



(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 공개특허공보(A)

(11) 공개번호 10-2019-0088940
(43) 공개일자 2019년07월29일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)
H01L 51/00 (2006.01) C07C 15/28 (2006.01)
C07C 15/38 (2006.01)
(52) CPC특허분류
H01L 51/0054 (2013.01)
C07C 15/28 (2013.01)
(21) 출원번호 10-2019-0087155(분할)
(22) 출원일자 2019년07월18일
심사청구일자 2019년07월18일
(62) 원출원 특허 10-2012-0140098
원출원일자 2012년12월05일
심사청구일자 2017년10월18일
(30) 우선권주장
1020120114074 2012년10월15일 대한민국(KR)

(71) 출원인
에스에프씨 주식회사
충청북도 청주시 청원구 오창읍 과학산업5로 89
(72) 발명자
유세진
경상북도 경산시 백자로10길 57 사동휴먼시아1단지 109-1105
심소영
대전광역시 동구 대전로 646 효동현대아파트 106-1302
이상해
대전광역시 유성구 반석서로 98 반석마을6단지아파트 603-1002
(74) 대리인
특허법인 공간

전체 청구항 수 : 총 10 항

(54) 발명의 명칭 치환기를 갖는 피렌 유도체 화합물 및 이를 포함하는 유기전계발광소자

(57) 요약

본 발명은 신규한 화합물 및 이를 발광물질로 포함하는 유기전계발광소자에 관한 것으로서, 구체적으로 하기 [화
(뒷면에 계속)

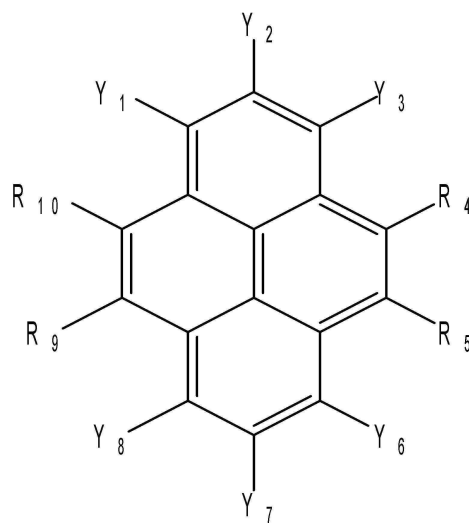
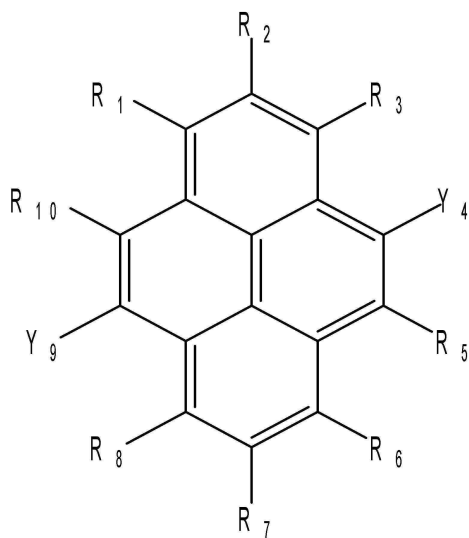
대표도 - 도1

80
70
60
50
40
30
20
10

학식 A] 또는 [화학식 B]로 표시되는 신규한 화합물 및 이를 포함하는 유기전계발광소자인 것을 특징으로 한다.

[화학식 A]

[화학식 B]



(52) CPC특허분류

C07C 15/38 (2013.01)

H01L 51/0052 (2013.01)

H01L 51/0058 (2013.01)

C07C 2603/24 (2017.05)

C07C 2603/50 (2017.05)

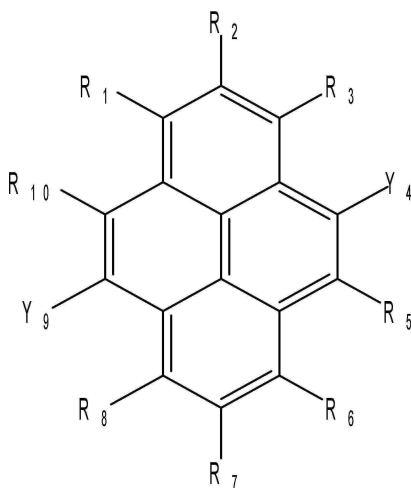
명세서

청구범위

청구항 1

하기 [화학식 A]로 표시되는 피렌계 유도체

[화학식 A]



상기 [화학식 A]에서,

상기 R₁ 내지 R₃, R₆ 내지 R₈는 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 30의 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알콕시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 50의 아릴기, 치환 또는 비치환되고 이종 원자로 O, N 또는 S를 갖는 탄소수 3 내지 50의 헤테로아릴기, 니트릴기, 니트로기, 할로젠기로 이루어진 군에서 선택되며, 서로 인접하는 기와 지방족, 또는 방향족의 축합 고리를 형성할 수 있고,

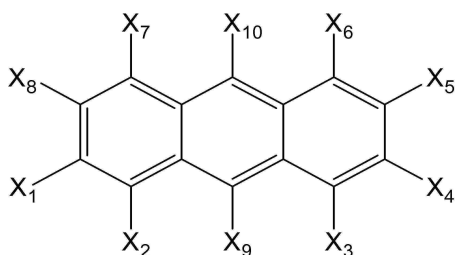
상기 R₅ 및 R₁₀은 각각 페닐기이고,

상기 Y₄ 및 Y₉는 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로, 상기 R₁ 내지 R₃, R₆ 내지 R₈에서 정의한 바와 동일한 치환기로 이루어지거나, 또는 하기 [구조식 1]로 표시되는 치환기를 가질 수 있으며,

단, Y₄ 및 Y₉ 중 선택된 하나만이 상기 [구조식 1]로 표시되는 치환기이거나;

또는, Y₄ 및 Y₉는 각각 상기 [구조식 1]로 표시되는 치환기이고,

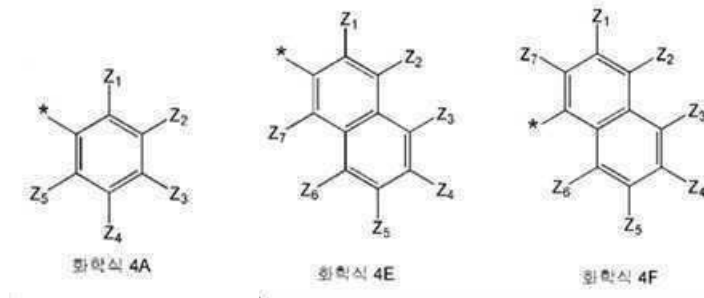
[구조식 1]



상기 [구조식 1] 중,

X₁ 내지 X₉은 서로 동일하거나 상이하며, 각각 독립적으로 수소; 중수소; 할로젠 원자; 시아노기; 니트로기; 치

환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 20의 알킬기; 하기 화학식 4A, 4E 내지 4F 의 치환기; 중에서 선택되는 하나로 표시되는 치환기로 이루어지고,



상기 화학식 4A, 4E 내지 4F 에서,

Z₁ 내지 Z₇은 서로 독립적으로, 수소; 중수소; 할로젠 원자; 시아노기; 니트로기; 탄소수 1 내지 10의 알킬기; 중수소, 할로젠 원자, 시아노기, 니트로기 중 하나 이상으로 치환된 탄소수 1 내지 10의 알킬기, 탄소수 1 내지 10의 알콕시기; 페닐기; 나프틸기; 플루오렌닐기; 페난트렌닐기; 안트릴기; 파이레닐기; 크라이세닐기; 중수소, 할로젠 원자, 시아노기, 니트로기, 탄소수 1 내지 10의 알킬기 중 하나 이상으로 치환된 페닐기, 나프틸기, 플루오렌닐기, 페난트렌닐기, 안트릴기, 파이레닐기 및 크라이세닐기; 중에서 선택되는 어느 하나이며,

상기 X₁₀은 하기 [구조식 2]로 표시되는 치환기이다.

[구조식 2]



상기 [구조식 2] 중,

L₁은 연결기로서, 단일 결합, 또는 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 60의 아릴렌기이고;

* 는 상기 [화학식 A]에서의 피렌기 및 안트라센기의 결합 사이트이며;

상기 '치환 또는 비치환된'에서의 '치환'은 중수소, 시아노기, 할로젠기, 니트로기로 이루어진 군에서 선택된 1 개 이상의 치환기로 치환되는 것을 의미한다.

청구항 2

제 1 항에 있어서,

상기 [구조식 1]의 X₁ 내지 X₉은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 할로젠 원자, 시아노기, 니트로기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 20의 알킬기, 치환 또는 비치환된 페닐기, 치환 또는 비치환된 펜타레닐기(pentalenyl), 치환 또는 비치환된 인데닐기(indenyl), 치환 또는 비치환된 나프틸기(naphthyl), 치환 또는 비치환된 아줄레닐(azulenyl), 치환 또는 비치환된 헵탈레닐(heptalenyl), 치환 또는 비치환된 인다세닐(indacenyl), 치환 또는 비치환된 아세나프틸기(acenaphthyl), 치환 또는 비치환된 플루오렌닐(fluorenyl), 치환 또는 비치환된 페나레닐기(phenalenyl), 치환 또는 비치환된 페난트렌닐기(phenanthrenyl), 치환 또는 비치환된 안트릴기(anthryl), 치환 또는 비치환된 플루오란테닐기(fluoranthenyl), 치환 또는 비치환된 트리페닐레닐기(triphenylenyl), 치환 또는 비치환된 파이레닐기(pyrenyl), 치환 또는 비치환된 크라이세닐기(chrysenyl), 치환 또는 비치환된 나프타세닐기(naphthacenyl), 치환 또는 비치환된 피세닐기(picenyl), 치환 또는 비치환된 페릴레닐기(perylenyl), 치환 또는 비치환된 펜타세닐기(pentaphenyl), 치환 또는 비치환된 헥사세닐기(hexacenyl)로 이루어진 군으로부터 선택되는 것을 특징으로 하는 피렌계 유도체.

청구항 3

제1항에 있어서,

상기 구조식 2의 L₁이 단일 결합, 치환 또는 비치환된 페닐렌기, 치환 또는 비치환된 펜타레닐렌기, 치환 또는

비치환된 인데닐렌기, 치환 또는 비치환된 나프틸렌기, 치환 또는 비치환된 아줄레닐렌기, 치환 또는 비치환된 헵탈레닐렌기, 치환 또는 비치환된 인다세닐렌기, 치환 또는 비치환된 아세나프틸렌기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐렌기, 치환 또는 비치환된 페나레닐렌기, 치환 또는 비치환된 페난트레닐렌기, 치환 또는 비치환된 안트릴렌기, 치환 또는 비치환된 플루오란테닐렌기, 치환 또는 비치환된 트리페닐레닐렌기, 치환 또는 비치환된 파이레닐렌기, 치환 또는 비치환된 크라이세닐렌기, 치환 또는 비치환된 나프타세닐렌기, 치환 또는 비치환된 피세닐렌기, 치환 또는 비치환된 페틸레닐렌기, 치환 또는 비치환된 펜타세닐렌기, 치환 또는 비치환된 헥사세닐렌기 중에서 선택되는 어느 하나인 것을 특징으로 하는 피렌계 유도체

청구항 4

제 1 항에 있어서,

상기 구조식 2 중 L₁이 단일 결합인 것을 특징으로 하는 피렌계 유도체.

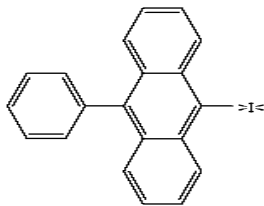
청구항 5

제1항에 있어서,

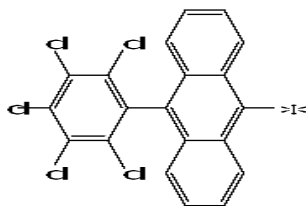
상기 화학식 A에서 상기 [구조식 1]은

하기 [치환기 1] 내지 [치환기 10], [치환기 17], [치환기 18], [치환기 20] 내지 [치환기 26], [치환기 32], [치환기 36], [치환기 37], [치환기 40], [치환기 44], [치환기 45], [치환기 47] 내지 [치환기 49], [치환기 51], [치환기 56], [치환기 60]으로 표시되는 군으로부터 선택되는 어느 하나인 것을 특징으로 하는 피렌 유도체

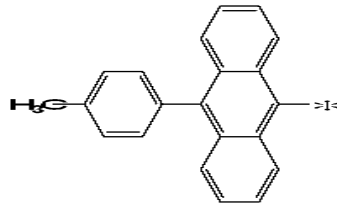
[치환기 1]



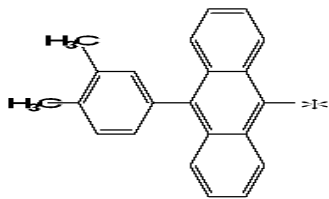
[치환기 2]



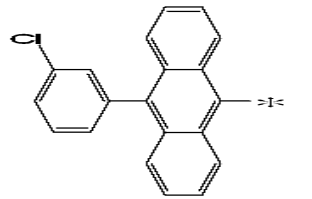
[치환기 3]



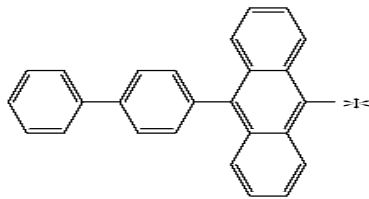
[치환기 4]



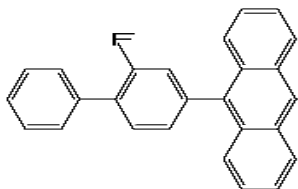
[치환기 5]



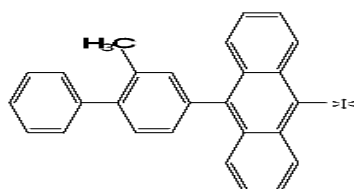
[치환기 6]



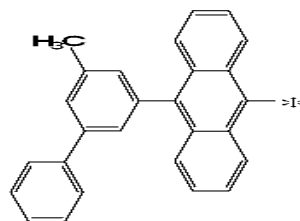
[치환기 7]



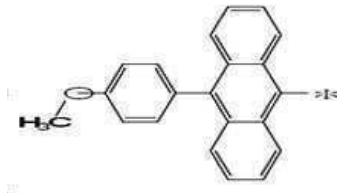
[치환기 8]



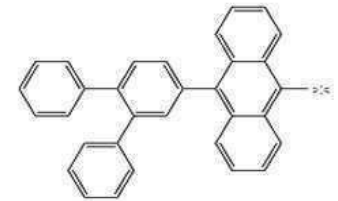
[치환기 9]



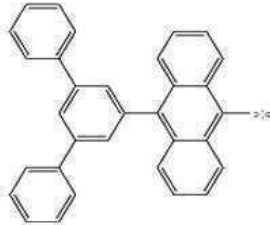
[치환기 10]



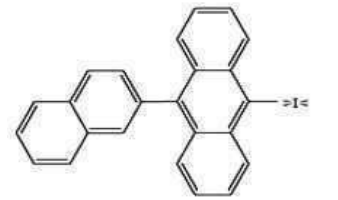
[치환기 17]



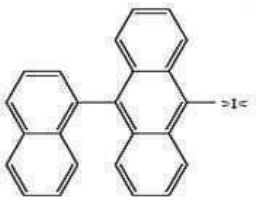
[치환기 18]



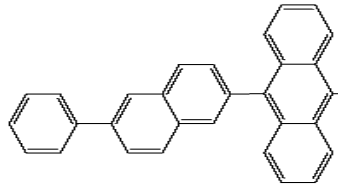
[치환기 20]



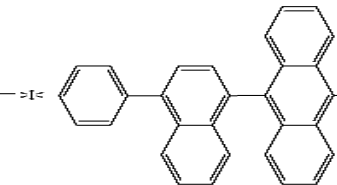
[치환기 21]



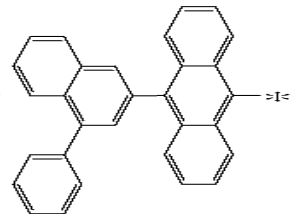
[치환기 22]



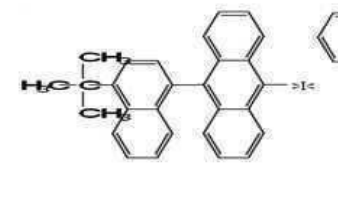
[치환기 23]



[치환기 24]



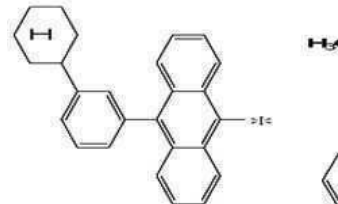
[치환기 25]



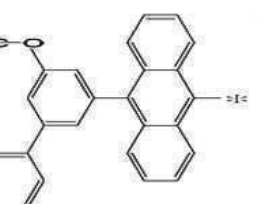
[치환기 26]



[치환기 32]



[치환기 36]

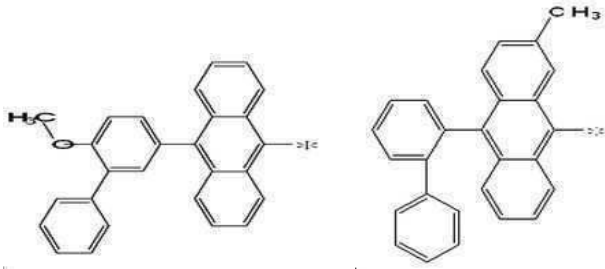


[치환기 37]



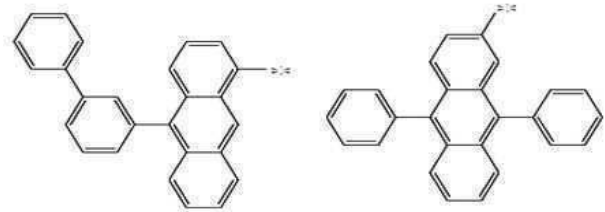
[치환기 40]





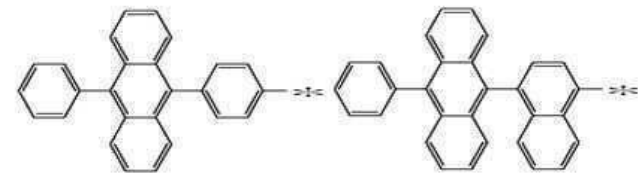
[치환기 44]

[치환기 45]



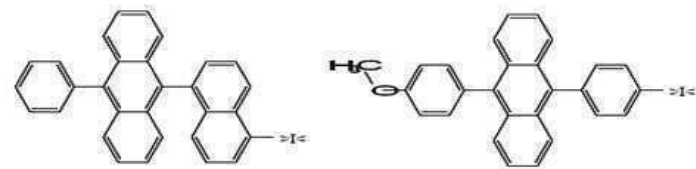
[치환기 47]

[치환기 48]



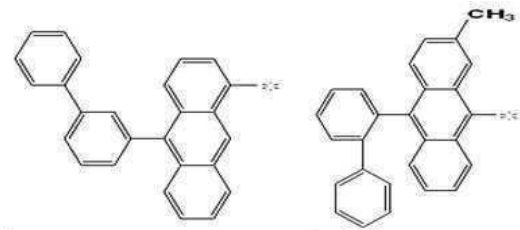
[치환기 49]

[치환기 51]



[치환기 56]

[치환기 60]



청구항 6

제1전극;

상기 제1전극에 대향된 제2전극; 및

상기 제1전극과 상기 제2전극 사이에 개재된 유기층;을 포함하고, 상기 유기층이 제1항 내지 제5항 중에서 선택되는 어느 한 항의 피렌계 유도체 화합물을 1종 이상 포함한, 유기 발광 소자.

청구항 7

제 6 항에 있어서,

상기 제1전극과 상기 제2전극 사이에 개재된 유기층이 발광층인 것을 특징으로 하는 유기발광소자.

청구항 8

제 6 항에 있어서,

상기 유기층이, 정공 주입층, 정공 수송층, 정공 주입 기능 및 정공 수송 기능을 동시에 갖는 기능층, 발광층, 전자 수송층, 및 전자 주입층 중 적어도 하나를 포함한, 유기 발광 소자.

청구항 9

제 7 항에 있어서,

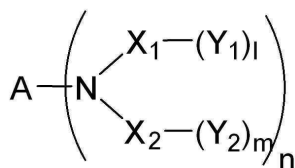
상기 발광층이 도판트를 더 포함하고, 상기 발광층에 포함된 상기 피렌계 유도체 화합물이 호스트의 역할을 하는, 유기 발광 소자

청구항 10

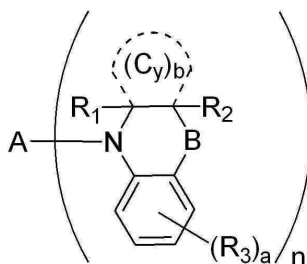
제 9 항에 있어서,

상기 도판트는 하기 화학식 1 또는 화학식 2로 표시되는 화합물인 것을 특징으로 하는, 유기발광소자

[화학식 1]



[화학식 2]



상기 [화학식 1]과 [화학식 2] 중,

A는 치환 또는 비치환된 탄소수 6내지 50의 아릴기, 치환 또는 비치환되고 이종 원자로 O, N 또는 S를 갖는 탄소수 3 내지 50의 헤테로아릴기, 치환되거나 치환되지 않은 탄소수 6 내지 60의 아릴렌기, 치환 또는 비치환되고 이종 원자로 O, N 또는 S를 갖는 탄소수 3 내지 50의 헤테로아릴렌기 중에서 선택되는 어느 하나이고,;

상기 [화학식 1] 에서,

X1 및 X2는 각각 독립적으로 치환되거나 치환되지 않은 탄소수 6 내지 30의 아릴렌기이거나 단일결합이고, X1과 X2는 서로 결합될 수 있고;

Y1 내지 Y2는 각각 독립적으로 치환되거나 치환되지 않은 탄소수 6 내지 24의 아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 24의 알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 24의 사이클로알킬기, 시아노기, 할로젠기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 40의 알킬실릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴실릴기, 중수소 및 수소로 이루어진 군으로부터 1종 이상 선택되고, Y1내지 Y2 각각은 서로 동일하거나 상이하며, 서로 인접하는 기와 지방족, 방향족의 축합 고리를 형성할 수 있으며;

l, m 은 각각 1 내지 20의 정수이고, n은 1 내지 4의 정수이며;

상기 [화학식 2] 에서,

C_y는 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 8의 시클로알킬이고, b는 1 내지 4 의 정수이되, b이 2 이상인 경우 각각의 시클로알칸은 융합된 형태일 수 있고. 또한, 시클로알칸내의 수소자리는 각각 중수소 또는 탄소수 1 내지 20의 알킬로 치환될 수 있으며, 서로 동일하거나 상이하고;

B 는 단일 결합 또는 -[C(R₅)(R₆)]_p-이고, 상기 p는 1 내지 3의 정수이되, p가 2 이상인 경우 2 이상의 R₅ 및 R₆ 은 서로 동일하거나 상이하고;

R_1 , R_2 , R_3 , R_5 및 R_6 은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 할로젠 원자, 시아노기, 니트로기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 60의 알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 60의 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 60의 아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 40의 알킬실릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴실릴기 중에서 선택될 수 있으며,

a 는 1 내지 4의 정수이되, a 가 2 이상인 경우 2 이상의 R_3 는 서로 동일하거나 상이하고, R_3 이 복수인 경우, 각각의 R_3 은 융합된 형태일 수 있고, n 은 1 내지 4의 정수이며,

상기 '치환 또는 비치환된'에서의 '치환'은 중수소, 시아노기, 할로젠기, 니트로기로 이루어진 군에서 선택된 1개 이상의 치환기로 치환되는 것을 의미한다.

발명의 설명

기술 분야

[0001] 본 발명은 치환기를 가진 피렌 유도체 화합물 및 이를 발광물질로 포함하는 유기전계발광소자에 관한 것으로서, 보다 상세하게는 구동전압, 전류효율 등의 발광 특성이 우수하고, 보다 장수명의 특성을 가지며 안정적인 안트라세닐기들을 가진 피렌 유도체 화합물 및 이를 포함하는 유기전계발광소자에 관한 것이다.

배경 기술

[0002] 최근 표시장치의 대형화에 따라 공간 점유가 작은 평면표시소자의 요구가 증대되고 있는데, 대표적인 평면표시소자인 액정 디스플레이는 기존의 CRT(cathode ray tube)에 비해 경량화가 가능하다는 장점은 있으나, 시야각(viewing angle)이 제한되고 배면 광(back light)이 반드시 필요하다는 등의 단점을 갖고 있다. 이에 반하여, 새로운 평면표시소자인 유기전계발광소자(organic light emitting diode, OLED)는 자기 발광 현상을 이용한 디스플레이로서, 시야각이 크고, 액정 디스플레이에 비해 경박, 단소해될 수 있으며, 빠른 응답 속도 등의 장점을 가지고 있으며, 최근에는 풀-컬러(full-color) 디스플레이 또는 조명으로의 응용이 기대되고 있다.

[0003] 일반적으로 유기 발광 현상이란 유기 물질을 이용하여 전기에너지를 빛에너지로 전환시켜주는 현상을 말한다.

[0004] 유기 발광 현상을 이용하는 유기전계발광소자는 통상 양극과 음극 및 이 사이에 유기물층을 포함하는 구조를 가진다. 여기서 유기물층은 유기전계발광소자의 효율과 안정성을 높이기 위하여 각기 다른 물질로 구성된 다층의 구조로 이루어진 경우가 많으며, 예컨대 정공주입층, 정공수송층, 발광층, 전자수송층, 전자주입층 등으로 이루어질 수 있다. 이러한 유기전계발광소자의 구조에서 두 전극 사이에 전압을 걸어주게 되면 양극에서는 정공이, 음극에서는 전자가 유기물층에 주입되게 되고, 주입된 정공과 전자가 만났을 때 엑시톤(exciton)이 형성되며, 이 엑시톤이 다시 바닥상태로 떨어질 때 빛이 나게 된다. 이러한 유기전계발광소자는 자발광, 고휘도, 고효율, 낮은 구동전압, 넓은 시야각, 높은 콘트라스트, 고속 응답성 등의 특성을 갖는 것으로 알려져 있다.

[0005] 유기전계발광소자에서 유기물층으로 사용되는 재료는 기능에 따라, 발광 재료와 전하수송 재료, 예컨대 정공주입 재료, 정공수송 재료, 전자수송 재료, 전자주입 재료 등으로 분류될 수 있다. 상기 발광 재료는 분자량에 따라 고분자형과 저분자형으로 분류될 수 있고, 발광 메커니즘에 따라 전자의 일중항 여기상태로부터 유래되는 형광 재료와 전자의 삼중항 여기상태로부터 유래되는 인광 재료로 분류될 수 있다. 또한, 발광 재료는 발광색에 따라 청색, 녹색, 적색 발광 재료와 보다 나은 천연색을 구현하기 위해 필요한 노란색 및 주황색 발광 재료로 구분될 수 있다.

[0006] 한편, 발광 재료로서 하나의 물질만 사용하는 경우 분자간 상호 작용에 의하여 최대 발광 파장이 장파장으로 이동하고 색순도가 떨어지거나 발광 감쇄 효과로 소자의 효율이 감소되는 문제가 발생하므로, 색순도의 증가와 에너지 전이를 통한 발광 효율을 증가시키기 위하여 발광 재료로서 호스트-도판트 시스템을 사용할 수 있다.

[0007] 그 원리는 발광층을 형성하는 호스트보다 에너지 대역 간극이 작은 도판트를 발광층에 소량 혼합하면, 발광층에서 발생한 엑시톤이 도판트로 수송되어 효율이 높은 빛을 내는 것이다. 이때, 호스트의 파장이 도판트의 파장대로 이동하므로, 이용하는 도판트의 종류에 따라 원하는 파장의 빛을 얻을 수 있다.

[0008] 유기전계발광소자가 전술한 우수한 특징들을 충분히 발휘하기 위해서는 소자 내 유기물층을 이루는 물질, 예컨대 정공주입 물질, 정공수송 물질, 발광 물질, 전자수송 물질, 전자주입 물질 등이 안정하고 효율적인 재료에 의하여 뒷받침되는 것이 선행되어야 하나, 아직까지 안정하고 효율적인 유기전계발광소자용 유기물층 재료의 개

발이 충분히 이루어지지 않은 상태이다. 따라서, 당 기술분야에서는 새로운 재료의 개발이 계속 요구되고 있는 실정이다.

발명의 내용

해결하려는 과제

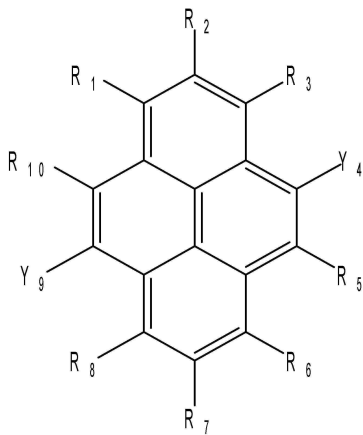
[0009] 따라서, 본 발명이 이루고자 하는 첫 번째 기술적 과제는 장수명을 가지며 구동전압이 낮고 발광효율이 우수한 특성을 갖는 유기전계발광소자용 피렌 유도체 화합물을 제공하는 것이다.

[0010] 본 발명이 이루고자 하는 두 번째 기술적 과제는 상기 피렌 유도체 화합물을 포함하는 유기전계발광소자를 제공하는 것이다.

과제의 해결 수단

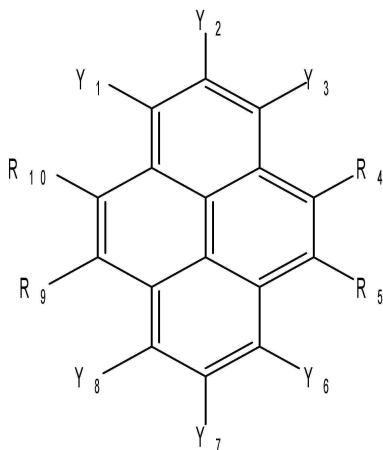
[0011] 본 발명은 상기 첫 번째 기술적 과제를 달성하기 위하여, 하기 [화학식 A] 또는 [화학식 B]로 표시되는 고리형 아민 치환기를 가진 피렌 유도체 화합물을 제공한다.

[0012] [화학식 A]



[0013]

[0014] [화학식 B]



[0015]

[0016] 상기 [화학식 A] 및 [화학식 B]에서,

[0017] 상기 R₁ 내지 R₄, R₆ 내지 R₉는 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 30의 알케닐기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 30의 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 30의 시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알콕시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬티옥시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 30의 아릴티옥시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬아민기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 30의 아릴아민기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내

지 50의 아틸기, 치환 또는 비치환되고 이중 원자로 O, N 또는 S를 갖는 탄소수 3 내지 50의 헤테로아틸기, 치환 또는 비치환된 실리콘기, 치환 또는 비치환된 붕소기, 치환 또는 비치환된 실란기, 카르보닐기, 포스포릴기, 아미노기, 니트릴기, 히드록시기, 니트로기, 할로젠기, 아미드기 및 에스테르기로 이루어진 군에서 선택되며, 서로 인접하는 기와 지방족, 방향족, 지방족헤테로 또는 방향족헤테로의 축합 고리를 형성할 수 있고,

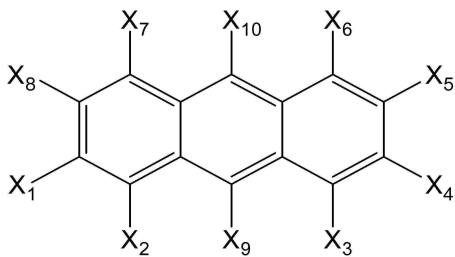
[0018] R_5 및 R_{10} 은 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 30의 알케닐기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 30의 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 30의 시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 50의 아틸기, 치환 또는 비치환되고 이중 원자로 O, N 또는 S를 갖는 탄소수 3 내지 50의 헤테로아틸기, 치환 또는 비치환된 실리콘기로 이루어진 군에서 선택되며, 서로 인접하는 기와 지방족, 방향족, 지방족헤테로 또는 방향족헤테로의 축합 고리를 형성할 수 있고,

[0019] 상기 Y_1 내지 Y_4 , Y_6 내지 Y_9 는 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로, 상기 R_1 내지 R_4 , R_6 내지 R_9 에서 정의한 바와 동일한 치환기를 가지거나, 또는 하기 [구조식 1]로 표시되는 치환기를 가질 수 있으며,

[0020] 단, [화학식 A]에서는 Y_4 및 Y_9 중 적어도 하나는 하기 [구조식 1]로 표시되는 치환기이며,

[0021] 또한 [화학식 B]에서는 상기 Y_1 내지 Y_3 과 Y_6 내지 Y_8 중 적어도 하나는 하기 [구조식 1]로 표시되는 치환기이다.

[0022] [구조식 1]



[0023]

[0024] 상기 [구조식 1] 중,

[0025] X_1 내지 X_{10} 은 서로 동일하거나 상이하며, 각각 독립적으로 상기 R_1 내지 R_4 , R_6 내지 R_9 에서 정의한 바와 동일한 치환기로 이루어지되, 상기 X_1 내지 X_{10} 중 하나는 하기 [구조식 2]로 표시되는 치환기이다.

[0026] [구조식 2]



[0027]

[0028] 상기 [구조식 2] 중,

[0029] L_1 은 연결기로서, 단일 결합, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 60의 알킬렌기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 60의 알케닐렌기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 60의 알킬닐렌기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 60의 시클로알킬렌기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 60의 헤테로시클로알킬렌기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 60의 아틸렌기 또는 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 60의 헤테로아틸렌기이고;

[0030] * 는 상기 [화학식 A] 또는 [화학식 B]에서의 피렌기 및 안트라센기의 결합 사이트를 의미한다.

[0031] 또한 본 발명은 상기 두 번째 과제를 달성하기 위하여, 제1전극, 상기 제1전극에 대향된 제2전극 및 상기 제1전극과 상기 제2전극 사이에 개재된 유기층을 포함하고, 상기 유기층이 [화학식 A] 또는 [화학식 B]로 표시되는 피렌 유도체 화합물을 1종 이상 포함한, 유기 발광 소자를 제공한다.

발명의 효과

[0032] 본 발명에 따르면, [화학식 A] 또는 [화학식 B]로 표시되는 피렌 유도체 화합물은 기존 물질에 비하여 안정적이고 우수한 발광 특성을 가지므로 이를 포함하는 유기전계발광소자는 저전압 구동이 가능하고 발광효율을 개선시킬 수 있다.

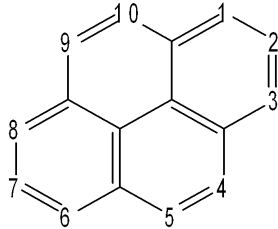
도면의 간단한 설명

[0033] 도 1은 본 발명의 일 구체예에 따른 유기전계발광소자의 개략도이다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

[0034] 이하, 본 발명을 더욱 상세하게 설명한다.

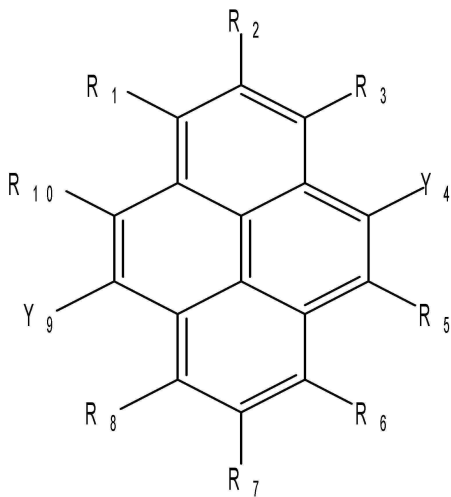
[0035] 이하 기술되는 피렌 유도체상의 치환되는 부분에 관한 용어를 통일화하기 위해, 본 발명에서의 피렌기의 방향족 탄소와 결합되는 수소와 치환될 수 있는 부분의 번호는 다음과 같이 정의한다.



[0036]

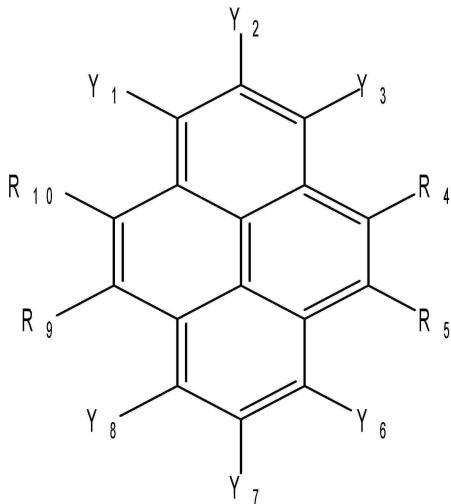
[0037] 본 발명은 유기전계소자의 발광층에 포함되는 피렌 유도체 화합물로서, 하기 [화학식 A] 또는 [화학식 B]로 표시되는 화합물인 것을 특징으로 하고, [화학식 A] 또는 [화학식 B]에서, 그 치환기를 보다 구체적으로 설명하면 하기와 같다.

[0038] [화학식 A]



[0039]

[0040] [화학식 B]



[0041]

[0042] 상기 [화학식 A] 및 [화학식 B]에서,

[0043] 상기 R_1 내지 R_4 , R_6 내지 R_9 는 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소 원자, 중수소 원자, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 30의 알케닐기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 30의 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 30의 시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알콕시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬티옥시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 30의 아릴티옥시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬아민기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 30의 아릴아민기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 50의 아릴기, 치환 또는 비치환되고 이종 원자로 O, N 또는 S를 갖는 탄소수 3 내지 50의 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 실리콘기, 치환 또는 비치환된 붕소기, 치환 또는 비치환된 실란기, 카르보닐기, 포스포릴기, 아미노기, 니트릴기, 히드록시기, 니트로기, 할로젠기, 아미드기 및 에스테르기로 이루어진 군에서 선택되며, 서로 인접하는 기와 지방족, 방향족, 지방족헤테로 또는 방향족헤테로의 축합 고리를 형성할 수 있고,

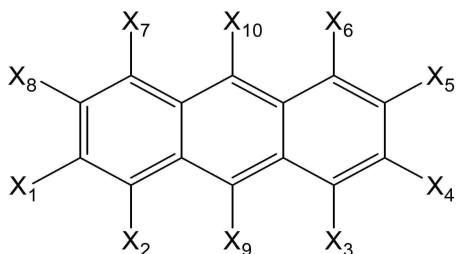
[0044] R_5 및 R_{10} 은 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 30의 알케닐기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 30의 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 30의 시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 50의 아릴기, 치환 또는 비치환되고 이종 원자로 O, N 또는 S를 갖는 탄소수 3 내지 50의 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 실리콘기로 이루어진 군에서 선택되며, 서로 인접하는 기와 지방족, 방향족, 지방족헤테로 또는 방향족헤테로의 축합 고리를 형성할 수 있고,

[0045] 상기 Y_1 내지 Y_4 , Y_6 내지 Y_9 는 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로, 상기 R_1 내지 R_4 , R_6 내지 R_9 에서 정의한 바와 동일한 치환기를 가지거나, 또는 하기 [구조식 1]로 표시되는 치환기를 가질 수 있으며,

[0046] 단, [화학식 A]에서는 Y_4 및 Y_9 중 적어도 하나는 하기 [구조식 1]로 표시되는 치환기이며,

[0047] 또한 [화학식 B]에서는 상기 Y_1 내지 Y_3 과 Y_6 내지 Y_8 중 적어도 하나는 하기 [구조식 1]로 표시되는 치환기이다.

[0048] [구조식 1]



[0049]

[0050] 상기 [구조식 1] 중,

[0051] X_1 내지 X_{10} 은 서로 동일하거나 상이하며, 각각 독립적으로 상기 R_1 내지 R_4 , R_6 내지 R_9 에서 정의한 바와 동일한 치환기로 이루어지되, 상기 X_1 내지 X_{10} 중 하나는 하기 [구조식 2]로 표시되는 치환기이다.

[0052] [구조식 2]



[0053]

[0054] 상기 [구조식 2] 중,

[0055] L_1 은 연결기로서, 단일 결합, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 60의 알킬렌기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 60의 알케닐렌기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 60의 알킬닐렌기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 60의 시클로알킬렌기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 60의 헤테로시클로알킬렌기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 60의 아릴렌기 또는 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 60의 헤테로아릴렌기이고;

[0056] * 는 상기 [화학식 A] 또는 [화학식 B]에서의 피렌기 및 안트라센기의 결합 사이트를 의미한다.

[0057] 본 발명에 있어서, "치환 또는 비치환된"이라는 용어는 시아노기, 할로젠기, 히드록시기, 니트로기, 알킬기, 알

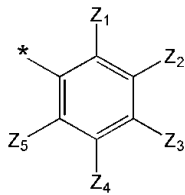
콕시기, 알킬아미노기, 아릴아미노기, 헤테로 아릴아미노기, 알킬실릴기, 아릴실릴기, 아릴옥시기, 아릴기, 헤테로아릴기, 게르마늄, 인, 보론, 수소 및 중수소로 이루어진 군에서 선택된 1개 이상의 치환기로 치환 또는 비치환되는 것을 의미한다.

[0058]

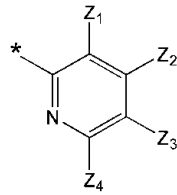
보다 구체적으로, 상기 [구조식 1]의 X_1 내지 X_{10} 은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 20의 알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 20의 알케닐기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 20의 알킬닐기, 치환 또는 비치환된 페닐기, 치환 또는 비치환된 펜타레닐기(pentalenyl), 치환 또는 비치환된 인덴닐기(indenyl), 치환 또는 비치환된 나프틸기(naphthyl), 치환 또는 비치환된 아줄레닐(azulenyl), 치환 또는 비치환된 헵탈레닐(heptalenyl), 치환 또는 비치환된 인다세닐(indacenyl), 치환 또는 비치환된 아세나프틸기(acenaphthyl), 치환 또는 비치환된 플루오레닐기(fluorenyl), 치환 또는 비치환된 페나레닐기(phenalenyl), 치환 또는 비치환된 페난트레닐기(phenanthrenyl), 치환 또는 비치환된 안트릴기(anthryl), 치환 또는 비치환된 플루오란테닐기(fluoranthenyl), 치환 또는 비치환된 트리페닐레닐기(triphenylenyl), 치환 또는 비치환된 파이레닐기(pyrenyl), 치환 또는 비치환된 크라이세닐기(chrysenyl), 치환 또는 비치환된 나프타세닐기(naphthacenyl), 치환 또는 비치환된 피세닐기(picenyl), 치환 또는 비치환된 페릴레닐기(perylene), 치환 또는 비치환된 펜타세닐기(pentaphenyl), 치환 또는 비치환된 헥사세닐기(hexacenyl), 치환 또는 비치환된 피롤일기(pyrrolyl), 치환 또는 비치환된 피라졸일기(pyrazolyl), 치환 또는 비치환된 이미다졸일기(imidazolyl), 치환 또는 비치환된 이미다졸리닐기(imidazolynyl), 치환 또는 비치환된 이미다조피리디닐기(imidazopyridinyl), 치환 또는 비치환된 이미다조피리미디닐기(imidazopyrimidinyl), 치환 또는 비치환된 피리디닐기(pyridinyl), 치환 또는 비치환된 피라지닐기(pyrazinyl), 치환 또는 비치환된 피리미디닐기(pyrimidinyl), 치환 또는 비치환된 인돌일기(indolyl), 치환 또는 비치환된 푸리닐기(purinyl), 치환 또는 비치환된 퀴놀리닐기(quinolinyl), 치환 또는 비치환된 프탈라지닐기(phthalazinyl), 치환 또는 비치환된 인돌리지닐기(indolizinyl), 치환 또는 비치환된 나프티리디닐기(naphthyridinyl), 치환 또는 비치환된 퀴나졸리닐기(quinazolinyl), 치환 또는 비치환된 시놀리닐기(cinnolinyl), 치환 또는 비치환된 인다졸일기(indazolyl), 치환 또는 비치환된 카바졸일기(carbazolyl), 치환 또는 비치환된 페나지닐기(phenazinyl), 치환 또는 비치환된 페난트리디닐기(phenanthridinyl), 치환 또는 비치환된 파이라닐기(pyranyl), 치환 또는 비치환된 크로메닐기(chromenyl), 치환 또는 비치환된 푸라닐기, 치환 또는 비치환된 벤조푸라닐기(benzofuranyl), 치환 또는 비치환된 티오펜일기(thiophenyl), 치환 또는 비치환된 벤조티오펜일기(benzothiophenyl), 치환 또는 비치환된 이소티아졸일기(isothiazolyl), 치환 또는 비치환된 벤조이미다졸일기(benzoimidazolyl), 치환 또는 비치환된 이소자졸일기(isoxazolyl), 치환 또는 비치환된 디벤조티오펜일기(dibenzothiophenyl), 치환 또는 비치환된 디벤조푸라닐기(dibenzopuranyl), 치환 또는 비치환된 트리아지닐기(triazinyl), 또는 치환 또는 비치환된 옥사디아졸일기(oxadiazolyl)로 이루어진 군으로부터 선택될 수 있다.

[0059]

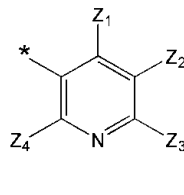
보다 구체적으로, 상기 [구조식 1]의 X_1 내지 X_{10} 은 서로 독립적으로, 수소; 중수소; 할로젠 원자; 히드록실기; 시아노기; 니트로기; 아미노기; 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 20의 알킬기; 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 20의 알케닐기; 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 20의 알킬닐기; 하기 화학식 4A 내지 4H의 치환기; 중에서 선택되는, 피렌계 유도체일 수 있다.



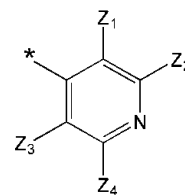
화학식 4A



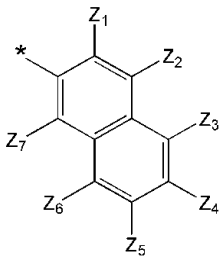
화학식 4B



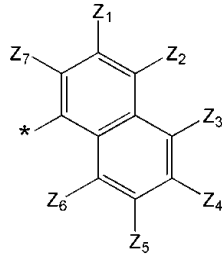
화학식 4C



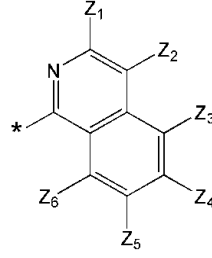
화학식 4D



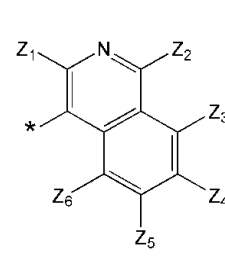
화학식 4E



화학식 4F



화학식 4G



화학식 4H

[0060]

[0061]

상기 화학식 4A 내지 4H 에서,

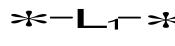
[0062]

Z₁내지 Z₇은 서로 독립적으로, 수소; 중수소; 할로젠 원자; 히드록실기; 시아노기; 니트로기; 아미노기; 아미디노기; 히드라진; 히드라존; 카르복실기나 이의 염; 술폰산기나 이의 염; 인산이나 이의 염; 탄소수 1 내지 10의 알킬기; 탄소수 1 내지 10의 알콕시기; 탄소수 1 내지 10의 알킬티오기; 중수소, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진, 히드라존, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염 및 인산이나 이의 염 중 하나 이상으로 치환된 탄소수 1 내지 10의 알킬기, 탄소수 1 내지 10의 알콕시기 및 탄소수 1 내지 10의 알킬티오기; 페닐기; 나프틸기; 플루오레닐기; 페난트레닐기; 안트릴기; 파이레닐기; 크라이세닐기; 중수소, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진, 히드라존, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염, 인산이나 이의 염, 탄소수 1 내지 10의 알킬기, 탄소수 1 내지 10의 알콕시기 및 탄소수 1 내지 10의 알킬티오기 중 하나 이상으로 치환된 페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트릴기, 파이레닐기 및 크라이세닐기; 인돌일기; 벤조이미다졸일기; 카바졸일기; 이미다졸일기; 이미다졸리닐기; 이미다조피리디닐기; 이미다조피리미디닐기; 피리디닐기; 피리미디닐기; 트리아지닐기; 퀴놀리닐기; 중수소, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진, 히드라존, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염, 인산이나 이의 염, 탄소수 1 내지 10의 알킬기, 탄소수 1 내지 10의 알콕시기, 탄소수 1 내지 10의 알킬티오기 페닐기 및 나프틸기 중 하나 이상으로 치환된 인돌일기, 벤조이미다졸일기, 카바졸일기, 이미다졸일기, 이미다졸리닐기, 이미다조피리디닐기, 이미다조피리미디닐기, 피리디닐기, 피리미디닐기, 트리아지닐기 및 퀴놀리닐기; 디(탄소수 1 내지 10의 알킬)아미노기; 및 디(탄소수 1 내지 10의 아릴)아미노기 중에서 선택되는 어느 하나이고, 상기 탄소수 6 내지 10의 아릴기는 페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트릴기, 파이레닐기 및 크라이세닐기 중에서 선택되는 어느 하나이다.

[0063]

본 발명에서 상기 구조식 1 내의 치환기 X₁₀가 상기 구조식 2()로 표시되는 치환기일 수 있다.

[0064]

본 발명에서 상기 치환기 X₁₀가 상기 구조식 2()로 표시되는 치환기인 경우, 상기 구조식 2의 L₁은 단일 결합, 치환 또는 비치환된 페닐렌기, 치환 또는 비치환된 펜타레닐렌기, 치환 또는 비치환된 인데닐렌기, 치환 또는 비치환된 나프틸렌기, 치환 또는 비치환된 아줄레닐렌기, 치환 또는 비치환된 헵탈레닐렌기, 치환 또는 비치환된 인다세닐렌기, 치환 또는 비치환된 아세나프틸렌기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐렌기, 치환 또는 비치환된 페나레닐렌기, 치환 또는 비치환된 페난트레닐렌기, 치환 또는 비치환된 안트릴렌기, 치환 또는 비치환된 플루오란테닐렌기, 치환 또는 비치환된 트리페닐레닐렌기, 치환 또는 비치환된 파이레닐렌기, 치환 또는 비치환된 크라이세닐렌기, 치환 또는 비치환된 나프타세닐렌기, 치환 또는 비치환된 피세닐렌기, 치환 또는 비치환된 페릴레닐렌기, 치환 또는 비치환된 펜타세닐렌기, 치환 또는 비치환된 헥사세닐렌기, 치환 또는 비치환된 피롤일렌기, 치환 또는 비치환된 피라졸일렌기, 치환 또는 비치환된 이미다졸일렌기, 치환 또는 비치환된 이미다졸리닐렌기, 치환 또는 비치환된 이미다조피리디닐렌기, 치환 또는 비치환된 이미다조피리미디닐렌기, 치환 또는 비치환된 피리디닐렌기, 치환 또는 비치환된 피라지닐렌기, 치환 또는 비치환된 피리미디닐렌기,

치환 또는 비치환된 인돌일렌기, 치환 또는 비치환된 푸리닐렌기, 치환 또는 비치환된 퀴놀리닐렌기, 치환 또는 비치환된 프탈라지닐렌기, 치환 또는 비치환된 인돌리지닐렌기, 치환 또는 비치환된 나프티리디닐렌기, 치환 또는 비치환된 퀴나졸리닐렌기, 치환 또는 비치환된 시놀리닐렌기, 치환 또는 비치환된 인다졸일렌기, 치환 또는 비치환된 카바졸일렌기, 치환 또는 비치환된 페나지닐렌기, 치환 또는 비치환된 페난트리디닐렌기, 치환 또는 비치환된 파이라닐렌기, 치환 또는 비치환된 크로메닐렌기, 치환 또는 비치환된 푸라닐렌기, 치환 또는 비치환된 벤조푸라닐렌기, 치환 또는 비치환된 티오펜일렌기, 치환 또는 비치환된 벤조티오펜일렌기, 치환 또는 비치환된 이소티아졸일렌기, 치환 또는 비치환된 벤조이미다졸일렌기, 치환 또는 비치환된 이속사졸일렌기, 치환 또는 비치환된 디벤조티오펜일렌기, 치환 또는 비치환된 디벤조푸라닐렌기, 치환 또는 비치환된 트리아지닐렌기, 또는 치환 또는 비치환된 옥사디아졸일렌기 중에서 선택되는 어느 하나일 수 있다.

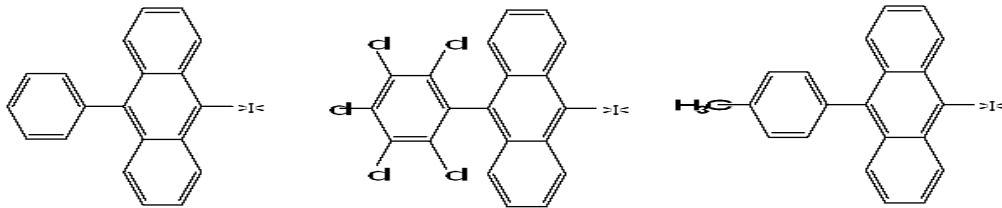
[0065] 이 경우에 상기 구조식 2의 L₁은 단일 결합일 수 있다.

[0066] 보다 구체적으로, 본 발명은 [화학식 A]에서는 치환기 Y₄ 및 Y₉ 중 선택된 하나만이 상기 [구조식 1]로 표시되는 치환기이며, 또한 상기 [화학식 B]에서는 치환기 Y₁ 내지 Y₃ 과 Y₆ 내지 Y₈ 중에서 선택된 하나만이 상기 [구조식 1]로 표시되는 치환기일 수 있다.

[0067] 또 다른 구체적인 예로서, 상기 [화학식 A]에서는 치환기 Y₄ 및 Y₉는 각각 상기 [구조식 1]로 표시되는 치환되고, 또한 [화학식 B]에서는 Y₁ 내지 Y₃ 중에서 선택된 어느 하나와 Y₆ 내지 Y₈ 중에서 선택된 어느 하나가 각각 상기 [구조식 1]로 치환될 수 있다.

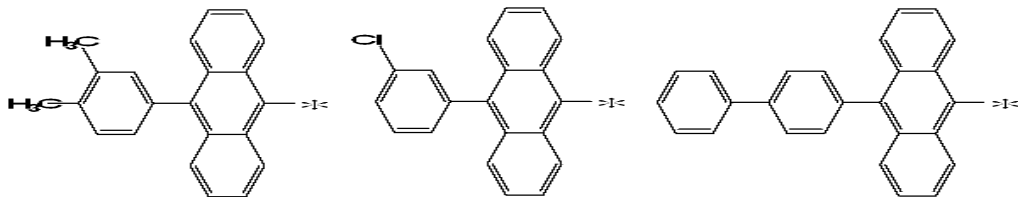
[0068] 보다 구체적으로, 본 발명에서 상기 화학식 A 및 화학식 B에서의 상기 [구조식 1]은 하기 [치환기 1] 내지 [치환기 100]으로 표시되는 군으로부터 선택되는 어느 하나일 수 있다.

[0069] [치환기 1] [치환기 2] [치환기 3]



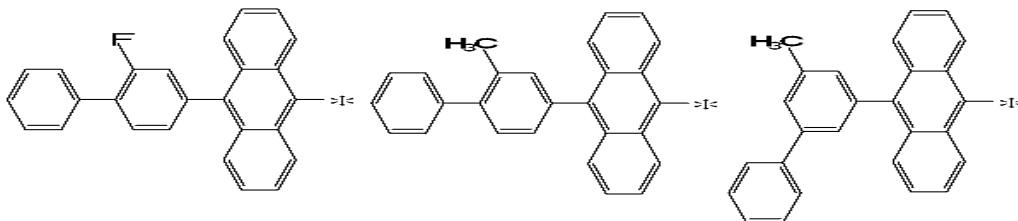
[0070]

[0071] [치환기 4] [치환기 5] [치환기 6]



[0072]

[0073] [치환기 7] [치환기 8] [치환기 9]



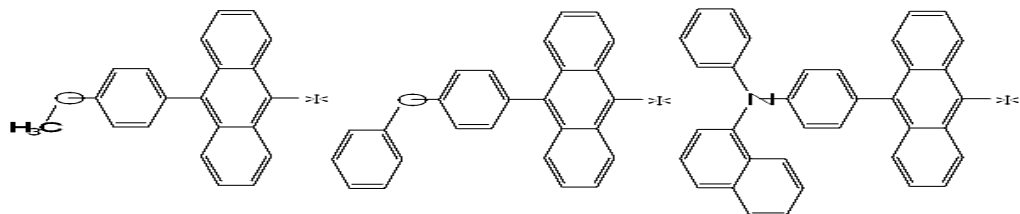
[0074]

[0075]

[치환기 10]

[치환기 11]

[치환기 12]



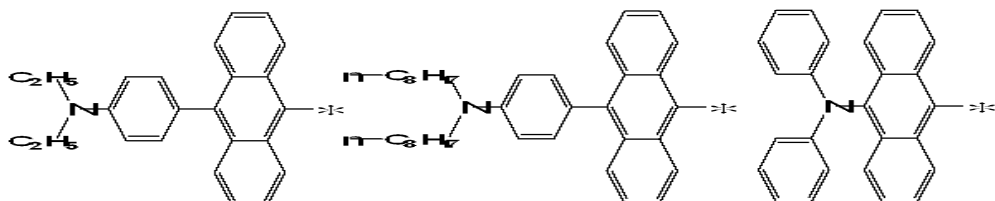
[0076]

[0077]

[치환기 13]

[치환기 14]

[치환기 15]



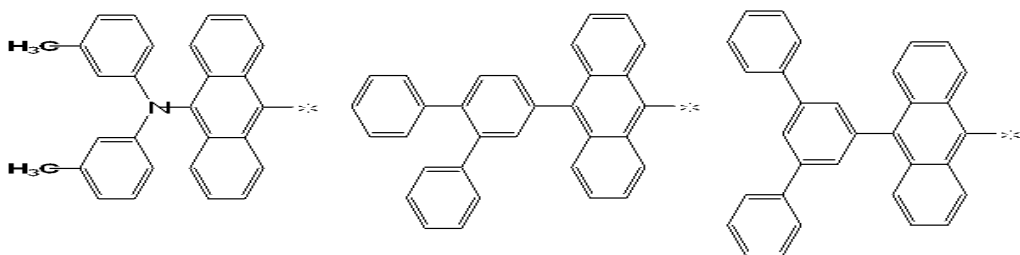
[0078]

[0079]

[치환기 16]

[치환기 17]

[치환기 18]



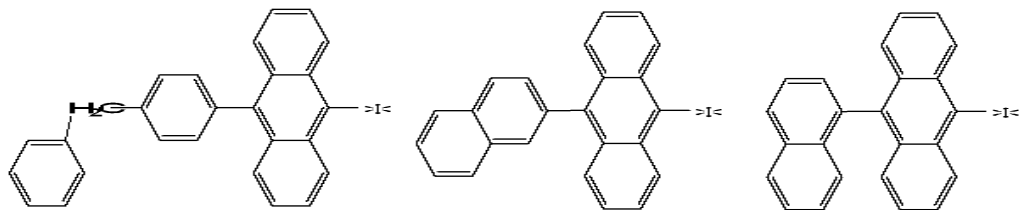
[0080]

[0081]

[치환기 19]

[치환기 20]

[치환기 21]



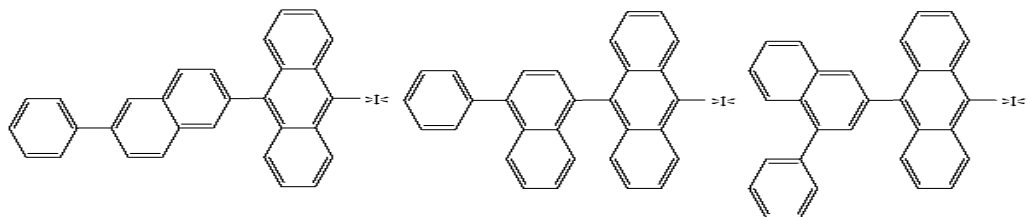
[0082]

[0083]

[치환기 22]

[치환기 23]

[치환기 24]



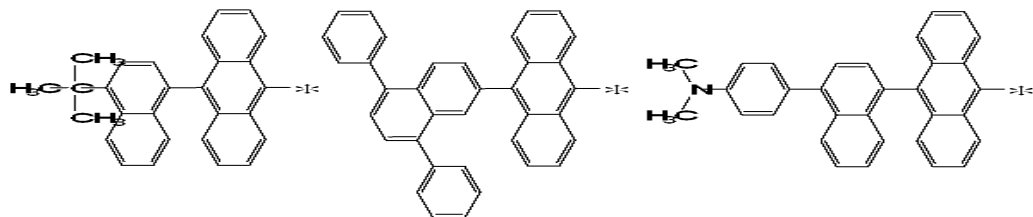
[0084]

[0085]

[치환기 25]

[치환기 26]

[치환기 27]



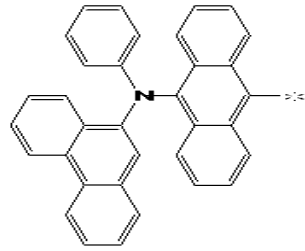
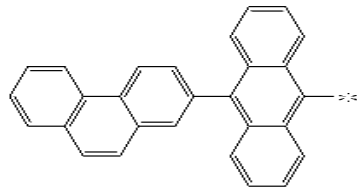
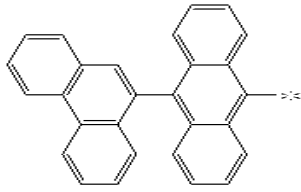
[0086]

[0087]

[치환기 28]

[치환기 29]

[치환기 30]



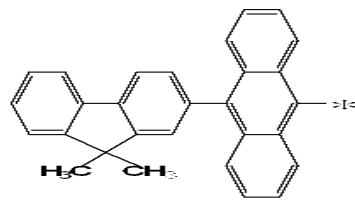
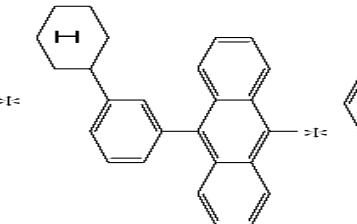
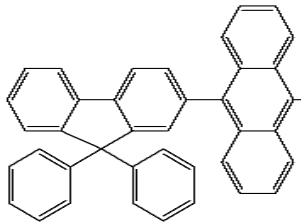
[0088]

[0089]

[치환기 31]

[치환기 32]

[치환기 33]



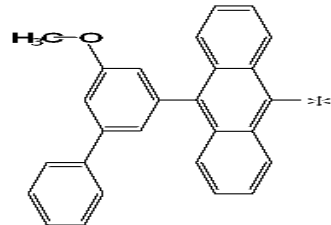
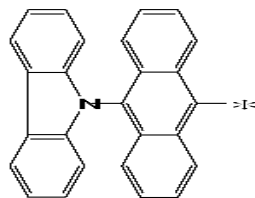
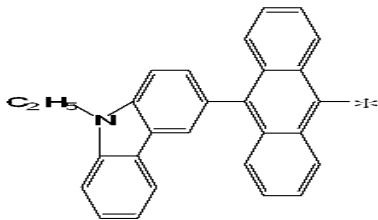
[0090]

[0091]

[치환기 34]

[치환기 35]

[치환기 36]



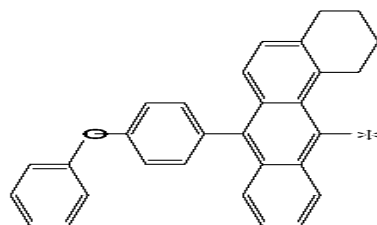
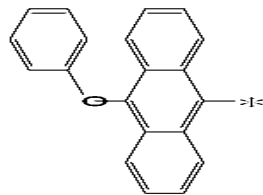
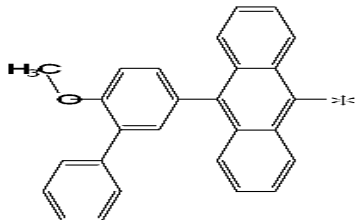
[0092]

[0093]

[치환기 37]

[치환기 38]

[치환기 39]



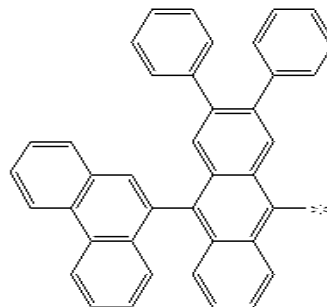
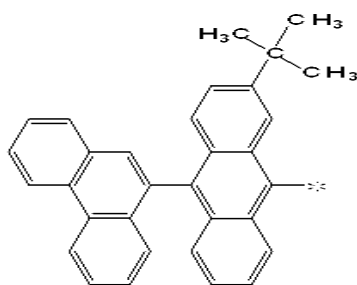
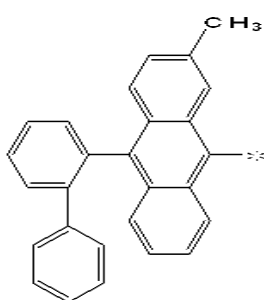
[0094]

[0095]

[치환기 40]

[치환기 41]

[치환기 42]



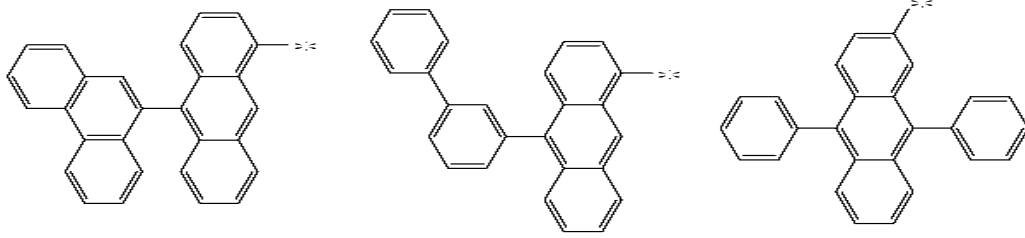
[0096]

[0097]

[치환기 43]

[치환기 44]

[치환기 45]



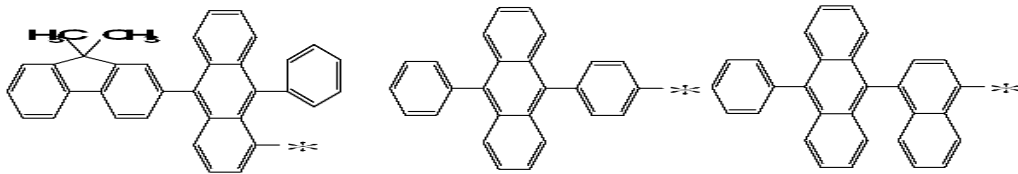
[0098]

[0099]

[치환기 46]

[치환기 47]

[치환기 48]



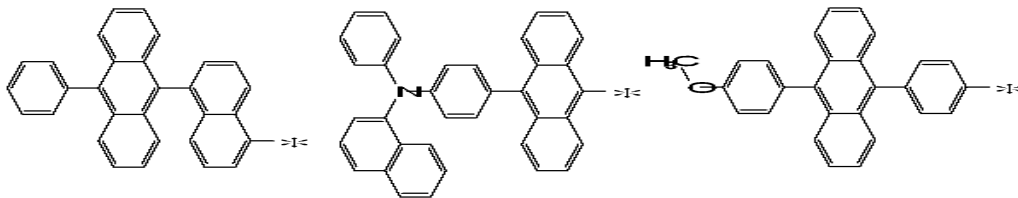
[0100]

[0101]

[치환기 49]

[치환기 50]

[치환기 51]



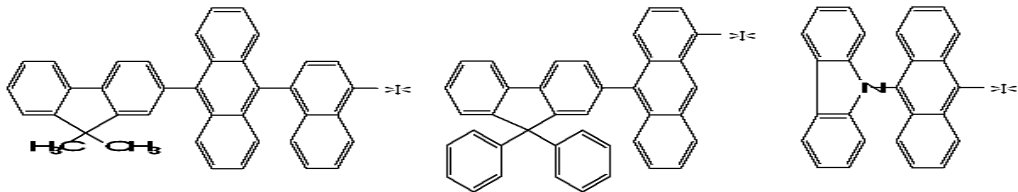
[0102]

[0103]

[치환기 52]

[치환기 53]

[치환기 54]



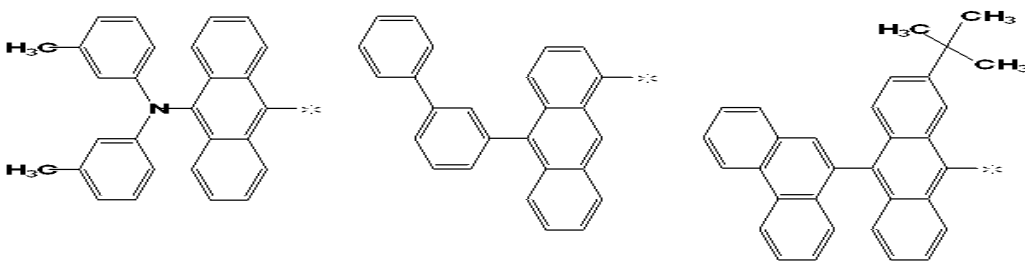
[0104]

[0105]

[치환기 55]

[치환기 56]

[치환기 57]



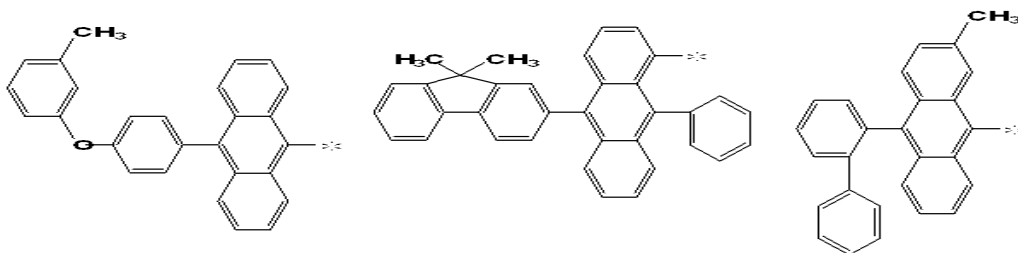
[0106]

[0107]

[치환기 58]

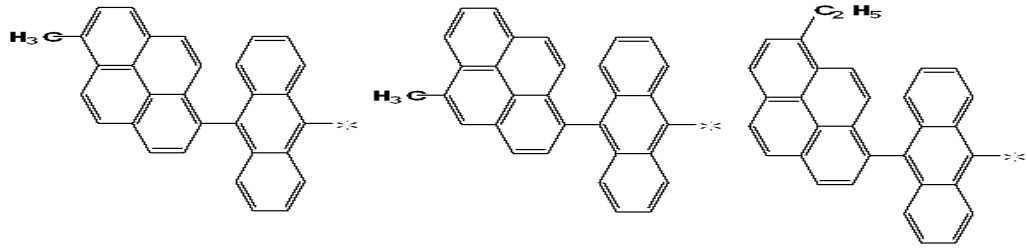
[치환기 59]

[치환기 60]



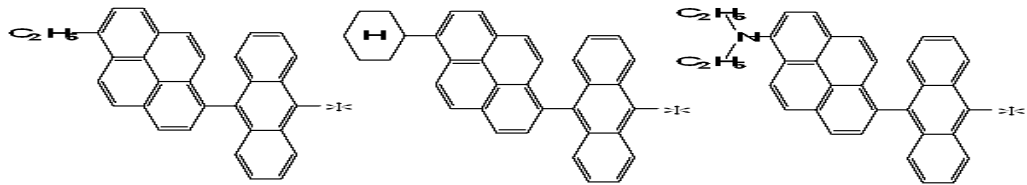
[0108]

[0109] [치환기 61] [치환기 62] [치환기 63]



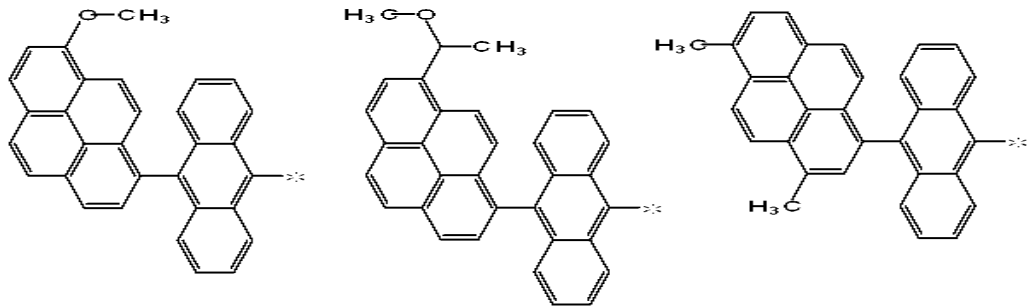
[0110]

[0111] [치환기 64] [치환기 65] [치환기 66]



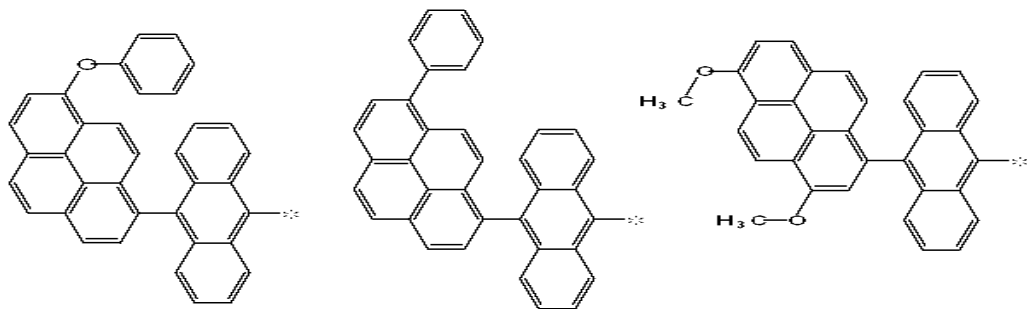
[0112]

[0113] [치환기 67] [치환기 68] [치환기 69]



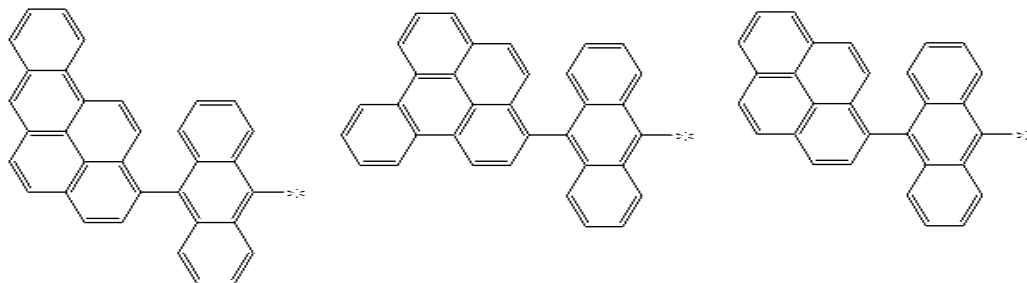
[0114]

[0115] [치환기 70] [치환기 71] [치환기 72]



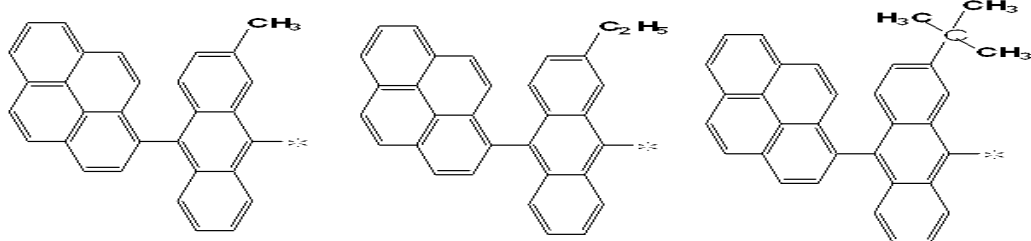
[0116]

[0117] [치환기 73] [치환기 74] [치환기 75]



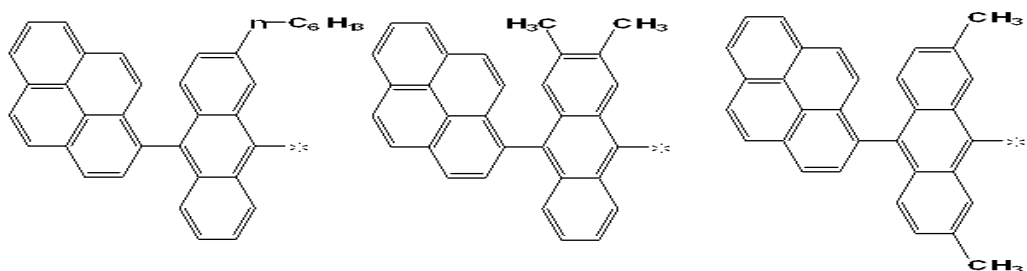
[0118]

[0119] [치환기 76] [치환기 77] [치환기 78]



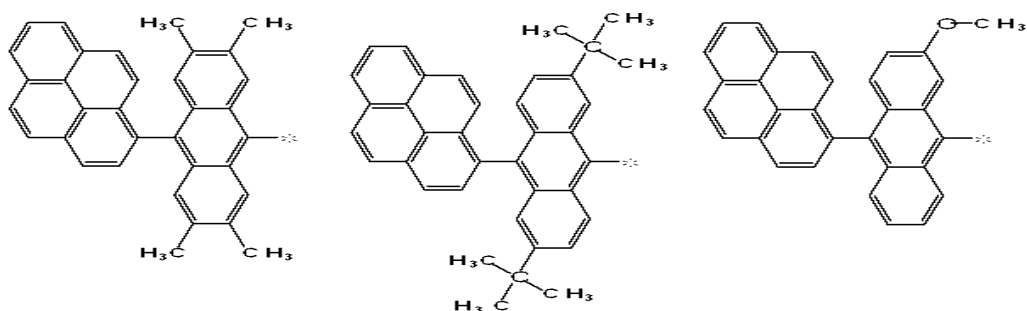
[0120]

[0121] [치환기 79] [치환기 80] [치환기 81]



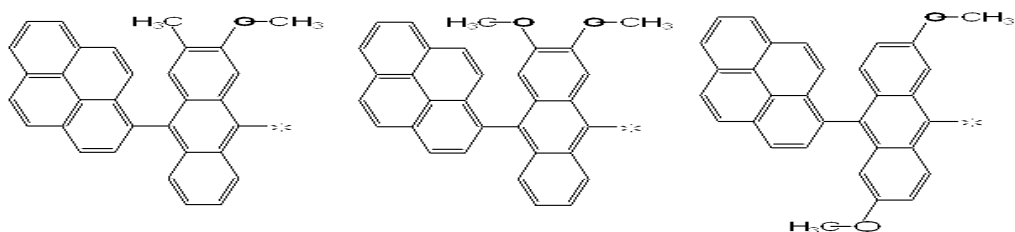
[0122]

[0123] [치환기 82] [치환기 83] [치환기 84]



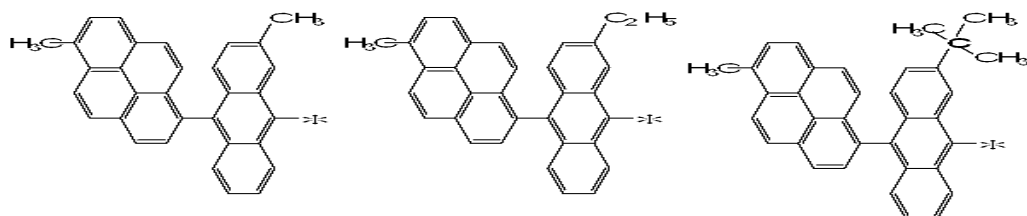
[0124]

[0125] [치환기 85] [치환기 86] [치환기 87]



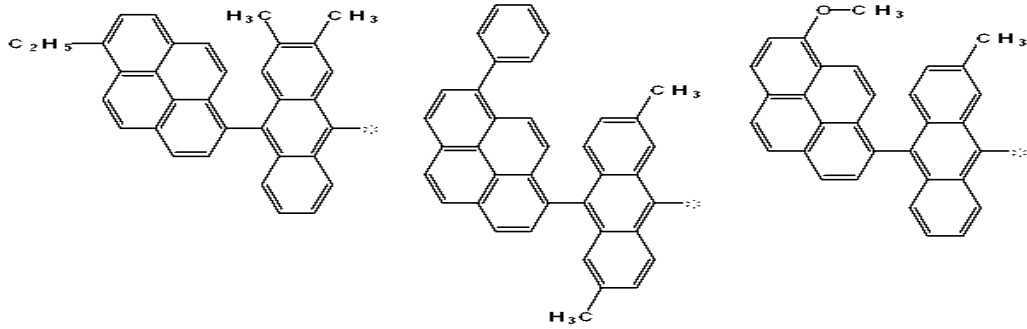
[0126]

[0127] [치환기 88] [치환기 89] [치환기 90]



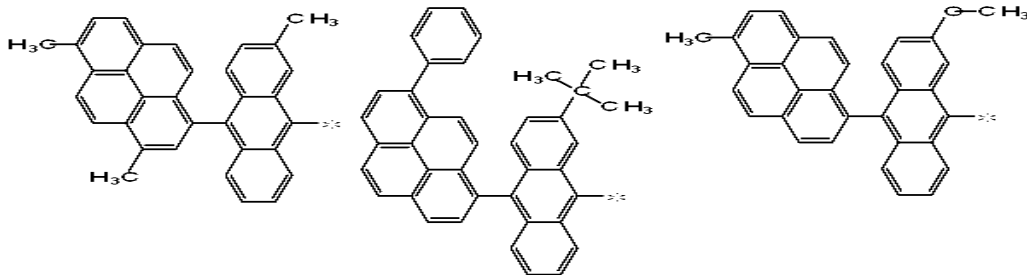
[0128]

[0129] [치환기 91] [치환기 92] [치환기 93]



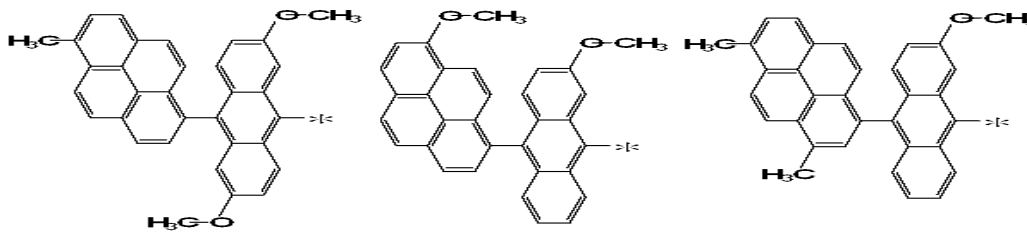
[0130]

[0131] [치환기 94] [치환기 95] [치환기 96]



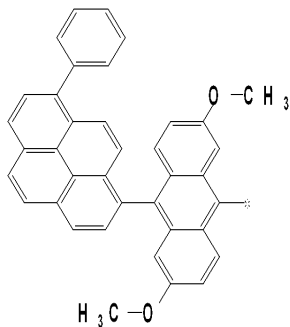
[0132]

[0133] [치환기 97] [치환기 98] [치환기 99]



[0134]

[0135] [치환기 100]



[0136]

[0137] 보다 구체적으로, 본 발명의 피렌계 유도체내의 상기 구조식 1이 상기 [치환기 1] 내지 [치환기 100]으로 표시되는 군으로부터 선택되는 어느 하나로 표시되는 경우에, 상기 화학식 A 및 화학식 B의 치환기 R_5 및 R_{10} 은 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 메틸기, 에틸기, 프로필기, 부틸기, 시클로펜틸기, 시클로헥실기, 페닐기 중에서 선택되는 어느 하나일 수 있다.

[0138] 본 발명의 하기 구조식 1은 치환기를 가진 안트라센 고리로서 상기 치환기는 이웃한 치환기와 서로 융합하여 고리를 생성할 수 있다.

[0139] 한편, 상기 구조식 1의 안트라세닐기는 L_1 을 사이에 두고, 피렌기와 결합될 수 있다.

[0140] 이 경우 상기 L_1 에 의해 축합한 화합물의 에너지 밴드갭을 조절하여 발광 파장을 조절가능하다.

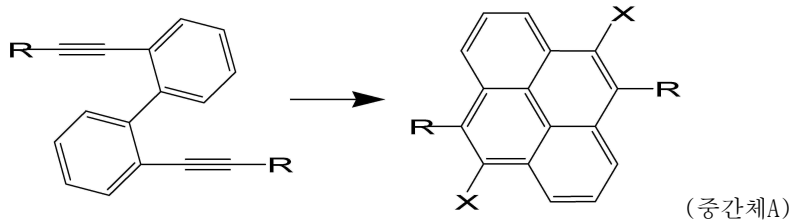
[0141] 이러한 축합한 화합물을 한 쌍의 전극(애노드 및 캐소드) 사이에 채운 유기 발광 소자의 구동시, 상기 축합한

화합물은 한 쌍의 전극 사이의 유기층 중, 유기층들 사이 또는 유기층과 전극 사이에 발생하는 줄 열에 대하여 높은 내열성을 가질 수 있는 바, 상기 축합환 화합물을 채용한 유기 발광 소자는 우수한 구동 전압, 효율, 휘도, 수명 특성을 가질 수 있다.

[0142] 이하 본 발명의 피렌계 유도체의 제조방법을 간략히 설명한다.

[0143] 본 발명의 [화학식 A]의 화합물은 다음의 반응식 1 및 반응식 2를 통해 제조될 수 있다.

[0144] [반응식 1]



[0146] [반응식 2]

[0147] (중간체 A) + 안트라센 유도체 $\longrightarrow$ [화학식 A]

[0148] 상기 중간체 A와 반응하는 안트라센 유도체는 본 발명의 화학식 A에서 정의된 구조식1의 치환기에 붕소가 결합된 형태의 붕산(boric acid) 화합물이 사용될 수 있다.

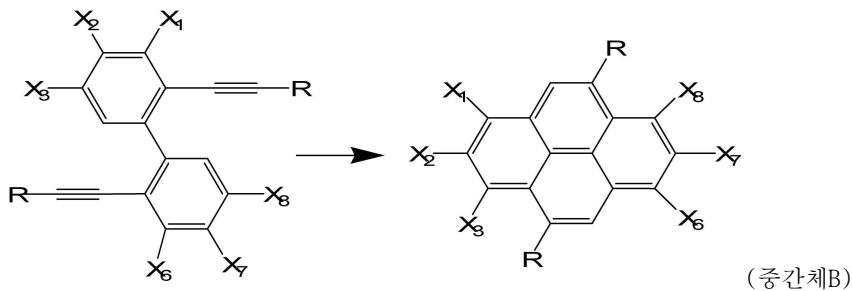
[0149] 따라서 본 발명의 [화학식 A]의 화합물은 피렌의 4번과 9번 위치의 할로젠 중 하나 이상을 안트라세닐기가 치환함으로써, 적어도 하나 이상의 구조식1의 치환기를 갖는 안트라세닐기를 포함한 피렌 유도체를 제공할 수 있다.

[0150] 또한 본 발명의 화학식 A의 화합물은 피렌의 5번과 10번 위치에 수소 또는 중수소를 제외한 치환기를 가질 수 있으며, 또한 상기 중간체A의 전구체인 바이페닐 화합물의 두 개의 페닐기에 치환기를 포함하는 경우 피렌의 1 내지 3번 위치 또는 6 내지 8번 위치를 수소가 아닌 다른 치환기로 치환가능한 장점이 있다.

[0151] 만약 상기 중간체A의 전구체인 바이페닐 화합물의 두 개의 페닐기에 치환된 치환기가 할로젠이라면, 상기 화학식 A의 화합물은 상기 구조식 1의 아민기를 3개 이상 가질 수도 있다.

[0152] 한편, 본 발명의 [화학식 B]의 화합물은 다음과 반응식 3 및 반응식 4를 통해 제조될 수 있다.

[0153] [반응식 3]



[0155] [반응식 4]

[0156] (중간체 B) + 안트라센 유도체 $\longrightarrow$ [화학식 B]

[0157] 상기 중간체 B와 반응하는 안트라센 유도체는 본 발명의 화학식 B에서 정의된 구조식1의 치환기에 붕소가 결합된 형태의 붕산(boric acid) 화합물이 사용될 수 있다.

[0158] 따라서 본 발명의 [화학식 B]의 화합물은 피렌의 5번과 10번 위치에 수소 또는 중수소를 제외한 치환기를 가질 수 있으며, 또한 상기 중간체B의 전구체인 바이페닐 화합물의 두 개의 페닐기가 할로젠 치환기를 포함하는 경우 피렌의 1 내지 3번 위치 또는 6 내지 8번 위치중 하나 이상을 상기 구조식1의 안트라세닐기가 치환함으로써, 적어도 하나 이상의 구조식1의 치환기를 갖는 안트라세닐기가 포함된 피렌 유도체를 제공할 수 있다.

[0159] 또한, 본 발명은 제1전극; 상기 제1전극에 대향된 제2전극; 및 상기 제1전극과 상기 제2전극 사이에 개재된 유

기층;을 포함하고, 상기 유기층이 본 발명의 피렌계 유도체 화합물을 1종 이상 포함한, 유기 발광 소자를 제공한다.

- [0160] 본 발명에서 "(유기층이) 피렌계 유도체 화합물을 1종 이상 포함한다"란, "(유기층이) 본 발명의 범주에 속하는 1종의 피렌계 유도체 화합물 또는 상기 피렌계 유도체 화합물의 범주에 속하는 서로 다른 2종 이상의 축합환 화합물을 포함할 수 있다"로 해석될 수 있다.
- [0161] 이때, 상기 본 발명의 화합물이 포함된 유기층은 상기 제1전극과 상기 제2전극 사이에 개재된 발광층인 것이 바람직하며, 상기 유기층이, 정공 주입층, 정공 수송층, 정공 주입 기능 및 정공 수송 기능을 동시에 갖는 기능층, 발광층, 전자 수송층, 및 전자 주입층 중 적어도 하나를 추가로 포함할 수 있다.
- [0162] 또한 본 발명에서 상기 유기층은 정공 주입층, 정공 수송층, 정공 주입 기능 및 정공 수송 기능을 동시에 갖는 기능층(이하, "H-기능층(H-functional layer)"이라 함) 중 적어도 하나를 포함하고, 상기 정공 주입층, 정공 수송층, 정공 주입 기능 및 정공 수송 기능을 동시에 갖는 기능층(이하, "H-기능층(H-functional layer)"이라 함) 중 적어도 하나에 상기 축합환 화합물이 포함되어 있을 수 있다.
- [0163] 상기 발광층에 포함된 축합환 화합물은 형광 도펀트의 역할을 할 수 있다. 예를 들면, 상기 축합환 화합물은 청색광을 방출하는 청색 형광 도펀트의 역할을 할 수 있다. 또는 상기 발광층에 포함된 축합환 화합물은 적색광, 녹색광 또는 청색광을 방출하는 형광 또는 인광 호스트의 역할을 할 수 있다.
- [0164] 상기 정공주입층, 정공수송층, 전자저지층, 발광층, 정공저지층, 전자수송층 및 전자주입층으로부터 선택된 하나 이상의 층은 단분자 증착방식 또는 용액공정에 의하여 형성될 수 있고, 상기 유기전계발광소자는 표시소자, 디스플레이 소자, 또는 단색 또는 백색 조명용 소자에 사용될 수 있다.
- [0165] 본 발명의 구체적인 예로서, 정공수송층(HTL, Hole Transport Layer)이 추가로 적층되어 있고, 상기 캐소드와 상기 유기발광층 사이에 전자수송층(ETL, Electron Transport Layer)이 추가로 적층되어 있는 것일 수 있는데, 상기 정공수송층은 애노드로부터 정공을 주입하기 쉽게 하기 위하여 적층되는 것으로서, 상기 정공수송층의 재료로는 이온화 포텐셜이 작은 전자공여성 분자가 사용되는데, 주로 트리페닐아민을 기본 골격으로 하는 디아민, 트리아민 또는 테트라아민 유도체가 많이 사용되고 있다.
- [0166] 본 발명에서도 상기 정공수송층의 재료로서 당업계에 통상적으로 사용되는 것인 한 특별히 제한되지 않으며, 예를 들어, N,N'-비스(3-메틸페닐)-N,N'-디페닐-[1,1'-비페닐]-4,4'-디아민(TPD) 또는 N,N'-디(나프탈렌-1-일)-N,N'-디페닐벤지딘 (a-NPD) 등을 사용할 수 있다.
- [0167] 상기 정공수송층의 하부에는 정공주입층(HIL, Hole Injecting Layer)을 추가적으로 더 적층할 수 있는데, 상기 정공주입층 재료 역시 당업계에서 통상적으로 사용되는 것인 한 특별히 제한되지 않고 사용할 수 있으며, 예를 들어 CuPc(copperphthalocyanine) 또는 스타버스트형 아민류인 TCTA(4,4',4"-tri(N-carbazolyl)triphenylamine), m-MTDATA(4,4',4"-tris-(3-methylphenylphenyl amino)triphenylamine) 등을 사용할 수 있다.
- [0168] 또한, 본 발명에 따른 유기전계발광소자에 사용되는 상기 전자수송층은 캐소드로부터 공급된 전자를 유기발광층으로 원활히 수송하고 상기 유기발광층에서 결합하지 못한 정공의 이동을 억제함으로써 발광층 내에서 재결합할 수 있는 기회를 증가시키는 역할을 한다.
- [0169] 상기 전자수송층 재료로는 당 기술분야에서 통상적으로 사용되는 것이면 특별히 제한되지 않고 사용할 수 있음은 물론이며, 예를 들어 옥사디아졸 유도체인 PBD, BMD, BND 또는 Alq₃등을 사용할 수 있다.
- [0170] 한편, 상기 전자수송층의 상부에는 캐소드로부터의 전자 주입을 용이하게 해주어 궁극적으로 파워효율을 개선시키는 기능을 수행하는 전자주입층(EIL, Electron Injecting Layer)을 더 적층시킬 수도 있는데, 상기 전자주입층 재료 역시 당해 기술분야에서 통상적으로 사용되는 것이면 특별한 제한없이 사용할 수 있으며, 예를 들어, LiF, NaCl, CsF, Li₂O, BaO등의 물질을 이용할 수 있다.
- [0171] 본 발명에 따른 유기전계발광소자는 표시소자, 디스플레이 소자 및 단색 또는 백색 조명용 소자 등에 사용될 수 있다.
- [0172] 도 1은 본 발명의 유기전계발광소자의 구조를 나타내는 단면도이다. 본 발명에 따른 유기전계발광소자는 애노드(20), 정공수송층(40), 유기발광층(50), 전자수송층(60) 및 캐소드(80)을 포함하며, 필요에 따라 정공주입층(30)과 전자주입층(70)을 더 포함할 수 있으며, 그 이외에도 1층 또는 2층의 중간층을 더 형성하는 것도 가능하며, 정공저지층 또는 전자저지층을 더 형성시킬 수도 있다.

[0173] 도 1을 참조하여 본 발명의 유기전계발광소자 및 그 제조방법에 대하여 살펴보면 다음과 같다. 먼저 기관(10) 상부에 애노드 전극용 물질을 코팅하여 애노드(20)를 형성한다. 여기에서 기관(10)으로는 통상적인 유기 EL 소자에서 사용되는 기관을 사용하는데 투명성, 표면 평활성, 취급용이성 및 방수성이 우수한 유기 기관 또는 투명 플라스틱 기관이 바람직하다. 그리고, 애노드 전극용 물질로는 투명하고 전도성이 우수한 산화인듐주석(ITO), 산화인듐아연(IZO), 산화주석(SnO₂), 산화아연(ZnO) 등을 사용한다.

[0174] 상기 애노드(20) 전극 상부에 정공 주입층 물질을 진공열 증착, 또는 스핀 코팅하여 정공주입층(30)을 형성한다. 그 다음으로 상기 정공주입층(30)의 상부에 정공수송층 물질을 진공 열증착 또는 스핀 코팅하여 정공수송층(40)을 형성한다.

[0175] 이어서, 상기 정공수송층(40)의 상부에 유기발광층(50)을 적층하고 상기 유기발광층(50)의 상부에 선택적으로 정공저지층(미도시)을 진공 증착 방법, 또는 스핀 코팅 방법으로서 박막을 형성할 수 있다. 상기 정공저지층은 정공이 유기발광층을 통과하여 캐소드로 유입되는 경우에는 소자의 수명과 효율이 감소되기 때문에 HOMO(Highest Occupied Molecular Orbital) 레벨이 매우 낮은 물질을 사용함으로써 이러한 문제를 방지하는 역할을 한다. 이 때, 사용되는 정공 저지 물질은 특별히 제한되지는 않으나 전자수송능력을 가지면서 발광 화합물보다 높은 이온화 포텐셜을 가져야 하며 대표적으로 BA1q, BCP, TPBI 등이 사용될 수 있다.

[0176] 이러한 정공저지층 위에 전자수송층(60)을 진공 증착 방법, 또는 스핀 코팅 방법을 통해 증착한 후에 전자주입층(70)을 형성하고 상기 전자주입층(70)의 상부에 캐소드 형성용 금속을 진공 열증착하여 캐소드(80) 전극을 형성함으로써 유기 EL 소자가 완성된다. 여기에서 캐소드 형성용 금속으로는 리튬(Li), 마그네슘(Mg), 알루미늄(Al), 알루미늄-리튬(Al-Li), 칼슘(Ca), 마그네슘-인듐(Mg-In), 마그네슘-은(Mg-Ag) 등을 사용할 수 있으며, 전면 발광 소자를 얻기 위해서는 ITO, IZO를 사용한 투과형 캐소드를 사용할 수 있다.

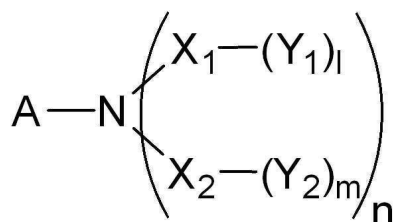
[0177] 또한, 본 발명의 다른 일 실시예에 의하면, 상기 정공주입층, 정공수송층, 전자저지층, 발광층, 정공저지층, 전자수송층 및 전자주입층으로부터 선택된 하나 이상의 층은 단분자 증착방식 또는 용액공정에 의하여 형성될 수 있으며, 본 발명에 따른 유기전계발광소자는 표시소자, 디스플레이 소자 및 단색 또는 백색 조명용 소자에 사용될 수 있다.

[0178] 또한 상기 발광층은 도펀트를 더 포함하고, 상기 발광층에 포함된 본 발명의 화합물은 호스트의 역할을 할 수 있다.

[0179] 또한, 본 발명의 구체적인 예에 의하면, 상기 발광층의 두께는 50 내지 2,000 Å인 것이 바람직하고, 상기 발광층은 다양한 도펀트 물질을 추가로 포함할 수 있다.

[0180] 이때, 상기 도펀트는 하기 <화학식 1> 또는 <화학식 2>로 표시되는 화합물일 수 있다.

[0181] <화학식 1>



[0182]

[0183] 상기 화학식 1 중,

[0184] A는 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 50의 아릴기, 치환 또는 비치환되고 이종 원자로 O, N 또는 S를 갖는 탄소수 3 내지 50의 헤테로아릴기, 치환되거나 치환되지 않은 탄소수 6 내지 60의 아릴렌기, 치환 또는 비치환되고 이종 원자로 O, N 또는 S를 갖는 탄소수 3 내지 50의 헤테로아릴렌기 중에서 선택되는 어느 하나이고,

[0185] X1 및 X2는 각각 독립적으로 치환되거나 치환되지 않은 탄소수 6 내지 30의 아릴렌기이거나 단일결합이고, X1과 X2는 서로 결합될 수 있고,

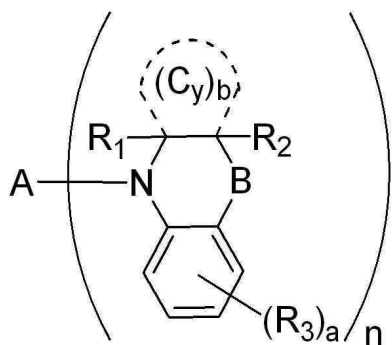
[0186] l, m 은 각각 1 내지 20의 정수이고, n은 1 내지 4의 정수이며,

[0187] Y1 내지 Y2는 각각 독립적으로 치환되거나 치환되지 않은 탄소수 6 내지 24의 아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 24의 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 24의 알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1

내지 24의 헥테로알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 24의 사이클로알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 24의 알콕시기, 시아노기, 할로젠기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 24의 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 40의 알킬실릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴실릴기, 게르마늄, 인, 보론, 중수소 및 수소로 이루어진 군으로부터 1종 이상 선택되고, Y1내지 Y2 각각은 서로 동일하거나 상이하며, 서로 인접하는 기와 지방족, 방향족, 지방족헥테로 또는 방향족헥테로의 축합 고리를 형성할 수 있다.

[0188] 보다 구체적으로, 상기 <화학식 1> 중 X1 내지 X2는 치환 또는 비치환된 페닐렌기, 치환 또는 비치환된 펜타렌기, 치환 또는 비치환된 인데닐렌기, 치환 또는 비치환된 나프틸렌기, 치환 또는 비치환된 아줄레닐렌기, 치환 또는 비치환된 헵탈레닐렌기, 치환 또는 비치환된 인다세닐렌기, 치환 또는 비치환된 아세나프틸렌기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐렌기, 치환 또는 비치환된 페나레닐렌기, 치환 또는 비치환된 페난트레닐렌기, 치환 또는 비치환된 안트릴렌기, 치환 또는 비치환된 플루오란테닐렌기, 치환 또는 비치환된 트리페닐레닐렌기, 치환 또는 비치환된 파이레닐렌기, 치환 또는 비치환된 크라이세닐렌기, 치환 또는 비치환된 나프타세닐렌기, 치환 또는 비치환된 피세닐렌기, 치환 또는 비치환된 페릴레닐렌기, 치환 또는 비치환된 펜타세닐렌기, 치환 또는 비치환된 헥사세닐렌기, 치환 또는 비치환된 피롤일렌기, 치환 또는 비치환된 피라졸일렌기, 치환 또는 비치환된 이미다졸일렌기, 치환 또는 비치환된 이미다졸리닐렌기, 치환 또는 비치환된 이미다조피리디닐렌기, 치환 또는 비치환된 이미다조피리미디닐렌기, 치환 또는 비치환된 피리디닐렌기, 치환 또는 비치환된 피라지닐렌기, 치환 또는 비치환된 피리미디닐렌기, 치환 또는 비치환된 인돌일렌기, 치환 또는 비치환된 푸리닐렌기, 치환 또는 비치환된 퀴놀리닐렌기, 치환 또는 비치환된 프탈라지닐렌기, 치환 또는 비치환된 인돌리지닐렌기, 치환 또는 비치환된 나프티리디닐렌기, 치환 또는 비치환된 퀴나졸리닐렌기, 치환 또는 비치환된 시놀리닐렌기, 치환 또는 비치환된 인다졸일렌기, 치환 또는 비치환된 카바졸일렌기, 치환 또는 비치환된 페나지닐렌기, 치환 또는 비치환된 페난트리디닐렌기, 치환 또는 비치환된 파이라닐렌기, 치환 또는 비치환된 크로메닐렌기, 치환 또는 비치환된 푸라닐렌기, 치환 또는 비치환된 벤조푸라닐렌기, 치환 또는 비치환된 티오펜일렌기, 치환 또는 비치환된 벤조티오펜일렌기, 치환 또는 비치환된 이소티아졸일렌기, 치환 또는 비치환된 벤조이미다졸일렌기, 치환 또는 비치환된 이속사졸일렌기, 치환 또는 비치환된 디벤조티오펜일렌기, 치환 또는 비치환된 디벤조푸라닐렌기, 치환 또는 비치환된 트리아지닐렌기, 또는 치환 또는 비치환된 옥사디아졸일렌기 중에서 선택될 수 있다.

[0189] <화학식 2>



[0190]

[0191] 상기 <화학식 2> 중,

[0192] A는 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 50의 아릴기, 치환 또는 비치환되고 이종 원자로 O, N 또는 S를 갖는 탄소수 3 내지 50의 헥테로아릴기, 치환되거나 치환되지 않은 탄소수 6 내지 60의 아릴렌기, 치환 또는 비치환되고 이종 원자로 O, N 또는 S를 갖는 탄소수 3 내지 50의 헥테로아릴렌기 중에서 선택되는 어느 하나이고,

[0193] Cy는 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 8의 시클로알킬이고, b는 1 내지 4의 정수이되, b이 2 이상인 경우 각각의 시클로알킬은 융합되어진 형태일 수 있다. 또한, 이에 치환된 수소는 각각 중수소 또는 알킬로 치환될 수 있으며, 서로 동일하거나 상이하다.

[0194] B는 단일 결합 또는 $-[C(R_5)(R_6)]_p-$ 이고, 상기 p는 1 내지 3의 정수이되, p가 2 이상인 경우 2 이상의 R₅ 및 R₆은 서로 동일하거나 상이하고;

[0195] R₁, R₂, R₃, R₅ 및 R₆은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진, 히드라존, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염, 인산이나 이의 염, 치

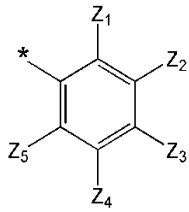
환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 60의 알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 60의 알케닐기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 60의 알키닐기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 60의 알콕시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 60의 알킬티오기(alkylthio), 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 60의 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 60의 아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 60의 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 60의 아릴싸이오기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 60의 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 60의 알킬 아미노기, 디(치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 60의 알킬)아미노기, 또는 (치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 60의 아릴)아미노기, 디(치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 60의 아릴)아미노기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 40의 알킬실릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴실릴기이고;

[0196] n은 1 내지 4의 정수이고;

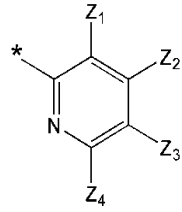
[0197] a는 1 내지 4의 정수이되, a가 2 이상인 경우 2 이상의 R_3 는 서로 동일하거나 상이하고, R_3 이 복수인 경우, 각각의 R_3 은 융합되어진 형태일 수 있다.

[0198] 보다 구체적으로, 상기 <화학식 2>의 R_1 , R_2 및 R_3 은 서로 독립적으로, 수소, 중수소, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진, 히드라존, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염, 인산이나 이의 염, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 20의 알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 20의 알케닐기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 20의 알키닐기, 치환 또는 비치환된 페닐기, 치환 또는 비치환된 펜타레닐기(pentalenyl), 치환 또는 비치환된 인덴닐기(indenyl), 치환 또는 비치환된 나프틸기(naphthyl), 치환 또는 비치환된 아줄레닐(azulenyl), 치환 또는 비치환된 헵탈레닐(heptalenyl), 치환 또는 비치환된 인다세닐(indacenyl), 치환 또는 비치환된 아세나프틸기(acenaphthyl), 치환 또는 비치환된 플루오레닐(flourenyl), 치환 또는 비치환된 페나레닐기(phenalenyl), 치환 또는 비치환된 페난트레닐기(phenanthrenyl), 치환 또는 비치환된 안트릴기(anthryl), 치환 또는 비치환된 플루오란테닐기(fluoranthenyl), 치환 또는 비치환된 트리페닐레닐기(triphenylenyl), 치환 또는 비치환된 파이레닐기(pyrenyl), 치환 또는 비치환된 크라이세닐기(chrysenyl), 치환 또는 비치환된 나프타세닐기(naphthacenyl), 치환 또는 비치환된 피세닐기(picenyl), 치환 또는 비치환된 페릴레닐기(peryleneyl), 치환 또는 비치환된 펜타세닐기(pentaphenyl), 치환 또는 비치환된 헥사세닐기(hexacenyl), 치환 또는 비치환된 피롤일기(pyrrolyl), 치환 또는 비치환된 피라졸일기(pyrazolyl), 치환 또는 비치환된 이미다졸일기(imidazolyl), 치환 또는 비치환된 이미다졸리닐기(imidazoliny), 치환 또는 비치환된 이미다조피리디닐기(imidazopyridinyl), 치환 또는 비치환된 이미다조피리미디닐기(imidazopyrimidinyl), 치환 또는 비치환된 피리디닐기(pyridinyl), 치환 또는 비치환된 피라지닐기(pyrazinyl), 치환 또는 비치환된 피리미디닐기(pyrimidinyl), 치환 또는 비치환된 인돌일기(indolyl), 치환 또는 비치환된 푸리닐기(purinyl), 치환 또는 비치환된 퀴놀리닐기(quinolinyl), 치환 또는 비치환된 프탈라지닐기(phthalazinyl), 치환 또는 비치환된 인돌리지닐기(indoliziny), 치환 또는 비치환된 나프티리디닐기(naphthyridinyl), 치환 또는 비치환된 퀴나졸리닐기(quinazolinyl), 치환 또는 비치환된 시놀리닐기(cinnolinyl), 치환 또는 비치환된 인다졸일기(indazolyl), 치환 또는 비치환된 카바졸일기(carbazolyl), 치환 또는 비치환된 페나지닐기(phenazinyl), 치환 또는 비치환된 페난트리디닐기(phenanthridinyl), 치환 또는 비치환된 파이라닐기(pyranyl), 치환 또는 비치환된 크로메닐기(chromenyl), 치환 또는 비치환된 푸라닐기, 치환 또는 비치환된 벤조푸라닐기(benzofuranyl), 치환 또는 비치환된 티오펜닐기(thiophenyl), 치환 또는 비치환된 벤조티오펜닐기(benzothiophenyl), 치환 또는 비치환된 이소티아졸일기(isothiazolyl), 치환 또는 비치환된 벤조이미다졸일기(benzoimidazolyl), 치환 또는 비치환된 이소자졸일기(isoxazolyl), 치환 또는 비치환된 디벤조티오펜닐기(dibenzothiophenyl), 치환 또는 비치환된 디벤조푸라닐기(dibenzopuranyl), 치환 또는 비치환된 트리아지닐기(triazinyl), 또는 치환 또는 비치환된 옥사디아졸일기(oxadiazolyl)로 이루어진 군으로부터 선택될 수 있다.

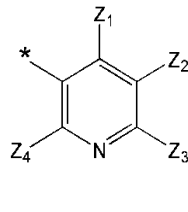
[0199] 보다 구체적으로, 상기 [화학식 2]의 R_1 , R_2 및 R_3 은 서로 독립적으로, 하기 화학식 4A 내지 4H 중 하나로 표시되는, 치환기일 수 있다.



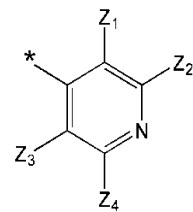
화학식 4A



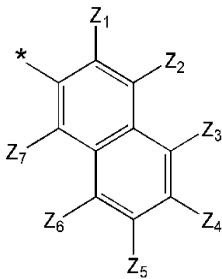
화학식 4B



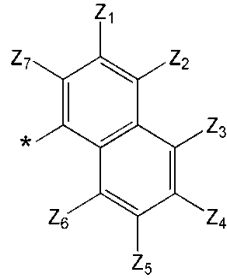
화학식 4C



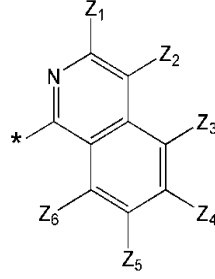
화학식 4D



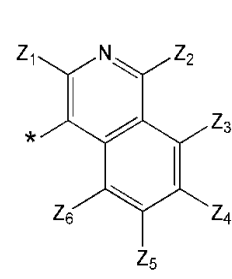
화학식 4E



화학식 4F



화학식 4G



화학식 4H

[0200]

[0201]

[0202]

상기 화학식 4A 내지 4H 에서,

Z₁내지 Z₇은 서로 독립적으로, 수소; 중수소; 할로젠 원자; 히드록실기; 시아노기; 니트로기; 아미노기; 아미노기; 히드라진; 히드라존; 카르복실기나 이의 염; 술폰산기나 이의 염; 인산이나 이의 염; 탄소수 1 내지 10의 알킬기; 탄소수 1 내지 10의 알콕시기; 탄소수 1 내지 10의 알킬티오기; 중수소, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진, 히드라존, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염 및 인산이나 이의 염 중 하나 이상으로 치환된 탄소수 1 내지 10의 알킬기, 탄소수 1 내지 10의 알콕시기 및 탄소수 1 내지 10의 알킬티오기; 페닐기; 나프틸기; 플루오레닐기; 페난트레닐기; 안트릴기; 파이레닐기; 크라이세닐기; 중수소, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진, 히드라존, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염, 인산이나 이의 염, 탄소수 1 내지 10의 알킬기, 탄소수 1 내지 10의 알콕시기 및 탄소수 1 내지 10의 알킬티오기 중 하나 이상으로 치환된 페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트릴기, 파이레닐기 및 크라이세닐기; 인돌일기; 벤조이미다졸일기; 카바졸일기; 이미다졸일기; 이미다졸리닐기; 이미다조피리디닐기; 이미다조피리미디닐기; 피리디닐기; 피리미디닐기; 트리아지닐기; 퀴놀리닐기; 중수소, 할로젠 원자, 히드록실기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, 아미디노기, 히드라진, 히드라존, 카르복실기나 이의 염, 술폰산기나 이의 염, 인산이나 이의 염, 탄소수 1 내지 10의 알킬기, 탄소수 1 내지 10의 알콕시기, 탄소수 1 내지 10의 알킬티오기 페닐기 및 나프틸기 중 하나 이상으로 치환된 인돌일기, 벤조이미다졸일기, 카바졸일기, 이미다졸일기, 이미다졸리닐기, 이미다조피리디닐기, 이미다조피리미디닐기, 피리디닐기, 피리미디닐기, 트리아지닐기 및 퀴놀리닐기; 디(탄소수 1 내지 10의 알킬)아미노기; 및 디(탄소수 1 내지 10의 아릴)아미노기 중에서 선택되는 어느 하나이고, 상기 탄소수 6 내지 10의 아릴기는 페닐기, 나프틸기, 플루오레닐기, 페난트레닐기, 안트릴기, 파이레닐기 및 크라이세닐기 중에서 선택되는 어느 하나이다.

[0203]

바람직하게는 상기 <화학식 2> 중 B는 단일 결합일 수 있다.

[0204]

이하, 바람직한 실시예를 들어 본 발명을 더욱 상세하게 설명한다. 그러나, 이들 실시예는 본 발명을 보다 구체적으로 설명하기 위한 것으로, 본 발명의 범위가 이에 의하여 제한되지 않는다는 것은 당업계의 통상의 지식을 가진 자에게 자명할 것이다.

[0205]

<실시예>

[0206]

합성예 1. 화합물 BD1의 합성

[0207]

1-1. 디할로피렌 중간체 합성

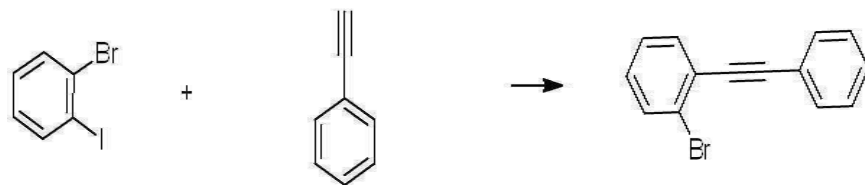
[0208]

(1-A) 4,9-다이아이오도-5,10-다이페닐-피렌의 합성(이하 '피렌 A'라고 한다.)

[0209]

(1-A-1) 2-브로모바이페닐아세틸렌의 합성

[0210] [반응식5]



[0211]

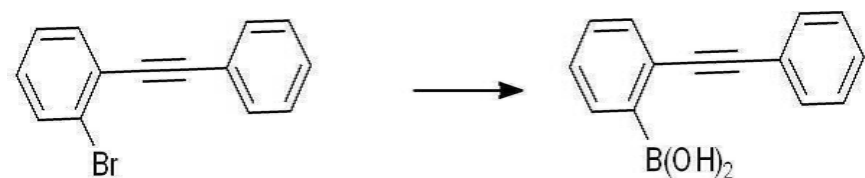
[0212] 2-브로모-아이오도-벤젠(10 g, 35 mmol), Pd(PPh₃)₄(0.8 g, 0.5 mmol), CuI(0.54 g, 1 mmol)을 트리에틸아민 50 mL에 넣고 상온에서 교반하며 잘 섞어 주었다.(반응은 질소 분위기에서 진행), 페닐아세틸렌(3.6 mL, 35 mmol)을 천천히 넣어 주었다.

[0213] 상온에서 1 시간 정도 교반 후 헥산 300 mL를 넣어 반응을 종결하였으며, 용액 전체를 실리카겔에 통과시켜 생성물을 분리하고, 헥산 500 mL로 컬럼을 마저 내렸다. 용매를 제거하여 흰색의 생성물을 얻었다.(수율 98%)

[0214] *128MS(MALDI-TOF): m/z 257 [M]⁺

[0215] (1-A-2) 2-바이페닐아세틸렌 보로닉산의 합성

[0216] [반응식6]



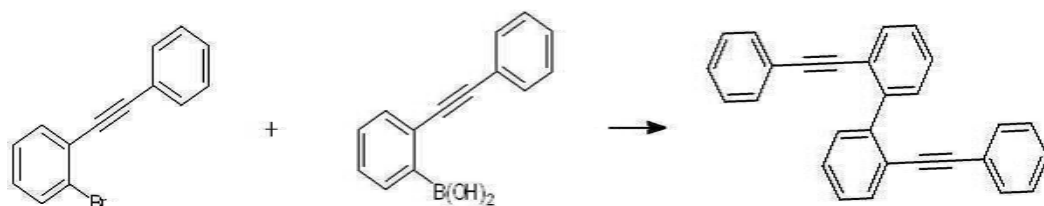
[0217]

[0218] 2-브로모바이페닐아세틸렌(10 g, 55 mmol)을 THF 100 mL에 녹였다. -78 °C까지 냉각시킨 상태에서 n-BuLi(50 mL)를 천천히 넣어 주었다. 첨가가 끝나면 -78 °C에서 1 시간 가량 교반 후 트리메틸 보레이트(6.57 g, 63 mmol)을 넣어 주었다. -78 °C에서 1 시간 교반 후 2 시간 가량 상온에서 교반하고 2 N HCl을 넣어 산성을 맞추었다. EA로 추출 후 용매 제거하고 헥산에 희석시켜 -78 °C에서 교반시켜 고체화하여 흰색 고체를 얻었다. (수율 70%)

[0219] MS(MALDI-TOF): m/z 223[M]⁺

[0220] (1-A-3) 2,2'-다이페닐에티닐바이페닐의 합성

[0221] [반응식7]



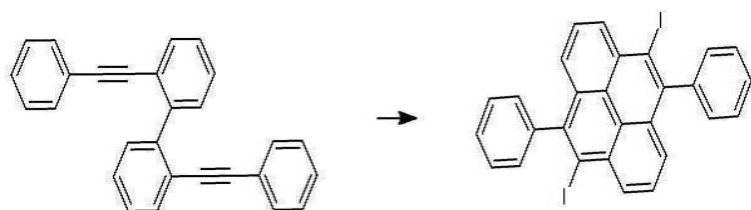
[0222]

[0223] 2-브로모바이페닐아세틸렌(10 g, 55 mmol), 2-바이페닐아세틸렌 보로닉산(9.5 g, 43 mmol), K₂CO₃(10.75 g, 78 mmol), Pd(PPh₃)₄(0.9 g, 1 mmol)을 toluene 100 mL, THF 100 mL, H₂O 50 mL 혼합용액에 넣고 reflux시켰다. 반응이 끝나면 층분리하여 유기용매 제거하고, 컬럼분리로 생성물 분리(MC:Hx=1:9)하였다.(수율 70%)

[0224] MS(MALDI-TOF): m/z 355[M]⁺

[0225] (1-A-4) 피렌A의 합성

[0226] [반응식8]



[0227]

[0228] 피렌A

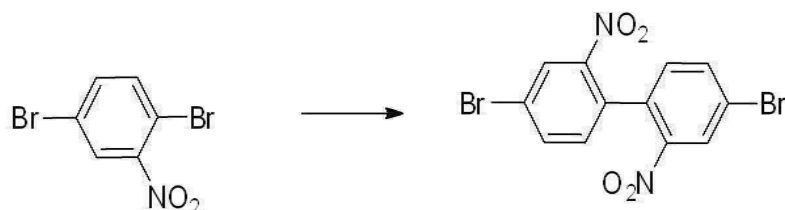
[0229] 2,2'-다이페닐에티닐바이페닐(10 g, 28 mmol)을 MC 100 mL에 녹였다. 상온에서 ICl (1M in MC)을 68 mL를 천천히 넣어 주었다. 상온에서 1 시간 교반 후 포화 Na₂S₂O₃로 아이오딘을 제거하고 EA 추출하였다. Column(MC:Hx=1:9)으로 생성물 분리하였다.(수율 60%)

[0230] MS(MALDI-TOF): m/z 606[M]⁺

[0231] (1-B) 2,7-다이브로모-5,10-다이페닐-피렌의 합성(이하 '피렌 B'라 한다.)

[0232] (1-B-1) 4,4'-다이브로모-2,2'-다이니트로-바이페닐의 합성.

[0233] [반응식9]



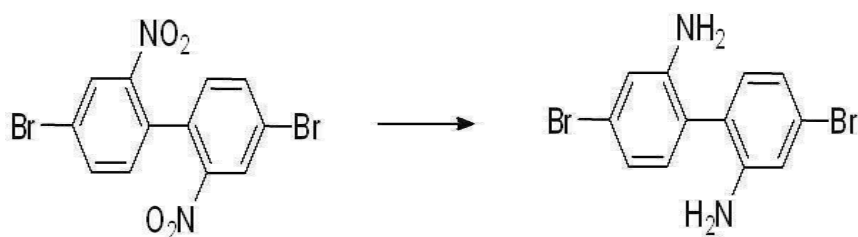
[0234]

[0235] 2,5-다이브로모니트로벤젠 250 g(0.890 mol), Copper powder 135.74 g(2.136 mol)과 DMF 1L를 넣었다. 반응기의 온도를 125 ℃로 승온하여 3 시간 동안 교반시켰다. 반응이 종료되면 온도를 실온으로 낮추고, Toluene 500 mL를 넣고 교반시켰다. 녹지않은 무기염을 celite filter하여 제거하고 여액을 건조시켰다. 건조된 여액에 Methanol 2 L를 넣고 강하게 교반시켰다. 생성된 결정을 여과하고 다시 Toluene 500 mL에 녹였다. 다시 남아있는 무기염을 celite filter하여 제거한 후, 여액을 건조시키고 다시 MeOH를 넣고 강하게 교반시켜 재결정여 4,4'-다이브로모-2,2'-다이니트로-바이페닐 139 g(77.7%)을 얻었다.

[0236] MS(MALDI-TOF): m/z 401[M]⁺

[0237] (1-B-2) 4,4'-다이브로모-2,2'-다이아미노바이페닐의 합성

[0238] [반응식10]



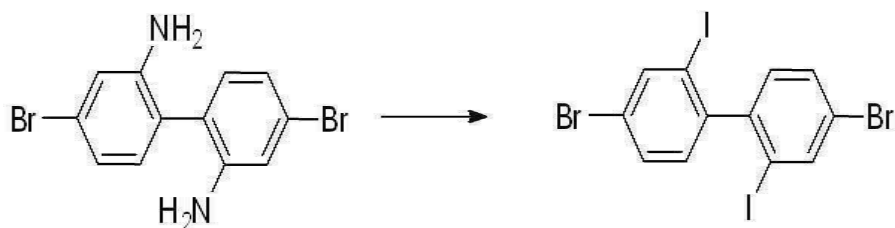
[0239]

[0240] 4,4'-다이브로모-2,2'-다이니트로-바이페닐 139.7 g(0.347 mol)을 넣고 Ethanol 2 L을 넣었다. 그리고 12 M HCl 1 L를 넣고 교반시켰다. 반응기의 온도를 0 ℃로 낮추고 Tin powder 165 g(1.39 mol)을 20 분에 걸쳐서 천천히 넣었다. 반응기의 온도를 100 ℃로 승온하고 3 시간 동안 환원시켰다. 반응이 종료되면 반응기의 온도를 0 ℃로 낮추고 Sodium hydroxide 수용액 12 M 1 L를 천천히 넣어 반응액을 염기성으로 만들었다. Ethylacetate를 넣어 추출하여 유기층을 분리하고 유기층을 무수처리하여 농축하였다. 헥산과 메틸렌클로라이드를 전개용매로 사용하여 컬럼크로마토그래피로 분리하여 4,4'-다이브로모-2,2'-다이아미노바이페닐을 얻었다.(87.7 g, 73.8 %)

[0241] MS(MALDI-TOF): m/z 341[M]⁺

[0242] (1-B-3) 4,4'-다이브로모-2,2'-다이아이오도바이페닐의 합성

[0243] [반응식11]



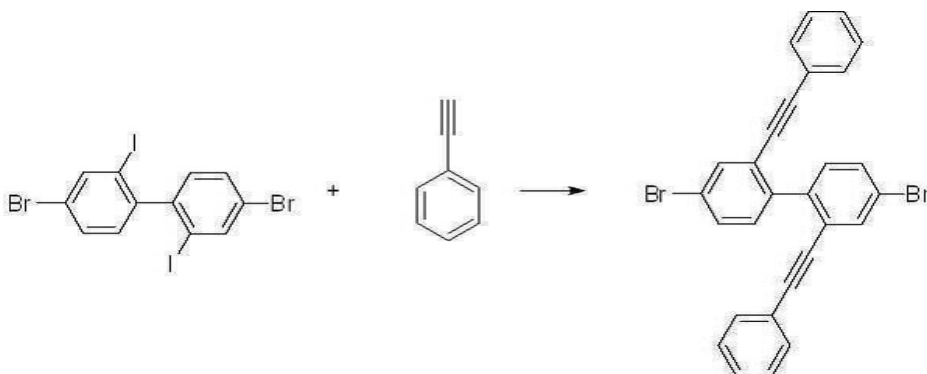
[0244]

[0245] 4,4'-다이브로모-2,2'-다이아미노바이페닐 87.7 g(0.256 mol), 12 M HCl 380 mL, 물 380 mL를 넣었다. 반응기의 온도를 0 ℃로 낮추었다. Sodiumnitrite 44.2 g(0.641 mol)을 물 220 mL에 녹여 반응기에 천천히 적가하고, 적가가 완료되면 1 시간 동안 동일 온도에서 1 시간 동안 교반시켰다. Potassium iodide를 물 850 mL에 녹여 천천히 적가하고, 적가가 완료되면 상온에서 1 시간 동안 교반시켰다. 그리고 반응기의 온도를 60 ℃로 승온하여 3 시간 더 교반시켰다. 반응이 완료되면 실온으로 낮추고 Ethylacetate를 이용하여 추출하여 유기층을 분리하였다. 분리된 유기층을 무수처리하고 건조시킨 후 헥산을 전개용매로 사용하여 컬럼크로마토그래피로 분리하여 4,4'-다이브로모-2,2'-다이아이오도바이페닐을 42.1g (29.1 %) 얻었다.

[0246] MS(MALDI-TOF): m/z 563[M]⁺

[0247] (1-B-4) 4,4'-다이브로모-2,2'-다이페닐에티닐바이페닐의 합성

[0248] [반응식12]



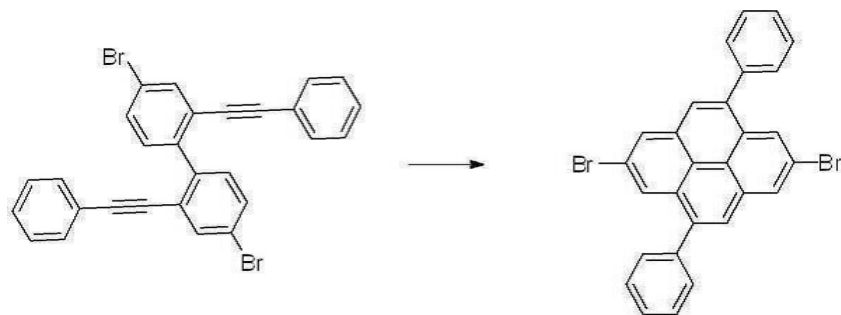
[0249]

[0250] 500 mL 둥근 바닥 플라스크에 질소기류하에서 4,4'-다이브로모-2,2'-다이아이오도바이페닐 20 g(0.036 mol)과 Copper iodide 0.7 g(0.0035 mol), Pd(PPh₃)₄ 1.6 g(0.0014 mol)을 넣고 Triethyl amine 200 mL에 녹였다. 반응기에 Phenylacetylene 9.3 g(0.085 mol)을 천천히 적가하고 1 시간 동안 교반시켰다. 반응이 종료되면 MC에 녹여 Celite와 Silica를 이용하여 filter하였다. 여액을 건조시키고 헥산을 전개용매로 사용하여 컬럼크로마토그래피로 분리하여 얻은 4,4'-다이브로모-2,2'-다이페닐에티닐바이페닐을 13.5 g (74.3 %) 얻었다.

[0251] MS(MALDI-TOF): m/z 511[M]⁺

[0252] (1-B-5) 피렌B의 합성

[0253] [반응식13]



[0254]

[0255]

피렌B

[0256] 250 mL 반응기에 질소 기류하에서 4,4'-다이브로모-2,2'-다이페닐에티닐바이페닐 12.3 g(0.024 mol)을 넣고 Dichloroethane 120 mL에 녹였다. Iron(III) trifluoro-methansulfonate 1.2 g(0.002 mol)을 넣고 12 시간 동안 환류시켰다. 반응이 종료되면 hotfilter하였다. 여액을 건조시키고 EA slurry하였다. 생성된 고체를 filter 하고 재결정하여 5,10-다이브로모-2,7-다이페닐-피렌을 2.0 g (16.3 %) 얻었다.

[0257] MS(MALDI-TOF): m/z 511[M]⁺

[0258] 1-2. 구조식 1을 가지는 안트라센 유도체의 합성

[0259] 합성예 1-2-a) 9-페닐 안트라센의 합성

[0260] 500ml의 3구 둥근바닥 플라스크에 페닐 보론산(phenyl Boric acid) 9.7g(79mmol), 9-브로모안트라센(9-Bromoanthracene) 17g(66mmol), 탄산칼륨 18.3g(132mmol), Pd(PPh₃)₄ 1.5g(1mmol), 물 35ml, 톨루엔 90ml 및 테트라하이드로퓨란 90ml를 넣고 환류반응시켰다.

[0261] 상기 반응 종료 후, 층 분리하여 수층은 제거하고 유기층을 감압 농축하여, 컬럼크로마토그래피를 이용하여 9-페닐 안트라센 13.6g(수득률 81 %)을 얻었다.

[0262] 합성예 1-2-b) 9-페닐-10브로모안트라센의 합성

[0263] 1L의 3구 둥근바닥 플라스크에 상기 합성예 1-2-a 에서 제조된 9-페닐안트라센 13.6g(0.054mol), 디클로로메탄 272ml를 넣고 상온에서 결정을 녹인 후, 0℃로 냉각한 후, 브롬 10.1g(0.063mol)을 디클로로메탄 50ml에 희석시켜 천천히 투입하며 반응시켰다. 상기 반응 종료 후 층 분리하여 수층은 제거하고 유기층을 감압 농축하여, MeOH로 결정을 석출시킨 후 재결정하여 노란색의 9-페닐-10-브로모안트라센 결정 13.4g(수득률 75.5%)을 얻었다

[0264] 합성예 1-2-c) 9-페닐-10-안트라센보론산의 합성

[0265] 9-페닐-10-브로모안트라센 (13.4 g, 40 mmol)을 THF 110 mL에 녹였다. -78 ℃까지 냉각시킨 상태에서 n-BuLi(30 mL)를 천천히 넣어 주었다. 첨가가 끝나면 -78 ℃에서 1 시간 가량 교반 후 트리메틸 보레이트(5.9 g, 56 mmol)을 넣어 주었다. -78 ℃에서 1 시간 교반 후 2 시간 가량 상온에서 교반하고 2 N HCl을 넣어 산성을 맞추었다. EA로 추출 후 용매 제거하면서 헥산으로 결정을 얻어 9-페닐-10-안트라센보론산 9.2g(수득률 76.7%)을 얻었다.

[0266] 1-3. 본 발명의 안트라세닐 치환기를 포함한 피렌 유도체 BD1 합성

[0267] 둥근 바닥 플라스크에 상기 합성예 1-2-c 에서 제조된 9-페닐-10-안트라센보론산 9.2g(31 mmol), 상기 피렌 A 18.8g(31mmol), K₂CO₃(8.6g,62mmol),Pd(PPh₃)₄(0.7g,1mmol)을 toluene 100 mL, THF 100 mL, 물 40 mL 반응기에 넣고 reflux시켰다.

[0268] 반응 종료 후 생성된 결정을 여과하고 톨루엔과 아세톤으로 여러 번 재결정 하여 얻어진 고체(5.5g, 수율24.2 %)를 건조한 후에 질소 기류하의 반응기에 상기 건조된 고체 (5.5g, 8mmol)과 테트라하이드로퓨란 50ml를 투입하고 교반하면서 -78 ℃까지 냉각시킨 상태에서 n-BuLi 5.2 mL(9mmol)를 천천히 넣어 주었다. 이때 발열이 일어나고, 다시 -40℃까지 냉각시킨 상태에서 물을 15ml 넣어서 quenching칭한다. 톨루엔과 아세톤으로 여러 번 재결정 하여 화합물 BD1(1.0g, 수율22%)을 합성하였다.

- [0269] MS(MALDI-TOF): m/z 607 $[M]^+$
- [0270] **합성예 2. 화합물 BD2의 합성**
- [0271] 합성예 1-2-a)에서 페닐 보론산 대신 2-톨릴 보론산을 사용하였다는 점을 제외하고는 화합물 BD1의 합성 방법과 동일한 방법을 이용하여 1.5g, 수율25.4%의 연노란색 고체 화합물 BD2를 얻었다.
- [0272] MS(MALDI-TOF): m/z 621 $[M]^+$
- [0273] **합성예 3. 화합물 BD3의 합성**
- [0274] 합성예 1-2-a)에서 페닐 보론산 대신 1-나프틸 보론산을 사용하였다는 점을 제외하고는 화합물 BD1의 합성 방법과 동일한 방법을 이용하여 1.4g, 수율25%의 연노란색 고체 화합물 BD3를 얻었다.
- [0275] MS(MALDI-TOF): m/z 657 $[M]^+$
- [0276] **합성예 4. 화합물 BD4의 합성**
- [0277] 합성예 1-2-a)에서 페닐 보론산 대신 펜타듀테리오페닐 보론산을 사용하였다는 점을 제외하고는 화합물 BD1의 합성 방법과 동일한 방법을 이용하여 2.3g, 수율24.5%의 연노란색 고체 화합물 BD4를 얻었다.
- [0278] MS(MALDI-TOF): m/z 612 $[M]^+$
- [0279] **합성예 5. 화합물 BD5의 합성**
- [0280] 디할로피렌 중간체를 피렌B를 사용한 것을 사용한 것을 제외하고는, 합성예 1-3과 동일한 방법을 이용하여 1.7 g, 수율21.3%의 연노란색 고체 화합물 BD5를 얻었다.
- [0281] **합성예 6. 화합물 BD6의 합성**
- [0282] 디할로피렌 중간체를 피렌B를 사용한 것을 사용한 것을 제외하고는, 합성예 2와 동일한 방법으로 합성하여 1.4 g, 수율23.5%의 연노란색 고체 화합물 BD6을 얻었다.
- [0283] **합성예 7. 화합물 BD7의 합성**
- [0284] 합성예 7-a) 9-(4-브로모페닐)-10-페닐안트라센의 합성
- [0285] 둥근바닥 플라스크에 9-페닐-10-안트라센보론산 9.2g(31mmol), 4-브로모-1-아이오도벤젠 8.7g(31mmol), 탄산칼륨 8.5g(62mmol), $Pd(PPh_3)_4$ 0.7g(1mmol), 물 20ml, 톨루엔 50ml 및 테트라하이드로퓨란 50ml를 넣고 환류반응시켰다.
- [0286] 상기 반응 종료 후, 층 분리하여 수층은 제거하고 유기층을 감압 농축하여, 컬럼크로마토그래피를 이용하여 9-(4-브로모페닐)-10-페닐안트라센 10.6g(수득률 84.2 %)을 얻었다.
- [0287] 합성예 7-b) 4-(10-페닐-9-안트릴)페닐보론산의 합성
- [0288] 9-(4-브로모페닐)-10-페닐안트라센 (10.6 g, 26 mmol)을 THF 90 mL에 녹였다. $-78^\circ C$ 까지 냉각시킨 상태에서 $n-BuLi$ (19.4 mL)를 천천히 넣어 주었다. 첨가가 끝나면 $-78^\circ C$ 에서 1 시간 가량 교반 후 트리메틸 보레이트(3.8 g, 36 mmol)을 넣어 주었다. $-78^\circ C$ 에서 1 시간 교반 후 2 시간 가량 상온에서 교반하고 2 N HCl을 넣어 산성을 맞추었다. EA로 추출 후 용매 제거하면서 헥산으로 결정을 얻어 4-(10-페닐-9-안트릴)페닐보론산 7.4g(수득률 76.4%)을 얻었다.
- [0289] 합성예 7-c) **화합물 BD7의 합성**
- [0290] 둥근 바닥 플라스크에 상기 합성예 7-b 에서 제조된 4-(10-페닐-9-안트릴)페닐보론산 7.4g(20 mmol), 상기 피렌 A 12g(20mmol), K_2CO_3 (5.5g, 40mmol), $Pd(PPh_3)_4$ (0.5g, 1mmol)을 toluene 60 mL, THF 60 mL, 물 25 mL 반응기에 넣고 reflux시켰다.
- [0291] 반응 종료 후 생성된 결정을 여과하고 톨루엔과 아세톤으로 여러 번 재결정 하여 얻어진 고체(8.2g, 수율51.2 %)를 건조한 후에 질소 기류하의 반응기에 상기 건조된 고체 (8.2g, 10 mmol)과 테트라하이드로퓨란 70ml를 투입하고 교반하면서 $-78^\circ C$ 까지 냉각시킨 상태에서 $n-BuLi$ 7.0 mL(11mmol)를 천천히 넣어 주었다. 이때 발열이

일어나고, 다시 -40°C 까지 냉각시킨 상태에서 물을 20ml 넣어서 quenching한다. 톨루엔과 아세톤으로 여러 번 재결정 하여 화합물 BD7(1.6g, 수율23.1%)을 합성하였다.

MS(MALDI-TOF): m/z 683 $[\text{M}]^+$

합성예 8. 화합물 BD8 의 합성

둥근 바닥 플라스크에 상기 합성예 1-2-c 에서 제조된 9-페닐-10-안트라센보론산 9.2 g(31 mmol), 상기 피렌 A 7.8 g (13 mmol), K_2CO_3 (3.6g, 26mmol), $\text{Pd}(\text{PPh}_3)_4$ (0.3g, 1mmol)을 톨루엔 40 mL, 1,4-다이옥산 40 mL, 물 20 mL 반응기에 넣고 reflux시켰다.

반응 종료 후 생성된 결정을 여과하고 톨루엔과 아세톤으로 여러 번 재결정 하여 연노란색 고체 화합물 BD8 (2.6g, 수율25%)을 합성하였다.

MS(MALDI-TOF): m/z 859 $[\text{M}]^+$

실시예 2 내지 8

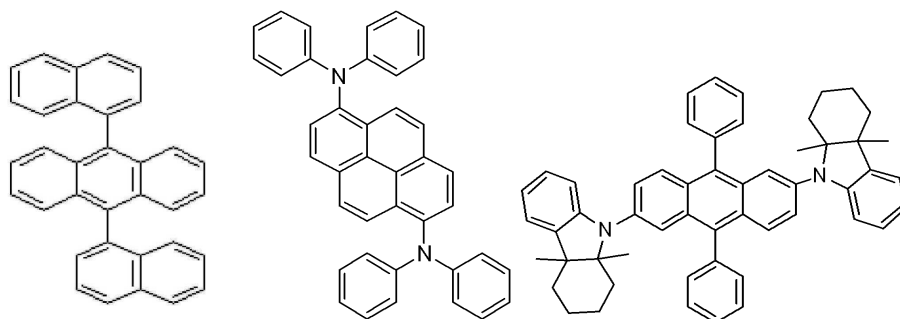
ITO 글래스의 발광면적이 2 mm $\times$ 2 mm 크기가 되도록 패터닝한 후 세정하였다. 상기 ITO 글래스를 진공 챔버에 장착한 후 베이스 압력이 1×10^{-7} torr가 되도록 한 후 상기 ITO 위에 CuPc(800 Å), α -NPD(300 Å)순으로 성막한 후 본 발명에 따른 화합물을 성막(250 Å)한 다음 Alq_3 (350 Å), LiF(5 Å), Al(500 Å)의 순서로 성막하여 유기전계발광소자를 제조하였다.

비교예

상기 실시예와 동일하게 제조하고, 다만, 발광층은 호스트 화합물로서, 하기 [화학식 3]으로 표시되는 안트라센계 화합물을 더 포함하고, 도판트 물질은 [화학식 4] 내지 [화학식 6] 화합물 중 하나를 선택하여 사용하였다.

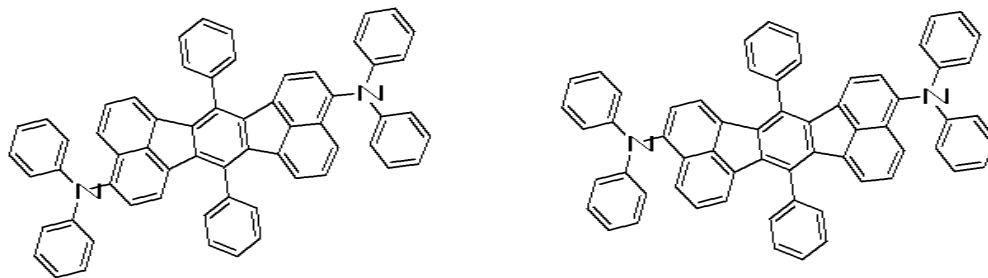
여기서 화학식 6은 아래 화학식 6 a 및 화학식 6b의 구조를 갖는 혼합물질 (6a : 6b = 30 : 70 , 몰비)이다.

[화학식 3] [화학식 4] [화학식 5]



[화학식 6]

[화학식6a] [화학식 6b]



평가예

상기 실시예 1 내지 22, 비교예 1 내지 3에 따라 제조된 유기전계발광소자에 대하여, 전압, 전류밀도, 휘도, 색 좌표 및 수명을 측정하고 그 결과를 하기 [표 1]에 나타내었다. T97은 휘도가 초기휘도에 비해 97%로 감소되는

데 소요되는 시간을 의미한다.

표 1

	호스트	도펀트	전압	전류밀도(mA/cm ²)	휘도(Cd/m ²)	발광색	T97
실시예1	합성예1	화학식4	4.2	10	810	청색	95
실시예2	합성예 2	화학식4	4.2	10	840	청색	99
실시예3	합성예 3	화학식4	4.1	10	830	청색	80
실시예4	합성예 4	화학식4	4.0	10	910	청색	105
실시예5	합성예 5	화학식4	4.3	10	780	청색	92
실시예7	합성예 7	화학식4	4.2	0	750	청색	88
실시예8	합성예 8	화학식4	4.2	0	820	청색	85
비교예1	화학식 3	화학식4	6.5	10	420	청색	20
실시예9	합성예1	화학식5	4.1	10	720	녹색	110
실시예10	합성예 2	화학식5	4.0	10	830	녹색	102
실시예11	합성예 3	화학식5	4.1	10	800	녹색	93
실시예12	합성예 4	화학식4	4.2	10	900	녹색	125
실시예13	합성예 5	화학식5	4.1	10	730	녹색	100
실시예14	합성예 7	화학식5	4.0	10	820	녹색	89
실시예15	합성예 8	화학식5	4.1	10	750	녹색	96
비교예2	화학식 3	화학식5	6.2	10	380	녹색	12
실시예16	합성예1	화학식6	4.3	10	780	황색	90
실시예17	합성예 2	화학식6	4.2	0	750	황색	102
실시예18	합성예 3	화학식6	4.3	10	770	황색	89
실시예19	합성예 4	화학식6	4.1	10	920	황색	106
실시예20	합성예 5	화학식6	4.2	100	750	황색	100
실시예21	합성예 7	화학식6	4.0	10	800	황색	95
실시예22	합성예 8	화학식6	3.9	10	750	황색	88
비교예3	화학식 3	화학식6	6.4	10	410	황색	15

상기 [표 1]에서 보는 바와 같이, 본 발명에 따른 유기 발광 화합물을 포함하는 유기전계발광자는 구동 전압이

낮으며, 휘도 및 수명 등의 발광특성이 우수하여 다양한 디스플레이 소자에 활용할 수 있다.

[0311]

부호의 설명

[0312]

10 : 기판 20 : 애노드

30 : 정공주입층 40 : 정공수송층

50 : 유기발광층 60 : 전자수송층

70 : 전자주입층 80 : 캐소드

도면

도면1

80
70
60
50
40
30
20
10

专利名称(译)	具有取代基的茈衍生物化合物和包含其的有机发光器件		
公开(公告)号	KR1020190088940A	公开(公告)日	2019-07-29
申请号	KR1020190087155	申请日	2019-07-18
[标]申请(专利权)人(译)	SFC股份有限公司		
申请(专利权)人(译)	에스에프씨주식회사		
[标]发明人	유세진 심소영 이상해		
发明人	유세진 심소영 이상해		
IPC分类号	H01L51/00 C07C15/28 C07C15/38		
CPC分类号	H01L51/0054 C07C15/28 C07C15/38 H01L51/0052 H01L51/0058 C07C2603/24 C07C2603/50		
优先权	1020120114074 2012-10-15 KR		
其他公开文献	KR102078110B1		
外部链接	Espacenet		

摘要(译)

本发明涉及一种新颖的化合物和包括该化合物的有机电致发光器件作为发光材料。具体地，它是由以下[化学式A]或[化学式B]表示的新型化合物以及包括该化合物的有机电致发光器件。[基衍生物由[化学式A]表示。

80
70
60
50
40
30
20
10