



(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 공개특허공보(A)

(11) 공개번호 10-2013-0014476
 (43) 공개일자 2013년02월07일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)
C09K 11/06 (2006.01) *H01L 51/50* (2006.01)
 (21) 출원번호 10-2012-0152374(분할)
 (22) 출원일자 2012년12월24일
 심사청구일자 없음
 (62) 원출원 특허 10-2011-0016181
 원출원일자 2011년02월23일
 심사청구일자 2011년02월23일
 (30) 우선권주장
 1020110005580 2011년01월19일 대한민국(KR)

(71) 출원인
(주)씨에스엘솔라
 경기도 성남시 중원구 갈마치로 176 (상대원동)
 (72) 발명자
김복영
 경기도 용인시 상현동 상현마을 831번지 쌍용2차
 218-601호
안중복
 서울특별시 도봉구 창2동 809 금융아파트
 101-1301
 (뒷면에 계속)
 (74) 대리인
정중원, 최지연, 이명택

전체 청구항 수 : 총 9 항

(54) 발명의 명칭 **유기발광화합물 및 이를 이용한 유기 광소자**

(57) 요약

본 발명은 유기 광소자 및 이에 사용되는 유기 광화합물에 관한 것으로서, 보다 상세하게는 우수한 발광효율, 발광 휘도, 색순도 및 발광 수명을 구현할 수 있는 유기 발광 소자와 이에 사용되는 유기 발광 화합물 또는 태양광 발전용 광소자 및 이에 사용되는 광화합물에 관한 것으로, 특히 인데노아크리딘(indenoacridine)계 유도체 및 이를 이용한 유기 광소자를 개발하여 전자수송층(ETM), 발광층(EML), 정공수송층(HTM) 등, 제1전극과 상기 제2전극 사이의 각종 유기막과 같이 다각적으로 쓰일 수 있는 물질을 개발하고, 효율 증가와 구동 전압의 감소와 같은 성능의 개선 및 OLED 재료로서의 능력을 극대화시킬 수 있다.

(72) 발명자

이재성

경기도 수원시 장안구 조원동 한일아파트 126동
303호

안도환

서울시 종로구 창신2동 639-20 창림아파트 501호

강지승

서울시 강서구 화곡1동 352-20

박노길

경기도 용인시 기흥구 동백동 575 호수마을 휴먼시
아아파트 1506-1102

한근희

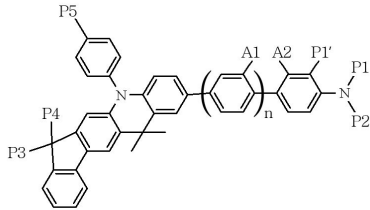
경기도 광명시 광명4동 한진아파트 109-1305

특허청구의 범위

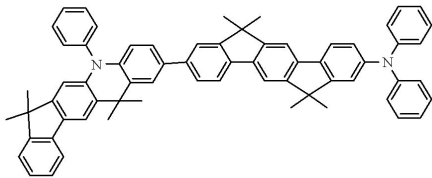
청구항 1

제1전극; 제2전극; 및 상기 제1전극과 상기 제2전극 사이에 적어도 한 층의 유기막을 포함하는 유기 광소자로서, 상기 유기막이 하기 화학식 F1 또는 F2의 유기 광화합물을 포함하는 것을 특징으로 하는 유기 광소자:

<화학식 F1>



<화학식 F2>



상기 화학식 F1에서

P1 및 P2는 각각 독립적으로

C6-C40의 아릴기, C5-C40의 헤테로아릴기, C5-C40의 아릴옥시기, C5-C40의 아릴아미노기, C5-C40의 디아릴아미노기, C6-C40의 아릴알킬기로 이루어진 군에서 선택되거나; 또는 인접하는 기와 축합(fused) 지방족 고리, 축합 방향족 고리, 축합 헤테로지방족 고리 또는 축합 헤테로방향족 고리를 형성하는 기이거나

P1은 P2 또는 P1' 와 상호 축합 고리를 형성하고(그렇지 않은 경우 P1' 는 H 또는 D이다),

P3, P4 및 P5는 각각 독립적으로

H, D, C1-C40의 알킬기, C6-C40의 아릴기, C5-C40의 헤테로아릴기, C5-C40의 아릴옥시기, C5-C40의 아릴아미노기, C5-C40의 디아릴아미노기, C6-C40의 아릴알킬기로 이루어진 군에서 선택되거나; 또는 인접하는 기와 축합(fused) 지방족 고리, 축합 방향족 고리, 축합 헤테로지방족 고리 또는 축합 헤테로방향족 고리를 형성하는 기이거나

P3는 P4는 상호 축합 고리를 형성하고,

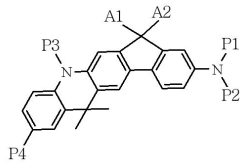
n은 0(zero), 1 또는 2이고,

A1은 H 또는 D이거나, n이 1인 경우 A1 및 A2는 상호 축합 고리를 형성한다.

청구항 2

제1전극; 제2전극; 및 상기 제1전극과 상기 제2전극 사이에 적어도 한 층의 유기막을 포함하는 유기 광소자로서, 상기 유기막이 하기 화학식 F3의 유기 광화합물을 포함하는 것을 특징으로 하는 유기 광소자:

<화학식 F3>



상기 화학식 F3에서

P1, P2 및 P3는 각각 독립적으로

C6~C40의 아릴기, C5~C40의 헤테로아릴기, C5~C40의 아릴옥시기, C5~C40의 아릴아미노기, C5~C40의 디아릴아미노기, C6~C40의 아릴알킬기로 이루어진 군에서 선택되거나; 또는 인접하는 기와 축합(fused) 지방족 고리, 축합 방향족 고리, 축합 헤테로지방족 고리 또는 축합 헤테로방향족 고리를 형성하는 기이고,

P4, A1 및 A2는 각각 독립적으로

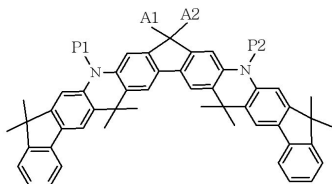
H, D, C1~C40의 알킬기, C6~C40의 아릴기, C5~C40의 헤테로아릴기, C5~C40의 아릴옥시기, C5~C40의 아릴아미노기, C5~C40의 디아릴아미노기, C6~C40의 아릴알킬기로 이루어진 군에서 선택되거나; 또는 인접하는 기와 축합(fused) 지방족 고리, 축합 방향족 고리, 축합 헤테로지방족 고리 또는 축합 헤테로방향족 고리를 형성하는 기이거나,

A1 및 A2는 상호 축합 고리를 형성한다.

청구항 3

제1전극; 제2전극; 및 상기 제1전극과 상기 제2전극 사이에 적어도 한 층의 유기막을 포함하는 유기 광소자로서, 상기 유기막이 하기 화학식 F4의 유기 광화합물을 포함하는 것을 특징으로 하는 유기 광소자:

<화학식 F4>



상기 화학식 F4에서

P1 및 P2는 각각 독립적으로

C6~C40의 아릴기, C5~C40의 헤테로아릴기, C5~C40의 아릴옥시기, C5~C40의 아릴아미노기, C5~C40의 디아릴아미노기, C6~C40의 아릴알킬기로 이루어진 군에서 선택되거나; 또는 인접하는 기와 축합(fused) 지방족 고리, 축합 방향족 고리, 축합 헤테로지방족 고리 또는 축합 헤테로방향족 고리를 형성하는 기이고,

A1 및 A2는 각각 독립적으로

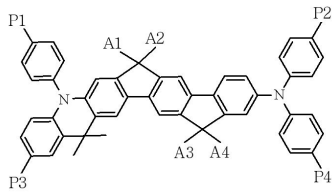
H, D, C1~C40의 알킬기, C6~C40의 아릴기, C5~C40의 헤테로아릴기, C5~C40의 아릴옥시기, C5~C40의 아릴아미노기, C5~C40의 디아릴아미노기, C6~C40의 아릴알킬기로 이루어진 군에서 선택되거나; 또는 인접하는 기와 축합(fused) 지방족 고리, 축합 방향족 고리, 축합 헤테로지방족 고리 또는 축합 헤테로방향족 고리를 형성하는 기이거나,

A1 및 A2는 상호 축합 고리를 형성한다.

청구항 4

제1전극; 제2전극; 및 상기 제1전극과 상기 제2전극 사이에 적어도 한 층의 유기막을 포함하는 유기 광소자로서, 상기 유기막이 하기 화학식 F5의 유기 광화합물을 포함하는 것을 특징으로 하는 유기 광소자:

<화학식 F5>



상기 화학식 F5에서

P1, P2, P3 및 P4는 각각 독립적으로

H, D, C6~C40의 아릴기, C5~C40의 헤테로아릴기, C5~C40의 아릴옥시기, C5~C40의 아릴아미노기, C5~C40의 디아릴아미노기, C6~C40의 아릴알킬기로 이루어진 군에서 선택되거나; 또는 인접하는 기와 축합(fused) 지방족 고리, 축합 방향족 고리, 축합 헤테로지방족 고리 또는 축합 헤테로방향족 고리를 형성하는 기이고,

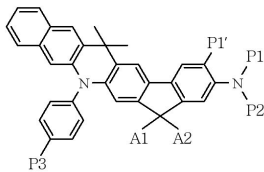
A1, A2, A3 및 A4는 각각 독립적으로

C1~C40의 알킬기, C6~C40의 아릴기, C5~C40의 헤테로아릴기, C5~C40의 아릴옥시기, C5~C40의 아릴아미노기, C5~C40의 디아릴아미노기, C6~C40의 아릴알킬기로 이루어진 군에서 선택되거나; 또는 인접하는 기와 축합(fused) 지방족 고리, 축합 방향족 고리, 축합 헤테로지방족 고리 또는 축합 헤테로방향족 고리를 형성하는 기이다.

청구항 5

제1전극; 제2전극; 및 상기 제1전극과 상기 제2전극 사이에 적어도 한 층의 유기막을 포함하는 유기 광소자로서, 상기 유기막이 하기 화학식 F6의 유기 광화합물을 포함하는 것을 특징으로 하는 유기 광소자:

<화학식 F6>



상기 화학식 F6에서

P1 및 P2는 각각 독립적으로

C6~C40의 아릴기, C5~C40의 헤테로아릴기, C5~C40의 아릴옥시기, C5~C40의 아릴아미노기, C5~C40의 디아릴아미노기, C6~C40의 아릴알킬기로 이루어진 군에서 선택되거나; 또는 인접하는 기와 축합(fused) 지방족 고리, 축합 방향족 고리, 축합 헤테로지방족 고리 또는 축합 헤테로방향족 고리를 형성하는 기이거나,

P1은 P1' 와 상호 축합 고리를 형성하고(그렇지 않은 경우 A1' 는 H 또는 D이다),

P3, A1 및 A2는 각각 독립적으로

H, D, C1~C40의 알킬기, C6~C40의 아릴기, C5~C40의 헤테로아릴기, C5~C40의 아릴옥시기, C5~C40의 아릴아미노기, C5~C40의 디아릴아미노기, C6~C40의 아릴알킬기로 이루어진 군에서 선택되거나; 또는 인접하는 기와 축합(fused) 지방족 고리, 축합 방향족 고리, 축합 헤테로지방족 고리 또는 축합 헤테로방향족 고리를 형성하는 기이거나,

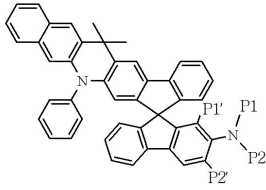
A1은 A2와 상호 축합 고리를 형성한다.

청구항 6

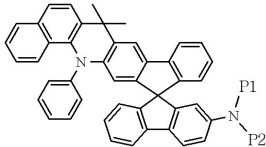
제1전극; 제2전극; 및 상기 제1전극과 상기 제2전극 사이에 적어도 한 층의 유기막을 포함하는 유기 광소자로서, 상기 유기막이 하기 화학식 F7, F10 또는 F11의 유기 광화합물을 포함하는 것을 특징으로 하는 유

기 광소자:

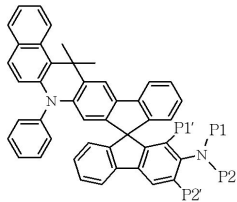
<화학식 F7>



<화학식 F10>



<화학식 F11>



상기 화학식 F7, F10 또는 F11에서

P1 및 P2는 각각 독립적으로

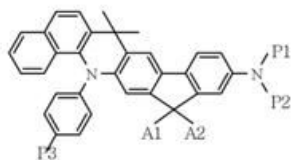
C6-C40의 아릴기, C5-C40의 헤테로아릴기, C5-C40의 아릴옥시기, C5-C40의 아릴아미노기, C5-C40의 디아릴아미노기, C6-C40의 아릴알킬기로 이루어진 군에서 선택되거나; 또는 인접하는 기와 축합(fused) 지방족 고리, 축합 방향족 고리, 축합 헤테로지방족 고리 또는 축합 헤테로방향족 고리를 형성하는 기이거나,

P1은 P1' 와, 그리고 P2는 P2' 와 상호 독립적으로 축합 고리를 형성한다(그렇지 않은 경우 P1' 및 P2' 는 상호 독립적으로 H 또는 D이다).

청구항 7

제1전극; 제2전극; 및 상기 제1전극과 상기 제2전극 사이에 적어도 한 층의 유기막을 포함하는 유기 광소자로서, 상기 유기막이 하기 화학식 F8, F9, F12 또는 F13의 유기 광화합물을 포함하는 것을 특징으로 하는 유기 광소자:

<화학식 F8>



상기 화학식 F14에서

n은 0(zero), 1 또는 2이고

A1 및 A2는 각각 독립적으로

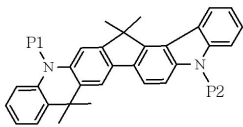
H, D, C1~C40의 알킬기, C6~C40의 아릴기, C5~C40의 헤테로아릴기, C5~C40의 아릴옥시기, C5~C40의 아릴아미노기, C5~C40의 디아릴아미노기, C6~C40의 아릴알킬기로 이루어진 군에서 선택되거나; 또는 인접하는 기와 축합(fused) 지방족 고리, 축합 방향족 고리, 축합 헤테로지방족 고리 또는 축합 헤테로방향족 고리를 형성하는 것이거나,

n이 1인 경우 A1은 A2와 상호 축합 고리를 형성한다.

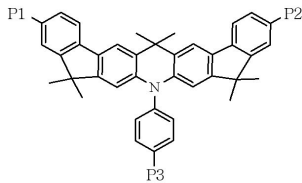
청구항 9

제1전극; 제2전극; 및 상기 제1전극과 상기 제2전극 사이에 적어도 한 층의 유기막을 포함하는 유기 광소자로서, 상기 유기막이 하기 화학식 F15 또는 F16의 유기 광화합물을 포함하는 것을 특징으로 하는 유기 광소자:

<화학식 F15>



<화학식 F16>



상기 화학식 F15에서

P1 및 P2는 각각 독립적으로

C6~C40의 아릴기, C5~C40의 헤테로아릴기, C5~C40의 아릴옥시기, C5~C40의 아릴아미노기, C5~C40의 디아릴아미노기, C6~C40의 아릴알킬기로 이루어진 군에서 선택되거나; 또는 인접하는 기와 축합(fused) 지방족 고리, 축합 방향족 고리, 축합 헤테로지방족 고리 또는 축합 헤테로방향족 고리를 형성하는 기이고,

상기 화학식 F16에서

P1, P2 및 P3는 각각 독립적으로

H, D, F, C1~C40의 알킬기, C6~C40의 아릴기, C5~C40의 헤테로아릴기, C5~C40의 아릴옥시기, C1~C40의 알킬옥시기, C3~C40의 시클로알킬기, C3~C40의 헤테로시클로알킬기, C5~C40의 아릴아미노기, C5~C40의 디아릴아미노기, C6~C40의 아릴알킬기로 이루어진 군에서 선택되거나; 또는 인접하는 기와 축합(fused) 지방족 고리, 축합 방향족 고리, 축합 헤테로지방족 고리 또는 축합 헤테로방향족 고리를 형성하는 기이다.

명세서

기술분야

[0001] 본 발명은 유기발광화합물, 특히 인데노아크리딘(indenoacridine)계 유도체 및 이를 이용한 유기 광소자에 관한 것으로서, 보다 상세하게는 우수한 발광효율, 발광 휘도, 색순도 및 발광 수명을 구현할 수 있는 유기 발광 소자와 이에 사용되는 유기 발광 화합물 또는 태양광 발전용 광소자 및 이에 사용되는 광화합물에 관한 것이다.

배경기술

[0002] 정보화시대로 급속히 진입하면서 전자 정보 기기와 인간의 인터페이스 역할을 하는 디스플레이(Display)의 중요성이 더욱 커지고 있다. 특히 언제 어디서나 편리하게 사용할 수 있고, 현장감 있게 생생한 화면을 보여 줄 수 있는 디스플레이를 개발하기 위한 노력이 절실히 필요하게 되었다. 더 나아가서 디스플레이를 유리 기판 대신에 플라스틱과 같은 유연한 기판 위에 제작하여 더 얇고, 더 가볍고, 깨지지 않는 플렉서블 디스플레이(flexible display)를 개발하는 연구가 활발하게 진행되고 있다. 유기발광다이오드(OLED) 디스플레이는 이와 같은 응용에 가장 적합한 차세대 평판디스플레이 기술로 큰 주목을 받고 있다.

[0003] 유기반도체에서의 전기발광 현상은 1963년 Pope, Kallmann, Magnate에 의해 안트라센 결정에서 처음으로 발견되었고[M. Pope, H. P. Kallmann and P. Magnae, J. Chem. Phys. **38**, 2042 (1963)], 이어서 1965년에 W. Helfrich [W. Helfrich and W. G. Schneider, Phys. Rev. Lett. **14**, 229(1965)] 등의 연구가 이어졌다. 그런데 고순도의 안트라센 결정은 전기전도도가 10^{-20} s/cm 이하의 절연체이므로 수백볼트 이상의 높은 전압을 가해야 전자와 정공이 주입되고 발광효율이 아주 낮았다. 그리고 반응성이 높은 알칼리 금속을 전극으로 사용한 실용적인 측면에서는 큰 문제가 있었다. 이후 1982년에 Vincett 등은 진공 증착 방법으로 비결정질의 안트라센 박막을 형성하고 유기 발광다이오드를 제작하는데 성공하였다. 이 소자의 발광효율은 약 0.05% 수준으로 아주 낮았으나, 이 방법은 현재까지 대표적인 OLED 제작 방법으로 사용되고 있다.

[0004] 1987년 Kodak사의 Tang등이 발광층과 전자 수송층으로 각각 Alq₃ 와 TPD라는 이중 층 저분자 유기물 박막을 형성하여 효율과 안정성이 개선된 녹색의 발광 현상을 발견한 이후로 저분자 OLED 디스플레이의 개발이 급속도로 빠르게 이루어졌다. 이러한 소자 구조에서는 정공 수송 물질과 전자 수송 물질의 전자 에너지 준위의 차이에 의해 전자와 정공이 diamine/Alq₃ 계면에 축적되어 전자-정공의 재결합 확률이 높아진다. 그 결과 이 소자는 10V 이하의 구동 전압에서 1000 cd/m² 이상의 휘도와 1.5 lm/W 수준의 높은 발광 효율을 나타냈다. 이 결과는 유기박막 발광다이오드를 이용하여 고회도, 고효율 디스플레이를 개발할 수 있는 가능성을 제시하기 때문에 큰 주목을 끌어서 전 세계적으로 OLED 연구를 활성화하는데 큰 역할을 했다.

[0005] 1980년대 후반 저분자 OLED 소자의 구조는 양극(ITO), 정공수송층 (Hole Transfer Layer, HTL) 발광층 (Emission Layer, EML), 음극(Mg:Ag)의 간단한 구조에서 출발하였다. 이후 형광소자의 경우는 CuPc같은 정공주입층(Hole Injection Layer, HIL)이 도입되었고, Cathode와 전자주입층 재료로 Al:Li이 개발되고 LiF 같은 재료가 개발되면서 구조가 복잡해지게 되었다. 이에 따라서 전기광학적인 특성도 효율과 구동전압이 혁신적으로 개선이 이루어지게 되었다.

발명의 내용

해결하려는 과제

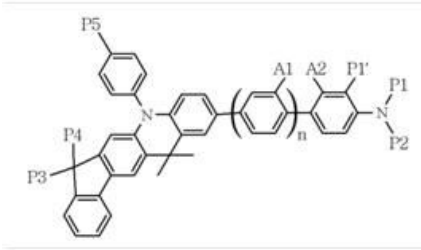
[0006] 본 발명이 이루고자 하는 첫 번째 기술적 과제는 유기 광소자, 특히 유기 전계 발광소자에 적용할 수 있는 새로운 유기 광화합물을 제공하는 것이다.

[0007] 본 발명이 이루고자 하는 두 번째 기술적 과제는 상기 신규 화합물을 포함하여 구동전압이 낮고, 발광효율, 휘도, 색순도, 열적 안정성 및 수명이 향상된 유기 전계 발광 소자 및 태양광 발전을 위한 유기 광소자를 제공하는 것이다.

과제의 해결 수단

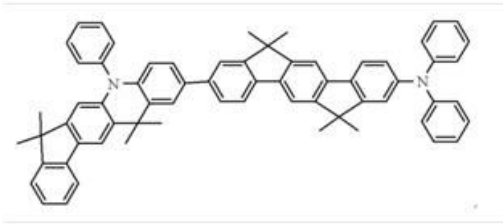
[0008] 본 발명에 따른 유기 광화합물 및 이를 이용한 유기 광소자는 하기 화학식 F1 내지 F16의 유기 광화합물을 기초로 한다:

[0009] <화학식 F1>



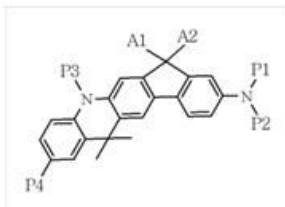
[0010]

[0011] <화학식 F2>



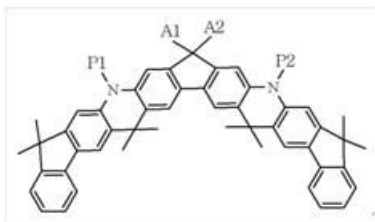
[0012]

[0013] <화학식 F3>



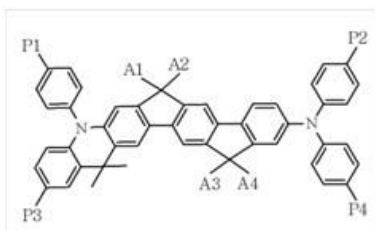
[0014]

[0015] <화학식 F4>



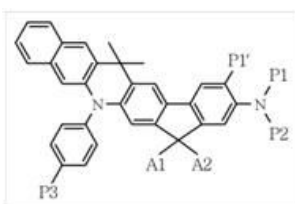
[0016]

[0017] <화학식 F5>



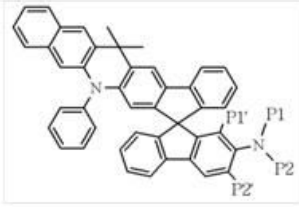
[0018]

[0019] <화학식 F6>



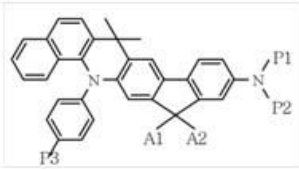
[0020]

[0021] <화학식 F7>



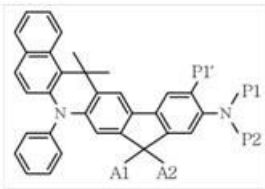
[0022]

[0023] <화학식 F8>



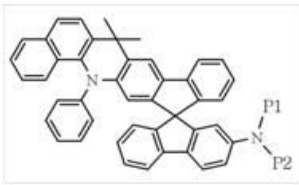
[0024]

[0025] <화학식 F9>



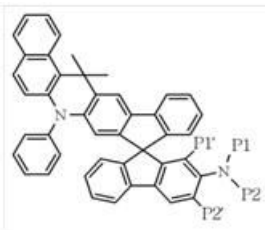
[0026]

[0027] <화학식 F10>



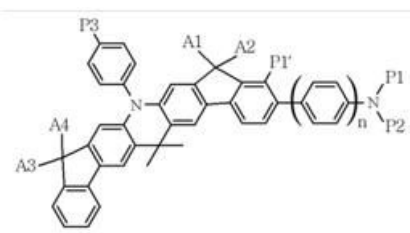
[0028]

[0029] <화학식 F11>



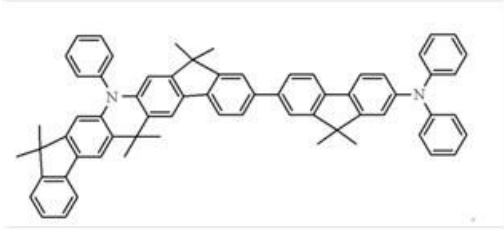
[0030]

[0031] <화학식 F12>



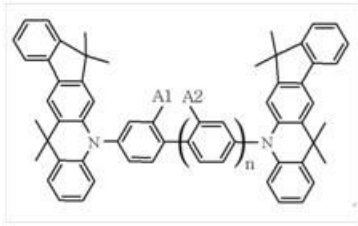
[0032]

[0033] <화학식 F13>



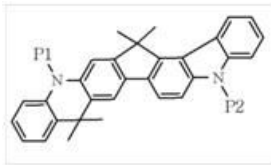
[0034]

[0035] <화학식 F14>



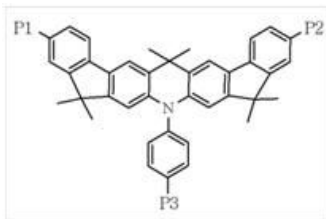
[0036]

[0037] <화학식 F15>



[0038]

[0039] <화학식 F16>



[0040]

[0041] 상기 화학식 F1 내지 F16에서

[0042] n은 0(zero), 1 또는 2이고,

[0043] P1, P2, P3, P4 및 P5는 각각 독립적으로

[0044] H, D, F, C1~C40의 알킬기, C6~C40의 아릴기, C5~C40의 헤테로아릴기, C5~C40의 아릴옥시기, C1~C40의 알킬옥시기, C3~C40의 시클로알킬기, C3~C40의 헤테로시클로알킬기, C5~C40의 아릴아미노기, C5~C40의 디아릴아미노기, C6~C40의 아릴알킬기로 이루어진 군에서 선택되거나 또는 인접하는 기와 축합(fused) 지방족 고리, 축합 방향족 고리, 축합 헤테로지방족 고리 또는 축합 헤테로방향족 고리를 형성하는 기이거나,

[0045] P1은 P2 또는 P1' 와 상호 축합 고리를 형성하거나(그렇지 않은 경우 P1' 는 H 또는 D이다),

[0046] P2는 P2' 와 상호 축합 고리를 형성하고(그렇지 않은 경우 P2' 는 H 또는 D이다),

[0047] A1, A2, A3 및 A4는 각각 독립적으로

[0048] C1~C40의 알킬기, C6~C40의 아릴기, C5~C40의 헤테로아릴기, C5~C40의 아릴옥시기, C5~C40의 아릴아미노기, C5~C40의 디아릴아미노기, C6~C40의 아릴알킬기로 이루어진 군에서 선택되거나; 또는 인접하는 기와 축합(fused) 지방족 고리, 축합 방향족 고리, 축합 헤테로지방족 고리 또는 축합 헤테로방향족 고리를 형성하는 기

이거나,

[0049] A1 및 A2는 상호 축합 고리를 형성한다.

발명의 효과

[0050] 본 발명에 따른 유기 광소자는 높은 발광 효율, 높은 발광 휘도, 높은 색순도 및 현저히 향상된 발광 수명을 제공한다,

[0051] 아울러 본 발명은 이를 유기 발광 소자 및 유기 발광 화합물, 또는 태양광 발전을 위한 유기 광소자 및 광화학 물질을 제공한다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

[0052] 이하 본 발명을 상세히 설명하도록 한다.

[0053] 본 발명은 다양한 변경을 가할 수 있고 여러 가지 형태를 가질 수 있는 바, 구현예(態樣, aspect)(또는 실시예)들을 본문에 상세하게 설명하고자 한다. 그러나 이는 본 발명을 특정한 개시 형태에 대해 한정하려는 것이 아니며, 본 발명의 사상 및 기술범위에 포함되는 모든 변경, 균등물 내지 대체물을 포함하는 것으로 이해되어야 한다.

[0054] 본 명세서에서 사용한 용어는 단지 특정한 구현예(태양, 態樣, aspect)(또는 실시예)를 설명하기 위해 사용된 것으로, 본 발명을 한정하려는 의도가 아니다. 단수의 표현은 문맥상 명백하게 다르게 뜻하지 않는 한, 복수의 표현을 포함한다. 본 출원에서, ~포함하다~ 또는 ~이루어진다~ 등의 용어는 명세서 상에 기재된 특징, 숫자, 단계, 동작, 구성요소, 부분품 또는 이들을 조합한 것이 존재함을 지정하려는 것이지, 하나 또는 그 이상의 다른 특징들이나 숫자, 단계, 동작, 구성요소, 부분품 또는 이들을 조합한 것들의 존재 또는 부가 가능성을 미리 배제하지 않는 것으로 이해되어야 한다.

[0055] 다르게 정의되지 않는 한, 기술적이거나 과학적인 용어를 포함해서 여기서 사용되는 모든 용어들은 본 발명이 속하는 기술 분야에서 통상의 지식을 가진 자에 의해 일반적으로 이해되는 것과 동일한 의미를 가지고 있다. 일반적으로 사용되는 사전에 정의되어 있는 것과 같은 용어들은 관련 기술의 문맥 상 가지는 의미와 일치하는 의미를 가지는 것으로 해석되어야 하며, 본 출원에서 명백하게 정의하지 않는 한, 이상적이거나 과도하게 형식적인 의미로 해석되지 않는다.

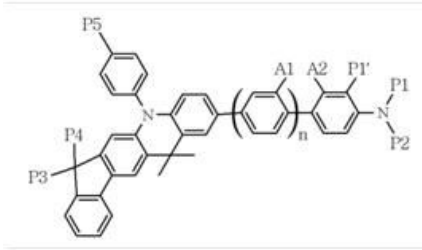
[0056] 본 발명은 인테노아크리딘(indenoacridine)계 유도체를 개발하여 전자수송층(ETM), 발광층(EML), 정공수송층(HTM) 등, 제1전극과 상기 제2전극 사이의 각종 유기막과 같이 다각적으로 쓰일 수 있는 물질을 제시하고, 효율 증가와 구동 전압의 감소와 같은 성능의 개선 및 OLED 재료로서의 능력을 극대화시킨 물질을 개발하고자 한다.

[0057] 본 명세서에서 유기 광화학물은 유기 광소자에 사용되는 화합물이라는 의미로서 반드시 발광이 가능한 화합물로 그 범위가 한정되지 않으며, 그 적용 범위도 유기 발광층에 한정되지 않고, 전하 주입층 및 전하 수송층 등 유기 광소자를 구성하는 어느 층에나 모두 사용될 수 있다.

[0058] 또 본 명세서에서 '광화학물' 및 '광소자'라는 용어는 사전적인 또는 관습적인 정의와 무관하게 본 발명이 유기 발광 소자 및 태양광 발전을 위한 소자에 모두 적용되는 경우를 고려하여, 이를 포괄하고자 선택한 용어이다.

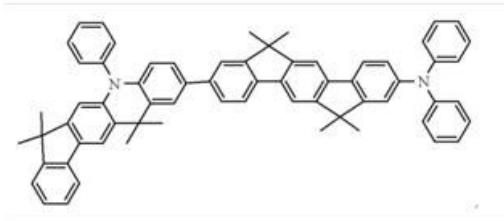
[0059] 본 발명의 제 1태양에 따르는 유기 광소자는, 제1전극; 제2전극; 및 상기 제1전극과 상기 제2전극 사이에 적어도 한 층의 유기막을 포함하는 유기 광소자로서, 상기 유기막이 하기 화학식 F1 내지 F16의 유기 광화학물을 포함한다:

[0060] <화학식 F1>



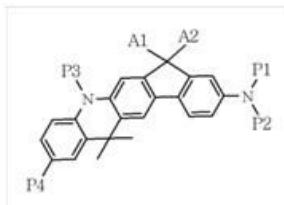
[0061]

[0062] <화학식 F2>



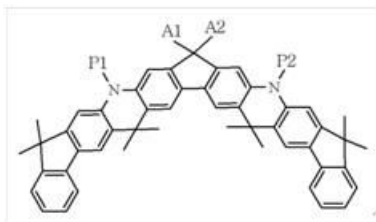
[0063]

[0064] <화학식 F3>



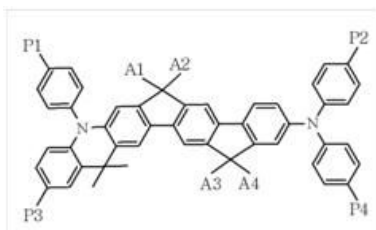
[0065]

[0066] <화학식 F4>



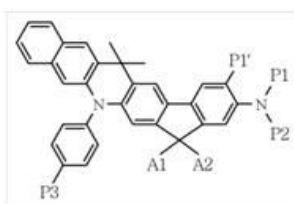
[0067]

[0068] <화학식 F5>



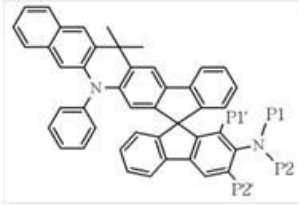
[0069]

[0070] <화학식 F6>



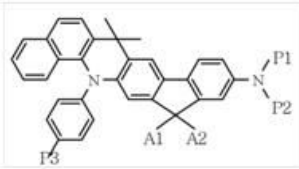
[0071]

[0072] <화학식 F7>



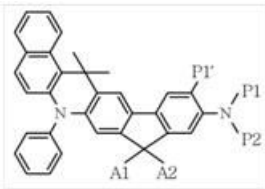
[0073]

[0074] <화학식 F8>



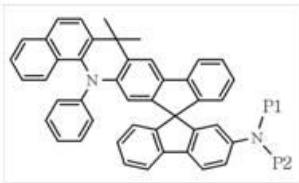
[0075]

[0076] <화학식 F9>



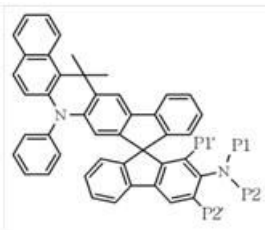
[0077]

[0078] <화학식 F10>



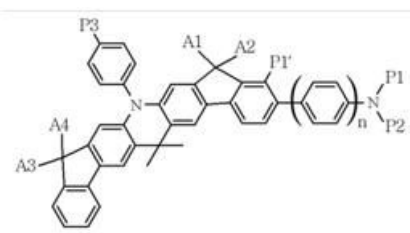
[0079]

[0080] <화학식 F11>



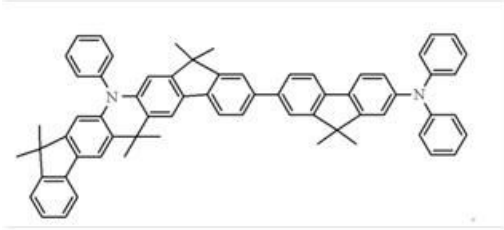
[0081]

[0082] <화학식 F12>



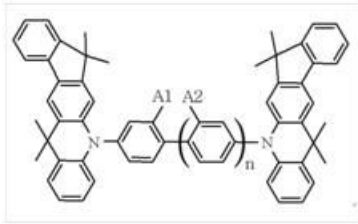
[0083]

[0084] <화학식 F13>



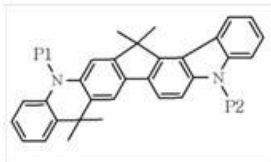
[0085]

[0086] <화학식 F14>



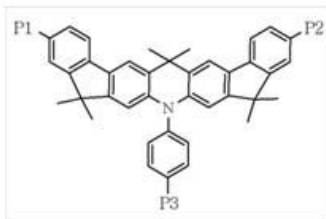
[0087]

[0088] <화학식 F15>



[0089]

[0090] <화학식 F16>



[0091]

[0092] 상기 화학식 F1 내지 F16에서

[0093] n은 0(zero), 1 또는 2이고,

[0094] P1, P2, P3, P4 및 P5는 각각 독립적으로

[0095] H, D, F, C1~C40의 알킬기, C2~C40의 알케닐기, C2~C40의 알키닐기, C6~C40의 아릴기, C5~C40의 헤테로아릴기, C5~C40의 아릴옥시기, C1~C40의 알킬옥시기, C3~C40의 시클로알킬기, C3~C40의 헤테로시클로알킬기, C5~C40의 아릴아미노기, C5~C40의 디아릴아미노기, C6~C40의 아릴알킬기로 이루어진 군에서 선택되거나 또는 인접하는 기와 축합(fused) 지방족 고리, 축합 방향족 고리, 축합 헤테로지방족 고리 또는 축합 헤테로방향족 고리를 형성하는 기이거나,

[0096] P1은 P2 또는 P1' 와 상호 축합 고리를 형성하거나(그렇지 않은 경우 P1' 는 H 또는 D이다),

[0097] P2는 P2' 와 상호 축합 고리를 형성하고(그렇지 않은 경우 P2' 는 H 또는 D이다),

[0098] A1, A2, A3 및 A4는 각각 독립적으로

[0099] H, D, F, C1~C40의 알킬기, C2~C40의 알케닐기, C2~C40의 알키닐기, C6~C40의 아릴기, C5~C40의 헤테로아릴기, C5~C40의 아릴옥시기, C1~C40의 알킬옥시기, C3~C40의 시클로알킬기, C3~C40의 헤테로시클로알킬기, C5~C40의

아릴아미노기, C5~C40의 디아릴아미노기, C6~C40의 아릴알킬기로 이루어진 군에서 선택되거나; 또는 인접하는 기와 축합(fused) 지방족 고리, 축합 방향족 고리, 축합 헤테로지방족 고리 또는 축합 헤테로방향족 고리를 형성하는 기이거나,

- [0100] A1 및 A2는 상호 축합 고리를 형성한다.
- [0101] 본 발명의 발명자는 상기 화학식 F1 내지 F16의 유기 광화합물의 치환기에서 P1, P2, P3, P4, P5, P1' , P2' , A1, A2, A3 및 A4를 선택 특정한,
- [0102] 다양한 유도체를 개발하여 전자수송층(ETM), 발광층(EML), 정공수송층(HTM) 등, 제1전극과 상기 제2전극 사이의 각종 유기막으로 사용될 수 있는 유기 광화합물 및
- [0103] 이를 이용한 유기 광소자를 개발하고,
- [0104] 유기발광소자로 활용될 경우 효율 증가와 구동 전압의 감소와 같은 성능의 개선 및 OLED 재료로서의 능력을 극대화시킬 수 있고, 특히 발광 수명이 현저히 향상됨을 발견하였으며,
- [0105] 이를 태양광 발전을 위한 광소자 및 광화합물 분야에 응용 적용할 경우 우수한 발전 효율을 얻을 수 있을 것으로 기대된다.
- [0106] 이하에서는 화학식 F1 내지 F16의 유기 광화합물을 유기 발광 소자와 관련하여 설명할 것이나, 이에 의하여 본 발명이 제한 해석되어서는 안 된다.
- [0107] 상기 화학식 F1 내지 F16의 유기 광화합물은 유기 광소자 중 제1전극과 제2전극 사이에 개재된 유기막을 이루는 물질로 적합하다. 상기 화학식 F1 내지 F16의 유기 광화합물은 유기 발광 소자의 유기막, 특히 정공수송층, 정공주입층 또는 발광층에 사용되기 적합하며 호스트 재료뿐만 아니라 도판트 재료로서도 사용된다. 상기 화학식 F1 내지 F16의 유기 광화합물은 청색 내지 녹색인 색상을 제공하며 백색 발광 소자에 사용하기에 적합하다.
- [0108] 보다 구체적으로 상기 화학식 F1(하기 화합물 1 내지 129에서 1 내지 22가 해당됨, 화학식 F2는 화합물 23임)에서
- [0109] P1 및 P2는 각각 독립적으로
- [0110] C6~C40의 아릴기, C5~C40의 헤테로아릴기, C5~C40의 아릴옥시기, C5~C40의 아릴아미노기, C5~C40의 디아릴아미노기, C6~C40의 아릴알킬기로 이루어진 군에서 선택되거나 또는 인접하는 기와 축합(fused) 지방족 고리, 축합 방향족 고리, 축합 헤테로지방족 고리 또는 축합 헤테로방향족 고리를 형성하는 기이거나
- [0111] P1은 P2 또는 P1' 와 상호 축합 고리를 형성하고(그렇지 않은 경우 P1' 는 H 또는 D이다),
- [0112] P3, P4 및 P5는 각각 독립적으로
- [0113] H, D, C1~C40의 알킬기, C6~C40의 아릴기, C5~C40의 헤테로아릴기, C5~C40의 아릴옥시기, C5~C40의 아릴아미노기, C5~C40의 디아릴아미노기, C6~C40의 아릴알킬기로 이루어진 군에서 선택되거나 또는 인접하는 기와 축합(fused) 지방족 고리, 축합 방향족 고리, 축합 헤테로지방족 고리 또는 축합 헤테로방향족 고리를 형성하는 기이거나
- [0114] P3는 P4는 상호 축합 고리를 형성하고,
- [0115] n은 0(zero), 1 또는 2이고,
- [0116] A1은 H 또는 D이거나, n이 1인 경우 A1 및 A2는 상호 축합 고리를 형성한다.
- [0117] 상기 화학식 F3(하기 화합물 1 내지 129에서 24 내지 35가 해당됨)에서
- [0118] P1, P2 및 P3는 각각 독립적으로
- [0119] C6~C40의 아릴기, C5~C40의 헤테로아릴기, C5~C40의 아릴옥시기, C5~C40의 아릴아미노기, C5~C40의 디아릴아미

노기, C6~C40의 아릴알킬기로 이루어진 군에서 선택되거나 또는 인접하는 기와 축합(fused) 지방족 고리, 축합 방향족 고리, 축합 헤테로지방족 고리 또는 축합 헤테로방향족 고리를 형성하는 기이고,

- [0120] P4, A1 및 A2는 각각 독립적으로
- [0121] H, D, C1~C40의 알킬기, C6~C40의 아릴기, C5~C40의 헤테로아릴기, C5~C40의 아릴옥시기, C5~C40의 아릴아미노기, C5~C40의 디아릴아미노기, C6~C40의 아릴알킬기로 이루어진 군에서 선택되거나 또는 인접하는 기와 축합(fused) 지방족 고리, 축합 방향족 고리, 축합 헤테로지방족 고리 또는 축합 헤테로방향족 고리를 형성하는 기이거나,
- [0122] A1 및 A2는 상호 축합 고리를 형성한다.
- [0123] 상기 화학식 F4(하기 화합물 1 내지 129에서 36 내지 50이 해당됨)에서
- [0124] P1 및 P2는 각각 독립적으로
- [0125] C6~C40의 아릴기, C5~C40의 헤테로아릴기, C5~C40의 아릴옥시기, C5~C40의 아릴아미노기, C5~C40의 디아릴아미노기, C6~C40의 아릴알킬기로 이루어진 군에서 선택되거나 또는 인접하는 기와 축합(fused) 지방족 고리, 축합 방향족 고리, 축합 헤테로지방족 고리 또는 축합 헤테로방향족 고리를 형성하는 기이고,
- [0126] A1 및 A2는 각각 독립적으로
- [0127] H, D, C1~C40의 알킬기, C6~C40의 아릴기, C5~C40의 헤테로아릴기, C5~C40의 아릴옥시기, C5~C40의 아릴아미노기, C5~C40의 디아릴아미노기, C6~C40의 아릴알킬기로 이루어진 군에서 선택되거나 또는 인접하는 기와 축합(fused) 지방족 고리, 축합 방향족 고리, 축합 헤테로지방족 고리 또는 축합 헤테로방향족 고리를 형성하는 기이거나,
- [0128] A1 및 A2는 상호 축합 고리를 형성한다.
- [0129] 상기 화학식 F5(하기 화합물 1 내지 129에서 51 내지 56이 해당됨)에서
- [0130] P1, P2, P3 및 P4는 각각 독립적으로
- [0131] H, D, C6~C40의 아릴기, C5~C40의 헤테로아릴기, C5~C40의 아릴옥시기, C5~C40의 아릴아미노기, C5~C40의 디아릴아미노기, C6~C40의 아릴알킬기로 이루어진 군에서 선택되거나 또는 인접하는 기와 축합(fused) 지방족 고리, 축합 방향족 고리, 축합 헤테로지방족 고리 또는 축합 헤테로방향족 고리를 형성하는 기이고,
- [0132] A1, A2, A3 및 A4는 각각 독립적으로
- [0133] C1~C40의 알킬기, C6~C40의 아릴기, C5~C40의 헤테로아릴기, C5~C40의 아릴옥시기, C5~C40의 아릴아미노기, C5~C40의 디아릴아미노기, C6~C40의 아릴알킬기로 이루어진 군에서 선택되거나 또는 인접하는 기와 축합(fused) 지방족 고리, 축합 방향족 고리, 축합 헤테로지방족 고리 또는 축합 헤테로방향족 고리를 형성하는 기이다.
- [0134] 상기 화학식 F6(하기 화합물 1 내지 129에서 57 내지 66, 그리고 69 및 70이 해당됨)에서
- [0135] P1 및 P2는 각각 독립적으로
- [0136] C6~C40의 아릴기, C5~C40의 헤테로아릴기, C5~C40의 아릴옥시기, C5~C40의 아릴아미노기, C5~C40의 디아릴아미노기, C6~C40의 아릴알킬기로 이루어진 군에서 선택되거나 또는 인접하는 기와 축합(fused) 지방족 고리, 축합 방향족 고리, 축합 헤테로지방족 고리 또는 축합 헤테로방향족 고리를 형성하는 기이거나,
- [0137] P1은 P1' 와 상호 축합 고리를 형성하고(그렇지 않은 경우 A1' 는 H 또는 D이다),
- [0138] P3, A1 및 A2는 각각 독립적으로
- [0139] H, D, C1~C40의 알킬기, C6~C40의 아릴기, C5~C40의 헤테로아릴기, C5~C40의 아릴옥시기, C5~C40의 아릴아미노기, C5~C40의 디아릴아미노기, C6~C40의 아릴알킬기로 이루어진 군에서 선택되거나 또는 인접하는 기와 축합(fused) 지방족 고리, 축합 방향족 고리, 축합 헤테로지방족 고리 또는 축합 헤테로방향족 고리를 형성하는 기

이거나,

- [0140] A1은 A2와 상호 축합 고리를 형성한다.
- [0141] 상기 화학식 F7(하기 화합물 1 내지 129에서 68, 69, 71, 72가 해당됨), F10(하기 화합물 1 내지 129에서 83, 84가 해당됨) 또는 F11(하기 화합물 1 내지 129에서 87, 88이 해당됨)에서
- [0142] P1 및 P2는 각각 독립적으로
- [0143] C6~C40의 아릴기, C5~C40의 헤테로아릴기, C5~C40의 아릴옥시기, C5~C40의 아릴아미노기, C5~C40의 디아릴아미노기, C6~C40의 아릴알킬기로 이루어진 군에서 선택되거나 또는 인접하는 기와 축합(fused) 지방족 고리, 축합 방향족 고리, 축합 헤테로지방족 고리 또는 축합 헤테로방향족 고리를 형성하는 기이거나,
- [0144] P1은 P1' 와, 그리고 P2는 P2' 와 상호 독립적으로 축합 고리를 형성한다(그렇지 않은 경우P1' 및 P2' 는 상호 독립적으로 H 또는 D이다).
- [0145] 상기 화학식 F8(하기 화합물 1 내지 129에서 73, 74, 75, 76, 81 및 82가 해당됨), F9(하기 화합물 1 내지 129에서 77 내지 80이 해당됨) 또는 F12(하기 화합물 1 내지 129에서 89 내지 109가 해당됨, 화학식 F13은 화합물 110임)에서
- [0146] P1 및 P2는 각각 독립적으로
- [0147] C6~C40의 아릴기, C5~C40의 헤테로아릴기, C5~C40의 아릴옥시기, C5~C40의 아릴아미노기, C5~C40의 디아릴아미노기, C6~C40의 아릴알킬기로 이루어진 군에서 선택되거나 또는 인접하는 기와 축합(fused) 지방족 고리, 축합 방향족 고리, 축합 헤테로지방족 고리 또는 축합 헤테로방향족 고리를 형성하는 기이거나,
- [0148] P1은 P1' 와 상호 축합 고리를 형성하고(그렇지 않은 경우P1' 는 H 또는 D이다)(화학식 F12는 n이 0인 경우),
- [0149] 상기 화학식 F12에서 n은 0(zero), 1 또는 2이고,
- [0150] P3, A1 및 A2는 각각 독립적으로
- [0151] H, D, C1~C40의 알킬기, C6~C40의 아릴기, C5~C40의 헤테로아릴기, C5~C40의 아릴옥시기, C5~C40의 아릴아미노기, C5~C40의 디아릴아미노기, C6~C40의 아릴알킬기로 이루어진 군에서 선택되거나 또는 인접하는 기와 축합(fused) 지방족 고리, 축합 방향족 고리, 축합 헤테로지방족 고리 또는 축합 헤테로방향족 고리를 형성하는 기이거나,
- [0152] A1은 A2와 상호 축합 고리를 형성한다.
- [0153] 상기 화학식 F14(하기 화합물 1 내지 129에서 111 내지 115가 해당됨)에서
- [0154] n은 0(zero), 1 또는 2이고
- [0155] A1 및 A2는 각각 독립적으로
- [0156] H, D, C1~C40의 알킬기, C6~C40의 아릴기, C5~C40의 헤테로아릴기, C5~C40의 아릴옥시기, C5~C40의 아릴아미노기, C5~C40의 디아릴아미노기, C6~C40의 아릴알킬기로 이루어진 군에서 선택되거나 또는 인접하는 기와 축합(fused) 지방족 고리, 축합 방향족 고리, 축합 헤테로지방족 고리 또는 축합 헤테로방향족 고리를 형성하는 기이거나,
- [0157] n이 1인 경우 A1은 A2와 상호 축합 고리를 형성한다.
- [0158] 상기 화학식 F15(하기 화합물 1 내지 129에서 116 내지 122가 해당됨)에서
- [0159] P1 및 P2는 각각 독립적으로
- [0160] C6~C40의 아릴기, C5~C40의 헤테로아릴기, C5~C40의 아릴옥시기, C5~C40의 아릴아미노기, C5~C40의 디아릴아미

노기, C6~C40의 아릴알킬기로 이루어진 군에서 선택되거나 또는 인접하는 기와 축합(fused) 지방족 고리, 축합 방향족 고리, 축합 헤테로지방족 고리 또는 축합 헤테로방향족 고리를 형성하는 기이다.

- [0161] 상기 화학식 F16(하기 화합물 1 내지 129에서 123 내지 129가 해당됨)에서
- [0162] P1, P2 및 P3는 각각 독립적으로
- [0163] H, D, F, C1~C40의 알킬기, C6~C40의 아릴기, C5~C40의 헤테로아릴기, C5~C40의 아릴옥시기, C1~C40의 알킬옥시기, C3~C40의 시클로알킬기, C3~C40의 헤테로시클로알킬기, C5~C40의 아릴아미노기, C5~C40의 디아릴아미노기, C6~C40의 아릴알킬기로 이루어진 군에서 선택되거나 또는 인접하는 기와 축합(fused) 지방족 고리, 축합 방향족 고리, 축합 헤테로지방족 고리 또는 축합 헤테로방향족 고리를 형성하는 기이다.
- [0164] 이상 상기 화학식 F1 내지 F16에서 각 화학식은 P1, P2, P3, P4, P5, P1', P2', A1, A2, A3 및 A4로 작용기를 공통적으로 표현하고 있으나, 각 화학식에서 이들은 상호 무관하다.
- [0165] 한편, 상기 P1, P2, P3, P4, P5, P1', P2', A1, A2, A3 및 A4의 상기 C1~C40의 알킬기, C2~C40의 알케닐기, C2~C40의 알키닐기, C5~C40의 아릴기, C5~C40의 헤테로아릴기, C5~C40의 아릴옥시기, C1~C40의 알킬옥시기, C5~C40의 아릴아미노기, C5~C40의 디아릴아미노기, C6~C40의 아릴알킬기, C3~C40의 시클로알킬기 및 C3~C40의 헤테로시클로알킬기는
- [0166] 각각 독립적으로 D, F, 할로젠, 니트릴기, 니트로기, C1~C40의 알킬기, C2~C40의 알케닐기, C1~C40의 알콕시기, C1~C40의 아미노기, C3~C40의 시클로알킬기, C3~C40의 헤테로시클로알킬기, C6~C40의 아릴기 및 C5~C40의 헤테로아릴기로 이루어진 군에서 선택되는 하나 이상으로 치환되거나 비치환되는 것이 바람직하다.
- [0167] 또 상기 P1, P2, P3, P4, P5, P1', P2', A1, A2, A3 및 A4의 상기 C1~C40의 알킬기, C2~C40의 알케닐기, C2~C40의 알키닐기, C5~C40의 아릴기, C5~C40의 헤테로아릴기, C5~C40의 아릴옥시기, C1~C40의 알킬옥시기, C5~C40의 아릴아미노기, C5~C40의 디아릴아미노기, C6~C40의 아릴알킬기, C3~C40의 시클로알킬기 및 C3~C40의 헤테로시클로알킬기에 도입되는 치환기 중에서
- [0168] C1~C40의 알킬기, C2~C40의 알케닐기, C1~C40의 알콕시기, C1~C40의 아미노기, C3~C40의 시클로알킬기, C3~C40의 헤테로시클로알킬기, C6~C40의 아릴기 및 C5~C40의 헤테로아릴기는
- [0169] 각각 독립적으로 D, F, 할로젠, 니트릴기, 니트로기, C1~C40의 알킬기, C2~C40의 알케닐기, C1~C40의 알콕시기, C1~C40의 아미노기, C3~C40의 시클로알킬기, C3~C40의 헤테로시클로알킬기, C6~C40의 아릴기 및 C5~C40의 헤테로아릴기로 이루어진 군에서 선택되는 하나 이상의 제2치환기로 추가적으로 치환되거나; 또는 인접하는 기와 축합 지방족 고리, 축합 방향족 고리, 축합 헤테로지방족 고리 또는 축합 헤테로방향족 고리를 형성하거나 스피로 결합을 하는 것이 바람직하다.
- [0170] 나아가 상기 P1, P2, P3, P4, P5, P1', P2', A1, A2, A3 및 A4의 상기 C1~C40의 알킬기, C2~C40의 알케닐기, C2~C40의 알키닐기, C5~C40의 아릴기, C5~C40의 헤테로아릴기, C5~C40의 아릴옥시기, C1~C40의 알킬옥시기, C5~C40의 아릴아미노기, C5~C40의 디아릴아미노기, C6~C40의 아릴알킬기, C3~C40의 시클로알킬기 및 C3~C40의 헤테로시클로알킬기에 도입되는 치환기는
- [0171] D, F, 페닐기, 톨일기, 비페닐기, 펜타레닐기, 인데닐기, 나프틸기, 비페닐레닐기, 안트라세닐기, 벤조안트라세닐기, 아즈레닐기, 헵타레닐기, 아세나프틸레닐기, 페나레닐기, 메틸안트릴기, 페난트레닐기, 트리페닐레닐기, 피레닐기, 크리세닐기, 피세닐기, 페릴레닐기, 클로로페릴레닐기, 펜타페닐기, 펜타세닐기, 테트라페닐레닐기, 헥사페닐기, 헥사세닐기, 루비세닐기, 코로네닐기, 트리나프틸레닐기, 헵타페닐기, 헵타세닐기, 플루오레닐기, 피란트레닐기, 오바레닐기, 카르바졸릴기, 디벤조피라닐기, 디벤조티오페닐기, 티오페닐기, 인돌일기, 푸리닐기, 벤즈이미다졸일기, 퀴놀리닐기, 벤조티오페닐기, 파라티아지닐기, 피롤일기, 피라졸릴기, 이미다졸릴기, 이미다졸리닐기, 옥사졸릴기, 티아졸릴기, 트리아졸릴기, 테트라졸릴기, 옥사디아졸릴기, 피리디닐기, 피리

다지닐기, 피리미디닐기, 피라지닐기, 티안트레닐기(thianthrenyl), 사이클로펜틸기, 사이클로헥실기, 옥시라닐기, 피롤리디닐기, 피라졸리디닐기, 이미다졸리디닐기, 피페리디닐기, 피페라지닐기, 모르폴리닐기, 디(C6-C50아릴)아미노기, 실레인기 및 이들의 유도체로 이루어진 군으로부터 선택된 것이 바람직하다.

[0172] 상기 아릴기는 방향족 고리 시스템을 갖는 1가 그룹으로서, 2 이상의 고리시스템을 포함할 수 있으며, 상기 2이상의 고리 시스템은 서로 결합 또는 축합된 형태로 존재할 수 있다. 상기 헤테로아릴기는 상기 아릴기 중 하나 이상의 탄소가 N, O, S, P, Si 및 Se로 이루어진 군으로부터 선택된 하나 이상으로 치환된 그룹을 가리킨다.

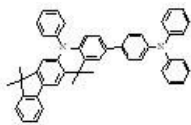
[0173] 한편, 사이클로알킬기는 고리 시스템을 갖는 알킬기를 가리키며, 상기 헤테로사이클로알킬기는 상기 사이클로알킬기 중 하나 이상의 탄소가 N, O, S, P, Si 및 Se로 이루어진 군으로부터 선택된 하나 이상으로 치환된 그룹을 가리킨다.

[0174] 상기 아릴기 및 헤테로아릴기의 하나 이상의 수소가 치환될 경우, 이들의 치환기는 C1-C50알킬기; C1-C50알콕시기; 비치환 또는 C1-C50알킬기 또는 C1-C50알콕시기로 치환된 C6-C50아릴기; 비치환 또는 C1-C50알킬기 또는 C1-C50알콕시기로 치환된 C2-C50헤테로아릴기; 비치환 또는 C1-C50알킬기 또는 C1-C50알콕시기로 치환된 C5-C50 사이클로알킬기 및 비치환 또는 C1-C20알킬기 또는 C1-C20알콕시기로 치환된 C5-C50헤테로사이클로알킬기, 또는 실레인기로 표시되는 그룹으로 이루어진 군으로부터 선택된 하나 이상일 수 있다.

[0175] 본 발명의 제 1태양에 따르는 유기 광소자는, 제1전극; 제2전극; 및 상기 제1전극과 상기 제2전극 사이에 적어도 한 층의 유기막을 포함하는 유기 광소자이다.

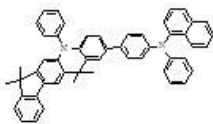
[0176] 본 발명의 유기 광소자에 사용되는 유기 광화합물은 하기 화학물 1 내지 129의 구조(이하 화학식들에서 '화학식'은 생략하고 숫자만 기재함)를 가질 수 있으나 이에 한정되는 것은 아니다:

[0177] 1



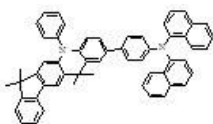
[0178]

[0179] 2



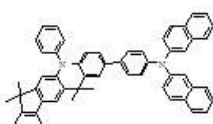
[0180]

[0181] 3



[0182]

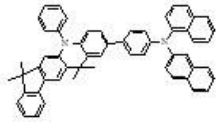
[0183] 4



[0184]

[0185]

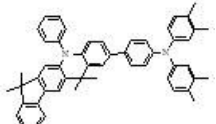
5



[0186]

[0187]

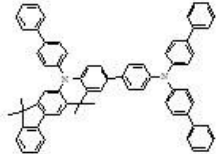
6



[0188]

[0189]

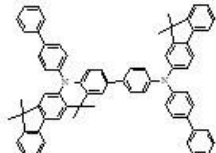
7



[0190]

[0191]

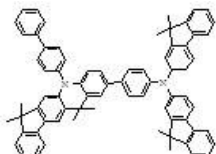
8



[0192]

[0193]

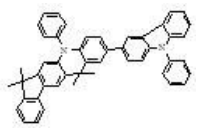
9



[0194]

[0195]

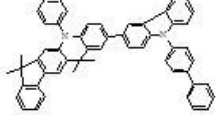
10



[0196]

[0197]

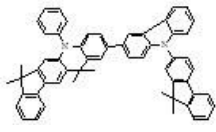
11



[0198]

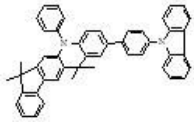
[0199]

12



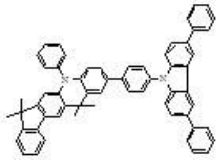
[0200]

[0201] 13



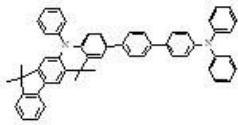
[0202]

[0203] 14



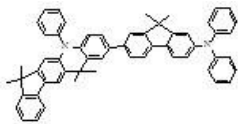
[0204]

[0205] 15



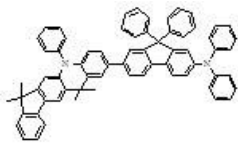
[0206]

[0207] 16



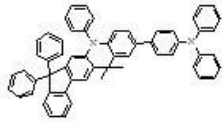
[0208]

[0209] 17



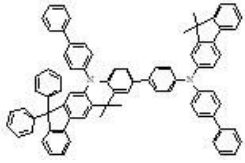
[0210]

[0211] 18



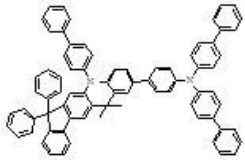
[0212]

[0213] 19



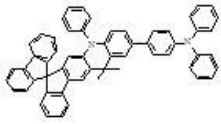
[0214]

[0215] 20



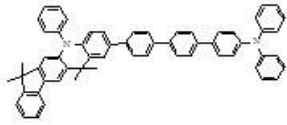
[0216]

[0217] 21



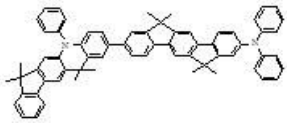
[0218]

[0219] 22



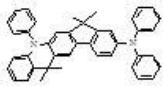
[0220]

[0221] 23



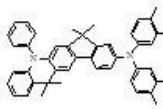
[0222]

[0223] 24



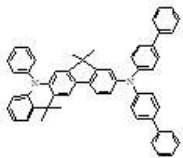
[0224]

[0225] 25



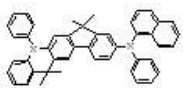
[0226]

[0227] 26



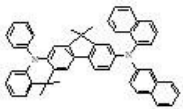
[0228]

[0229] 27



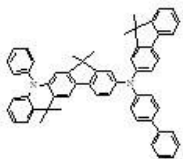
[0230]

[0231] 28



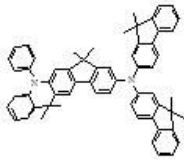
[0232]

[0233] 29



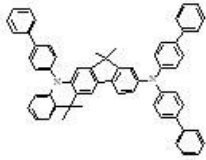
[0234]

[0235] 30



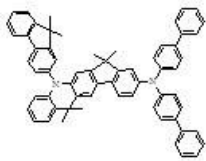
[0236]

[0237] 31



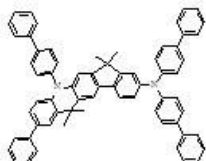
[0238]

[0239] 32



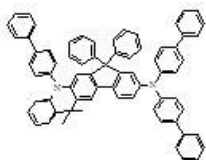
[0240]

[0241] 33



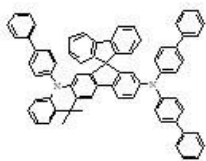
[0242]

[0243] 34



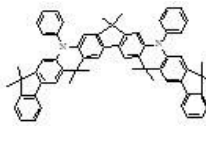
[0244]

[0245] 35



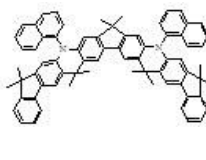
[0246]

[0247] 36



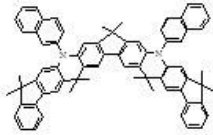
[0248]

[0249] 37



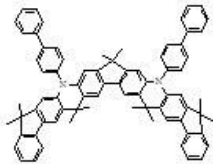
[0250]

[0251] 38



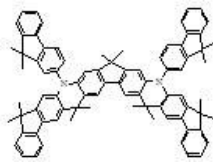
[0252]

[0253] 39



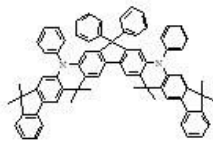
[0254]

[0255] 40



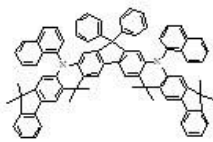
[0256]

[0257] 41



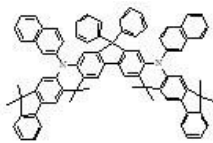
[0258]

[0259] 42



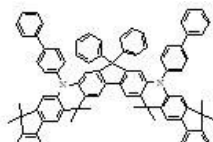
[0260]

[0261] 43



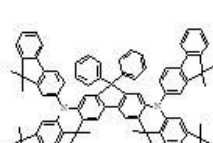
[0262]

[0263] 44



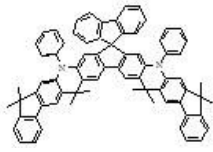
[0264]

[0265] 45



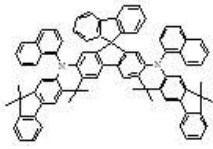
[0266]

[0267] 46



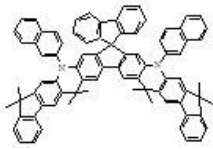
[0268]

[0269] 47



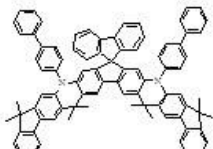
[0270]

[0271] 48



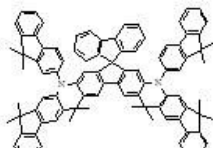
[0272]

[0273] 49



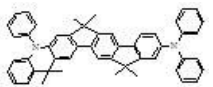
[0274]

[0275] 50



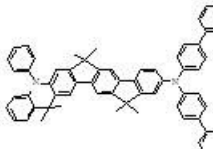
[0276]

[0277] 51



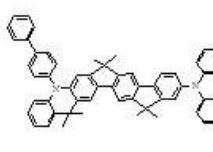
[0278]

[0279] 52



[0280]

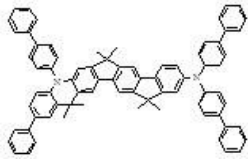
[0281] 53



[0282]

[0283]

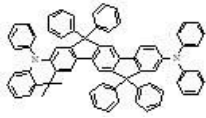
54



[0284]

[0285]

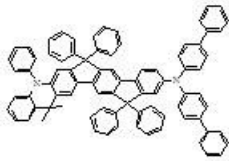
55



[0286]

[0287]

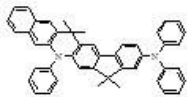
56



[0288]

[0289]

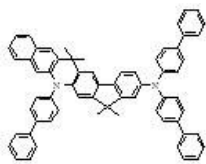
57



[0290]

[0291]

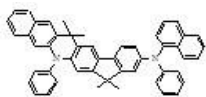
58



[0292]

[0293]

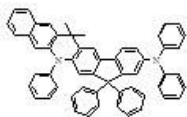
59



[0294]

[0295]

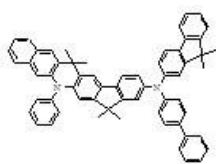
60



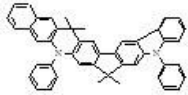
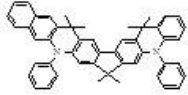
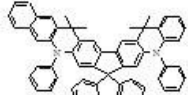
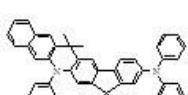
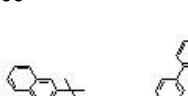


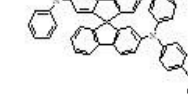
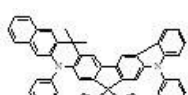
[0296]

[0297]

61

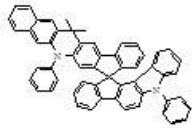


[0298]

- [0299] 62

- [0300]
- [0301] 63

- [0302]
- [0303] 64

- [0304]
- [0305] 65

- [0306]
- [0307] 66

- [0308]
- [0309] 67

- [0310]
- [0311] 68

- [0312]
- [0313] 69

- [0314]
- [0315] 70

- [0316]

[0317]

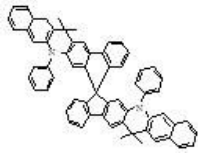
71



[0318]

[0319]

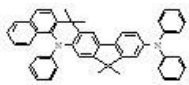
72



[0320]

[0321]

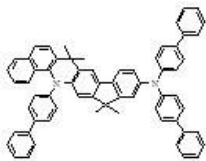
73



[0322]

[0323]

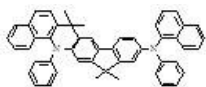
74



[0324]

[0325]

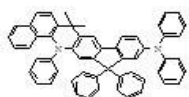
75



[0326]

[0327]

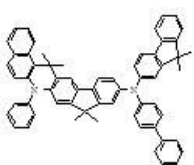
76



[0328]

[0329]

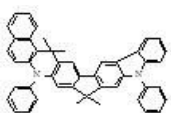
77



[0330]

[0331]

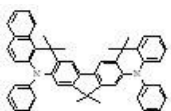
78



[0332]

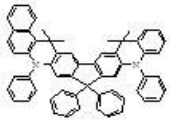
[0333]

79



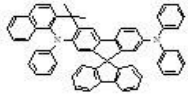
[0334]

[0335] 80



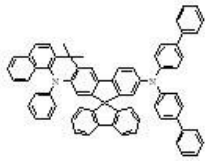
[0336]

[0337] 81



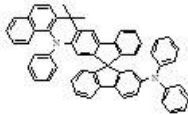
[0338]

[0339] 82



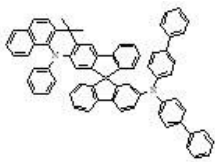
[0340]

[0341] 83



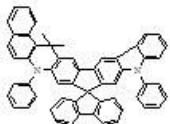
[0342]

[0343] 84



[0344]

[0345] 85



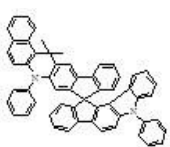
[0346]

[0347] 86



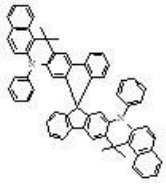
[0348]

[0349] 87



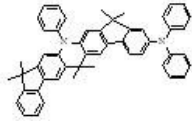
[0350]

[0351] 88



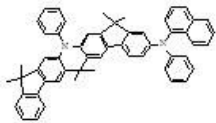
[0352]

[0353] 89



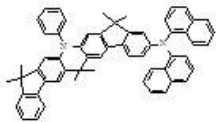
[0354]

[0355] 90



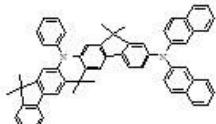
[0356]

[0357] 91



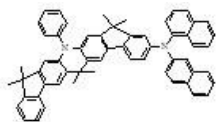
[0358]

[0359] 92



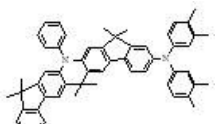
[0360]

[0361] 93



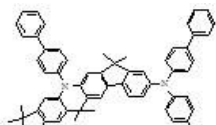
[0362]

[0363] 94



[0364]

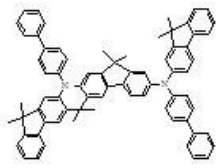
[0365] 95



[0366]

[0367]

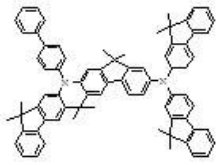
96



[0368]

[0369]

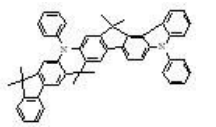
97



[0370]

[0371]

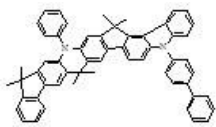
98



[0372]

[0373]

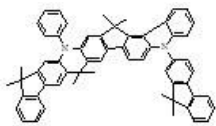
99



[0374]

[0375]

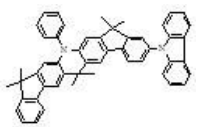
100



[0376]

[0377]

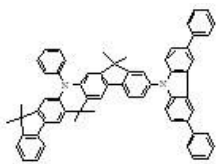
101



[0378]

[0379]

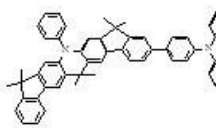
102



[0380]

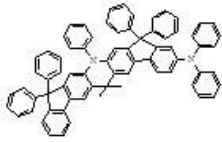
[0381]

103



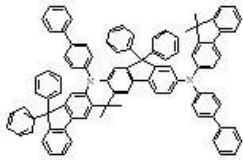
[0382]

[0383] 104



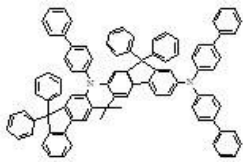
[0384]

[0385] 105



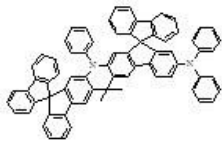
[0386]

[0387] 106



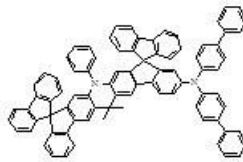
[0388]

[0389] 107



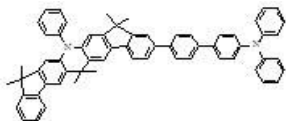
[0390]

[0391] 108



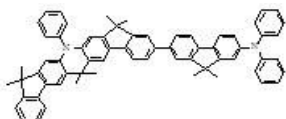
[0392]

[0393] 109



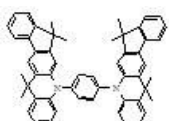
[0394]

[0395] 110

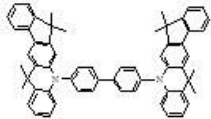
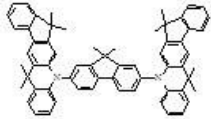
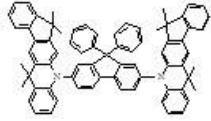
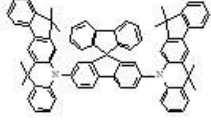
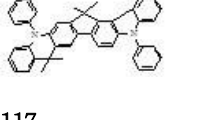
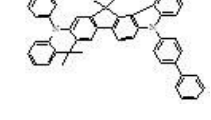
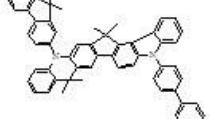
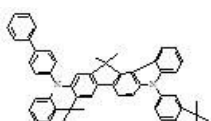


[0396]

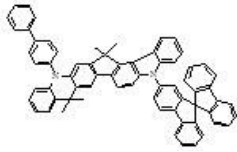
[0397] 111



[0398]

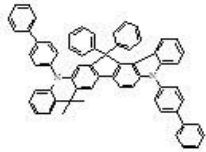
- [0399] 112
- 
- [0400]
- [0401] 113
- 
- [0402]
- [0403] 114
- 
- [0404]
- [0405] 115
- 
- [0406]
- [0407] 116
- 
- [0408]
- [0409] 117
- 
- [0410]
- [0411] 118
- 
- [0412]
- [0413] 119
- 
- [0414]

[0415] 120



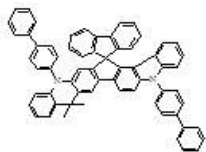
[0416]

[0417] 121



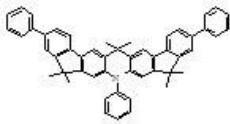
[0418]

[0419] 122



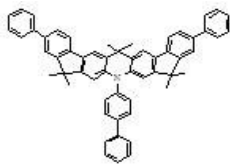
[0420]

[0421] 123



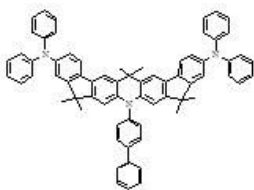
[0422]

[0423] 124



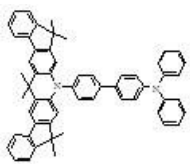
[0424]

[0425] 125



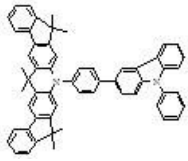
[0426]

[0427] 126



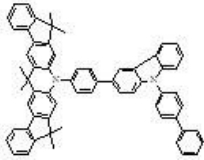
[0428]

[0429] 127



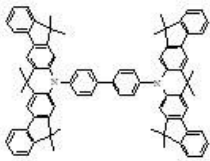
[0430]

[0431] 128



[0432]

[0433] 129



[0434]

[0435] 상기 화학식 F1 내지 F16의 화합물로 표시되는 본 발명에 따른 유기 광화합물은 통상의 합성 방법을 이용하여 합성될 수 있으며, 상기 화합물의 보다 상세한 합성 경로는 하기 합성예의 반응식들을 참조한다. 상기 화학식 F1 내지 F16의 화합물은 유기 광소자의 유기막, 특히 정공수송층, 정공주입층 또는 발광층에 사용되기 적합하다. 본 발명을 따르는 유기 발광 소자의 구조는 매우 다양하다. 상기 제1전극과 제2전극 사이에 정공주입층, 정공수송층, 정공저지층, 전자저지층, 전자수송층 및 전자주입층으로 이루어진 균으로부터 선택된 하나 이상의 층을 더 포함할 수 있다.

[0436] 보다 구체적으로, 본 발명을 따르는 유기 발광 소자의 구현에는

[0437] 먼저, 유기 발광 소자는 제1전극/정공주입층/발광층/전자수송층/전자주입층/제2전극으로 이루어진 구조를 가질 수 있고,

[0438] 또 유기 발광 소자는 제1전극/정공주입층/정공수송층/발광층/전자수송층/전자주입층/제2전극으로 이루어진 구조를 가질 수 있으며,

[0439] 나아가 유기 발광 소자는 제1전극/정공주입층/정공수송층/발광층/정공저지층/전자수송층/전자주입층/제2전극의 구조를 가질 수 있다.

[0440] 이때, 상기 정공수송층, 정공주입층 및 발광층 중 하나 이상은 본 발명을 따르는 화합물을 포함할 수 있다.

[0441] 본 발명을 따르는 유기 광소자의 발광층은 적색, 녹색, 청색 또는 백색을 포함하는 인광 또는 형광 도펀트를 포함할 수 있다. 이 중, 상기 인광 도펀트는 Ir, Pt, Os, Ti, Zr, Hf, Eu, Tb 및 Tm으로 이루어진 균으로부터 선택된 하나 이상의 원소를 포함하는 유기금속화합물일 수 있다. 또한, 본 발명에 따르는 화합물은 발광층에서 형광 도펀트로도 사용될 수 있다.

[0442] 이하, 본 발명을 따르는 유기 광소자의 제조 방법을 유기 광소자를 참조하여, 살펴보기로 한다. 먼저 기판 상부에 높은 일함수를 갖는 제1전극용 물질을 증착법 또는 스퍼터링법 등에 의해 형성하여 제1전극을 형성한다. 상기 제1전극은 애노드(Anode)일 수 있다. 여기에서 기판으로는 통상적인 유기 광소자에서 사용되는 기판을 사용하는 데 기계적 강도, 열적 안정성, 투명성, 표면 평활성, 취급용이성 및 방수성이 우수한 유리 기판 또는 투명 플라스틱 기판이 바람직하다. 제1전극용 물질로는 투명하고 전도성이 우수한 산화인듐주석(ITO), 산화인듐아연(IZO), 산화주석(SnO2), 산화아연(ZnO) 등을 사용한다.

[0443] 다음으로, 상기 제1전극 상부에 진공증착법, 스펀코팅법, 캐스트법, LB법 등과 같은 다양한 방법을 이용하여 정공주입층(HIL)을 형성할 수 있다.

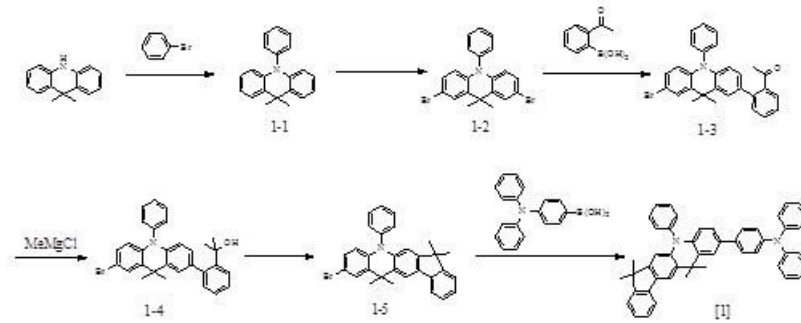
- [0444] 진공증착법에 의하여 정공주입층을 형성하는 경우, 그 증착 조건은 정공주입층의 재료로서 사용하는 화합물, 목적으로 하는 정공주입층의 구조 및 열적 특성에 따라 다르지만, 일반적으로 증착온도 100 내지 500℃, 진공도 10^{-5} 내지 10^{-3} torr, 증착속도 0.01 내지 100Å/sec, 막 두께는 통상 100Å 내지 1μm 범위에서 적절히 선택하는 것이 바람직하다.
- [0445] 스핀코팅법에 의하여 정공주입층을 형성하는 경우, 그 코팅 조건은 정공주입층의 재료로서 사용하는 화합물, 목적으로 하는 정공주입층의 구조 및 열적 특성에 따라 상이하지만, 약 2000rpm 내지 5000rpm의 코팅 속도, 코팅 후 용매 제거를 위한 열처리 온도는 약 80℃ 내지 200℃의 온도 범위에서 적절히 선택하는 것이 바람직하다.
- [0446] 상기 정공주입층 물질은 전술한 바와 같은 화학식 a를 갖는 화합물일 수 있다.
- [0447] 또는, 예를 들어, 미국특허 제4,356,429호에 개시된 구리프탈로시아닌 등의 프탈로시아닌 화합물 또는 Advanced Material, 6, p.677(1994)에 기재되어 있는 스타버스트형 아민 유도체류인 TCTA, m-MTDATA, m-MTDAPB, 2-TNATA(4,4',4"-tris(N-(2-naphtyl)-N-phenylamino)triphenylamine; 4,4',4"-트리스(N-(나프틸)-N-페닐아미노)트리페닐아민), 용해성이 있는 전도성 고분자인 Pani/DBSA (Polyaniline/Dodecylbenzenesulfonic acid:폴리아닐린/도데실벤젠설포산) 또는 PEDOT/PSS (Poly(3,4-ethylenedioxythiophene)/Poly(4-styrenesulfonate):폴리(3,4-에틸렌디옥시티오펜)/폴리(4-스티렌설포네이트)), PANI/CSA (Polyaniline/Camphor sulfonic acid:폴리아닐린/캄퍼설포산) 또는 PANI/PSS (Polyaniline)/Poly(4-styrenesulfonate):폴리아닐린/폴리(4-스티렌설포네이트)) 등과 같은 공지된 정공주입 물질을 사용할 수 있다.
- [0448] 상기 정공주입층의 두께는 약 100Å 내지 10000Å, 바람직하게는 100Å 내지 1000Å일 수 있다. 상기 정공주입층의 두께가 100Å 미만인 경우, 정공주입 특성이 저하될 수 있으며, 상기 정공주입층의 두께가 10000Å를 초과하는 경우, 구동전압이 상승할 수 있기 때문이다.
- [0449] 다르게는, 상기 정공주입층은 진공기상증착법에 의해 형성할 수 있다. 구체적인 증착조건은 사용하는 화합물에 따라 다르지만, 일반적인 정공주입층의 형성과 거의 동일한 조건범위 중에서 선택된다. 예를 들어 DNTPD(N,N-bis-[4-(di-m-tolylamino)phenyl]-N,N-diphenylbiphenyl-4,4'-diamine) 등이 사용될 수 있다.
- [0450] 다음으로 상기 정공주입층 상부에 진공증착법, 스핀코팅법, 캐스트법, LB법 등과 같은 다양한 방법을 이용하여 정공수송층(HTL)을 형성할 수 있다. 진공증착법 및 스핀코팅법에 의하여 정공수송층을 형성하는 경우, 그 증착조건 및 코팅조건은 사용하는 화합물에 따라 다르지만, 일반적으로 정공주입층의 형성과 거의 동일한 조건범위 중에서 선택된다.
- [0451] 상기 정공수송층 물질은 전술한 바와 같은 화학식 a의 화합물을 포함할 수 있다. 또는, 예를 들어, N-페닐카르바졸, 폴리비닐카르바졸 등의 카르바졸 유도체, N,N'-비스(3-메틸페닐)-N,N'-디페닐-[1,1'-비페닐]-4,4'-디아민(TPD), N,N'-디(나프탈렌-1-일)-N,N'-디페닐 벤지딘(α-NPD) 등의 방향족 축합환을 가지는 통상적인 아민 유도체 등과 같은 공지된 정공수송 물질을 사용할 수 있다. 상기 정공수송층의 두께는 약 50Å 내지 1000Å, 바람직하게는 100Å 내지 600Å일 수 있다. 상기 정공수송층의 두께가 50Å 미만인 경우, 정공수송 특성이 저하될 수 있으며, 상기 정공수송층의 두께가 1000Å를 초과하는 경우, 구동전압이 상승할 수 있기 때문이다.
- [0452] 다음으로 상기 정공수송층 상부에 진공증착법, 스핀코팅법, 캐스트법, LB법 등과 같은 방법을 이용하여 발광층(EML)을 형성할 수 있다. 진공증착법 및 스핀코팅법에 의해 발광층을 형성하는 경우, 그 증착조건은 사용하는 화합물에 따라 다르지만, 일반적으로 정공주입층의 형성과 거의 동일한 조건범위 중에서 선택된다.
- [0453] 상기 발광층은 전술한 바와 같이 본 발명을 따르는 화학식 a의 화합물을 포함할 수 있다. 이 때, 화학식 a의 화합물은 적합한 공지의 호스트 재료와 함께 사용될 수 있거나, 공지의 도펀트 재료와 함께 사용될 수 있다.
- [0454] 상기 화학식 a의 화합물을 단독으로 사용하는 것도 가능하다. 호스트 재료의 경우, 예를 들면, Alq3(tris(8-hydroxy-quinolate)aluminium) 또는 CBP(4,4'-N,N'-디카바졸-비페닐), 또는 PVK(폴리(n-비닐카르바졸)) 등을 사용할 수 있다.
- [0455] 도펀트 재료의 경우, 형광 도펀트로서는 이데미쯔사(Idemitsu사)에서 구입 가능한 IDE102, IDE105 및 하야시바

라사에서 구입 가능한 C545T 등을 사용할 수 있으며, 인광 도펀트로서는 적색 인광 도펀트 PtOEP, UDC사의 RD61, 녹색 인광 도펀트 Ir(PPy)3(PPy=2-phenylpyridine), 청색 인광 도펀트인 F2Irpic, UDC사의 적색 인광 도펀트 RD 61 등을 사용할 수 있다. MQD(N-methylquinacridone), 쿠마린(Coumarine)유도체 등도 사용할 수 있다.

- [0457] 도핑 농도는 특별히 제한 되지 않으나 통상적으로 호스트100 중량부를 기준으로 하여 상기 도펀트의 함량은 0.01 ~ 15 중량부이다.상기 발광층의 두께는 약 100Å 내지 1000Å, 바람직하게는 200Å 내지 600Å일 수 있다.
- [0458] 상기 발광층의 두께가 100Å 미만인 경우, 발광 특성이 저하될 수 있으며, 상기 발광층의 두께가 1000Å를 초과하는 경우, 구동전압이 상승할 수 있기 때문이다.
- [0459] 발광층에 발광 화합물이 인광 도펀트와 함께 사용할 경우에는 삼중항 여기자 또는 정공이 전자수송층으로 확산 되는 현상을 방지하기 위하여, 상기 발광층 상부에 진공증착법, 스펀코팅법, 캐스트법, LB법 등과 같은 방법을 이용하여 정공저지층(HBL)을 형성할 수 있다. 진공증착법 및 스펀코팅법에 의해 정공저지층을 형성하는 경우, 그 조건은 사용하는 화합물에 따라 다르지만, 일반적으로 정공주입층의 형성과 거의 동일한 조건범위 중에서 선택된다. 사용가능한 공지의 정공저지재료, 예를 들면 옥사디아졸 유도체나 트리아졸 유도체, 페난트롤린 유도체, BCP 등을 들 수 있다.
- [0460] 상기 정공저지층의 두께는 약 50Å 내지 1000Å, 바람직하게는 100Å 내지 300Å일 수 있다. 상기 정공저지층의 두께가 50Å 미만인 경우, 정공저지 특성이 저하될 수 있으며, 상기 정공저지층의 두께가 1000Å를 초과하는 경우, 구동전압이 상승할 수 있기 때문이다.상기 정공저지층이 생략될 경우 도 1b에 도시된 구조를 가지는 유기발광 소자가 얻어진다.
- [0461] 다음으로 전자수송층(ETL)을 진공증착법, 또는 스펀코팅법, 캐스트법 등의 다양한 방법을 이용하여 형성한다.
- [0462] 진공증착법 및 스펀코팅법에 의해 전자수송층을 형성하는 경우, 그 조건은 사용하는 화합물에 따라 다르지만, 일반적으로 정공주입층의 형성과 거의 동일한 조건범위 중에서 선택된다. 상기 전자수송층 재료는 전자주입전극(Cathode)로부터 주입된 전자를 안정하게 수송하는 기능을 하는 것으로서 퀴놀린 유도체, 특히 트리스(8-퀴놀리노레이트)알루미늄(Alq3), TAZ, Balq, PBD등과 같은 공지의 재료를 사용할 수도 있다.
- [0463] 상기 전자수송층의 두께는 약 100Å 내지 1000Å, 바람직하게는 200Å 내지 500Å일 수 있다. 상기 전자수송층의 두께가 100Å 미만인 경우, 전자수송 특성이 저하될 수 있으며, 상기 전자수송층의 두께가 1000Å를 초과하는 경우, 구동전압이 상승할 수 있기 때문이다.
- [0464] 또한 전자수송층 상부에 음극으로부터 전자의 주입을 용이하게 하는 기능을 가지는 물질인 전자주입층(EIL)이 적층될 수 있으며 이는 특별히 재료를 제한하지 않는다.
- [0465] 전자 주입층으로서 LiF, NaCl, CsF, Li2O, BaO 등과 같은 전자주입층 형성 재료로서 공지된 임의의 물질을 이용할 수 있다. 상기 전자주입층의 증착조건은 사용하는 화합물에 따라 다르지만, 일반적으로 정공주입층의 형성과 거의 동일한 조건범위 중에서 선택된다.
- [0466] 상기 전자주입층의 두께는 약 1Å 내지 100Å, 바람직하게는 5Å 내지 50Å일 수 있다. 상기 전자주입층의 두께가 1Å 미만인 경우, 전자주입 특성이 저하될 수 있으며, 상기 전자주입층의 두께가 100Å를 초과하는 경우, 구동전압이 상승할 수 있기 때문이다.
- [0467] 마지막으로 전자주입층 상부에 진공증착법이나 스퍼터링법 등의 방법을 이용하여 제2전극을 형성할 수 있다.
- [0468] 상기 제2전극은 캐소드(Cathode)로 사용될 수 있다. 상기 제2전극 형성용 금속으로는 낮은 일함수를 가지는 금속, 합금, 전기전도성 화합물 및 이들의 혼합물을 사용할 수 있다. 구체적인 예로서는 리튬(Li), 마그네슘(Mg), 알루미늄(Al), 알루미늄-리튬(Al-Li), 칼슘(Ca), 마그네슘-인듐(Mg-In), 마그네슘-은(Mg-Ag)등을 들 수 있다. 또한 전면 발광소자를 얻기 위하여 ITO, IZO를 사용한 투과형 캐소드를 사용할 수도 있다.
- [0469] 본 발명의 다른 구현예에 따르는 유기 전계 발광 화합물은 상기 화학식 a로 표현될 수 있으며, 보다 구체적으로는 상기 화학식 1 내지 129로 표현될 수 있다. 상기 화합물들에 대한 구체적인 내용은 상술한 유기 발광 소자에 대하여 설명한 부분과 동일하다.
- [0470] 이하에서, 본 발명의 반응예 및 비교예를 구체적으로 예시하지만, 본 발명이 하기의 합성예 및 실시예로 한정되

는 것은 아니다. 이하의 반응예에서 중간체 화합물은 최종 생성물의 번호에 일련번호를 추가하는 방식으로 표기한다. 예를 들어, 화합물 1은 화합물 [1] 로 상기 화합물의 중간체 화합물은 [1-1] 등으로 표기한다. 본 명세서에서 화합물의 번호는 화학식의 번호로서 표기한다. 예를 들어, 화학식 1로 표시되는 화합물은 화합물 1로 표기한다.

[0471] [반응 예 1] 화합물 [1]의 합성



[0472]

[0473] 중간체 화합물 [1-1]의 제조

[0474] 2L 플라스크에 9,9-디메틸-9,10-디히드로아크리딘 50.0g(0.239mol), 브로모벤젠 37.5g(0.239mol), 팔라듐(II) 아세테이트 1.07g (4.78mmol), 포타슘 t-부톡사이드 34.45g(0.359mol), 트리-t-부틸포스핀 50% 4.64mL(9.56mmol)을 넣고 톨루엔 1L 로 4시간동안 환류 교반한다. 상온으로 냉각 후 에틸아세테이트와 포화암모늄 수용액으로 추출한다. 유기층을 무수황산 마그네슘으로 건조하여 여과한다. 여과액을 감압 농축 후 디클로로메탄과 메탄올로 흰색고체의 중간체 화합물 [1-1] 49g(72%) 을 수득하였다.

[0475] 중간체 화합물 [1-2]의 제조

[0476] 중간체 화합물 [1-1] 49g(0.172mol)을 디클로로메탄 1L로 녹인다. 엔브로모숙시니미드 67.3g (0.378mol)을 상기의 반응액에 0℃에서 천천히 첨가시킨다. 상온에서 12시간 교반 후 디클로로메탄을 더 넣고 추출하여 무수황산 마그네슘으로 건조하여 여과한다. 여과액은 감압 농축하여 실리카겔 컬럼크로마토그래프로 분리정제하여 노란색고체의 중간체 화합물 [1-2] 58g (76%)을 수득하였다.

[0477] 중간체 화합물 [1-3]의 제조

[0478] 500mL 플라스크에 중간체 화합물[1-2] 10g(22.56mmol), 2-아세틸페닐 보론산 4.44g(27.08mmol), 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐 521g(0.451mmol)과 탄산나트륨 4.68g(33.84mmol)을 넣고 1,4-디옥산 300mL와 증류수 30mL 넣고 질소분위기에서 24시간 동안 환류 교반한다. 반응 종료 후 에틸아세테이트로 추출한다. 무수황산 마그네슘으로 건조하여 여과한다. 여과액은 감압 농축하여 실리카겔 컬럼크로마토그래프로 분리정제하여 미색고체의 중간체 화합물 [1-3] 8.6g (79%)을 수득하였다.

[0480] 중간체 화합물 [1-4]의 제조

[0481] 플라스크에 중간체 화합물[1-3] 8.5g(17.62mmol) 을 무수 테트라히드로퓨란 100mL 로 녹이고 질소 분위기 0℃에서 3M 메틸마그네슘 클로라이드 17.6mL(52.86mmol)천천히 적가시킨다. 상온에서 4시간 동안 교반 후 에틸아세테이트로 추출한다. 무수황산 마그네슘으로 건조하여 여과한다. 여과액은 감압 농축하여 실리카겔 컬럼크로마토그래프로 분리정제하여 미색고체의 중간체 화합물 [1-4] 6.1g (69%)을 수득하였다.

[0483] 중간체 화합물 [1-5]의 제조

[0484] 플라스크에 중간체 화합물[1-4] 6.0g(12.04mmol) 을 무수 디클로로메탄 100mL 로 녹이고 질소 분위기 0℃에서 트리플로로메탄 술폰산 1.06mL(12.04mmol)천천히 적가시킨다. 상온에서 2시간 동안 교반 후 반응액을 포화 탄산 수소나트륨 수용액에 부어 추출한다. 유기층을 무수황산 마그네슘으로 건조하여 여과한다. 여과액은 감압 농축 하여 실리카겔 컬럼크로마토그래프로 분리정제하여 미색고체의 중간체 화합물 [1-5] 4.2g (73%)을 수득하였다.

[0486] 화합물 [1]의 제조

[0487] 250mL 플라스크에 중간체 화합물[1-5] 4.0g(8.33mmol), 4-(디페닐아미노)페닐 보론산 2.89g(9.99mol), 테트라 키스(트리페닐포스핀)팔라듐 193mg(0.167mmol)과 탄산나트륨 1.73g(12.50mol)을 넣고 1,4-디옥산 100mL와 증류 수 10mL 넣고 질소분위기에서 24시간 동안 환류 교반한다. 반응 종료 후 에틸아세테이트로 추출한다. 무수황산 마그네슘으로 건조하여 여과한다. 여과액은 감압 농축하여 실리카겔 컬럼크로마토그래프로 분리정제하여 미색고체의 목적 화합물 [1] 4.6g (85%)을 수득하였다.

[0488] 상기 반응예 1의 방법에 따라 1내지 23의 화합물을 제조하였으며, 하기 [제1표군(群)]에 그 결과를 나타내었다.

[0489] [제1표군(群)]

| 화합물 번호 | ¹ H NMR (300 MHz, CDCl ₃) (s) | MS/FAB (M ⁺) |
|--------|---|--------------------------|
| 1 | 7.77(m, 1H), 7.51(m, 1H), 7.45~7.44(m, 3H), 7.36(s, 1H), 7.28~7.26(m, 2H), 7.18~7.10(m, 7H), 6.71(m, 3H), 6.57~6.51(m, 10H), 1.62(s, 12H) | 644 |
| 2 | 7.97~7.92(m, 2H), 7.77(m, 1H), 7.51~7.43(m, 7H), 7.36(s, 1H), 7.28~7.26(m, 3H), 7.18~7.10(m, 5H), 6.88(m, 1H), 6.71(m, 2H), 6.59~6.51(m, 8H), 1.62(s, 12H) | 694 |
| 3 | 7.97~7.92(m, 4H), 7.77(m, 1H), 7.51~7.43(m, 10H), 7.36(s, 1H), 7.28~7.26(m, 4H), 7.18~7.10(m, 3H), 6.88(m, 2H), 6.71(m, 1H), 6.59~6.51(m, 6H), 1.62(s, 12H) | 744 |
| 4 | 7.78~7.64(m, 9H), 7.51(m, 1H), 7.45~7.36(m, 8H), 7.28~7.10(m, 7H), 6.71(m, 1H), 6.59~6.51(m, 6H), 1.62(s, 12H) | 744 |
| 5 | 7.97~7.92(m, 2H), 7.78~7.74(m, 3H), 7.67~7.64(m, 2H), 7.51~7.36(m, 10H), 7.28~7.10(m, 7H), 6.88(m, 1H), 6.71(m, 1H), 6.59~6.53(m, 6H), 1.62(s, 12H) | 744 |
| 6 | 7.77(m, 1H), 7.51(m, 1H), 7.45~7.44(m, 3H), 7.36(s, 1H), 7.28~7.26(m, 2H), 7.18~7.10(m, 3H), 6.76~6.71(m, 3H), 6.59~6.51(m, 6H), 6.33(d, 2H), 6.22(d, 2H), 2.24(s, 12H), 1.62(s, 12H) | 700 |
| 7 | 7.77(m, 1H), 7.51(m, 1H), 7.45~7.31(m, 27H), 6.59~6.57(m, 9H), 6.51(d, 2H), 1.62(s, 12H) | 872 |
| 8 | 7.77(m, 2H), 7.52~7.51(m, 2H), 7.45~7.26(m, 22H), 7.18(m, 2H), 6.65(m, 1H), 6.59~6.57(m, 7H), 6.51~6.48(m, 2H), 1.62(s, 18H) | 912 |
| 9 | 7.77(m, 3H), 7.52~7.51(m, 3H), 7.45~7.41(m, 11H), 7.36~7.18(m, 9H), 6.65(m, 2H), 6.59~6.57(m, 5H), 6.51~6.48(m, 3H), 1.62(s, 24H) | 952 |
| 10 | 8.45(m, 1H), 7.84~7.77(m, 3H), 7.69~7.67(m, 3H), 7.59~7.58(m, 3H), 7.51(m, 1H), 7.45~7.10(m, 14H), 6.71(m, 1H), 6.57~6.51(m, 4H), 1.62(s, 12H) | 642 |
| 11 | 8.45(m, 1H), 7.84~7.77(m, 3H), 7.69~7.67(m, 3H), 7.59~7.58(m, 3H), 7.51(m, 1H), 7.45~7.10(m, 14H), 6.71(m, 1H), 6.57~6.51(m, 4H), 1.62(s, 12H) | 718 |
| 12 | 8.45(m, 1H), 7.84~7.77(m, 5H), 7.67(m, 1H), 7.59(m, 1H), 7.51(d, 1H), 7.45~7.43(m, 3H), 7.36(s, 1H), 7.38~7.18(m, 10H), 6.71(m, 1H), 6.57~6.51(m, 4H), 1.62(s, 18H) | 758 |

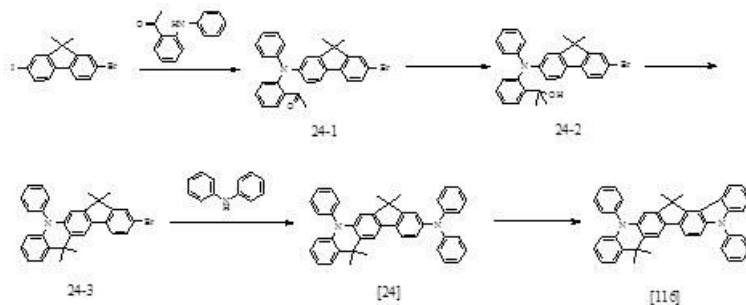
[0490]

| | | |
|----|---|------|
| 13 | 8.45(m, 1H), 8.02(m, 1H), 7.84(m, 1H), 7.77(m, 1H), 7.69(d, 2H), 7.58~7.51(m, 4H), 7.45~7.36(m, 3H), 7.26~7.10(m, 8H), 6.71(m, 1H), 6.57~6.51(m, 4H), 1.62(s, 12H) | 642 |
| 14 | 8.08(m, 1H), 7.90(d, 1H), 7.77(m, 2H), 7.69~7.67(m, 4H), 7.59~7.58(m, 3H), 7.51(m, 1H), 7.45~7.26(m, 14H), 7.18~7.10(m, 3H), 6.71(m, 1H), 6.57~6.51(m, 4H), 1.62(s, 12H) | 794 |
| 15 | 7.77(m, 1H), 7.51(m, 1H), 7.45~7.44(m, 3H), 7.36(s, 1H), 7.28~7.26(m, 2H), 7.18~7.10(m, 11H), 6.71(m, 3H), 6.59~6.53(m, 10H), 1.62(s, 12H) | 720 |
| 16 | 7.83~7.77(m, 2H), 7.67(m, 1H), 7.53~7.51(m, 3H), 7.45(m, 1H), 7.36(s, 1H), 7.28~7.26(m, 2H), 7.18~7.10(m, 7H), 6.71~6.65(m, 4H), 6.57~6.48(m, 9H), 1.62(s, 18H) | 760 |
| 17 | 7.83~7.77(m, 2H), 7.67(m, 1H), 7.53~7.51(m, 3H), 7.45(m, 1H), 7.36(s, 1H), 7.28~7.10(m, 15H), 7.01(m, 4H), 6.71~6.65(m, 4H), 6.53~6.48(m, 9H), 1.62(s, 12H) | 884 |
| 18 | 7.77(m, 1H), 7.51~7.44(m, 4H), 7.36(s, 1H), 7.28~7.01(m, 19H), 6.71(m, 3H), 6.59~6.53(m, 10H), 1.62(s, 6H) | 768 |
| 19 | 7.77(m, 2H), 7.52~7.18(m, 32H), 7.01(m, 4H), 6.59~6.57(m, 8H), 6.51~6.48(m, 2H), 1.62(s, 12H) | 1036 |
| 20 | 7.77(m, 1H), 7.51(m, 1H), 7.44~7.18(m, 34H), 7.01(m, 4H), 6.59~6.57(m, 9H), 6.51(m, 1H), 1.62(s, 6H) | 996 |
| 21 | 7.77(m, 1H), 7.65(m, 2H), 7.51~7.44(m, 4H), 7.36(s, 1H), 7.25~7.06(m, 15H), 6.71(m, 3H), 6.59~6.53(m, 10H), 1.62(s, 6H) | 766 |
| 22 | 7.77(m, 1H), 7.51(m, 1H), 7.45~7.44(m, 3H), 7.36(s, 1H), 7.28~7.26(m, 2H), 7.18~7.10(m, 15H), 6.71(m, 3H), 6.59~6.51(m, 10H), 1.62(s, 12H) | 796 |
| 23 | 7.83(d, 1H), 7.77~7.74(m, 2H), 7.67(s, 2H), 7.59(s, 1H), 7.53~7.51(m, 2H), 7.45(d, 1H), 7.36(s, 1H), 7.28~7.26(m, 2H), 7.18(t, 1H), 7.10(t, 6H), 6.70~6.71(m, 4H), 6.57~6.51(m, 9H), 1.62(s, 18H) | 877 |

[0491]

[0492]

[반응 예 2] 화합물 [24], [116]의 합성



[0493]

[0494]

중간체 화합물 [24-1]의 제조

[0495]

반응예 1과 동일한 방법으로 2-브로모-7-요오도-9,9-디메틸-9H-플로렌, 1-(2-(페닐아미노)페닐)에탄온, 팔라듐(II) 아세테이트, 포타슘 t-부톡시드, 50% 트리-t-부틸포스핀을 사용하여 중간체 화합물 [24-1]을 제조하였다.

[0497]

중간체 화합물 [24-2]의 제조

[0498]

반응예 1과 동일한 방법으로 중간체 화합물[24-1], 3M 메틸마그네슘 클로라이드를 사용하여 중간체 화합물 [24-2]을 제조하였다.

[0500]

중간체 화합물 [24-3]의 제조

[0501]

반응예 1과 동일한 방법으로 중간체 화합물[24-2], 트리플로로메탄 술폰산을 사용하여 중간체 화합물 [24-3]을

제조하였다.

[0502] 화합물 [24]의 제조

[0503] 반응예 1과 동일한 방법으로 중간체 화합물[24-3], 디페닐아민, 팔라듐(II) 아세테이트, 포타슘 t-부톡시드, 50% 트리-t-부틸포스핀을 사용하여 목적 화합물 [24]을 제조하였다.

[0504] 화합물 [116]의 제조

[0505] 플라스크에 중간체 화합물 [24] 10g(17.58mmol) 과 트리클로로알루미늄 7.03g (52.74mmol)을 무수 디클로로메탄 100mL 로 상온에서 3시간 동안 교반한다. 반응액을 1N 염산 수용액으로 추출하고 유기층을 무수황산 마그네슘으로 건조하여 여과한다. 여과액은 감압 농축하여 실리카겔 컬럼 크로마토 그래프로 분리 정제하여 흰색 고체의 목적 화합물 2.5g (25%)을 제조하였다.

[0506] 상기 반응예 2의 방법에 따라 24내지 110, 116 내지 122의 화합물을 제조하였으며, 하기 [제2표군(群)]에 그 결과를 나타내었다.

[0507] [제2표군(群)]

| 화합물 번호 | ¹ H NMR (300 MHz, CDCl ₃) (δ) | MS/FAB (M ⁺) |
|--------|---|--------------------------|
| 24 | 7.52(d, 1H), 7.36(s, 1H), 7.10(t, 6H), 6.95~6.92(m, 2H), 6.71~6.45(m, 14H), 1.62(s, 12H) | 568 |
| 25 | 7.52(d, 1H), 7.36(s, 1H), 7.10(t, 2H), 6.95~6.92(m, 2H), 6.76~6.63(m, 5H), 6.57~6.45(m, 5H), 6.33(s, 2H), 6.22(d, 2H), 2.24(s, 12H), 1.62(s, 12H) | 624 |
| 26 | 7.52(d, 1H), 7.44~7.31(m, 15H), 7.10(t, 2H), 6.95~6.92(m, 2H), 6.71~6.45(m, 12H), 1.62(s, 12H) | 720 |
| 27 | 7.97~7.92(m, 2H), 7.52~7.43(m, 4H), 7.36(s, 1H), 7.28(t, 1H), 7.10(t, 4H), 6.95~6.88(m, 3H), 6.71~6.45(m, 11H), 1.62(s, 12H) | 618 |
| 28 | 7.97~7.92(m, 2H), 7.78~7.74(m, 2H), 7.67~7.64(m, 2H), 7.52~7.36(m, 7H), 7.28~7.26(m, 2H), 7.10(t, 2H), 6.95~6.88(m, 3H), 6.71~6.45(m, 8H), 1.62(s, 12H) | 668 |
| 29 | 7.77(d, 1H), 7.52(d, 2H), 7.45~7.41(m, 7H), 7.36~7.28(m, 3H), 7.18(t, 1H), 7.10(t, 2H), 6.95~6.92(m, 2H), 6.71(t, 1H), 6.65~6.45(m, 11H), 1.62(s, 18H) | 761 |
| 30 | 7.77(d, 2H), 7.52~7.52(m, 3H), 7.45(d, 2H), 7.36(s, 1H), 7.28(t, 2H), 7.18(t, 2H), 7.10(t, 2H), 6.95~6.92(m, 2H), 6.71(t, 1H), 6.65~6.57(m, 5H), 6.53~6.45(m, 6H), 1.62(s, 24H) | 801 |
| 31 | 7.52(d, 1H), 7.44~7.31(m, 22H), 6.95~6.92(m, 2H), 6.65~6.57(m, 9H), 6.48~6.45(m, 2H), 1.62(s, 12H) | 797 |
| 32 | 7.77(d, 1H), 7.52(d, 2H), 7.45~7.28(m, 17H), 7.18(t, 1H), 6.95~6.92(m, 2H), 6.65~6.57(m, 8H), 6.48~6.45(m, 3H), 1.62(s, 18H) | 837 |
| 33 | 7.52~7.51(m, 2H), 7.44~7.26(m, 28H), 6.65(s, 1H), 6.59~6.57(m, 7H), 6.51~6.48(m, 2H), 1.62(s, 12H) | 873 |
| 34 | 7.52(d, 1H), 7.44~7.16(m, 28H), 7.01~6.92(m, 6H), 6.65~6.57(m, 9H), 6.48~6.45(m, 2H), 1.62(s, 6H) | 921 |
| 35 | 7.65(d, 2H), 7.52(d, 1H), 7.44~7.25(m, 24H), 7.09~7.06(m, 4H), 6.95~6.92(m, 2H), 6.65~6.57(m, 9H), 6.48~6.45(m, 2H), 1.62(s, 6H) | 919 |
| 36 | 7.77(d, 2H), 7.45(d, 2H), 7.36(s, 4H), 7.28(t, 2H), 7.18(t, 2H), 7.10(t, 4H), 6.71(t, 2H), 6.57~6.53(m, 8H), 1.62(s, 30H) | 841 |
| 37 | 7.97~7.92(m, 4H), 7.77(d, 2H), 7.47~7.43(m, 8H), 7.36(s, 4H), 7.28(t, 4H), 7.18(t, 2H), 6.88(d, 2H), 6.57(m, 4H), 1.62(s, 30H) | 941 |

[0508]

| | | |
|----|---|------|
| 38 | 7.78~7.74(m, 6H), 7.67~7.64(m, 4H), 7.45~7.36(m, 10H), 7.28~7.26(m, 4H), 7.18(t, 2H), 6.57(s, 4H), 1.62(s, 10H) | 941 |
| 39 | 7.77(d, 2H), 7.45~7.28(m, 22H), 7.18(t, 2H), 6.59~6.57(m, 8H), 1.62(s, 30H) | 993 |
| 40 | 7.77(d, 4H), 7.52(d, 2H), 7.45(d, 4H), 7.36(s, 4H), 7.28(t, 4H), 7.18(t, 4H), 6.65(s, 2H), 6.57(s, 4H), 6.48(d, 2H), 1.62(s, 42H) | 1073 |
| 41 | 7.77(d, 2H), 7.45(d, 2H), 7.36(s, 4H), 7.28~7.10(m, 14H), 7.01(d, 4H), 6.71(t, 2H), 6.57~6.57(s, 4H), 6.53(4, 4H), 1.62(m, 24H) | 965 |
| 42 | 7.97~7.92(m, 4H), 7.77(d, 2H), 7.47~7.43(m, 8H), 7.36(s, 4H), 7.28~7.16(m, 12H), 7.01(d, 4H), 6.88(d, 2H), 6.57(s, 4H), 1.62(s, 24H) | 1065 |
| 43 | 7.78~7.74(m, 6H), 7.67~7.64(m, 4H), 7.45~7.36(m, 10H), 7.28~7.16(m, 12H), 7.01(d, 4H), 6.57(s, 4H), 1.62(s, 24H) | 1065 |
| 44 | 7.77(d, 2H), 7.45~7.16(m, 30H), 7.01(d, 4H), 6.59(d, 4H), 6.57(s, 4H), 1.62(s, 24H) | 1117 |
| 45 | 8.07(d, 4H), 7.72~7.65(m, 6H), 7.56(s, 4H), 7.48~7.36(m, 14H), 7.21(m, 4H), 6.95(s, 2H), 6.77(s, 4H), 6.68(d, 2H), 1.68(s, 36H) | 1197 |
| 46 | 8.07(d, 2H), 7.95(m, 2H), 7.75(d, 2H), 7.56(s, 4H), 7.48~7.38(m, 4H), 7.28~7.19(m, 10H), 6.91(t, 2H), 6.77~6.73(m, 8H), 1.68(s, 24H) | 963 |
| 47 | 8.07~8.02(m, 4H), 7.97(d, 2H), 7.85(m, 2H), 7.67~7.63(m, 8H), 7.56(s, 4H), 7.48~7.38(m, 8H), 7.28~7.19(m, 4H), 7.08(m, 2H), 6.87(s, 4H), 1.68(s, 24H) | 1063 |
| 48 | 8.08~8.04(m, 6H), 7.97~7.94(m, 6H), 7.75~7.66(m, 10H), 7.59~7.38(m, 8H), 7.29~7.26(m, 4H), 6.97(s, 4H), 1.68(s, 24H) | 1063 |
| 49 | 8.07(d, 2H), 7.95(d, 2H), 7.64~7.38(m, 26H), 7.29~7.26(m, 4H), 6.99~6.97(m, 8H), 1.68(s, 24H) | 1115 |
| 50 | 8.07(d, 4H), 7.95(m, 2H), 7.72~7.65(m, 6H), 7.56(s, 4H), 7.48~7.36(m, 10H), 7.29~7.26(m, 4H), 6.95(s, 2H), 6.87(s, 4H), 6.78(d, 2H), 1.68(s, 36H) | 1195 |
| 51 | 7.97(s, 1H), 7.89~7.88(m, 2H), 7.72(d, 1H), 7.40(m, 6H), 7.25~7.22(m, 2H), 7.01~6.93(m, 6H), 6.83~6.75(m, 8H), 1.68(s, 18H) | 684 |
| 52 | 7.97(s, 1H), 7.89~7.88(m, 2H), 7.72(d, 1H), 7.64~7.61(m, 12H), 7.51(m, 2H), 7.40(t, 2H), 7.35~7.32(m, 2H), 7.11~6.75(m, 12H), 1.68(s, 18H) | 837 |

[0509]

| | | |
|----|---|------|
| 53 | 7.97(s, 1H), 7.89~7.88(m, 2H), 7.72(d, 1H), 7.64~7.61(m, 18H), 7.51(m, 3H), 7.35~7.32(m, 2H), 6.95~6.89(m, 9H), 6.78~6.75(m, 2H), 1.68(s, 18H) | 913 |
| 54 | 7.97(s, 1H), 7.89~7.88(m, 2H), 7.72~7.71(m, 2H), 7.64~7.46(m, 27H), 6.95~9.89(m, 8H), 6.71~6.68(m, 2H), 1.68(s, 18H) | 989 |
| 55 | 7.90~7.82(m, 4H), 7.63~7.41(m, 28H), 7.01~6.93(m, 6H), 6.73~6.65(m, 8H), 1.68(s, 6H) | 933 |
| 56 | 7.90~7.82(m, 4H), 7.64~7.12(m, 38H), 6.91~6.68(m, 12H), 1.68(s, 6H) | 1085 |
| 57 | 7.95~7.88(m, 2H), 7.78~7.72(m, 2H), 7.56(m, 2H), 7.45~7.40(m, 2H), 7.30(m, 6H), 6.91~6.85(m, 4H), 6.77~6.68(m, 8H), 1.68(s, 6H), 1.65(s, 6H) | 618 |
| 58 | 7.95~7.88(m, 2H), 7.78~7.72(m, 2H), 7.64~7.40(m, 25H), 6.85(s, 1H), 6.79~6.77(m, 7H), 6.68(d, 1H), 1.68(s, 6H), 1.65(s, 6H) | 847 |
| 59 | 7.97~7.92(m, 2H), 7.75~7.68(m, 2H), 7.58~7.20(m, 10H), 7.10(m, 4H), 6.88(d, 1H), 6.81~6.75(m, 3H), 6.67~6.58(m, 6H), 1.68(s, 6H), 1.65(s, 6H) | 668 |
| 60 | 7.95~7.88(m, 2H), 7.78~7.72(m, 2H), 7.56(m, 2H), 7.45~7.21(m, 18H), 6.91~6.85(m, 4H), 6.73(m, 8H), 1.68(s, 6H) | 742 |
| 61 | 7.97~7.95(m, 2H), 7.78~7.72(m, 4H), 7.64~7.38(m, 14H), 7.30(m, 2H), 6.91~6.85(m, 3H), 6.79~6.68(m, 7H), 1.68(s, 12H), 1.65(s, 6H) | 811 |
| 62 | 8.25(d, 1H), 8.04(d, 1H), 7.88~7.85(m, 2H), 7.79~7.78(m, 3H), 7.68~7.55(m, 6H), 7.45~7.30(m, 7H), 6.91(t, 1H), 6.83(s, 1H), 6.73(m, 2H), 1.68(s, 6H), 1.65(s, 6H) | 616 |
| 63 | 8.05~7.98(m, 2H), 7.88(m, 1H), 7.56(m, 3H), 7.45~7.40(m, 2H), 7.30(m, 4H), 7.15~7.12(m, 2H), 6.91~6.73(m, 9H), 6.65(m, 1H), 1.68(s, 12H), 1.65(s, 6H) | 658 |
| 64 | 7.95~7.88(m, 2H), 7.78(m, 1H), 7.56(m, 3H), 7.45~7.12(m, 18H), 6.91~6.73(m, 9H), 6.65(m, 1H), 1.68(s, 6H), 1.65(s, 6H) | 783 |
| 65 | 7.95~7.88(m, 4H), 7.78~7.72(m, 2H), 7.56(m, 2H), 7.45~7.40(m, 4H), 7.30~7.26(m, 10H), 6.91~6.85(m, 4H), 6.73~6.68(m, 8H), 1.68(s, 6H) | 740 |
| 66 | 7.95(m, 1H), 7.88~7.85(m, 3H), 7.78~7.72(m, 2H), 7.64~7.40(m, 20H), 7.30~7.26(m, 6H), 6.91~6.68(m, 10H),, 1.68(s, 6H) | 893 |

[0510]

| | | |
|----|---|-----|
| 67 | 7.77~7.65(m, 4H), 7.58(s, 1H), 7.40~7.06(m, 17H), 6.71(m, 3H), 6.53~6.52(m, 7H), 6.45(s, 1H), 6.39(d, 1H), 1.68(s, 6H) | 740 |
| 68 | 7.77~7.75(m, 2H), 7.68~7.65(m, 2H), 7.58(s, 1H), 7.41~7.06(m, 27H), 6.71(t, 1H), 6.59~6.53(m, 7H), 6.45(s, 1H), 6.39(d, 1H), 1.68(s, 6H) | 893 |
| 69 | 8.25(d, 1H), 7.84(d, 1H), 7.75~7.35(m, 13H), 7.25~7.06(m, 13H), 6.71(t, 1H), 6.65(s, 1H), 6.53(m, 2H), 1.68(s, 6H) | 738 |
| 70 | 7.75~7.65(m, 4H), 7.58(s, 1H), 7.36(m, 3H), 7.25~7.20(m, 4H), 7.10~7.06(m, 8H), 6.92(m, 2H), 6.71~6.53(m, 9H), 6.45(d, 1H), 1.68(s, 6H), 7.62(s, 6H) | 781 |
| 71 | 8.25(d, 1H), 7.87~7.65(m, 6H), 7.58(s, 1H), 7.48~7.02(m, 20H), 6.71(t, 1H), 6.57~6.53(m, 3H), 1.68(s, 6H) | 738 |
| 72 | 7.75~7.68(m, 6H), 7.58(s, 2H), 7.36~7.10(m, 18H), 6.71(t, 2H), 6.53(m, 4H), 6.47(s, 2H), 1.68(s, 12H) | 831 |
| 73 | 7.94~7.93(m, 2H), 7.5(d, 1H), 7.41~7.36(m, 4H), 7.11~7.10(m, 6H), 6.81(d, 1H), 6.71~6.65(m, 4H), 6.57~6.48(m, 8H), 1.68(s, 6H), 1.62(s, 6H) | 618 |
| 74 | 7.94~7.93(m, 2H), 7.52(d, 1H), 7.44~7.31(m, 25H), 6.81(d, 1H), 6.65(s, 1H), 6.59~6.57(m, 7H), 6.48(d, 1H), 1.68(s, 6H), 1.62(s, 6H) | 847 |
| 75 | 7.94~7.93(m, 4H), 7.52~7.36(m, 8H), 7.28(t, 1H), 7.20(m, 4H), 6.88(d, 1H), 6.81(d, 1H), 6.71~6.65(m, 3H), 6.57~6.53(m, 6H), 1.68(s, 6H), 1.62(s, 6H) | 668 |
| 76 | 7.94~7.93(m, 2H), 7.52(d, 1H), 7.41~7.36(m, 4H), 7.23~7.01(m, 16H), 6.81(d, 1H), 6.71~6.65(m, 4H), 6.57~6.53(m, 8H), 1.68(s, 6H) | 742 |
| 77 | 7.85~7.77(m, 3H), 7.52~7.28(m, 14H), 7.19~7.10(m, 4H), 7.96(d, 1H), 6.71~6.48(m, 10H), 1.68(s, 6H), 1.62(s, 12H) | 811 |
| 78 | 8.25(s, 1H), 7.85~7.83(m, 3H), 7.59~7.58(m, 2H), 7.51~7.35(m, 7H), 7.23~7.10(m, 6H), 6.98(d, 1H), 6.71(t, 1H), 6.63(d, 1H), 6.53(m, 2H), 1.68(s, 6H), 1.62(s, 6H) | 616 |
| 79 | 7.85~7.83(m, 2H), 7.51 (d, 1H), 7.36~7.35(m, 3H), 7.19~7.10(m, 5H), 6.96~6.92(m, 3H), 6.71~6.53(m, 9H), 6.45(d, 1H), 1.75(s, 6H), 1.62(s, 12H) | 658 |
| 80 | 7.85~7.83(m, 2H), 7.51 (d, 1H), 7.36~7.35(m, 3H), 7.23~6.92(m, 18H), 6.71~6.53(m, 9H), 6.45(d, 1H), 1.75(s, 6H), 1.62(s, 6H) | 783 |

[0511]

| | | |
|----|--|-----|
| 81 | 7.94~7.93(m, 2H), 7.65 (m, 2H), 7.52(d, 1H), 7.43~7.36(m, 4H), 7.25(m, 2H), 7.10~7.06 (m, 10H), 6.81(d, 1H), 6.71~6.65(m, 4H), 6.53~6.48(m, 8H), 1.68(s, 6H) | 740 |
| 82 | 7.94~7.93(m, 2H), 7.65(m, 2H), 7.52(d, 1H), 7.44~7.31(m, 20H), 7.10~7.06(m, 6H), 6.81(d, 1H), 6.71~6.48(m, 10H), 1.68(s, 6H) | 893 |
| 83 | 7.94~7.93(m, 2H), 7.77(d, 1H), 7.65(d, 1H), 7.45~7.36(m, 6H), 7.28~7.06(m, 11H), 6.81(d, 1H), 6.71(m, 3H), 6.57~6.53(m, 7H), 6.45(s, 1H), 6.39(d, 1H), 1.68(s, 6H) | 740 |
| 84 | 7.94~7.93(m, 2H), 7.77(d, 1H), 7.65(d, 1H), 7.45~7.28(m, 27H), 6.81(d, 1H), 6.71(t, 1H), 6.57~6.53(m, 7H), 6.45(s, 1H), 6.39(d, 1H), 1.68(s, 6H) | 893 |
| 85 | 8.45(d, 1H), 7.85~7.83(m, 3H), 7.65(m, 2H), 7.58~7.35(m, 9H), 7.25~7.06(m, 12H), 6.96(d, 1H), 6.71(t, 1H), 6.63(s, 1H), 6.53(m, 2H), 1.75(s, 6H) | 738 |
| 86 | 7.85~7.83(m, 2H), 7.65(m, 2H), 7.51(d, 1H), 7.36~7.35(m, 3H), 7.25~7.06(m, 11H), 6.96~6.92(m, 3H), 6.71~6.63(m, 9H), 6.55(d, 1H), 1.75(s, 6H), 1.62(s, 6H) | 780 |
| 87 | 8.45(d, 1H), 7.85~7.77(m, 5H), 7.65(d, 1H), 7.51~7.02(m, 21H), 6.71(t, 1H), 6.67~6.63(m, 3H), 1.75(s, 6H) | 738 |
| 88 | 7.85~7.83(m, 4H), 7.71(d, 2H), 7.51(d, 2H), 7.35~7.30(m, 6H), 7.19~7.10(m, 10H), 6.96(d, 2H), 6.71 (m, 2H), 6.63~6.57(m, 6H), 1.75(s, 12H) | 831 |
| 89 | 7.87(d, 1H), 7.62(d, 1H), 7.55(d, 1H), 7.46(d, 1H), 7.38~7.37(m, 1H), 7.28~7.20(m, 7H), 6.81~6.75(m, 4H), 6.67~6.58(m, 9H), 1.62(s, 18H) | 684 |
| 90 | 8.07~8.02(m, 2H), 7.87(d, 1H), 7.62~7.53(m, 5H), 7.46(d, 2H), 7.38~7.36(m, 2H), 7.28~7.20(m, 5H), 6.98(d, 1H), 6.81~6.75(m, 3H), 6.67~6.58(m, 7H), 1.62(s, 18H) | 734 |
| 91 | 8.07~8.02(m, 2H), 7.87(d, 1H), 7.62~7.53(m, 8H), 7.46(d, 2H), 7.38~7.36(m, 3H), 7.28~7.20(m, 3H), 6.98~6.96(m, 2H), 6.81~6.75(m, 2H), 6.67~6.58(m, 5H), 1.62(s, 18H) | 785 |
| 92 | 7.88~7.84(m, 5H), 7.77~7.74(m, 4H), 7.62(d, 1H), 7.55~7.46(m, 7H), 7.38~7.20(m, 6H), 6.81~6.76(m, 2H), 6.67~6.58(m, 5H), 1.62(s, 18H) | 785 |

[0512]

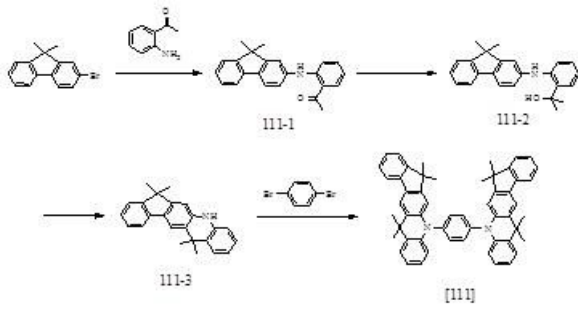
| | | |
|-----|---|------|
| 93 | 8.07~8.02(m, 2H), 7.88~7.84(m, 3H), 7.77~7.74(m, 2H), 7.62~7.46(m, 9H), 7.38~7.36(m, 3H), 7.28~7.20(m, 3H), 6.68(d, 1H), 6.81~6.76(m, 2H), 6.67~6.58(m, 5H), 1.62(s, 18H) | 785 |
| 94 | 7.87(d, 1H), 7.62(d, 1H), 7.55(d, 1H), 7.46(s, 2H), 7.38~7.20(m, 4H), 6.86~6.81(m, 4H), 6.67~6.58(m, 5H), 6.43~6.41(m, 2H), 6.32~6.30(m, 2H), 2.24(s, 12H), 1.62(s, 18H) | 741 |
| 95 | 7.87(d, 1H), 7.62~7.38(m, 26H), 7.28~7.27(m, 1H), 6.75(s, 1H), 6.69~6.67(m, 8H), 6.58(d, 1H), 1.62(s, 18H) | 913 |
| 96 | 7.87~7.85(m, 2H), 7.62~7.60(m, 2H), 7.55~7.38(m, 20H), 7.28~7.26(m, 2H), 7.65~7.64(m, 2H), 6.69~6.67(m, 6H), 6.58~6.56(m, 2H), 1.62(s, 24H) | 953 |
| 97 | 7.87~7.85(m, 3H), 7.62~7.60(m, 3H), 7.55~7.38(m, 15H), 7.28~7.26(m, 3H), 6.75~6.73(m, 3H), 6.69~6.67(m, 4H), 6.58~6.56(m, 3H), 1.62(s, 30H) | 993 |
| 98 | 8.55(d, 1H), 7.94(d, 1H), 7.87(d, 1H), 7.79(d, 1H), 7.68(s, 1H), 7.58~7.20(m, 14H), 6.81~6.80(m, 1H), 6.73(s, 1H), 6.67~6.63(m, 3H), 1.62(s, 18H) | 682 |
| 99 | 8.55(d, 1H), 7.94(d, 1H), 7.87(d, 1H), 7.79~7.77(m, 3H), 7.68~7.65(m, 3H), 7.52~7.20(m, 14H), 6.81~6.80(m, 1H), 6.73(s, 1H), 6.67~6.63(m, 3H), 1.62(s, 18H) | 758 |
| 100 | 8.55(d, 1H), 7.94(d, 1H), 7.87~7.85(m, 3H), 7.79(d, 1H), 7.68(s, 1H), 7.55~7.46(m, 5H), 7.42~7.20(m, 9H), 6.81~6.80(m, 2H), 6.73(s, 1H), 6.67~6.63(m, 3H), 1.62(s, 24H) | 799 |
| 101 | 8.55(d, 1H), 8.12(d, 1H), 7.94(d, 1H), 7.87~7.85(m, 2H), 7.63(d, 1H), 7.55~7.46(m, 5H), 7.42~7.20(m, 8H), 6.81~6.80(m, 1H), 6.71~6.63(m, 4H), 1.62(s, 18H) | 682 |
| 102 | 8.18(d, 1H), 8.00(d, 1H), 7.87~7.85(m, 3H), 7.77~7.75(m, 2H), 6.69(d, 1H), 7.55~7.46(m, 16H), 7.28~7.20(m, 3H), 6.81~6.80(m, 1H), 6.71~6.63(m, 4H), 1.62(s, 18H) | 835 |
| 103 | 7.93(d, 1H), 7.87(d, 1H), 7.77(s, 1H), 7.63(d, 1H), 7.55~7.54(m, 3H), 7.46(s, 2H), 7.38~7.20(m, 8H), 6.81~6.79(m, 3H), 6.69~6.63(m, 10H), 1.62(s, 18H) | 761 |
| 104 | 7.87(d, 1H), 7.62(d, 1H), 7.55(d, 1H), 7.46(s, 2H), 7.33~7.11(m, 28H), 6.81~6.75(m, 4H), 6.67~6.58(m, 9H), 1.62(s, 6H) | 933 |
| 105 | 7.87~7.85(m, 2H), 7.62~7.26(m, 36H), 7.11~7.05(m, 8H), 6.75~6.67(m, 8H), 6.58~6.56(m, 2H), 1.62(s, 12H) | 1201 |

[0513]

| | | |
|-----|---|------|
| 106 | 7.87(d, 2H), 7.62~7.26(m, 39H), 7.11~7.05(m, 8H), 6.75~6.67(m, 9H), 6.58(d, 1H), 1.62(s, 6H) | 1161 |
| 107 | 7.87(d, 1H), 7.75~7.71(m, 4H), 7.62(d, 1H), 7.55(d, 1H), 7.46(s, 2H), 7.38~7.16(m, 20H), 6.81~6.75(m, 4H), 6.67~6.58(m, 9H), 1.62(s, 6H) | 929 |
| 108 | 7.87(d, 1H), 7.75~7.71(m, 4H), 7.62(d, 1H), 7.54~7.16(m, 33H), 6.81~6.58(m, 11H), 1.62(s, 6H) | 1081 |
| 109 | 7.93(d, 1H), 7.87(d, 1H), 7.77(s, 1H), 7.63(d, 1H), 7.55~7.54(m, 3H), 7.46(s, 2H), 7.38~7.24(m, 12H), 6.81~6.79(m, 3H), 6.69~6.63(m, 10H), 1.62(s, 18H) | 837 |
| 110 | 7.93~7.92(m, 2H), 7.87(d, 1H), 7.77(s, 2H), 7.63~7.62(m, 3H), 7.55(d, 1H), 7.46(s, 2H), 7.38~7.37(m, 1H), 7.28~7.20(m, 7H), 6.81~6.75(m, 4H), 6.67~6.58(m, 9H), 1.62(s, 24H) | 877 |
| 116 | 8.56(d, 1H), 7.95(d, 1H), 7.78(d, 1H), 7.68(s, 1H), 7.56~7.47(m, 6H), 7.31~7.23(m, 4H), 7.05~7.02(m, 2H), 6.79~6.74(m, 3H), 6.61~6.56(m, 3H), 1.72(s, 12H) | 566 |
| 117 | 8.54(d, 1H), 7.94(d, 1H), 7.80~7.76(m, 3H), 7.69~7.65(m, 3H), 7.56~7.49(m, 11H), 7.43~7.40(m, 2H), 7.29~7.24(m, 2H), 7.05~7.01(m, 2H), 6.73~6.68(m, 4H), 6.55(d, 1H), 1.72(s, 12H) | 718 |
| 118 | 8.55(d, 1H), 7.93~7.90(m, 2H), 7.81~7.78(m, 3H), 7.67~7.62(m, 4H), 7.56~7.50(m, 6H), 7.40~7.37(m, 2H), 7.31~7.26(m, 3H), 7.05~7.02(m, 2H), 6.76~6.72(m, 3H), 6.58~6.55(m, 2H), 1.72(s, 18H) | 758 |
| 119 | 8.54(d, 1H), 7.93~7.88(m, 3H), 7.78(d, 1H), 7.68(s, 1H), 7.55~7.48(m, 9H), 7.42~7.39(m, 3H), 7.32~7.27(m, 3H), 7.05~7.01(m, 2H), 6.73~6.68(m, 4H), 6.55(d, 1H), 1.72(s, 18H) | 758 |
| 120 | 8.56(d, 1H), 7.92~7.88(m, 3H), 7.78~7.74(m, 3H), 7.67(s, 1H), 7.54~7.49(m, 9H), 7.42~7.39(m, 3H), 7.34~7.28(m, 5H), 7.18~7.14(m, 4H), 7.05~7.02(m, 2H), 6.72~6.69(m, 4H), 6.54(d, 1H), 1.72(s, 12H) | 880 |
| 121 | 8.55(d, 1H), 7.94(d, 1H), 7.76~7.68(m, 6H), 7.56~7.50(m, 11H), 7.42~7.39(m, 2H), 7.32~7.25(m, 8H), 7.12~7.03(m, 6H), 6.72~6.68(m, 4H), 6.55(d, 1H), 1.72(s, 6H) | 842 |
| 122 | 8.55(d, 1H), 7.94(d, 1H), 7.78~7.69(m, 8H), 7.55~7.50(m, 11H), 7.43~7.41(m, 2H), 7.31~7.21(m, 8H), 7.04~7.00(m, 2H), 6.72~6.68(m, 4H), 6.54(d, 1H), 1.72(s, 6H) | 840 |

[0514]

[0515] [반응 예 3] 화합물 [111]의 합성



[0516]

[0517] 중간체 화합물 [111-1]의 제조

[0518] 반응예 1과 동일한 방법으로 2-브로모-9,9-디메틸-9H-플로렌, 2-아미노아세트페논, 팔라듐(II) 아세테이트, 포타슘 t-부톡시드, 50% 트리-t-부틸포스핀을 사용하여 중간체 화합물 [111-1]을 제조하였다.

[0520] 중간체 화합물 [111-2]의 제조

[0521] 반응예 1과 동일한 방법으로 중간체 화합물[24-1], 3M 메틸마그네슘 클로라이드를 사용하여 중간체 화합물 [111-2]을 제조하였다.

[0523] 중간체 화합물 [111-3]의 제조

[0524] 반응예 1과 동일한 방법으로 중간체 화합물[24-2], 트리플로로메탄 술폰산을 사용하여 중간체 화합물 [111-3]을 제조하였다.

[0525] 화합물 [111]의 제조

[0526] 반응예 1과 동일한 방법으로 중간체 화합물[24-3], 1,4-디브로모벤젠, 팔라듐(II) 아세테이트, 포타슘 t-부톡시드, 50% 트리-t-부틸포스핀을 사용하여 목적 화합물 [111]을 제조하였다.

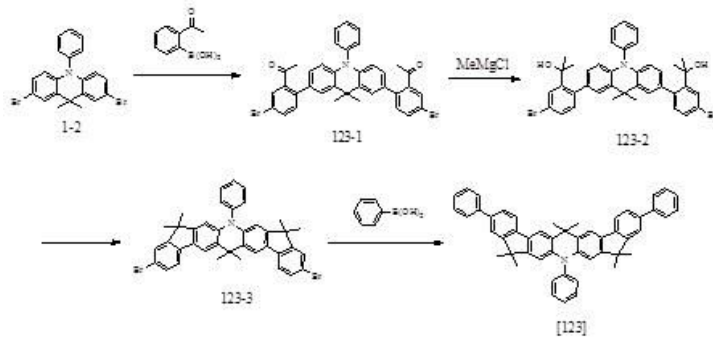
[0527] 상기 반응예 3의 방법에 따라 111내지 115, 126내지129의 화합물을 제조하였으며, 하기 [제3표]에 그 결과를 나타내었다.

[0528] [제3표]

| 화합물 번호 | ¹ H NMR (300 MHz, CDCl ₃) (δ) | MS/FAB (M ⁺) |
|-----------|---|-----------------------------|
| 111 | 7.88~7.85(m, 2H), 7.54~7.52(m, 2H), 7.46(s, 2H), 7.39~7.36(m, 2H), 7.29~7.27(m, 2H), 7.06~7.01(m, 4H), 6.72~6.67(m, 4H), 6.56~6.53(m, 4H), 1.72(s, 24H) | 724 |
| 112 | 7.88~7.86(m, 2H), 7.56~7.52(m, 6H), 7.45(s, 2H), 7.38~7.36(m, 2H), 7.29~7.27(m, 2H), 7.06~7.01(m, 4H), 6.74~6.67(m, 8H), 6.56~6.53(m, 2H), 1.72(s, 24H) | 800 |
| 113 | 7.88~7.86(m, 2H), 7.62~7.57(m, 4H), 7.46(s, 2H), 7.38~7.35(m, 2H), 7.29~7.26(m, 2H), 7.06~7.00(m, 4H), 6.76~6.72(m, 4H), 6.68~6.65(m, 2H), 6.59~6.55(m, 4H), 1.72(s, 30H) | 840 |
| 114 | 7.87~7.85(m, 2H), 7.61~7.56(m, 4H), 7.45(s, 2H), 7.37~7.26(m, 10H), 7.12~7.03(m, 8H), 6.76~6.71(m, 4H), 6.68~6.65(m, 2H), 6.59~6.54(m, 4H), 1.72(s, 24H) | 964 |
| 115 | 7.88~7.86(m, 2H), 7.76~7.73(m, 2H), 7.61~7.56(m, 4H), 7.46(s, 2H), 7.36~7.29(m, 6H), 7.20~7.15(m, 4H), 7.06~7.01(m, 4H), 6.76~6.72(m, 4H), 6.67~6.64(m, 2H), 6.59~6.54(m, 4H), 1.72(s, 24H) | 962 |
| 126 | 7.88~7.85(m, 2H), 7.56~7.53(m, 6H), 7.46(s, 2H), 7.39~7.36(m, 2H), 7.27~7.21(m, 6H), 6.82~6.79(m, 2H), 6.68~6.63(m, 10H), 1.72(s, 18H) | 760 |
| 127 | 8.55(d, 1H), 7.92~7.87(m, 4H), 7.74~7.71(m, 2H), 7.57~7.50(m, 8H), 7.47~7.43(m, 3H), 7.35~7.26(m, 6H), 6.69~6.65(m, 4H), 1.72(s, 18H) | 758 |
| 128 | 8.56(d, 1H), 7.93~7.88(m, 4H), 7.80~7.77(m, 3H), 7.69~7.66(m, 3H), 7.56~7.51(m, 8H), 7.47~7.43(m, 3H), 7.36~7.25(m, 6H), 6.70~6.65(m, 4H), 1.72(s, 18H) | 834 |
| 129 | 7.88~7.86(m, 4H), 7.56~7.53(m, 8H), 7.46(m, 4H), 7.39~7.36(m, 4H), 7.29~7.25(m, 4H), 6.71~6.64(m, 8H), 1.72(s, 36H) | 1032 |

[0529]

[0530] [반응 예 4] 화합물 [123]의 합성



[0531]

[0532] 중간체 화합물 [123-1]의 제조

[0533] 반응예 1과 동일한 중간체 화합물[1-2] 2-아세틸페닐 보론산, 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐, 탄산나트륨, 1,4-디옥산, 물을 사용하여 미색고체의 중간체 화합물 [123-1]을 제조 하였다.

[0534] 중간체 화합물 [123-2]의 제조

[0535] 반응예 1과 동일한 방법으로 중간체 화합물[123-1], 3M 메틸마그네슘 클로라이드 2.5당량을 사용하여 중간체 화합물 [123-2]을 제조하였다.

[0537] 중간체 화합물 [123-3]의 제조

[0538] 반응예 1과 동일한 방법으로 중간체 화합물[123-2], 트리플로로메탄 술폰산을 사용하여 중간체 화합물 [123-

3]을 제조하였다.

[0539] 화합물 [123]의 제조

[0540] 반응예 1과 동일한 중간체 화합물[123-3] 페닐 보론산, 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐, 탄산나트륨, 1,4-디옥산, 물을 사용하여 미색고체의 중간체 화합물 [124]을 제조하였다.

[0541] 상기 반응예 4의 방법에 따라 123내지 125의 화합물을 제조하였으며, 하기 [제4표] 에 그 결과를 나타내었다

[0542] [제4표]

| 화합물 번호 | ¹ H NMR (300 MHz, CDCl ₃) (δ) | MS/FAB (M ⁺) |
|--------|--|--------------------------|
| 123 | 7.94~7.91(m, 2H), 7.78~7.75(m, 2H), 7.64~7.61(m, 2H), 7.54~7.50(m, 8H), 7.45~7.41(m, 4H), 7.21~7.18(m, 2H), 6.82(dd, 1H), 6.67~6.62(m, 4H), 1.72(s, 18H) | 669 |
| 124 | 7.93~7.90(m, 2H), 7.78(s, 2H), 7.64~7.61(m, 2H), 7.56~7.51(m, 14H), 7.46~7.41(m, 5H), 6.69~6.65(m, 4H), 1.72(s, 18H) | 745 |
| 125 | 7.63~7.60(m, 2H), 7.55~7.51(m, 6H), 7.45~7.41(m, 3H), 7.22~7.18(m, 8H), 6.81~6.76(m, 6H), 6.69~6.62(m, 14H), 1.72(s, 18H) | 927 |

[0543]

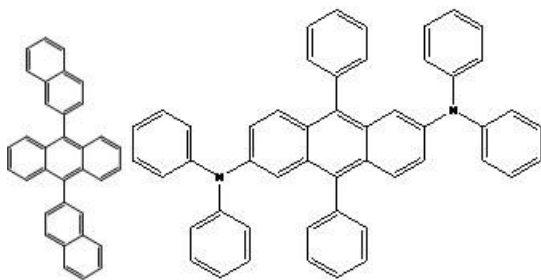
[0544] 비교예 1

[0545] 하기 화학식 a로 표시되는 화합물 a를 형광 녹색 호스트로 사용하고, 하기 화학식 b로 표시되는 화합물 b를 형광 녹색 도판트로 사용하고, 2-TNATA(4,4',4''-tris(N-naphthalen-2-yl)-N-phenylamino)-triphenylamine)을 정공주입층 물질로 사용하고, α-NPD(N,N'-di(naphthalene-1-yl)-N,N'-diphenylbenzidine)을 정공수송층 물질로 사용하여, 다음과 같은 구조를 갖는 유기발광소자를 제작하였다: ITO/2-TNATA(80nm)/α-NPD(30nm)/화합물 a+화합물b(30nm)/Alq3(30nm)/LiF(0.5nm)/Al(60nm).

[0546] 애노드는 코닝(Corning)사의 15Ω/cm² (1000Å) ITO 유리 기판을 50mm x 50mm x 0.7mm크기로 잘라서 아세톤 이소프로필 알콜과 순수물 속에서 각 15분 동안 초음파 세정한 후, 30분 동안 UV 오존 세정하여 사용하였다. 상기 기판 상부에 2-TANATA를 진공 증착하여 80nm 두께의 정공주입층을 형성하였다. 상기 정공주입층 상부에, α-NPD를 진공 증착하여 30nm 두께의 정공수송층을 형성하였다. 상기 정공수송층 상부에 화학식 a로 표시되는 화합물 a 및 화학식 b로 표시되는 화합물 b(3% 도핑)를 진공 증착하여 30nm두께의 발광층을 형성하였다. 이후, 상기 발광층 상부에 Alq3 화합물을 30nm의 두께로 진공증착하여 전자수송층을 형성하였다. 상기 전자수송층 상부에 LiF 0.5nm(전자주입층)과 Al 60nm(캐소드)를 순차적으로 진공증착하여, 표 1에 표시된 바와 같은 유기발광소자를 제조하였다. 이를 비교샘플 1이라고 한다.

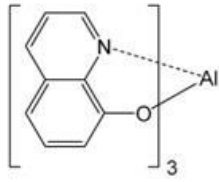
[0547] <화학식 a>

<화학식 b>



[0548]

[0549] <화학식 c>



[0550]

[0551] 실시예 1 ~ 129

[0552] 상기 비교예 1 중, 정공수송층 화합물로서 화합물 C(α-NPD) 대신 상기 합성예에 개시된 화학식 1~129로 표시되는 화합물 1~129를 정공수송층 화합물로 각각 이용한 것을 제외하고는 상기 비교예 1과 동일한 방법으로 ITO/2-TNATA(80nm)/화합물 1~129 중 하나 (30nm)/화합물a+화합물b(30nm)/Alq3(30nm)/LiF(0.5nm)/Al(60nm)의 구조를 갖는 유기발광소자를 제조하였다. 이를 각각 샘플 1~129 라고 한다.

[0553] 평가예 1: 비교샘플 1 및 샘플 1~129의 발광 특성 평가

[0554] 비교샘플 1 및 샘플 1~129에 대하여, Keithley SMU 235, PR650를 이용하여 발광휘도, 발광효율, 발광피크를 각각 평가하여, 그 결과를 하기 [제5표군(群)]에 나타내었다. 상기 샘플들은 512~526nm 범위에서 녹색 발광피크 값을 보여주었다.

[0555] [제5표군(群)]

| 샘플 No. | 정공수송층 화합물 No. | 휘도 [cd/m ²] | 효율 [cd/A] | 발광피크 [nm] |
|--------|---------------|-------------------------|-----------|-----------|
| 비교샘플 1 | c | 2032 | 20.3 | 516 |
| 1 | 1 | 1717 | 17.2 | 522 |
| 2 | 2 | 1717 | 17.2 | 518 |
| 3 | 3 | 2286 | 22.9 | 520 |
| 4 | 4 | 1854 | 18.5 | 520 |
| 5 | 5 | 2256 | 22.6 | 523 |
| 6 | 6 | 2195 | 22.0 | 513 |
| 7 | 7 | 1802 | 18.0 | 524 |
| 8 | 8 | 2059 | 20.6 | 520 |
| 9 | 9 | 2796 | 28.0 | 515 |
| 10 | 10 | 2825 | 28.3 | 525 |
| 11 | 11 | 2674 | 26.7 | 513 |
| 12 | 12 | 2093 | 20.9 | 523 |
| 13 | 13 | 1806 | 18.1 | 519 |
| 14 | 14 | 2734 | 27.3 | 520 |
| 15 | 15 | 2395 | 24.0 | 514 |
| 16 | 16 | 2760 | 27.6 | 514 |
| 17 | 17 | 2632 | 26.3 | 524 |
| 18 | 18 | 1850 | 18.5 | 525 |
| 19 | 19 | 2788 | 27.9 | 516 |
| 20 | 20 | 2201 | 22.0 | 514 |
| 21 | 21 | 2013 | 20.1 | 523 |
| 22 | 22 | 1668 | 16.7 | 513 |
| 23 | 23 | 1913 | 19.1 | 514 |
| 24 | 24 | 1844 | 18.4 | 523 |
| 25 | 25 | 2566 | 25.7 | 512 |
| 26 | 26 | 2885 | 28.9 | 523 |
| 27 | 27 | 2536 | 25.4 | 515 |
| 28 | 28 | 1752 | 17.5 | 517 |
| 29 | 29 | 2287 | 22.9 | 525 |

[0556]

| | | | | |
|----|----|------|------|-----|
| 30 | 30 | 2574 | 25.7 | 512 |
| 31 | 31 | 2874 | 28.7 | 518 |
| 32 | 32 | 2365 | 23.7 | 523 |
| 33 | 33 | 2495 | 25.0 | 525 |
| 34 | 34 | 2271 | 22.7 | 515 |
| 35 | 35 | 2223 | 22.2 | 518 |
| 36 | 36 | 2664 | 26.6 | 522 |
| 37 | 37 | 2146 | 21.5 | 524 |
| 38 | 38 | 2743 | 27.4 | 517 |
| 39 | 39 | 2762 | 27.6 | 514 |
| 40 | 40 | 2858 | 28.6 | 517 |
| 41 | 41 | 2121 | 21.2 | 519 |
| 42 | 42 | 2598 | 26.0 | 520 |
| 43 | 43 | 2017 | 20.2 | 515 |
| 44 | 44 | 2342 | 23.4 | 520 |
| 45 | 45 | 2016 | 20.2 | 524 |
| 46 | 46 | 2012 | 20.1 | 519 |
| 47 | 47 | 2643 | 26.4 | 520 |
| 48 | 48 | 2296 | 23.0 | 520 |
| 49 | 49 | 2356 | 23.6 | 520 |
| 50 | 50 | 2724 | 27.2 | 518 |
| 51 | 51 | 2805 | 28.1 | 520 |
| 52 | 52 | 2302 | 23.0 | 522 |
| 53 | 53 | 1834 | 18.3 | 526 |
| 54 | 54 | 1883 | 18.8 | 524 |
| 55 | 55 | 2264 | 22.6 | 519 |
| 56 | 56 | 2719 | 27.2 | 526 |
| 57 | 57 | 2073 | 20.7 | 523 |
| 58 | 58 | 2682 | 26.8 | 518 |
| 59 | 59 | 1663 | 16.6 | 516 |
| 60 | 60 | 2715 | 27.2 | 519 |
| 61 | 61 | 2864 | 28.6 | 517 |
| 62 | 62 | 2808 | 28.1 | 514 |
| 63 | 63 | 2687 | 26.9 | 524 |
| 64 | 64 | 1920 | 19.2 | 523 |
| 65 | 65 | 1956 | 19.6 | 515 |

[0557]

| | | | | |
|-----|-----|------|------|-----|
| 66 | 66 | 2650 | 26.5 | 519 |
| 67 | 67 | 2072 | 20.7 | 520 |
| 68 | 68 | 2063 | 20.6 | 521 |
| 69 | 69 | 2109 | 21.1 | 518 |
| 70 | 70 | 2474 | 24.7 | 512 |
| 71 | 71 | 2881 | 28.8 | 520 |
| 72 | 72 | 1777 | 17.8 | 526 |
| 73 | 73 | 1963 | 19.6 | 520 |
| 74 | 74 | 1823 | 18.2 | 516 |
| 75 | 75 | 2840 | 28.4 | 524 |
| 76 | 76 | 2503 | 25.0 | 523 |
| 77 | 77 | 2291 | 22.9 | 512 |
| 78 | 78 | 2581 | 25.8 | 516 |
| 79 | 79 | 1766 | 17.7 | 524 |
| 80 | 80 | 2875 | 28.8 | 512 |
| 81 | 81 | 2380 | 23.8 | 512 |
| 82 | 82 | 2755 | 27.6 | 516 |
| 83 | 83 | 1959 | 19.6 | 519 |
| 84 | 84 | 1837 | 18.4 | 513 |
| 85 | 85 | 1785 | 17.9 | 516 |
| 86 | 86 | 2803 | 28.0 | 515 |
| 87 | 87 | 2406 | 24.1 | 519 |
| 88 | 88 | 1746 | 17.5 | 525 |
| 89 | 89 | 2534 | 25.3 | 516 |
| 90 | 90 | 2678 | 26.8 | 512 |
| 91 | 91 | 1782 | 17.8 | 519 |
| 92 | 92 | 2312 | 23.1 | 519 |
| 93 | 93 | 2639 | 26.4 | 524 |
| 94 | 94 | 1917 | 19.2 | 518 |
| 95 | 95 | 1811 | 18.1 | 517 |
| 96 | 96 | 1622 | 16.2 | 524 |
| 97 | 97 | 2004 | 20.0 | 512 |
| 98 | 98 | 2324 | 23.2 | 521 |
| 99 | 99 | 2332 | 23.3 | 512 |
| 100 | 100 | 2255 | 22.6 | 517 |
| 101 | 101 | 1768 | 17.7 | 524 |

[0558]

| | | | | |
|-----|-----|------|------|-----|
| 102 | 102 | 2017 | 20.2 | 526 |
| 103 | 103 | 2349 | 23.5 | 525 |
| 104 | 104 | 1908 | 19.1 | 513 |
| 105 | 105 | 1692 | 16.9 | 526 |
| 106 | 106 | 1844 | 18.4 | 525 |
| 107 | 107 | 2263 | 22.6 | 518 |
| 108 | 108 | 1648 | 16.5 | 524 |
| 109 | 109 | 2177 | 21.8 | 521 |
| 110 | 110 | 1969 | 19.7 | 512 |
| 111 | 111 | 1771 | 17.7 | 512 |
| 112 | 112 | 2367 | 23.7 | 516 |
| 113 | 113 | 2116 | 21.2 | 519 |
| 114 | 114 | 2171 | 21.7 | 525 |
| 115 | 115 | 2655 | 26.6 | 515 |
| 116 | 116 | 2580 | 25.8 | 524 |
| 117 | 117 | 1969 | 19.7 | 524 |
| 118 | 118 | 2229 | 22.3 | 521 |
| 119 | 119 | 1943 | 19.4 | 519 |
| 120 | 120 | 2135 | 21.4 | 517 |
| 121 | 121 | 1868 | 18.7 | 512 |
| 122 | 122 | 2740 | 27.4 | 520 |
| 123 | 123 | 2272 | 22.7 | 524 |
| 124 | 124 | 1754 | 17.5 | 525 |
| 125 | 125 | 1681 | 16.8 | 513 |
| 126 | 126 | 1615 | 16.2 | 521 |
| 127 | 127 | 2100 | 21.0 | 513 |
| 128 | 128 | 1971 | 19.7 | 519 |
| 129 | 129 | 2426 | 24.3 | 520 |

[0559]

[0560] 상기 [제5표군(群)]에 보여지는 바와 같이 샘플 1 ~129중에 상당수는 비교샘플 1에 비하여 향상된 발광 특성을

나타내었다.

[0561] 이상의 설명에서 통상의 공지된 기술을 생략되어 있으나, 당업자라면 용이하게 이를 추측 및 추론하고 재현할 수 있다.

| | | | |
|---------------|---|---------|------------|
| 专利名称(译) | 有机发光化合物和使用其的有机光子器件 | | |
| 公开(公告)号 | KR1020130014476A | 公开(公告)日 | 2013-02-07 |
| 申请号 | KR1020120152374 | 申请日 | 2012-12-24 |
| 申请(专利权)人(译) | 氛围有限公司凯 | | |
| 当前申请(专利权)人(译) | 氛围有限公司凯 | | |
| [标]发明人 | KIM BOK YOUNG 김복영 AHN JUNG BOK 안중복 LEE JEA SUNG 이재성 AHN DO HWAN 안도환 KANG JI SOUNG 강지승 PARK NO GIL 박노길 HAN KEUN HEE 한근희 | | |
| 发明人 | 김복영 안중복 이재성 안도환 강지승 박노길 한근희 | | |
| IPC分类号 | C09K11/06 H01L51/50 | | |
| CPC分类号 | H01L51/006 H01L51/0072 Y02E10/50 | | |
| 代理人(译) | 李明博译 | | |
| 优先权 | 1020110005580 2011-01-19 KR | | |
| 外部链接 | Espacenet | | |

摘要(译)

本发明涉及有机发光器件和用于其中的有机发光化合物。并且具有优异的发光效率，实现发光亮度的有机发光装置，色纯度和发光寿命以及用于该太阳能发电的光学装置和由此使用的光活性化合物中使用的有机发光化合物尤其是茚并吡啶（茚并吡啶）基团衍生物和使用其的有机发光器件更具体地开发，并且可以像第二电极和电子传输层之间的所有有机层那样多边形使用的材料（ETM），发光层（EML），空穴传输层（HTM）等，开发出第一电极。可以最大化作为性能改善的能力，例如降低效率增加和驱动电压以及OLED材料。

