



(19) 대한민국특허청(KR)  
(12) 등록특허공보(B1)

(45) 공고일자 2018년01월02일  
(11) 등록번호 10-1793124  
(24) 등록일자 2017년10월27일

- |   |  |
|---|--|
| <p>(51) 국제특허분류(Int. Cl.)<br/>C09K 11/06 (2006.01) C07D 209/56 (2006.01)<br/>C07D 209/82 (2006.01) C07D 471/04 (2006.01)<br/>C07D 487/04 (2006.01) H01L 51/00 (2006.01)<br/>H01L 51/50 (2006.01)</p> <p>(52) CPC특허분류<br/>C09K 11/06 (2013.01)<br/>C07D 209/56 (2013.01)</p> <p>(21) 출원번호 10-2016-0052215<br/>(22) 출원일자 2016년04월28일<br/>심사청구일자 2016년04월28일</p> <p>(65) 공개번호 10-2017-0123053<br/>(43) 공개일자 2017년11월07일<br/>(56) 선행기술조사문헌<br/>CN102746293 A</p> | <p>(73) 특허권자<br/>벽산페인트 주식회사<br/>서울특별시 금천구 가산디지털1로 219,904호(가산동, 벽산디지털밸리6차)</p> <p>(72) 발명자<br/>정국성<br/>서울특별시 강서구 양천로 489 우성아파트 102동 505호<br/>김규성<br/>경기도 광명시 안현로 34 하안주공3단지아파트 311동 111호<br/>(뒷면에 계속)</p> <p>(74) 대리인<br/>강정빈, 송두현</p> |
|---|--|

전체 청구항 수 : 총 6 항

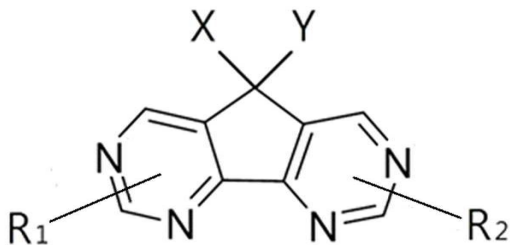
심사관 : 송이화

(54) 발명의 명칭 인광 호스트용 화합물 및 이를 포함한 유기 발광 소자

(57) 요약

본 발명은 하기 화학식 1로 표시되는 인광 호스트용 화합물 및 이를 포함한 유기 발광 소자에 관한 것이다:

[화학식 1]



인광 호스트용 화합물을 포함하는 유기 발광 소자는 긴 수명과 전기 이동도 및 열적 안정성을 가질 수 있다.

대표도



(52) CPC특허분류

*C07D 209/82* (2013.01)

*C07D 471/04* (2013.01)

*C07D 487/04* (2013.01)

*H01L 51/0072* (2013.01)

*H01L 51/5012* (2013.01)

*C09K 2211/1011* (2013.01)

*C09K 2211/1029* (2013.01)

*C09K 2211/1044* (2013.01)

(72) 발명자

**조남철**

인천광역시 부평구 안남로 272 금호타운 306동 50  
3호

**김미현**

충청남도 아산시 배방읍 배방로201번길 10 배방어  
울림아파트 102동 806호

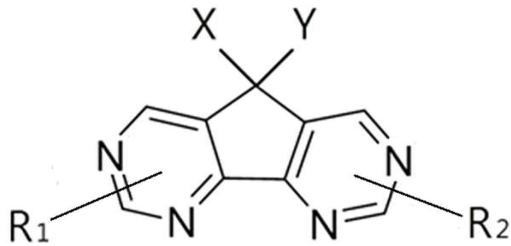
명세서

청구범위

청구항 1

하기 화학식 1로 표시되는 인광 호스트용 화합물:

[화학식 1]



상기 식에서

X와 Y는 각각 독립적으로 헤테로 원자를 포함하거나 포함하지 않는 하나 이상의 C1-C30의 탄화수소기로 치환 또는 비치환된 카바졸기, 또는 헤테로 원자를 포함하거나 포함하지 않는 하나 이상의 C1-C30의 탄화수소기로 치환 또는 비치환된 카볼린기이며;

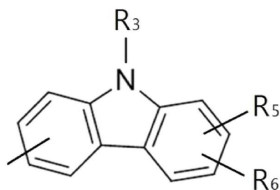
상기 R1 및 R2는 각각 독립적으로 수소 원자, 시아노기, 히드록시기, 티올기, 할로젠 원자, 치환 또는 비치환된 C1-C14의 알킬기, 치환 또는 비치환된 C1-C14의 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C2-C14의 알케닐기, 치환 또는 비치환된 C6-C14의 아릴기, 치환 또는 비치환된 C7-C14의 아릴알킬기, 치환 또는 비치환된 C6-C14의 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C4-C14의 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 C5-C14의 헤테로아릴알킬기, 치환 또는 비치환된 C4-C14의 헤테로아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C5-C14의 사이클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C4-C14의 헤테로사이클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C2-C14의 알킬카르보닐기, 치환 또는 비치환된 C7-C30의 아릴카르보닐기, 또는 C1-C14의 알킬티오기이며,

상기에서 헤테로 고리에는 N, O, 및 S 중에서 선택되는 헤테로 원자가 1개 이상 포함된다.

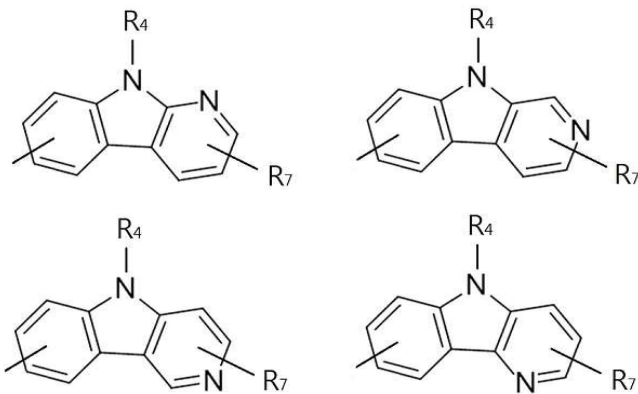
청구항 2

제1항에 있어서,

상기 치환 또는 비치환된 카바졸기는 하기 화학식으로 표시되며,



상기 치환 또는 비치환된 카볼린기는 하기 화학식 중의 어느 하나로 표시되며,



상기 화학식들에서, R3 내지 R7은 각각 독립적으로 수소 원자, 시아노기, 히드록시기, 티올기, 할로젠 원자, 치환 또는 비치환된 C1-C14의 알킬기, 치환 또는 비치환된 C1-C14의 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C2-C14의 알케닐기, 치환 또는 비치환된 C6-C14의 아릴기, 치환 또는 비치환된 C7-C14의 아릴알킬기, 치환 또는 비치환된 C6-C14의 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C4-C14의 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 C5-C14의 헤테로아릴알킬기, 치환 또는 비치환된 C4-C14의 헤테로아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C5-C14의 사이클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C4-C14의 헤테로사이클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C5-C14의 사이클로알킬기로 치환된 C1-C4의 알킬기, 치환 또는 비치환된 C4-C14의 헤테로사이클로알킬기로 치환된 C1-C4의 알킬기, 치환 또는 비치환된 C2-C14의 알킬카르보닐기, 치환 또는 비치환된 C7-C30의 아릴카르보닐기, 또는 C1-C14의 알킬티오기이고,

상기 R5 및 R6는 서로 결합하여 치환 또는 비치환된 C4~C10의 사이클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C4-C10의 사이클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C6~C20의 방향족 고리, 또는 치환 또는 비치환된 C4-C20의 헤테로방향족 고리를 형성할 수 있으며,

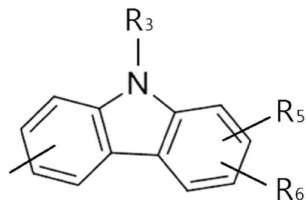
상기에서 헤테로 고리에는 N, O, 및 S 중에서 선택되는 헤테로 원자가 1개 이상 포함되는 것을 특징으로 하는 인광 호스트용 화합물.

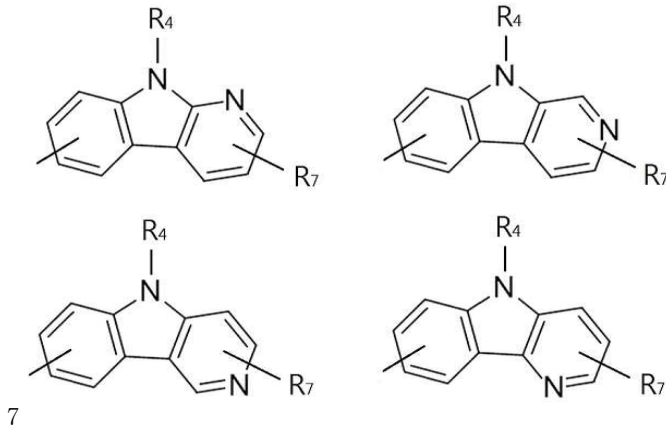
### 청구항 3

청구항 2에 있어서,

R1 및 R2는 수소 원자이고:

X 및 Y는 각각 독립적으로 하기 화학식들 중에서 선택되는 치환된 카바졸기 또는 치환된 카볼린기인 것을 특징으로 하는 인광 호스트용 화합물:





상기 화학식들에서, R3 또는 R4는 치환 또는 비치환된 C1-C10의 알킬기; 치환 또는 비치환된 C2-C5의 알케닐기; 치환 또는 비치환된 C6-C14의 아릴기; 치환 또는 비치환된, 하나 이상의 질소원자를 포함하는 C4-C5의 헤테로아릴기; 치환 또는 비치환된, 하나 이상의 질소원자를 포함하는 C4-C6의 헤테로사이클로알킬기로 치환된 C1-C4의 알킬기이고,

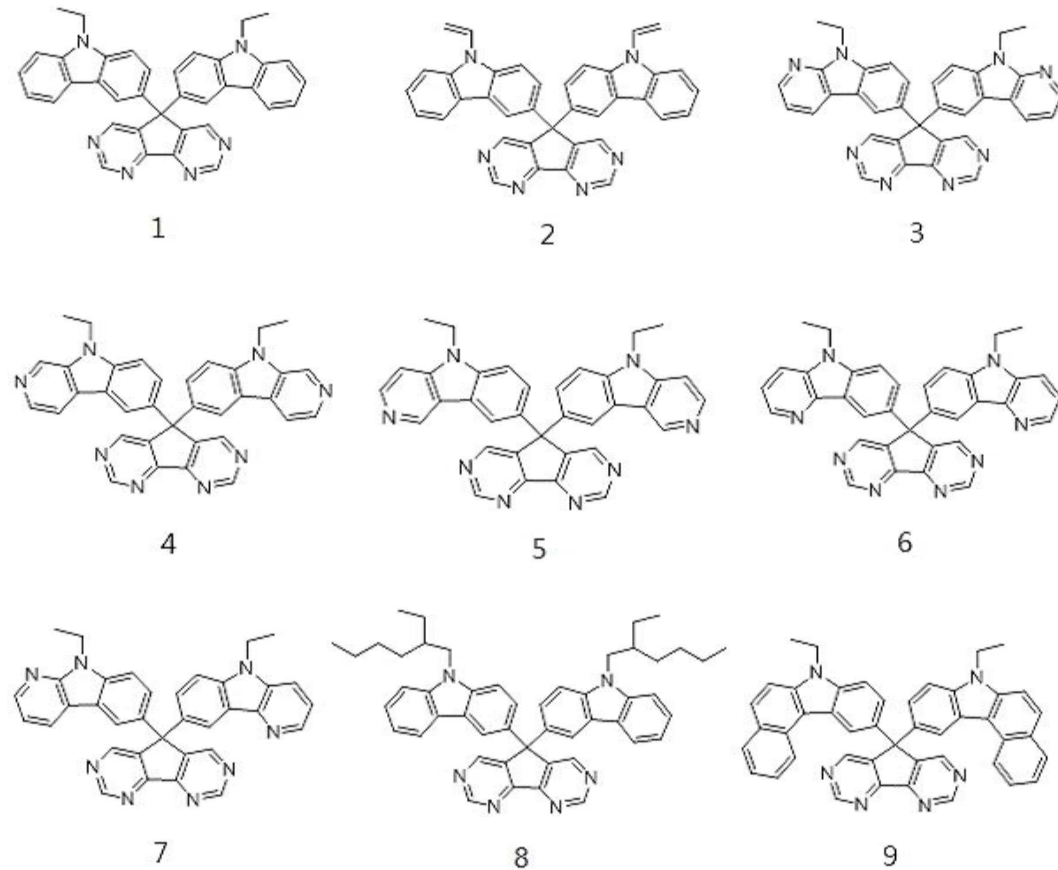
상기 R5 및 R6는 수소 원자이거나, 서로 결합하여 치환 또는 비치환된 C6의 방향족 고리를 형성하며,

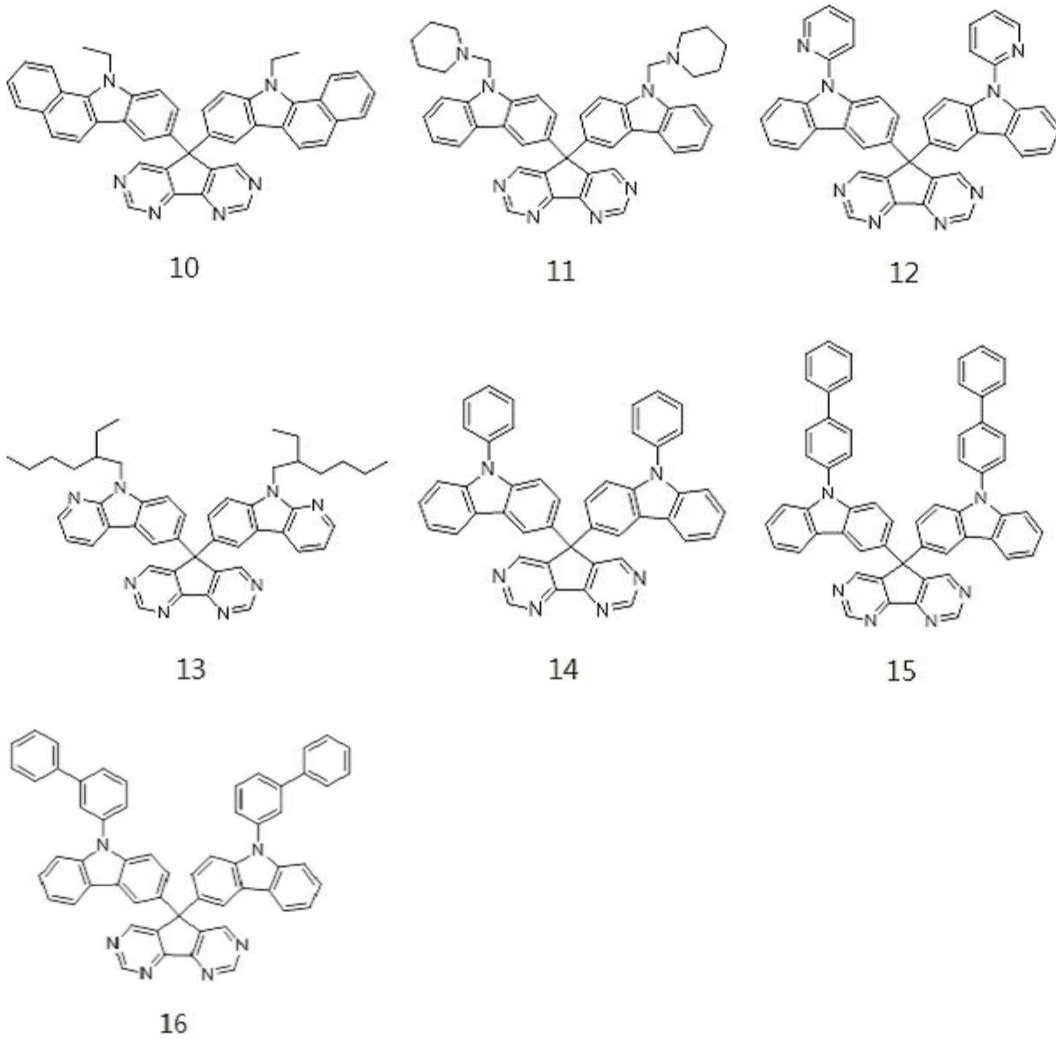
상기 R7은 수소 원자이다.

**청구항 4**

청구항 3에 있어서,

상기 인광 호스트용 화합물은 하기의 화합물 1 내지 16 중에서 선택되는 어느 하나인 것을 특징으로 하는 인광 호스트용 화합물:





**청구항 5**

한 쌍의 전극 사이에 유기막을 포함하는 유기 발광 소자에 있어서,  
 상기 유기막이 제1항 내지 제4항 중 어느 하나의 항에 따른 인광 호스트용 화합물을 포함하는 것을 특징으로 하는 유기 발광 소자.

**청구항 6**

제5항에 있어서,  
 상기 유기막은 발광층인 것을 특징으로 하는 유기 발광 소자.

**발명의 설명**

**기술분야**

[0001] 본 발명은 인광 호스트용 화합물 및 이를 포함한 유기 발광 소자에 관한 것이다. 보다 상세하게, 본 발명은 도너-억셉터-도너(D-A-D) 구조를 채택하여 밴드갭을 크게 한 인광 호스트용 화합물, 및 이를 포함시켜 색을 구현 하면서 우수한 발광효율을 갖는 유기 발광 소자에 관한 것이다.

**배경기술**

[0002] 전기발광소자(electroluminescent device: EL 소자)는 자발광형 표시소자로 시야각이 넓고 콘트라스트가 우수할 뿐만 아니라 응답 시간이 빠르다는 장점을 가지고 있다.

- [0003] EL 소자는 발광층(emitting layer) 형성용 재료에 따라 무기 EL 소자와 유기 EL 소자로 구분된다. 여기에서 유기 EL 소자는 무기 EL 소자에 비하여 휘도, 구동전압 및 응답속도 특성이 우수하고 다색화가 가능하다는 장점을 가지고 있다.
- [0004] 일반적인 유기 EL 소자는 기판 상부에 애노드가 형성되어 있고, 이 애노드 상부에 정공 수송층, 발광층, 전자 수송층 및 캐소드가 순차적으로 형성되어 있는 구조를 가지고 있다. 여기에서 정공 수송층, 발광층 및 전자 수송층은 유기 화합물로 이루어진 유기 박막들이다.
- [0005] 상술한 바와 같은 구조를 갖는 유기 EL 소자의 구동 원리는 다음과 같다. 상기 애노드 및 캐소드 간에 전압을 인가하면 애노드로부터 주입된 정공은 정공 수송층을 경유하여 발광층에 이동된다. 한편, 전자는 캐소드로부터 전자 수송층을 경유하여 발광층에 주입되고 발광층 영역에서 캐리어들이 재결합하여 엑시톤(exiton)을 생성한다. 이 엑시톤이 여기 상태에서 기저 상태로 변화되고, 이로 인하여 발광층의 분자가 발광함으로서 화상이 형성된다. 발광 재료는 그 발광 메커니즘에 따라 일중항 상태의 엑시톤을 이용하는 형광 재료와 삼중항 상태를 이용하는 인광 재료로 나뉜다. 인광 재료는 일반적으로 무거운 원자를 함유하는 유기무기 화합물 구조를 가지고 있으며 무거운 원자에 의해 원래 금지 전이이던 삼중항 상태의 엑시톤이 허용 전이를 거쳐 인광 발광 하게 된다. 인광 재료는 75% 생성 확률을 갖는 삼중항 엑시톤을 사용할 수 있게 되어 25% 일중항 엑시톤을 이용하는 형광 재료보다 매우 높은 발광 효율을 가질 수 있다.
- [0006] 인광 재료를 이용한 발광층은 호스트 물질과 이로부터 에너지를 전이 받아 발광하는 도판트 물질로 구성되어 있는데, 도판트 물질로는 이리듐 금속 화합물을 이용한 여러 재료들이 보고 되고 있다. 이리듐 화합물을 이용한 유기 발광 재료에 대한 연구로는 프린스턴 대학, 남캘리포니아 대학 등에서 이리듐(Iridium), 플래티늄(platinum) 금속 화합물을 이용한 여러 인광 재료들이 발표되고 있으나, 좀 더 발광 특성이 우수하고 안정한 재료 개발이 진행되고 있다.

**선행기술문헌**

**특허문헌**

- [0007] (특허문헌 0001) 대한민국 공개특허공보 제10-2006-0113935호

**발명의 내용**

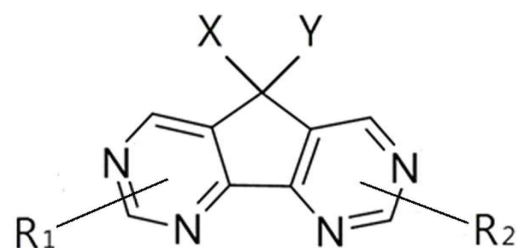
**해결하려는 과제**

- [0008] 따라서, 본 발명이 이루고자 하는 기술적 과제는 도너-억셉터-도너(D-A-D) 구조를 채택하여 밴드갭을 크게 한 인광 호스트용 화합물을 제공하는 것이다.
- [0009] 또한, 본 발명이 이루고자 하는 다른 기술적 과제는 도너-억셉터-도너(D-A-D) 구조를 채택하여 밴드갭을 크게 한 인광 호스트용 화합물을 사용한 유기 발광 소자를 제공하는 것이다.

**과제의 해결 수단**

- [0010] 본 발명은 하기 화학식 1로 표시되는 인광 호스트용 화합물을 제공한다:

[화학식 1]



- [0012] 상기 식에서
- [0013]
- [0014] X와 Y는 각각 독립적으로 헤테로 원자를 포함하거나 포함하지 않는 하나 이상의 C1-C30의 탄화수소기로 치환 또

는 비치환된 카바졸기, 또는 헤테로 원자를 포함하거나 포함하지 않는 하나 이상의 C1-C30의 탄화수소기로 치환 또는 비치환된 카볼린기이며;

[0015] 상기 R1 및 R2는 각각 독립적으로 수소 원자, 시아노기, 히드록시기, 티올기, 할로겐 원자, 치환 또는 비치환된 C1-C14의 알킬기, 치환 또는 비치환된 C1-C14의 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C2-C14의 알케닐기, 치환 또는 비치환된 C6-C14의 아릴기, 치환 또는 비치환된 C7-C14의 아릴알킬기, 치환 또는 비치환된 C6-C14의 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C4-C14의 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 C5-C14의 헤테로아릴알킬기, 치환 또는 비치환된 C4-C14의 헤테로아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C5-C14의 사이클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C4-C14의 헤테로사이클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C2-C14의 알킬카르보닐기, 치환 또는 비치환된 C7-C30의 아릴카르보닐기, 또는 C1-C14의 알킬티오기이며,

[0016] 상기에서 헤테로 고리에는 N, O, 및 S 중에서 선택되는 헤테로 원자가 1개 이상 포함된다.

[0018] 또한, 본 발명은

[0019] 한 쌍의 전극 사이에 구비되어 있는 유기막을 포함하고 있는 유기 발광 소자에 있어서, 상기 유기막이 상기 화학식 1로 표시되는 인광 호스트용 화합물을 포함하고 있는 것을 특징으로 하는 유기 발광 소자를 제공한다.

**발명의 효과**

[0020] 본 발명에 따른 인광 호스트용 화합물은 도너-억셉터-도너(D-A-D) 구조를 채택하여 밴드갭을 크게 하도록 설계 하면서, 특징적으로는 억셉터 역할의 중심부로 하나 이상의 질소원자가 치환된 구조를 모핵으로 하고 모핵의 주변에 도너 역할로 카바졸 또는 카볼린 화합물을 결합시켜 높은 삼중항 에너지(ET)를 가지면서 높은 유리전이 온도(Tg)와 분자량이 큰 비정형의 물질로 디자인되어, 상기 물질을 이용한 발광 소자는 우수한 발광 특성과 안정성을 가질 수 있다.

**도면의 간단한 설명**

[0021] 도 1은 본 발명의 일 구현예에 따른 유기 발광 소자의 구조를 나타낸 단면도이다.

**발명을 실시하기 위한 구체적인 내용**

[0022] 이하, 본 발명을 더욱 상세히 설명한다.

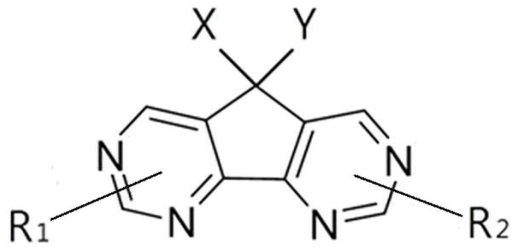
[0023] 본 발명의 바람직한 실시 예를 첨부된 도면에 의하여 상세히 설명하면 다음과 같다. 본 발명의 상세한 설명에 앞서, 이하에서 설명되는 본 명세서 및 청구범위에 사용된 용어나 단어는 통상적이거나 사전적인 의미로 한정해서 해석되어서는 안된다. 따라서, 본 명세서에 기재된 실시예와 도면에 도시된 구성은 본 발명의 가장 바람직한 일 실시예에 불과할 뿐이고 본 발명의 기술적 사상을 모두 대변하는 것은 아니므로, 본 출원시점에 있어서 이들을 대체할 수 있는 다양한 균등물과 변형예들이 있을 수 있음을 이해하여야 한다.

[0025] 본 발명에 따른 인광 호스트용 화합물은 HOMO-LUMO 간의 밴드갭을 크게 하기 위하여 도너-억셉터-도너(D-A-D) 구조를 채택하여 설계한 것이며, 특징적으로는 억셉터 역할의 중심부로 하나 이상의 질소원자가 치환된 구조를 모핵으로 하여 모핵의 주변에 도너 역할로 카바졸 또는 카볼린 화합물이 결합된 구조이며, 상기 카바졸 또는 카볼린 화합물은 1개 또는 2개가 포함되며, 구조 내 아민과 고리환에 알킬 또는 오각 내지 육각 고리의 유도체가 치환된 화합물을 대칭 또는 비대칭 구조로 포함한다.

[0026] 상기 모핵인 시클로펜타[1,2-d:5,4-d']디피리미딘 구조에 포함된 4개의 질소원자는 전자를 끌어당기는 역할을 수행함으로써 인광 호스트용 화합물의 밴드갭을 더 크게 하는 기능을 수행한다.

[0027] 구체적으로, 본 발명에 따른 인광 호스트용 화합물은 하기 화학식 1의 구조를 갖는다:

[0028] [화학식 1]



[0029]

[0030] 상기 식에서

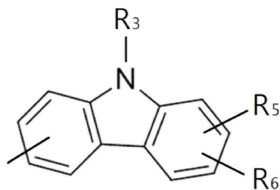
[0031] X와 Y는 각각 독립적으로 헤테로 원자를 포함하거나 포함하지 않는 하나 이상의 C1~C30의 탄화수소기로 치환 또는 비치환된 카바졸기, 또는 헤테로 원자를 포함하거나 포함하지 않는 하나 이상의 C1~C30의 탄화수소기로 치환 또는 비치환된 카볼린기이며;

[0032] 상기 R1 및 R2는 각각 독립적으로 수소 원자, 시아노기, 히드록시기, 티올기, 할로젠 원자, 치환 또는 비치환된 C1-C14의 알킬기, 치환 또는 비치환된 C1-C14의 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C2-C14의 알케닐기, 치환 또는 비치환된 C6-C14의 아릴기, 치환 또는 비치환된 C7-C14의 아릴알킬기, 치환 또는 비치환된 C6-C14의 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C4-C14의 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 C5-C14의 헤테로아릴알킬기, 치환 또는 비치환된 C4-C14의 헤테로아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C5-C14의 사이클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C4-C14의 헤테로사이클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C2-C14의 알킬카르보닐기, 치환 또는 비치환된 C7-C30의 아릴카르보닐기, 또는 C1-C14의 알킬티오기이며,

[0033] 상기에서 헤테로 고리에는 N, O, 및 S 중에서 선택되는 헤테로 원자가 1개 이상 포함된다.

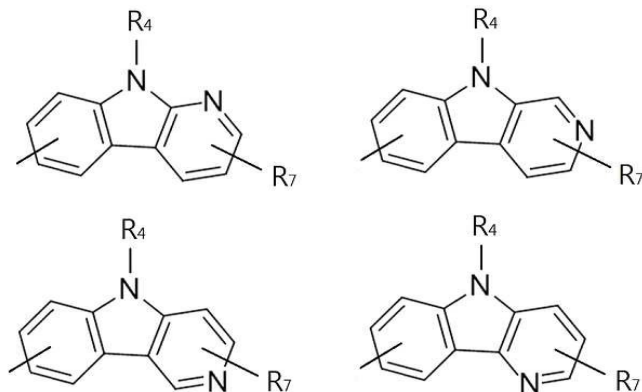
[0035] 상기 화학식 1로 표시되는 인광 호스트용 화합물은 한 분자내 밴드갭에 차이가 있는 도너-억셉터-도너 구조를 채택하여, 밴드갭이 3.0 eV 이상이 되어 에너지 전달이 우수하며, 이로 인한 높은 발광 효율을 나타낼 수 있다. 또한, 상술한 화학식 1로 표시되는 인광 호스트용 화합물은 유기 발광 소자에 색을 구현하기 위해 사용될 수 있으며, 특히 청색을 구현하기 위해 사용될 수 있다.

[0037] 상기 화학식 1로 표시되는 화합물에서 치환 또는 비치환된 카바졸기는 하기 화학식으로 표시될 수 있으며,



[0038]

[0039] 상기 치환 또는 비치환된 카볼린기는 하기 화학식 중의 어느 하나로 표시될 수 있으며,



[0040]

[0041] 상기 화학식들에서, R3 내지 R7은 각각 독립적으로 수소 원자, 시아노기, 히드록시기, 티올기, 할로젠 원자, 치환 또는 비치환된 C1-C14의 알킬기, 치환 또는 비치환된 C1-C14의 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C2-C14의 알케닐기, 치환 또는 비치환된 C6-C14의 아릴기, 치환 또는 비치환된 C7-C14의 아릴알킬기, 치환 또는 비치환된 C6-

C14의 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C4-C14의 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 C5-C14의 헤테로아릴알킬기, 치환 또는 비치환된 C4-C14의 헤테로아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C5-C14의 사이클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C4-C14의 헤테로사이클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C5-C14의 사이클로알킬기로 치환된 C1-C4의 알킬기, 치환 또는 비치환된 C4-C14의 헤테로사이클로알킬기로 치환된 C1-C4의 알킬기, 치환 또는 비치환된 C2-C14의 알킬카르보닐기, 치환 또는 비치환된 C7-C30의 아릴카르보닐기, 또는 C1-C14의 알킬티오기이고,

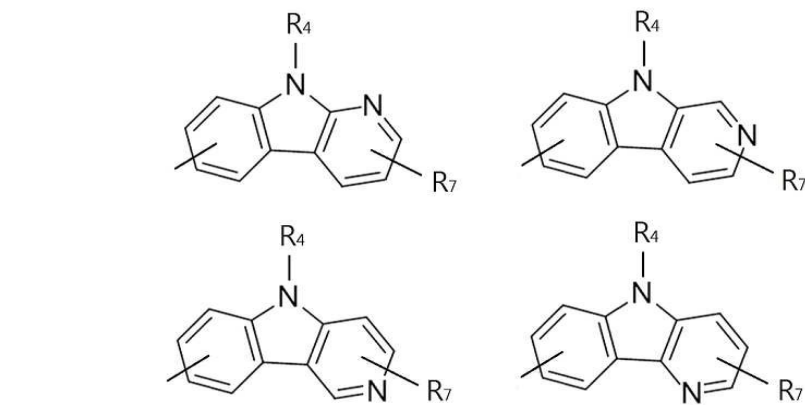
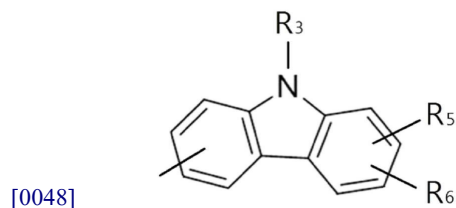
[0042] 상기 R5 및 R6는 서로 결합하여 치환 또는 비치환된 C4~C10의 사이클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C4-C10의 사이클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 C6~C20의 방향족 고리, 또는 치환 또는 비치환된 C4~C20의 헤테로방향족 고리를 형성할 수 있으며,

[0043] 상기에서 헤테로 고리에는 N, O, 및 S 중에서 선택되는 헤테로 원자가 1개 이상 포함될 수 있다.

[0045] 상기 화학식 1로 표시되는 화합물에서 더욱 바람직하게는,

[0046] R1 및 R2는 수소 원자이고;

[0047] X 및 Y는 각각 독립적으로 하기 화학식들 중에서 선택되는 치환된 카바졸기 또는 치환된 카볼린기일 수 있다

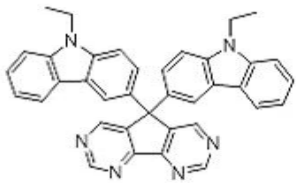


[0050] 상기 화학식들에서, R3 또는 R4는 치환 또는 비치환된 C1-C10의 알킬기; 치환 또는 비치환된 C2-C5의 알케닐기; 치환 또는 비치환된 C6-C14의 아릴기; 치환 또는 비치환된, 하나 이상의 질소원자를 포함하는 C4-C5의 헤테로아릴기; 치환 또는 비치환된, 하나 이상의 질소원자를 포함하는 C4-C6의 헤테로사이클로알킬기로 치환된 C1-C4의 알킬기이고,

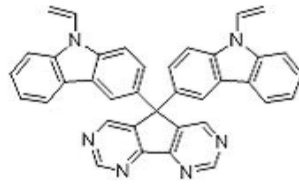
[0051] 상기 R5 및 R6는 수소 원자이거나, 서로 결합하여 치환 또는 비치환된 C6의 방향족 고리를 형성하며,

[0052] 상기 R7은 수소 원자이다.

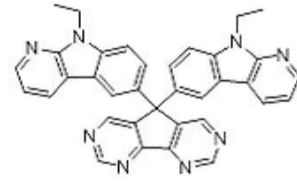
[0054] 더 더욱 바람직하게는, 상기 인광 호스트용 화합물은 하기의 화합물 1 내지 16 중에서 선택되는 어느 하나일 수 있다:



1

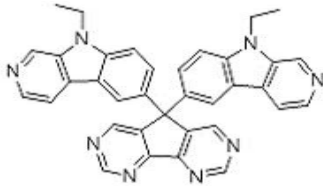


2

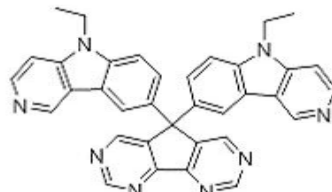


3

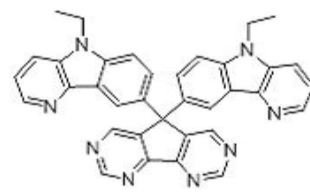
[0056]



4

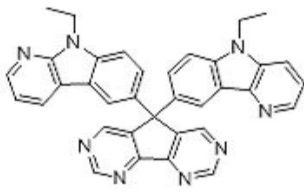


5

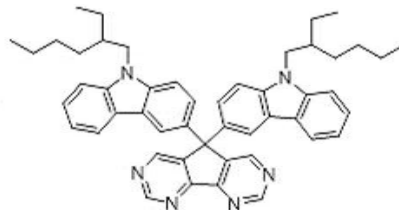


6

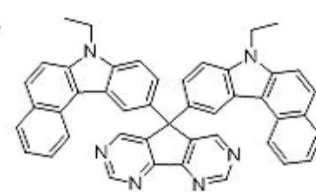
[0057]



7

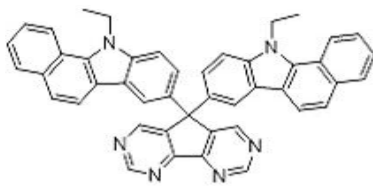


8

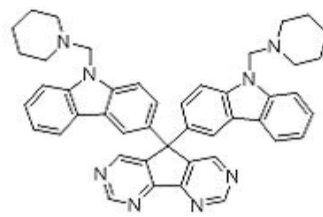


9

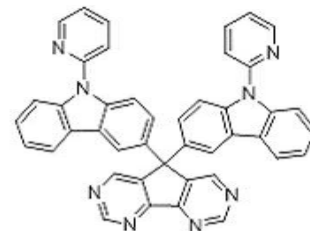
[0058]



10

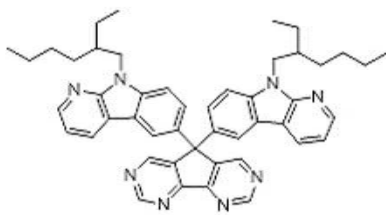


11

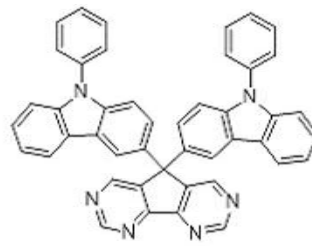


12

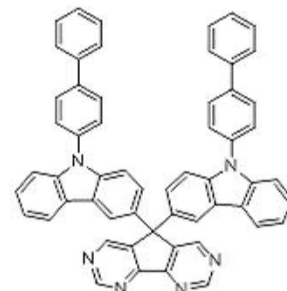
[0059]



13

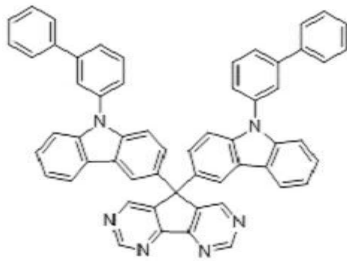


14



15

[0060]



16

- [0061]
- [0063] 또한, 본 발명은
- [0064] 한 쌍의 전극 사이에 유기막을 포함하는 유기 발광 소자에 있어서, 상기 유기막이 본 발명에 따른 인광 호스트용 화합물을 포함하는 것을 특징으로 하는 유기 발광 소자에 관한 것이다.
- [0065] 상기 유기막은 발광층일 수 있다.
- [0067] 이하, 본 발명에 따른 인광 호스트용 화합물을 채용한 유기 발광 소자의 구조 및 제조 방법을 설명한다.
- [0068] 본 발명에 따른 유기 발광 소자는 통상의 발광 소자의 구조를 채용할 수 있으며, 필요에 따라 구조가 변경될 수 있다. 기본적으로 유기 발광 소자는 제 1 전극(애노드 전극)과 제 2 전극(캐소드 전극) 사이에 유기막(발광층)을 포함하는 구조를 가지며, 필요에 따라서, 정공 주입층, 정공 수송층, 정공 억제층, 전자 주입층 또는 전자 수송층이 더 포함될 수 있다. 본 발명의 발광 소자의 구조를 설명하기 위하여 도 1를 참조한다.
- [0069] 도 1를 참조하면, 본 발명에 따른 유기 발광 소자는 애노드 전극(20)과 캐소드 전극(80) 사이에 발광층(50)을 포함하는 구조를 가지며, 애노드 전극(20)과 발광층(50) 사이에 정공 주입층(30)과 정공 수송층(40)을 포함하고 있으며, 또한, 발광층(50)과 캐소드 전극(80) 사이에 전자 수송층(50)과 전자 주입층(70)을 포함하고 있다.
- [0070] 한편, 본 발명의 일 실시 예에 따른 도 1의 유기 발광 소자는 다음과 같은 공정을 통해 제조되며, 이는 하나의 예를 상술하고 있는 것일 뿐 이 방법으로 한정되는 것은 아니다.
- [0071] 먼저 기판(10) 상부에 애노드 전극용 물질을 코팅하여 애노드 전극(20)을 형성한다. 여기서, 기판(10)으로는 이 분야에서 일반적으로 사용되는 기판을 사용할 수 있으며, 특히 투명성, 표면평활성, 취급용이성 및 방수성이 우수한 유리 기판 또는 투명 플라스틱 기판이 바람직하다. 또한, 상기 기판위에 형성된 애노드 전극용 물질로는 투명하고 전도성이 우수한 산화인듐주석(ITO), 산화주석(SnO<sub>2</sub>), 산화아연(ZnO) 등이 사용될 수 있지만, 이것으로 제한되는 것은 아니다.
- [0072] 상기 애노드 전극(20)의 상부에 정공 주입층(HIL)(30)을 선택적으로 형성한다. 이때 정공 주입층은 진공 증착 또는 스핀 코팅과 같은 통상적인 방법을 통해 형성한다. 정공 주입층용 물질로는 특별히 제한되지 않지만 CuPc(구리 프탈로시아닌) 또는 IDE 406(Idemitsu Kosan사)이 사용될 수 있다.
- [0073] 이어서, 상기 정공 주입층(30) 상부에 상기 정공 수송층(HTL)(40)을 진공 증착 또는 스핀 코팅과 같은 통상적인 방법을 통해 형성한다. 상기 정공 수송층용 물질로는 특별히 제한되지 않지만, N, N'-디페닐-N, N'-비스(1-나프틸)-1,1'-비페닐-4,4'-디아민(NPB), N, N'-비스(3-메틸페닐)-N, N'-디페닐-[1,1'-비페닐]-4,4'-디아민(TPD), N, N'-디(나프탈렌-1-일)-N, N'-디페닐벤지딘, N, N'-디(나프탈렌-1-일)-N, N'-디페닐-벤지딘 : α-NPD)등이 사용될 수 있다.
- [0074] 이어서 정공 수송층(40) 상부에 발광층(EML)(50)을 형성한다. 상기 발광층 형성 재료로는 본 발명에 따른 인광 호스트용 화합물 중에서 선택된 1종 이상을 발광 호스트 물질로 포함할 수 있으며, 단층 또는 2층 이상의 다층 구조를 가질 수 있다. 이때, 화학식 1의 화합물은 단독으로 포함되거나, 당 업계에 공지된 기타 화합물, 예를 들면 청색 발광 도판트(FIrppy 또는 FIrpic 등의 이리듐 화합물)등과 혼합되어 포함될 수 있다. 상기 발광층에 인광 호스트용 화합물은 발광층을 구성하는 물질 총 중량에 기초하여 1 내지 95중량%의 범위 내에서 포함될 수 있다.
- [0075] 상기 인광 호스트용 화합물은 진공 증착 방법으로 형성될 수 있으며, 또한 스핀 코팅과 같은 습식공정을 통해서 증착될 수 있으며, 레이저 열전사법(LITI)이 이용될 수도 있다.
- [0076] 선택적으로 상기 발광층(50)의 상부에는 발광 물질에서 형성되는 엑시톤이 전자수송층으로 이동되는 것을 막아

주거나 정공이 전자 수송층(60)으로 이동되는 것을 막아주는 정공 억제층(HBL)이 형성될 수 있으며, 정공 억제층용 물질로는 특별히 제한되지 않지만, 페난트롤린계 화합물(예를 들면, BCP) 등을 사용할 수 있다. 이것은 진공 증착 방법 또는 스핀 코팅 방법을 통해 형성될 수 있다.

[0077] 또한 발광층(50)위에 전자 수송층(ETL)(60)이 형성될 수 있으며, 이는 진공 증착 방법 또는 스핀 코팅 방법이 이용될 수 있다. 전자 수송층용 재료로서는 특별히 제한되지 않지만 TBPI, 알루미늄 착물(예를 들면, Alq3(트리스(8-퀴놀리놀라토)-알루미늄))을 사용할 수 있다.

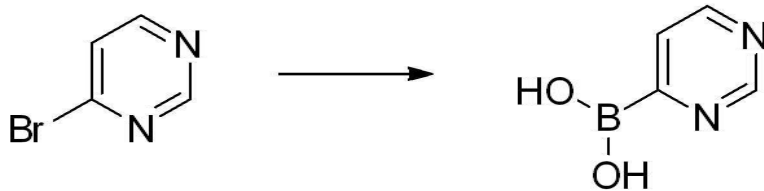
[0078] 상기 전자 수송층(60) 상부에 전자 주입층(EIL)(70)이 진공증착 또는 스핀코팅과 같은 방법을 이용하여 형성될 수 있으며, 전자 주입층(70)용 재료로는 특별히 제한되지 않지만 LiF, NaCl, CsF등의 물질을 이용할 수 있다.

[0079] 이어서, 전자 주입층(70) 상부에 캐소드 전극(80)이 진공 증착을 통하여 형성됨으로써 발광 소자가 완성된다. 여기에서 캐소드용 금속으로는 리튬(Li), 마그네슘(Mg), 알루미늄(Al), 알루미늄-리튬(Al-Li), 칼슘(Ca), 마그네슘-인듐(Mg-In), 마그네슘-은(Mg-Ag)등이 이용된다.

[0080] 또한, 본 발명에 따른 유기 발광 소자는 도 1에 나타난 바와 같은 적층 구조를 가지며, 필요에 따라서 한층 또는 2층의 중간층, 예를 들면 정공 억제층 등을 더 형성하는 것도 가능하다. 또한 발광 소자의 각 층의 두께는 이 분야에서 일반적으로 사용되는 범위에서 필요에 따라 결정될 수 있다.

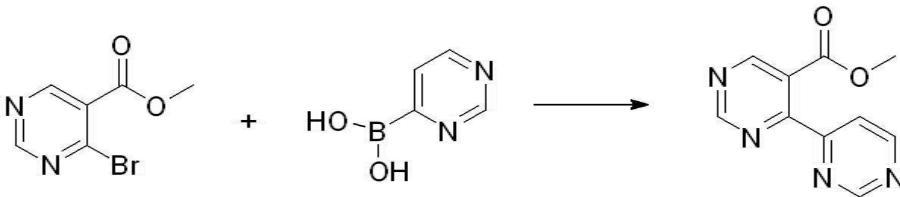
[0081] 이하, 본 발명을 실시예를 들어 더욱 상세히 설명하지만, 본 발명이 하기 실시예로 한정되는 것은 아니다.

[0083] **합성예 1: 피리미딘-4-일보로닉 에시드의 합성**



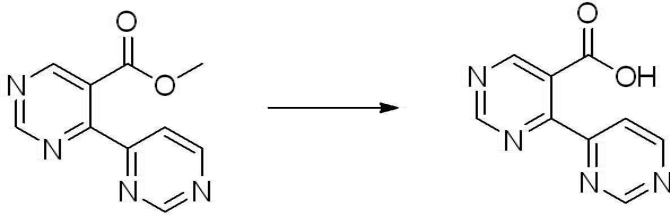
[0084] [0086] 4-브로모피리미딘 14.6g(92mmol)을 테트라하이드로 퓨란 300mL에 가하고 1.6몰 n-부틸리튬 115.2mL(184mmol)을 -78℃에서 천천히 가한 다음 같은 온도에서 1시간 교반한다. 반응 용액에 트리메틸 보레이트 30.8mL(276mmol)을 1시간에 걸쳐 서서히 가하고 같은 온도에서 1시간 더 반응시킨 다음 상온으로 승온하여 2N 염산으로 산성화하고 에틸아세테이트 600mL를 가하여 추출하고 포화 소금물로 2회 세척하고 다시 물로 1회 세척한다. 유기층을 무수 소듐 설페이트를 가하여 30분간 교반한 후 여과하여 감압 증류한 다음 얻어진 잔사를 에틸아세테이트 n-헥산 1:2 혼합 용액을 용리액으로 실리카겔 크로마토그래피하여 목적 화합물 피리미딘-4-일보로닉 에시드 7.3g(수율 64.3%)을 얻었다.

[0088] **합성예 2: 메틸 [4,4'-바이피리미딘]-5-카르복실레이트의 합성**



[0089] [0091] 메틸 4-브로모피리미딘-5-카르복실레이트 6.5g(30mmol)과 피리미딘-4-일보로닉 에시드 5.6g(45mmol)을 톨루엔 60mL에 녹이고 포타슘 카보네이트 9.2g(66mmol)을 물30mL에 녹인 용액을 가한 다음 에탄올 30mL를 가한다. 혼합 용액을 40℃로 승온한 후 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐(0) 174mg(0.5mol%)을 한번에 가하고 80℃에서 환류하여 18시간 반응시킨다. 반응 종결을 확인 한 후 트랩을 사용하여 에탄올을 제거하고 톨루엔 40mL를 가하여 여과하고 포화 소금물로 3회 세척 추출한다. 여액에 활성탄과 무수 소듐 설페이트를 가하여 30분간 교반한 후 여과하고 감압 증류하여 얻어진 잔사를 에틸아세테이트 n-헥산 1:4 혼합 용액을 용리액으로 실리카겔 크로마토그래피하여 목적화합물 메틸 [4,4'-바이피리미딘]-5-카르복실레이트 3.75g(수율 57.8%)을 얻는다.

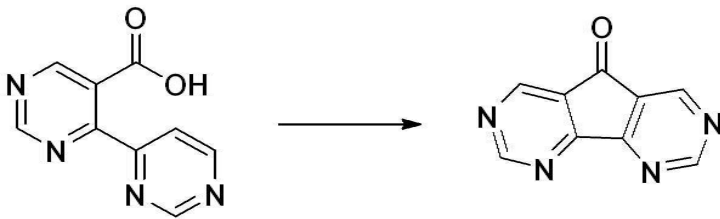
[0093] **합성예 3: [4,4'-바이피리미딘]-5-카르복실릭 에시드의 합성**



[0094]

[0096] 메틸 [4,4'-바이피리미딘]-5-카르복실레이트 3.75g(17.5mmol)에 다이옥산 50mL를 가하고 9몰 포다시움 하이드록사이드 수용액 50mL를 가한 후 12시간 환류 교반한다. 반응 종결을 확인하고 반응액을 감압 증류하고 얻어진 잔사에 물 100mL를 가하여 생성된 고형물을 여과하고 얻어진 여액을 진한 염산 20mL로 산성화 한다. 생성된 고형물을 여과하고 물과 과량의 아세톤으로 세척하고 감압 건조하여 목적화합물 [4,4'-바이피리미딘]-5-카르복실릭 에시드 3.13g(수율 88.7%)을 얻었다.

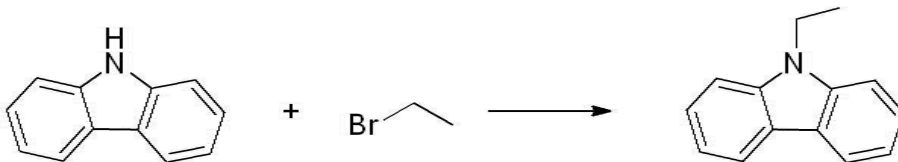
[0099] **합성예 4: 5H-씨클로펜타[1,2-d:5,4-d']디피리미딘-5-온의 합성**



[0100]

[0102] [4,4'-바이피리미딘]-5-카르복실릭 에시드 3.1g(15.3mmol)을 폴리포스포릭 에시드 70mL에 가하고 120℃에서 12시간 동안 반응시킨다. 반응 종결을 확인 하고, 상온으로 냉각한 다음 1N 수산화나트륨 수용액을 가하여 pH를 7-8로 한 후 생성된 침전을 여과하고 물로 세척하여 얻어진 고형물을 이소부틸알코올로 재결정하여 목적화합물 5H-씨클로펜타[1,2-d:5,4-d']디피리미딘-5-온 0.7g(수율 24.9%)을 얻었다.

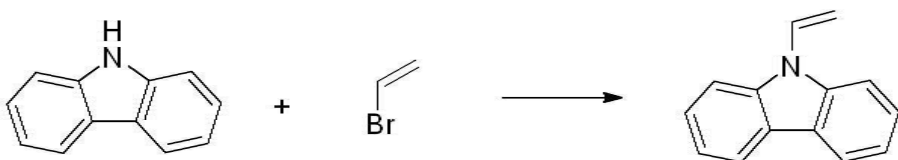
[0104] **합성예 5: 9H-에틸-카바졸의 합성**



[0105]

[0107] 테트라하이드로퓨란 30mL에 9H-카바졸 10g(59.8mmol)을 가하고 0℃로 한 다음 소듐하이드라이드 2.88g(120mmol)을 가한 다음 30분간 교반한다. 반응 용액에 브로모에탄 7.85g(72mmol)을 가하고 3시간 환류 교반한다. 반응 종결을 확인 한 다음 상온으로 한 후 반응 용액에 메틸렌클로라이드 100mL를 가하고 포화 소금물로 세척하여 추출한다. 유기층을 무수 망초로 처리하고 여과하여 여액을 감압 증류한 다음 n-헥산으로 결정화하여 목적화합물 9H-에틸-카바졸 10.8g(수율 92.3%)을 얻었다.

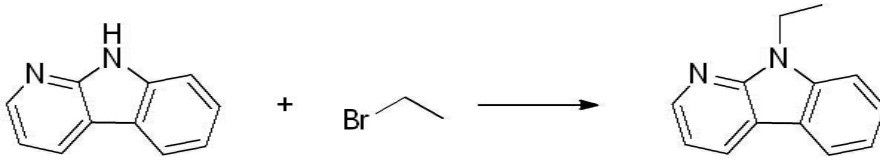
[0109] **합성예 6: 9-비닐-9H-카바졸의 합성**



[0110]

[0112] 9H-카바졸 16.7g(100mmol), 브로모에텐 16g(150mmol)과 소듐-t-부톡사이드 19.3g(200mmol)을 질소 분위기 하에서 톨루엔 500mL에 가하고 상온에서 30분 교반후 60℃로 한 다음 트리스(디벤질리덴아세톤)디팔라디움(0) 0.83g과 트리스-t-부틸포스핀 0.16g을 차례대로 넣고 30분 교반한 후 환류 상태에서 18시간 반응시킨다. 반응 종결을 확인한 다음 여과하고 여액을 모두 감압 증류하고 얻어진 잔사에 n-헵탄을 가하고 2시간 교반하여 생성된 결정을 여과하여 얻어진 고형물을 에틸아세테이트와 n-헥산 1:1 혼합용액을 용리액으로 실리카겔 크로마토그 래피하여 목적화합물 9-비닐-9H-카바졸 15g(수율 77.8%)을 얻었다.

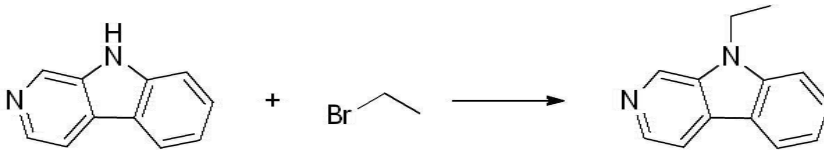
[0114] 합성예 7: 9-에틸-9H-피리도[2,3-b]인들의 합성



[0115]

[0117] 테트라하이드로푸란 100mL에 9H-피리도[2,3-b]인돌(α-카볼린) 10g(59.8mmol)을 가하고 0℃로 한 다음 소듐하이드라이드 2.88g(120mmol)을 가한 다음 30분간 교반한다. 반응 용액에 브로모에탄 7.85g(72mmol)을 가하고 3시간 환류 교반한다. 반응 종결을 확인 한 다음 상온으로 한 후 반응 용액에 에틸아세테이트 500mL를 가하고 20% 소금물로 세척하고 정제수로 세척하여 추출한다. 유기층을 무수 망초로 처리하고 여과하여 여액을 감압 증류한 다음 n-헥산으로 결정화하여 목적화합물 9-에틸-9H-피리도[2,3-b]인돌 9.93g(수율 84.3%)을 얻었다.

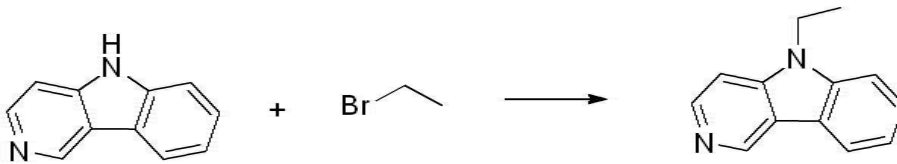
[0119] 합성예 8: 9-에틸-9H-피리도[3,4-b]인들의 합성



[0120]

[0122] 테트라하이드로푸란 100mL에 9H-피리도[3,4-b]인돌(β-카볼린) 10g(59.8mmol)을 가하고 0℃로 한 다음 소듐하이드라이드 2.88g(120mmol)을 가한 다음 30분간 교반한다. 반응 용액에 브로모에탄 7.85g(72mmol)을 가하고 3시간 환류 교반한 다음 합성예 7과 동일한 방법으로 처리하여 목적화합물 9-에틸-9H-피리도[3,4-b]인돌 8.22g(수율 69.8%)을 얻었다.

[0124] 합성예 9: 5-에틸-5H-피리도[4,3-b]인들의 합성

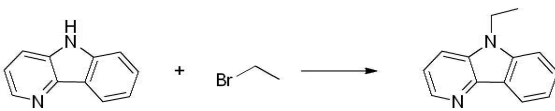


[0125]

[0126]

[0127] 테트라하이드로푸란 100mL에 5H-피리도[4,3-b]인돌(γ-카볼린) 10g(59.8mmol)을 가하고 0℃로 한 다음 소듐하이드라이드 2.88g(120mmol)을 가한 다음 30분간 교반한다. 반응 용액에 브로모에탄 7.85g(72mmol)을 가하고 3시간 환류 교반한 다음 합성예 7과 동일한 방법으로 처리하여 목적화합물 5-에틸-5H-피리도[4,3-b]인돌 8.6g(수율 73.0%)을 얻었다.

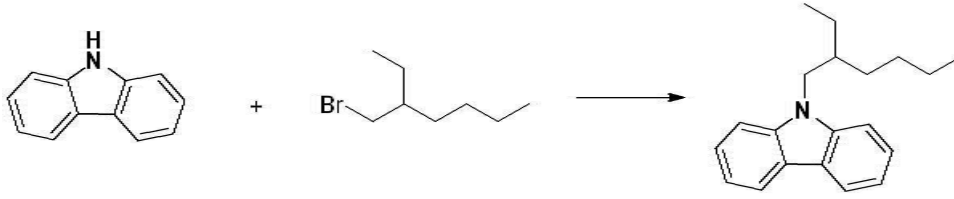
[0129] 합성예 10: 5-에틸-5H-피리도[3,2-b]인들의 합성



[0130]

[0132] 테트라하이드로푸란 100mL에 5H-피리도[3,2-b]인돌(δ-카볼린) 10g(59.8mmol)을 가하고 0℃로 한 다음 소듐하이드라이드 2.88g(120mmol)을 가한 다음 30분간 교반한다. 반응 용액에 브로모에탄 7.85g(72mmol)을 가하고 3시간 환류 교반한 다음 합성예 7과 동일한 방법으로 처리하여 목적화합물 5-에틸-5H-피리도[3,2-b]인돌 10.2g(수율 86.6%)을 얻었다.

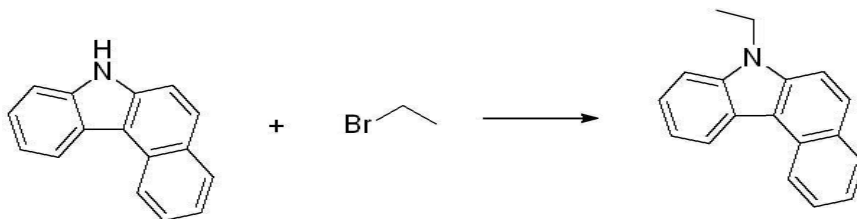
[0134] 합성예 11: 9-(2-에틸헥실)-9H-카바졸의 합성



[0135]

[0136] 테트라하이드로퓨란 200mL에 9H-카바졸 15g(90mmol)을 가하고 0℃로 한 다음 소듐하이드라이드 4.32g(180mmol)을 가한 다음 30분간 교반한다. 반응 용액에 3-(브로모메틸)헵탄 26.1g(135mmol)을 가하고 3시간 환류 교반한다. 반응 종결을 확인 후 상온으로 한 후 반응 용액을 감압 증류한 다음 얻어진 잔사에 에틸아세테이트 800mL를 가하고 포화 소금물로 세척하고 정제수로 1회 세척하여 추출한다. 유기층을 무수 망초로 처리하고 여과하여 여액을 감압 증류한 다음 n-헵탄으로 결정화하여 백색의 목적화합물 9-(2-에틸헥실)-9H-카바졸 21.6g(수율 85.9%)을 얻었다.

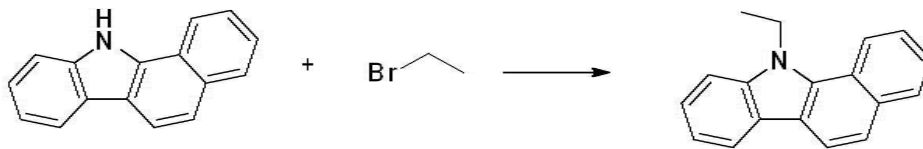
[0138] 합성예 12: 7-에틸-7H-벤조[c]카바졸의 합성



[0139]

[0141] 테트라하이드로퓨란 150mL에 7H-벤조[c]카바졸 19.6g(90mmol)을 질소 분위기 하에서 가하고 0℃로 한 다음 소듐하이드라이드 4.32g(180mmol)을 가하고 30분간 교반한다. 반응 용액에 브로모에탄 14.7g(135mmol)을 가하고 3시간 환류 교반한다. 반응 종결을 확인 후 상온으로 한 후 반응 용액을 감압 증류한 다음 얻어진 잔사에 에틸아세테이트 600mL를 가하고 20% 소금물로 세척하고 정제수로 1회 세척하여 추출한다. 유기층을 무수 망초로 처리하고 여과하여 여액을 감압 증류한 다음 n-헵탄으로 결정화하여 목적화합물 7-에틸-7H-벤조[c]카바졸 18.1g(수율 82.2%)을 얻었다.

[0143] 합성예 13: 11-에틸-11H-벤조[a]카바졸의 합성

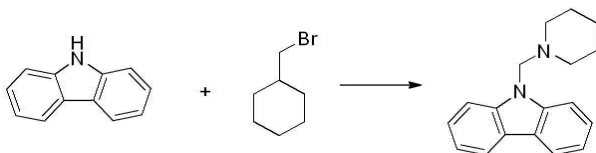


[0144]

[0146] 테트라하이드로퓨란 150mL에 11H-벤조[a]카바졸 19.6g(90mmol)을 질소 분위기 하에서 가하고 0℃로 한 다음 소듐하이드라이드 4.32g(180mmol)을 가하고 30분간 교반한다. 반응 용액에 브로모에탄 14.7g(135mmol)을 가하고 합성예 12와 동일한 방법으로 처리하여 목적화합물 11-에틸-11H-벤조[a]카바졸 16g(수율 72.4%)을 얻었다.

[0147]

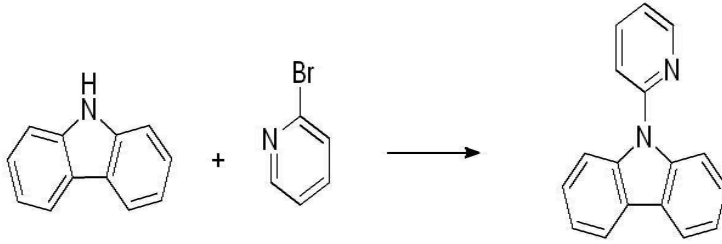
[0148] 합성예 14: 9-(피페리딘-1-일메틸)-9H-카바졸의 합성



[0150]

[0152] 테트라하이드로퓨란 150mL에 9H-카바졸 16.7g(100mmol)을 질소 분위기 하에서 가하고 0℃로 한 다음 소듐하이드라이드 4.8g(200mmol)을 가하고 30분간 교반한다. 반응 용액에 (브로모메틸)시클로헥산 24g(135mmol)을 가하고 합성예 11과 동일한 방법으로 처리하여 목적화합물 9-(피페리딘-1-일메틸)-9H-카바졸 16.6g(수율 62.8%)을 얻었다.

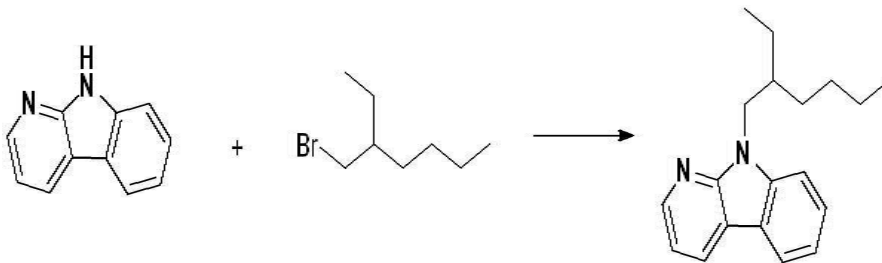
[0154] 합성예 15: 9-(2-피리디닐)-9H-카바졸의 합성



[0156]

[0157] 9H-카바졸 16.7g(100mmol), 2-브로모피리딘 23.7g(150mmol)과 소듐-t-부톡사이드 19.3g(200mmol)을 질소 분위기 하에서 톨루엔 500mL에 가하고 상온에서 30분 교반한 후 60℃로 한 다음 트리스(디벤질리텐아세톤)디팔라디움(0) 0.83g과 트리스-t-부틸포스핀 0.16g을 차례대로 넣고 30분 교반한 후 환류 상태에서 36시간 반응시킨다. 반응 종결을 확인한 다음 실리카 여과하고 여액을 모두 감압 증류하고 얻어진 잔사에 에틸아세테이트와 n-헥산 5:1 혼합용액을 용리액으로 실리카겔 크로마토그래피하여 목적화합물 14.3g(수율 58.8%)을 얻었다.

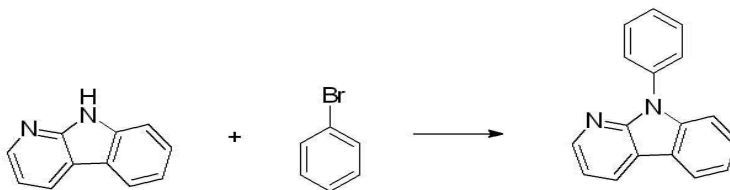
[0159] 합성예 16: 9-(2-에틸헥실)-9H-피리도[2,3-b]인들의 합성



[0161]

[0163] 테트라하이드로퓨란 250mL에 9H-피리도[2,3-b]인돌(α-카볼린) 15g(89.2mmol)을 가하고 0℃로 한 다음 소듐하이드라이드 4.32g(180mmol)을 가하고 30분간 교반한다. 반응 용액에 3-(브로모메틸)헵탄 26.1g(135mmol)을 가하고 3시간 환류 교반한다. 반응 종결을 확인한 후 상온으로 한 후 반응 용액을 감압 증류한 다음 얻어진 잔사에 에틸아세테이트 500mL를 가하고 포화 소금물로 세척하고 정제수로 1회 세척하여 추출한다. 유기층을 무수 망초로 처리하고 여과하여 여액을 감압 증류한 다음 차가운 디클로로메탄과 소량의 n-헵탄으로 결정화하여 목적화합물 9-(2-에틸헥실)-9H-피리도[2,3-b]인돌 16.2g(수율 64.3%)을 얻었다.

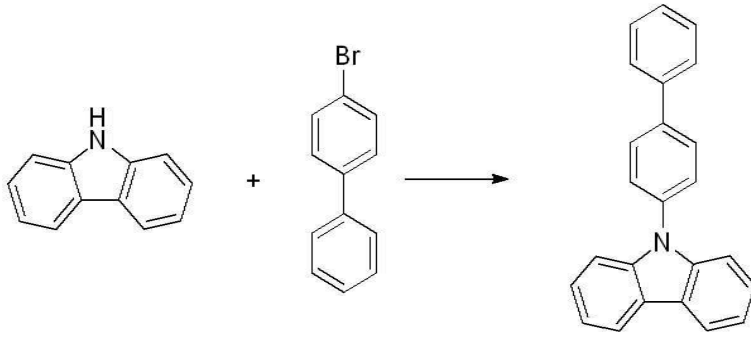
[0165] 합성예 17: 9-페닐-9H-피리도[2,3-b]인들의 합성



[0166]

[0168] 9H-피리도[2,3-b]인돌(α-카볼린) 12g(71mmol), 브로모벤젠 12.32g(78mmol), 소듐-t-부톡사이드 9.05g(94mmol)을 질소 분위기 하에서 톨루엔 200mL에 가하고 상온에서 30분 교반후 60℃로 한 다음 트리스(디벤질리텐아세톤)디팔라디움(0) 0.5g과 트리스-t-부틸포스핀 0.1g을 차례대로 넣고 30분 교반한 후 환류 상태에서 24시간 반응시킨다. 반응 종결을 확인한 다음 여과하고 여액을 모두 감압 증류하고 얻어진 잔사에 n-헵탄을 가하고 2시간 교반하여 생성된 결정을 여과한다. 여과해서 얻어진 고형물을 에틸아세테이트와 n-헥산 2:1 혼합용액을 용리액으로 사용하여 실리카겔 크로마토그래피하여 목적화합물 9-페닐-9H-피리도[2,3-b]인 15.2g(수율 87.7%)을 얻었다.

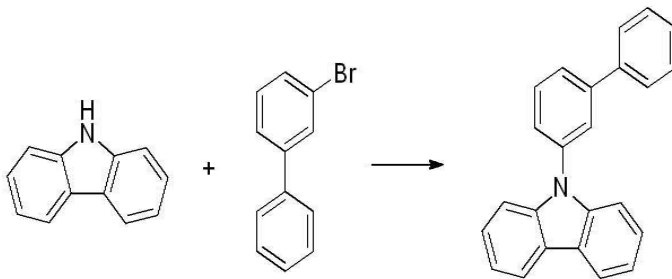
[0170] 합성예 18: 9-([1,1'-바이페닐]-4-일)-5H-카바졸의 합성



[0172]

[0174] 9H-카바졸 10g(60mmol), 4-브로모-1,1'-바이페닐 18.2g(78mmol), 소듐-t-부톡사이드 9.05g(94mmol)을 질소 분위기 하에서 크실렌 300mL에 가하고 상온에서 30분 교반후 60°C로 한 다음 트리스(디벤질리덴아세톤)디팔라디움(0) 0.5g과 트리스-t-부틸포스핀 0.1g을 차례대로 넣고 30분 교반한 후 환류 상태에서 30시간 반응시킨다. 반응 종결을 확인한 다음 여과하고 여액을 모두 감압 증류하여 얻어진 잔사에 n-헵탄을 가하고 2시간 교반하여 생성된 결정을 여과하여 얻어진 고형물을 에틸아세테이트와 n-헵산 4:1 혼합용액을 용리액으로 실리카겔 크로마토그래피하여 목적화합물 9-([1,1'-바이페닐]-4-일)-5H-카바졸 19.5g(수율 78.2%)을 얻었다.

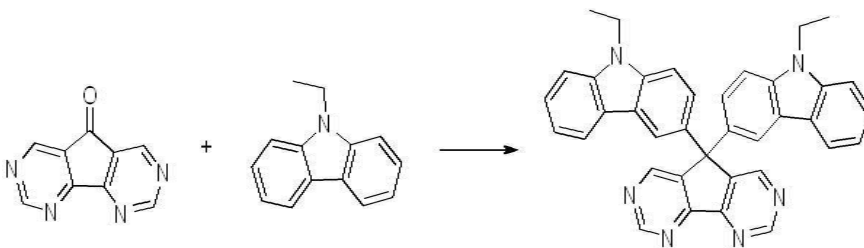
[0176] 합성예 19: 9-([1,1'-바이페닐]-3-yl)-9H-카바졸의 합성



[0177]

[0179] 9H-카바졸 10g(60mmol), 3-브로모-1,1'-바이페닐 18.2g(78mmol), 소듐-t-부톡사이드 9.05g(94mmol)을 질소 분위기 하에서 크실렌 300mL에 가하고 합성예 18과 동일한 방법으로 처리하여 목적화합물 9-([1,1'-바이페닐]-4-일)-5H-카바졸 20.2g(수율 81.1%)을 얻었다.

[0181] 합성예 20: 5,5-비스(9-에틸-9H-카바졸-3-일)-5H-시클로펜타[1,2-d:5,4-d']디피리미딘의 합성(화합물 1)



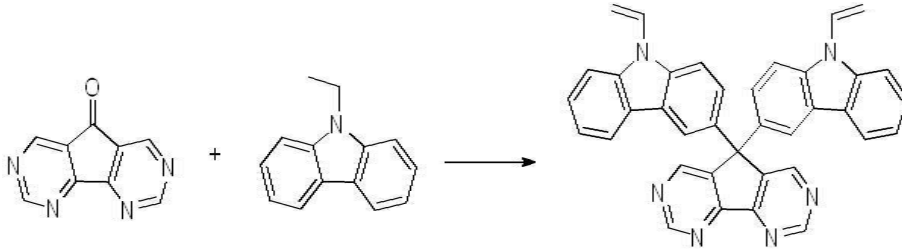
[0183]

[0185] 5H-시클로펜타[1,2-d:5,4-d']디피리미딘-5-온 1.8g(10mmol)과 9-에틸-9H-카바졸 4.2g(22mmol)을 디클로로에탄 100mL에 모두 가하고 질소 분위기 하에서 환류 교반하였다. 반응 용액에 포스포러스 펜톡사이드 7.1g(50mmol)을 메탄설포닉에시드 85g에 녹인 용액을 2시간에 걸쳐 서서히 가하고 30시간 반응시킨다. 반응 종결을 확인하고 상온으로 한 다음 메탄올 300mL를 가하여 1시간 동안 교반하여 생성된 결정을 여과하고 얻어진 고형물을 메틸렌클로라이드와 아세톤 2:1 혼합용액을 용리액으로 실리카겔 크로마토그래피하여 목적화합물 5,5-비스(9-에틸-9H-카바졸-3-일)-5H-시클로펜타[1,2-d:5,4-d']디피리미딘 3.7g(수율 65.8%)을 얻었다.

[0187] 한편, 위의 화합물에 대한 NMR 데이터는 다음과 같다.

[0188] <sup>1</sup>H NMR (CDCl<sub>3</sub>): δ=9.14(s, 1H), 8.8(s, 1H), 8.42(d, 2H), 7.94 (t, 2H), 7.76, 7.52 (m, 4H), 7.38 (t, 2H), 7.34 (m, 4H) 4.53(q, 4H), 1.29(t, 6H)

[0190] 합성예 21: 5,5-비스(9-비닐-9H-카바졸-3-일)-5H-시클로펜타[1,2-d:5,4-d']디피리미딘의 합성(화합물 2)



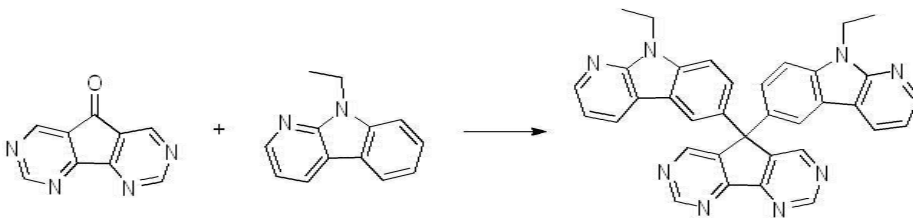
[0192]

[0194] 5H-시클로펜타[1,2-d:5,4-d']디피리미딘-5-온 1.8g(10mmol)과 9-비닐-9H-카바졸 4.2g(22mmol)을 디클로로에탄 100mL에 모두 가하고 질소 분위기 하에서 환류 교반하였다. 반응 용액에 포스포러스 펜톡사이드 7.1g(50mmol)을 메탄설포닉에스드 85g에 녹인 용액을 2시간에 걸쳐 서서히 가하고 30시간 반응시킨다. 반응 종결을 확인하고 상온으로 한 다음 메탄올 300mL를 가하여 1시간 동안 교반하여 생성된 결정을 여과하고 얻어진 고형물을 메틸렌클로라이드와 아세톤 1:1 혼합용액을 용리액으로 실리카겔 크로마토그래피하여 목적화합물 5,5-비스(9-비닐-9H-카바졸-3-일)-5H-시클로펜타[1,2-d:5,4-d']디피리미딘 3g(수율54.3%)을 얻었다.

[0196] 한편, 위의 화합물에 대한 NMR 데이터는 다음과 같다.

[0197] <sup>1</sup>H NMR (DMSO-d<sub>6</sub>): δ=9.14(s, 1H), 8.82(s, 1H). 8.42(d, 2H), 7.96(t, 2H), 7.76. 7.53 (m, 4H), 7.41 (t, 2H), 7.36 (m, 4H) 4.54(q, 4H), 1.29(t, 6H), 5.41, 5.22(dd, 4H), 5.18(s, 2H)

[0199] 합성예 22: 5,5-비스(9-에틸-9H-피리도[2,3-b]인돌-6-일)-5H-시클로펜타[1,2-d:5,4-d']디피리미딘의 합성(화합물 3)



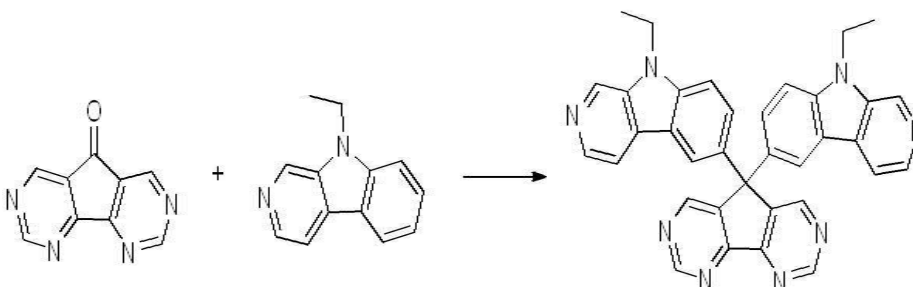
[0201]

[0203] 5H-시클로펜타[1,2-d:5,4-d']디피리미딘-5-온 1.8g(10mmol)과 9-에틸-9H-피리도[2,3-b]인돌 4.2g(22mmol)을 디클로로에탄 100mL에 모두 가하고 질소 분위기 하에서 환류 교반하였다. 반응 용액에 포스포러스 펜톡사이드 7.1g(150mmol)을 메탄설포닉에스드 85g에 녹인 용액을 2시간에 걸쳐 서서히 가하고 36시간 반응시킨다. 반응 종결을 확인하고 상온으로 한 다음 메탄올 300mL를 가하여 1시간 동안 교반하여 생성된 결정을 여과하고, 얻어진 고형물을 메틸렌클로라이드와 n-헥산 1:1 혼합용액을 용리액으로 실리카겔 크로마토그래피하여 목적화합물 5,5-비스(9-에틸-9H-피리도[2,3-b]인돌-6-yl)-5H-시클로펜타[1,2-d:5,4-d']디피리미딘 2.5g(수율 44.8%)을 얻었다.

[0205] 한편, 위의 화합물에 대한 NMR 데이터는 다음과 같다.

[0206] <sup>1</sup>H NMR (CDCl<sub>3</sub>): δ=9.15(s, 1H), 8.84(s, 1H). 8.60(dd, 2H), 8.42(d, 2H), 8.31(d, 2H), 7.76. 7.64 (m, 4H), 7.12 (t, 2H), 4.55(q, 4H), 1.30(t, 6H)

[0208] 합성예 23: 5,5-비스(9-에틸-9H-피리도[3,4-b]인돌-6-일)-5H-시클로펜타[1,2-d:5,4-d']디피리미딘의 합성(화합물 4)



[0210]

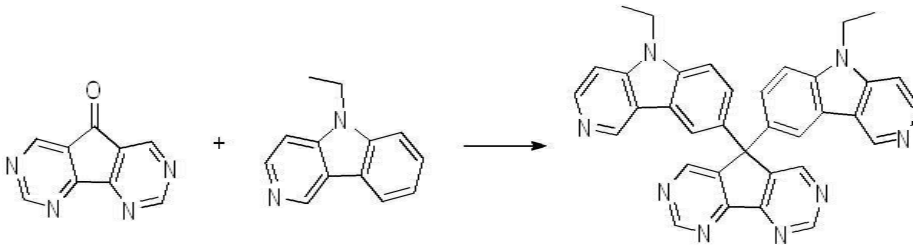
[0212] 5H-시클로펜타[1,2-d:5,4-d']디피리미딘-5-온 1.8g(10mmol)과 9-에틸-9H-피리도[3,4-b]인돌 4.2g(22mmol)을 디클로로에탄 100mL에 모두 가하고 합성에 22와 동일한 방법으로 처리하여 목적화합물 5,5-비스(9-에틸-9H-피리도[3,4-b]인돌-6-일)-5H-시클로펜타[1,2-d:5,4-d']디피리미딘 2.7g(수율 50%)을 얻었다.

[0214] 한편, 위의 화합물에 대한 NMR 데이터는 다음과 같다.

[0215]  $^1\text{H NMR}$  ( $\text{CDCl}_3$ ):  $\delta=9.14(\text{s}, 1\text{H}), 8.82(\text{s}, 1\text{H}), 8.67(\text{s}, 2\text{H}), 8.42(\text{d}, 2\text{H}), 8.34(\text{d}, 2\text{H}), 7.76, 7.62(\text{m}, 4\text{H}), 7.10(\text{t}, 2\text{H}), 4.54(\text{q}, 4\text{H}), 1.30(\text{t}, 6\text{H})$

[0216]

[0217] 합성예 24: 5,5-비스(5-에틸-5H-피리도[4,3-b]인돌-8-일)-5H-시클로펜타[1,2-d:5,4-d']디피리미딘의 합성(화합물 5)



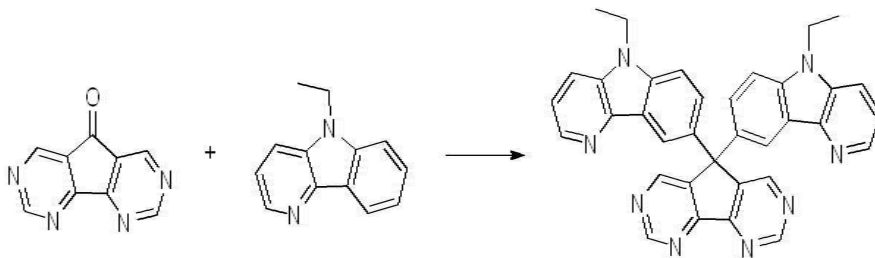
[0219]

[0221] 5H-시클로펜타[1,2-d:5,4-d']디피리미딘-5-온 1.8g(10mmol)과 5-에틸-5H-피리도[4,3-b]인돌 4.2g(66mmol)을 디클로로에탄 100mL에 모두 가하고 합성에 22와 동일한 방법으로 처리하여 목적화합물 5,5-비스(5-에틸-5H-피리도[4,3-b]인돌-8-일)-5H-시클로펜타[1,2-d:5,4-d']디피리미딘 2.7g(수율 47.8%)을 얻었다.

[0223] 한편, 위의 화합물에 대한 NMR 데이터는 다음과 같다.

[0224]  $^1\text{H NMR}$  ( $\text{CDCl}_3$ ):  $\delta=9.14(\text{s}, 1\text{H}), 8.83(\text{s}, 1\text{H}), 8.68(\text{s}, 2\text{H}), 8.48(\text{d}, 2\text{H}), 8.32(\text{d}, 2\text{H}), 7.74, 7.48(\text{m}, 4\text{H}), 7.10(\text{t}, 2\text{H}), 4.55(\text{q}, 4\text{H}), 1.30(\text{t}, 6\text{H})$

[0226] 합성예 25: 5,5-비스(5-에틸-5H-피리도[3,2-b]인돌-8-일)-5H-시클로펜타[1,2-d:5,4-d']디피리미딘의 합성(화합물 6)



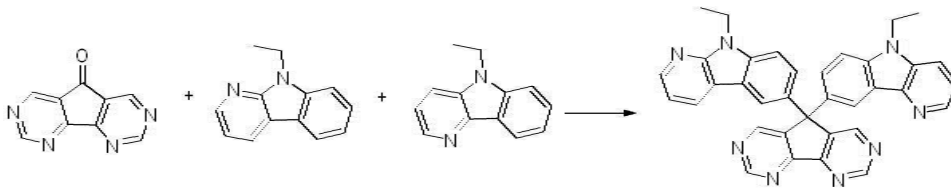
[0228]

[0230] 5H-시클로펜타[1,2-d:5,4-d']디피리미딘-5-온 1.8g(10mmol)과 5-에틸-5H-피리도[3,2-b]인돌 4.2g(22mmol)을 디클로로에탄 300mL에 모두 가하고 합성에 22와 동일한 방법으로 처리하여 목적화합물 5,5-비스(5-에틸-5H-피리도[3,2-b]인돌-8-일)-5H-시클로펜타[1,2-d:5,4-d']디피리미딘 2.4g(수율 42.6%)을 얻었다.

[0232] 한편, 위의 화합물에 대한 NMR 데이터는 다음과 같다.

[0233]  $^1\text{H NMR}$  ( $\text{CDCl}_3$ ):  $\delta=9.15(\text{s}, 1\text{H}), 8.82(\text{s}, 1\text{H}), 8.72(\text{dd}, 2\text{H}), 8.46(\text{d}, 2\text{H}), 8.33(\text{d}, 2\text{H}), 7.74, 7.64(\text{m}, 4\text{H}), 7.12(\text{t}, 2\text{H}), 4.54(\text{q}, 4\text{H}), 1.30(\text{t}, 6\text{H})$

[0235] 합성예 26: 5-(5-에틸-5H-피리도[3,2-b]인돌-8-일)-5-(9-에틸-9H-피리도[2,3-b]인돌-6-일)-5H-시클로펜타[1,2-d:5,4-d']디피리미딘의 합성(화합물 7)



[0237]

[0238]

5H-시클로펜타[1,2-d:5,4-d']디피리미딘-5-온 1.8g(10mmol), 9-에틸-9H-피리도[2,3-b]인돌 2.4g(12mmol), 5-에틸-5H-피리도[3,2-b]인돌 2.4g(12mmol)을 디클로로에탄 400mL에 모두 가하고 합성에 22와 동일한 방법으로 처리하여 목적화합물 5-(5-에틸-5H-피리도[3,2-b]인돌-8-일)-5-(9-에틸-9H-피리도[2,3-b]인돌-6-일)-5H-시클로펜타[1,2-d:5,4-d']디피리미딘 2.2g(수율 38.6%)을 얻었다.

[0240]

한편, 위의 화합물에 대한 NMR 데이터는 다음과 같다.

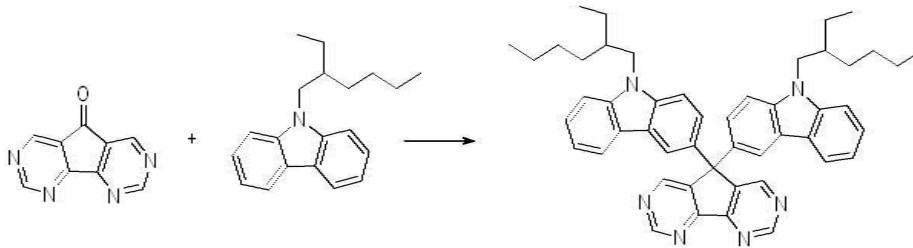
[0241]

<sup>1</sup>H NMR (CDCl<sub>3</sub>): δ=9.15(s, 1H), 8.92(s, 1H), 8.72(m, 2H), 8.46(d, 2H), 8.33(d, 2H), 7.59, 7.97 (m, 4H), 7.22 (t, 2H), 4.53(q, 4H), 1.30(t, 6H)

[0242]

[0243]

합성예 27: 5,5-비스(9-(2-에틸헥실)-9H-카바졸-3-일)-5H-시클로펜타[1,2-d:5,4-d']디피리미딘의 합성(화합물 8)



[0245]

[0247]

5H-시클로펜타[1,2-d:5,4-d']디피리미딘-5-온 1.8g(10mmol)과 9-(2-에틸헥실)-9H-카바졸 7g(25mmol)을 디클로로에탄 200mL에 모두 가하고 질소 분위기 하에서 환류 교반하였다. 반응 용액에 포스포러스 펜톡사이드 7.1g(50mmol)을 메탄설포닉에시드 85g에 녹인 용액을 2시간에 걸쳐 서서히 가하고 30시간 반응시킨다. 반응 종결을 확인하고 상온으로 한 다음 메탄올 300mL를 가하여 1시간 동안 교반하여 생성된 결정을 여과하고, 얻어진 고형물을 메틸렌클로라이드와 아세톤 2:1 혼합용액을 용리액으로 실리카겔 크로마토그래피하여 목적화합물 5,5-비스(9-에틸-9H-카바졸-3-일)-5H-시클로펜타[1,2-d:5,4-d']디피리미딘 3.7g(수율 51.1%)을 얻었다.

[0249]

한편, 위의 화합물에 대한 NMR 데이터는 다음과 같다.

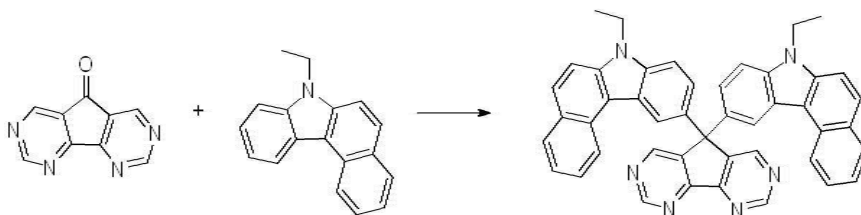
[0250]

<sup>1</sup>H NMR (CDCl<sub>3</sub>): δ=9.15(s, 1H), 8.84(s, 1H), 8.48(d, 2H), 7.92(t, 2H), 7.74, 7.53 (m, 4H), 7.41 (t, 2H), 7.36 (m, 4H), 5.41, 5.24(dd, 4H), 5.18(s, 2H), 3.91, 3.68(m, 4H), 1.5(m, 4H), 1.29(st, 4H), 1.24(m, 8H), 0.92(t, 6H)

[0251]

[0252]

합성예 28: 10,10'-(5H-시클로펜타[1,2-d:5,4-d']디피리미딘-5,5-디일)비스(7-에틸-7H-벤조[c]카바졸)의 합성(화합물 9)



[0254]

[0256]

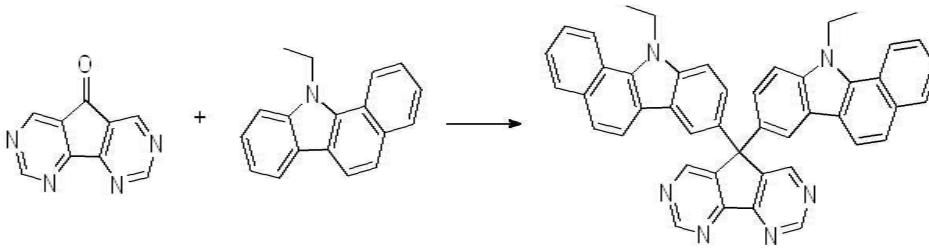
5H-시클로펜타[1,2-d:5,4-d']디피리미딘-5-온 3.7g(20mmol)과 7-에틸-7H-벤조[c]카바졸 14.7g(60mmol)을 디클로로에탄 300mL에 모두 가하고 질소 분위기 하에서 환류 교반하였다. 반응 용액에 포스포러스 펜톡사이드

14.2g(100mmol)을 메탄설포닉에스드 170g에 녹인 용액을 2시간에 걸쳐 서서히 가하고 48시간 반응시킨다. 반응 종결을 확인하고 상온으로 한 다음 메탄올 800mL를 가하여 1시간 동안 교반하여 생성된 결정을 여과하고, 얻어진 고형물을 메틸렌클로라이드와 에틸아세테이트 2:3 혼합용액을 용리액으로 실리카겔 크로마토그래피하여 목적 화합물 10, 10'-(5H-시클로펜타[1,2-d:5,4-d']디피리미딘-5,5-디일)비스(7-에틸-7H-벤조[c]카바졸 5.6g(수율 42.9%)을 얻었다.

[0258] 한편, 위의 화합물에 대한 NMR 데이터는 다음과 같다.

[0259]  $^1\text{H NMR (CDCl}_3\text{)}$ :  $\delta=9.15(\text{s, 1H})$ ,  $8.84(\text{s, 1H})$ .  $8.48(\text{d, 2H})$ ,  $8.54(\text{m, 2H})$ ,  $7.92(\text{t, 2H})$ ,  $7.74$ .  $7.53(\text{m, 4H})$ ,  $7.41(\text{t, 2H})$ ,  $7.36(\text{m, 4H})$ ,  $4.53(\text{q, 4H})$ ,  $1.29(\text{t, 6H})$

[0261] 합성예 29: 8,8'-(5H-시클로펜타[1,2-d:5,4-d']디피리미딘-5,5-일)비스(11-에틸-11H-벤조[a]카바졸의 합성(화합물 10)



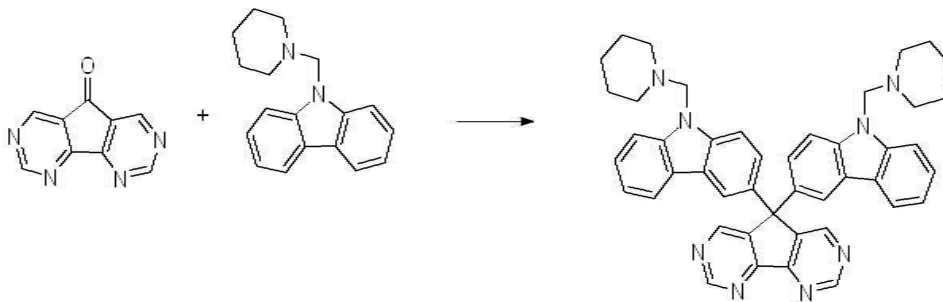
[0263]

[0265] 5H-시클로펜타[1,2-d:5,4-d']디피리미딘-5-온 3.7g(20mmol)과 11-에틸-11H-벤조[a]카바졸 14.7g(60mmol)을 디클로로에탄 300mL에 모두 가하고 합성예 28과 동일한 방법으로 처리하여 목적화합물 8,8'-(5H-시클로펜타[1,2-d:5,4-d']디피리미딘-5,5-일)비스(11-에틸-11H-벤조[a]카바졸) 5.1g(수율 38.8%)을 얻었다.

[0267] 한편, 위의 화합물에 대한 NMR 데이터는 다음과 같다.

[0268]  $^1\text{H NMR (CDCl}_3\text{)}$ :  $\delta=9.14(\text{s, 1H})$ ,  $8.82(\text{s, 1H})$ .  $8.45(\text{d, 2H})$ ,  $7.94(\text{t, J=8.6 Hz, 2H})$ ,  $7.76$ .  $7.52(\text{m, 4H})$ ,  $7.38(\text{t, J=3.6 Hz, 2H})$ ,  $7.34(\text{m, 2H})$   $4.53(\text{q, 4H})$ ,  $1.29(\text{t, 6H})$

[0270] 합성예 30: 5,5-비스(9-(피페리딘-1-일메틸)-9H-카바졸-3-일)-5H-시클로펜타[1,2-d:5,4-d']디피리미딘의 합성(화합물 11)



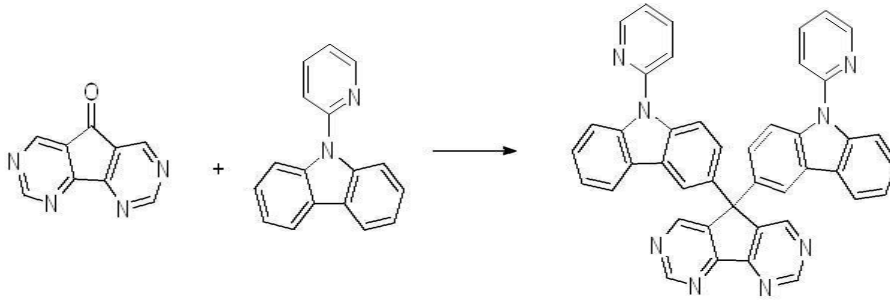
[0272]

[0274] 5H-시클로펜타[1,2-d:5,4-d']디피리미딘-5-온 3.7g(20mmol)과 7-에틸-7H-벤조[c]카바졸 14.7g(60mmol)을 디클로로에탄 300mL에 모두 가하고 질소 분위기 하에서 환류 교반하였다. 반응 용액에 포스포러스 펜톡사이드 14.2g(100mmol)을 메탄설포닉에스드 170g에 녹인 용액을 2시간에 걸쳐 서서히 가하고 30시간 반응시킨다. 반응 종결을 확인하고 상온으로 한 다음 메탄올 800mL를 가하여 1시간 동안 교반하여 생성된 결정을 여과하고, 얻어진 고형물을 클로르포름을 용리액으로 실리카겔 크로마토그래피하여 목적화합물 5,5-비스(9-(피페리딘-1-일메틸)-9H-카바졸-3-일)-5H-시클로펜타[1,2-d:5,4-d']디피리미딘 8.1g(수율 58.4%)을 얻었다.

[0276] 한편, 위의 화합물에 대한 NMR 데이터는 다음과 같다.

[0277]  $^1\text{H NMR (CDCl}_3\text{)}$ :  $\delta=9.14(\text{s, 1H})$ ,  $8.8(\text{s, 1H})$ .  $8.43(\text{d, 2H})$ ,  $7.94(\text{t, 2H})$ ,  $7.76$ .  $7.52(\text{m, 4H})$ ,  $7.39(\text{t, 2H})$ ,  $7.33(\text{m, 4H})$ ,  $4.88(\text{s, 4H})$ .  $2.45(\text{t, 8H})$ ,  $1.44(\text{m, 12H})$

[0279] 합성예 31: 5,5-비스(9-(피리딘-2-일)-9H-카바졸-3-일)-5H-시클로펜타[1,2-d:5,4-d']디피리미딘의 합성(화합물 12)



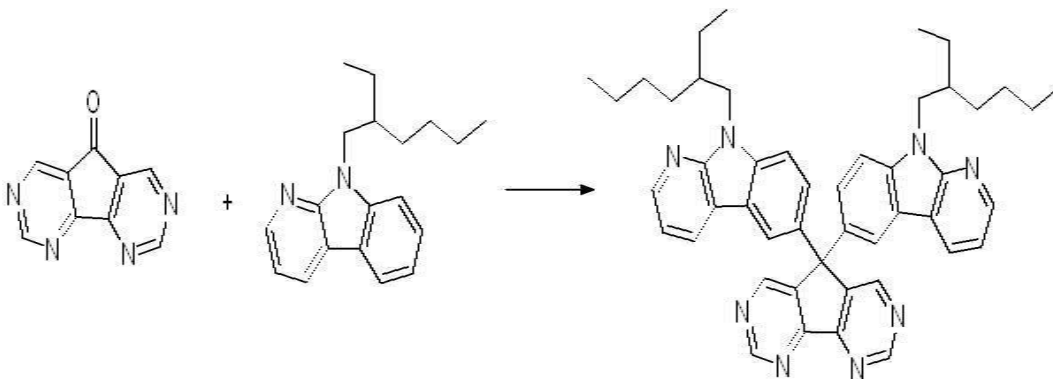
[0281]

[0283] 5H-시클로펜타[1,2-d:5,4-d']디피리미딘-5-온 1.8g(10mmol)과 9-(피리딘-2-일)-9H-카바졸 6.1g(25mmol)을 디클로로에탄 200mL에 모두 가하고 실시예 30과 동일하게 처리하여 목적화합물 5,5-비스(9-(피리딘-2-일)-9H-카바졸-3-일)-5H-시클로펜타[1,2-d:5,4-d']디피리미딘 2.9g(수율 43.7%)을 얻었다.

[0285] 한편, 위의 화합물에 대한 NMR 데이터는 다음과 같다.

[0286]  $^1\text{H}$  NMR ( $\text{DMSO-d}_6$ ):  $\delta=9.15(\text{s}, 1\text{H}), 8.7(\text{s}, 1\text{H}), 8.41(\text{d}, 2\text{H}), 8.80, 7.94 (\text{m}, 6\text{H}), 7.90(\text{m}, 2\text{H}), 7.76, 7.44 (\text{m}, 6\text{H}), 7.39 (\text{t}, 2\text{H}), 7.34 (\text{m}, 4\text{H})$

[0288] 합성예 32: 5,5-비스(9-(2-에틸헥실)-9H-피리도[2,3-b]인돌-6-일)-5H-시클로펜타[1,2-d:5,4-d']디피리미딘의 합성(화합물 13)



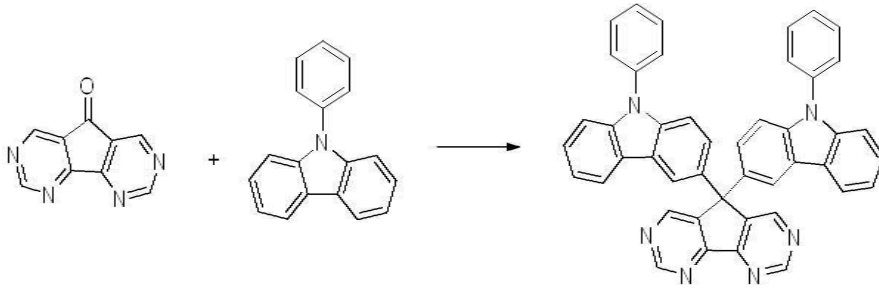
[0290]

[0292] 5H-시클로펜타[1,2-d:5,4-d']디피리미딘-5-온 1.8g(10mmol)과 9-(2-에틸헥실)-9H-피리도[2,3-b]인돌 6.2g(22mmol)을 디클로로메탄 120mL에 모두 가하고 합성예 22와 동일한 방법으로 처리하여 목적화합물 5,5-비스(9-(2-에틸헥실)-9H-피리도[2,3-b]인돌-6-일)-5H-시클로펜타[1,2-d:5,4-d']디피리미딘 4.2g(수율 58.1%)을 얻었다.

[0294] 한편, 위의 화합물에 대한 NMR 데이터는 다음과 같다.

[0295]  $^1\text{H}$  NMR ( $\text{CDCl}_3$ ):  $\delta=9.14(\text{s}, 1\text{H}), 8.8(\text{s}, 1\text{H}), 8.62(\text{d}, 2\text{H}), 8.02 (\text{t}, 2\text{H}), 7.82, 7.62 (\text{m}, 4\text{H}), 7.42 (\text{t}, 2\text{H}), 7.34 (\text{m}, 2\text{H}), 4.92(\text{s}, 4\text{H}), 2.46(\text{t}, 8\text{H}), 1.42(\text{m}, 12\text{H})$

[0297] 합성예 33: 5,5-비스(9-페닐-9H-카바졸-3-일)-5H-시클로펜타[1,2-d:5,4-d']디피리미딘의 합성(화합물 14)



[0299]

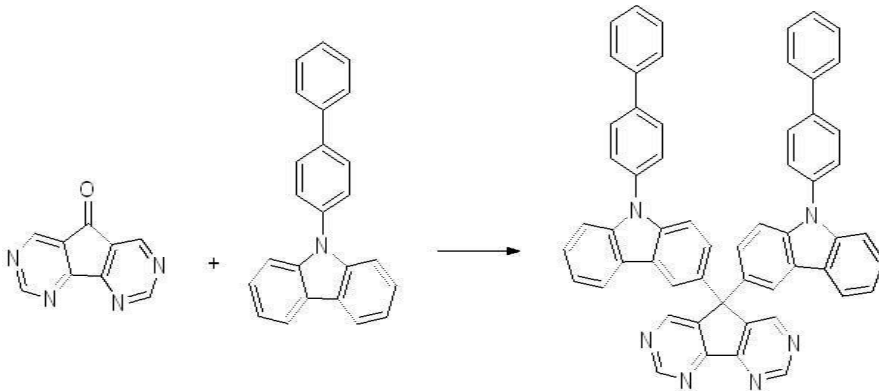
[0301] 5H-시클로펜타[1,2-d:5,4-d']디피리미딘-5-온 1.8g(10mmol)과 9-페닐-9H-카바졸 5.4g(22mmol)을 디클로로메탄 120mL에 모두 가하고 질소 분위기 하에서 환류 교반하였다. 포스포러스 펜톡사이드 7.1g(50mmol)을 메탄설포닉 에시드 85g에 녹인 후 상기 반응 용액에 1시간에 걸쳐 서서히 가하고 30시간 반응시킨다. 반응 종결을 확인하고 상온으로 한 다음 메탄올 300mL를 가하여 1시간 동안 교반하여 생성된 결정을 여과하고 얻어진 고형물을 메틸렌 클로라이드와 에틸아세테이트 5:1 혼합용액을 용리액으로 실리카겔 크로마토그래피하여 목적화합물 5,5-비스(9-페닐-9H-카바졸-3-일)-5H-시클로펜타[1,2-d:5,4-d']디피리미딘 3.1g(수율 48.3%)을 얻었다.

[0303] 한편, 위의 화합물에 대한 NMR 데이터는 다음과 같다.

[0304]  $^1\text{H NMR}$  ( $\text{CDCl}_3$ ):  $\delta$ =9.17(s, 1H), 8.83(s, 1H), 8.42(d, 2H), 7.94 (t, 2H), 7.76. 7.52 (m, 4H), 7.50, 7.48(m, 8H), 7.45(m,2H), 7.38 (t, 2H), 7.34 (m, 4H)

[0305]

[0306] 합성예 34: 5,5-비스(9-([1,1'-바이페닐]-4-일)-9H-카바졸-3-일)-5H-시클로펜타[1,2-d:5,4-d']디피리미딘의 합성(화합물 15)



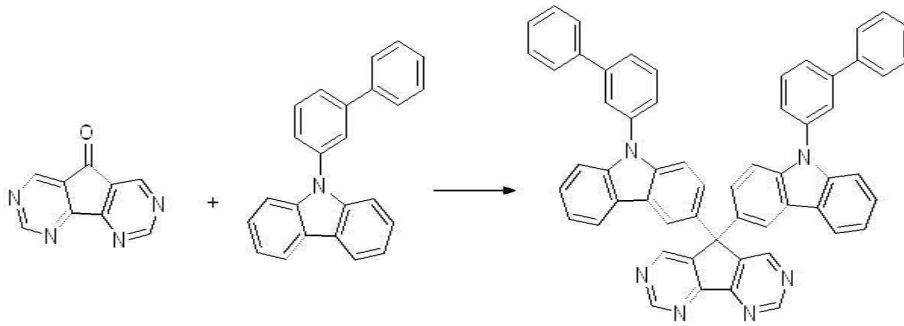
[0308]

[0310] 5H-시클로펜타[1,2-d:5,4-d']디피리미딘-5-온 1.8g(10mmol)과 9-([1,1'-바이페닐카바졸]-4-일)-9H-카바졸 8g(25mmol)을 디클로로에탄 300mL에 모두 가하고 합성예 33과 동일한 방법으로 처리하여 목적화합물 5,5-비스(9-([1,1'-바이페닐]-4-일)-9H-카바졸-3-일)-5H-시클로펜타[1,2-d:5,4-d']디피리미딘 3.4g(수율 42.3%)을 얻었다.

[0312] 한편, 위의 화합물에 대한 NMR 데이터는 다음과 같다.

[0313]  $^1\text{H NMR}$  ( $\text{CDCl}_3$ ):  $\delta$ =9.18(s, 1H), 8.88(s, 1H), 8.44(d, 2H), 7.94 (t, 2H), 7.77. 7.54 (m, 10H), 7.55, 7.46(m, 10H), 7.45(m,2H), 7.36 (t, 2H), 7.37 (m, 4H)

[0315] 합성예 35: 5,5-비스(9-([1,1'-바이페닐]-3-일)-9H-카바졸-3-일)-5H-시클로펜타[1,2-d:5,4-d']디피리미딘의 합성(화합물 16)



[0317]

[0318] 5H-시클로펜타[1,2-d:5,4-d']디피리미딘-5-온 1.8g(10mmol)과 9-([1,1'-비페닐]-3-일)-9H-카바졸 8g(25mmol)을 디클로로에탄 300mL에 모두 가하고 합성예 33과 동일한 방법으로 처리하여 목적화합물 5,5-비스(9-([1,1'-비페닐]-3-일)-9H-카바졸-3-일)-5H-시클로펜타[1,2-d:5,4-d']디피리미딘 3g(수율 38.3%)을 얻었다.

[0320] 한편, 위의 화합물에 대한 NMR 데이터는 다음과 같다.

[0321] <sup>1</sup>H NMR (CDCl<sub>3</sub>): δ=9.18(s, 1H), 8.88(s, 1H), 8.45(d, 2H), 7.92 (t, 2H), 7.82, 7.52 (m, 8H), 7.65, 7.48(m, 10H), 7.52(m,4H), 7.38 (t, 2H), 7.42 (m, 4H)

[0323] 본 발명의 화합물들은 상기 합성예 1 내지 35를 참고하는 경우 공지의 기술에 의해 합성될 수 있다.

[0325] **시험예 1**

[0326] 상기 합성예에서 제조된 화합물 1 내지 16에 대한 대표적 물성을 평가하여 그 결과를 하기 표 1에 나타내었다.

**표 1**

[0327]

물성	UV max (nm)	PL max (nm)	HOMO (eV)	LUMO (eV)	밴드갭 (eV)	T <sub>1</sub> (eV)	Tg (° C)
화합물1(합성예 20)	279,310,335	343	6.01	2.40	3.61	3.01	210
화합물2(합성예 21)	280,305,329	345	5.99	2.40	3.59	2.98	205
화합물3(합성예 22)	281,306,332	349	5.95	2.39	3.56	2.97	208
화합물4(합성예 23)	277,311,336	343	6.02	2.41	3.61	2.97	210
화합물5(합성예 24)	276,310,334	343	5.90	2.30	3.60	2.87	204
화합물6(합성예 25)	275,308,335	345	5.98	2.42	3.56	3.02	199
화합물7(합성예 26)	265,300,320	340	5.90	2.25	3.65	3.05	207
화합물8(합성예 27)	264,301,323	336	5.91	2.24	3.67	3.03	183
화합물9(합성예 28)	263,302,320	334	5.92	2.22	3.70	3.02	186
화합물10(합성예 29)	276,313,334	358	5.97	2.51	3.46	2.91	210
화합물11(합성예 30)	268,307,329	360	6.01	2.61	3.40	2.93	205
화합물12(합성예 31)	260,310,323	374	5.98	2.65	3.33	2.90	207
화합물13(합성예 32)	261,315,330	365	5.97	2.60	3.37	2.92	201
화합물14(합성예 33)	264,302,325	350	5.92	2.41	3.51	3.04	203
화합물15(합성예 34)	250,305,323	340	6.00	2.39	3.61	3.02	195
화합물16(합성예 35)	253,301,320	335	5.99	2.37	3.62	3.09	197

[0329] UV<sub>max</sub>: 스펙트로미터 및 사이클릭 볼타메트리로부터 측정된 물질의 흡수파장

[0330] PL<sub>max</sub>: 스펙트로미터 및 사이클릭 볼타메트리로부터 측정된 물질의 발광파장

[0331] HOMO, LUMO, 밴드갭: 스펙트로미터 및 사이클릭 볼타메트리로부터 측정

[0332] T<sub>1</sub>: 필름형태로 삼중항 에너지(Triplet energy)(77K에서 인광측정을 하여 확인)

[0333] Tg: 유리전이온도

[0335] 본 발명에 따라 합성된 호스트 물질의 삼중항 에너지(T<sub>1</sub>)는 대표적인 도펀트 물질(예를 들면, Firpic)의 삼중항 에너지(2.7 eV)보다 높은 값을 가지고 있어 효율적인 에너지 전이가 일어날 수 있으며, 또한 170°C 이상의 Tg로

열적 안정성을 가지고 있다.

[0337] **실시예 1: 유기발광소자의 제조**

[0338] ITO 기판은 발광 면적이 3mm x 3mm 크기가 되도록 패터닝한 후 세정하였다. 기판을 진공 챔버에 장착한 후 베이스 압력이  $1 \times 10^{-6}$  torr가 되도록 한 후 애노드 ITO 위에 정공수송층으로 NPB를 40nm의 두께로 성막하고, 그 위에 발광층으로 상기 합성에 20에서 제조된 화합물 1, 5,5-비스(9-에틸-9H-카바졸-3-일)-5H-시클로펜타[1,2-d:5,4-d']디피리미딘과 도펀트인 [FCNIr]를 도펀트의 도핑 농도 11%로 20nm의 두께로 성막하였다. 그 후 상기 발광층 상부에 TPBI를 진공 증착하여 50nm 두께의 전자 수송층을 형성하고, 전자주입층인 LiF를 1.0nm의 두께로 성막하고, 캐소드인 Al을 500nm 의 두께로 성막하여 유기발광소자를 제조하였다. 이어서 이들에 대한 발광 특성을 평가하여 그 결과를 하기 표 2에 나타내었다.

[0340] **실시예 2~16: 유기발광소자의 제조**

[0341] 실시예 1에서 발광층 호스트로 사용된 합성에 20의 화합물 1 대신 각각 합성에 21 내지 35에서 제조된 화합물 2 내지 16를 사용한 것을 제외하고는 실시예 1과 동일하게 하여 유기발광소자를 제조하였으며, 그 결과를 하기 표 2에 나타내었다.

[0343] **비교예 1: 유기발광소자의 제조**

[0344] 실시예 1에서 발광층 호스트로 사용된 합성에 20의 화합물 1 대신 mCP(1,3-비스(N-카바졸릴)벤젠 물질을 사용한 것을 제외하고는 실시예 1과 동일하게 하여 유기발광소자를 제조하였으며, 그 결과를 하기 표 2에 나타내었다.

**표 2**

[0345]

항목	전압 [V]	전류밀도 [mA/cm <sup>2</sup> ]	전류효율 [Cd/A]	전력효율 [lm/W]	양자효율 [%]
실시예1(화합물1)	3.60	4.10	24.42	21.31	10.53
실시예2(화합물2)	3.83	4.46	22.45	18.44	10.55
실시예3(화합물3)	3.78	4.64	21.57	17.93	11.41
실시예4(화합물4)	3.87	4.64	21.57	17.51	12.06
실시예5(화합물5)	3.74	4.28	23.39	19.68	11.70
실시예6(화합물6)	4.10	4.05	24.69	18.94	11.89
실시예7(화합물7)	4.14	4.55	22.00	16.70	11.52
실시예8(화합물8)	4.19	4.32	23.15	17.38	12.10
실시예9(화합물9)	4.28	4.64	21.57	15.85	12.30
실시예10(화합물10)	3.42	4.10	24.42	22.43	11.97
실시예11(화합물11)	3.33	4.32	23.15	21.84	11.20
실시예12(화합물12)	3.24	4.10	24.42	23.68	11.50
실시예13(화합물13)	3.29	4.73	21.16	20.24	11.30
실시예14(화합물14)	3.51	4.64	21.57	19.31	10.88
실시예15(화합물15)	3.47	4.10	24.42	22.14	10.89
실시예16(화합물16)	3.51	4.41	22.68	20.30	10.23
비교예1	6.71	14.1	6.80	3.21	3.86

[0347] 이상에서와 같이 도면과 명세서에서 최적의 실시예가 개시되었다. 본 발명은 상기한 실시 예에 한정되지 아니하며 본 발명의 정신을 벗어나지 않는 범위 내에서 당해 발명이 속하는 기술 분야에서 통상의 지식을 가진 자에 의해 다양한 변경과 수정이 가능할 것이며, 본 발명의 진정한 기술적 보호범위는 첨부된 청구범위의 기술적 사상에 의해 정해져야 할 것이다.

**부호의 설명**

[0349]

- 10: 기판
- 20: 애노드 전극
- 30: 정공 주입층

- 40: 정공 수송층
- 50: 발광층
- 60: 전자 수송층
- 70: 전자 주입층
- 80: 캐소드 전극

**도면**

**도면1**

캐소드 전극	80
전자 주입층 (EIL)	70
전자 수송층 (ETL)	60
발광층 (EML)	50
정공 수송층 (HTL)	40
정공 주입층 (HIL)	30
애노드 전극	20
기판	10

专利名称(译)	用于磷光主体的化合物和含有该化合物的有机发光器件		
公开(公告)号	<a href="#">KR101793124B1</a>	公开(公告)日	2018-01-02
申请号	KR1020160052215	申请日	2016-04-28
申请(专利权)人(译)	Byeoksan涂料有限公司		
当前申请(专利权)人(译)	Byeoksan涂料有限公司		
[标]发明人	JOUNG KUK SOUNG 정국성 KIM KYU SOUNG 김규성 JO NAM CHOL 조남철 KIM MI HYUN 김미현		
发明人	정국성 김규성 조남철 김미현		
IPC分类号	C09K11/06 C07D209/56 C07D209/82 C07D471/04 C07D487/04 H01L51/00 H01L51/50		
CPC分类号	C09K11/06 C07D487/04 C07D471/04 C07D209/56 C07D209/82 H01L51/5012 H01L51/0072 C09K2211/1044 C09K2211/1029 C09K2211/1011		
代理人(译)	Songduhyeon		
其他公开文献	KR1020170123053A		
外部链接	<a href="#">Espacenet</a>		

摘要(译)

本发明涉及由化学式1表示的磷光主体化合物，以及包含该化合物的有机发光装置。包含用于磷光主体的化合物的有机发光装置确保了长寿命，电动性和热稳定性。

