(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 공개특허공보(A)

(11) 공개번호 10-2014-0116043
(43) 공개일자 2014년10월01일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)
C09K 11/06 (2006.01) *C07D 495/04* (2006.01)
H01L 51/50 (2006.01)
(21) 출원번호 10-2014-0104378(분할)
(22) 출원일자 2014년08월12일
심사청구일자 2014년08월12일
(62) 원출원 특허 10-2013-0057908
원출원일자 2013년05월22일
심사청구일자 2014년03월12일
(30) 우선권주장
1020110038136 2011년04월25일 대한민국(KR)

(71) 출원인
(주)씨에스엘쏠라
경기도 성남시 중원구 갈마치로 176 (상대원동)
(72) 발명자
박노길
경기도 성남시 중원구 상대원동 510-9
한근희
경기도 성남시 중원구 상대원동 510-9
(뒷면에 계속)
(74) 대리인
특허법인 대아

전체 청구항 수 : 총 6 항

(54) 발명의 명칭 **유기발광 화합물 및 이를 이용한 유기 광소자**

(57) 요 약

본 발명은 유기발광 화합물 및 이를 이용한 유기 광소자에 관한 것으로서, 보다 상세하게는 유기발광 화합물로 디벤조티오펜계 유도체를 개발하여 인광 Host 물질로 우수한 전하수송 특성을 가지며 Dopant의 흡수 Spectrum과의 Overlap이 잘 되는 유기발광 화합물을 제시하고, 이를 이용하여 향상된 발광 효율과 저전압 구동 그리고 우수한 색발현률을 구현한 유기 발광 소자 또는 태양광 발전용 광소자에 관한 것이다.

(72) 발명자
안중복
경기도 성남시 중원구 상대원동 510-9

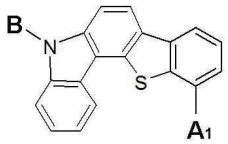
김복영
경기도 용인시 상현동 상현마을 831번지 쌍용2차 218-60

특허청구의 범위

청구항 1

하기 화학식 F4로 표시되는 유기 광화합물:

<화학식 F4>



상기 화학식 F4에서

A1 및 B는 각각 독립적으로 H, D, F, C1~C40의 알킬기, C6~C40의 아릴기, C5~C40의 헤테로아릴기, C6~C40의 아릴옥시기, C1~C40의 알킬옥시기, C6~C40의 아릴아미노기, C12~C40의 디아릴아미노기, C7~C40의 아릴알킬기, C3~C40의 시클로알킬기 및 C3~C40의 헤테로시클로알킬기로 이루어진 군에서 선택되거나; 또는 인접하는 기와 축합(fused) 지방족 고리, 축합 방향족 고리, 축합 헤테로지방족 고리 또는 축합 헤테로방향족 고리를 형성하는 기이다.

청구항 2

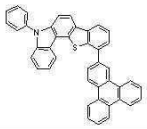
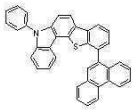
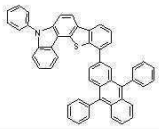
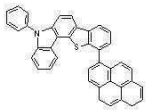
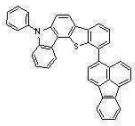
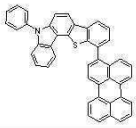
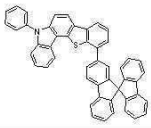
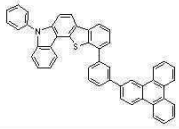
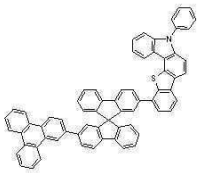
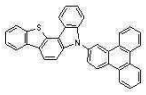
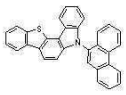
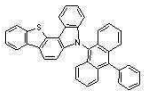
제 1 항에 있어서,

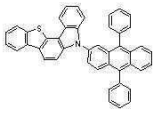
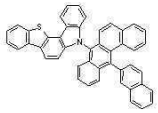
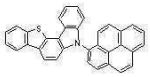
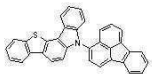
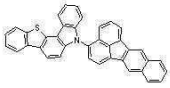
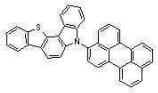
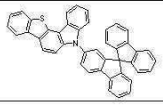
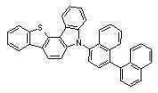
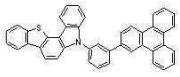
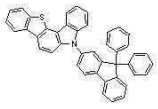
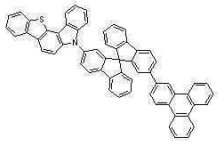
상기 A1 및 B 중 적어도 하나는 C6~C40의 아릴기, C5~C40의 헤테로아릴기, C6~C40의 아릴옥시기, C1~C40의 알킬옥시기, C6~C40의 아릴아미노기, C12~C40의 디아릴아미노기, C7~C40의 아릴알킬기, C3~C40의 시클로알킬기 및 C3~C40의 헤테로시클로알킬기로 이루어진 군에서 선택되거나; 또는 인접하는 기와 축합(fused) 지방족 고리, 축합 방향족 고리, 축합 헤테로지방족 고리 또는 축합 헤테로방향족 고리를 형성하는 기인 것을 특징으로 하는 유기 광화합물.

청구항 3

제 1 항에 있어서,

하기 화학식 77 내지 103 중 어느 하나로 표시되는 유기 광화합물.

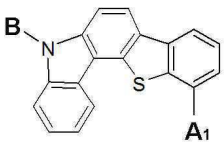
77		78	
79		80	
81		82	
83		84	
85		86	
87		88	
89		90	
91		92	

93		94	
95		96	
97		98	
99		100	
101		102	
103			

청구항 4

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

A1 및 B는 각각 독립적으로 H, D, F, C1~C40의 알킬기, C6~C40의 아릴기, C5~C40의 헤테로아릴기, C6~C40의 아릴옥시기, C1~C40의 알킬옥시기, C6~C40의 아릴아미노기, C12~C40의 디아릴아미노기, C7~C40의 아릴알킬기, C3~C40의 시클로알킬기 및 C3~C40의 헤테로시클로알킬기로 이루어진 군에서 선택되거나; 또는 인접하는 기와 축합(fused) 지방족 고리, 축합 방향족 고리, 축합 헤테로지방족 고리 또는 축합 헤테로방향족 고리를 형성하는 기이다.

청구항 5

제 4 항에 있어서,

상기 A1 및 B 중 적어도 하나는 C6~C40의 아릴기, C5~C40의 헤테로아릴기, C6~C40의 아릴옥시기, C1~C40의 알킬옥시기, C6~C40의 아릴아미노기, C12~C40의 디아릴아미노기, C7~C40의 아릴알킬기, C3~C40의 시클로알킬기 및 C3~C40의 헤테로시클로알킬기로 이루어진 군에서 선택되거나; 또는 인접하는 기와 축합(fused) 지방족 고리, 축합 방향족 고리, 축합 헤테로지방족 고리 또는 축합 헤테로방향족 고리를 형성하는 기인 것을 특징으로 하는 유기 광소자.

청구항 6

제 4 항에 있어서,

상기 유기막은 발광층이고, 상기 화학식 F4의 유기 광화합물이 호스트 재료 또는 도판트 재료로서 포함되거나; 또는 상기 유기막은 전자수송층이고, 상기 화학식 F4의 유기 광화합물이 전자수송층 재료로서 포

함된 유기 광소자.

명 세 서

기 술 분 야

[0001] 본 발명은 유기발광 화합물 및 이를 이용한 유기 광소자에 관한 것으로서, 보다 상세하게는 유기발광 화합물로 디벤조티오펜계 유도체를 개발하여 인광 Host 물질로 우수한 전하수송 특성을 가지며 Dopant의 흡수 Spectrum과의 Overlap이 잘 되는 유기발광 화합물을 제시하고, 이를 이용하여 향상된 발광 효율과 저전압 구동 그리고 우수한 색발현률을 구현한 유기 발광 소자 또는 태양광 발전용 광소자에 관한 것이다.

배 경 기 술

[0002] 1987년 Kodak사의 Tang등이 발광층과 전하수송층으로 각각 Alq_3와 TPD라는 이중층 저분자 유기물 박막을 형성하여 효율과 안정성이 개선된 녹색의 발광현상을 발견한 이후로 저분자 OLED 디스플레이의 개발이 급속도로 빠르게 이루어졌다. 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 Injedtion Layer, HIL)이 도입되었고, Cathode와 전자주입층 재료로 Al:Li이 개발되고 LiF 같은 재료가 개발되면서 구조가 복잡해지게 되었다. 이에 따라서 전기광학적인 특성도 효율과 구동 전압이 혁신적으로 개선이 이루어지게 되었다.

[0003] 인광구조는 일반적으로 양극(Anode), 정공주입층, 정공수송층, 발광층, 전자수송층(Electron Transfer Layer, ETL), 전자 주입층(Electro Iniection Layer, EIL), 그리고 음극(Cathode)으로 구성되어 있으며 추가로 정공저지층(Hole Blocking Layer, HBL) 층이 도입이 되었으나 반드시 꼭 필요한 층은 아닌 것으로 알려져 있다.

[0004] 발광층 물질은 크게 형광소자용 발광재료와 인광소자용 발광재료로 구분되며 다시 발광색에 따라 구분이 된다. 또 발광층 재료는 Host용 물질과 Dopant용 물질로 나누어진다. Host 또는 Dopant 물질만으로도 빛을 낼 수 있으나 자체 Quenching 현상으로 효율 및 휘도가 매우 낮아지고, 각각 분자들끼리 Self-aggregation 현상 때문에 각 분자의 고유한 특성이 아닌 Excimer 특성이 함께 나타나기 때문에 발광효율 및 소자안정성을 높이기 위해서는 Host에 Dopant를 도핑하여 발광층을 만든다.

[0005] 인광 호스트 재료로는 정공이동성과 전자이동성이 있는 양극성물질인 CBP가 Red, Green 용으로 현재까지 널리 사용되었다. 하지만 최근에는 전자수송성이 있는 Balq 또는 그것과 비슷한 종류의 Al착제 물질들이 인광 Red Host로 유용하다고 알려져 있다. 그리고 Blue 인광 Host용 재료로서 CBP의 유도체, Artsi계 무질들이 특성이 우수하다고 알려져 있다.

[0006] Host 재료에 필요한 특성으로는 먼저 전하수송 특성이 우수해야 한다. 발광층에서도 정공이나 전자를 이동시켜야 하기 때문에 적절한 이동도가 꼭 필요하다. 또 Host 재료는 에너지를 Dopant에 전달해야 되기 때문에 Host의 발광 Spectrum이 Dopant의 흡수 Spectrum과 잘 Overlap이 되어야 에너지 Transfer가 잘 일어난다. 에너지 측면에서도 Host의 Band Gap이 당연히 Dopant의 Gap 보다는 넓어야 하며 Host의 LUMO Level이 Dopant LUMO보다 높아야 한다.

발명의 내용

해결하려는 과제

[0007] 본 발명이 이루고자 하는 기술적 과제는 유기 광소자, 특히 유기 전계 발광소자에 적용할 수 있는 새로운 유기 광화합물을 제공하는 것이다.

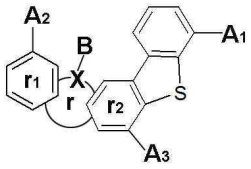
[0008] 본 발명이 이루고자 하는 다른 기술적 과제는 유기발광 화합물로 인광 Host 물질로 우수한 전하수송 특성을 가지며 Dopant의 흡수 Spectrum과의 Overlap 특성을 극대화시키며, 향상된 발광 효율과 저전압 구동 그리고

우수한 색발현률을 구현할 수 있는 디벤조티오펜계 유도체 및 이를 이용한 유기 발광 소자 또는 태양광 발전용 광소자를 제공하는 것이다.

과제의 해결 수단

[0009] 본 발명에 따른 유기 광화합물 및 이를 이용한 유기 광소자는 하기 화학식 F의 유기 광화합물을 기초로 한다:

[0010] <화학식 F>

[0011] 

[0012] 상기 화학식F에서

[0013] X는 S, Se, O 또는 N이고,

[0014] B는 X가 S, Se 또는 O인 경우 0(zero)이고,

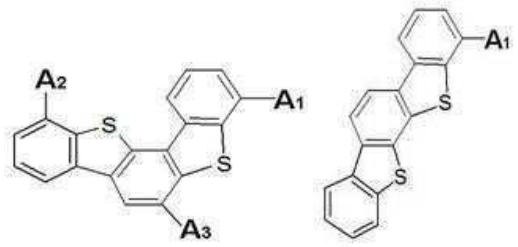
[0015] 고리r은 인접 고리 r1 및 r2와 축합 헤테로방향족 고리를 형성하고,

[0016] A1, A2, A3 및 B는 각각 독립적으로

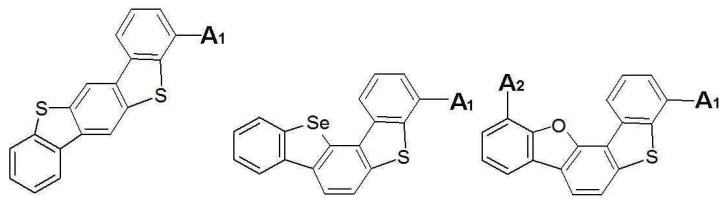
[0017] H, D, F, C1~C40의 알킬기, C6~C40의 아릴기, C5~C40의 헤테로아릴기, C6~C40의 아릴옥시기, C1~C40의 알킬옥시기, C6~C40의 아릴아미노기, C12~C40의 디아릴아미노기, C7~C40의 아릴알킬기, C3~C40의 시클로알킬기 및 C3~C40의 헤테로시클로알킬기로 이루어진 군에서 선택되거나; 또는 인접하는 기와 축합(fused) 지방족 고리, 축합 방향족 고리, 축합 헤테로지방족 고리 또는 축합 헤테로방향족 고리를 형성하는 기이다.

[0018] 또 상기 화학식F는 하기 화학식 F1, F2, F3a, F3b, F3c 또는 F4인 것을 특징으로 한다;

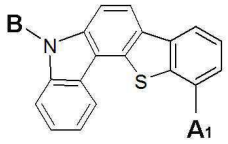
[0019] <화학식 F1> <화학식 F2>

[0020] 

[0021] <화학식 F3a> <화학식 F3b> <화학식 F3c>

[0022] 

[0023] <화학식 F4>

[0024] 

[0025] 상기 화학식 F1, F2, F3a, F3b, F3c 및 F4 각각에서

[0026] A1, A2, A3 및 B는 각각 독립적으로

[0027] H, D, F, C1~C40의 알킬기, C6~C40의 아릴기, C5~C40의 헤테로아릴기, C6~C40의 아릴옥시기, C1~C40의 알킬옥시기, C6~C40의 아릴아미노기, C12~C40의 디아릴아미노기, C7~C40의 아릴알킬기, C3~C40의 시클로알킬기 및 C3~C40의 헤테로시클로알킬기로 이루어진 군에서 선택되거나; 또는 인접하는 기와 축합(fused) 지방족 고리, 축합 방향족 고리, 축합 헤테로지방족 고리 또는 축합 헤테로방향족 고리를 형성하는 기이다.

[0028] 나아가 본 발명에 따른 유기 광화합물 및 이를 이용한 유기 광소자는 하기 화학식 1 내지 103에 해당하는 유기 광화합물을 기초로 한다.

발명의 효과

[0029] 본 발명에 따른 유기발광 화합물, 특히 디벤조티오펜계 유도체 및 이를 이용한 유기 광소자는 광 Host 물질로 우수한 전하수송 특성을 가지며 Dopant의 흡수 Spectrum과의 Overlap 특성을 극대화시키며, 향상된 발광 효율과 저전압 구동 그리고 우수한 색발현률을 구현할 수 있다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

[0030] 이하 본 발명을 상세히 설명하도록 한다.

[0031] 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.

[0032] 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.

[0033] 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.

[0034] 본 발명은 특히 디벤조티오펜계 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.

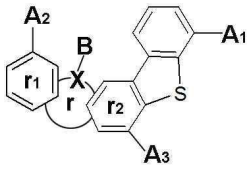
[0035] 본 명세서에서 유기 광화합물은 유기 광소자에 사용되는 화합물이라는 의미로서 반드시 발광이 가능한 화합물로 그 범위가 한정되지 않으며, 그 적용 범위도 유기 발광층에 한정되지 않고, 전하 주입층 및 전하 수송층

등 유기 광소자를 구성하는 어느 층에나 모두 사용될 수 있다.

[0036] 또 본 명세서에서 '광화합물' 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 선정한 용어이다.

[0037] 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 F의 유기 광화합물을 포함한다.

[0038] <화학식 F>

[0039] 

[0040] 상기 화학식F에서

[0041] X는 S, Se, O 또는 N이고(X의 위치는 고리 r에서 임의의 위치에 있다),

[0042] B는 X가 S, Se 또는 O인 경우 0(zero)이고,

[0043] 고리r은 인접 고리 r1 및 r2와 축합 헤테로방향족 고리를 형성하고,

[0044] A1, A2, A3 및 B는 각각 독립적으로

[0045] H, D, F, C1~C40의 알킬기, C6~C40의 아릴기, C5~C40의 헤테로아릴기, C6~C40의 아릴옥시기, C1~C40의 알킬옥시기, C6~C40의 아릴아미노기, C12~C40의 디아릴아미노기, C7~C40의 아릴알킬기, C3~C40의 시클로알킬기 및 C3~C40의 헤테로시클로알킬기로 이루어진 군에서 선택되거나; 또는 인접하는 기와 축합(fused) 지방족 고리, 축합 방향족 고리, 축합 헤테로지방족 고리 또는 축합 헤테로방향족 고리를 형성하는 기이다.

[0046] 본 발명의 발명자는 상기 화학식 F의 유기 광화합물의 치환기에서 A1, A2, A3 및 B와 X를 선택 특정한, 다양한 유도체를 개발하여 전자수송층(ETM), 발광층(EML), 정공수송층(HTM) 등, 제1전극과 상기 제2전극 사이의 각종 유기막으로 사용될 수 있는 유기 광화합물 및 이를 이용한 유기 광소자를 개발하고,

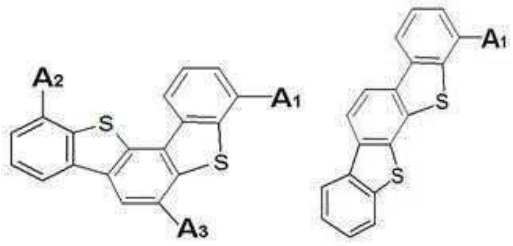
[0047] 유기발광소자로 활용될 경우 효율 증가와 구동 전압의 감소와 같은 성능의 개선 및 OLED 재료로서의 능력을 극대화시킬 수 있고, 특히 발광 수명이 현저히 향상됨을 발견하였으며,

[0048] 이를 태양광 발전을 위한 광소자 및 광화합물 분야에 응용 적용할 경우 우수한 발전 효율을 얻을 수 있을 것으로 기대된다.

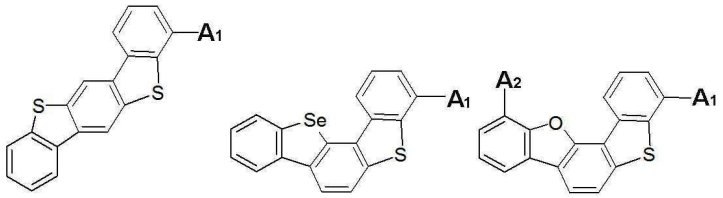
[0049] 이하에서는 화학식 F의 유기 광화합물을 유기 발광 소자와 관련하여 설명할 것이나, 이에 의하여 본 발명이 제한 해석 되어서는 안 된다.

[0050] 또 상기 화학식F는 하기 화학식 F1, F2, F3a, F3b, F3c 또는 F4인 것이 바람직하다.(하기 화합물 1 내지 103 중 화합물 1~29는 화학식 F1, 화합물 30~43은 화학식 F2, 화합물 44~50은 화학식 F3a, 화합물 51~64는 화학식 F3b, 화합물 65~76은 화학식 F3c, 화합물 77~103은 화학식 F4에 속한다)

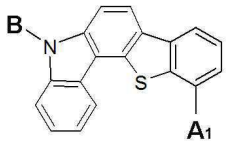
[0051] <화학식 F1> <화학식 F2>

[0052] 

[0053] <화학식 F3a> <화학식 F3b> <화학식 F3c>

[0054] 

[0055] <화학식 F4>

[0056] 

[0057] 상기 화학식 F1, F2, F3a, F3b, F3c 및 F4 각각에서

[0058] A1, A2, A3 및 B는 각각 독립적으로

[0059] H, D, F, C1~C40의 알킬기, C6~C40의 아릴기, C5~C40의 헤테로아릴기, C6~C40의 아릴옥시기, C1~C40의 알킬옥시기, C6~C40의 아릴아미노기, C12~C40의 디아릴아미노기, C7~C40의 아릴알킬기, C3~C40의 시클로알킬기 및 C3~C40의 헤테로시클로알킬기로 이루어진 군에서 선택되거나; 또는 인접하는 기와 축합(fused) 지방족 고리, 축합 방향족 고리, 축합 헤테로지방족 고리 또는 축합 헤테로방향족 고리를 형성하는 기이다.

[0060] 한편, 화학식 F, F1, F2, F3a, F3b, F3c 및 F4 각각에서

[0061] 상기 A1, A2, A3 및 B 중 적어도 하나는 C6~C40의 아릴기, C5~C40의 헤테로아릴기, C6~C40의 아릴옥시기, C1~C40의 알킬옥시기, C6~C40의 아릴아미노기, C12~C40의 디아릴아미노기, C7~C40의 아릴알킬기, C3~C40의 시클로알킬기 및 C3~C40의 헤테로시클로알킬기로 이루어진 군에서 선택되거나; 또는 인접하는 기와 축합(fused) 지방족 고리, 축합 방향족 고리, 축합 헤테로지방족 고리 또는 축합 헤테로방향족 고리를 형성하는 기인 것이 바람직하다.

[0062] 상기 화학식 F, F1, F2, F3a, F3b, F3c 또는 F4의 유기 광화합물은 유기 광소자 중 제1전극과 제2전극 사이에 개재된 유기막을 이루는 물질로 적합하다. 상기 화학식 F의 유기 광화합물은 유기 발광 소자의 유기막, 특히 정공수송층, 정공주입층 또는 발광층에 사용되기 적합하며 호스트 재료뿐만 아니라 도판트 재료로서도 사용된다. 상기 화학식 F의 유기 광화합물은 청색 내지 녹색인 색상을 제공하며 백색 발광 소자에 사용하기에 적합하다.

[0063] 상기 A1, A2, A3 및 B 각각의 상기 C1~C40의 알킬기, C2~C40의 알케닐기, C2~C40의 알키닐기, C6~C40의 아릴기, C5~C40의 헤테로아릴기, C6~C40의 아릴옥시기, C1~C40의 알킬옥시기, C6~C40의 아릴아미노기, C12~C40의 디아릴아미노기, C7~C40의 아릴알킬기, C3~C40의 시클로알킬기 및 C3~C40의 헤테로시클로알킬기는

[0064] 각각 독립적으로 D, F, 할로겐, 니트릴기, 니트로기, C1~C40의 알킬기, C2~C40의 알케닐기, C1~C40의 알콕시

기, 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.

[0065] 또 상기 A1, A2, A3 및 B 각각의 상기 C1~C40의 알킬기, C2~C40의 알케닐기, C2~C40의 알키닐기, C6~C40의 아릴기, C5~C40의 헤테로아릴기, C6~C40의 아릴옥시기, C1~C40의 알킬옥시기, C6~C40의 아릴아미노기, C12~C40의 디아릴아미노기, C7~C40의 아릴알킬기, C3~C40의 시클로알킬기 및 C3~C40의 헤테로시클로알킬기에 도입되는 치환기 중에서

[0066] 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

[0067] 각각 독립적으로 D, F, 할로겐, 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.

[0068] 나아가 상기 A1, A2, A3 및 B 각각의 상기 C1~C40의 알킬기, C2~C40의 알케닐기, C2~C40의 알키닐기, C6~C40의 아릴기, C5~C40의 헤테로아릴기, C6~C40의 아릴옥시기, C1~C40의 알킬옥시기, C6~C40의 아릴아미노기, C12~C40의 디아릴아미노기, C7~C40의 아릴알킬기, C3~C40의 시클로알킬기 및 C3~C40의 헤테로시클로알킬기에 도입되는 치환기는

[0069] 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, 디벤조퓨라닐기, 디벤조티오페닐기, 티오페닐기, 인돌일기, 푸리닐기, 벤즈이미다졸일기, 퀴놀리닐기, 벤조티오페닐기, 파라티아지닐기, 피롤일기, 피라졸릴기, 이미다졸릴기, 이미다졸리닐기, 옥사졸릴기, 티아졸릴기, 트리아졸릴기, 테트라졸일기, 옥사디아졸릴기, 피리디닐기, 피리다지닐기, 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.

[0070] 상기 아릴기는 방향족 고리 시스템을 갖는 1가 그룹으로서, 2 이상의 고리시스템을 포함할 수 있으며, 상기 2 이상의 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.

[0071] 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.

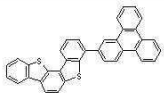
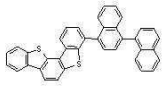
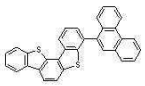
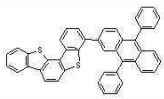
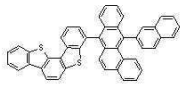
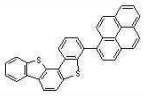
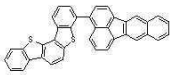
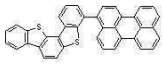
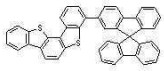
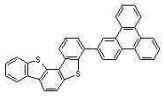
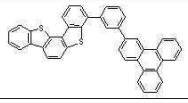
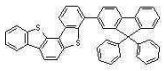
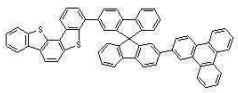
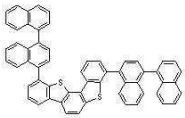
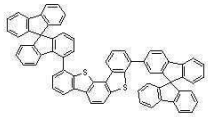
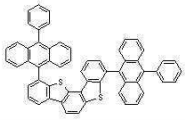
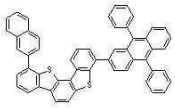
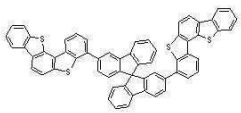
[0072] 상기 아릴기 및 헤테로아릴기의 하나 이상의 수소가 치환될 경우, 이들의 치환기는 C1-C50알킬기; C1-C50알콕시기; 비치환 또는 C1-C50알킬기 또는 C1-C50알콕시기로 치환된 C6-C50아릴기; 비치환 또는 C1-C50알킬기 또는 C1-C50알콕시기로 치환된 C2-C50헤테로아릴기; 비치환 또는 C1-C50알킬기 또는 C1-C50알콕시기로 치환된 C5-C50사이클로알킬기및 비치환 또는 C1-C20알킬기 또는 C1-C20알콕시기로 치환된 C5-C50헤테로사이클로알킬기, 또는 실레인기로 표시되는 그룹으로 이루어진 군으로부터 선택된 하나 이상일 수 있다.

[0073] 본 발명의 제 1태양에 따르는 유기 광소자는, 제1전극; 제2전극; 및 상기 제1전극과 상기 제2전극 사이에 적

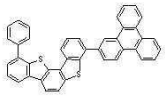
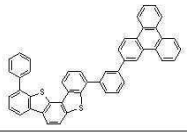
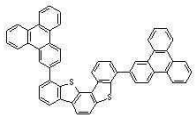
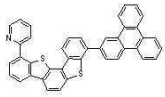
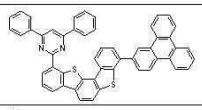
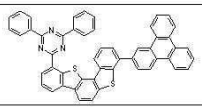
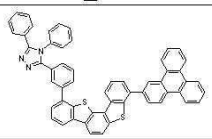
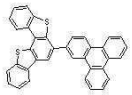
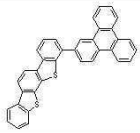
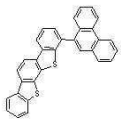
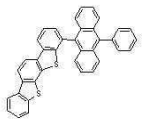
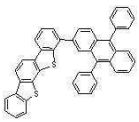
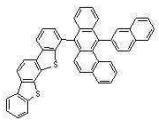
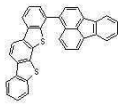
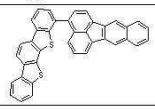
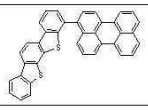
어도 한 층의 유기막을 포함하는 유기 광소자이다.

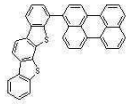
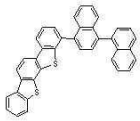
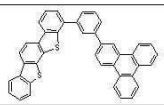
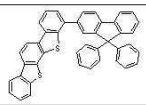
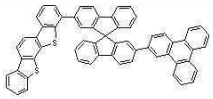
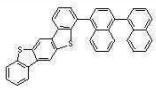
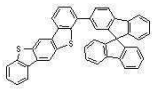
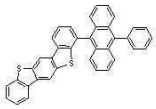
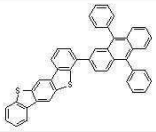
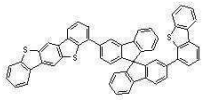
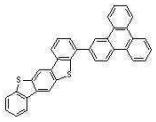
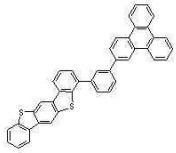
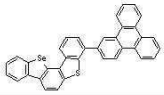
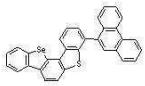
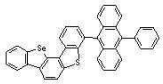
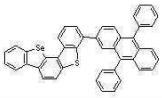
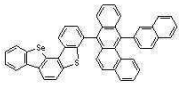
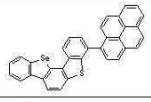
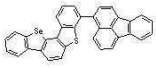
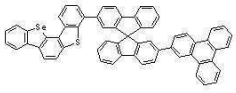
[0074] 본 발명의 유기 광소자에 사용되는 유기 광화합물은 하기 화학식 1 내지 103의 구조(이하 화학식들에서 '화학식'은 생략하고 숫자만 기재함)를 가질 수 있으나 이에 한정되는 것은 아니다:

[0075]

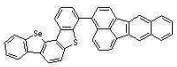
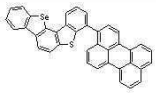
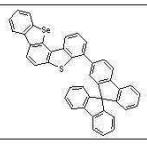
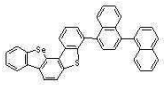
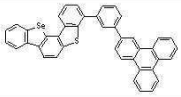
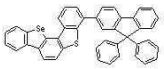
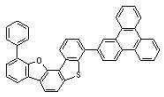
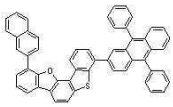
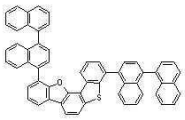
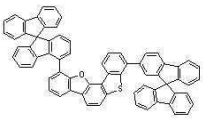
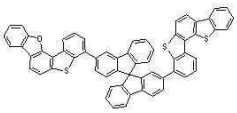
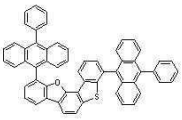
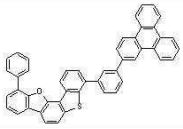
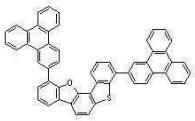
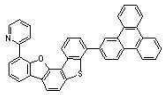
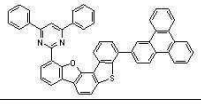
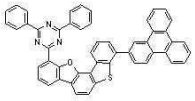
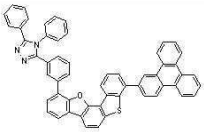
1		2	
3		4	
5		6	
7		8	
9		10	
11		12	
13		14	
15		16	
17		18	
19		20	

[0076]

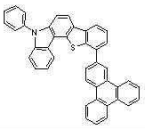
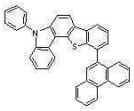
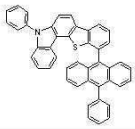
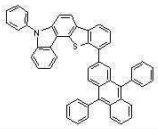
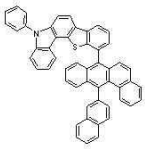
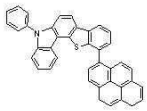
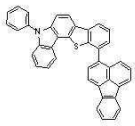
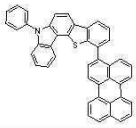
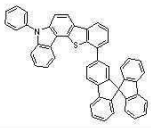
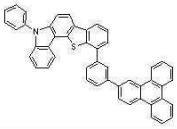
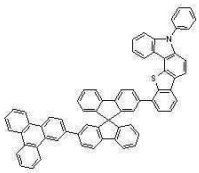
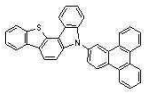
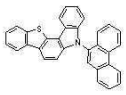
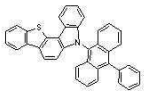
21		22	
23		24	
25		26	
27		28	
29		30	
31		32	
33		34	
35		36	
37		38	

39		40	
41		42	
43		44	
45		46	
47		48	
49		50	
51		52	
53		54	
55		56	
57		58	

[0077]

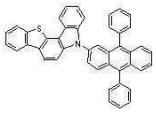
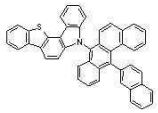
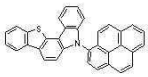
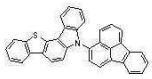
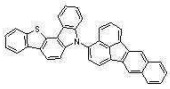
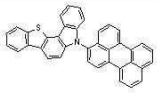
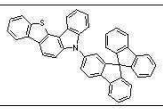
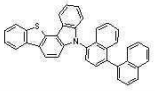
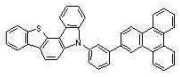
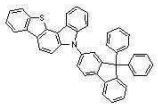
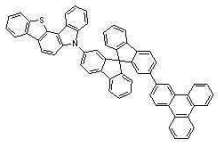
59		60	
61		62	
63		64	
65		66	
67		68	
69		70	
71		72	
73		74	
75		76	

[0078]

77		78	
79		80	
81		82	
83		84	
85		86	
87		88	
89		90	
91		92	

[0079]

[0080]

93		94	
95		96	
97		98	
99		100	
101		102	
103			

[0081] 상기 화학식 F, F1, F2, F3a, F3b, F3c 및 F4 각각의 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 F, F1, F2, F3a, F3b, F3c 및 F4 각각의 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 군으로부터 선택된 하나 이상의 층을 더 포함할 수 있다.

[0082] 보다 구체적으로, 본 발명을 따르는 유기 발광 소자의 구현예는

[0083] 먼저, 유기 발광 소자는 제1전극/정공주입층/발광층/전자수송층/전자주입층/제2전극으로 이루어진 구조를 가질 수 있고,

[0084] 또 유기 발광 소자는 제1전극/정공주입층/정공수송층/발광층/전자수송층/전자주입층/제2전극으로 이루어진 구조를 가질 수 있으며,

[0085] 나아가 유기 발광 소자는 제1전극/정공주입층/정공수송층/발광층/정공저지층/전자수송층/전자주입층/제2전극의 구조를 가질 수 있다.

[0086] 이때, 상기 정공수송층, 정공주입층 및 발광층 중 하나 이상은 본 발명을 따르는 화합물을 포함할 수 있다.

[0087] 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 군으로부터 선택된 하나 이상의 원소를 포함하는 유기금속화합물일 수 있다. 또한, 본 발명에 따르는 화합물은 발광층에서 형광 도펀트로도 사용될 수 있다.

[0088] 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 사용하는데 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.

[0089] 다음으로, 상기 제1전극 상부에 진공증착법, 스핀코팅법, 캐스트법, LB법 등과 같은 다양한 방법을 이용하여 정공주입층(HIL)을 형성할 수 있다.

[0090] 진공증착법에 의하여 정공주입층을 형성하는 경우, 그 증착 조건은 정공주입층의 재료로서 사용하는 화합물, 목적으로 하는 정공주입층의 구조 및 열적 특성 등에 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 1㎛ 범위에서 적절히 선택하는 것이 바람직하다.

[0091] 스핀코팅법에 의하여 정공주입층을 형성하는 경우, 그 코팅 조건은 정공주입층의 재료로서 사용하는 화합물, 목적하는 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 범위 에서 적절히 선택하는 것이 바람직하다.

[0092] 상기 정공주입층 물질은 전술한 바와 같은 화학식 F를 갖는 화합물일 수 있다.

[0093] 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/도데실벤젠술폰산) 또는 PEDOT/PSS (Poly(3,4-ethylenedioxythiophene)/Poly(4-styrenesulfonate):폴리(3,4-에틸렌디옥시티오펜)/폴리(4-스티렌술포네이트)), PANI/CSA (Polyaniline/Camphor sulfonicacid:폴리아닐린/캠퍼술폰산) 또는 PANI/PSS

[0094] (Polyaniline)/Poly(4-styrenesulfonate):폴리아닐린)/폴리(4-스티렌술포네이트)) 등과 같은 공지된 정공주입 물질을 사용할 수 있다.

[0095] 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.

[0096] 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.

[0097] 다음으로 상기 정공주입층 상부에 진공증착법, 스핀코팅법, 캐스트법, LB법 등과 같은 다양한 방법을 이용하여 정공수송층(HTL)을 형성할 수 있다. 진공증착법 및 스핀팅법에 의하여 정공수송층을 형성하는 경우, 그 증착조건 및 코팅조건은 사용하는 화합물에 따라 다르지만, 일반적으로 정공주입층의 형성과 거의 동일한 조건범위 중에서 선택된다.

[0098] 상기 정공수송층 물질은 전술한 바와 같은 화학식 F의 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.

[0099] 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.

[0100] 상기 발광층은 전술한 바와 같이 본 발명을 따르는 화학식 F의 화합물을 포함할 수 있다. 이 때, 화학식 F의 화합물은 적합한 공지의 호스트 재료와 함께 사용될 수 있거나, 공지의 도펀트 재료와 함께 사용될 수 있다.

[0101] 상기 화학식 F의 화합물을 단독으로 사용하는 것도 가능하다. 호스트 재료의 경우, 예를 들면, Alq3(tris(8-hydroxy-quinolatealuminium) 또는 CBP(4,4'-N,N'-디카바졸-비페닐), 또는 PVK(폴리(n-비닐카바졸)) 등을 사용할 수 있다.

[0102] 도펀트 재료의 경우, 형광 도펀트로서는 이데미츠사(Idemitsu사)에서 구입 가능한 IDE102, IDE105 및 하야시바라사에서 구입 가능한 C545T 등을 사용할 수 있으며, 인광 도펀트로서는 적색 인광 도펀트 PtOEP, UDC사의 RD61, 녹색 인광 도판트 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.

[0103] 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.

[0104] 상기 발광층의 두께가 100Å 미만인 경우, 발광 특성이 저하될 수 있으며, 상기 발광층의 두께가 1000Å를 초과하는 경우, 구동전압이 상승할 수 있기 때문이다.

[0105] 발광층에 발광 화합물이 인광 도펀트와 함께 사용할 경우에는 삼중항 여기자 또는 정공이 전자수송층으로 확산되는 현상을 방지하기 위하여, 상기 발광층 상부에 진공증착법, 스핀코팅법, 캐스트법, LB법 등과 같은 방법을 이용하여 정공저지층(HBL)을 형성할 수 있다. 진공증착법 및 스핀코팅법에 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.

[0106] 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.

[0107] 다음으로 전자수송층(ETL)을 진공증착법, 또는 스핀코팅법, 캐스트법 등의 다양한 방법을 이용하여 형성한다.

[0108] 진공증착법 및 스핀코팅법에 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.

[0109] 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.

[0110] 또한 전자수송층 상부에 음극으로부터 전자의 주입을 용이하게 하는 기능을 가지는 물질인 전자주입층(EIL)이 적층될 수 있으며 이는 특별히 재료를 제한하지 않는다.

[0111] 전자 주입층으로서는 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.

[0112] 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.

[0113] 마지막으로 전자주입층 상부에 진공증착법이나 스퍼터링법 등의 방법을 이용하여 제2전극을 형성할 수 있다.

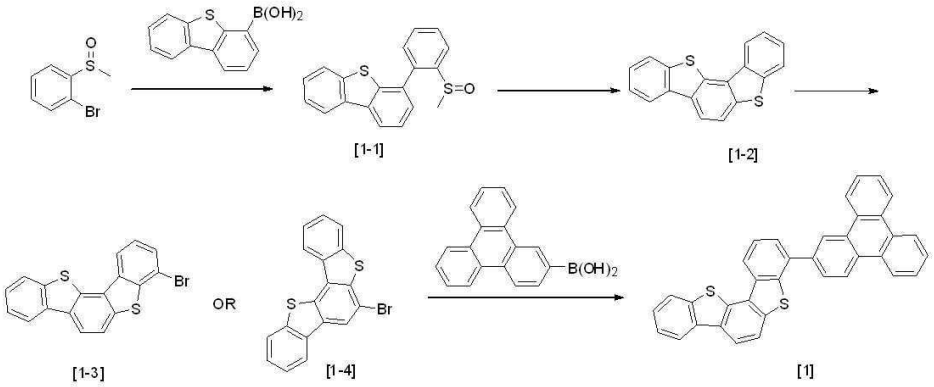
[0114] 상기 제2전극은 캐소드(Cathode)로 사용될 수 있다. 상기 제2전극 형성용 금속으로는 낮은 일함수를 가지는 금속, 합금, 전기전도성 화합물 및 이들의 혼합물을 사용할 수 있다. 구체적인 예로서는 리튬(Li), 마그네슘(Mg), 알루미늄(Al), 알루미늄-리튬(Al-Li), 칼슘(Ca), 마그네슘-인듐(Mg-In), 마그네슘-은(Mg-Ag)등을 들 수 있다. 또한 전면 발광소자를 얻기 위하여 ITO, IZO를 사용한 투과형 캐소드를 사용할 수도 있다.

[0115] 본 발명의 다른 구현예에 따르는 유기 전계 발광 화합물은 상기 화학식 F로 표현될 수 있으며, 보다 구체적으로는 상기 화학식 1 내지 103으로 표현될 수 있다. 상기 화합물들에 대한 구체적인 내용은 상술한 유기 발과

소자에 대하여 설명한 부분과 동일하다.

[0116] 이하에서, 본 발명의 반응예 및 비교예를 구체적으로 예시하지만, 본 발명이 하기의 합성예 및 실시예로 한정되는 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 화학물의 번호는 화학식의 번호로서 표기한다. 예를 들어, 화학식 1로 표시되는 화합물은 화합물 1로 표기한다.

[0117] **[반응 예 1] 화합물 [1]의 합성**

[0118] 

[0119] 중간체 화합물 [1-1]의 제조

[0120] 1L 반응플라스크에 1-브로모-2-(메틸술피닐)벤젠50g(228.20mmol), 디벤조[b,d]티 오펜-4-일 보론산 62.4g(273.84mmol)을 투입하고 톨루엔 600mL를 사용하여 현탁교반 시키고 질소 분위기에서 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐 5.2g(4.56mmol), 탄산칼륨 47.3g (342.30mmol), 정제수 60ml을 첨가하여 24시간 동안 환류 교반시킨다. 반응이 종료되면 실온까지 냉각 후 염화나트륨 수용액으로 층분리하여 얻은 유기층을 무수 황산 마그네슘으로 수분을제거하고 감압 증류한다. 감압 증류하여 생성된 유기물을 컬럼 크로마토그라피를 통하여 분리한 후 디클로로메탄과 헥산으로 재결정화하여 미색 고체의 중간체 화합물[1-1] 52.2g(71%)를 수득하였다.

[0121] 중간체 화합물 [1-2]의 제조

[0122] 250mL 반응플라스크에 중간체 화합물 [1-1] 50g(155.06mmol), 무수인산 1.1g (8.06mmol), 트리플루오로메탄술폰산 500ml1을 투입하고 질소기류 하에서 24시간 동안 상온에서 교반시킨다. 반응이 종결되면 얼음물에 반응액을 천천히 적가하여 결정화 한다. 결정화된 고체는 여과하여 증류수와 메탄올로 세척한다. 여과된 고체는 피리딘 1L에 12시간 동안 환류 교반한 다음 실온까지 냉각 후 디클로로메탄과 증류수를 사용하여 유기층을 분리 무수 황산마그네슘으로 수분을제거하고 감압 증류한다. 감압 증류하여 생성된 유기물을 컬럼 크로마토그라피를 통하여 분리한 후 디클로로메탄과 헥산으로 재결정화하여 미색 고체의 중간체 화합물[1-2] 38.2g(85%)를 수득하였다.

[0123] 중간체 화합물 [1-3], [1-4]의 제조

[0124] 500mL 반응플라스크에 중간체 화합물 [1-2] 38g(130.85mmol), N-브로모석시니미드 25.61g(143.93mmol)을 차광하여 디클로로메탄 200mL로 5시간 동안 교반한다. 반응이 종료되면 정제수로 층분리하여 얻은 유기층을 무수 황산 마그네슘으로 수분을제거하고 감압 증류한다. 감압 증류하여 생성된 유기물을 컬럼 크로마토그라피를 통하여 분리한 후 디클로로메탄과 헥산으로 재결정화하여 노란색 고체의 중간체 화합물[1-3] 21.7g(45%), [1-4] 19.3g(40%)를 수득하였다.

[0125] 화합물 [1]의 제조

[0126] 250mL 반응플라스크에 중간체 화합물 [1-3] 5g(13.53mmol), 트리페닐렌-2-일 보론산 4.4g(16.24mmol), 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐 312mg(0.27mmol), 탄산칼륨 2.8g (20.29mmol) 을 투입하고 질소기류하에서 1,4-디옥산100mL, 정제수 10mL 로 12시간 동안 환류 교반시킨다. 반응종결 후 실온까지 천천히 냉각한 다음 반응액을 여과한다. 여과된 고체는 정제수 와 메탄올로 세척하고 디클로로메탄과 메탄올로 재결정화하여 연두색 고체의 목적화합물[1] 5.0g(72%)를 수득하였다.

[0127] ^{1}H NMR (300 MHz, $CDCl_3$) : δ 9.15(d, 1H), 8.97~8.93(m, 2H), 8.47~8.38(m, 2H), 8.22~7.77(m, 11H), 7.61~7.49(m, 3H), 7.25(d, 1H)

[0128] MS/FAB : 516(M^+)

[0129] 상기 반응예 1의 방법에따라 1내지 29의 화합물을 제조하였으며, 하기 [제1표군(群)]에 그 결과를 나타내었다.

[0130] [제1표군(群)]

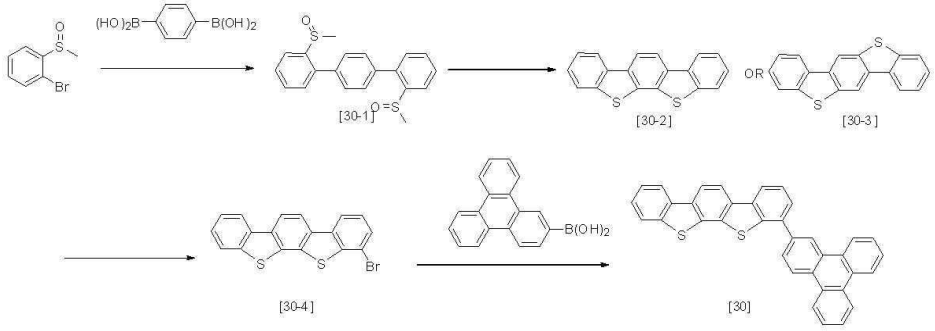
화합물 번호	수율 (%)	^{1}H NMR (300 MHz, $CDCl_3$) (δ)	MS/FAB (M^+)
1	72	9.15(d, 1H), 8.97~8.93(m, 2H), 8.47~8.38(m, 2H), 8.22~7.77(m, 11H), 7.61~7.49(m, 3H), 7.25(d, 1H)	516
2	72	8.59~8.37(m, 6H), 8.24~7.95(m, 7H), 7.65~7.45(m, 8H), 7.25(d, 1H)	542
3	70	8.95~8.89(m, 2H), 8.45~8.41(m, 2H), 8.25~7.81(m, 10H), 7.59~7.46(m, 3H), 7.25(d, 1H)	466
4	73	8.47~8.40(m, 2H), 8.20(d, 1H), 8.09~7.88(m, 6H), 7.63~7.24(m, 13H)	542
5	72	8.45~8.37(m, 2H), 8.26~7.91(m, 7H), 7.66~7.35(m, 16H), 7.25(d, 1H)	618
6	70	8.93(m, 1H), 8.49~8.41(m, 2H), 8.22~7.71(m, 13H), 7.61~7.48(m, 6H), 7.40~7.26(m, 4H)	642
7	72	8.45~8.41(m, 2H), 8.20~7.94(m, 6H), 7.91~7.69(m, 6H), 7.58~7.47(m, 3H), 7.25(d, 1H)	490
8	71	8.47~8.39(m, 4H), 8.25~7.89(m, 7H), 7.82~7.77(m, 2H), 7.59~7.50(m, 4H), 7.25(d, 1H)	490
9	70	8.46~8.40(m, 2H), 8.21~8.13(m, 3H), 8.09~7.78(m, 6H), 7.71~7.45(m, 8H), 7.25(d, 1H)	540
10	71	8.49~8.41(m, 2H), 8.20(d, 1H), 8.05~7.89(m, 6H), 7.64~7.45(m, 4H), 7.39~7.24(m, 7H)	540
11	70	8.47~8.41(m, 2H), 8.20(d, 1H), 8.09~7.73(m, 7H), 7.67~7.46(m, 5H), 7.43~7.12(m, 9H)	604
12	72	9.15(d, 1H), 8.97~8.93(m, 2H), 8.47~8.38(m, 2H), 8.22~7.77(m, 11H), 7.61~7.49(m, 3H), 7.25(d, 1H)	516
13	68	9.15(d, 1H), 8.95~8.92(m, 2H), 8.45~8.41(m, 2H), 8.22~7.77(m, 11H), 7.70(s, 1H), 7.59~7.44(m, 6H), 7.25(d, 1H)	592
14	70	8.46~8.41(m, 2H), 8.20(d, 1H), 8.05~7.74(m, 5H), 7.58~7.46(m, 11H), 7.41~7.23(m, 3H), 7.25~7.11(m, 4H)	606
15	70	9.15(d, 1H), 8.93~8.90(m, 2H), 8.48~8.40(m, 2H), 8.22~7.71(m, 16H), 7.64~7.12(m, 13H)	831

[0131]

16	72	8.59~8.53(m, 6H), 8.44~8.35(m, 4H), 8.21~7.95(m, 11H), 7.66~7.51(m, 12H), 7.25(d, 1H)	795
17	70	8.43~8.40(m, 2H), 8.23~8.18(m, 2H), 8.05(d, 1H), 7.96~7.72(m, 8H), 7.63~7.47(m, 7H), 7.42~7.12(d, 18H)	919
18	69	8.41~8.37(m, 2H), 8.22~8.18(m, 2H), 8.05(d, 1H), 7.94~7.89(m, 8H), 7.58~7.24(m, 21H)	795
19	70	8.43~8.41(m, 2H), 8.20~8.11(m, 3H), 8.08~7.86(m, 7H), 7.73(d, 1H), 7.60~7.33(m, 18H), 7.25(d, 1H)	744
20	72	8.49~8.40(m, 4H), 8.21~8.17(m, 2H), 8.06~7.97(m, 5H), 7.90~7.71(m, 3H), 7.61~7.14(d, 18H)	893
21	70	9.15(d, 1H), 8.95~8.91(m, 2H), 8.44~8.42(m, 2H), 8.26~8.01(m, 7H), 7.91~7.80(m, 4H), 7.61~7.48(m, 7H), 7.25(d, 1H)	592
22	69	9.15(d, 1H), 8.97~8.89(m, 2H), 8.41~8.36(m, 2H), 8.25~7.95(m, 7H), 7.88~7.69(m, 5H), 7.58~7.41(m, 10H), 7.25(d, 1H)	668
23	71	9.15(d, 2H), 8.95~8.90(m, 4H), 8.42~8.40(m, 2H), 8.27~8.02(m, 11H), 7.88~7.79(m, 8H), 7.59~7.51(m, 2H), 7.25(d, 1H)	742
24	70	9.15(d, 1H), 8.93~8.87(m, 2H), 8.55~8.29(m, 4H), 8.20~8.04(m, 6H), 7.93~7.80(m, 4H), 7.66~7.49(m, 3H), 7.29~7.22(m, 2H), 6.95(m, 1H)	593
25	71	9.15(d, 1H), 8.93~8.91(m, 2H), 8.45~8.04(m, 9H), 7.89~7.75(m, 9H), 7.58~7.22(m, 9H)	746
26	70	9.15(d, 1H), 8.95~8.91(m, 2H), 8.44~8.40(m, 2H), 8.32~8.01(m, 10H), 7.92~7.80(m, 5H), 7.62~7.22(m, 9H)	747
27	72	9.15(d, 1H), 8.95~8.93(m, 2H), 8.41~7.99(m, 12H), 7.90~7.70(m, 5H), 7.58~7.27(m, 13H)	812
28	68	9.15(d, 1H), 8.94~8.91(m, 2H), 8.47~8.45(m, 2H), 8.26~7.79(m, 11H), 7.52~7.45(m, 4H)	516
29	70	9.15(d, 1H), 8.95~8.92(m, 2H), 8.45~8.40(m, 2H), 8.19~7.97(m, 11H), 7.77~7.43(m, 8H)	592

[0132]

[0133] **[반응 예 2] 화합물 [30]의 합성**



[0134]

[0135] 중간체 화합물 [30-1]의 제조

[0136] 반응 예 1과 동일한 합성방법으로 1-브로모-2-(메틸술피닐)벤젠, 1,4-페닐렌디보론산, 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐, 탄산칼륨, 정제수, 톨루엔을 사용하여 미색 고체의 중간체 화합물 [30-1] 28.5g(68%)을 합성하였다.

[0137] 중간체화합물 [30-2], [30-3]의 제조

[0138] 반응 예 1과 동일한 합성방법으로 중간체 화합물 [30-1], 무수인산, 트리플루오로메탄 술폰산, 피리딘을 사용하여 노란색 고체의 중간체 화합물 [30-2] 8.0g(35%), [30-3] 7.3g(32%)을 합성하였다.

[0139] 중간체 화합물 [30-4]의 제조

[0140] 반응 예 1과 동일한 합성방법으로 중간체 화합물 [30-2], N-브로모석시니미드 디클로로메탄을 사용하여 노란색 고체의 중간체 화합물 [30-4] 7.9g(78%)을 합성하였다.

[0141] 화합물 [30]의 제조

[0142] 반응 예 1과 동일한 합성방법으로 중간체 화합물 [30-4], 트리페닐렌-2-일 보론산, 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐, 탄산칼륨, 1,4-디옥산, 정제수을 사용하여 연두색 고체의 목적화합물[30] 4.8g(70%)를 수득하였다.

[0143] ^{1}H NMR (300 MHz, $CDCl_3$) : δ 9.15(d, 1H), 8.94~8.93(m, 2H), 8.47~8.41(m, 2H), 8.25~7.76(m, 11H), 7.62~7.45(m, 4H)

[0144] MS/FAB : 516(M^+)

[0145] 상기 반응예 2의 방법에 따라 30내지 50의 화합물을 제조하였으며, 하기 [제2표군(群)]에 그 결과를 나타내었다.

[0146] [제2표군(群)]

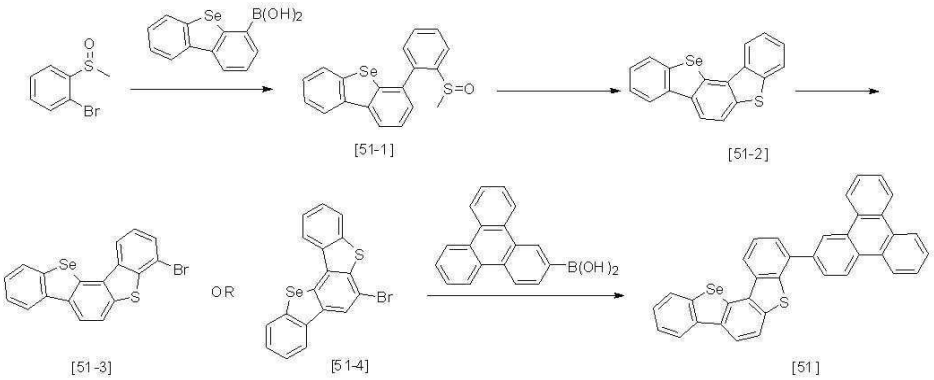
화합물 번호	수율 (%)	^{1}H NMR (300 MHz, $CDCl_3$) (δ)	MS/FAB (M^+)
30	70	9.15(d, 1H), 8.94~8.93(m, 2H), 8.47~8.41(m, 2H), 8.25~7.76(m, 11H), 7.62~7.45(m, 4H)	516
31	68	8.93(m, 2H), 8.46~8.39(m, 2H), 8.24~7.82(m, 10H), 7.66~7.47(m, 4H)	466
32	72	8.45~8.40(m, 2H), 8.20(d, 1H), 8.07~7.88(m, 6H), 7.62~7.34(m, 13H)	542
33	71	8.47~8.41(m, 2H), 8.25~7.91(m, 7H), 7.60~7.38(m, 17H)	618
34	69	7.65(m, 1H), 8.37~8.31(m, 2H), 8.21~7.72(m, 13H), 7.64~7.44(m, 7H), 7.39~7.32(m, 3H)	642
35	72	8.35~8.31(m, 2H), 8.10~7.88(m, 6H), 7.78~7.61(m, 6H), 7.50~7.40(m, 4H)	490
36	71	8.35~8.31(m, 4H), 8.10~7.80(m, 7H), 7.70~7.69(m, 2H), 7.50~7.40(m, 5H)	490
37	70	8.35~8.31(m, 2H), 8.10~8.06(m, 3H), 7.95~7.80(m, 4H), 7.70~7.69(m, 2H), 7.57~7.40(m, 9H)	540
38	69	8.35~8.31(m, 2H), 8.10(d, 1H), 7.95~7.81(m, 6H), 7.51~7.29(m, 11H)	540
39	72	8.35~8.31(m, 2H), 8.10(d, 1H), 7.95~7.77(m, 4H), 7.67~7.65(m, 3H), 7.53~7.40(m, 6H), 7.28~7.06(m, 8H)	604
40	70	8.45(d, 3H), 8.35~8.31(m, 3H), 8.10(d, 1H), 7.98~7.88(m, 6H), 7.51~7.40(m, 9H)	542
41	71	9.05~8.83(m, 3H), 8.35~8.31(m, 2H), 8.10~7.72(m, 11H), 7.60~7.38(m, 8H)	592
42	69	8.35~8.31(m, 2H), 8.10(d, 1H), 7.95~7.67(m, 5H), 7.53~7.40(m, 6H), 7.28~7.16(m, 8H), 7.01(m, 4H)	606

[0147]

43	72	9.05~8.83(m, 3H), 8.35~8.31(m, 2H), 8.10~7.65(m, 16H), 7.53~7.06(m, 13H)	831
44	70	8.45~8.31(m, 6H), 8.10(d, 1H), 7.98~7.88(m, 5H), 7.76~7.68(m, 2H), 7.51~7.40(m, 8H)	542
45	69	8.35~8.31(m, 2H), 8.10(d, 1H), 7.88~7.76(m, 4H), 7.68~7.65(m, 4H), 7.53~7.40(m, 5H), 7.28~7.06(m, 8H)	604
46	72	8.35~8.31(m, 2H), 8.10(d, 1H), 7.88~7.68(m, 7H), 7.48~7.29(m, 12H)	542
47	71	8.35~8.31(m, 2H), 8.10~8.03(m, 2H), 7.88~7.68(m, 6H), 7.51~7.29(m, 16H)	618
48	70	8.35~8.31(m, 4H), 8.10(d, 2H), 7.96~7.88(m, 3H), 7.77~7.65(m, 5H), 7.51~7.09(m, 16H)	787
49	71	9.05(d, 1H), 8.83(d, 2H), 8.35~8.31(m, 2H), 8.10~7.68(m, 12H), 7.48~7.40(m, 3H)	516
50	68	9.05(d, 1H), 8.83(d, 2H), 8.35~8.31(m, 2H), 8.10~7.68(m, 12H), 7.60~7.38(m, 7H)	592

[0148]

[0149] **[반응 예 3] 화합물 [51]의 합성**



[0150]

[0151] 중간체 화합물 [51-1]의 제조

[0152] 반응 예 1과 동일한 합성방법으로 1-브로모-2-(메틸술피닐)벤젠, 디벤조[b,d]셀레노펜-4-일 보론산, 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐, 탄산칼륨, 정제수, 톨루엔을 사용하여 미색 고체의 중간체 화합물 [51-1] 25.1g(70%)을 합성하였다.

[0153] 중간체화합물 [51-2]의 제조

[0154] 반응 예 1과 동일한 합성방법으로 중간체 화합물 [51-1], 무수인산, 트리플루오로메탄 술폰산 피리딘을 사용하여 노란색 고체의 중간체 화합물 [51-2] 18.7g(82%)을 합성하였다.

[0155] 중간체 화합물 [51-3], [51-4]의 제조

[0156] 반응 예 1과 동일한 합성방법으로 중간체 화합물 [51-2], N-브로모석시니미드 디클로로메탄올을 사용하여 노란색 고체의 중간체 화합물 [51-3] 9.3g(42%), [51-4] 7.9g(36%)을 합성하였다.

[0157] 화합물 [51]의 제조

[0158] 반응 예 1과 동일한 합성방법으로 중간체 화합물 [51-4], 트리페닐렌-2-일 보론산, 테트라키스(트리페닐포스

핀)팔라듐, 탄산칼륨, 1,4-디옥산, 정제수를 사용하여 연두색 고체 의 목적화합물[51] 4.8g(70%)를 수득하였다.

[0159] ^{1}H NMR (300 MHz, $CDCl_3$) : δ 9.05(d, 1H), 8.83(d, 2H), 8.31(d, 1H), 8.10~7.94(m, 5H), 7.78~7.69(m, 7H), 7.48~7.20(m, 4H)

[0160] MS/FAB : 563(M^+)

[0161] 상기 반응예 3의 방법에 따라 51내지 89의 화합물을 제조하였으며, 하기 [제3표군(群)]에 그 결과를 나타내었다.

[0162] [제3표군(群)]

[0163]

화합물 번호	수율 (%)	^{1}H NMR (300 MHz, $CDCl_3$) (δ)	MS/FAB (M^+)
51	71	9.05(d, 1H), 8.83(d, 2H), 8.31(d, 1H), 8.10~7.94(m, 5H), 7.78~7.69(m, 7H), 7.48~7.20(m, 4H)	563
52	72	8.83(d, 2H), 8.31(d, 1H), 8.10~8.02(m, 3H), 7.83~7.69(m, 8H), 7.48~7.20(m, 4H)	513
53	70	8.31(d, 1H), 8.10(d, 1H), 7.81~7.69(m, 7H), 7.48~7.20(m, 13H)	589
54	71	8.31(d, 1H), 8.10~8.03(m, 2H), 7.87~7.69(m, 6H), 7.51~7.20(m, 17H)	665
55	72	8.83(d, 1H), 8.31(d, 1H), 8.10~8.02(m, 2H), 7.90~7.63(m, 12H), 7.49~7.41(m, 5H), 7.31~7.20(m, 5H)	689
56	70	8.31(d, 1H), 8.10~8.02(m, 3H), 7.94(d, 1H), 7.78~7.61(m, 9H), 7.48~7.20(m, 4H)	537
57	69	8.32~8.31(m, 3H), 8.10~8.00(m, 3H), 7.86~7.69(m, 7H), 7.48~7.20(m, 5H)	537
58	72	9.05(d, 1H), 8.83(d, 2H), 8.31(d, 1H), 8.10~7.94(m, 5H), 7.83~7.65(m, 12H), 7.53~7.20(m, 13H)	877
59	70	8.31(d, 1H), 8.10~8.06(m, 3H), 7.86~7.69(m, 7H), 7.57~7.20(m, 9H)	587
60	71	8.31(d, 1H), 8.10(d, 1H), 7.87~7.69(m, 7H), 7.51~7.41(m, 3H), 7.31~7.20(m, 8H)	587

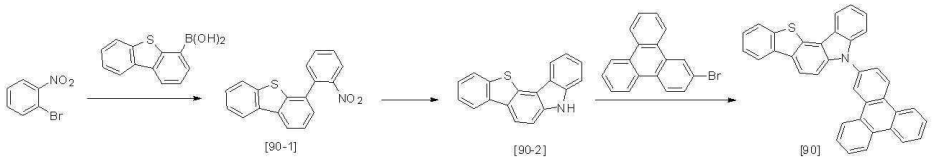
61	71	8.31(d, 1H), 8.10(d, 1H), 7.83~7.65(m, 8H), 7.53~7.41(m, 4H), 7.31~7.06(m, 10H)	651
62	72	8.45(d, 3H), 8.32~8.31(m, 2H), 8.10(d, 1H), 7.98~7.91(m, 4H), 7.76~7.69(m, 3H), 7.51~7.20(m, 9H)	589
63	70	9.05(d, 1H), 8.83(d, 2H), 8.31(d, 1H), 8.10~7.94(m, 5H), 7.78~7.60(m, 8H), 7.48~7.20(m, 7H)	639
64	71	8.31(d, 1H), 8.10(d, 1H), 7.83~7.67(m, 6H), 7.53~7.41(m, 4H), 7.31~7.16(m, 10H), 7.01(m, 4H)	653
65	72	9.05(d, 1H), 8.83(d, 2H), 8.31(d, 1H), 8.08~7.94(m, 5H), 7.78~7.71(m, 7H), 7.48~7.28(m, 8H)	576
66	70	8.31(d, 1H), 8.10~8.03(m, 2H), 7.90~7.70(m, 9H), 7.63(d, 1H), 7.51~7.28(m, 19H)	728
67	69	8.45~8.31(m, 9H), 8.10(d, 1H), 7.98~7.91(m, 8H), 7.75~7.70(m, 3H), 7.51~7.45(m, 12H), 7.28(t, 1H)	778
68	72	8.31(d, 1H), 8.10(d, 1H), 7.83~7.65(m, 11H), 7.53~7.41(m, 7H), 7.28~7.06(m, 18H)	903
69	70	8.35~8.31(m, 3H), 8.10(d, 2H), 7.96~7.88(m, 3H), 7.79~7.65(m, 5H), 7.56~7.06(m, 19H)	877
70	71	8.31(d, 1H), 8.10(d, 1H), 7.81~7.70(m, 11H), 7.48~7.28(m, 21H)	778
71	71	9.17(s, 1H), 8.95(t, 2H), 8.43~8.06(m, 6H), 7.91~7.83(m, 7H), 7.72~7.41(m, 12H)	652
72	72	9.17(d, 2H), 8.95(d, 4H), 8.43~8.06(m, 10H), 7.91~7.83(m, 11H), 7.61~7.41(m, 3H)	726
73	70	9.17(s, 1H), 8.95(d, 2H), 8.52~8.14(m, 8H), 7.93~7.43(m, 10H), 7.28~7.04(m, 2H)	577
74	71	9.17(s, 1H), 8.95(d, 2H), 8.43~8.06(m, 7H), 7.91~7.82(m, 11H), 7.61~7.43(m, 9H)	730
75	72	9.17(s, 1H), 8.95(d, 2H), 8.43~8.14(m, 10H), 7.91~7.82(m, 7H), 7.61~7.41(m, 9H)	731
76	70	δ 9.17(s, 1H), 8.95(d, 2H), 8.43~8.06(m, 9H), 7.91~7.83(m, 7H), 7.72~7.41(m, 14H)	795
77	69	9.17(s, 1H), 8.95(d, 2H), 8.57~8.43(m, 2H), 7.22~7.84(m, 11H), 7.61~7.27(m, 9H)	575
78	72	8.95(d, 2H), 8.57~8.43(m, 2H), 8.22~7.84(m, 10H), 7.61~7.27(m, 9H)	525

[0164]

79	70	8.57~8.43(m, 2H), 8.22~7.93(m, 7H), 7.61~7.27(m, 18H)	601
80	71	8.57~8.43(m, 2H), 8.22~8.07(m, 3H), 7.99~7.93(m, 4H), 7.63~7.27(m, 22H)	677
81	71	8.95(d, 1H), 8.55~8.43(m, 2H), 8.22~7.89(m, 12H), 7.75~7.27(m, 16H)	701
82	72	8.57(d, 1H), 8.43~8.07(m, 3H), 7.96~7.72(m, 4H), 7.59~7.08(m, 10H), 6.57(d, 1H), 6.11(t, 1H), 5.82(t, 1H), 3.68(d, 2H), 2.65(d, 2H)	551
83	70	8.57(t, 1H), 8.43~8.22(m, 4H), 8.12~7.81(m, 8H), 7.59~7.27(m, 10H)	549
84	71	8.57(t, 1H), 8.43(d, 1H), 8.22~7.81(m, 9H), 7.69~7.27(m, 14H)	599
85	72	8.57(t, 1H), 8.43(d, 1H), 8.22~7.93(m, 7H), 7.59~7.35(m, 16H)	599
86	70	8.57(t, 1H), 8.43(d, 1H), 8.22~7.77(m, 8H), 7.59~7.21(m, 19H)	633
87	69	8.57(d, 4H), 8.44~8.22(m, 3H), 8.09~7.96(m, 6H), 7.59~7.27(m, 14H)	601
88	72	9.17(s, 1H), 8.95(d, 2H), 8.57(t, 1H), 8.43(d, 1H), 8.22~7.84(m, 11H), 7.72~7.27(m, 13H)	651
89	70	9.17(s, 1H), 8.95(d, 2H), 8.57(t, 1H), 8.43(d, 1H), 8.22~7.77(m, 16H), 7.59~7.18(m, 18H)	890

[0165]

[0166] **[반응 예 4] 화합물 [90]의 합성**

[0167] 

[0168] 중간체 화합물 [90-1]의 제조

[0169] 반응 예 1과 동일한 합성방법으로 1-브로모-2-니트로벤젠, 디벤조[b,d]티오펜-4-일 보론산, 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐, 탄산칼륨, 정제수, 톨루엔을 사용하여 미색 고체의 중간체 화합물 [90-1] 21.3g(70%)을 합성하였다.

[0170] 중간체 화합물 [90-2]의 제조

[0171] 500mL 반응플라스크에 중간체 화합물 [90-1] 20g(65.49mmol), 트리페닐 포스핀 51.5g(196.49mmol), 1,2-디클로벤젠 200mL을 사용하여 180℃에서 12시간 동안 교반한다. 반응이 종료되면 실온까지 냉각 후 1,2-디클로벤젠을 감압 증류한다. 감압 증류하여 생성된 유기물을 컬럼 크로마토그라피를 통하여 분리한 후 디클로로메탄과 메탈올로 재결정화하여 미색 고체의 중간체 화합물[90-2] 10.3g(58%)를 수득하였다.

[0172] 화합물 [90]의 제조

[0173] 250mL 반응플라스크에 중간체 화합물 [90-2] 5g(18.29mmol), 2-브로모트리페닐렌6.7g(21.94mmol), 톨루엔 100mL를 투입하고 질소분위기에서 팔라듐아세테이트(II) 82mg (0.36mmol), 소디움터트부톡시드 2.6g(27.43mmol), 더트부틸포스핀(50% 톨루엔 용액) 0.35mL(0.73mmol)을 첨가하여 12시간동안 환류교반 시킨다. 반응이 종료되면 실온까지 냉각 후 생성된 고체를 여과 한 다음 메탈올로 세척한다. 여과된 고체를 아세

톤 환류 교반 후 여과하여 흰색 고체의 목적화합물[90] 6.3g(70%)을 수득하였다.

[0174] ^{1}H NMR (300 MHz, $CDCl_3$) : δ 8.95(t, 3H), 8.57~8.47(m, 2H), 8.14~7.91.(m, 11H), 7.54~7.27(m, 5H)

[0175] MS/FAB : 499(M^+)

[0176] 상기 반응예 4의 방법에따라 90내지 103의 화합물을 제조하였으며, 하기 [제4표]에 그 결과를 나타내었다.

[0177] [제4표]

화합물 번호	수율 (%)	^{1}H NMR (300 MHz, $CDCl_3$) (δ)	MS/FAB (M^+)
90	70	8.95(t, 3H), 8.57~8.47(m, 2H), 8.14~7.91.(m, 11H), 7.54~7.27(m, 5H)	499
91	68	8.92(d, 2H), 8.57~8.47(m, 2H), 8.07~7.72.(m, 10H), 7.54~7.27(m, 5H)	449
92	71	.57~8.47(m, 2H), 8.07~7.92.(m, 7H), 7.54~7.27(m, 14H)	525
93	69	8.45(m, 1H), 8.35(m, 1H), 7.95(d, 1H), 7.88~7.81(m, 6H), 7.42~7.15(m, 18H)	601
94	70	8.83(m, 1H), 8.45(m, 1H), 8.35(m, 1H), 8.02~7.81(m, 12H), 7.63(m, 1H), 7.49~7.40(m, 5H), 7.38~7.15(m, 6H)	625
95	72	8.45(m, 1H), 8.35(m, 1H), 8.00~7.75(m, 8H), 7.61(s, 4H), 7.42~7.40(m, 2H), 7.23~7.15(m, 3H)	473
96	70	8.45(m, 1H), 8.35~8.32(m, 3H), 8.00~7.91(m, 7H), 7.75(m, 1H), 7.57~7.40(m, 4H), 7.23~7.15(m, 3H)	473
97	72	8.45(m, 1H), 8.35(m, 1H), 8.06(m, 2H), 7.95~7.81(m, 5H), 7.75(m, 1H), 7.57~7.40(m, 8H), 7.23~7.15(m, 3H)	523
98	68	8.45(m, 1H), 8.35(m, 1H), 7.95~7.81(m, 7H), 7.42~7.40(m, 2H), 7.32~7.15(m, 10H)	523
99	70	8.45(m, 1H), 8.35(m, 1H), 7.95~7.77(m, 5H), 7.65(d, 2H), 7.45~7.40(m, 4H), 7.39~7.06(m, 12H)	587
100	69	8.45(m, 3H), 8.35~8.32(m, 2H), 7.98~7.84(m, 7H), 7.51~7.40(m, 7H), 7.39~7.15(m, 4H)	525
101	71	9.05(d, 1H), 8.83(m, 2H), 8.45(m, 1H), 8.35(m, 1H), 8.08~7.72(m, 12H), 7.42~7.36(m, 5H), 7.23~7.15(m, 3H)	575
102	70	8.45(m, 1H), 8.35(m, 1H), 7.95~7.77(m, 5H), 7.45~7.40(m, 4H), 7.39~7.15(m, 12H), 7.01(m, 4H)	589
103	72	9.05(d, 1H), 8.83(m, 2H), 8.45(m, 1H), 8.35(m, 1H), 8.08~7.65(m, 16H), 7.53~7.40(m, 4H), 7.39~7.11(m, 10H)	814

[0178]

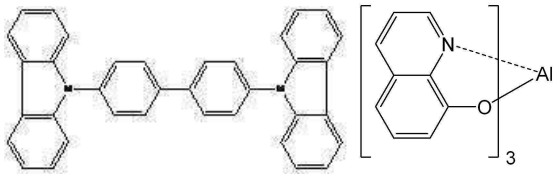
[0179] 비교예 1

[0180] 하기 화학식 a로 표시되는 화합물 a를 인광 녹색 호스트로 사용하고, 하기 화학식 b로 표시되는 화합물을 인광 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)/화합물a+화합물b(30nm)/Alq3(30nm)/LiF(0.5nm)/ Al(60nm).

[0181] 애노드는 코닝(Corning)사의 15Ω/cm^2 (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(8% 도핑)를 진공 증착하여 30nm두께의 발광층을 형성하

였다. 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 6에 표시된 바와 같은 유기발광소자를 제조하였다. 이를 비교샘플 1이라고 한다.

[0182] <화학식 a> <화학식 b>

[0183] 

[0184] 실시예 1~103

[0185] 상기 비교예 1 중, 발광층 인광 녹색 호스트 화합물로서 화합물 a 대신 상기 합성예에 개시된 화학식 1~103으로 표시되는 화합물 1~103을 발광층 인광 녹색 호스트 화합물로 각각 이용한 것을 제외하고는 상기 비교예 1과 동일한 방법으로 ITO/2-TNATA(80nm)/α-NPD(30nm)/[인광 녹색 호스트 화합물 1~103 중 하나+화합물 b(8%)](30nm)/Alq3(30nm)/LiF(0.5nm)/Al(60nm)의 구조를 갖는 유기발광소자를 제조하였다. 이를 각각 샘플 1 내지 103이라고 한다.

[0186] 평가예 1: 비교샘플 1 및 샘플 1~103의 발광 특성 평가

[0187] 비교샘플 1 및 샘플 1~2103에 대하여, Keithley SMU 235, PR650를 이용하여 발광휘도, 발광효율, 발광피크를 각각 평가하여, 그 결과를 하기 [제5표군(群)]에 나타내었다. 상기 샘플들은 516~524nm 범위에서 녹색 발광 피크값을 보여주었다.

[0188] [제5표군(群)]

샘플 No.	호스트 화합물 No.	도판트 화합물 No.	휘도 [cd/m^2]	효율 [cd/A]	발광피크 [nm]
비교샘플 1	a	b	2325	23.2	516
1	1	b	2622	26.2	524
2	2	b	2096	21.0	521
3	3	b	2428	24.3	522
4	4	b	1985	19.9	524
5	5	b	2489	24.9	523
6	6	b	2122	21.2	517
7	7	b	2432	24.3	520
8	8	b	2243	22.4	523
9	9	b	2275	22.8	516
10	10	b	2308	23.1	517
11	11	b	2258	22.6	518
12	12	b	2204	22.0	522
13	13	b	1913	19.1	524
14	14	b	1958	19.6	519
15	15	b	2527	25.3	519
16	16	b	2149	21.5	522
17	17	b	2377	23.8	518
18	18	b	2494	24.9	517
19	19	b	2186	21.9	521
20	20	b	2385	23.9	517
21	21	b	2374	23.7	518
22	22	b	2093	20.9	523

[0189]

23	23	b	2320	23.2	517
24	24	b	2148	21.5	516
25	25	b	1998	20.0	519
26	26	b	2304	23.0	516
27	27	b	2162	21.6	519
28	28	b	2042	20.4	523
29	29	b	2267	22.7	524
30	30	b	2517	25.2	521
31	31	b	1980	19.8	520
32	32	b	2152	21.5	518
33	33	b	2028	20.3	523
34	34	b	2103	21.0	518
35	35	b	2544	25.4	518
36	36	b	2484	24.8	523
37	37	b	2631	26.3	520
38	38	b	2288	22.9	523
39	39	b	2494	24.9	518
40	40	b	2674	26.7	518
41	41	b	2045	20.5	516
42	42	b	2215	22.2	523
43	43	b	2147	21.5	522
44	44	b	2303	23.0	516
45	45	b	2115	21.2	516
46	46	b	2281	22.8	522
47	47	b	2671	26.7	520
48	48	b	2196	22.0	517
49	49	b	1962	19.6	523

[0190]

50	50	b	2544	25.4	521
51	51	b	2122	21.2	521
52	52	b	2700	27.0	520
53	53	b	2582	25.8	516
54	54	b	2700	27.0	518
55	55	b	2460	24.6	517
56	56	b	2566	25.7	522
57	57	b	2370	23.7	517
58	58	b	2209	22.1	523
59	59	b	2076	20.8	516
60	60	b	2048	20.5	523
61	61	b	2630	26.3	521
62	62	b	2134	21.3	519
63	63	b	2082	20.8	522
64	64	b	2549	25.5	520
65	65	b	2026	20.3	518
66	66	b	2015	20.2	516
67	67	b	2207	22.1	517
68	68	b	2283	22.8	520
69	69	b	2139	21.4	516
70	70	b	2262	22.6	523
71	71	b	2332	23.3	521
72	72	b	2025	20.3	523
73	73	b	2698	27.0	522
74	74	b	2585	25.9	519
75	75	b	2343	23.4	517
76	76	b	2595	26.0	523

[0191]

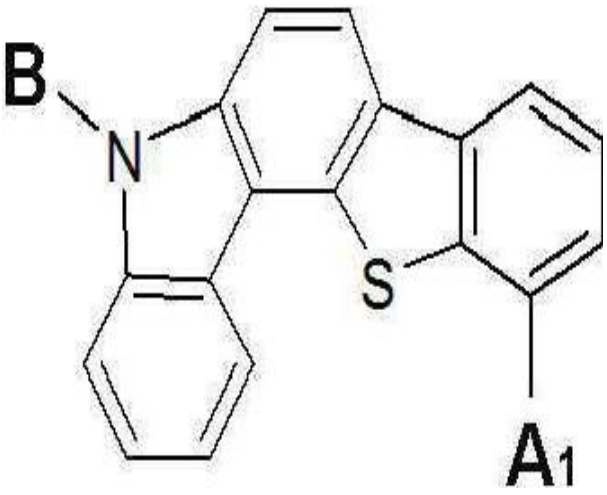
77	77	b	2232	22.3	518
78	78	b	2024	20.2	523
79	79	b	2482	24.8	518
80	80	b	2166	21.7	517
81	81	b	2421	24.2	518
82	82	b	2386	23.9	517
83	83	b	2359	23.6	522
84	84	b	2507	25.1	521
85	85	b	2250	22.5	518
86	86	b	2179	21.8	523
87	87	b	1988	19.9	520
88	88	b	2144	21.4	520
89	89	b	2087	20.9	516
90	90	b	2169	21.7	521
91	91	b	2112	21.1	516
92	92	b	1992	19.9	519
93	93	b	2453	24.5	524
94	94	b	1964	19.6	518
95	95	b	2212	22.1	523
96	96	b	2210	22.1	517
97	97	b	2374	23.7	520
98	98	b	2159	21.6	517
99	99	b	1979	19.8	521
100	100	b	2184	21.8	523
101	101	b	2311	23.1	516
102	102	b	2677	26.8	524
103	103	b	2349	23.5	523

[0192]

[0193] 상기 [제5표군(群)]에 보여지는 바와 같이 샘플 1 내지 103중에는 비교샘플 1에 비하여 향상된 발광 특성을 나타내는 화합물이 있었다.

[0194] 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	KR1020140116043A	公开(公告)日	2014-10-01
申请号	KR1020140104378	申请日	2014-08-12
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	NO GILL PARK 박노길 KEUN HEE HAN 한근희 JUNG BOK AN 안중복 BOK YOUNG KIM 김복영		
发明人	박노길 한근희 안중복 김복영		
IPC分类号	C09K11/06 C07D495/04 H01L51/50		
CPC分类号	C07D495/04 C09K11/06 H01L51/0062 H01L51/0067 H01L51/0071 H01L51/0074 H01L51/5016		
优先权	1020110038136 2011-04-25 KR		
外部链接	Espacenet		

摘要(译)

有机发光化合物和使用其的有机光子器件本发明涉及有机发光化合物和使用其的有机光子器件。更具体地说，本发明涉及一种有机发光化合物rhodibenzothiophene衍生物，其作为磷光主体材料具有优异的电荷传输性能并且与掺杂剂的吸收光谱重叠。并且有机发光器件或使用其的光伏发电的光电器件实现了改进的发光效率，低电压驱动和优异的显色速率。