작하였다. LiF(1 nm)와 Al은 차례로 증착방법(10⁻⁶ Torr 이하의 압력)을 통하여 전자수송층 상에 필름을 형성하였다.

실시예 3

- [0305] 유기발광 소자의 제작
- [0306] 발광층에 실시예 1에서 제조된 화학식 [2-2]로 표시되는 화합물을 사용하는 것을 제외하고는, 상기 실시예 2와 동일한 방법으로 유기발광 소자를 제작하였다.

실시예 4

- [0307] 유기발광 소자의 제작

[0308] 발광층에 실시예 1에서 제조된 화학식 [2-5]로 표시되는 화합물을 사용하는 것을 제외하고는, 상기 실시예 2와 동일한 방법으로 유기발광 소자를 제작하였다.

실시예 5

[0309] 유기발광 소자의 제작

[0310] 발광층에 실시예 1에서 제조된 화학식 [3-1]로 표시되는 화합물을 사용하는 것을 제외하고는, 상기 실시예 2와 동일한 방법으로 유기발광 소자를 제작하였다.

실시예 6

[0311] 유기발광 소자의 제작

[0312] 발광층에 실시예 1에서 제조된 화학식 [3-3]로 표시되는 화합물을 사용하는 것을 제외하고는, 상기 실시예 2와 동일한 방법으로 유기발광 소자를 제작하였다.

실시예 7

[0313] 유기발광 소자의 제작

[0314] 발광층에 실시예 1에서 제조된 화학식 [5-1]로 표시되는 화합물을 사용하는 것을 제외하고는, 상기 실시예 2와 동일한 방법으로 유기발광 소자를 제작하였다.

실시예 8

[0315] 유기발광 소자의 제작

[0316] 발광층에 실시예 1에서 제조된 화학식 [5-3]로 표시되는 화합물을 사용하는 것을 제외하고는, 상기 실시예 2와 동일한 방법으로 유기발광 소자를 제작하였다.

실시예 9

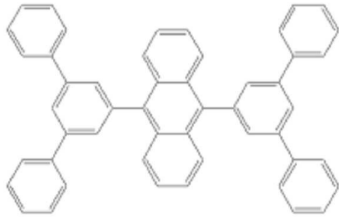
[0317] 유기발광 소자의 제작

[0318] 발광층에 실시예 1에서 제조된 화학식 [2-4]로 표시되는 화합물을 사용하는 것을 제외하고는, 상기 실시예 2와 동일한 방법으로 유기발광 소자를 제작하였다.

[0319] **[비교예 1]**

[0320] 유기발광 소자의 제작

[0321] 발광층의 재료로서, 하기 화학식으로 표시되는 화합물(CB201)을 사용하고, 전자수송층으로서, 상기 실시예 2와 동일한 방법으로 유기발광 소자를 제작하였다.



[0322]

[비교예 1]

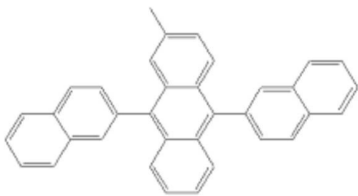
[0323]

유기발광 소자의 제작

[0324]

발광층의 재료로서, 하기 화학식의 중래물질(MADN)을 사용하고, 전자수송층으로서, Alq₃(8-히드록시퀴놀린 알루미늄) 30nm 두께를 제외하고는, 상기 실시예 2와 동일한 방법으로 유기발광 소자를 제작하였다.

[0325]



[0326]

[실험예 1]

[0327]

유기발광 소자용 화합물의 광학특성

[0328]

상기 실시예 1에서 제조된 화학식 2-1, 2-2, 2-5, 3-1, 3-3, 5-1, 5-3 으로 표시되는 화합물의 광학적 특성을 측정하기 위하여, 자외선 분광기(HP 8453 UV-vis-NIR spectrometer)를 통하여 UV 스펙트럼을 확보하고, 광발광 특성을 관찰하기 위하여, 분광기(Perkin-Elmer luminescence spectrometer LS50(Xenon flash tube))를 이용하여 PL 스펙트럼을 얻었다.

[0329]

[0330]

각각의 UV / PL 스펙트럼을 통한 광학 특성은 클로로포름 용액과 증착 방법에 의해 제작된 필름 상태에서 측정하였다.

[0331]

도 2 내지 도 5는 실시예 1에서 제조된 화학식 2-1, 2-2, 2-5, 3-1, 3-3, 5-1, 5-3으로 표시되는 화합물에 대한 광학특성 결과를 도시한 것이다.

[0332]

도 2 내지 도 5는 본 발명의 실시예에 제시된 유기발광 소자용 화합물 2-1, 2-2, 2-5, 3-1, 3-3, 5-1, 5-3의 광학특성 결과로서, 각 분자의 최대 흡수 파장은 380 내지 420nm 부근에서 관찰되었으며, 모두 용액상태 및 필름상태에서도 광학 특성이 다르지 않는 결과를 확인하였다.

[0333]

이러한 결과는 트리플 또는 멀티플 코어로 결합된 분자 구조가 많이 뒤틀려 있으며 벌키하기 때문에 서로의 충전(packing)을 막아주기 때문인 것으로 예측할 수 있다.

[0334]

또한, 도 7 및 도 8로부터 실시예 화합물들이 excimer peak를 가지며, 치환기의 갯수 또는 중심코어의 종류에 따라 excimer peak의 intensity 와 shift를 변화시킬 수 있음을 알 수 있다. 즉, excimer peak를 가지는 본 발명에 따른 화합물들은 치환기의 갯수 또는 중심코어의 종류를 변화시켜 real white에 가까운 색좌표 값을 가지게 할 수 있어, 백색 발광 재료로 사용될 수 있다.

[실험예 2]

[0335]

유기발광 소자의 특성

[0336]

상기 유기발광 소자의 발광특성, 즉 상기 실시예 2 내지 8, 비교예 1 및 2의 유기발광 소자에 대한 전류밀도 및 구동전압을 전류-전압계(Keithley 2400 electrometer)를 이용하여 측정하고, 발광효율, 양자효율, 및 외부양자

[0337]

효율을 휘도계(Minolta CS-1000A) 등을 이용하여 측정하였으며, 이를 색좌표 데이터와 함께 하기 표 1 및 도 9 내지 도 11에 나타내었다.

표 1

	발광효율 (Cd/A)	전력효율 (lm/W)	색좌표 (x, y)
실시예 2	4.97	2.42	(0.201, 0.307)
실시예 3	3.81	1.83	(0.192, 0.242)
실시예 4	3.43	1.45	(0.372, 0.313)
실시예 5	3.50	1.70	(0.229, 0.406)
실시예 6	6.01	2.56	(0.318, 0.438)
실시예 7	3.95	1.83	(0.191, 0.313)
실시예 8	4.30	1.76	(0.297, 0.371)
실시예 9	3.43	1.78	(0.151, 0.140)
비교예 1	2.71	1.26	(0.158, 0.114)
비교예 2	2.86	1.48	(0.171, 0.138)

[0338]

[0339]

상기 표 1 및 도 9 내지 도 11의 결과로부터, 종래 벤젠고리가 치환된 단일종의 코어(mono-core)(비교예 1) 및 나프탈렌 코어를 포함하는 트리플 코어(비교예 2)로 이루어진 발광층 대비, 본 발명의 트리플 또는 멀티플 코어(실시예 2 내지 9)로 이루어진 발광층으로 구성된 유기발광 소자의 경우, 색좌표 값이 real white 값인 (0.33, 0.33)에 가까운 값을 가짐을 알 수 있었다. 또한 실시예 2 내지 9의 색좌표 값은 본 발명의 실시예에 따른 화합물이 청색 발광 재료로도 충분히 사용될 수 있음을 보여준다.

[0340]

또한, 실시예 화합물들은 모두 비교예 화합물들에 비해 우수한 발광효율 및 전력효율을 가짐을 확인할 수 있었다.

[0341]

즉, 제작된 소자의 색좌표(CIE1931), 발광효율, 및 전력효율 측정결과, 본 발명의 트리플 또는 멀티플 코어 형태의 화합물은 청색 또는 백색 발광 재료로서 보다 순도가 향상된 발광층으로 사용될 수 있음을 확인하였다.

[0342]

상기에서 살펴본 바와 같이, 본 발명은 분자 내 트리플 또는 멀티플 코어 형태로 결합된 구조를 포함하는 유기 발광 소자용 화합물, 구체적으로 청색 또는 백색 유기발광 소자용 화합물을 제공한다.

[0343]

본 발명의 유기발광 소자용 화합물은 트리플 또는 멀티플 코어 형태의 구조를 포함하는 것으로서, 단일 코어로 이루어진 화합물 대비, 청색 또는 백색 발광 재료로 적합하게 사용될 수 있다.

[0344]

이에, 본 발명의 유기발광 소자용 화합물은 우수한 청색 또는 백색 발광재료로서, 이를 발광층으로 채용한 유기 발광 소자의 성능개선을 기대할 수 있다.

[0345]

본 발명에 대해 상기 합성에 및 실시예를 참고하여 설명하였으나, 이는 예시적인 것에 불과하며, 본 발명에 속하는 기술 분야의 통상의 지식을 가진 자라면 이로부터 다양한 변형 및 균등한 타 실시예가 가능하다는 점을 이해할 것이다. 따라서 본 발명의 진정한 기술적 보호범위는 첨부된 특허청구범위의 기술적 사상에 의해 정해져야 할 것이다.

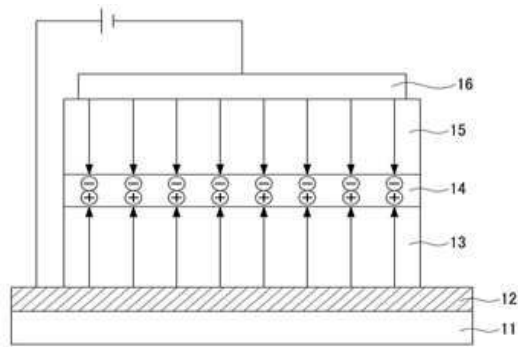
부호의 설명

[0346]

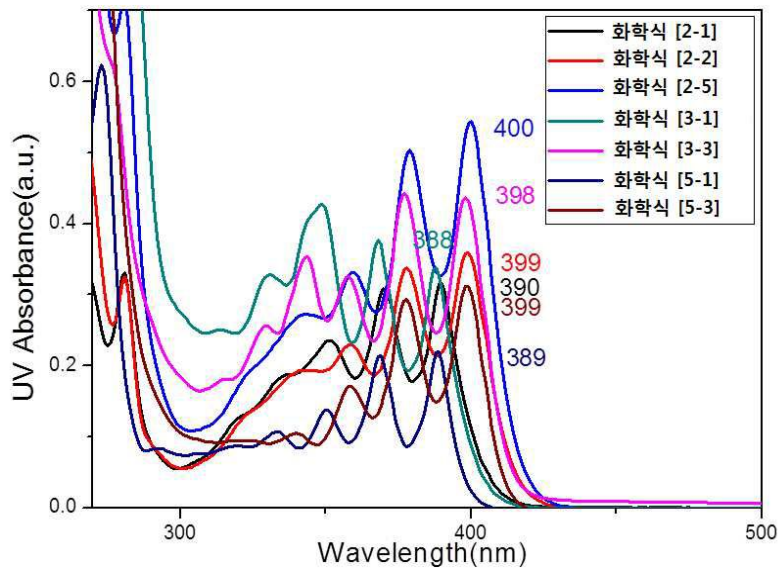
- 11: 기판
- 12: 애노드
- 13: 정공수송층
- 14: 유기발광층
- 15: 전자수송층
- 16: 캐소드

도면

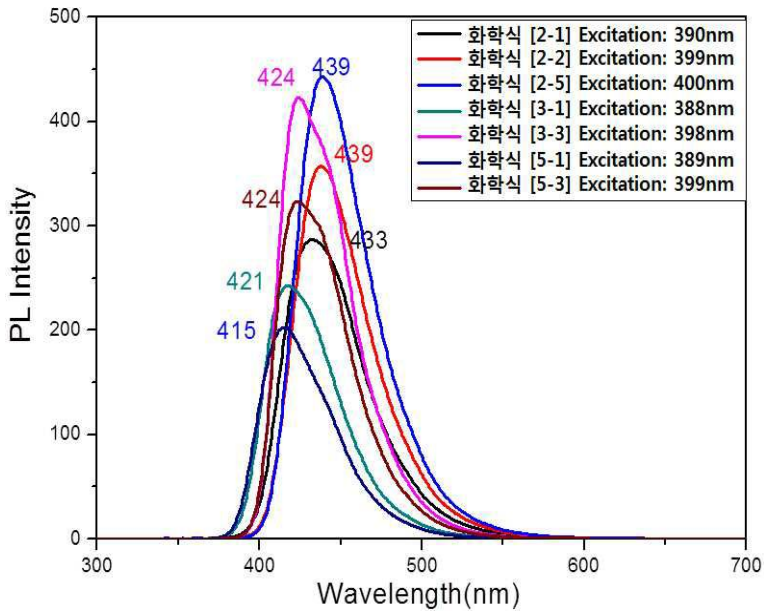
도면1



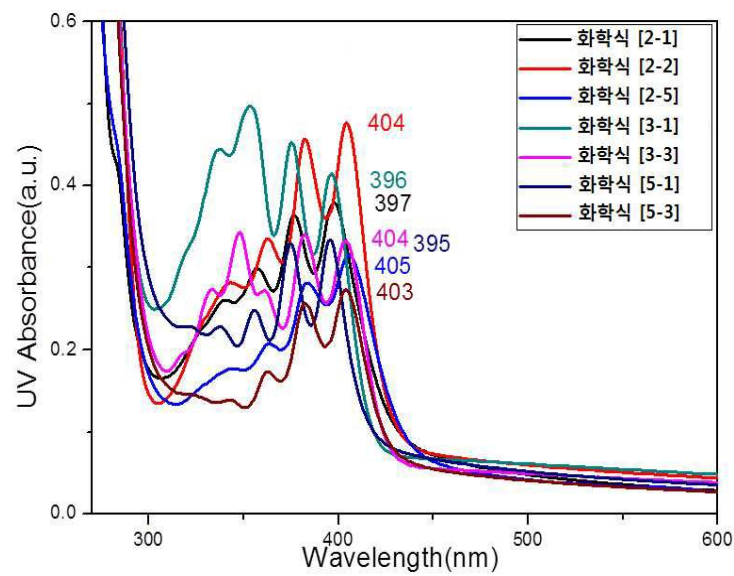
도면2



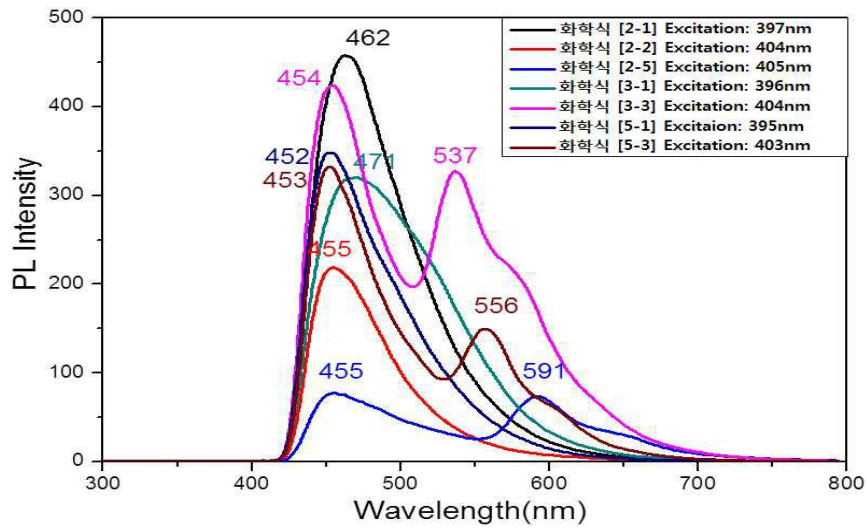
도면3



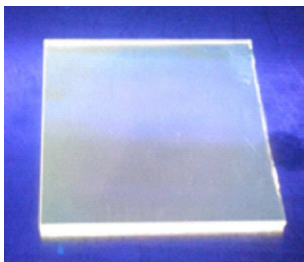
도면4



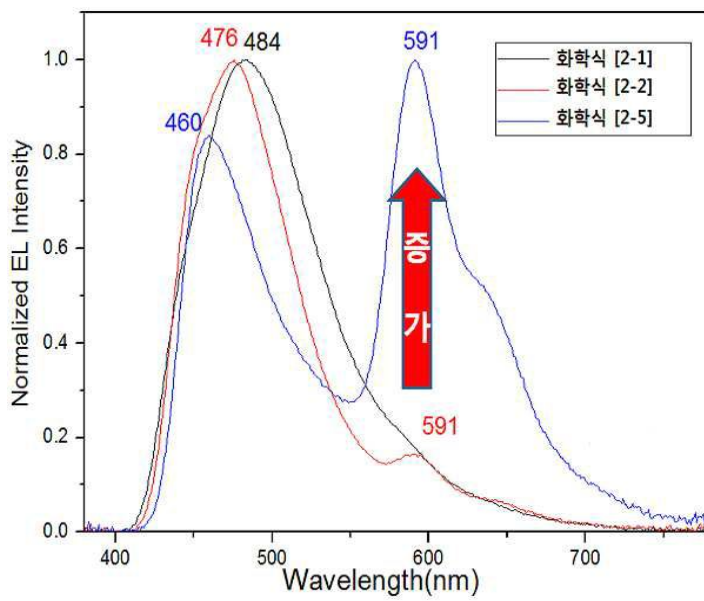
도면5



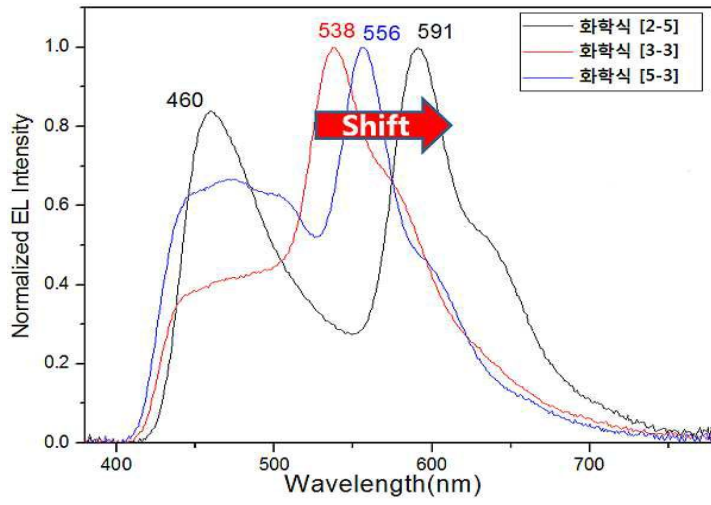
도면6



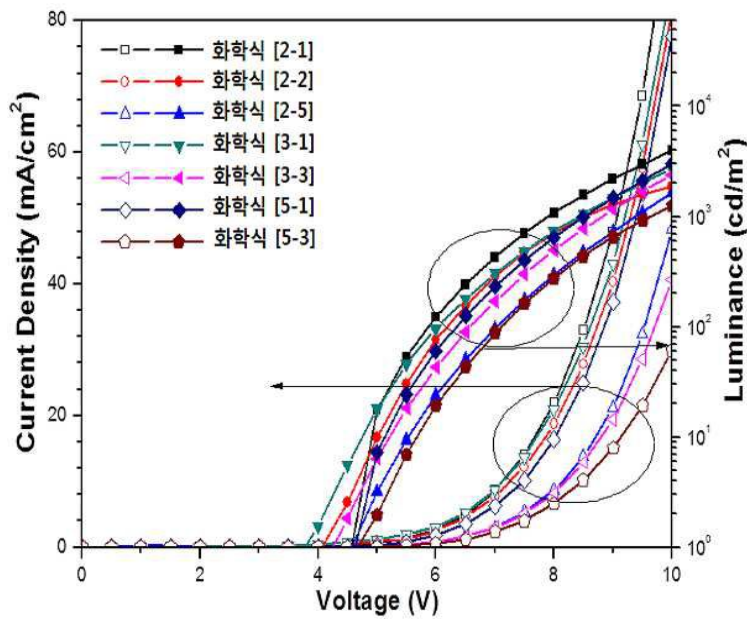
도면7



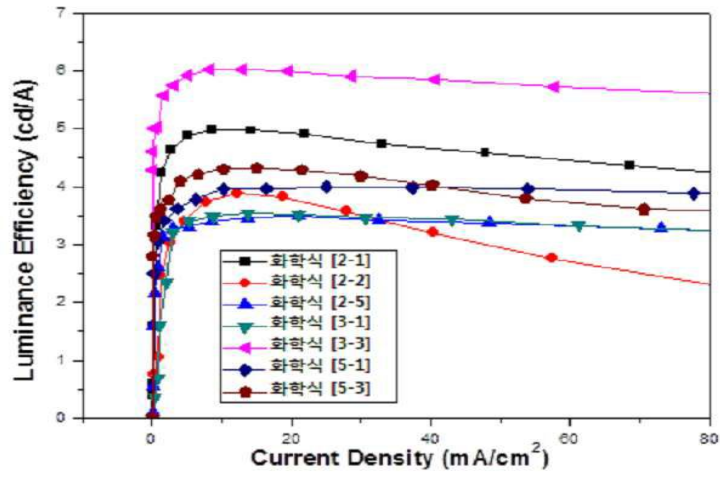
도면8



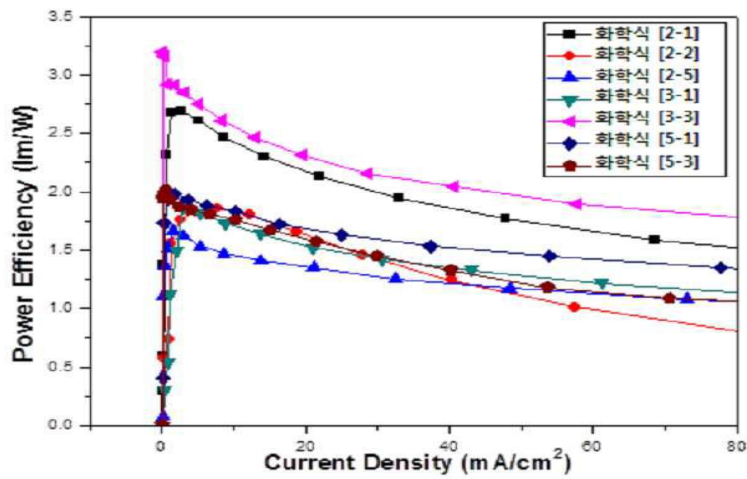
도면9



도면10



도면11



专利名称(译)	标题：用于包括三核或多核结构的有机电致发光器件的化合物和使用它们的有机电致发光		
公开(公告)号	KR101554693B1	公开(公告)日	2015-09-21
申请号	KR1020130004064	申请日	2013-01-14
[标]申请(专利权)人(译)	韩国IND学术合作天主教UNIV FOUND		
申请(专利权)人(译)	天主教大学学术合作		
当前申请(专利权)人(译)	天主教大学学术合作		
[标]发明人	PARK JONGWOOK 박종욱 LEE JAEHYUN 이재현 KIM BEOMJIN 김범진		
发明人	박종욱 이재현 김범진		
IPC分类号	C09K11/06 H01L51/50		
CPC分类号	H01L51/0052 H01L51/0059 H01L51/5024 Y02B20/181		
代理人(译)	专利法的优美		
其他公开文献	KR1020140091969A		
外部链接	Espacenet		

摘要(译)

本发明涉及一种用于采用该有机发光器件，包括在分子的三核或多核结构的显示装置的有机发光器件，和的化合物。 本发明提供了一种有机发光元件7 (E-d-C-d-E) 结构来表示的在分子中包含化学式1或三核 (B-A-B) 的化合物，或多个内核。此外，通过采用本发明化合物的有机发光器件作为发光层，使用通过在除了蓝色发光材料的常规的单核所作的化合物时，可以具有比接近真实白色的值的颜色坐标是合适的，其为白色发光材料。 [化学式1] R1 - (B-A-B) -R2 [化学式7] R13- (E-D-C-D-E) -R14 上式的描述涉及本发明的详细描述。 支持本发明的国家研发项目 作业号码 2012001846 Bucheomyeong 教育，科学和技术部 研究管理专业 韩国研究基金会 研究项目名称 高级研究人员研究项目 研究项目名称 分子精密控制融合技术未来型电子材料系统研究 1.1 主要组织 天主教大学产业合作基金会 研究期 2012年5月1日 - 2015.04.30

