



(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 등록특허공보(B1)

(45) 공고일자 2019년09월05일
 (11) 등록번호 10-1974860
 (24) 등록일자 2019년04월26일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)
 C09K 11/06 (2006.01) H01L 51/00 (2006.01)
 H01L 51/50 (2006.01)
 (52) CPC특허분류
 C09K 11/06 (2013.01)
 H01L 51/0059 (2013.01)
 (21) 출원번호 10-2015-0017265
 (22) 출원일자 2015년02월04일
 심사청구일자 2017년04월04일
 (65) 공개번호 10-2016-0095827
 (43) 공개일자 2016년08월12일
 (56) 선행기술조사문헌
 KR1020090086015 A*
 KR1020100093064 A*
 KR1020100108903 A*
 *는 심사관에 의하여 인용된 문헌

(73) 특허권자
 에스에프씨주식회사
 충청북도 청주시 청원구 오창읍 과학산업5로 89
 (72) 발명자
 차순욱
 경기도 고양시 일산동구 노루목로 80 호수마을3단
 지아파트 317-1003
 박석배
 충청남도 금산군 금산읍 후곶천길 18 해맑은 아파
 트 101-704
 (뒷면에 계속)
 (74) 대리인
 특허법인 공간

전체 청구항 수 : 총 16 항

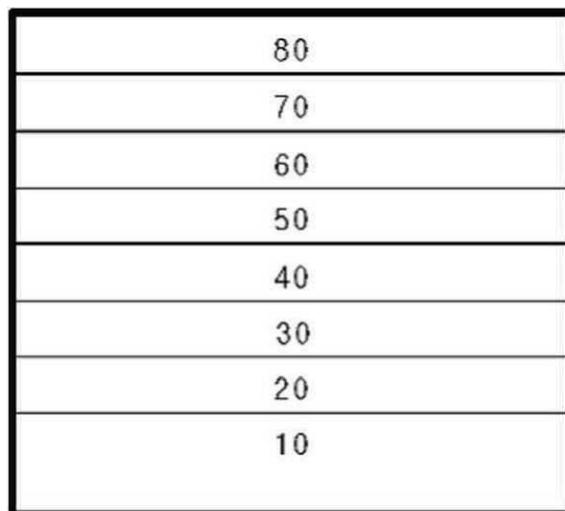
심사관 : 송이화

(54) 발명의 명칭 **저전압구동이 가능하며 장수명을 갖는 유기 발광 소자**

(57) 요약

본 발명은 저전압구동이 가능하며 또한 장수명을 갖는 유기발광소자에 관한 것으로, 보다 자세하게는 제1전극; 상기 제1전극에 대향된 제2전극; 및 상기 제1전극과 상기 제2전극 사이에 개재되는 발광층;을 포함하는 유기발광 소자로서, 상기 발광층이 [화학식 A] 또는 [화학식 B]로 표시되는 아민 화합물 중 적어도 하나와, [화학식 D]로 표시되는 화합물 중 적어도 하나를 포함하는 유기 발광 소자에 관한 것으로, 상기 [화학식 A], [화학식 B] 및 [화학식 D]의 구조는 발명의 상세한 설명에 기재된 바와 동일하다

대표도 - 도1



(52) CPC특허분류

H01L 51/5012 (2013.01)

H01L 2924/12044 (2013.01)

(72) 발명자

박상우

서울특별시 종로구 창신8길 31

신유나

서울특별시 성북구 정릉로 305 경남아파트 101동
1004호

김희대

경상남도 밀양시 교동로 180

명세서

청구범위

청구항 1

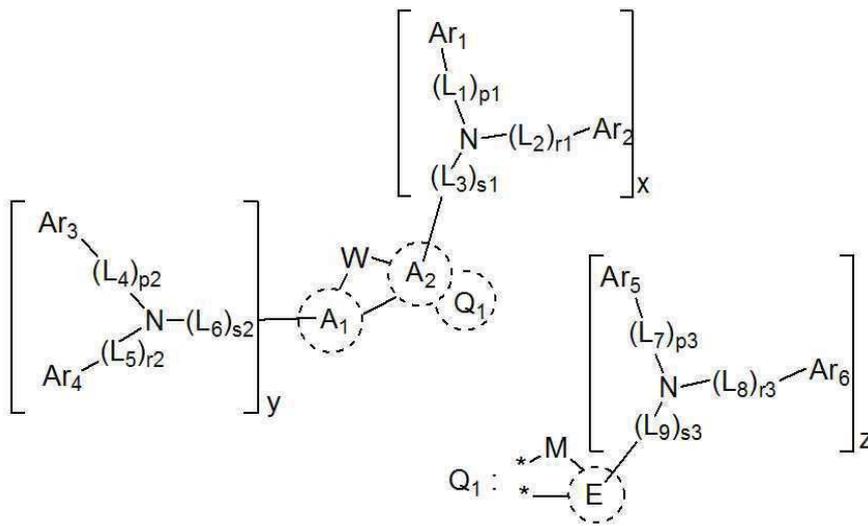
제1전극;

상기 제1전극에 대향된 제2전극; 및

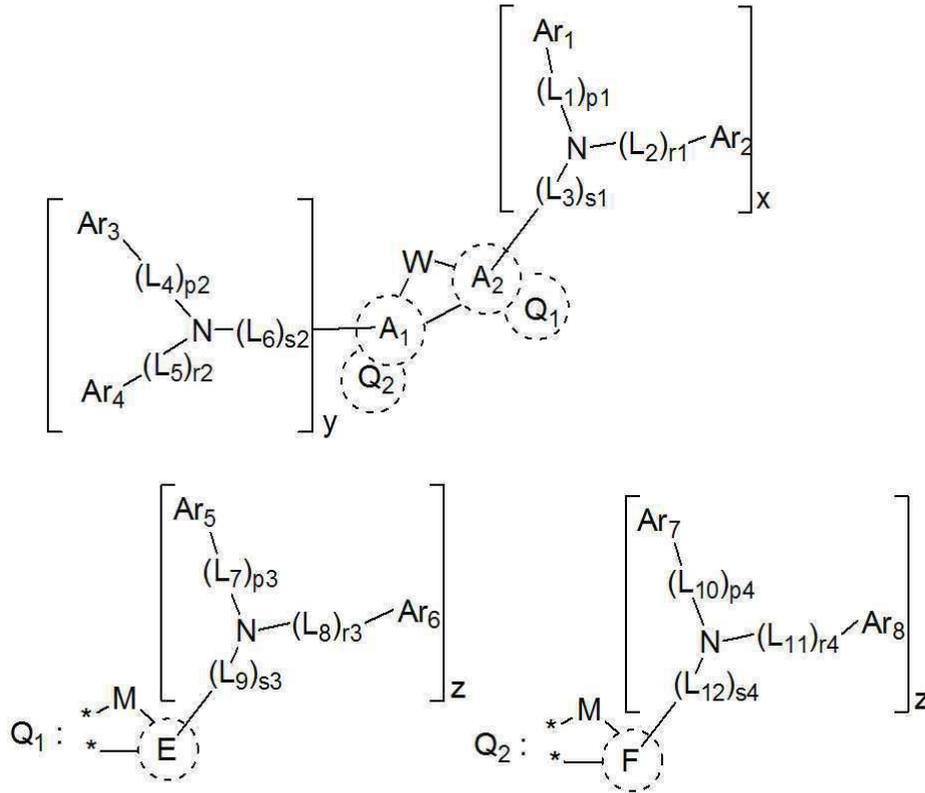
상기 제1전극과 상기 제2전극 사이에 개재되는 발광층;을 포함하는 유기발광소자로서,

상기 발광층이 하기 [화학식 A] 또는 [화학식 B]로 표시되는 아민 화합물 중 적어도 하나를 포함하며, 또한 하기 [화학식 D]로 표시되는 화합물을 포함하는 유기발광소자.

[화학식 A]



[화학식 B]



상기 [화학식 A] 및 [화학식 B]에서, A₁, A₂, E 및 F는 각각 서로 동일하거나 상이하고, 서로 독립적으로 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 50의 방향족 탄화수소 고리, 또는 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 40의 방향족 헤테로고리이고;

상기 A₁의 방향족 고리내 서로 이웃한 두개의 탄소원자와, 상기 A₂의 방향족 고리내 서로 이웃한 두개의 탄소원자는 상기 W와 함께 5원환을 형성함으로써 각각 축합고리를 형성하며;

상기 연결기 L₁ 내지 L₁₂는 각각 서로 동일하거나 상이하고, 서로 독립적으로 단일 결합, 또는 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 60의 아릴렌기 중에서 선택되며;

상기 W는 CR₁R₂, SiR₁R₂, O, S 중에서 선택되며,

상기 M은 N-R₃, CR₄R₅, SiR₆R₇, O, S중에서 선택되는 어느 하나이며;

상기 치환기 R₁ 내지 R₇, Ar₁ 내지 Ar₈은 각각 서로 동일하거나 상이하고, 서로 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 50의 아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 30의 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 50의 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬실릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 30의 아릴실릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬게르마늄기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 아릴게르마늄기, 시아노기, 니트로기, 할로젠기 중에서 선택되는 어느하나이되,

상기 R₁ 및 R₂는 서로 연결되어 지환족, 방향족의 단일환 또는 다환 고리를 형성할 수 있으며, 상기 형성된 지환족, 방향족의 단일환 또는 다환 고리의 탄소원자는 N, O, P, Si, S 중에서 선택되는 어느 하나 이상의 헤테로원자로 치환될 수 있으며;

상기 p1 내지 p4, r1 내지 r4, s1 내지 s4는 각각 1 내지 3의 정수이되, 이들 각각이 2 이상인 경우에 각각의 연결기 L₁ 내지 L₁₂는 서로 동일하거나 상이하고,

상기 Ar₁ 과 Ar₂, Ar₃과 Ar₄, Ar₅와 Ar₆, 및 Ar₇과 Ar₈은 각각 서로 연결되어 고리를 형성할 수 있고;

[화학식 A]에서,

상기 x는 1이고,

y 및 z는 각각 동일하거나 상이하며, 서로 독립적으로 0 또는 1의 정수이되, y 및 z가 동시에 0인 경우는 제외하며,

[화학식 B]에서,

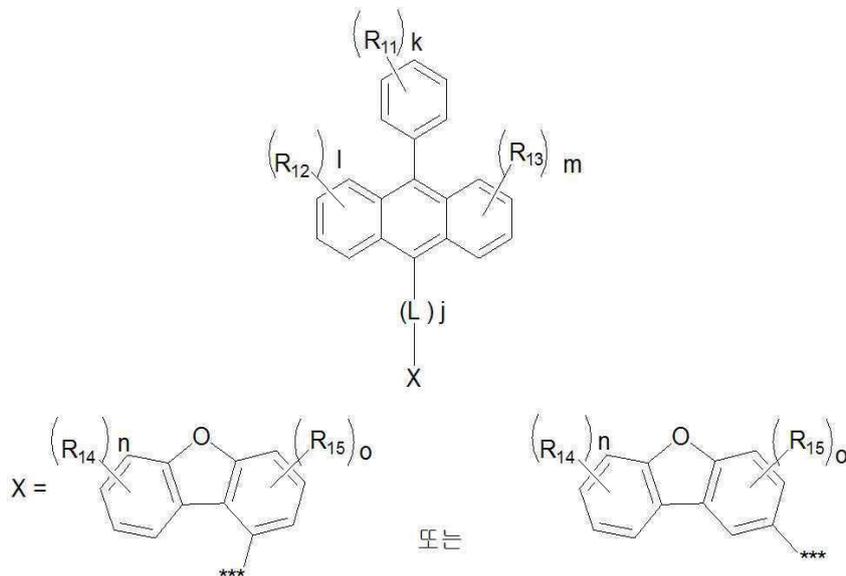
상기 x는 1이고,

y 및 z는 각각 동일하거나 상이하며, 서로 독립적으로 0 또는 1이며,

상기 화학식 A에서 A₂ 고리내 서로 이웃한 두개의 탄소원자는 상기 구조식 Q₁의 *와 결합하여 축합고리를 형성하고,

상기 화학식 B에서 상기 A₁ 고리내 서로 이웃한 두개의 탄소원자는 상기 구조식 Q₂의 *와 결합하여 축합고리를 형성하고, 상기 A₂ 고리내 서로 이웃한 두개의 탄소원자는 상기 구조식 Q₁의 *와 결합하여 축합고리를 형성한다.

[화학식 D]



상기 [화학식 D] 에서,

치환기 R₁₁ 내지 R₁₅는,

각각 동일하거나 상이하고, 서로 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 30의 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 50의 아릴기, 치환 또는 비치환되고 이종원자로 O, N 또는 S를 갖는 탄소수 2 내지 50의 헤테로아릴기, 시아노기, 니트로기, 할로젠기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 실릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 게르마늄기 중에서 선택되는 어느 하나이고,

상기 R₁₁ 내지 R₁₅의 치환기가 결합되지 않은 방향족 고리의 탄소에는 수소가 결합되며,

상기 연결기 L은 단일 결합, 또는 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 60의 아릴렌기이며;

j는 0 내지 2의 정수이고, 상기 j가 2 이상인 경우 각각의 L은 서로 동일하거나 상이하며,

k는 1 내지 5의 정수이고,

l 내지 n은 각각 서로 동일하거나 상이하고, 서로 독립적으로 1 내지 4의 정수이며,

o 는 1 내지 3의 정수이되,

상기 k 내지 o가 각각 2 이상인 경우 각각의 R₁₁ 내지 R₁₅는 서로 동일하거나 상이하며,

X의 '***'는 연결기 L과 결합하는 결합사이트이고,

상기 [화학식 A], [화학식 B] 및 [화학식 D]에서의 '치환 또는 비치환된'에서의 '치환'은 중수소, 시아노기, 할로젠기, 히드록시기, 니트로기, 탄소수 1 내지 24의 알킬기, 탄소수 1 내지 24의 할로겐화된 알킬기, 탄소수 6 내지 24의 아릴기, 탄소수 6 내지 24의 아릴알킬기, 탄소수 2 내지 24의 헤테로아릴기 또는 탄소수 2 내지 24의 헤테로아릴알킬기, 탄소수 1 내지 24의 알킬실릴기, 탄소수 1 내지 24의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택된 1개 이상의 치환기로 치환되는 것을 의미한다.

청구항 2

제 1 항에 있어서,

상기 유기발광소자의 발광층은 호스트와 도판트를 포함하여 이루어지고,

상기 [화학식 A] 또는 [화학식 B]로 표시되는 아민 화합물은 도판트로서 사용되며, 상기 [화학식 D]로 표시되는 화합물은 호스트로서 사용되는 것을 특징으로 하는 유기 발광 소자

청구항 3

제 1 항에 있어서,

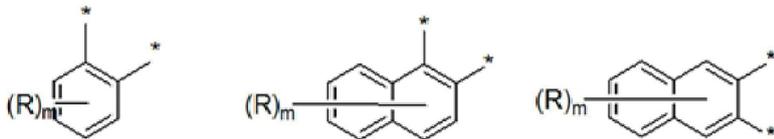
상기 화학식 A 또는 화학식 B에서의 A₁, A₂, E 및 F는 각각 동일하거나 상이하고, 서로 독립적으로 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 50의 방향족 탄화수소 고리인 것을 특징으로 하는 유기 발광 소자.

청구항 4

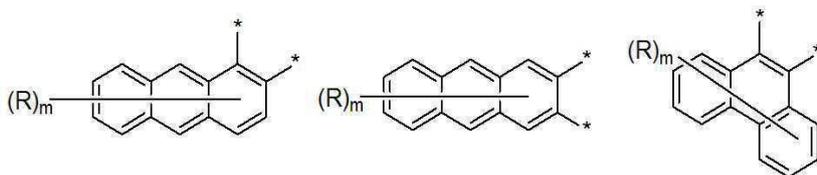
제 3 항에 있어서,

상기 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 50의 방향족 탄화수소 고리는 동일하거나 상이하고, 서로 독립적으로 [구조식 10] 내지 [구조식 21] 중에서 선택되는 어느 하나인 것을 특징으로 하는 유기 발광 소자.

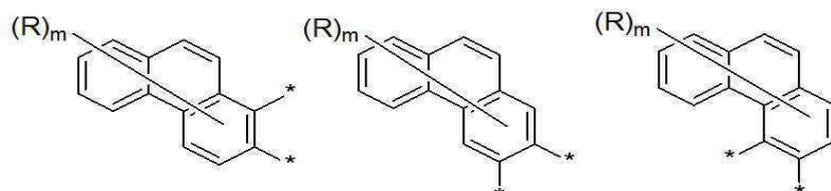
[구조식 10] [구조식 11] [구조식 12]



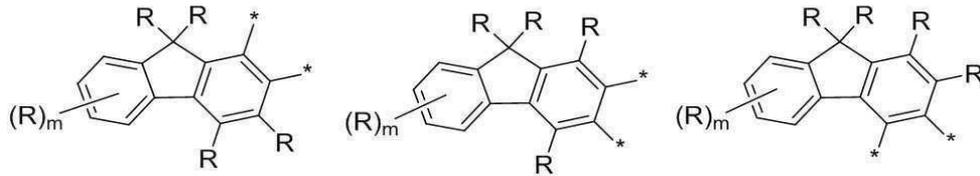
[구조식 13] [구조식 14] [구조식 15]



[구조식 16] [구조식 17] [구조식 18]



[구조식 19] [구조식 20] [구조식 21]



상기 [구조식 10] 내지 [구조식 21]에서 "-*"는 상기 W를 포함하는 5원환을 형성하거나, 또는 상기 구조식 Q₁ 및 Q₂에서의 M을 포함하는 5원환을 형성하기 위한 결합 사이트를 의미하며,

상기 [구조식 10] 내지 [구조식 21]의 방향족 탄화수소 고리가 A₁고리 또는 A₂고리에 해당하면서 구조식 Q₁ 또는 구조식 Q₂와 결합하는 경우에는 이들중 서로 이웃한 두개의 탄소원자는 상기 구조식 Q₁의 *와 결합하거나 또는 구조식 Q₂의 *와 결합하여 축합고리를 형성하며;

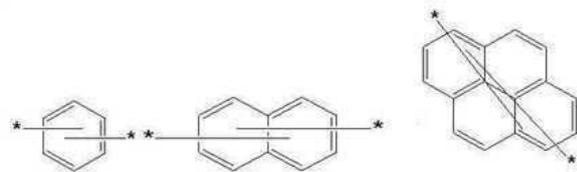
상기 [구조식 10] 내지 [구조식 21]에서 상기 R은 제1항에서 정의한 R₁ 및 R₂과 동일하고, m은 1 내지 8의 정수이며, m이 2이상인 경우 또는 R이 2이상인 경우에는 각각의 R은 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

청구항 5

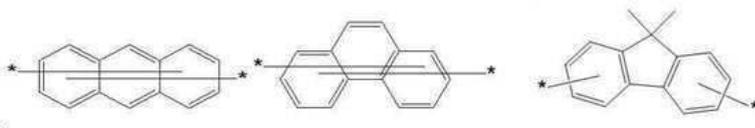
제 2 항에 있어서,

상기 화학식 D의 안트라센 유도체의 연결기 L은 단일결합이거나, 아래 [구조식 22], [구조식 23], [구조식 25], [구조식 27], [구조식 28] 또는 [구조식 30] 중에서 선택되는 어느 하나인 것을 특징으로 하는 유기 발광 소자.

[구조식 22] [구조식 23] [구조식 25]



[구조식 27] [구조식 28] [구조식 30]



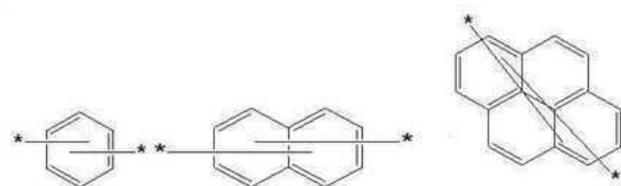
상기 연결기 L에서 방향족 고리의 탄소자리는 수소 또는 중수소가 결합될 수 있다.

청구항 6

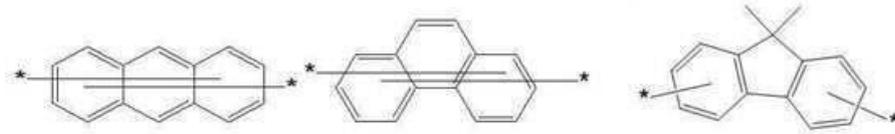
제1항에 있어서,

상기 화학식 A 및 화학식 B내 연결기 L₁ 내지 L₁₂는 단일결합이거나, 아래 [구조식 22], [구조식 23], [구조식 25], [구조식 27], [구조식 28] 또는 [구조식 30] 중에서 선택되는 어느 하나인 것을 특징으로 하는 유기발광 화합물.

[구조식 22] [구조식 23] [구조식 25]



[구조식 27] [구조식 28] [구조식 30]



상기 연결기 L에서 방향족 고리의 탄소자리는 수소 또는 중수소가 결합될 수 있다.

청구항 7

제 1 항에 있어서,

상기 화학식 D 내 치환기 R₁₁ 내지 R₁₅ 중 하나 이상은 중수소를 포함하는 것을 특징으로 하는 유기발광 화합물.

청구항 8

제 7 항에 있어서,

상기 R₁₁은 중수소이고, k는 5인 것을 특징으로 하는 유기발광 화합물.

청구항 9

제 7 항에 있어서,

상기 R₁₂ 및/또는 R₁₃는 중수소이고, l이 2이상이거나 또는 m이 2이상인 것을 특징으로 하는 유기발광 화합물.

청구항 10

제 7 항에 있어서,

상기 R₁₄ 및/또는 R₁₅는 중수소이고, n 이 2이상이거나 또는 o가 2이상인 것을 특징으로 하는 유기 발광 소자.

청구항 11

제1항에 있어서,

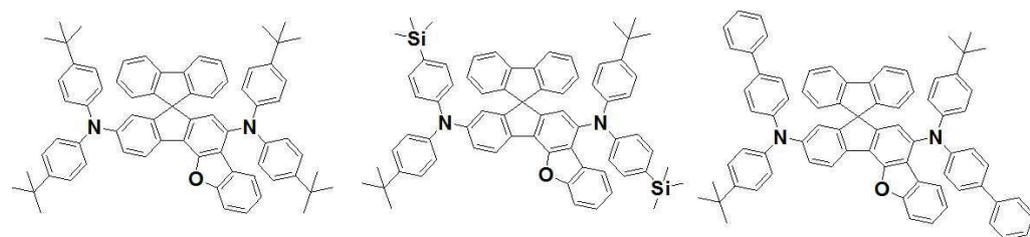
상기 [화학식 A] 및 [화학식 B]의 W는 CR₁R₂ 또는, SiR₁R₂인 것을 특징으로 하는 유기발광소자.

청구항 12

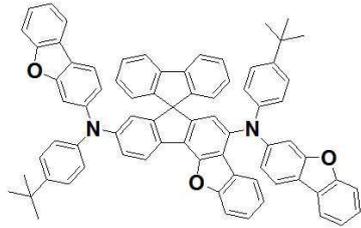
제1항에 있어서,

상기 아민화합물은 하기 [화학식 1] 내지 [화학식239] 중에서 선택되는 어느 하나인 것을 특징으로 하는 유기발광소자.

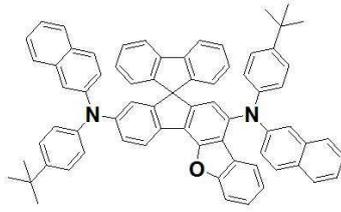
<화학식 1 > <화학식 2 > <화학식 3>



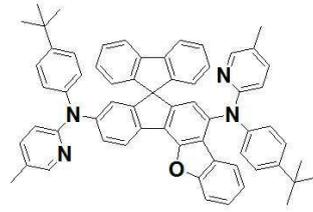
<화학식 4 >



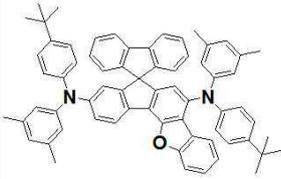
<화학식 5 >



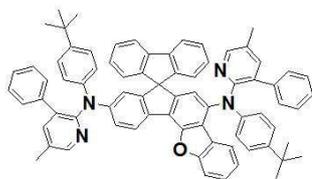
<화학식 6 >



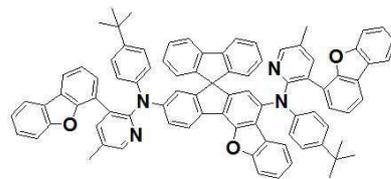
<화학식 7 >



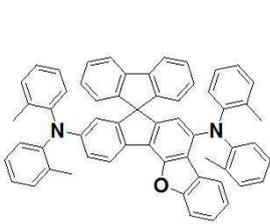
<화학식 8 >



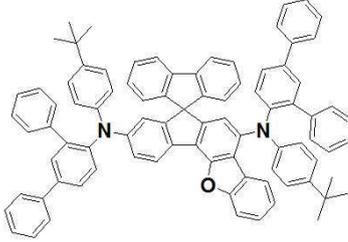
<화학식 9 >



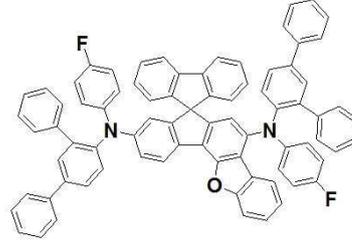
<화학식 10 >



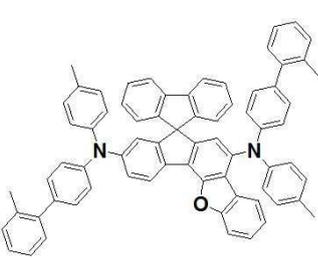
<화학식 11 >



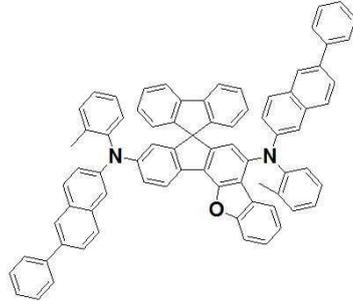
<화학식 12 >



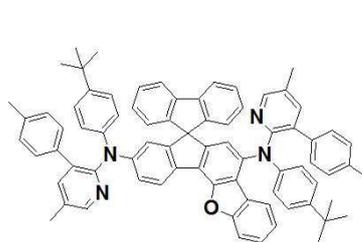
<화학식 13 >



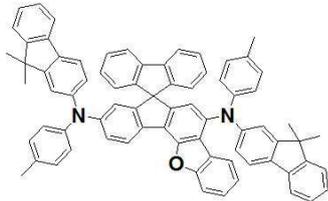
<화학식 14 >



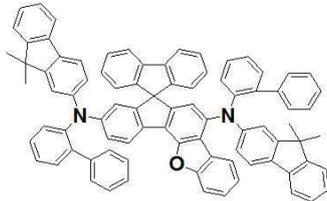
<화학식 15 >



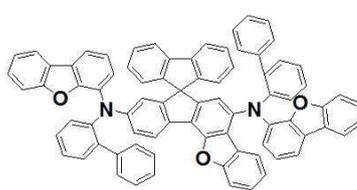
<화학식 16 >



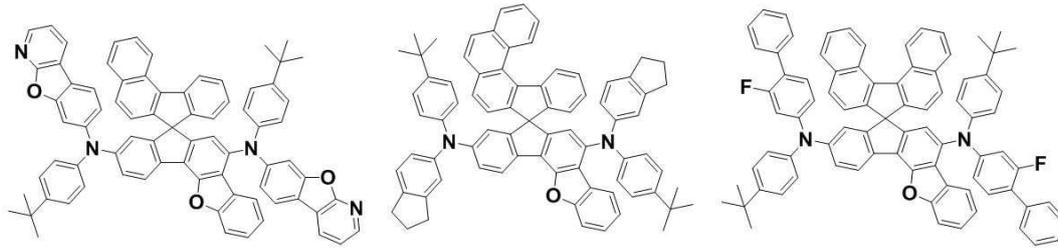
<화학식 17 >



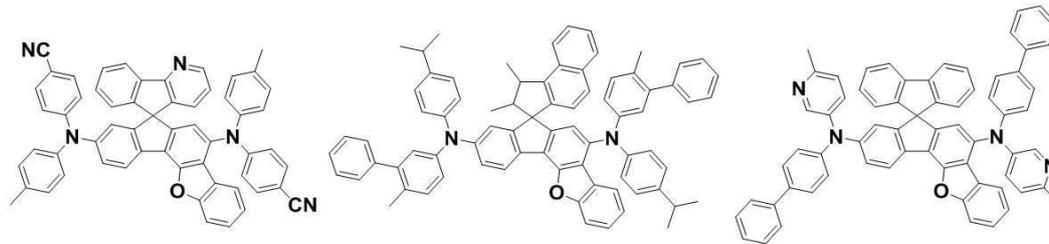
<화학식 18 >



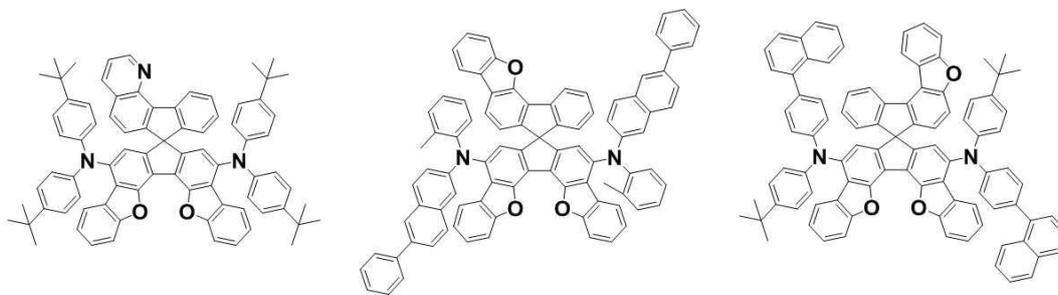
<화학식 19 > <화학식 20 > <화학식 21>



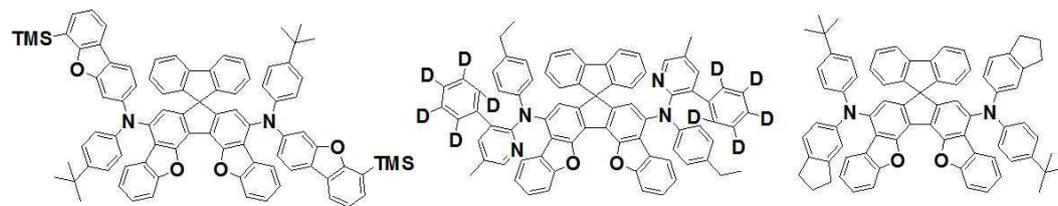
<화학식 22 > <화학식 23 > <화학식 24>



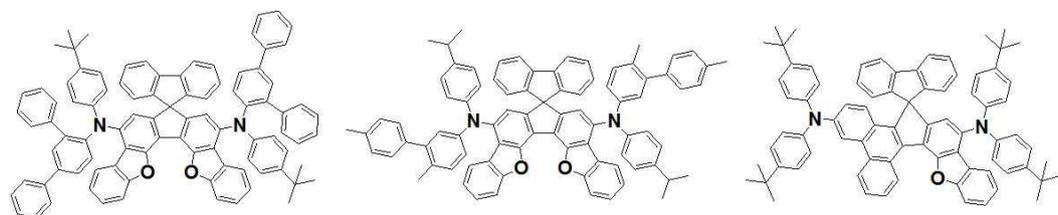
<화학식 25 > <화학식 26 > <화학식 27>



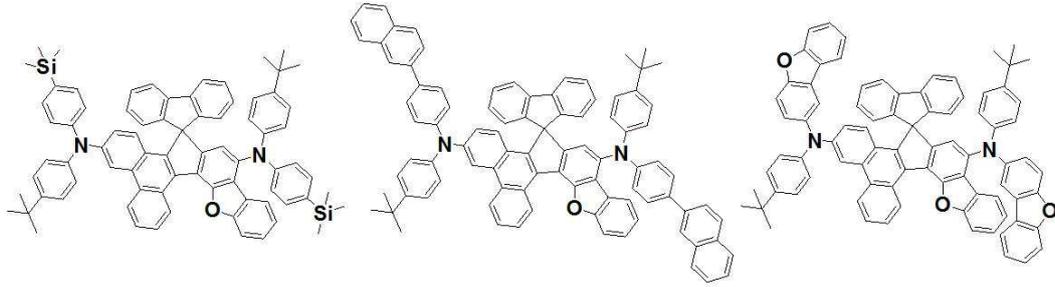
<화학식 28 > <화학식 29 > <화학식 30>



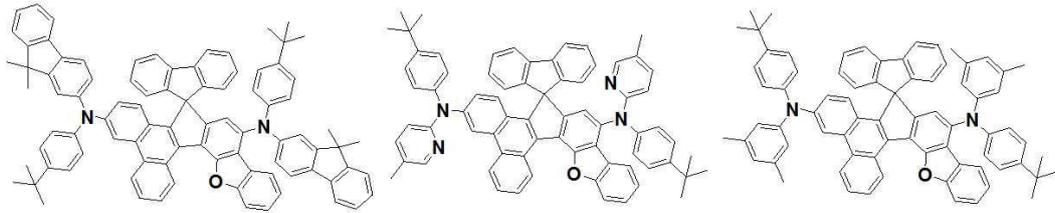
<화학식 31 > <화학식 32 > <화학식 33>



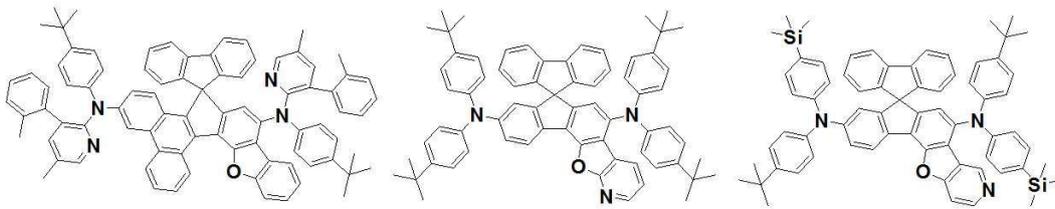
<화학식 34 > <화학식 35 > <화학식 36>



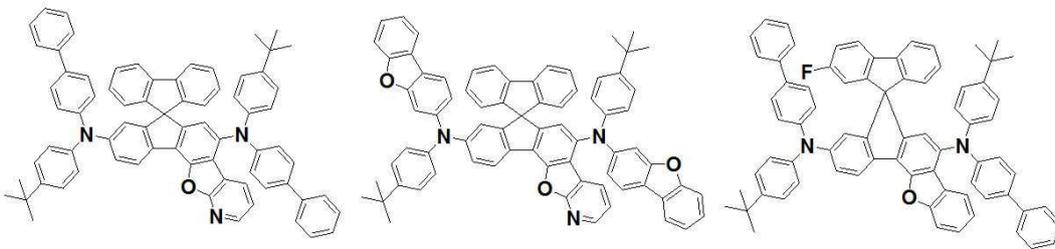
<화학식 37 > <화학식 38 > <화학식 39>



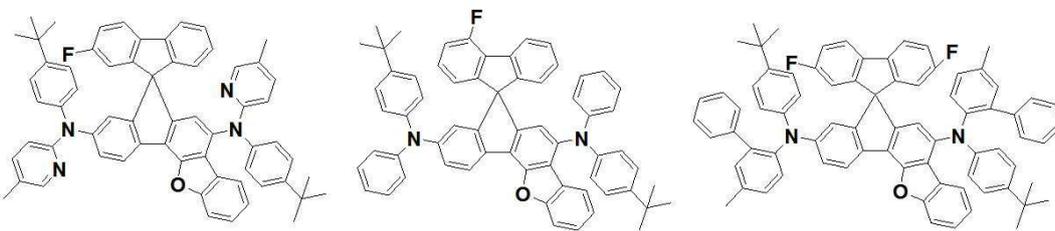
<화학식 40 > <화학식 41 > <화학식 42>



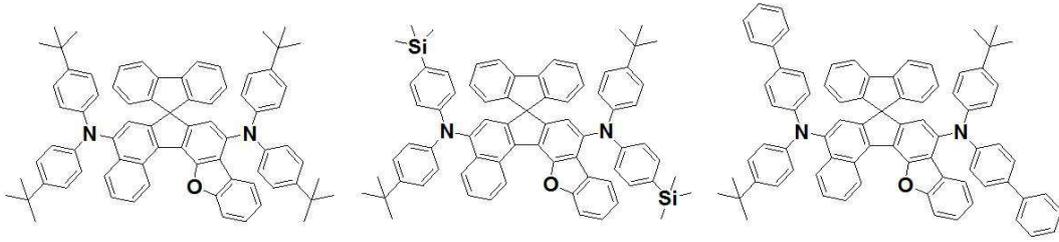
<화학식 43 > <화학식 44 > <화학식 45>



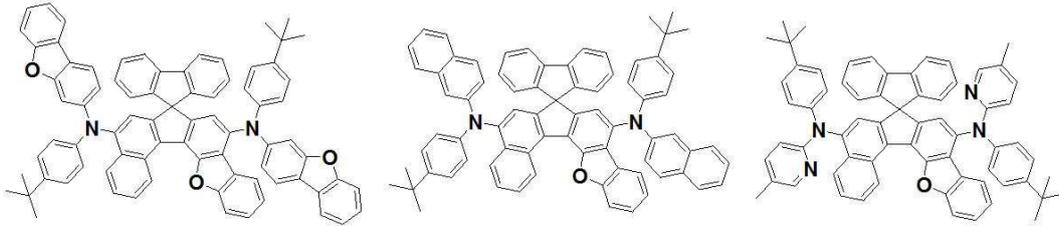
<화학식 46 > <화학식 47 > <화학식 48>



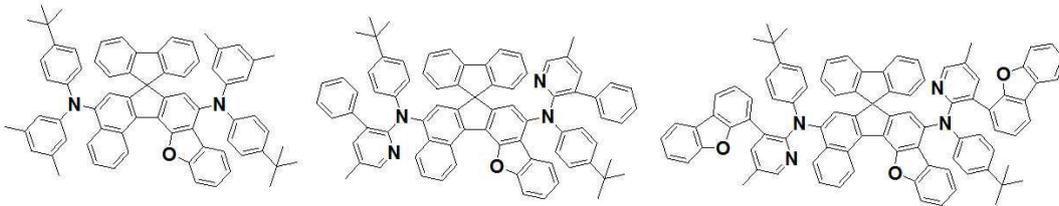
<화학식 49 > <화학식 50 > <화학식 51>



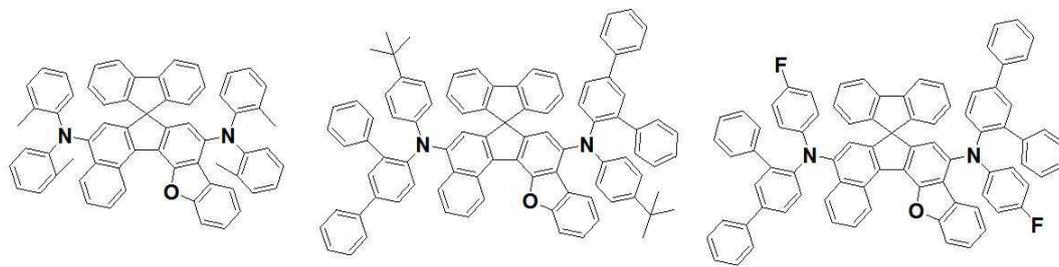
<화학식 52 > <화학식 53 > <화학식 54>



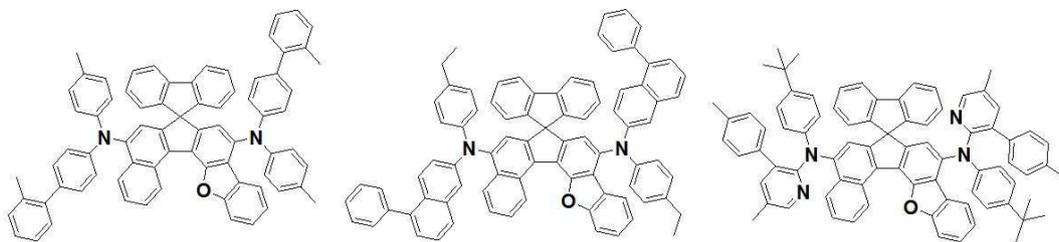
<화학식 55 > <화학식 56 > <화학식 57>



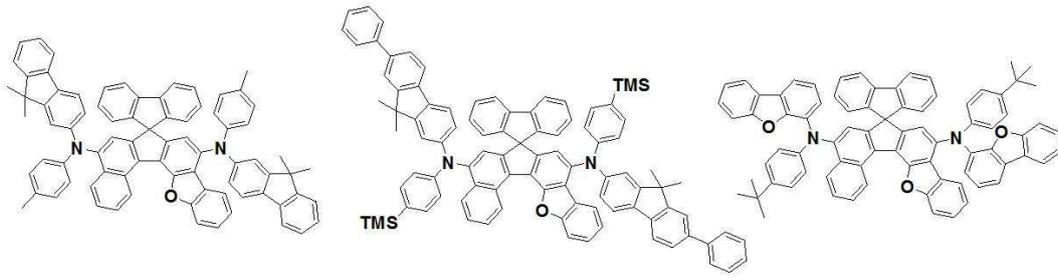
<화학식 58 > <화학식 59 > <화학식 60>



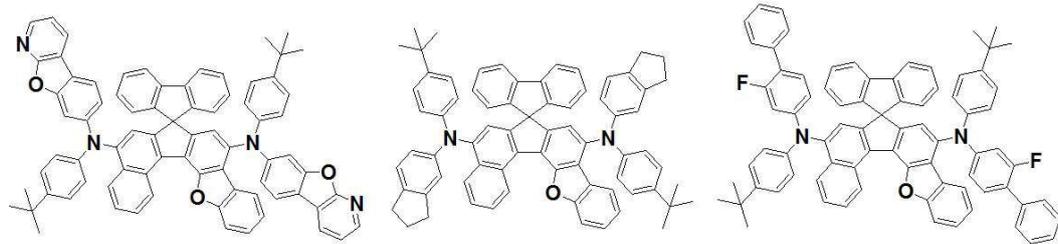
<화학식 61 > <화학식 62 > <화학식 63>



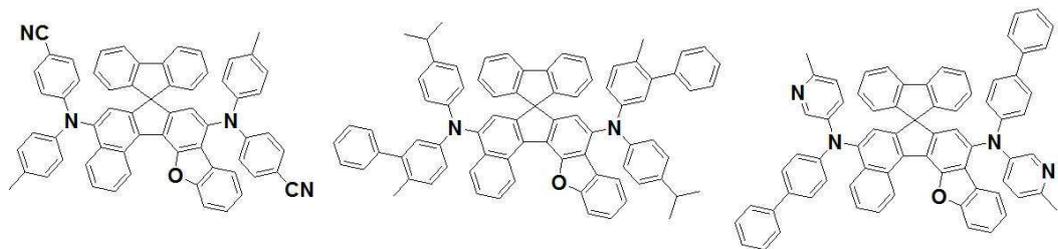
<화학식 64 > <화학식 65 > <화학식 66>



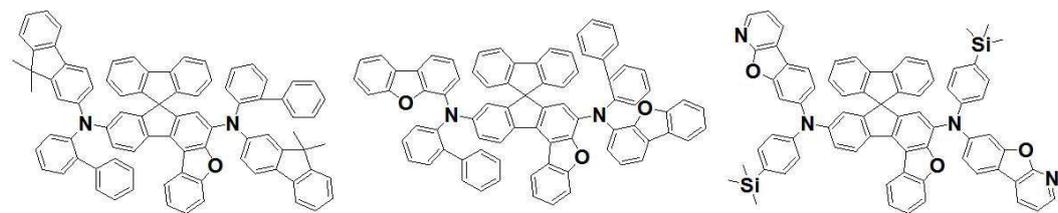
<화학식 67 > <화학식 68 > <화학식 69>



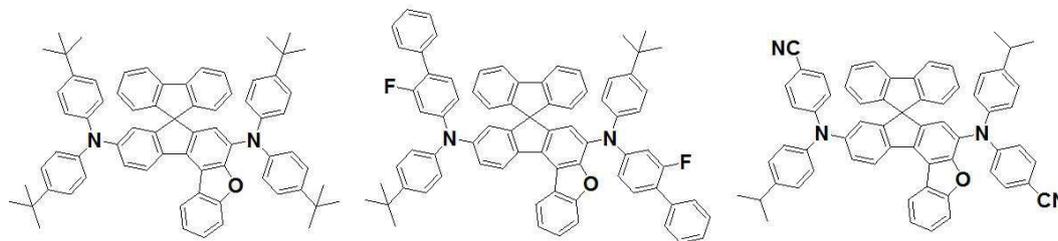
<화학식 70 > <화학식 71 > <화학식 72>



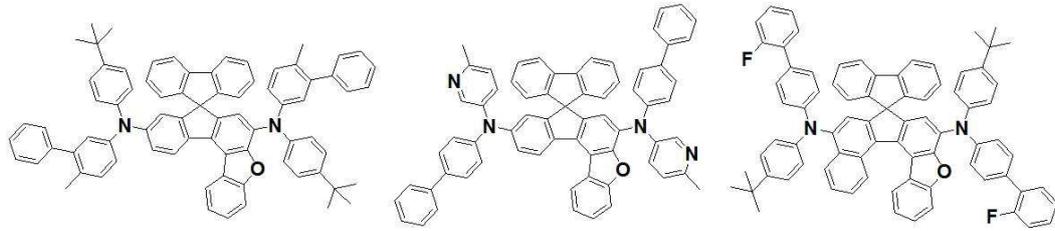
<화학식 73 > <화학식 74 > <화학식 75>



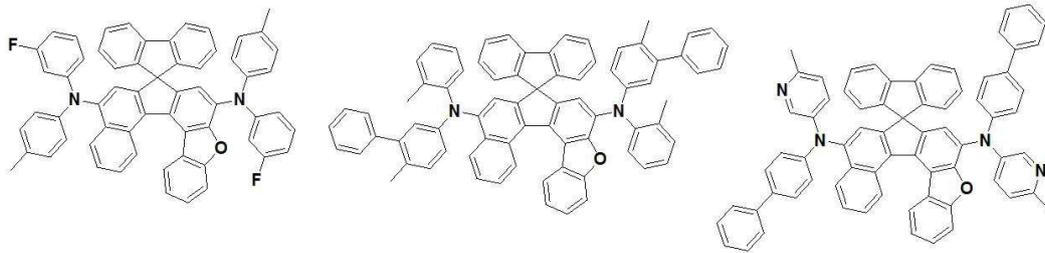
<화학식 76 > <화학식 77 > <화학식 78>



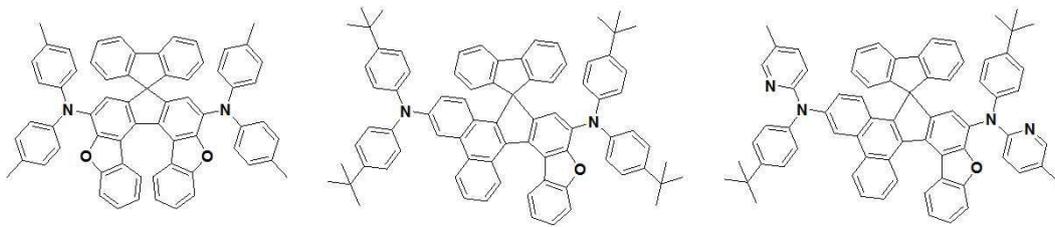
<화학식 79 > <화학식 80 > <화학식 81>



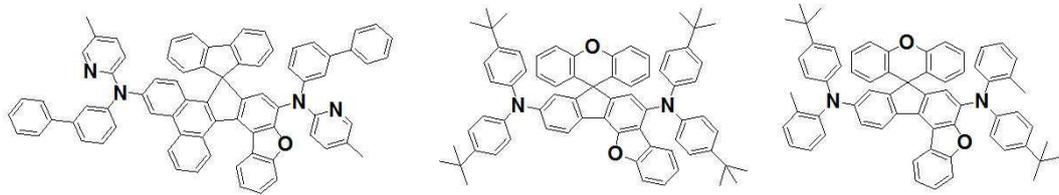
<화학식 82 > <화학식 83 > <화학식 84>



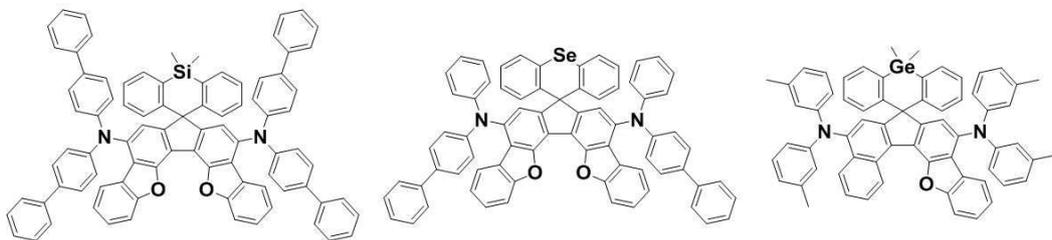
<화학식 85 > <화학식 86 > <화학식 87>



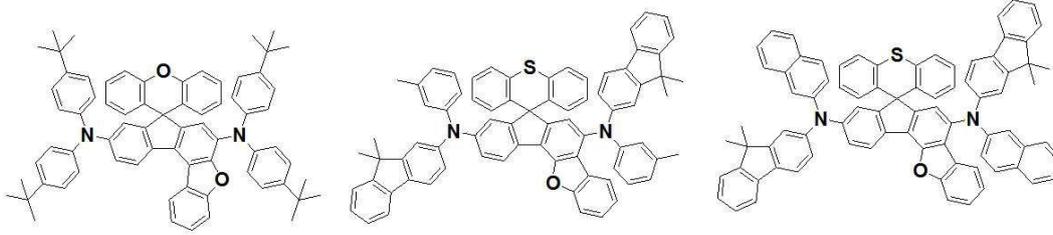
<화학식 88 > <화학식 89 > <화학식 90>



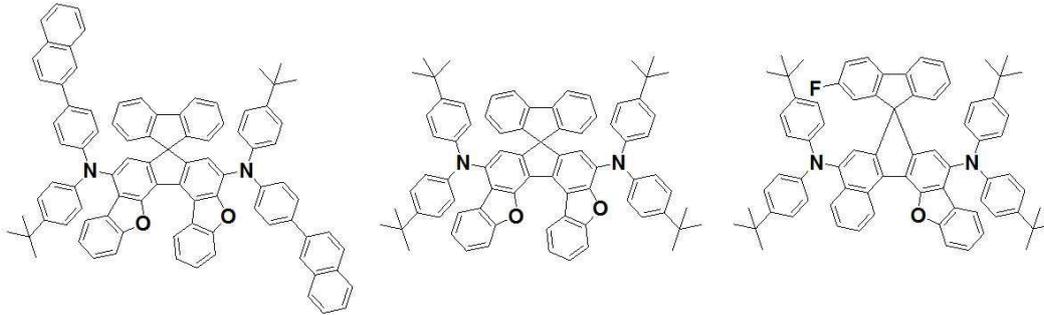
<화학식 91 > <화학식 92 > <화학식 93>



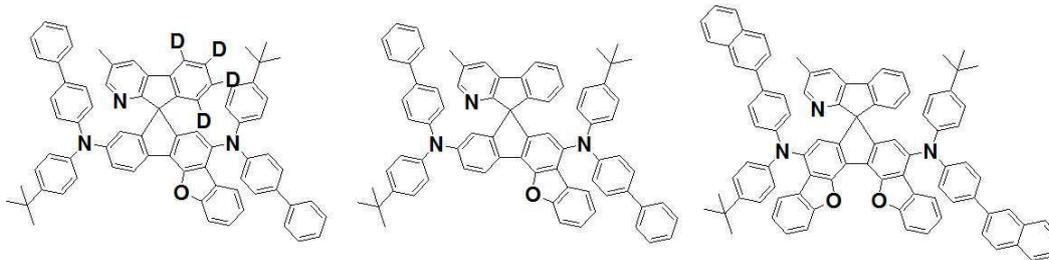
<화학식 94 > <화학식 95 > <화학식 96>



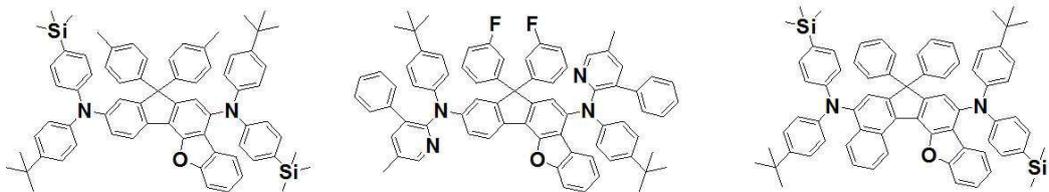
<화학식 97 > <화학식 98 > <화학식 99>



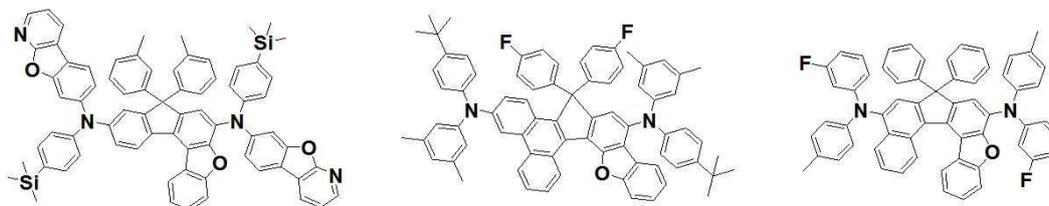
<화학식 100 > <화학식 101 > <화학식 102>



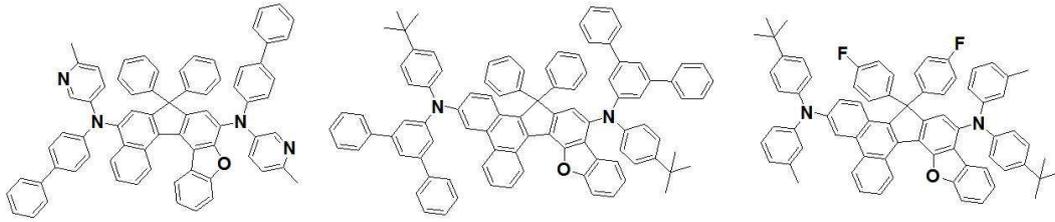
<화학식 103 > <화학식 104 > <화학식 105>



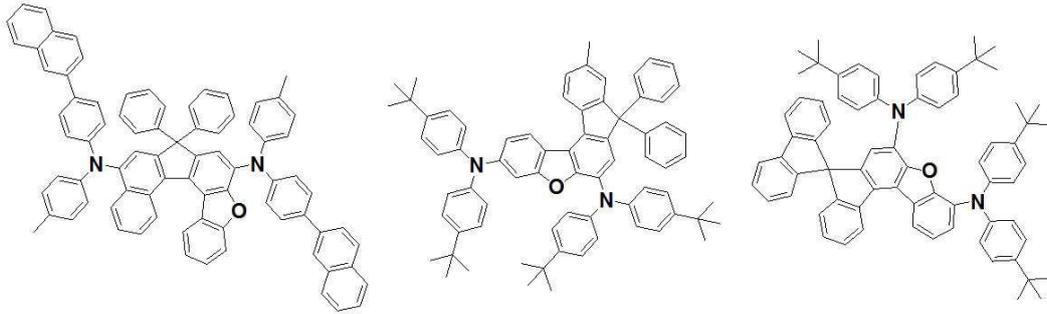
<화학식 106 > <화학식 107 > <화학식 108>



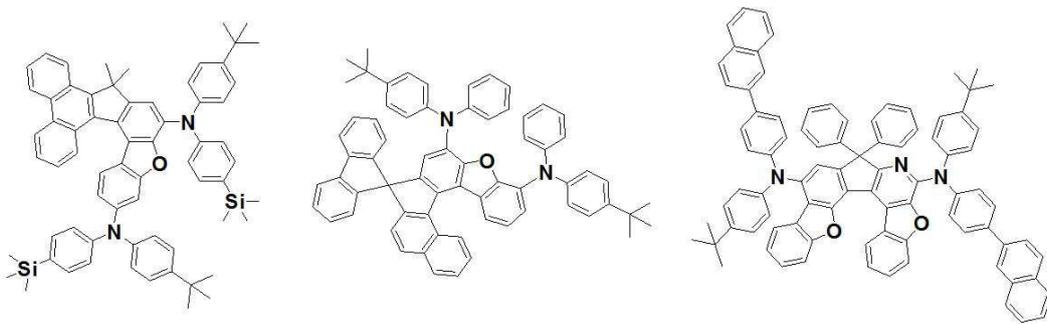
<화학식 109 > <화학식 110 > <화학식 111>



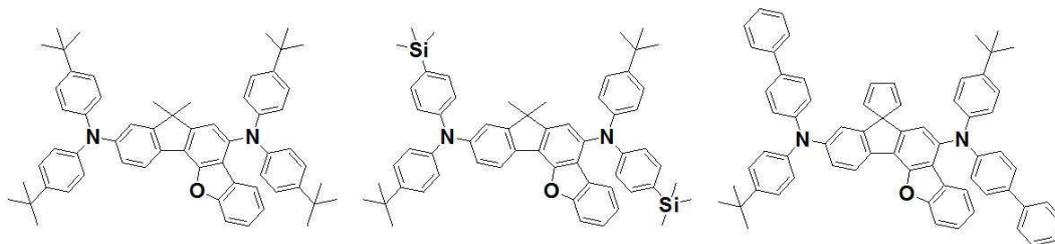
<화학식 112 > <화학식 113 > <화학식 114>



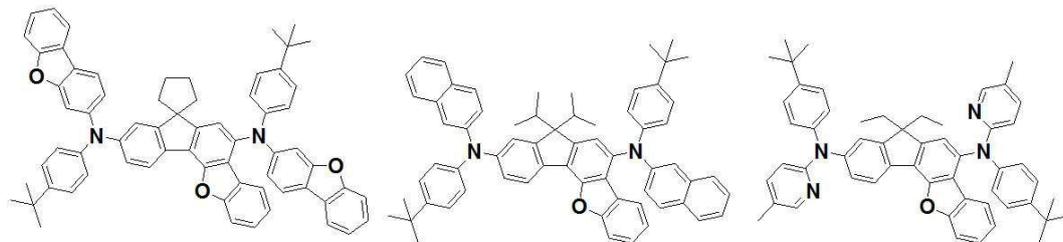
<화학식 115 > <화학식 116 > <화학식 117>



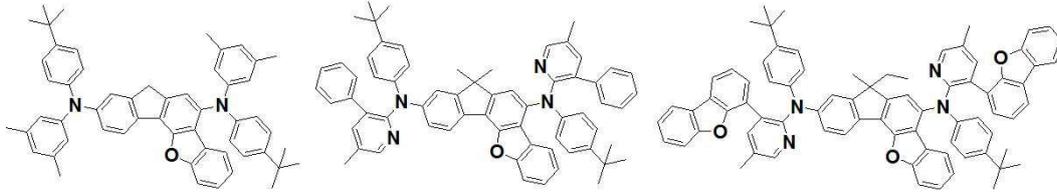
<화학식 118 > <화학식 119 > <화학식 120>



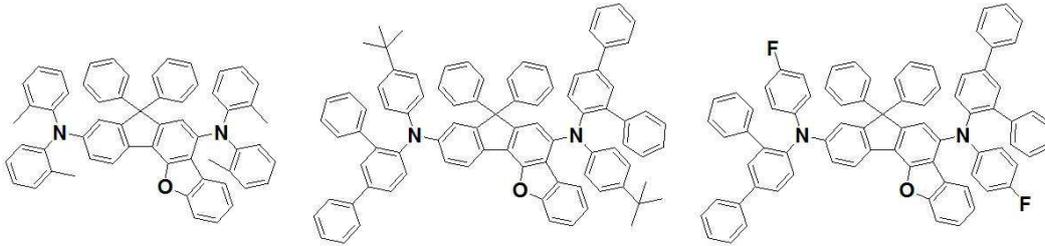
<화학식 121 > <화학식 122 > <화학식 123>



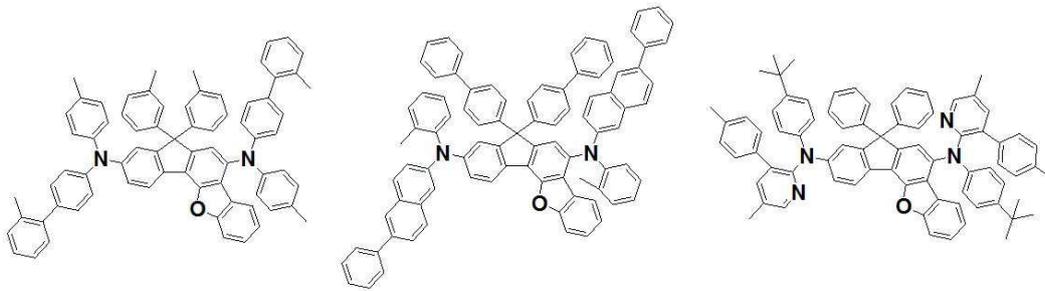
<화학식 124 > <화학식 125 > <화학식 126>



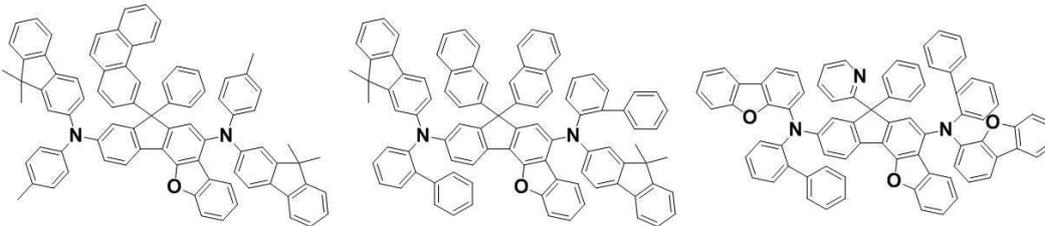
<화학식 127 > <화학식 128 > <화학식 129>



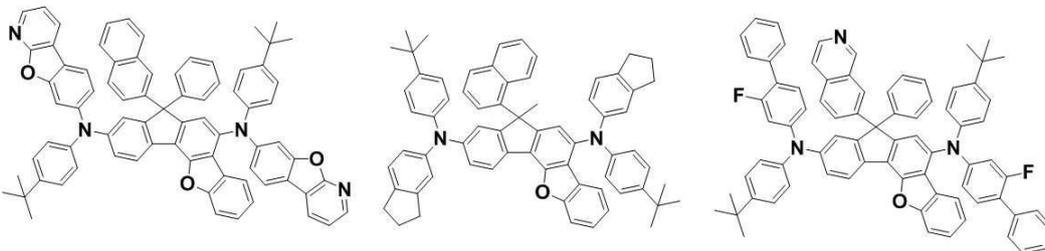
<화학식 130 > <화학식 131 > <화학식 132>



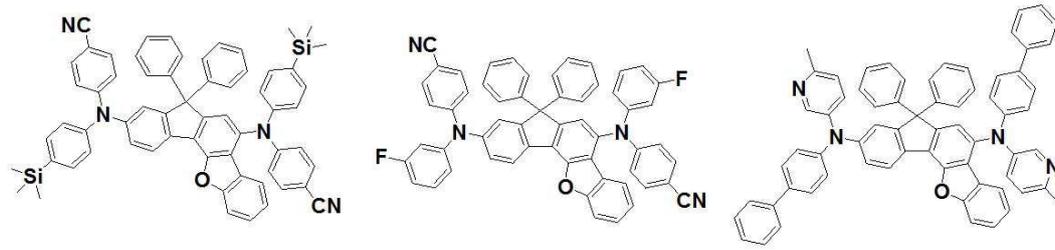
<화학식 133 > <화학식 134 > <화학식 135 >



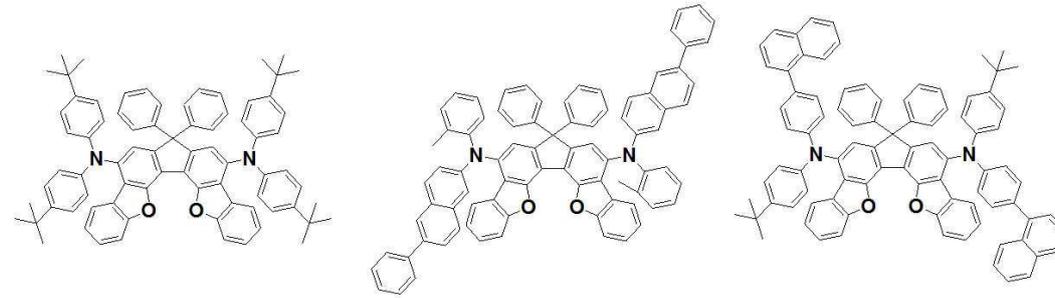
<화학식 136 > <화학식 137 > <화학식 138>



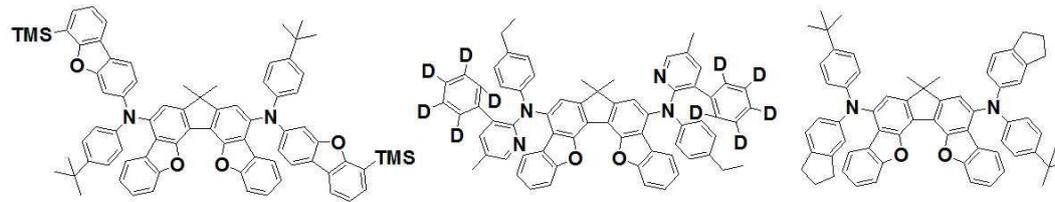
<화학식 139 > <화학식 140 > <화학식 141 >



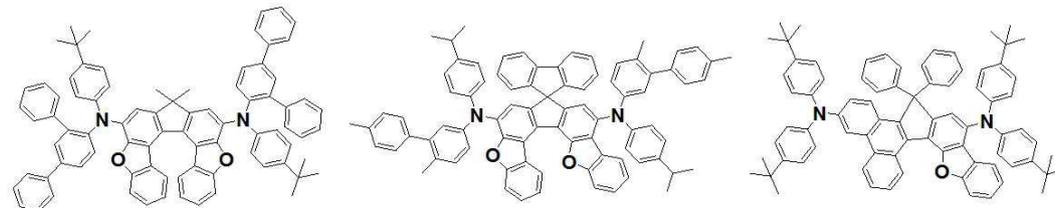
<화학식 142 > <화학식 143 > <화학식 144>



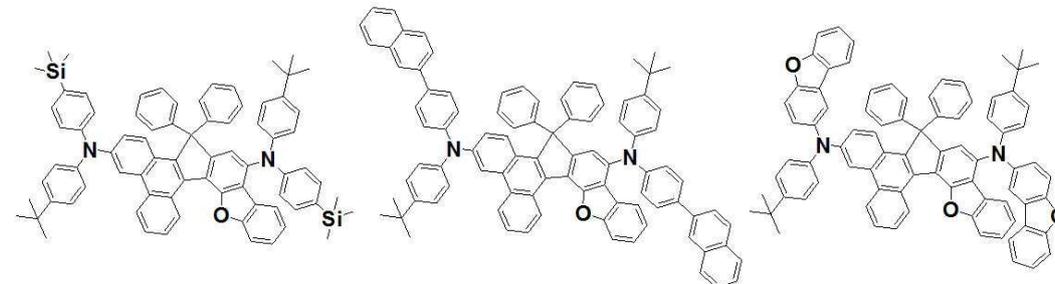
<화학식 145 > <화학식 146 > <화학식 147>



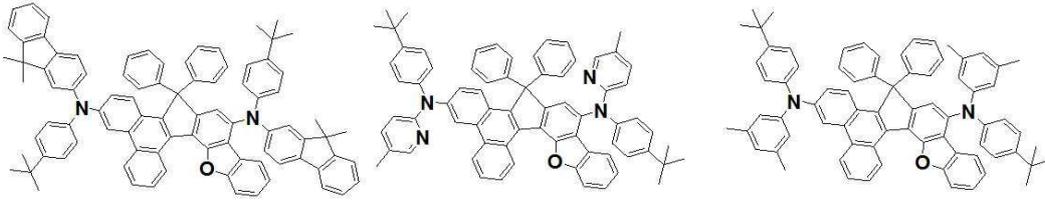
<화학식 148 > <화학식 149 > <화학식 150>



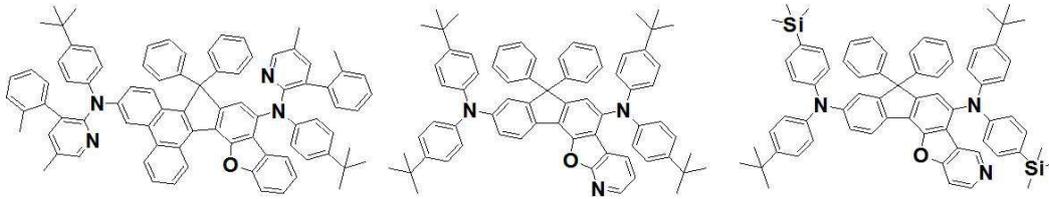
<화학식 151 > <화학식 152 > <화학식 153>



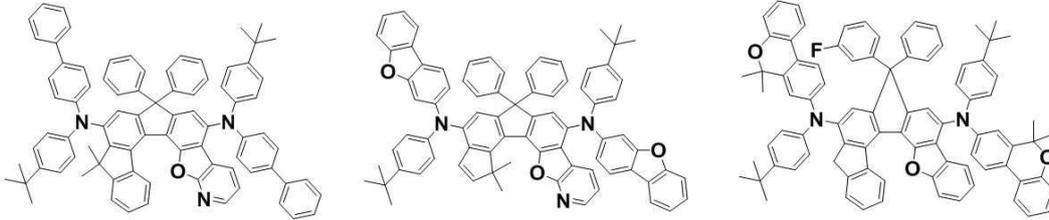
<화학식 154 > <화학식 155 > <화학식 156>



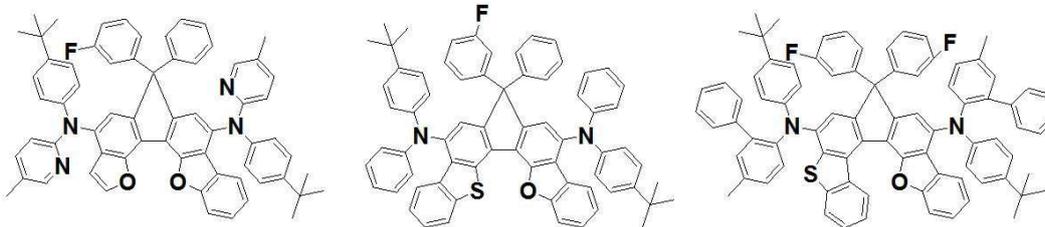
<화학식 157 > <화학식 158 > <화학식 159>



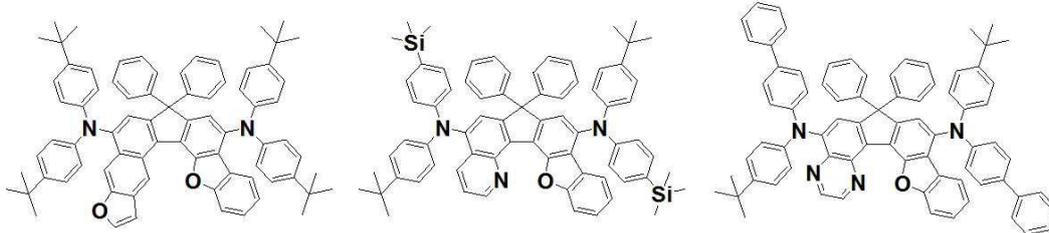
<화학식 160 > <화학식 161 > <화학식 162>



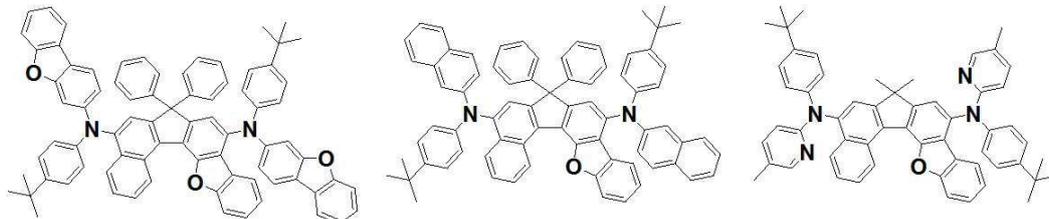
<화학식 163 > <화학식 164 > <화학식 165>



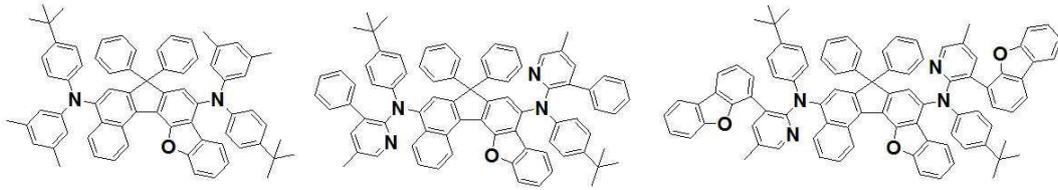
<화학식 166 > <화학식 167 > <화학식 168>



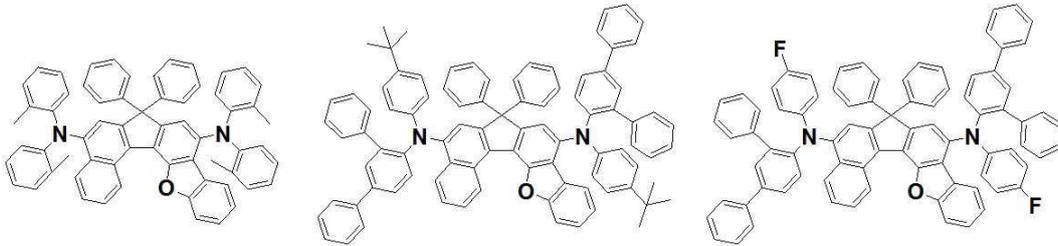
<화학식 169 > <화학식 170 > <화학식 171>



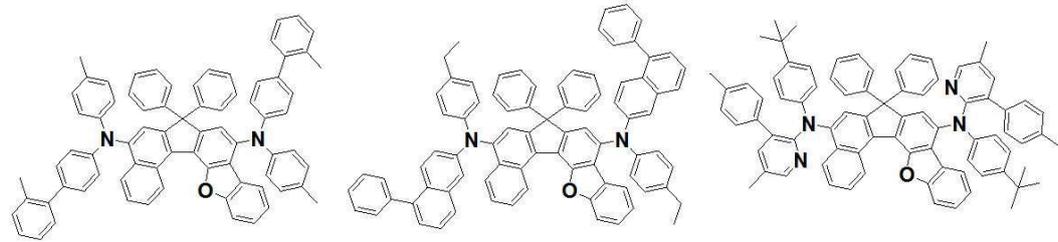
<화학식 172 > <화학식 173 > <화학식 174>



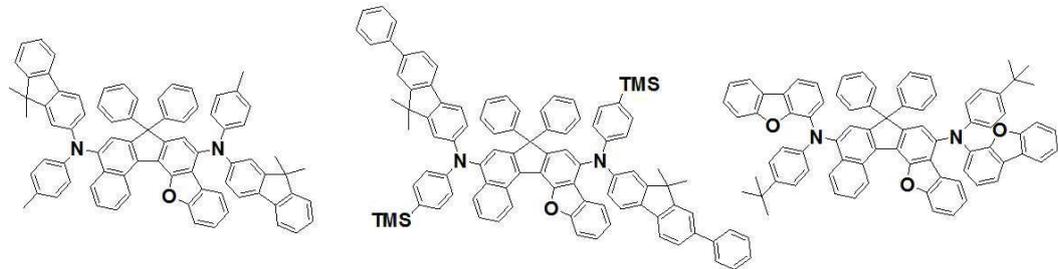
<화학식 175 > <화학식 176 > <화학식 177>



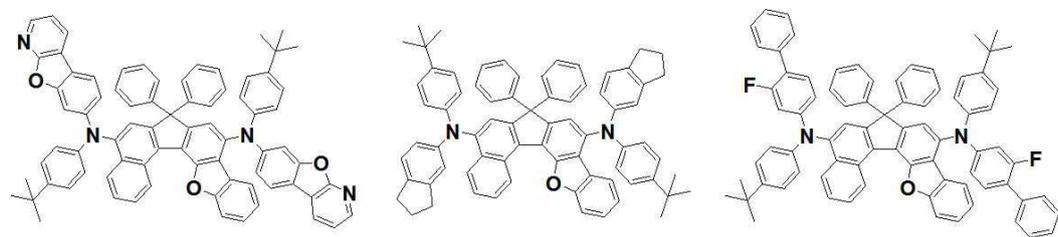
<화학식 178 > <화학식 179 > <화학식 180>



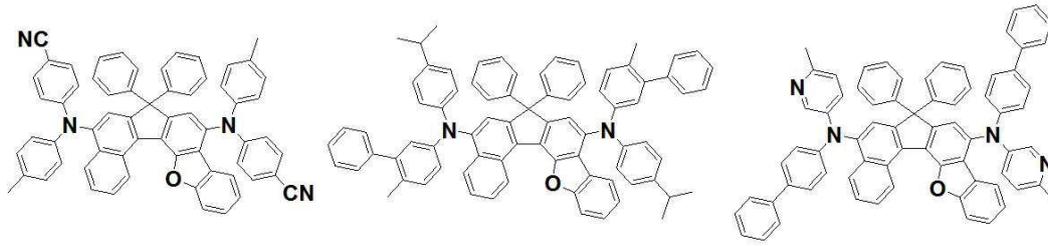
<화학식 181 > <화학식 182 > <화학식 183>



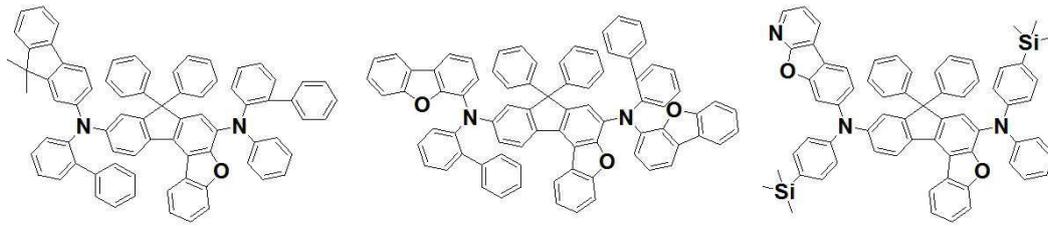
<화학식 184 > <화학식 185 > <화학식 186>



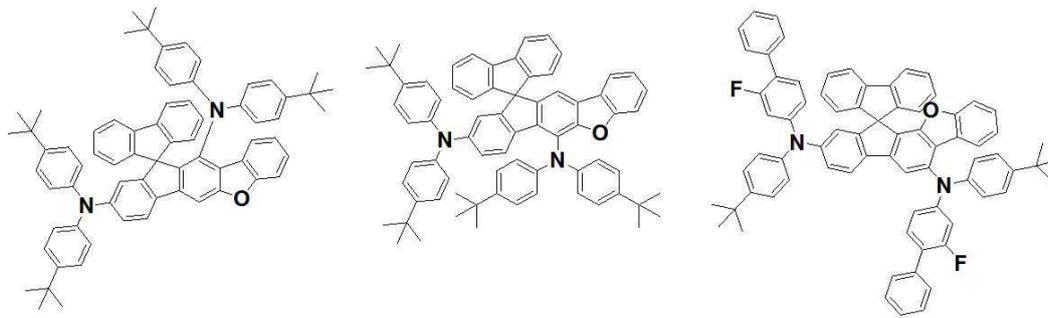
<화학식 187> <화학식 188 > <화학식 189>



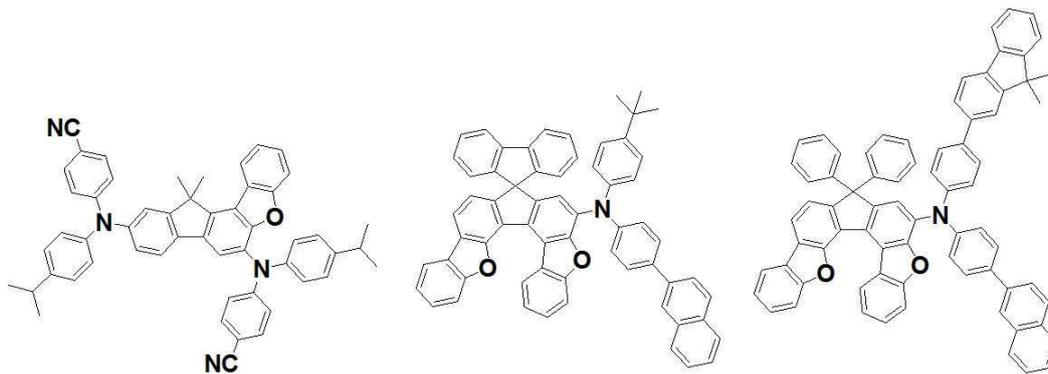
<화학식 190> <화학식 191 > <화학식 192>



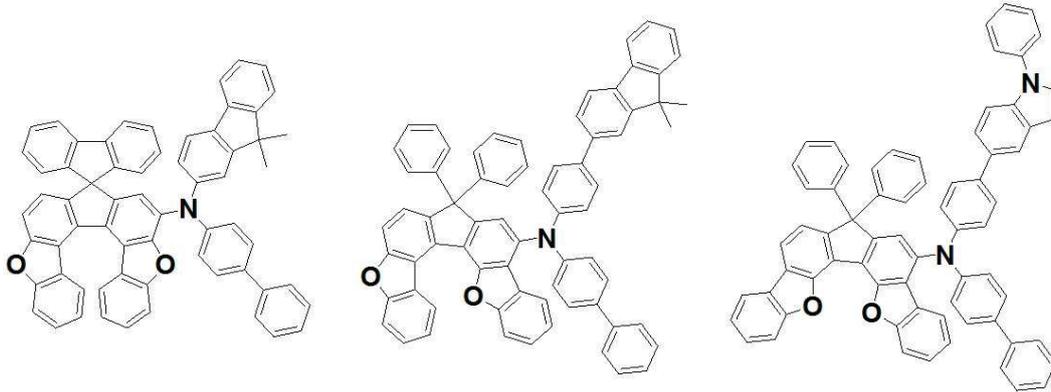
<화학식 193> <화학식 194 > <화학식 195>



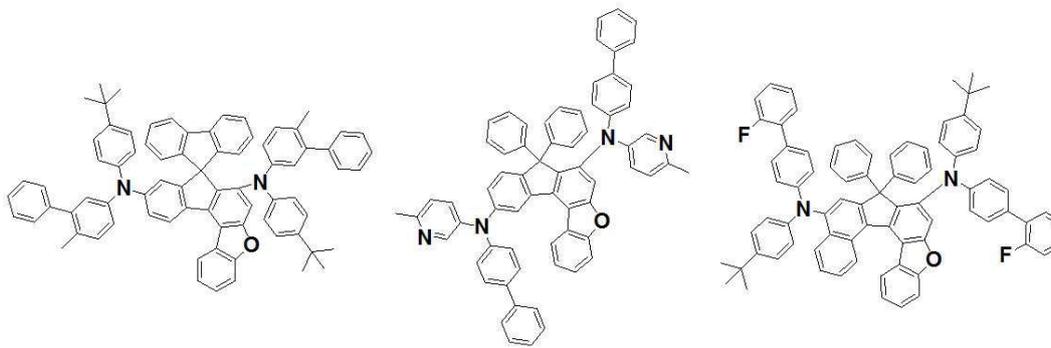
<화학식 196 > <화학식 197 > <화학식 198>



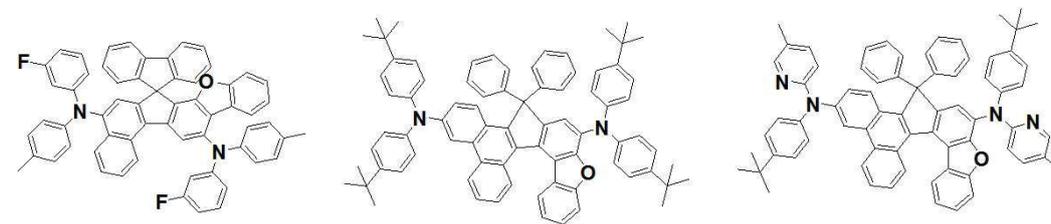
<화학식 199 > <화학식 200 > <화학식 201>



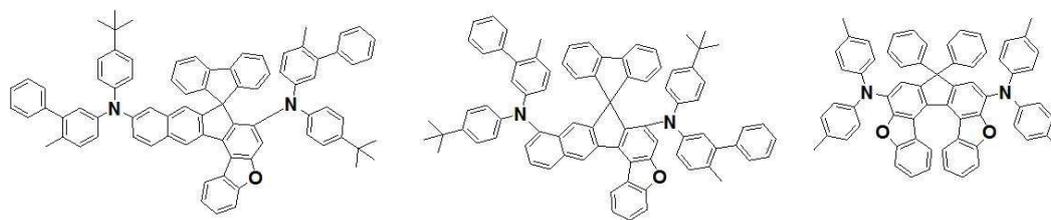
<화학식 202 > <화학식 203 > <화학식 204>



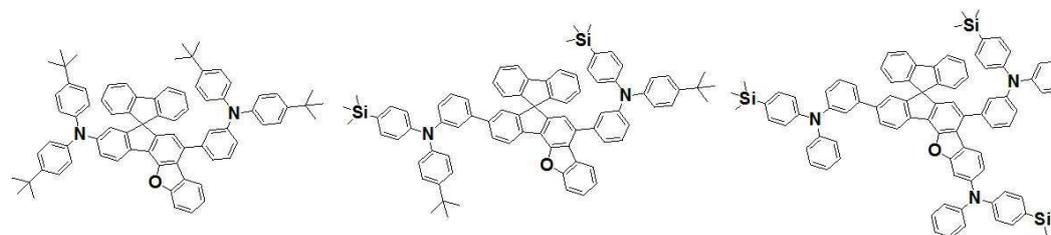
<화학식 205 > <화학식 206 > <화학식 207>



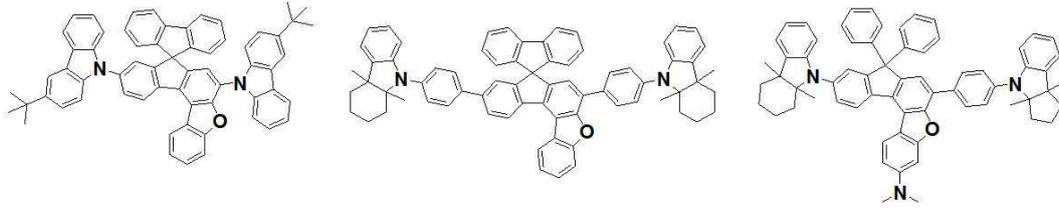
<화학식 208 > <화학식 209 > <화학식 210>



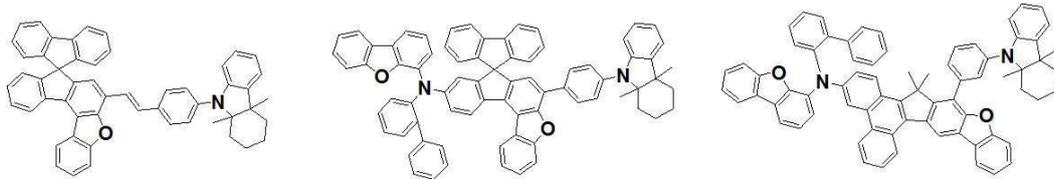
<화학식 211 > <화학식 212 > <화학식 213>



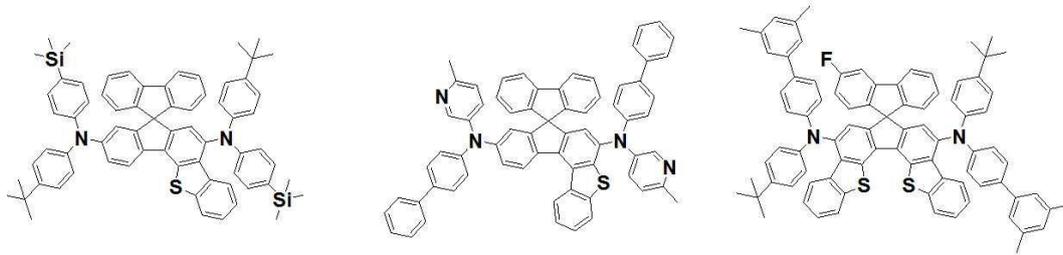
<화학식 214 > <화학식 215 > <화학식 216>



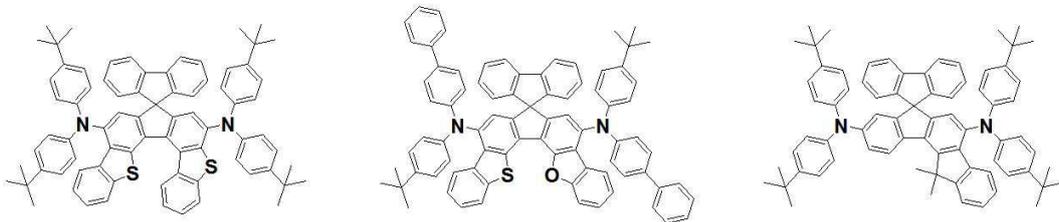
<화학식 217 > <화학식 218 > <화학식 219>



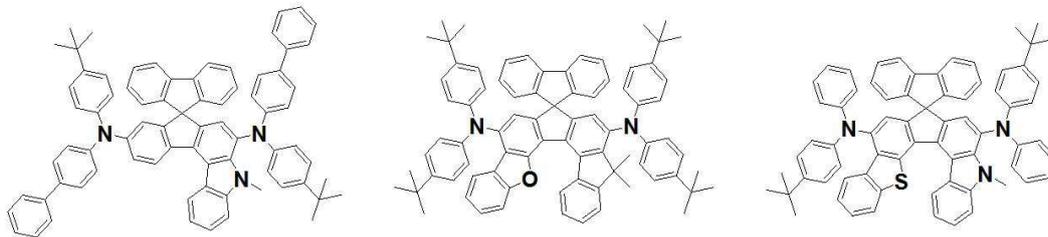
<화학식 220 > <화학식 221 > <화학식 222>



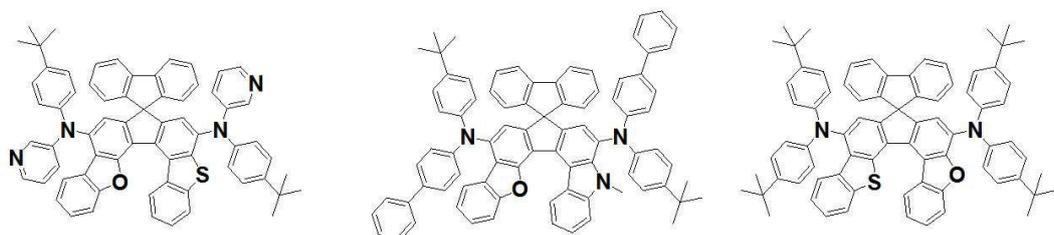
<화학식 223 > <화학식 224 > <화학식 225>



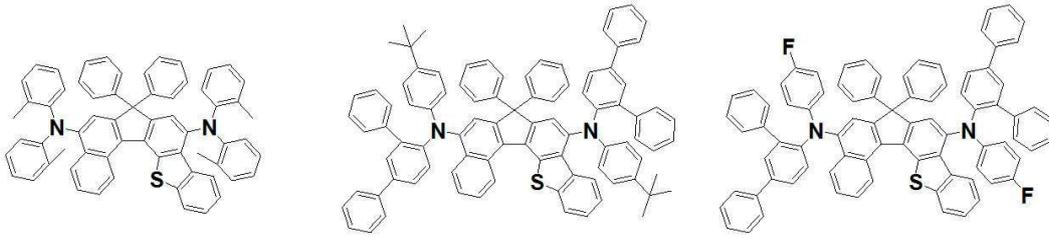
<화학식 226 > <화학식 227 > <화학식 228>



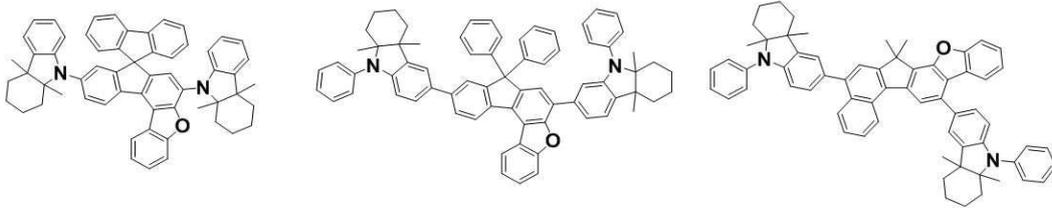
<화학식 229 > <화학식 230 > <화학식 231>



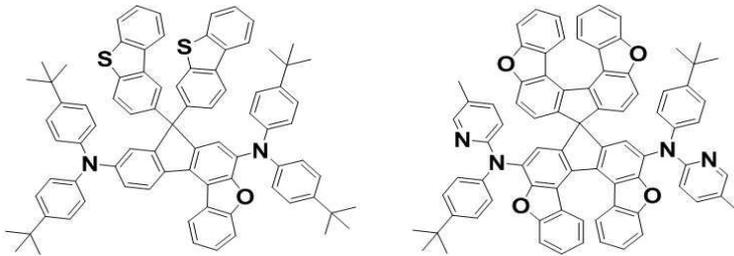
<화학식 232 > <화학식 233 > <화학식 234>



<화학식 235 > <화학식 236 > <화학식 237>



<화학식 238 > <화학식 239 >

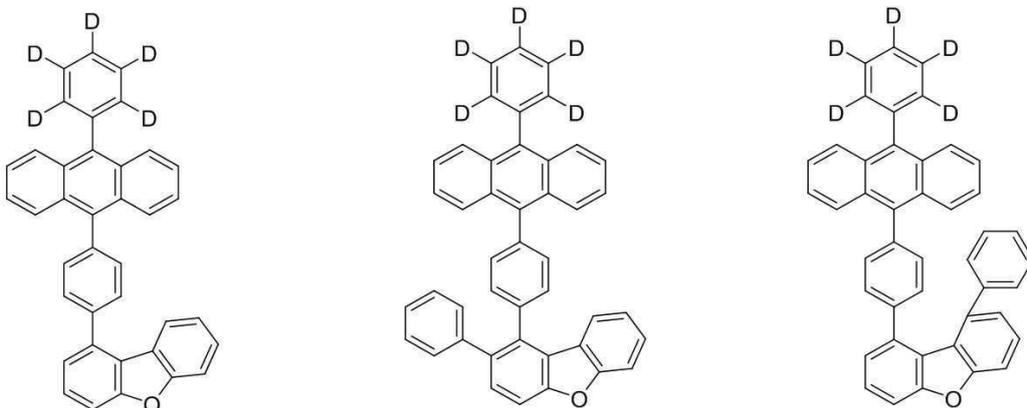


청구항 13

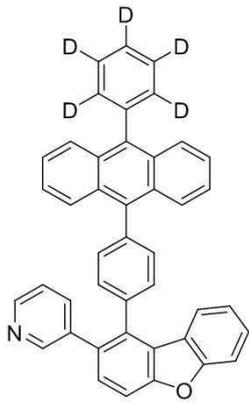
제1항에 있어서,

상기 [화학식 D]로 표시되는 화합물은 하기 [화합물1] 내지 [화합물138]으로 표시되는 군으로부터 선택된 어느 하나인 것을 특징으로 하는 유기 발광 소자.

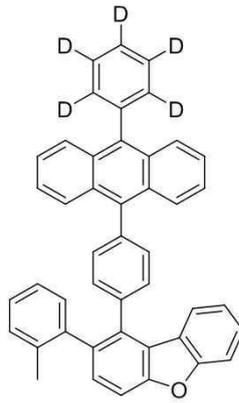
<화합물1> <화합물2> <화합물3>



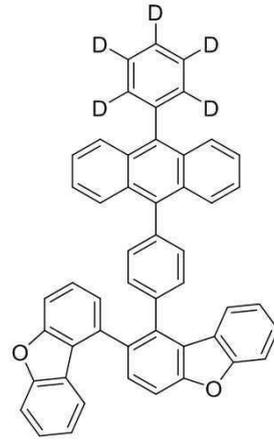
<화합물4>



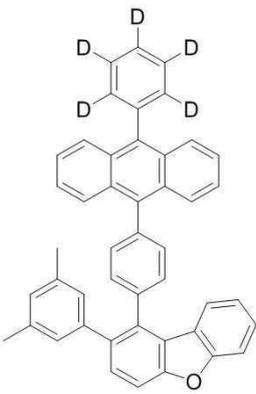
<화합물5>



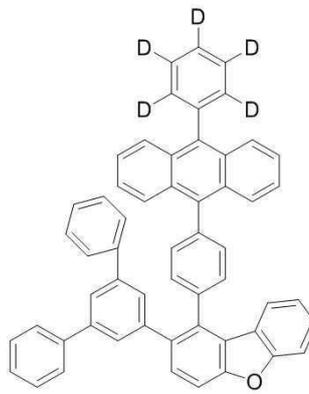
<화합물6>



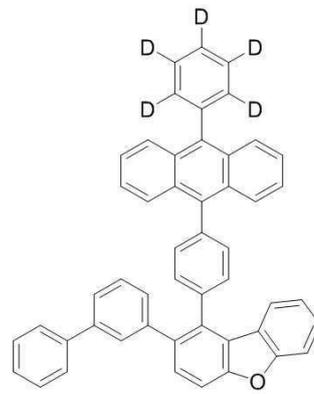
<화합물7>



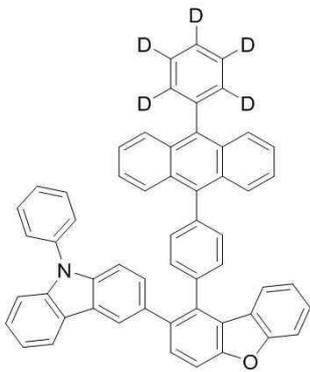
<화합물8>



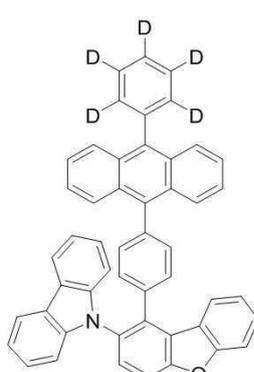
<화합물9>



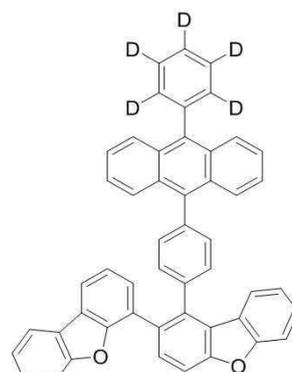
<화합물10>



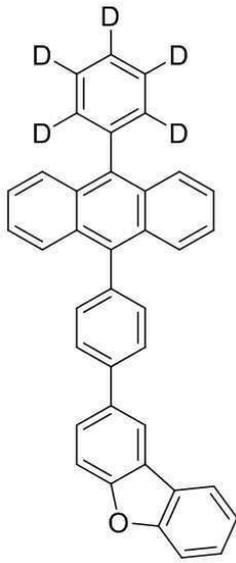
<화합물11>



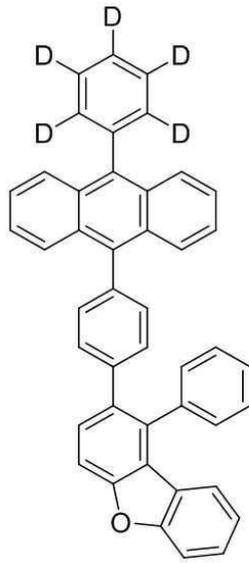
<화합물12>



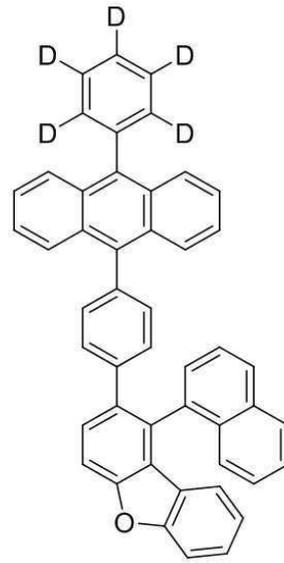
<화합물 13>



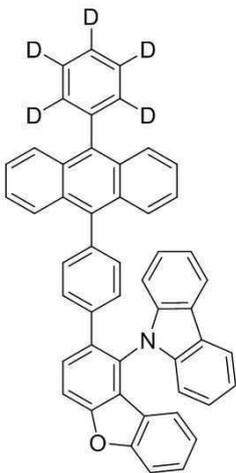
<화합물 14>



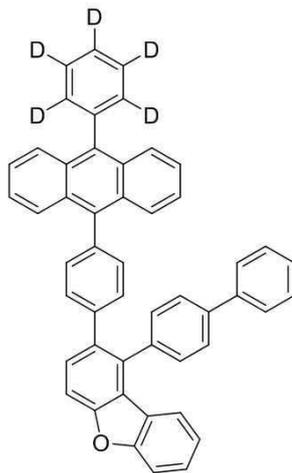
<화합물 15>



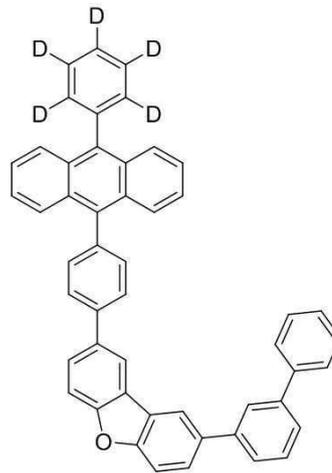
<화합물 16>



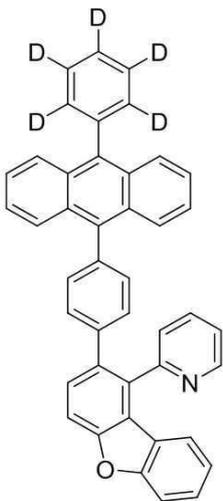
<화합물 17>



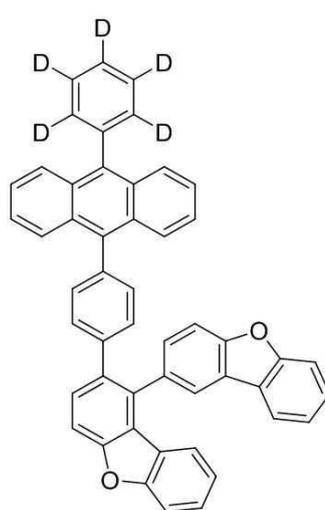
<화합물 18>



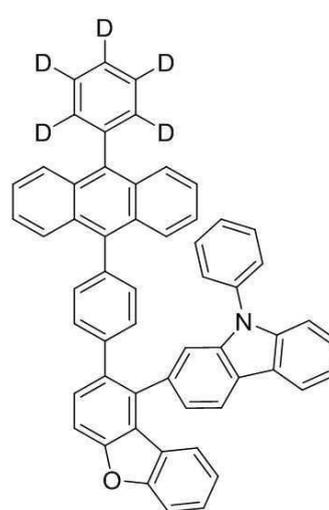
<화합물 19>



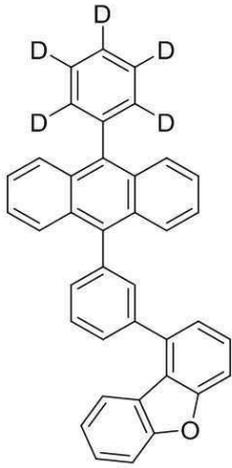
<화합물 20>



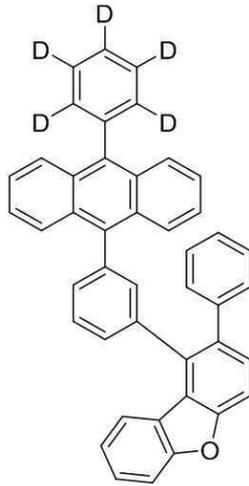
<화합물 21>



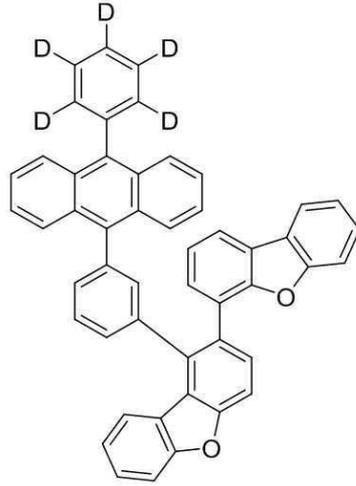
<화합물22>



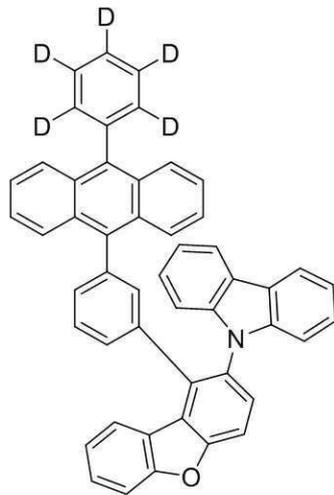
<화합물23>



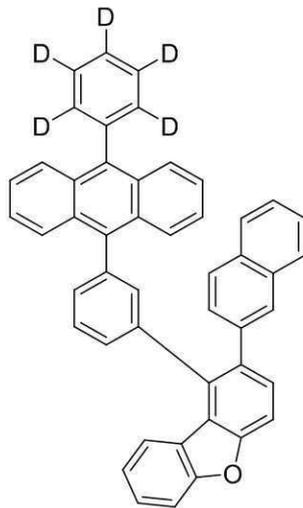
<화합물24>



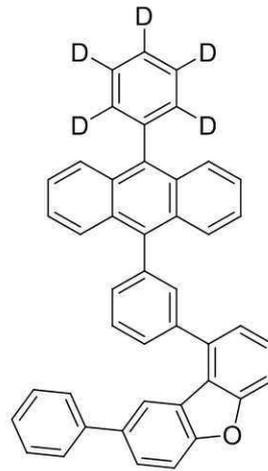
<화합물25>



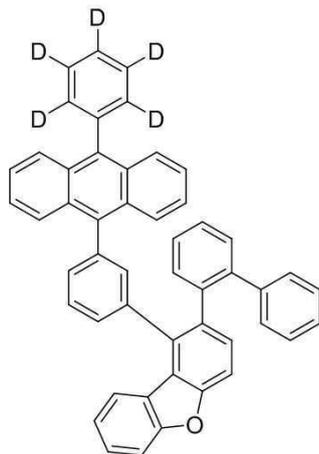
<화합물26>



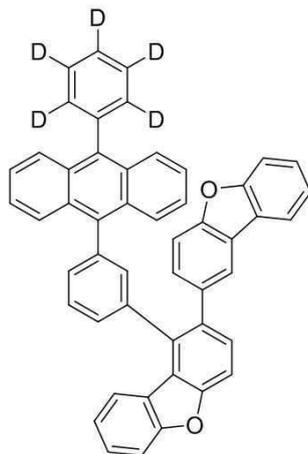
<화합물27>



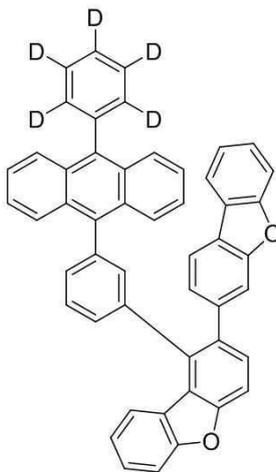
<화합물28>



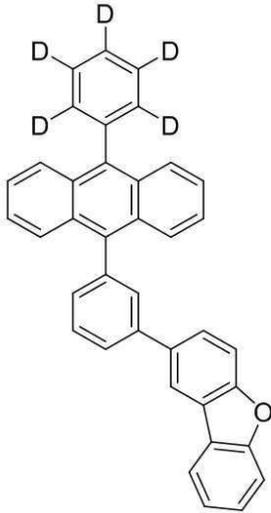
<화합물29>



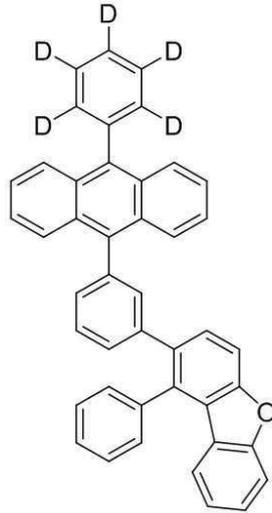
<화합물30>



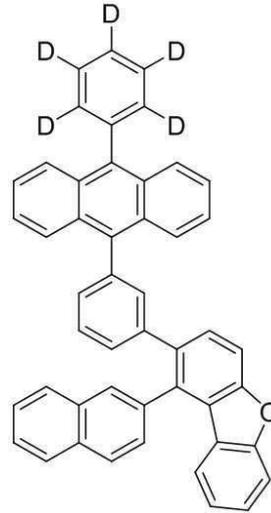
<화합물31>



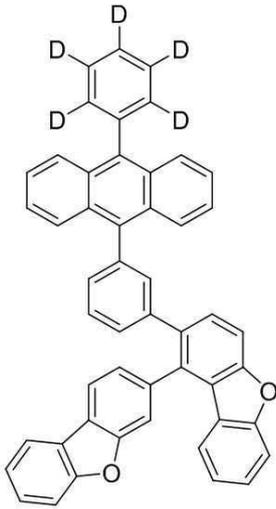
<화합물32>



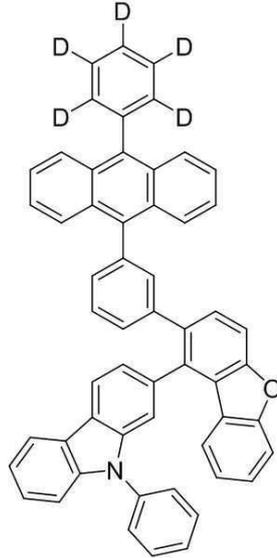
<화합물33>



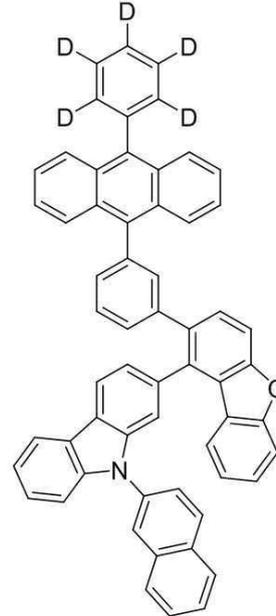
<화합물34>



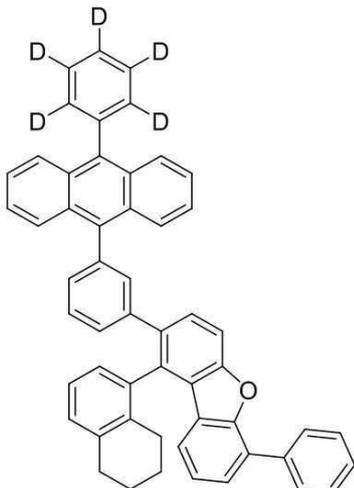
<화합물35>



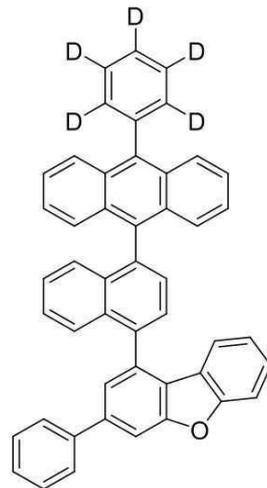
<화합물36>



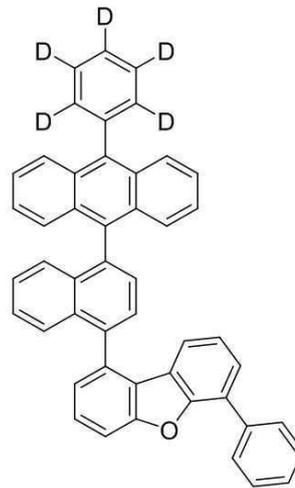
<화합물37>



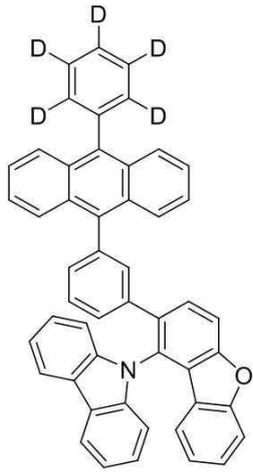
<화합물38>



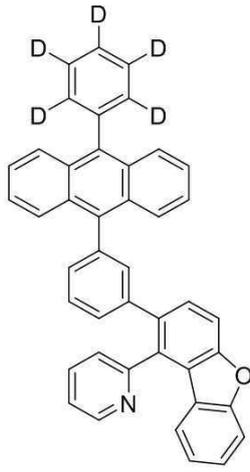
<화합물39>



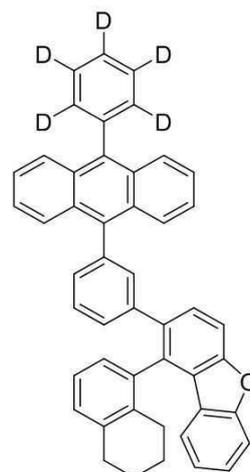
<화합물40>



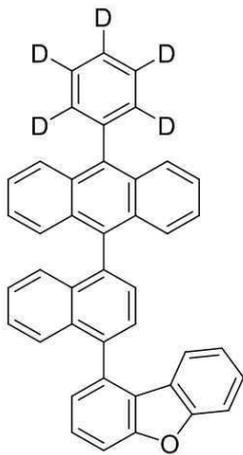
<화합물 41>



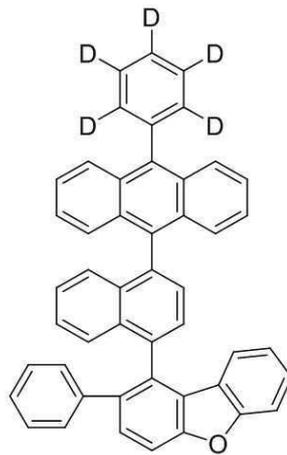
<화합물42>



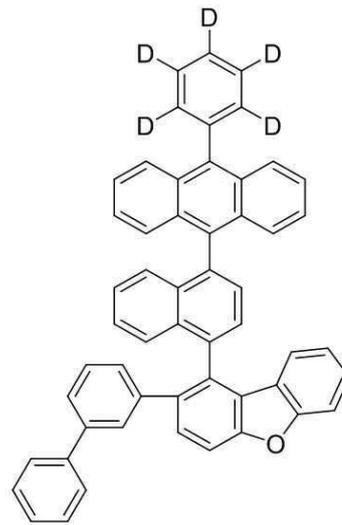
<화합물43>



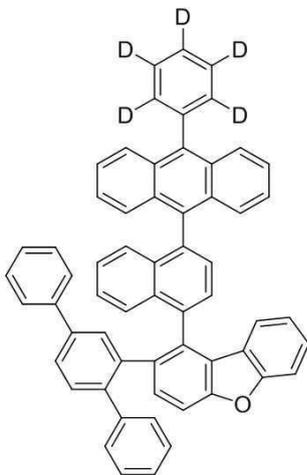
<화합물 44>



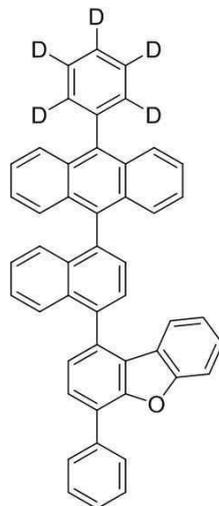
<화합물45>



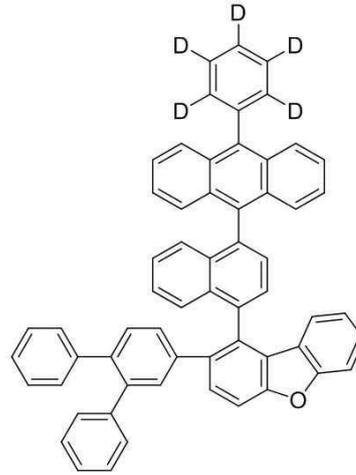
<화합물46>



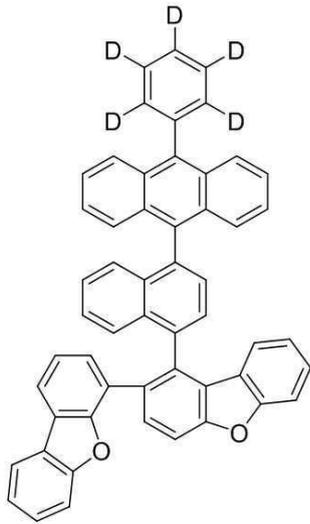
<화합물47>



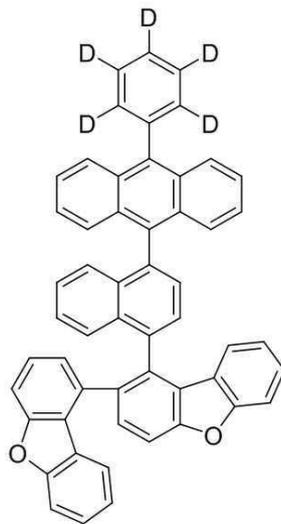
<화합물48>



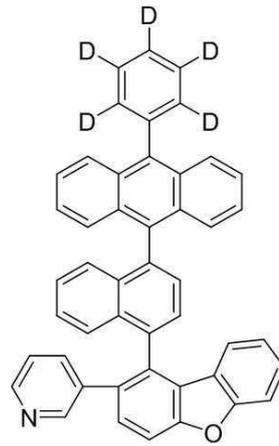
<화합물49>



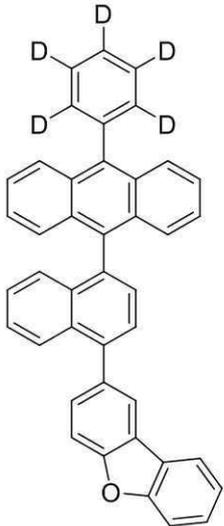
<화합물50>



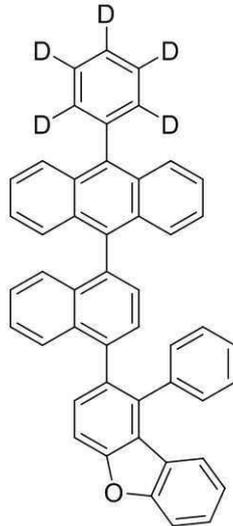
<화합물51>



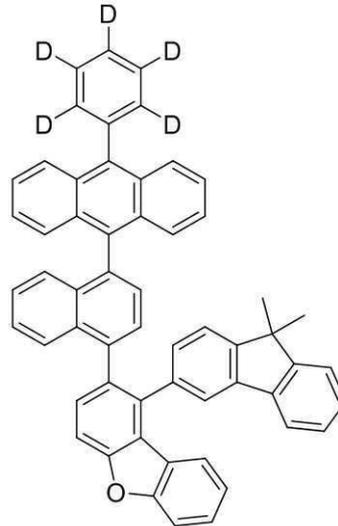
<화합물52>



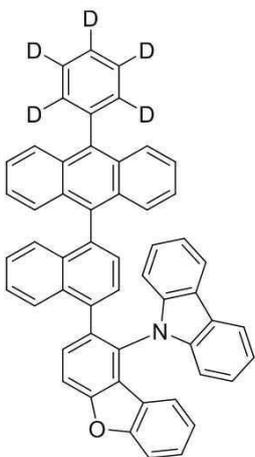
<화합물53>



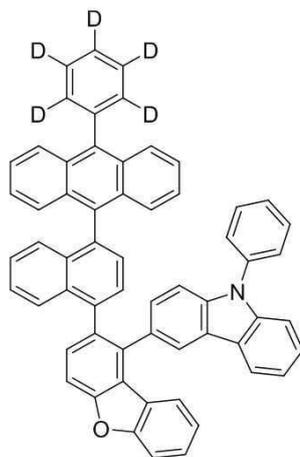
<화합물54>



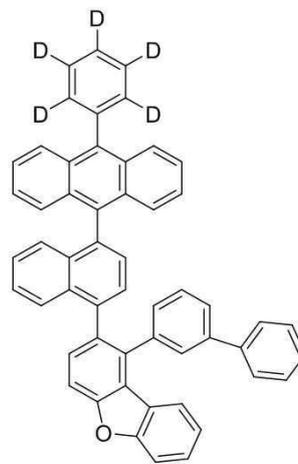
<화합물55>



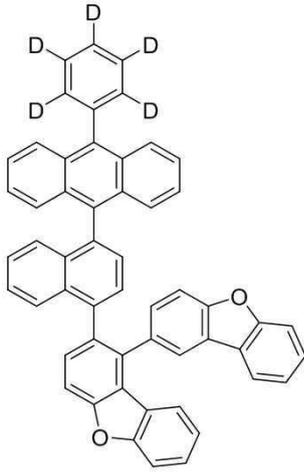
<화합물 56>



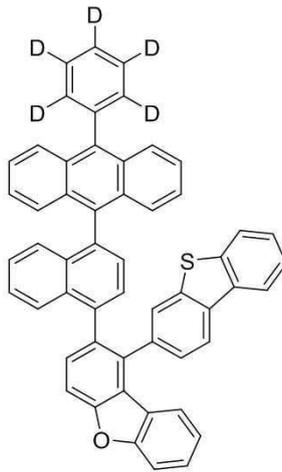
<화합물57>



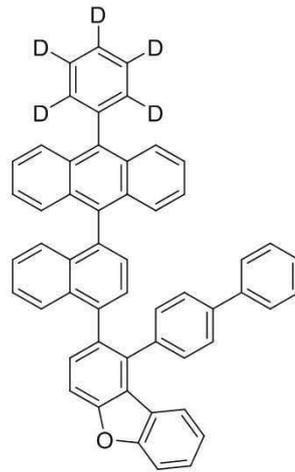
<화합물58>



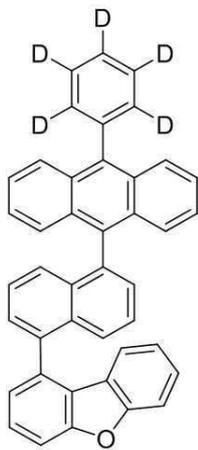
<화합물59>



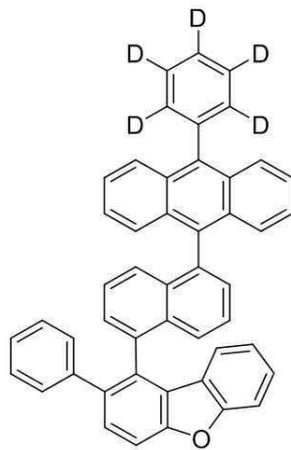
<화합물60>



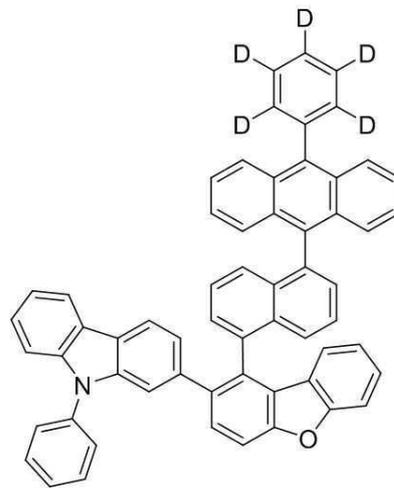
<화합물 61>



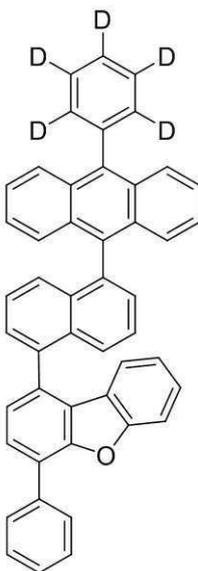
<화합물 62>



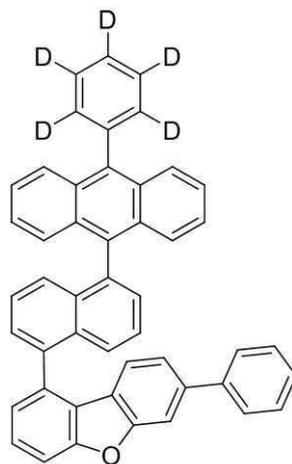
<화합물 63>



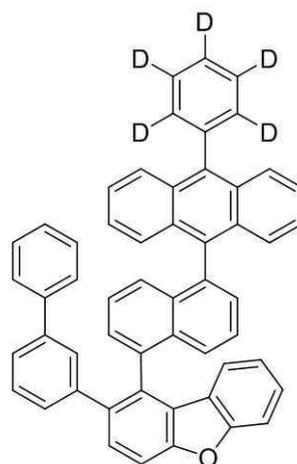
<화합물 64>



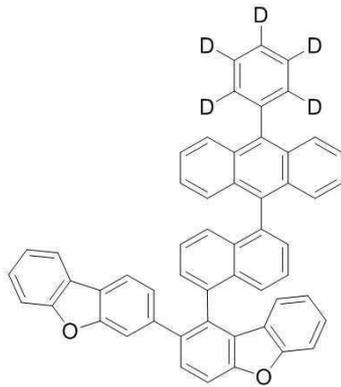
<화합물 65>



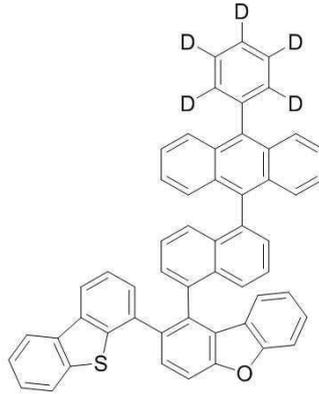
<화합물 66>



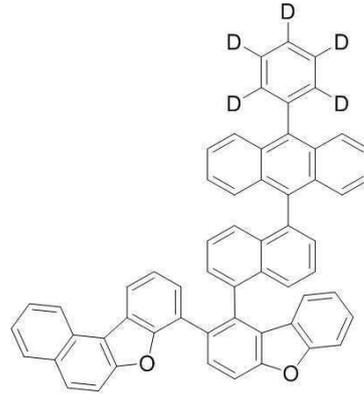
<화합물67>



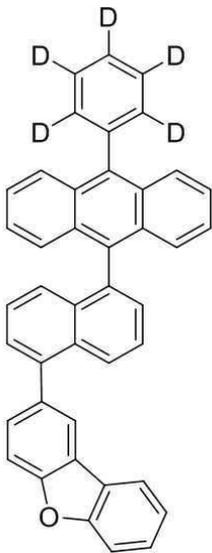
<화합물68>



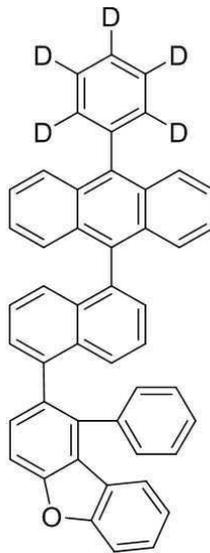
<화합물69>



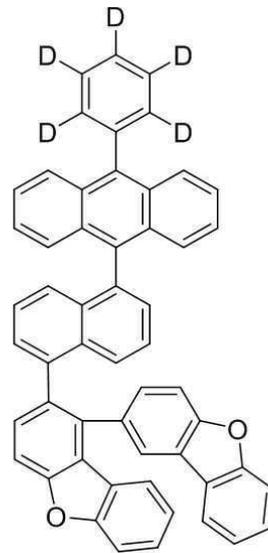
<화합물70>



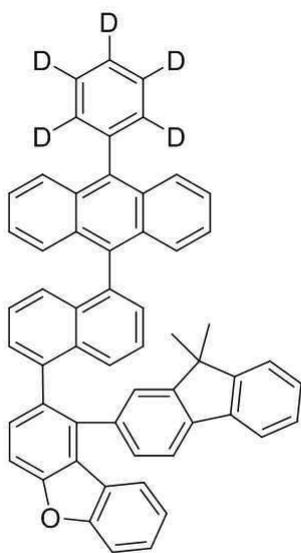
<화합물71>



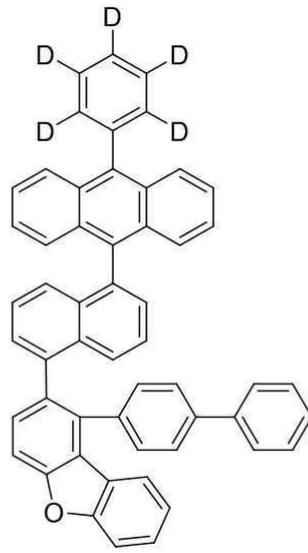
<화합물72>



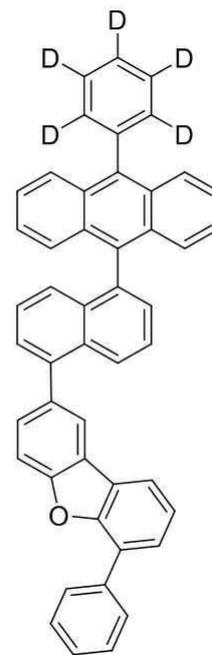
<화합물 73>



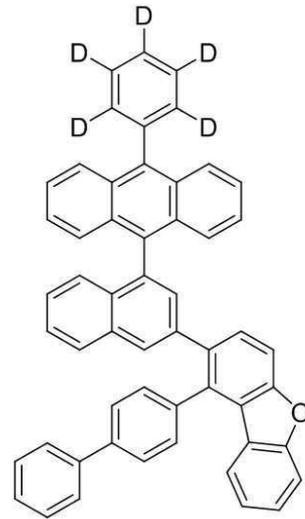
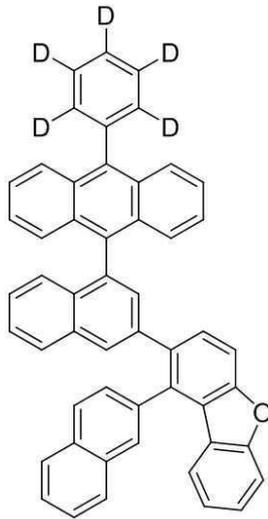
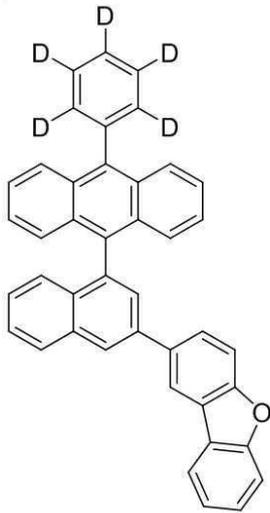
<화합물74>



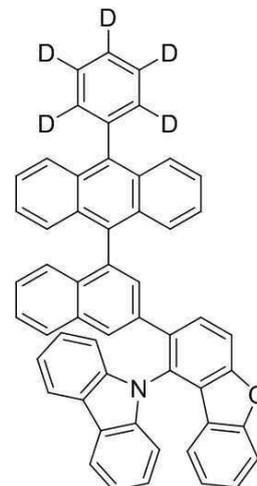
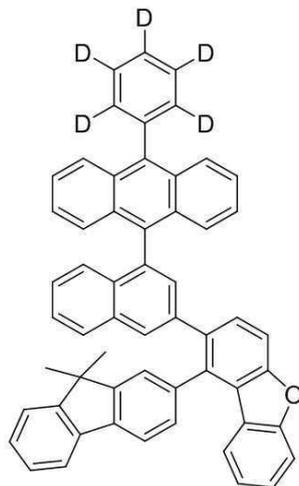
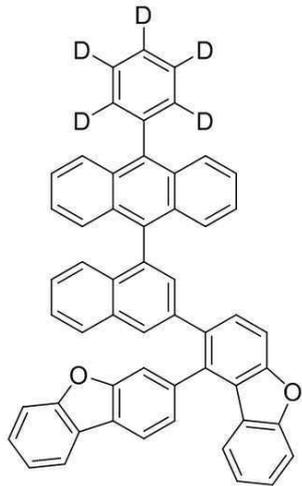
<화합물75>



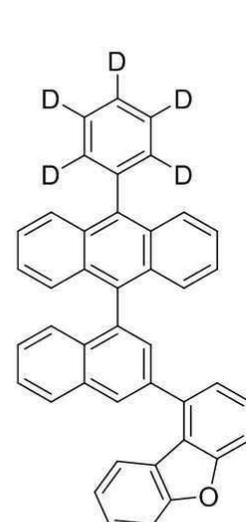
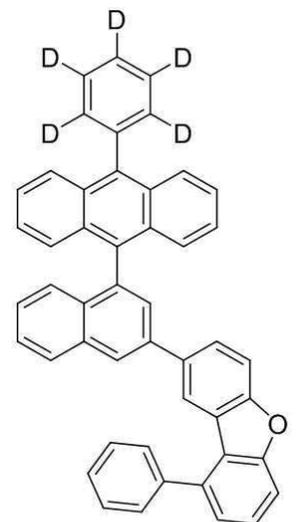
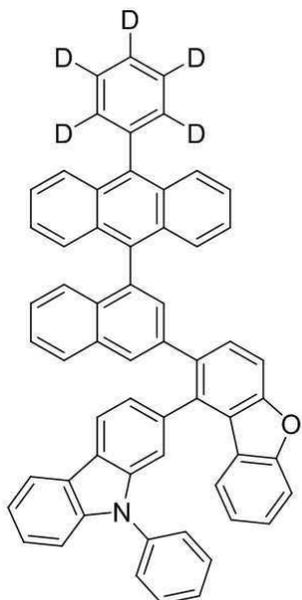
<화합물 76> <화합물 77> <화합물 78>



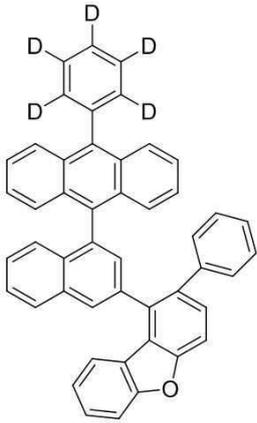
<화합물 79> <화합물 80> <화합물 81>



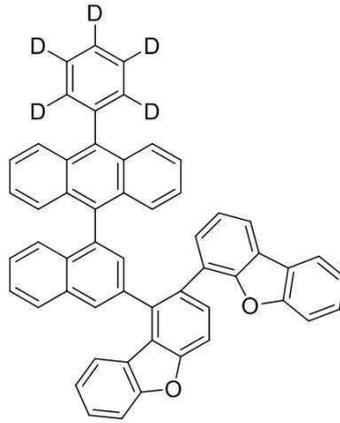
<화합물 82> <화합물 83> <화합물 84>



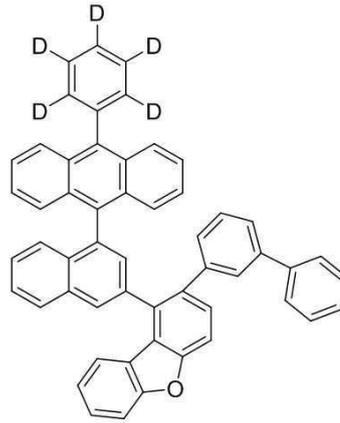
<화합물85>



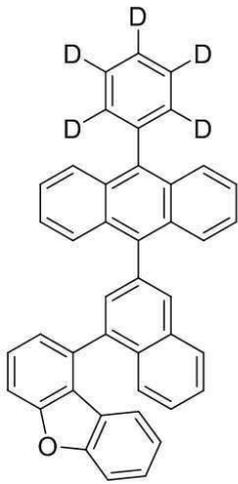
<화합물86>



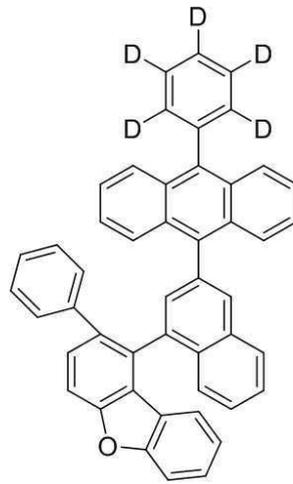
<화합물87>



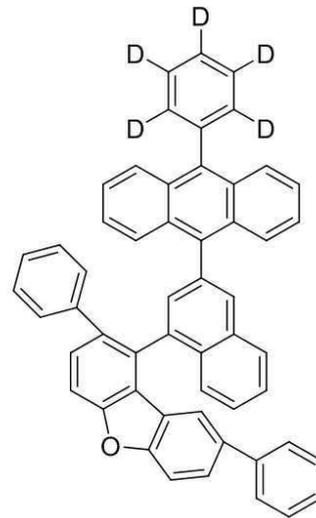
<화합물88>



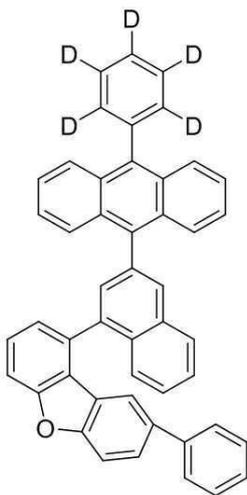
<화합물89>



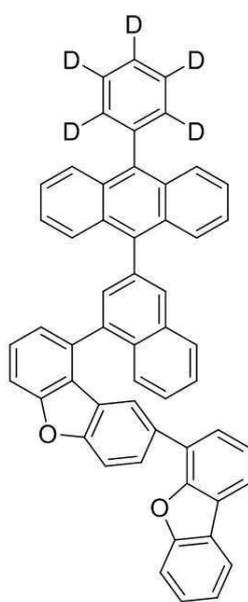
<화합물90>



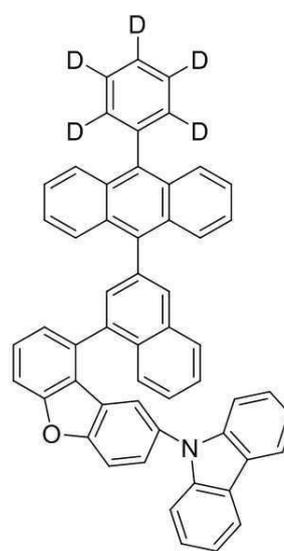
<화합물91>



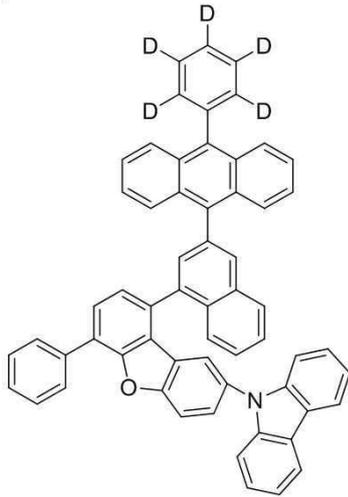
<화합물 92>



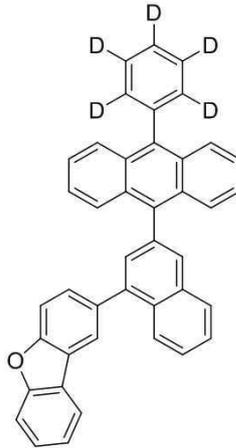
<화합물93>



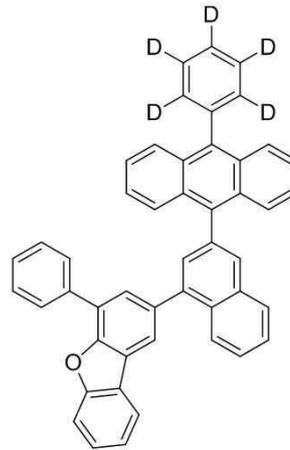
<화합물94>



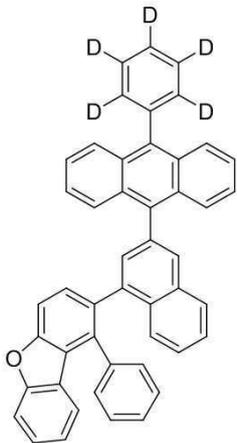
<화합물95>



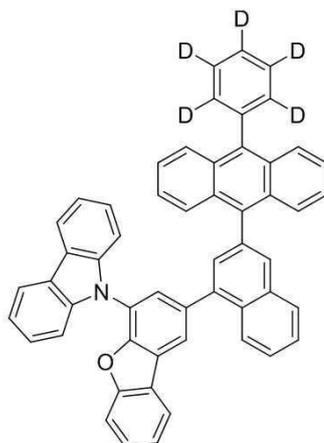
<화합물96>



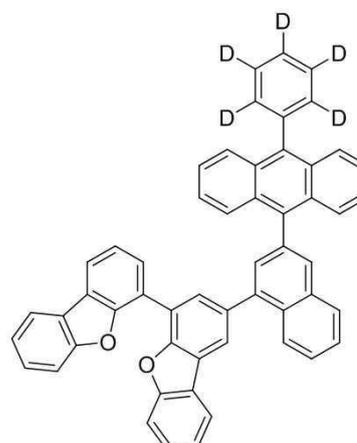
<화합물97>



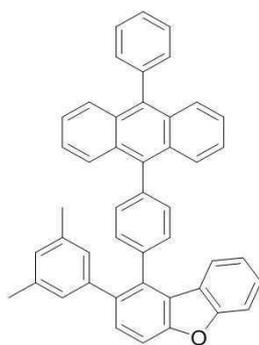
<화합물98>



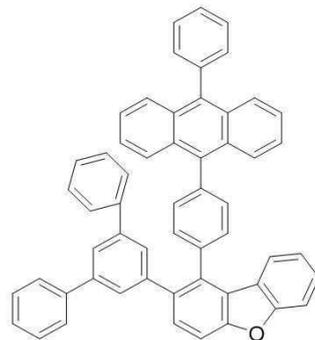
<화합물99>



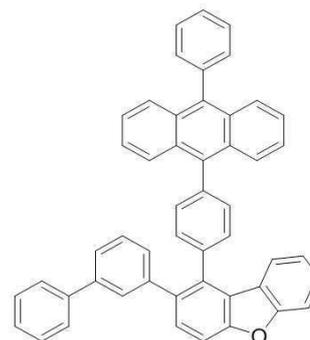
<화합물 100>



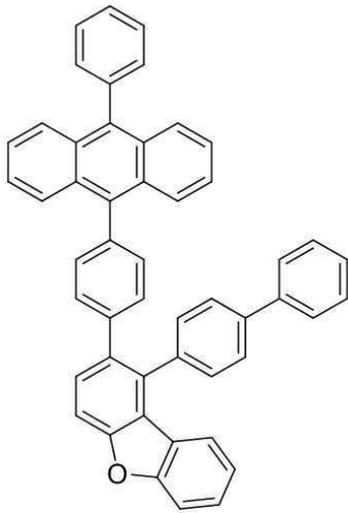
<화합물 101>



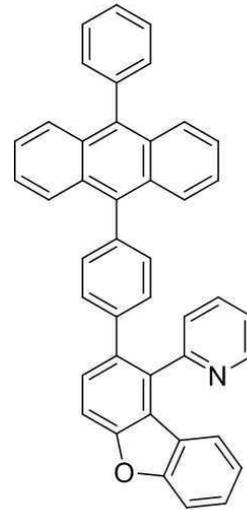
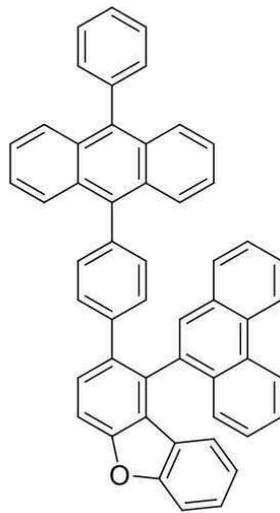
<화합물 102>



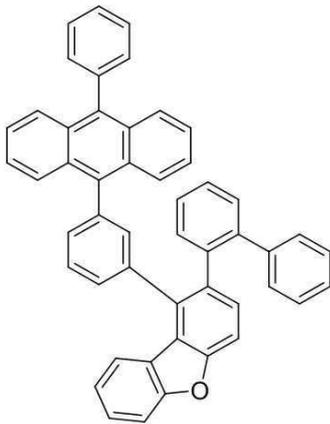
<화합물 103> <화합물 104>



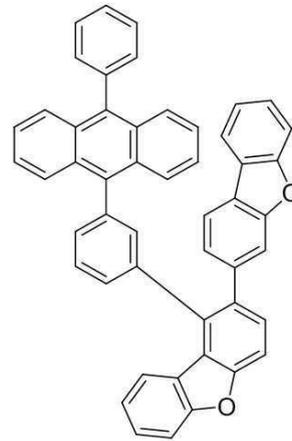
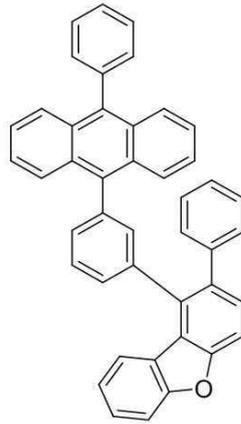
<화합물 105>



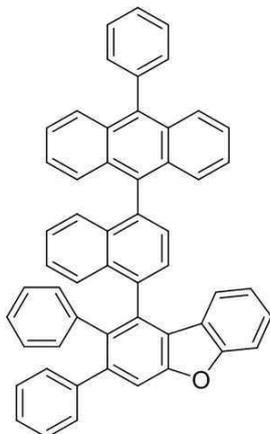
<화합물 106> <화합물 107>



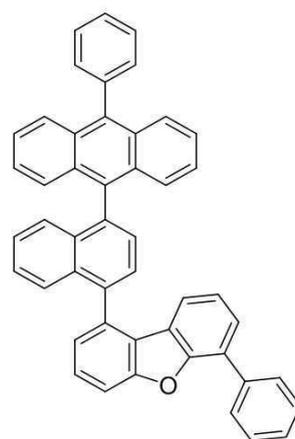
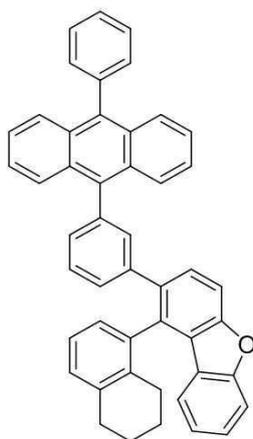
<화합물 108>



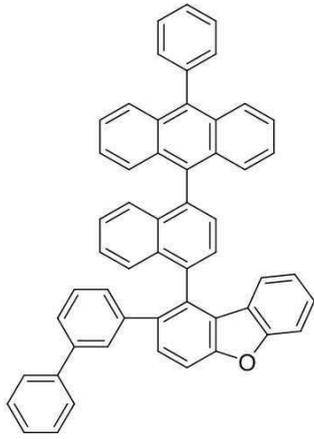
<화합물 109> <화합물 110>



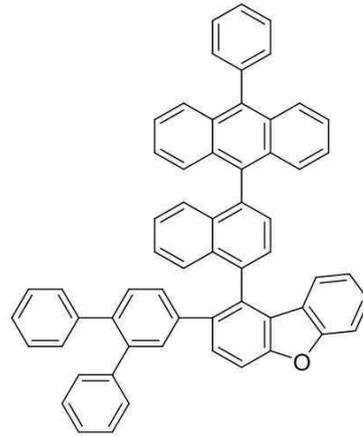
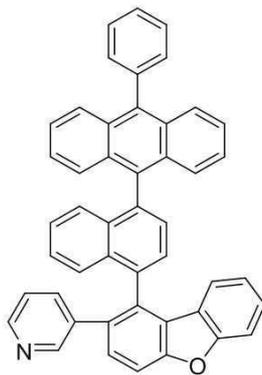
<화합물 111>



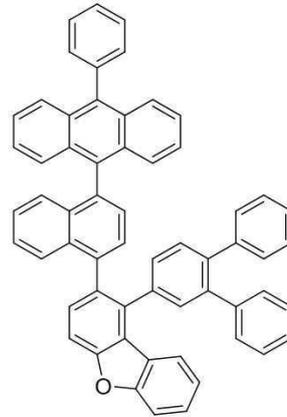
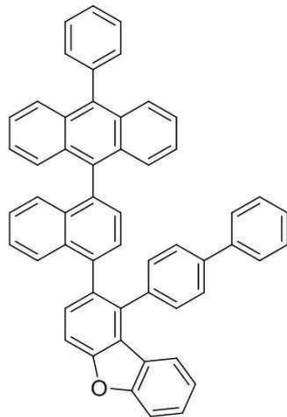
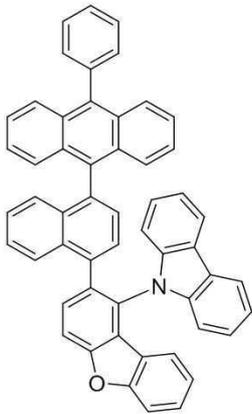
<화합물 112> <화합물 113>



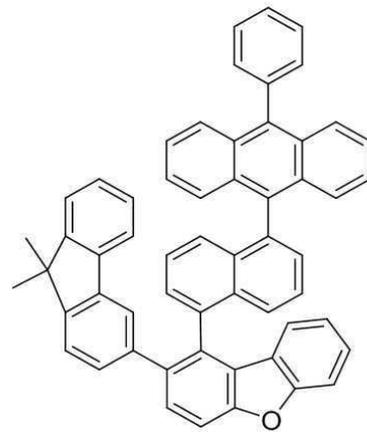
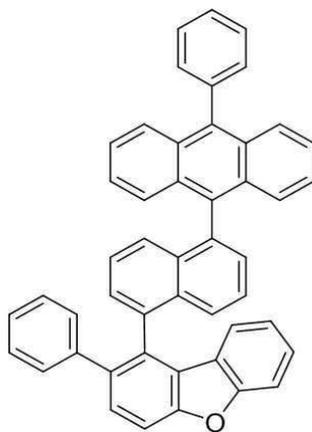
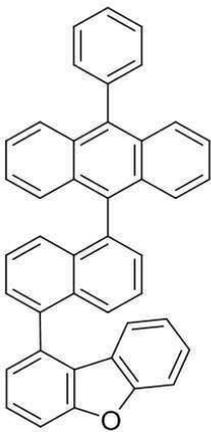
<화합물 114>



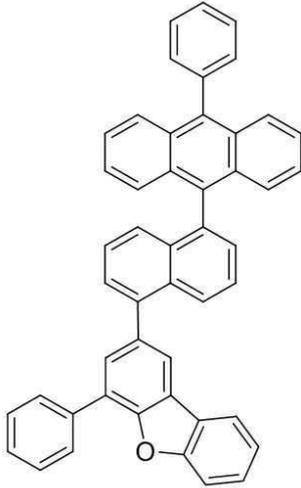
<화합물 115> <화합물 116> <화합물 117>



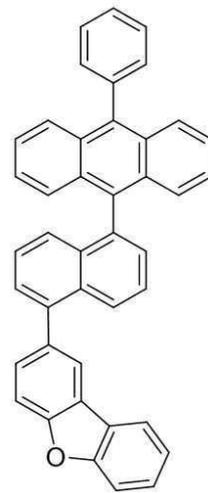
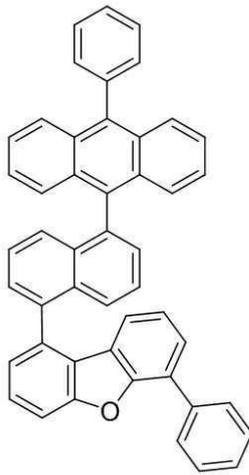
<화합물 118> <화합물 119> <화합물 120>



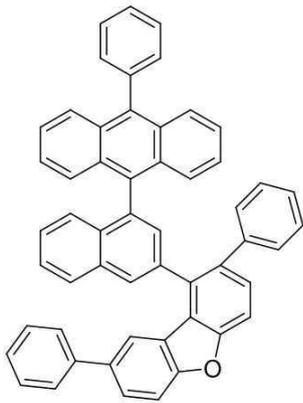
<화합물 121> <화합물 122>



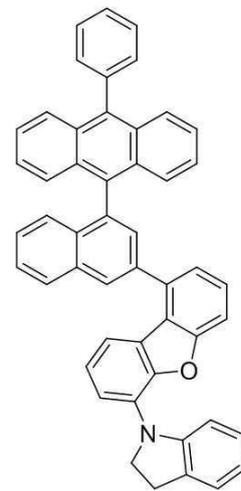
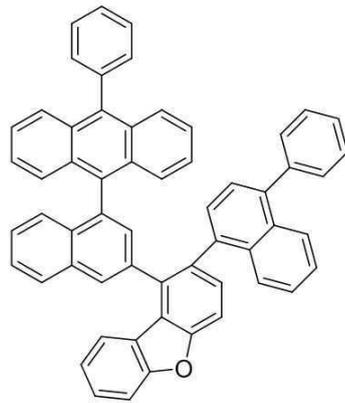
<화합물 123>



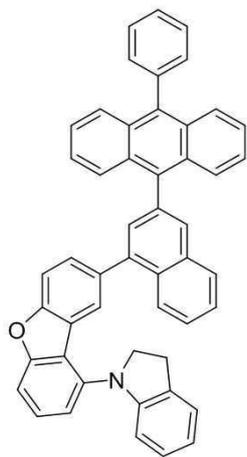
<화합물 124> <화합물 125>



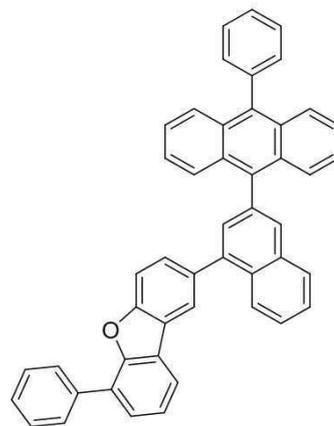
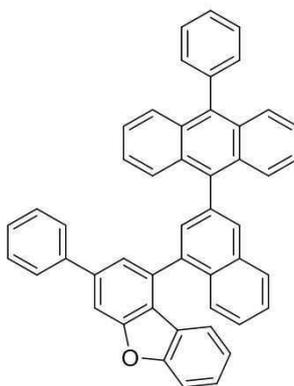
<화합물 126>



<화합물 127> <화합물 128>



<화합물 129>



는 기능층, 전자 수송층, 및 전자 주입층 중 선택되는 적어도 하나의 층을 추가적으로 포함하는 것을 특징으로 하는 유기 발광 소자.

청구항 15

제 14 항에 있어서,

상기 각각의 층중에서 선택된 하나 이상의 층은 증착공정 또는 용액공정에 의해 형성되는 것을 특징으로 하는 유기 발광 소자.

청구항 16

제 1 항에 있어서,

상기 유기발광소자는 평판 디스플레이 장치; 플렉시블 디스플레이 장치; 단색 또는 백색의 평판 조명용 장치; 및, 단색 또는 백색의 플렉시블 조명용 장치;에서 선택되는 어느 하나에 사용되는 것을 특징으로 하는 유기 발광 소자.

발명의 설명

기술 분야

[0001] 본 발명은 저전압구동이 가능하며 장수명을 갖는 유기발광소자에 관한 것으로, 보다 자세하게는 유기발광 소자 내 발광층으로 사용되는 특정구조의 호스트 재료와 도판트 재료를 포함하는 유기 발광 소자에 관한 것이다.

배경 기술

[0002] 유기 발광 소자(organic light emitting diode, OLED)는 자기 발광 현상을 이용한 디스플레이로서, 시야각이 크고 액정 디스플레이에 비해 경박, 단소해질 수 있고, 빠른 응답 속도 등의 장점을 가지고 있어 풀-컬러(full-color) 디스플레이 또는 조명용의 응용이 기대되고 있다.

[0003] 상기 유기 발광 소자에서 유기물층으로 사용되는 재료는 기능에 따라, 발광 재료와 전자수송 재료, 예컨대 정공 주입 재료, 정공수송 재료, 전자수송 재료, 전자주입 재료 등으로 분류될 수 있다. 상기 발광 재료는 분자량에 따라 고분자형과 저분자형으로 분류될 수 있고, 발광 메커니즘에 따라 전자의 일중항 여기상태로부터 유래되는 형광 재료와 전자의 삼중항 여기상태로부터 유래되는 인광 재료로 분류될 수 있다. 또한, 발광 재료는 발광색에 따라 청색, 녹색, 적색 발광 재료와 보다 나은 천연색을 구현하기 위해 필요한 노란색 및 주황색 발광 재료로 구분될 수 있다.

[0004] 한편, 발광 재료로서 하나의 물질만 사용하는 경우, 분자간 상호 작용에 의하여 최대 발광 파장이 장파장으로 이동하고 색순도가 떨어지거나 발광 감쇄 효과로 소자의 효율이 감소되는 문제가 발생하므로, 색순도의 증가와 에너지 전이를 통한 발광 효율을 증가시키기 위하여 발광 재료로서 호스트-도판트 시스템을 사용할 수 있다.

[0005] 그 원리는 발광층을 형성하는 호스트보다 에너지 대역 간극이 작은 도판트를 발광층에 소량 혼합하면, 발광층에서 발생한 엑시톤이 도판트로 수송되어 효율이 높은 빛을 내는 것이다. 이때, 호스트의 파장이 도판트의 파장대로 이동하므로, 이용하는 도판트의 종류에 따라 원하는 파장의 빛을 얻을 수 있다.

[0006] 이러한 발광층 중 도판트 화합물에 관한 종래기술로서 공개특허공보 제10-2008-0015865(2008.02.20)에는 아릴 아민이 결합된 인테노플루오렌유도체 등을 이용한 유기발광소자가 개시되어 있고, 공개특허공보 제10-2012-0047706호(2012.05.14)에서는 한분자내에 디벤조퓨란 또는 디벤조티오펜이플루오렌과 함께 존재하거나, 벤조퓨란 또는 디벤조티오펜이카바졸과 함께 존재하는 구조의 화합물을 이용한 유기발광소자가 개시되어 있다.

[0007] 또한 발광층 중 호스트 화합물에 관한 종래기술로서 대한민국 특허출원 제10-2013-0121947호에서는 형광호스트로서 사용가능한 안트라센 유도체를 포함하는 유기발광 소자에 대해 기재되어 있다.

[0008] 그러나, 상기 선행문헌을 포함하는 종래기술에도 불구하고 저전력 및 장수명을 나타내는 유기발광소자의 개발에 대한 요구는 지속적으로 요구되고 있는 실정이다.

선행기술문헌

- [0009] 공개특허공보제 10-2008-0015865 (2008.02.20)
- [0010] 공개특허공보 제10-2012-0047706호(2012.05.14)
- [0011] 대한민국특허출원 10-2013-0121947호

발명의 내용

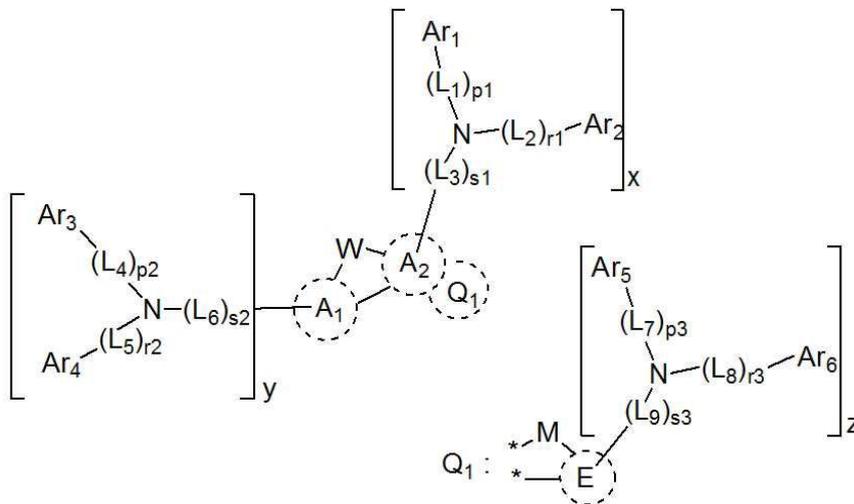
해결하려는 과제

- [0012] 따라서, 본 발명이 이루고자 하는 기술적 과제는 특정한 구조의 도판트와 호스트를 통해 저전력과 장수명 특성을 갖는 신규한 유기발광소자(organic light emitting diode, OLED)를 제공하는 것이다.

과제의 해결 수단

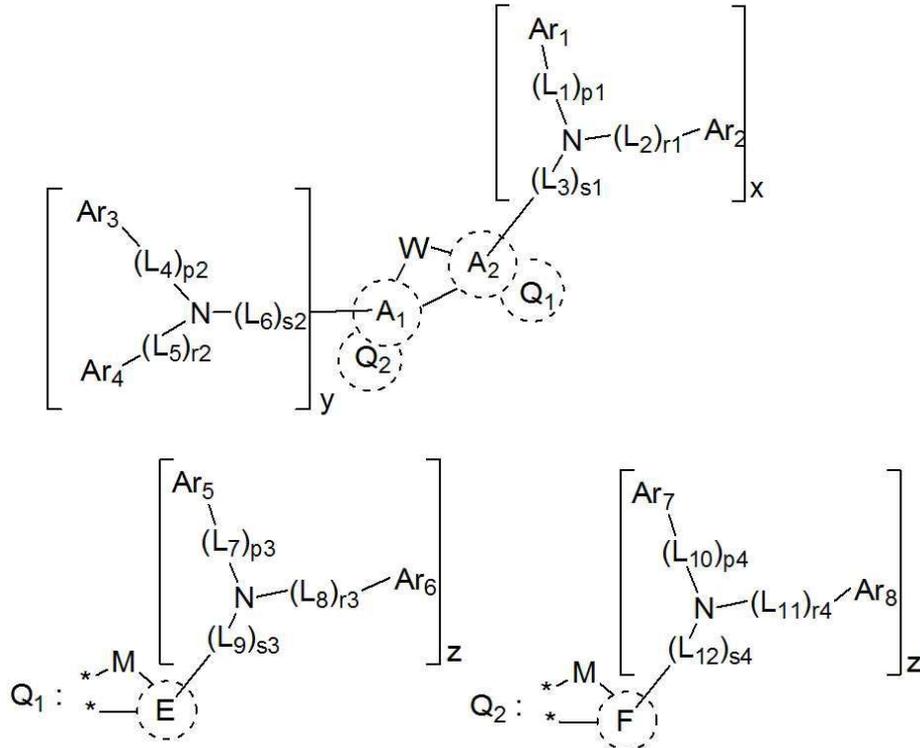
- [0013] 본 발명은 상기 기술적 과제들을 달성하기 위하여, 제1전극; 상기 제1전극에 대향된 제2전극; 및 상기 제1전극과 상기 제2전극사이에 개재되는 발광층;을 포함하는 유기발광소자로서, 상기 발광층이 하기 [화학식 A] 또는 [화학식 B]로 표시되는 아민 화합물 중 적어도 하나를 포함하며, 또한 하기 [화학식 D]로 표시되는 화합물을 포함하는 유기발광소자를 제공한다.

- [0014] [화학식 A]



- [0015]

[0016] [화학식 B]



[0017]

[0018] 상기 [화학식 A] 및 [화학식 B]에서, A₁, A₂, E 및 F는 각각 서로 동일하거나 상이하고, 서로 독립적으로 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 50의 방향족 탄화수소 고리, 또는 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 40의 방향족 헤테로고리이고;

[0019] 상기 A₁의 방향족 고리내 서로 이웃한 두 개의 탄소원자와, 상기 A₂의 방향족 고리내 서로 이웃한 두개의 탄소원자는 상기 W와 함께 5원환을 형성함으로써 각각 축합고리를 형성하며;

[0020] 상기 연결기 L₁ 내지 L₁₂는 각각 서로 동일하거나 상이하고, 서로 독립적으로 단일 결합, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 60의 알킬렌기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 60의 알케닐렌기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 60의 알킬닐렌기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 60의 시클로알킬렌기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 60의 헤테로시클로알킬렌기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 60의 아릴렌기 또는 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 60의 헤테로아릴렌기 중에서 선택되며;

[0021] 상기 W는 CR₁R₂, SiR₁R₂, GeR₁R₂, O, S 중에서 선택되며,

[0022] 상기 M은 N-R₃, CR₄R₅, SiR₆R₇, GeR₈R₉, O, S, Se 중에서 선택되는 어느 하나이며;

[0023] 상기 치환기 R₁ 내지 R₉, Ar₁ 내지 Ar₈은 각각 서로 동일하거나 상이하고, 서로 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 50의 아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 30의 알케닐기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 20의 알킬닐기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 30의 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 30의 시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 50의 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 30의 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알콕시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬티옥시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 30의 아릴티옥시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬아민기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 30의 아릴아민기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬실릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 30의 아릴실릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬게르마늄기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 아릴게르마늄기, 시아노기, 니트로기, 할로젠기 중에서 선택되는 어느하나이되,

[0024] 상기 R₁ 및 R₂는 서로 연결되어 치환족, 방향족의 단일환 또는 다환 고리를 형성할 수 있으며, 상기 형성된 치환

족, 방향족의 단일환 또는 다환 고리의 탄소원자는 N, O, P, Si, S, Ge, Se, Te 중에서 선택되는어느 하나 이상의 헤테로원자로 치환될 수 있으며;

[0025] 상기 p1 내지 p4, r1 내지 r4, s1 내지 s4는 각각 1 내지 3의 정수이되, 이들 각각이 2 이상인 경우에 각각의 연결기 L₁ 내지 L₁₂는 서로 동일하거나 상이하고,

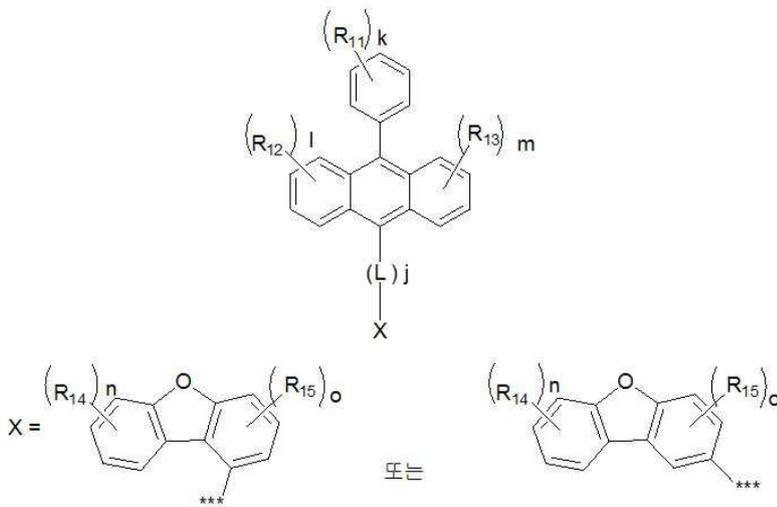
[0026] 상기 x는 1 또는 2의 정수이고, y 및 z는 각각 동일하거나 상이하며, 서로 독립적으로 0 내지 3의 정수이며,

[0027] 상기 Ar₁ 과 Ar₂, Ar₃과 Ar₄, Ar₅와 Ar₆, 및 Ar₇과 Ar₈은 각각 서로 연결되어 고리를 형성할 수 있고;

[0028] 상기 화학식 A에서 A₂ 고리내 서로 이웃한 두개의 탄소원자는 상기 구조식 Q₁의 *와 결합하여 축합고리를 형성하고,

[0029] 상기 화학식 B에서 상기 A₁ 고리내 서로 이웃한 두개의 탄소원자는 상기 구조식 Q₂의 *와 결합하여 축합고리를 형성하고, 상기 A₂ 고리내 서로 이웃한 두개의 탄소원자는 상기 구조식 Q₁의 *와 결합하여 축합고리를 형성가능하다.

[0030] [화학식 D]



[0031]

[0032] 상기 [화학식 D] 에서,

[0033] 치환기 R₁₁ 내지 R₁₅는,

[0034] 각각 동일하거나 상이하고, 서로 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 30의 알케닐기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 30의 알키닐기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 30의 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 30의 시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알콕시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬티옥시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 30의 아릴티옥시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬아민기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 30의 아릴아민기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 50의 아릴기, 치환 또는 비치환되고 이종원자로 O, N 또는 S를 갖는 탄소수 2 내지 50의 헤테로아릴기, 시아노기, 니트로기, 할로젠기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 실릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 게르마늄기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 붕소기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알루미늄기, 카르보닐기, 포스포릴기, 아미노기, 싸이올기, 히드록시기, 셀레늄기, 텔루륨기, 아미드기, 에테르기 및 에스테르기 중에서 선택되는어느하나이고,

[0035] 상기 R₁₁ 내지 R₁₅의 치환기가 결합되지 않은 방향족 고리의 탄소에는 수소가 결합되며,

[0036] 상기 연결기 L은 단일 결합, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 60의 아릴렌기이며;

[0037] j는 0 내지 2의 정수이고, 상기 j가 2 이상인 경우 각각의 L은 서로 동일하거나 상이하며,

[0038] k는 1 내지 5의 정수이고,

- [0039] 1 내지 n은 각각 서로 동일하거나 상이하고, 서로 독립적으로 1 내지 4의 정수이며,
- [0040] o 는 1 내지 3의 정수이되,
- [0041] 상기 k 내지 o가 각각 2 이상인 경우 각각의 R₁₁ 내지 R₁₅는 서로 동일하거나 상이하며,
- [0042] X의 '***'는 연결기 L과 결합하는 결합사이트이고,

[0043] 상기 [화학식 A], [화학식 B] 및 [화학식 D]에서의 '치환 또는 비치환된'에서의 '치환'은 중수소, 시아노기, 할로젠기, 히드록시기, 니트로기, 탄소수 1 내지 24의 알킬기, 탄소수 1 내지 24의 할로겐화된 알킬기, 탄소수 1 내지 24의 알케닐기, 탄소수 1 내지 24의 알키닐기, 탄소수 1 내지 24의 헤테로알킬기, 탄소수 6 내지 24의 아릴기, 탄소수 6 내지 24의 아릴알킬기, 탄소수 2 내지 24의 헤테로아릴기 또는 탄소수 2 내지 24의 헤테로아릴알킬기, 탄소수 1 내지 24의 알콕시기, 탄소수 1 내지 24의 알킬아미노기, 탄소수 1 내지 24의 아릴아미노기, 탄소수 1 내지 24의 헤테로 아릴아미노기, 탄소수 1 내지 24의 알킬실릴기, 탄소수 1 내지 24의 아릴실릴기, 탄소수 1 내지 24의 아릴옥시기로 이루어진 군에서 선택된 1개 이상의 치환기로 치환되는 것을 의미한다.

발명의 효과

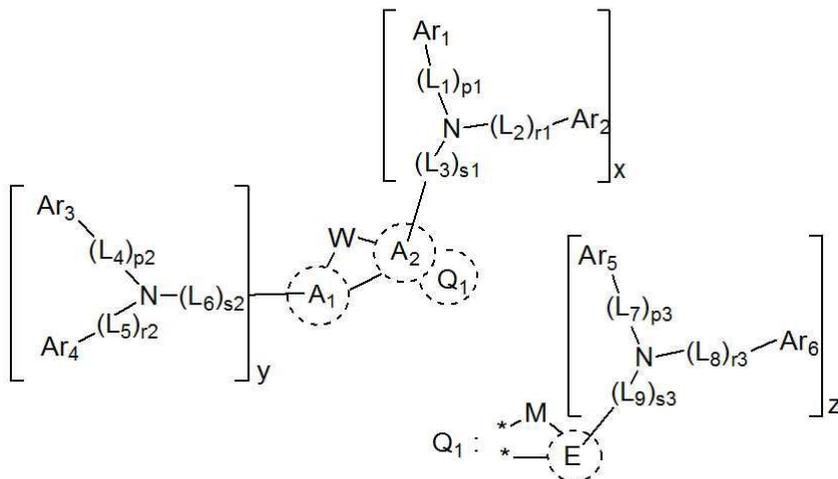
[0044] 본 발명에 따른 유기발광소자는 종래기술에 따른 유기발광소자에 비하여 저전압에서 유기발광소자의 구동이 가능하며, 또한 장수명 효과를 나타낼 수 있다.

도면의 간단한 설명

[0045] 도 1은 본 발명의 일 구체예에 따른 유기 발광 소자의 개략도이다.

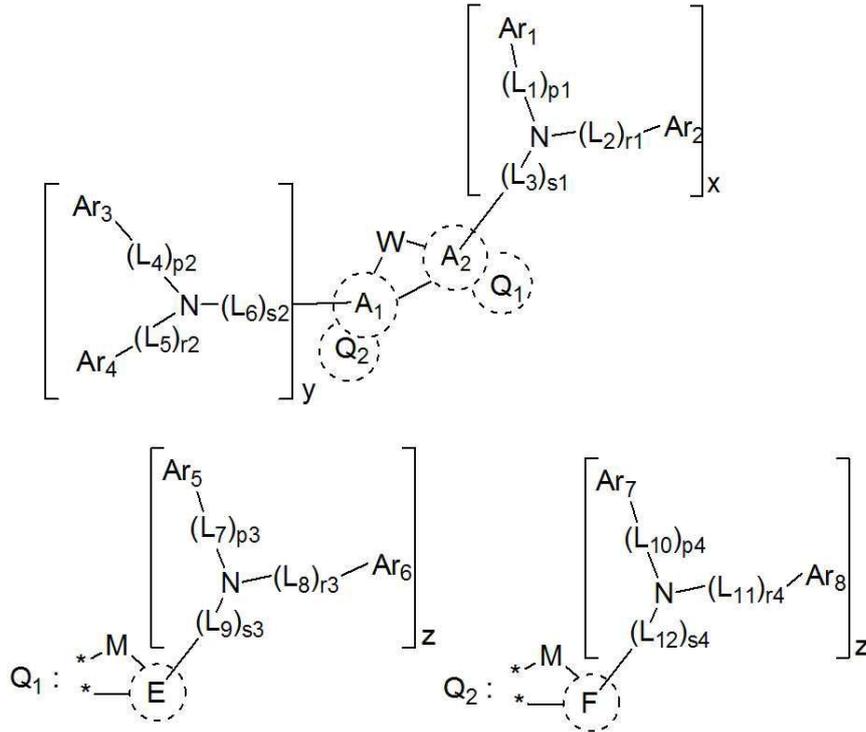
발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

- [0046] 이하, 본 발명을 더욱 상세하게 설명한다.
- [0047] 본 발명은 제1전극; 상기 제1전극에 대향된 제2전극; 및 상기 제1전극과 상기 제2전극 사이에 개재되는 발광층;을 포함하는 유기발광소자로서,
- [0048] 상기 발광층이 하기 [화학식 A] 또는 [화학식 B]로 표시되는 아민 화합물 중 적어도 하나를 포함하며, 또한 하기 [화학식 D]로 표시되는 화합물을 포함하는 유기발광소자를 제공한다.
- [0049] [화학식 A]



[0050]

[0051] [화학식 B]



[0052]

[0053] 상기 [화학식 A] 및 [화학식 B]에서, A₁, A₂, E 및 F는 각각 서로 동일하거나 상이하고, 서로 독립적으로 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 50의 방향족 탄화수소 고리, 또는 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 40의 방향족 헤테로고리이고;

[0054] 상기 A₁의 방향족 고리내 서로 이웃한 두 개의 탄소원자와, 상기 A₂의 방향족 고리내 서로 이웃한 두개의 탄소원자는 상기 W와 함께 5원환을 형성함으로써 각각 축합고리를 형성하며;

[0055] 상기 연결기 L₁ 내지 L₁₂는 각각 서로 동일하거나 상이하고, 서로 독립적으로 단일 결합, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 60의 알킬렌기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 60의 알케닐렌기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 60의 알키닐렌기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 60의 시클로알킬렌기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 60의 헤테로시클로알킬렌기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 60의 아릴렌기 또는 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 60의 헤테로아릴렌기 중에서 선택되며;

[0056] 상기 W는 CR₁R₂, SiR₁R₂, GeR₁R₂, O, S 중에서 선택되며,

[0057] 상기 M은 N-R₃, CR₄R₅, SiR₆R₇, GeR₈R₉, O, S, Se 중에서 선택되는 어느 하나이며;

[0058] 상기 치환기 R₁ 내지 R₉, Ar₁ 내지 Ar₈은 각각 서로 동일하거나 상이하고, 서로 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 50의 아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 30의 알케닐기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 20의 알키닐기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 30의 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 30의 시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 50의 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 30의 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알콕시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬티옥시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 30의 아릴티옥시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬아민기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 30의 아릴아민기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬실릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 30의 아릴실릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬게르마늄기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 아릴게르마늄기 시아노기, 니트로기, 할로젠기 중에서 선택되는 어느 하나이되,

[0059] 상기 R₁ 및 R₂는 서로 연결되어 지환족, 방향족의 단일환 또는 다환 고리를 형성할 수 있으며, 상기 형성된 지환

족, 방향족의 단일환 또는 다환 고리의 탄소원자는 N, O, P, Si, S, Ge, Se, Te 중에서 선택되는 어느 하나 이상의 헤테로원자로 치환될 수 있으며;

[0060] 상기 p1 내지 p4, r1 내지 r4, s1 내지 s4는 각각 1 내지 3의 정수이되, 이들 각각이 2 이상인 경우에 각각의 연결기 L₁ 내지 L₁₂는 서로 동일하거나 상이하고,

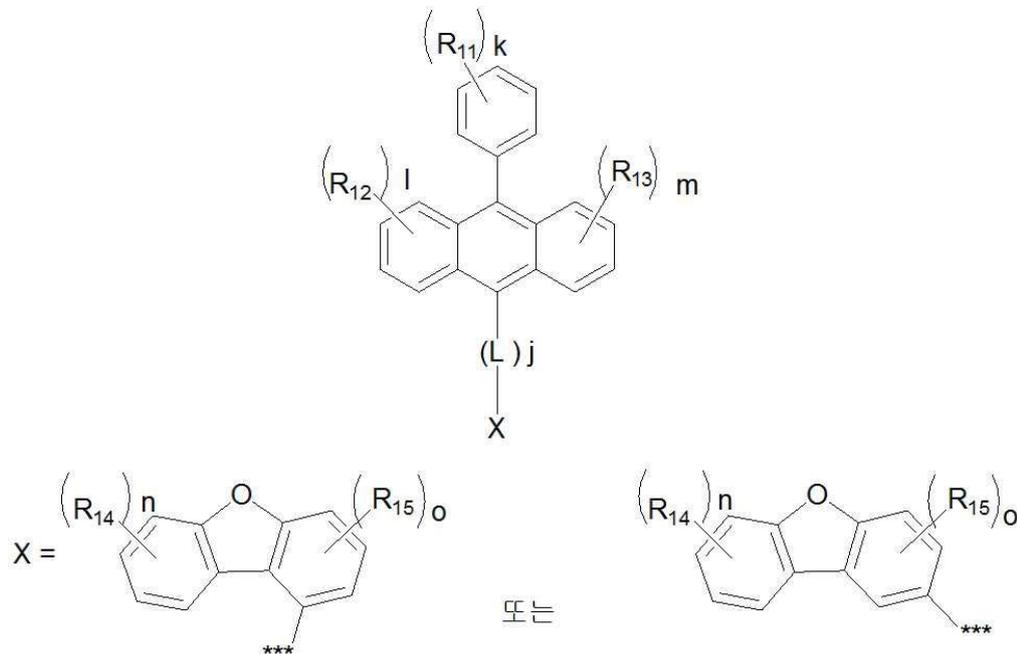
[0061] 상기 x는 1 또는 2의 정수이고, y 및 z는 각각 동일하거나 상이하며, 서로 독립적으로 0 내지 3의 정수이며,

[0062] 상기 Ar₁ 과 Ar₂, Ar₃과 Ar₄, Ar₅와 Ar₆, 및 Ar₇과 Ar₈은 각각 서로 연결되어 고리를 형성할 수 있고;

[0063] 상기 화학식 A에서 A₂ 고리내 서로 이웃한 두개의 탄소원자는 상기 구조식 Q₁의 *와 결합하여 축합고리를 형성하고,

[0064] 상기 화학식 B에서 상기 A₁ 고리내 서로 이웃한 두개의 탄소원자는 상기 구조식 Q₂의 *와 결합하여 축합고리를 형성하고, 상기 A₂ 고리내 서로 이웃한 두개의 탄소원자는 상기 구조식 Q₁의 *와 결합하여 축합고리를 형성가능하다.

[0065] [화학식 D]



[0066] 상기 [화학식 D] 에서,
 [0067] 치환기 R₁₁ 내지 R₁₅는,

[0068] 각각 동일하거나 상이하고, 서로 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 30의알케닐기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 30의 알킬닐기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 30의 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 30의 시클로알케닐기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알콕시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬티옥시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 30의 아릴티옥시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬아민기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 30의 아릴아민기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 50의 아릴기, 치환 또는 비치환되고 이종원자로 O, N 또는 S를 갖는 탄소수 2 내지 50의 헤테로아릴기, 시아노기, 니트로기, 할로젠기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 실릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 게르마늄기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 붕소기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알루미늄기, 카르보닐기, 포스포릴기, 아미노기, 싸이올기, 히드록시기, 셀레늄기, 텔루륨기, 아미드기, 에테르기 및 에스테르기 중에서 선택되는 어느 하나이고,

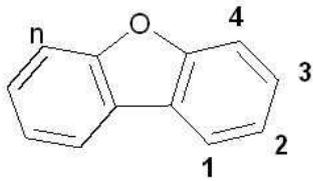
[0070] 상기 R₁₁ 내지 R₁₅의 치환기가 결합되지 않은 방향족 고리의 탄소에는 수소가 결합되며,

- [0071] 상기 연결기 L은 단일 결합, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 60의 아릴렌기이며;
- [0072] j는 0 내지 2의 정수이고, 상기 j가 2 이상인 경우 각각의 L은 서로 동일하거나 상이하며,
- [0073] k는 1 내지 5의 정수이고,
- [0074] l 내지 n은 각각 서로 동일하거나 상이하고, 서로 독립적으로 1 내지 4의 정수이며,
- [0075] o 는 1 내지 3의 정수이되,
- [0076] 상기 k 내지 o가 각각 2 이상인 경우 각각의 R₁₁ 내지 R₁₅는 서로 동일하거나 상이하며,
- [0077] X의 '***'는 연결기 L과 결합하는 결합사이트이고,
- [0078] 상기 [화학식 A], [화학식 B] 및 [화학식 D]에서의 '치환 또는 비치환된'에서의 '치환'은 중수소, 시아노기, 할로젠기, 히드록시기, 니트로기, 탄소수 1 내지 24의 알킬기, 탄소수 1 내지 24의 할로젠화된 알킬기, 탄소수 1 내지 24의 알케닐기, 탄소수 1 내지 24의 알키닐기, 탄소수 1 내지 24의 헤테로알킬기, 탄소수 6 내지 24의 아릴기, 탄소수 6 내지 24의 아릴알킬기, 탄소수 2 내지 24의 헤테로아릴기 또는 탄소수 2 내지 24의 헤테로아릴알킬기, 탄소수 1 내지 24의 알콕시기, 탄소수 1 내지 24의 알킬아미노기, 탄소수 1 내지 24의 아릴아미노기, 탄소수 1 내지 24의 헤테로 아릴아미노기, 탄소수 1 내지 24의 알킬실릴기, 탄소수 1 내지 24의 아릴실릴기, 탄소수 1 내지 24의 아릴옥시기로 이루어진 군에서 선택된 1개 이상의 치환기로 치환되는 것을 의미한다.
- [0079] 한편, 본 발명에서의 상기 "치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬기", "치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 50의 아릴기" 등에서의 상기 알킬기 또는 아릴기의 범위를 고려하여 보면, 상기 탄소수 1 내지 30의 알킬기 및 탄소수 5 내지 50의 아릴기의 탄소수의 범위는 각각 상기 치환기가 치환된 부분을 고려하지 않고 비치환된 것으로 보았을 때의 알킬 부분 또는 아릴 부분을 구성하는 전체 탄소수를 의미하는 것이다. 예컨대, 파라위치에 부틸기가 치환된 페닐기는 탄소수 4의 부틸기로 치환된 탄소수 6의 아릴기에 해당하는 것으로 보아야 한다.
- [0080] 본 발명의 화합물에서 사용되는 치환기인 아릴기는 하나 이상의 고리를 포함하는 탄화수소로 이루어진방향족 시스템을 의미하며, 상기 아릴기가 치환기가 있는 경우 서로 이웃하는 치환기와 서로 융합 (fused)되어 고리를 추가로 형성할 수 있다.
- [0081] 상기 아릴기의 구체적인 예로는 페닐기, o-비페닐기, m-비페닐기, p-비페닐기, o-터페닐기, m-터페닐기, p-터페닐기, 나프틸기, 안트릴기, 페난트릴기, 피레닐기, 인데닐, 플루오레닐기, 테트라히드로나프틸기, 페릴렌일, 크라이세닐, 나프타세닐,플루오란텐일등과 같은 방향족 그룹을 들 수 있고, 상기 아릴기 중 하나 이상의 수소 원자는 중수소 원자, 할로젠 원자, 히드록시기, 니트로기, 시아노기, 실릴기, 아미노기 (-NH₂, -NH(R), -N(R')(R'')), R'과 R''은 서로 독립적으로 탄소수 1 내지 10의 알킬기이며, 이 경우 "알킬아미노기"라 함), 아미디노기, 히드라진기, 히드라존기, 카르복실기, 술폰산기, 인산기, 탄소수 1 내지 24의 알킬기, 탄소수 1 내지 24의 할로젠화된 알킬기, 탄소수 1 내지 24의 알케닐기, 탄소수 1 내지 24의 알키닐기, 탄소수 1 내지 24의 헤테로알킬기, 탄소수 6 내지 24의 아릴기, 탄소수 6 내지 24의 아릴알킬기, 탄소수 2 내지 24의 헤테로아릴기 또는 탄소수 2 내지 24의 헤테로아릴알킬기로 치환될 수 있다.
- [0082] 본 발명의 화합물에서 사용되는 치환기인 헤테로아릴기는 N, O, P, Si, S, Ge, Se, Te 중에서 선택된 1, 2 또는 3개의 헤테로 원자를 포함하고, 나머지 고리 원자가 탄소인 탄소수 2 내지 24의 고리 방향족 시스템을 의미하며, 상기 고리들은 융합(fused)되어 고리를 형성할 수 있다. 그리고 상기 헤테로아릴기 중 하나 이상의 수소 원자는 상기 아릴기의 경우와 마찬가지로의 치환기로 치환가능하다.
- [0083] 또한 본 발명에서 상기 방향족 헤테로고리는 방향족 탄화수소 고리에서 방향족 탄소중 하나이상인 N, O, P, Si, S, Ge, Se, Te 중에서 선택된 하나 이상의 헤테로 원자로 치환된 것을 의미한다.
- [0084] 본 발명에서 사용되는 치환기인 알킬기의 구체적인 예로는 메틸, 에틸, 프로필, 이소프로필, 이소부틸, sec-부틸, tert-부틸, 펜틸, iso-아밀, 헥실 등을 들 수 있고, 상기 알킬기 중 하나 이상의 수소 원자는 원자는 원자는 상기 아릴기의 경우와 마찬가지로의 치환기로 치환가능하다.
- [0085] 본 발명의 화합물에서 사용되는 치환기인 알콕시기의 구체적인 예로는 메톡시, 에톡시, 프로폭시, 이소부틸옥시, sec-부틸옥시, 펜틸옥시, iso-아밀옥시, 헥실옥시 등을 들 수 있고, 상기 알콕시기 중 하나 이상의 수소 원자는 상기 아릴기의 경우와 마찬가지로의 치환기로 치환가능하다.
- [0086] 본 발명의 화합물에서 사용되는 치환기인 실릴기의 구체적인 예로는 트리메틸실릴, 트리에틸실릴,

트리페닐실릴, 트리메톡시실릴, 디메톡시페닐실릴, 디페닐메틸실릴, 실릴, 디페닐비닐실릴, 메틸사이클로뷰틸실릴, 디메틸퓨릴실릴 등을 들 수 있고, 상기 실릴기 중 하나 이상의 수소 원자는 상기 아릴기의 경우와 마찬가지로 치환기로 치환가능 하다.

[0087] 본 발명에 따른 유기발광소자에서의 상기 화학식 A 또는 화학식 B로 표시되는 아민 화합물은 상기 화학식 A에서, 구조식 Q₁이 A₂고리에 연결되는 경우에 상기 Ar₁ 및 Ar₂를 포함하는 아민기는 반드시 A₂ 고리에 결합되게 되는 구조적 특징을 가지며, 또한 화학식 B 에서 구조식 Q₂가 A₁고리에 연결되고, 구조식 Q₁이 A₂고리에 연결되는 경우에 상기 A₂ 고리에는 반드시 Ar₁ 및 Ar₂를 포함하는 아민기가 결합되는 구조적 특징을 가진다.

[0088] 또한,본 발명에서의 상기 화학식 D로 표시되는 화합물은 안트라센 고리의 9번 위치에 결합하는 연결기 L이 아래 그림1에서 나타내는 바와 같이, 치환 또는 비치환된 디벤조퓨란의 어느 한쪽 페닐고리의 1번 또는 2번 위치의 탄소원자와 결합하는 것을 기술적 특징으로 한다.



[그림 1]

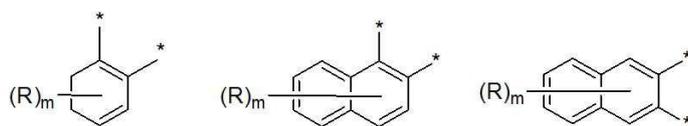
[0089] 본 발명에 따른 유기발광소자의 발광층은 호스트와 도판트를 포함하여 이루어지고,
 [0090] 상기 [화학식 A] 또는 [화학식 B]로 표시되는 아민 화합물은 발광층내 도판트로서 사용되며, 본 발명에서의 발광층의 또다른 구성요소인 상기 [화학식 D]로 표시되는 화합물은 호스트로서 사용됨으로써, 종래기술에 따른 유기발광소자에 비해 저전압에서 구동할 수 있으며, 또한 장수명의 효과를 가질 수 있다.

[0091] 또한 본 발명에서 상기 화학식 A 또는 화학식 B에서의 A₁, A₂, E 및 F는 각각 동일하거나 상이하고, 서로 독립적으로 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 50의 방향족 탄화수소 고리일 수 있다.

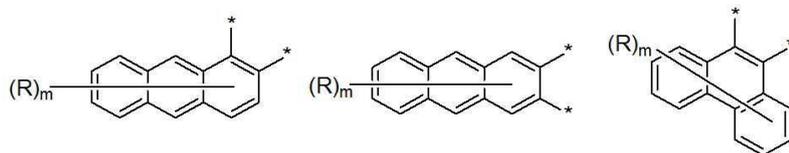
[0092] 또한 본 발명에서 상기 화학식 A 또는 화학식 B에서의 A₁, A₂, E 및 F가 각각 동일하거나 상이하고, 서로 독립적으로 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 50의 방향족 탄화수소 고리에 해당하는 경우에, 상기 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 50의 방향족 탄화수소 고리는 동일하거나 상이하고, 서로 독립적으로 [구조식 10] 내지 [구조식 21] 중에서 선택되는 어느 하나일 수 있다.

[0093] 상기와 같이, 화학식 A 또는 화학식 B에서의 A₁, A₂, E 및 F가 각각 동일하거나 상이하고, 서로 독립적으로 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 50의 방향족 탄화수소 고리에 해당하는 경우에, 상기 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 50의 방향족 탄화수소 고리는 동일하거나 상이하고, 서로 독립적으로 [구조식 10] 내지 [구조식 21] 중에서 선택되는 어느 하나일 수 있다.

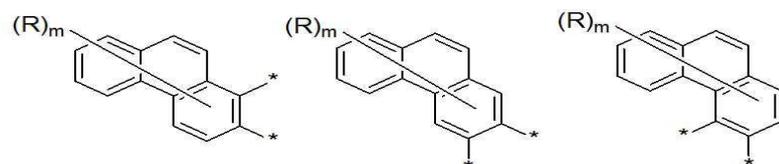
[0094] [구조식 10] [구조식 11] [구조식 12]



[0095] [구조식 13] [구조식 14] [구조식 15]

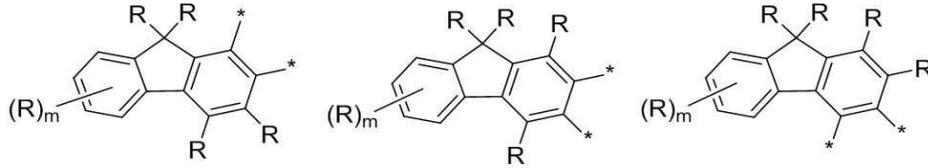


[0097] [구조식 16] [구조식 17] [구조식 18]



[0099]

[0100] [구조식 19] [구조식 20] [구조식 21]



[0101]

[0102] 상기 [구조식 10] 내지 [구조식 21]에서 "-"*는 상기 W를 포함하는 5원환을 형성하거나, 또는 상기 구조식 Q₁ 및 Q₂에서의 M을 포함하는 5원환을 형성하기 위한 결합 사이트를 의미하며,

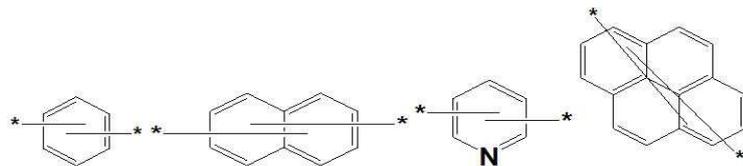
[0103] 상기 [구조식 10] 내지 [구조식 21]의 방향족 탄화수소 고리가 A₁고리 또는 A₂고리에 해당하면서 구조식 Q₁ 또는 구조식 Q₂와 결합하는 경우에는 이들중 서로 이웃한 두개의 탄소원자는 상기 구조식 Q₁의 *와 결합하거나 또는 구조식 Q₂의 *와 결합하여 축합고리를 형성하며;

[0104] 상기 [구조식 10] 내지 [구조식 21]에서 상기 R은 앞서 정의한 R₁ 및 R₂과 동일하고

[0105] m은 1 내지 8의 정수이며, m이 2이상인 경우 또는 R이 2이상인 경우에는 각각의 R은 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

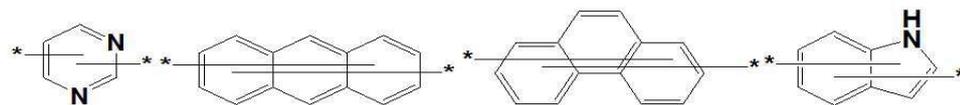
[0106] 또한 본 발명에서 상기 화학식 D의 안트라센 유도체의 연결기 L은 단일결합이거나, 아래 [구조식 22] 또는 [구조식 30] 중에서 선택되는 어느 하나일 수 있다.

[0107] [구조식 22] [구조식 23] [구조식 24] [구조식 25]



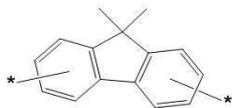
[0108]

[0109] [구조식 26] [구조식 27] [구조식 28] [구조식 29]



[0110]

[0111] [구조식 30]



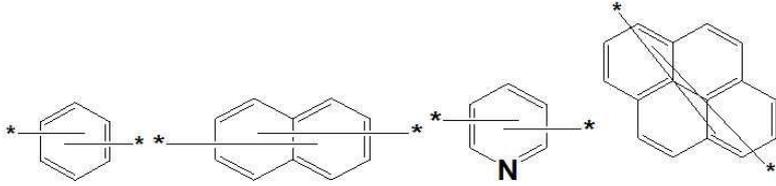
[0112]

[0113] 상기 연결기 L에서 방향족 고리의 탄소자리는 수소 또는 중수소가 결합될 수 있다.

[0114] 또한 본 발명에서, 상기 화학식 A 및 화학식 B에서의 연결기 L₁ 내지 L₁₂는 각각 서로 동일하거나 상이하며, 단일결합이거나, 또는 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 20의 아릴렌기, 또는 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 20의 헤테로아릴렌기중에서 선택되는 어느 하나일 수 있다.

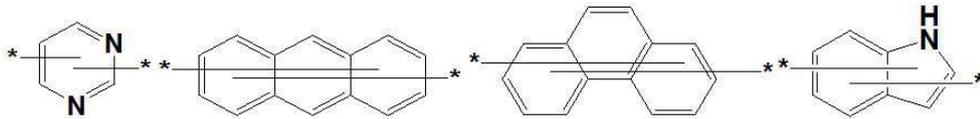
[0115] 이경우에 상기 연결기 L₁ 내지 L₁₂는 각각 단일결합이거나, 아래 [구조식 22] 또는 [구조식 30] 중에서 선택되는 어느 하나일 수 있다.

[0116] [구조식 22] [구조식 23] [구조식 24] [구조식 25]



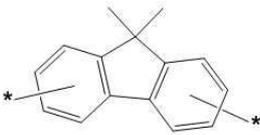
[0117]

[0118] [구조식 26] [구조식 27] [구조식 28] [구조식 29]



[0119]

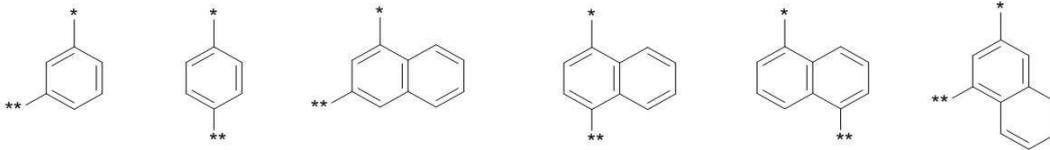
[0120] [구조식 30]



[0121]

[0122] 상기 연결기 L에서 방향족 고리의 탄소자리는 수소 또는 중수소가 결합될 수 있다.

[0123] 예컨대, 상기 연결기 L과, 연결기 L₁ 내지 L₁₂는 단일결합이거나 또는 하기 [L₂₁] 내지 [L₂₆]로 표시되는 구조를 가질 수 있다.



[0124]

[0125] L₂₁ L₂₂ L₂₃ L₂₄ L₂₅ L₂₆

[0126] 여기서 상기 '-*'는 안트라센에 결합되는 결합사이트이고, 상기 '-**'는 X에 결합되는 결합사이트이다.

[0127] 보다 상세하게는, 이 경우에 y는 1이고, z은 0일 수 있다.

[0128] 또한, 본 발명의 상기 화학식 D 내 치환기 R₁₁ 내지 R₁₅ 중 하나 이상은 중수소일 수 있다.

[0129] 일 실시예로서, 상기 치환기 R₁₁은 중수소이고, k는 5일 수 있다.

[0130] 일 실시예로서, R₁₂ 및/또는 R₁₃는 중수소이고, l이 2이상이거나 또는 m이 2이상일 수 있다.

[0131] 일 실시예로서, R₁₂ 및 R₁₃가 동시에 중수소로서 l과 m이 각각 2이상일 수 있다.

[0132] 일 실시예로서, 상기 R₁₄ 및/또는 R₁₅는 중수소이고, n 이 2이상이거나 또는 o가 2이상일 수 있다.

[0133] 일 실시예로서 상기 R₁₄ 및 R₁₅가 동시에 중수소이며, n 과 o가 각각 2이상일 수 있다.

[0134] 일 실시예로서, 본 발명의 [화학식 A] 또는 [화학식 B]로 표시되는 아민 화합물 내 치환기 R₁ 내지 R₉, Ar₁ 내지 Ar₈은 각각 서로 동일하거나 상이하고, 서로 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 20의 아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 30의 시클로알킬기, 치환 또는 비치환되고 이종 원자로 O, N, S 및 Si에서 선택되는 어느 하나이상을 갖는 탄소수 2 내지 20의 헤테로아릴기, 시아노기, 할로젠기중에서 선택되는 어느 하나일 수 있다.

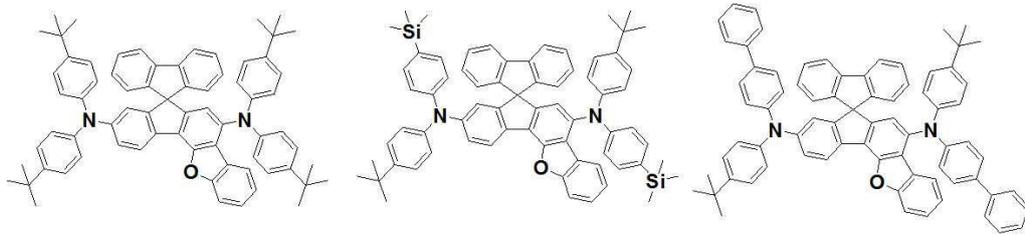
[0135] 또한 본 발명의 화학식 A 또는 화학식 B로 표시되는 아민화합물에 있어서, 상기 A₁, A₂, E, F, Ar₁ 내지 Ar₈, L₁

내지 L₁₂, R₁ 내지 R₉에서의 '치환'되는 치환기는 시아노기, 할로젠기, 탄소수 1 내지 6의 알킬기, 탄소수 6 내지 18의 아릴기, 탄소수 6 내지 18의 아릴알킬기, 탄소수 3 내지 18의 헤테로아릴기, 탄소수 1 내지 12의 알킬실릴기, 탄소수 6 내지 18의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택된 어느 하나일 수 있다.

[0136] 또한 본 발명에서 상기 [화학식 A] 및 [화학식 B]의 W는 CR₁R₂, 또는 SiR₁R₂ 일 수 있다.

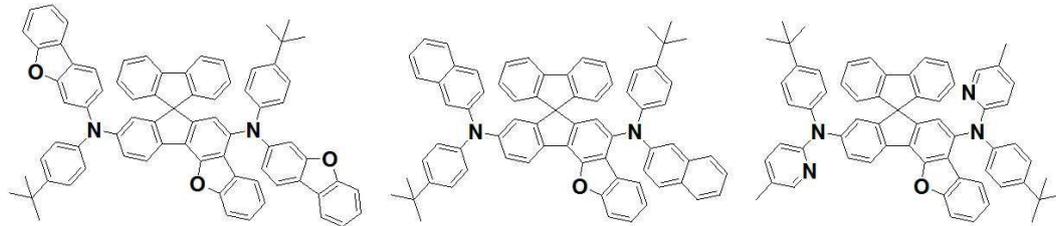
[0137] 또한 본 발명에서의 상기 화학식 A 또는 화학식 B로 표시되는 화합물은 하기 [화학식 1] 내지 [화학식 239] 중에서 선택되는 어느 하나일 수 있다.

[0138] <화학식 1> <화학식 2 > <화학식 3 >



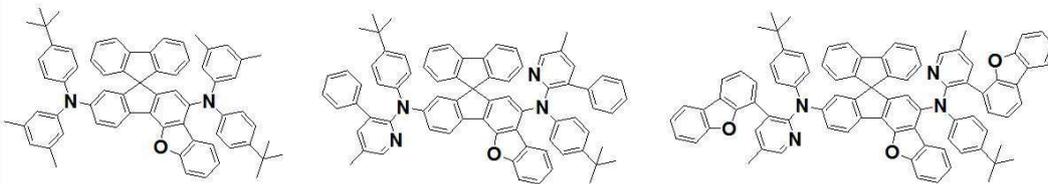
[0139]

[0140] <화학식 4> <화학식 5 > <화학식 6 >



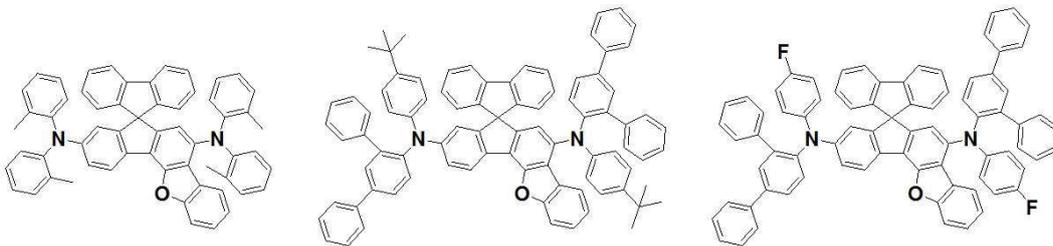
[0141]

[0142] <화학식 7> <화학식 8 > <화학식 9 >



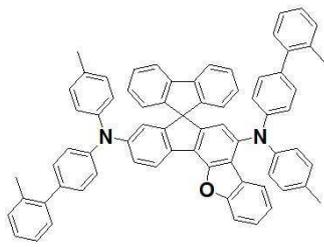
[0143]

[0144] <화학식 10> <화학식 11 > <화학식 12 >

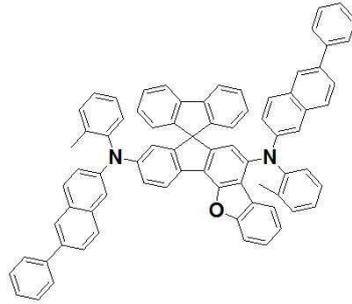


[0145]

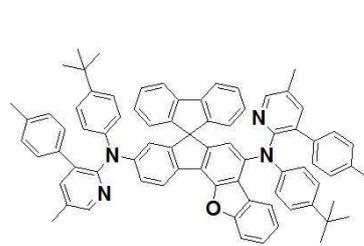
[0146] <화학식 13>



<화학식 14 >

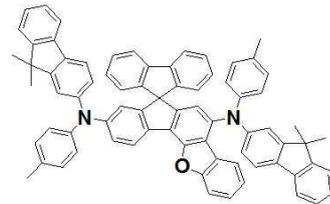


<화학식 15>

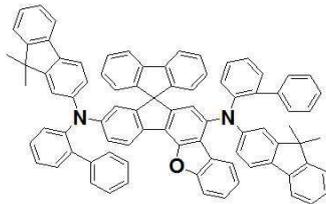


[0147]

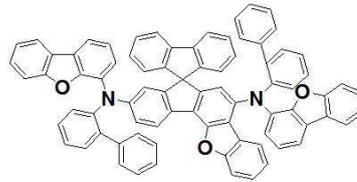
[0148] <화학식 16>



<화학식 17 >

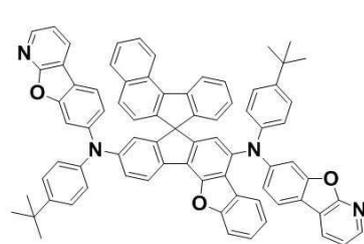


<화학식 18>

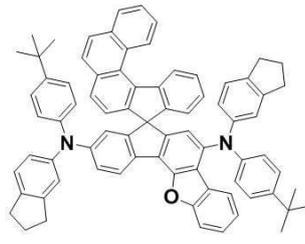


[0149]

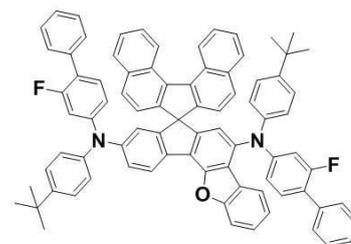
[0150] <화학식 19>



<화학식 20 >

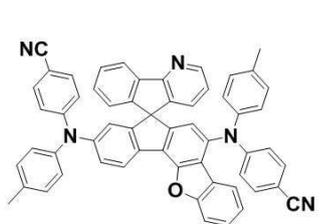


<화학식 21>

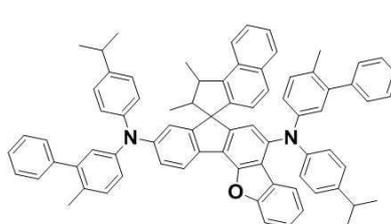


[0151]

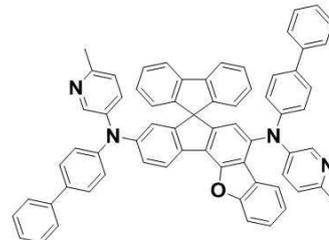
[0152] <화학식 22>



<화학식 23 >

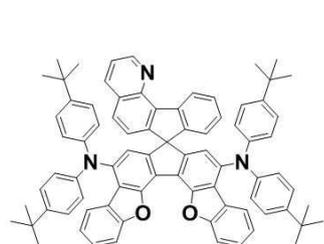


<화학식 24>

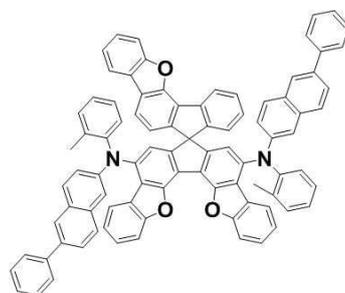


[0153]

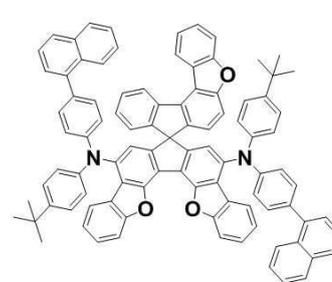
[0154] <화학식 25>



<화학식 26 >



<화학식 27>



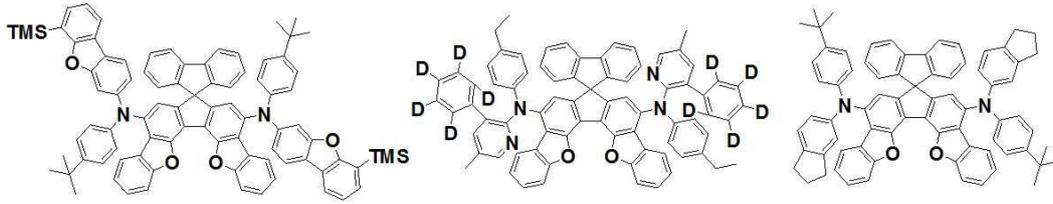
[0155]

[0156]

<화학식 28>

<화학식 29 >

<화학식 30>



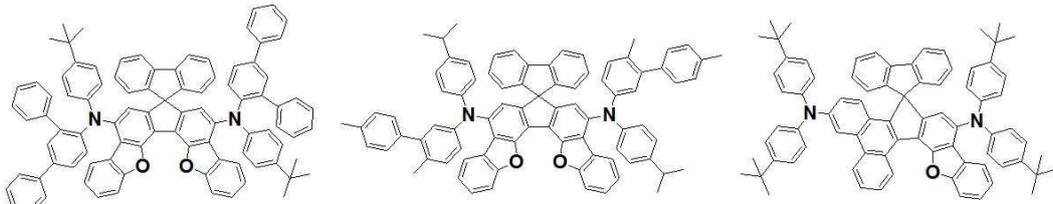
[0157]

[0158]

<화학식 31>

<화학식 32 >

<화학식 33>



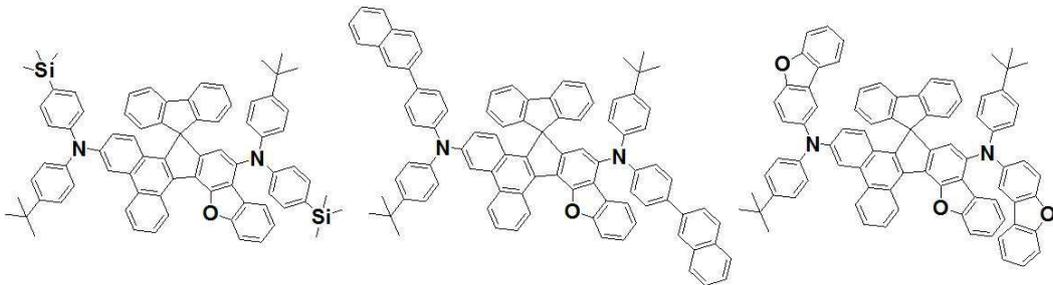
[0159]

[0160]

<화학식 34 >

<화학식 35 >

<화학식 36>



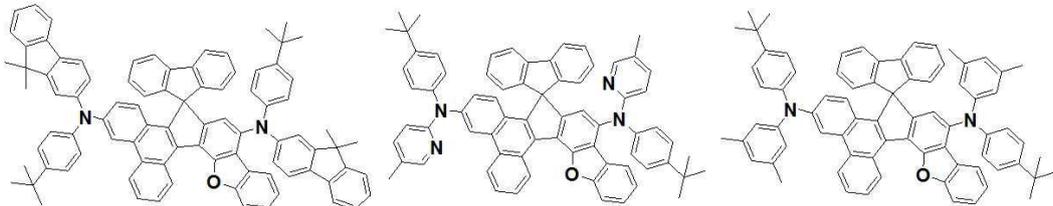
[0161]

[0162]

<화학식 37 >

<화학식 38 >

<화학식 39>



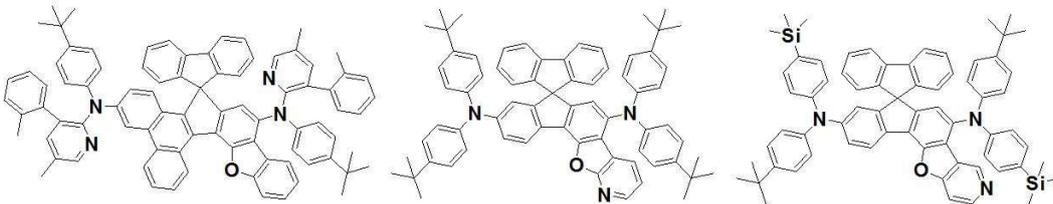
[0163]

[0164]

<화학식 40 >

<화학식 41 >

<화학식 42>



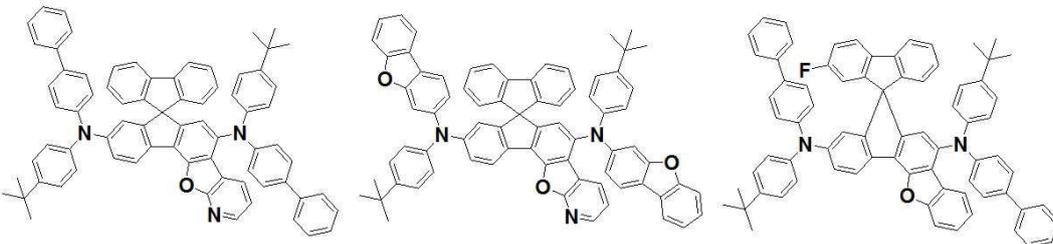
[0165]

[0166]

<화학식 43 >

<화학식 44 >

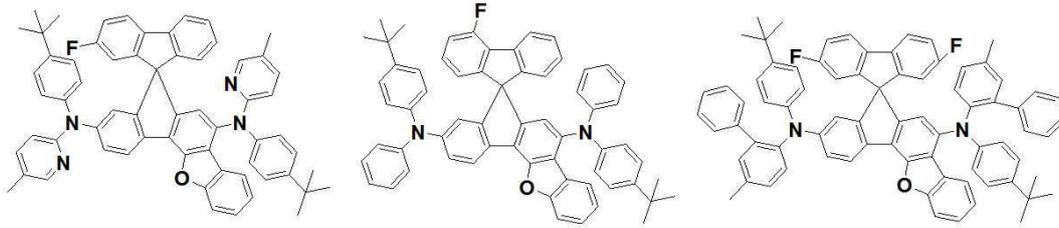
<화학식 45>



[0167]

[0168]

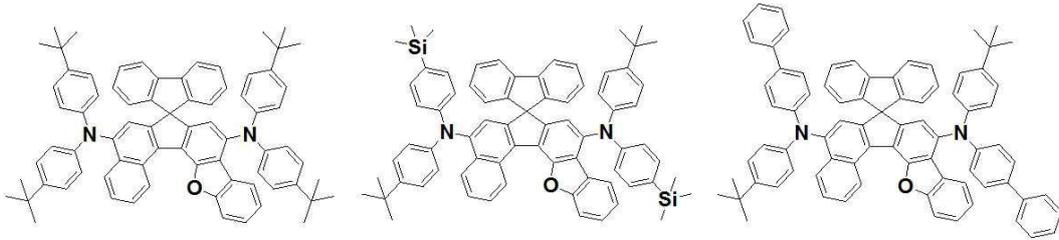
<화학식 46 > <화학식 47 > <화학식 48>



[0169]

[0170]

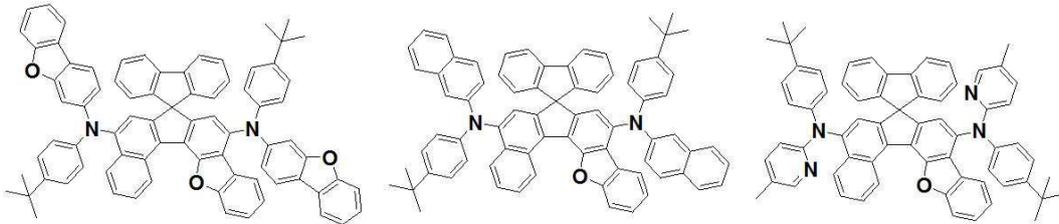
<화학식 49 > <화학식 50 > <화학식 51>



[0171]

[0172]

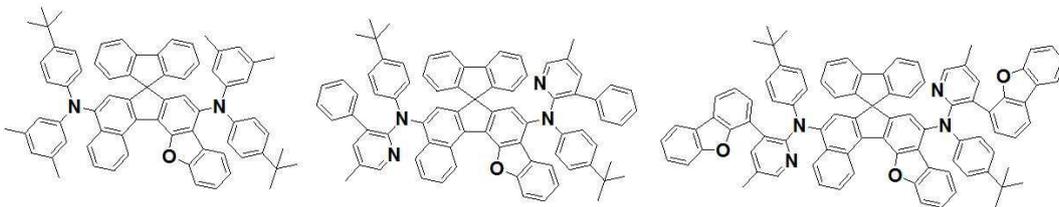
<화학식 52 > <화학식 53 > <화학식 54>



[0173]

[0174]

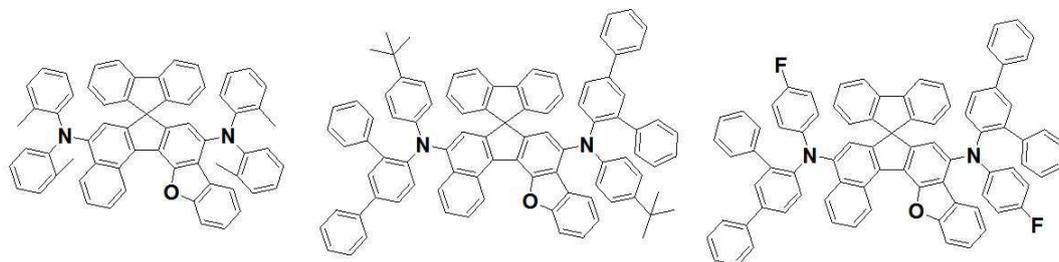
<화학식 55 > <화학식 56 > <화학식 57>



[0175]

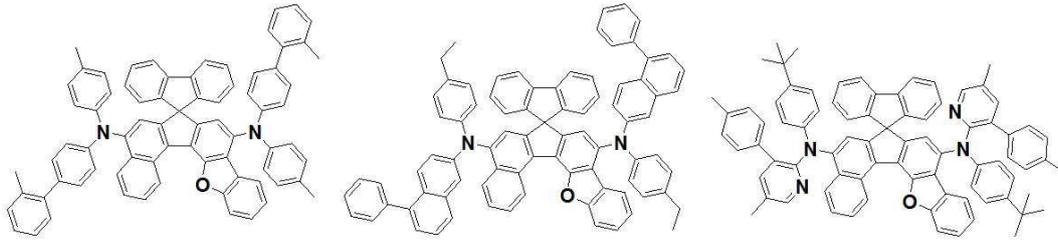
[0176]

<화학식 58 > <화학식 59 > <화학식 60>



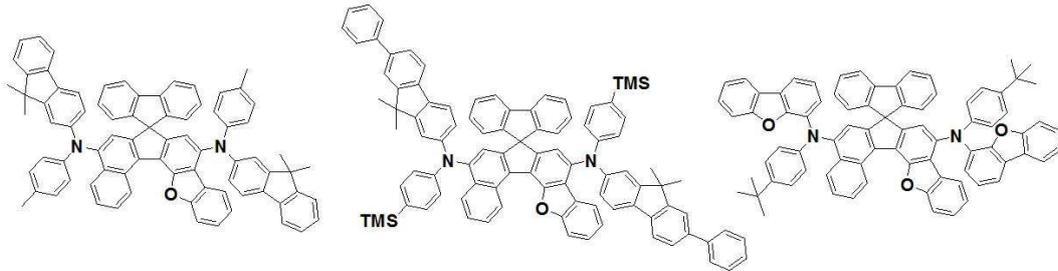
[0177]

[0178] <화학식 61 > <화학식 62 > <화학식 63>



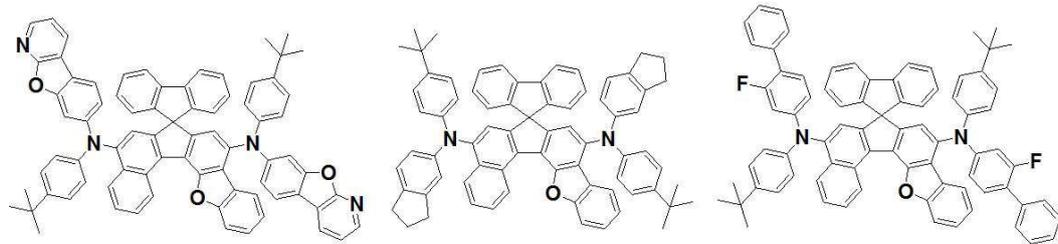
[0179]

[0180] <화학식 64 > <화학식 65 > <화학식 66>



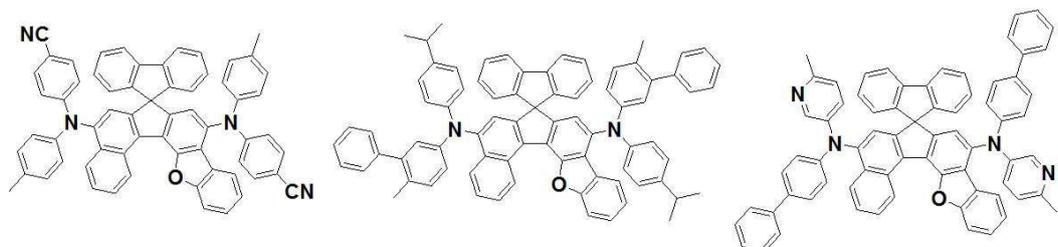
[0181]

[0182] <화학식 67 > <화학식 68 > <화학식 69>



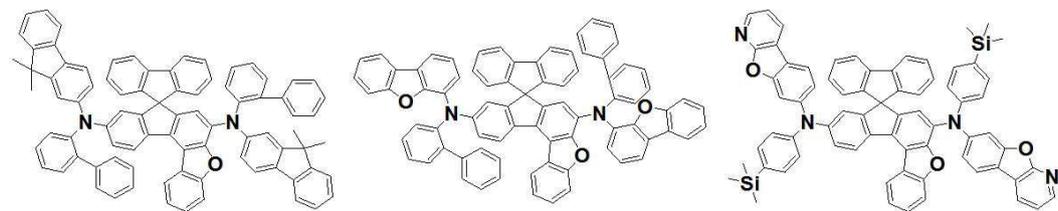
[0183]

[0184] <화학식 70 > <화학식 71 > <화학식 72>



[0185]

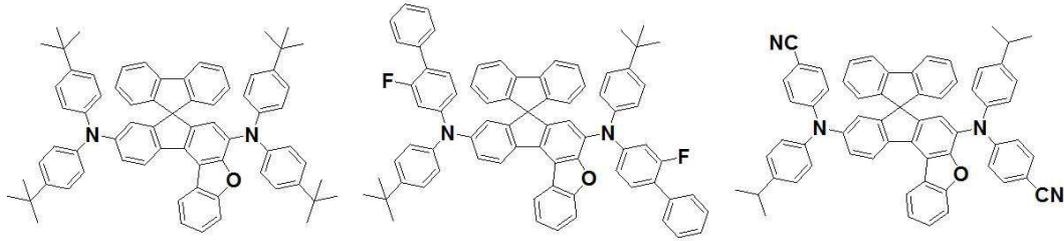
[0186] <화학식 73 > <화학식 74 > <화학식 75>



[0187]

[0188]

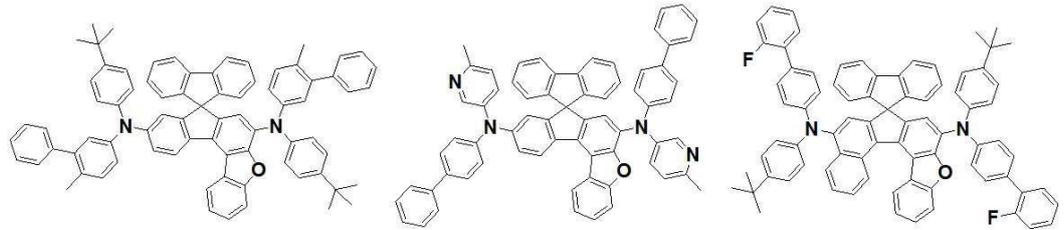
<화학식 76 > <화학식 77 > <화학식 78>



[0189]

[0190]

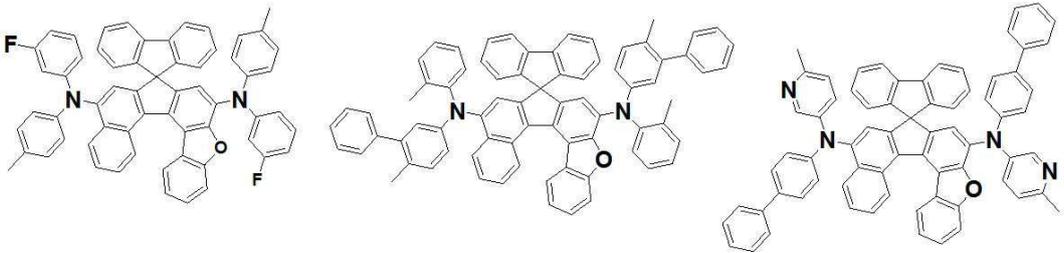
<화학식 79 > <화학식 80 > <화학식 81>



[0191]

[0192]

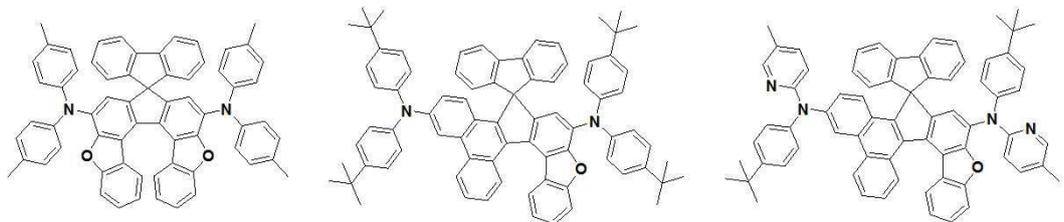
<화학식 82 > <화학식 83 > <화학식 84>



[0193]

[0194]

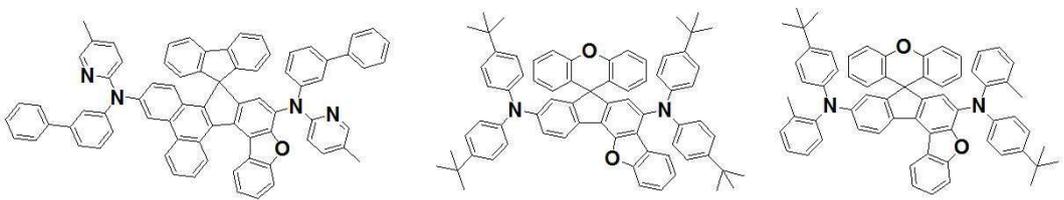
<화학식 85 > <화학식 86 > <화학식 87>



[0195]

[0196]

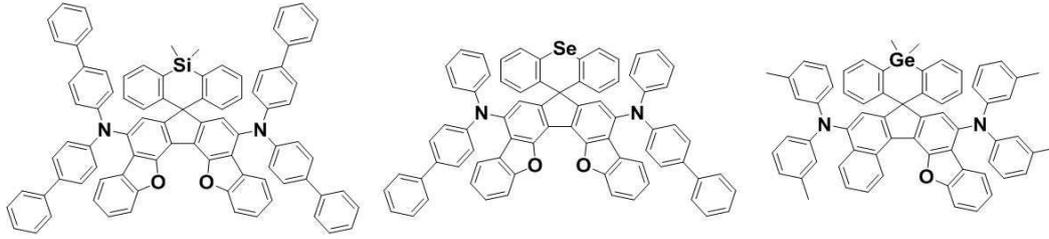
<화학식 88 > <화학식 89 > <화학식 90>



[0197]

[0198]

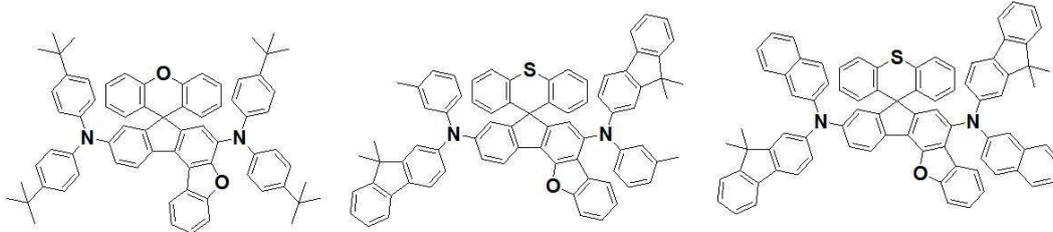
<화학식 91 > <화학식 92 > <화학식 93>



[0199]

[0200]

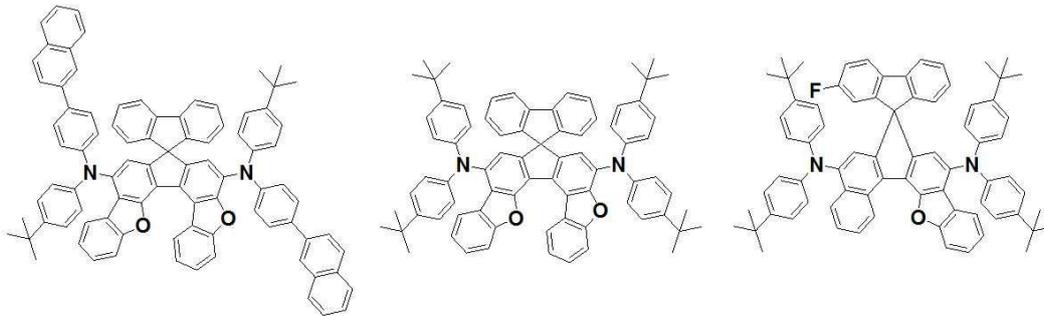
<화학식 94 > <화학식 95 > <화학식 96>



[0201]

[0202]

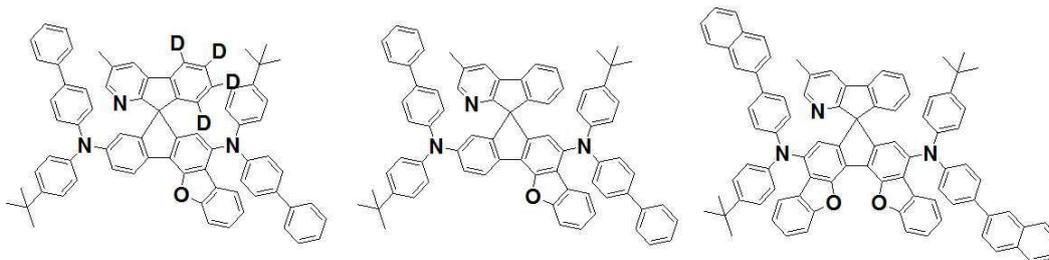
<화학식 97 > <화학식 98 > <화학식 99>



[0203]

[0204]

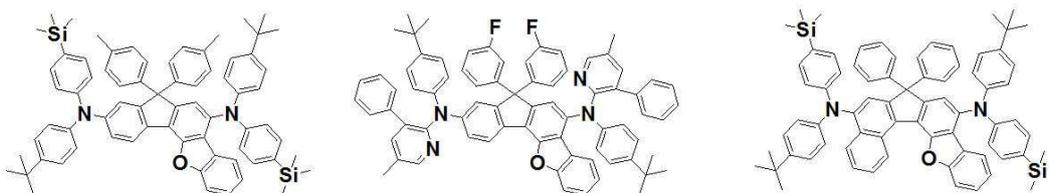
<화학식 100 > <화학식 101 > <화학식 102>



[0205]

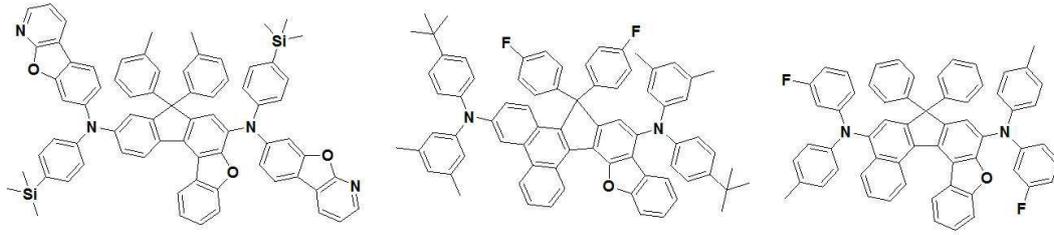
[0206]

<화학식 103 > <화학식 104 > <화학식 105>



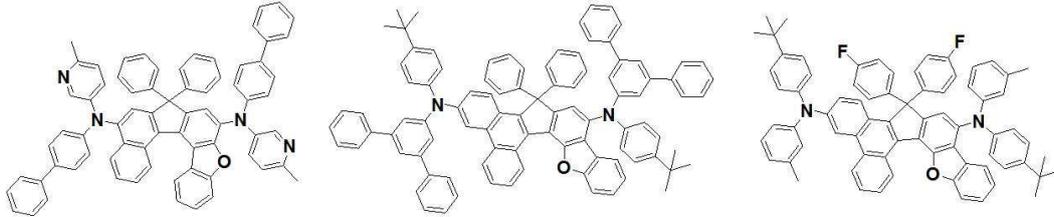
[0207]

[0208] <화학식 106 > <화학식 107 > <화학식 108>



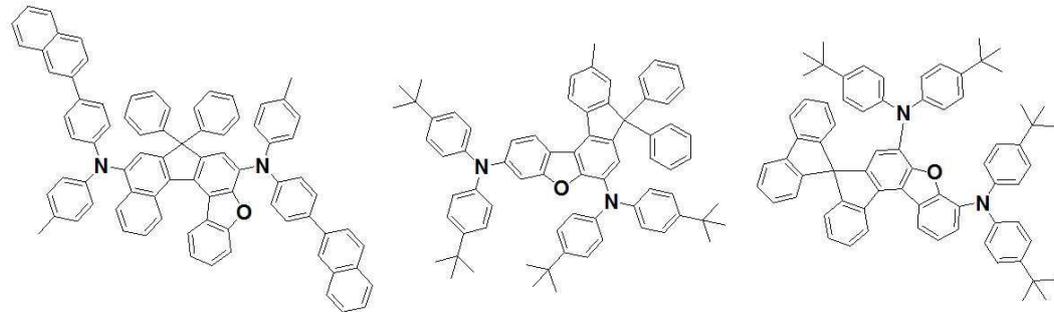
[0209]

[0210] <화학식 109 > <화학식 110 > <화학식 111>



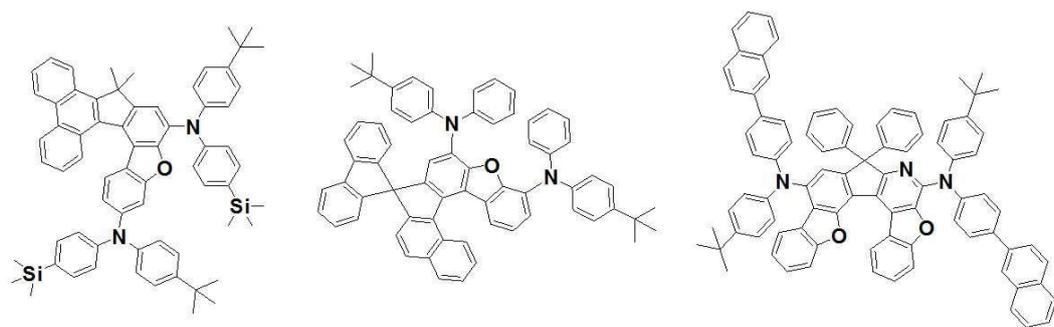
[0211]

[0212] <화학식 112 > <화학식 113 > <화학식 114>



[0213]

[0214] <화학식 115 > <화학식 116 > <화학식 117>



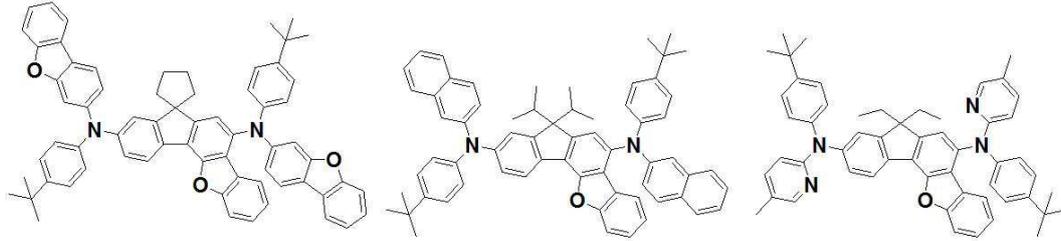
[0215]

[0216] <화학식 118 > <화학식 119 > <화학식 120>



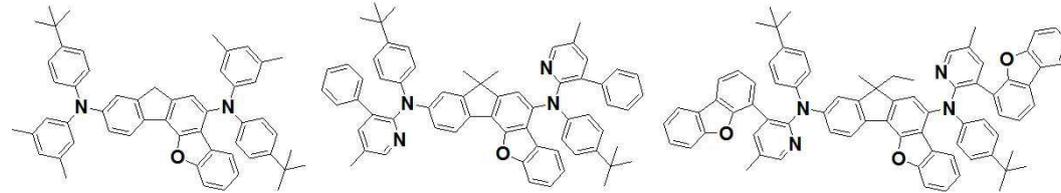
[0217]

[0218] <화학식 121 > <화학식 122 > <화학식 123>



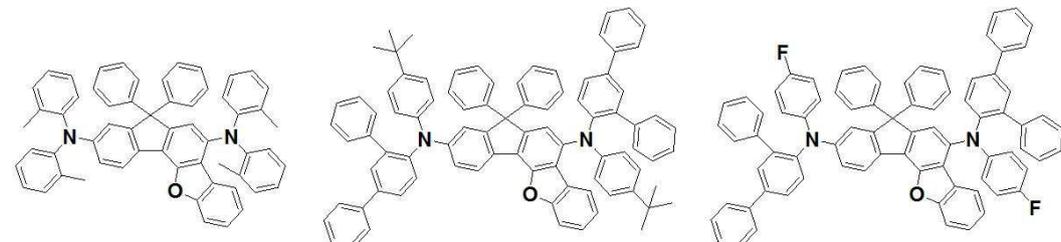
[0219]

[0220] <화학식 124 > <화학식 125 > <화학식 126>



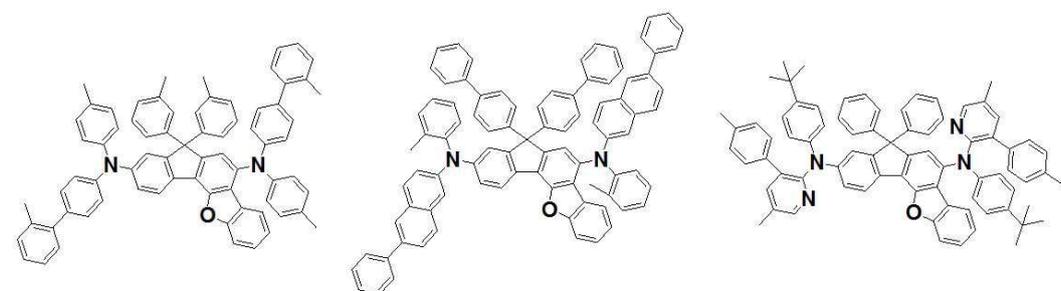
[0221]

[0222] <화학식 127 > <화학식 128 > <화학식 129>



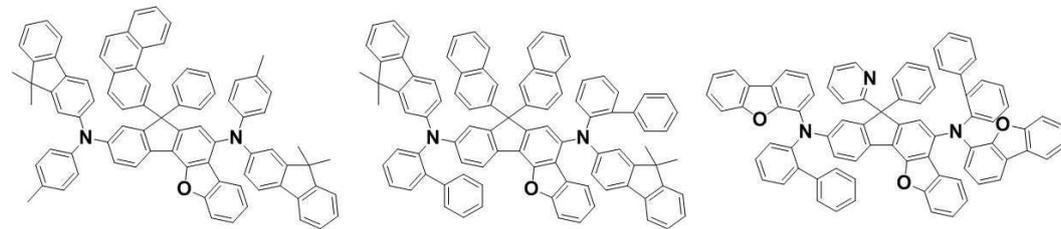
[0223]

[0224] <화학식 130 > <화학식 131 > <화학식 132>



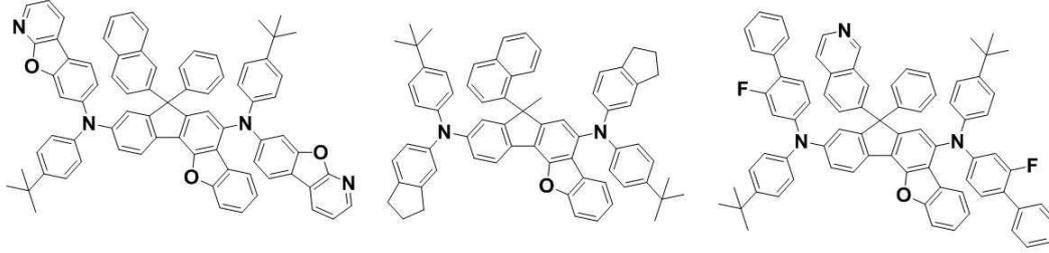
[0225]

[0226] <화학식 133 > <화학식 134 > <화학식 135 >



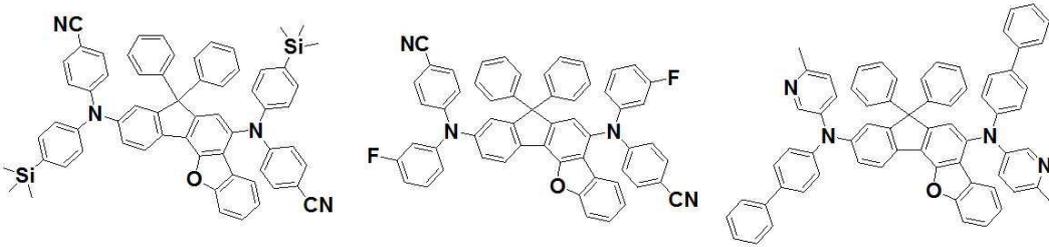
[0227]

[0228] <화학식 136 > <화학식 137 > <화학식 138>



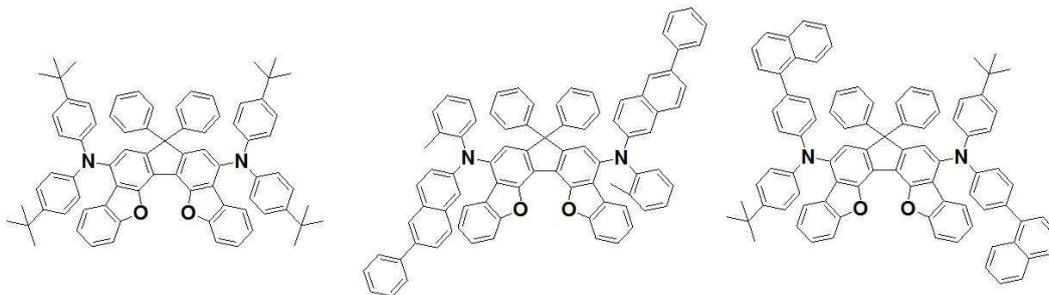
[0229]

[0230] <화학식 139 > <화학식 140 > <화학식 141 >



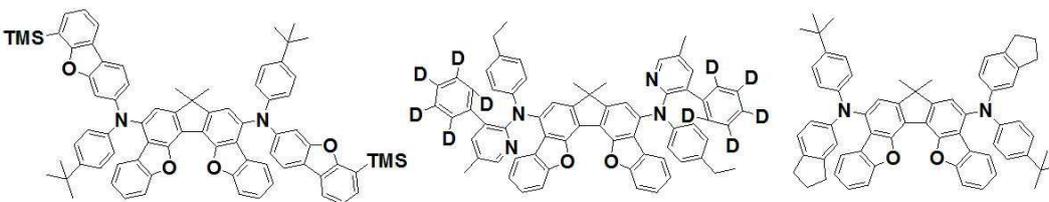
[0231]

[0232] <화학식 142 > <화학식 143 > <화학식 144>



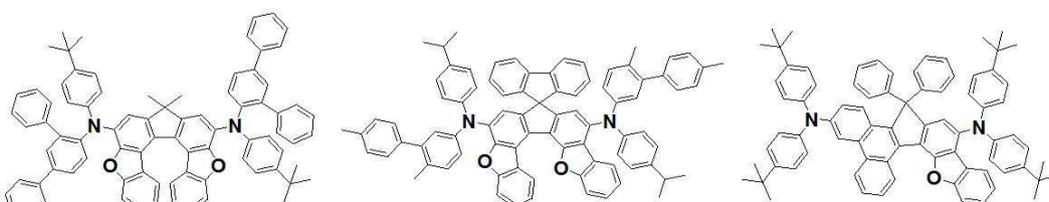
[0233]

[0234] <화학식 145 > <화학식 146 > <화학식 147>



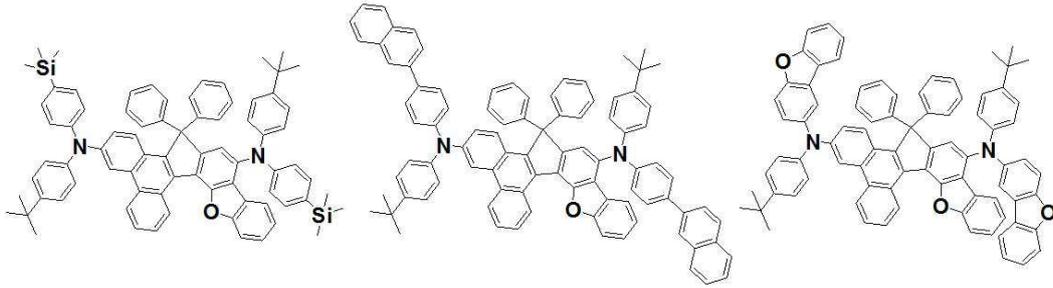
[0235]

[0236] <화학식 148 > <화학식 149 > <화학식 150>



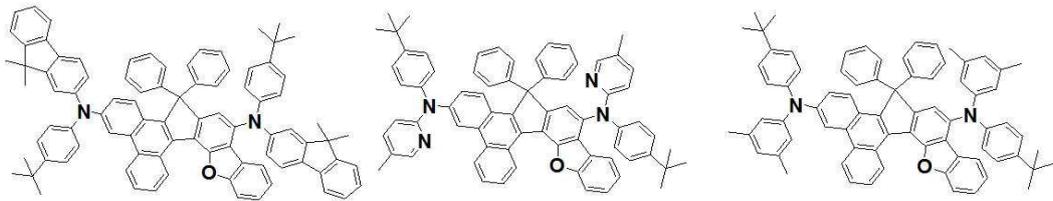
[0237]

[0238] <화학식 151 > <화학식 152 > <화학식 153>



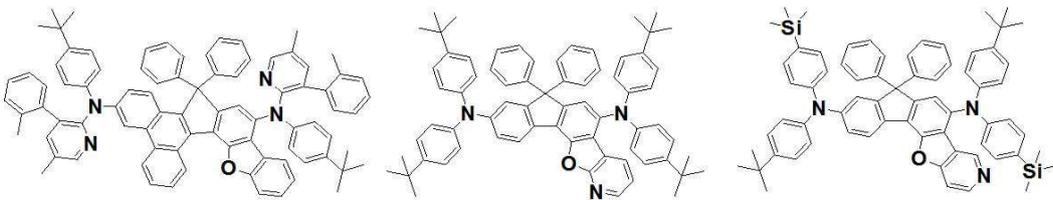
[0239]

[0240] <화학식 154 > <화학식 155 > <화학식 156>



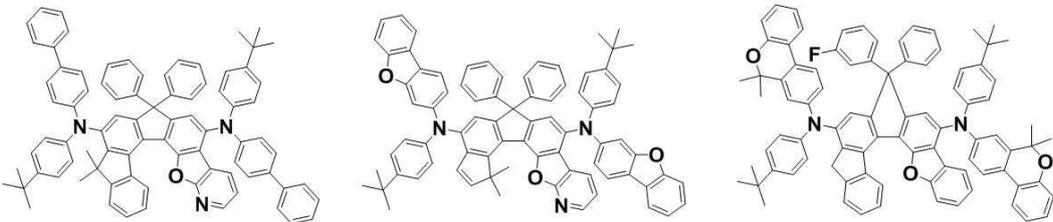
[0241]

[0242] <화학식 157 > <화학식 158 > <화학식 159>



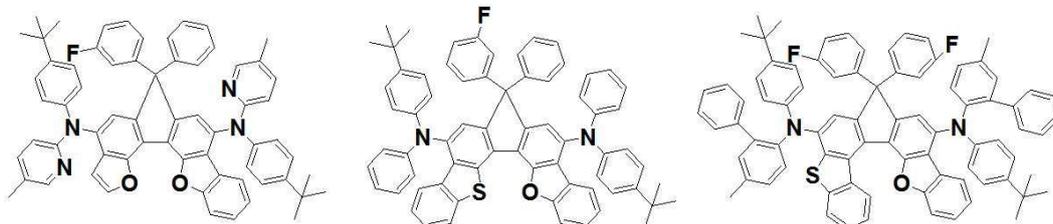
[0243]

[0244] <화학식 160 > <화학식 161 > <화학식 162>



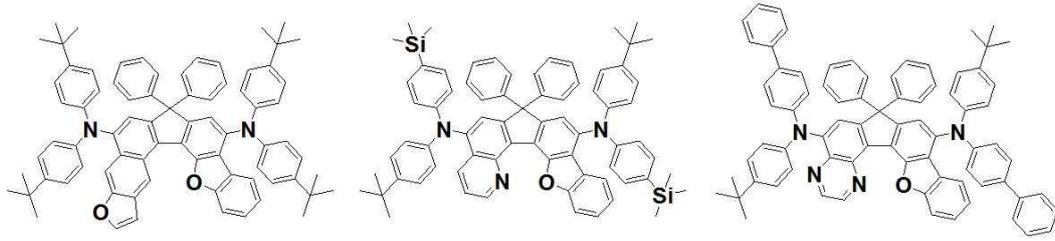
[0245]

[0246] <화학식 163 > <화학식 164 > <화학식 165>



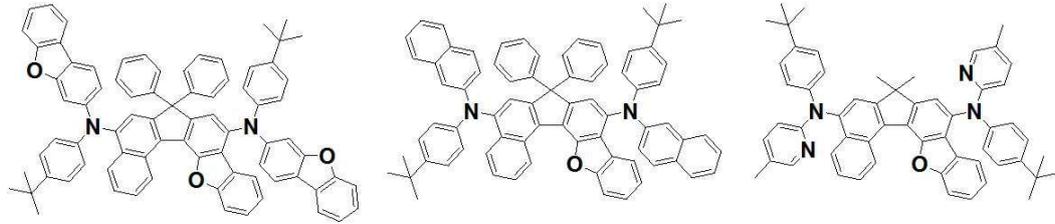
[0247]

[0248] <화학식 166 > <화학식 167 > <화학식 168>



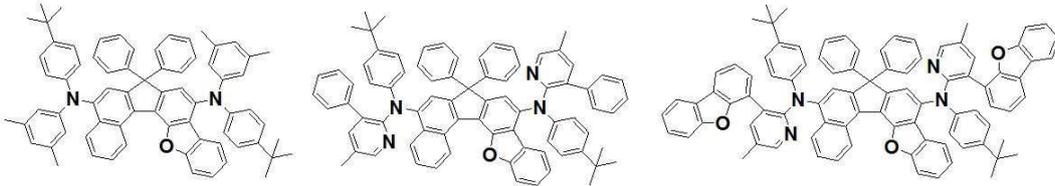
[0249]

[0250] <화학식 169 > <화학식 170 > <화학식 171>



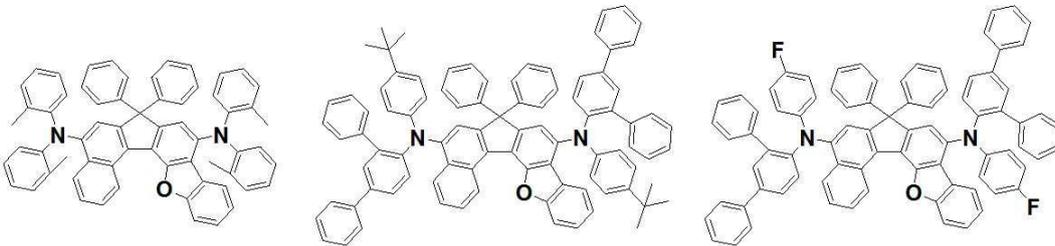
[0251]

[0252] <화학식 172 > <화학식 173 > <화학식 174>



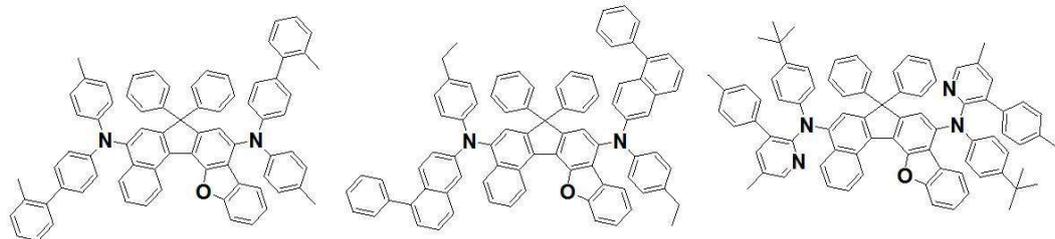
[0253]

[0254] <화학식 175 > <화학식 176 > <화학식 177>



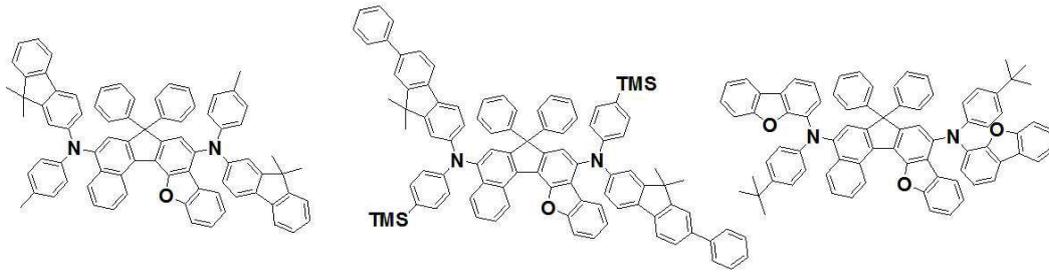
[0255]

[0256] <화학식 178 > <화학식 179 > <화학식 180>



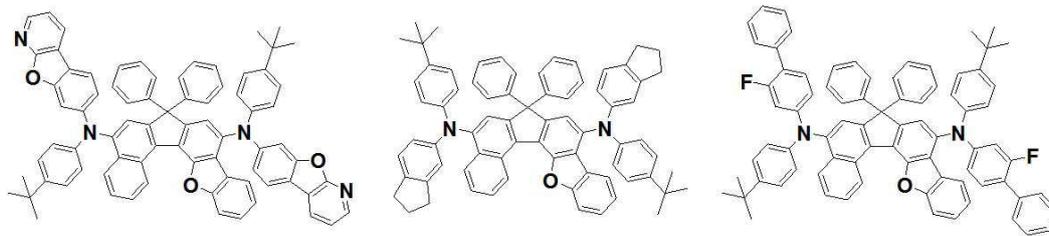
[0257]

[0258] <화학식 181 > <화학식 182 > <화학식 183>



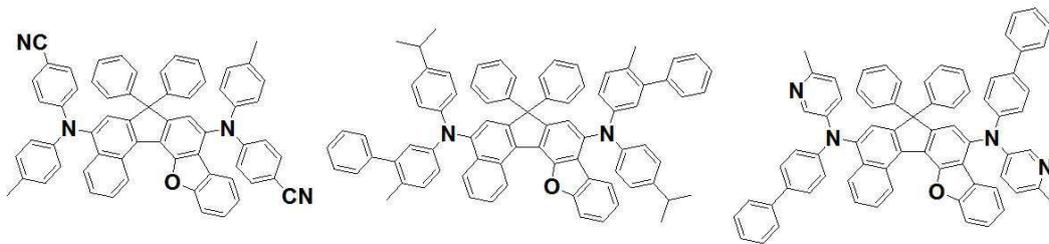
[0259]

[0260] <화학식 184 > <화학식 185 > <화학식 186>



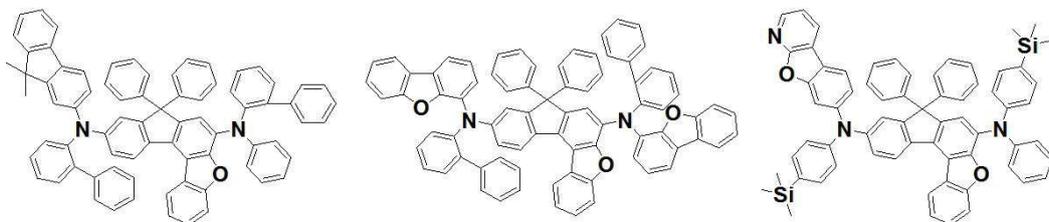
[0261]

[0262] <화학식 187 > <화학식 188 > <화학식 189>



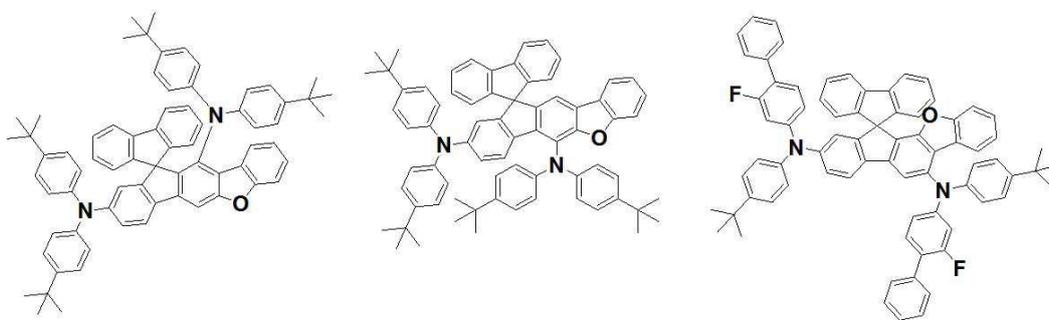
[0263]

[0264] <화학식 190 > <화학식 191 > <화학식 192>



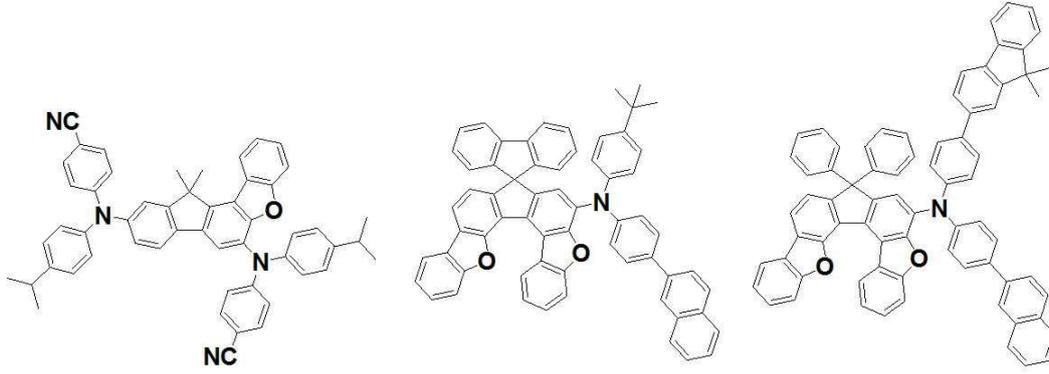
[0265]

[0266] <화학식 193 > <화학식 194 > <화학식 195>



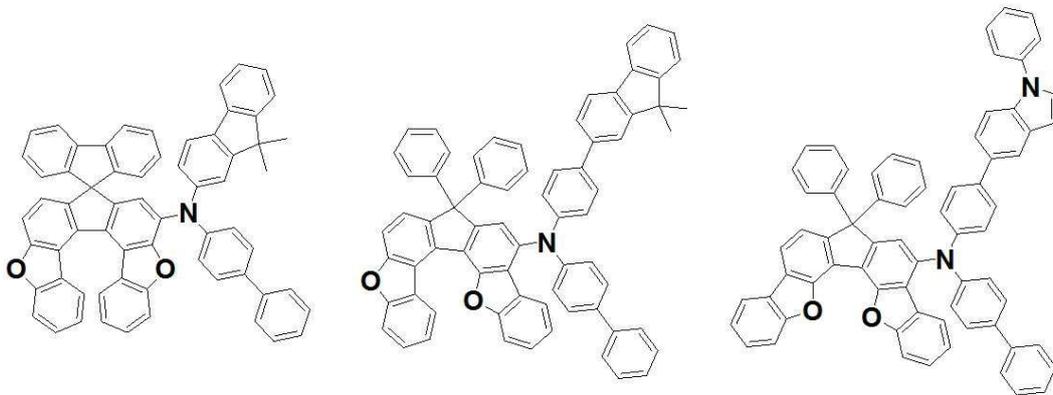
[0267]

[0268] <화학식 196 > <화학식 197 > <화학식 198>



[0269]

[0270] <화학식 199 > <화학식 200 > <화학식 201>



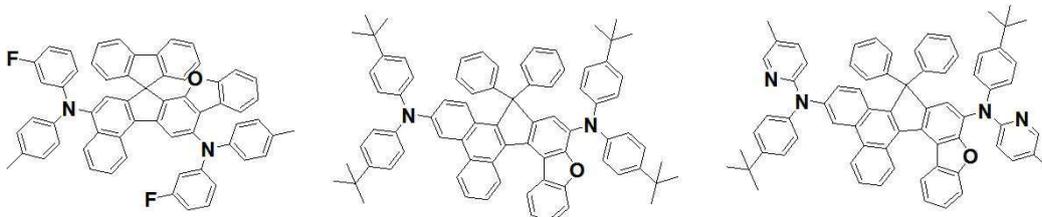
[0271]

[0272] <화학식 202 > <화학식 203 > <화학식 204>



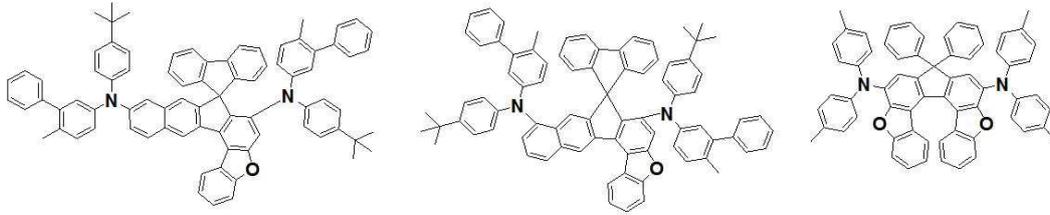
[0273]

[0274] <화학식 205 > <화학식 206 > <화학식 207>



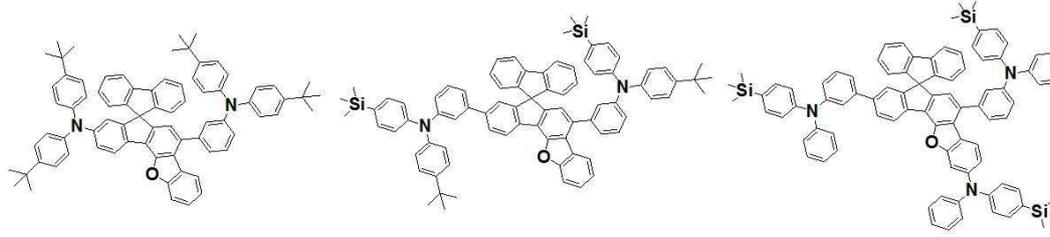
[0275]

[0276] <화학식 208 > <화학식 209 > <화학식 210>



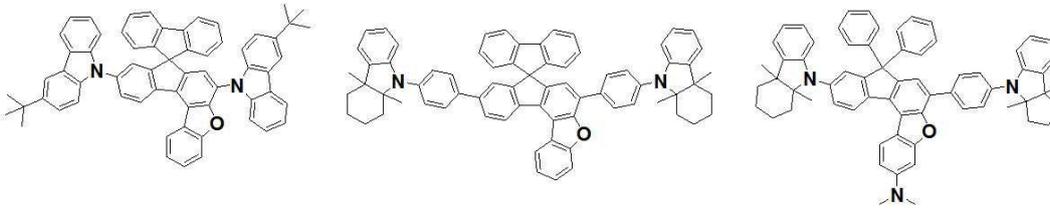
[0277]

[0278] <화학식 211 > <화학식 212 > <화학식 213>



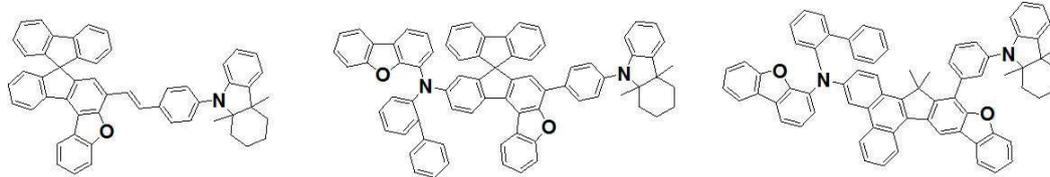
[0279]

[0280] <화학식 214 > <화학식 215 > <화학식 216>



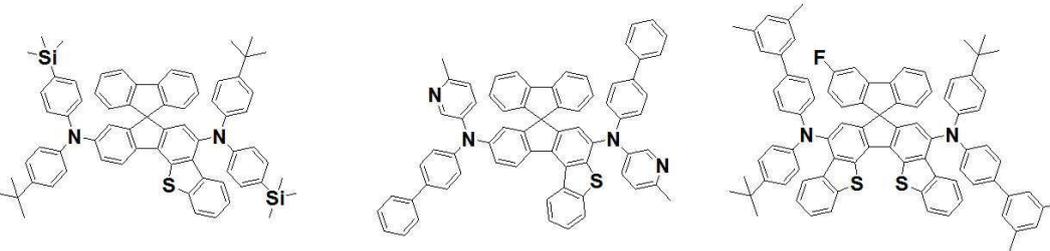
[0281]

[0282] <화학식 217 > <화학식 218 > <화학식 219>



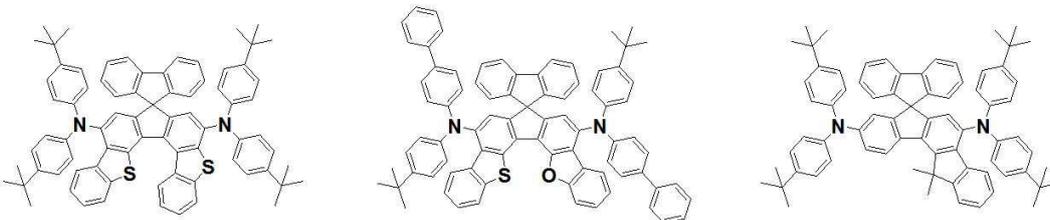
[0283]

[0284] <화학식 220 > <화학식 221 > <화학식 222>



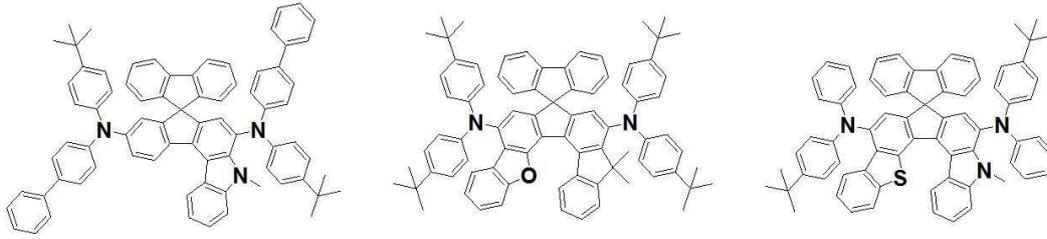
[0285]

[0286] <화학식 223 > <화학식 224 > <화학식 225>



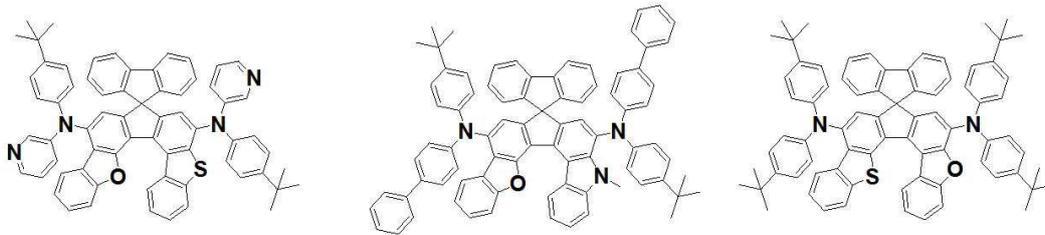
[0287]

[0288] <화학식 226 > <화학식 227 > <화학식 228>



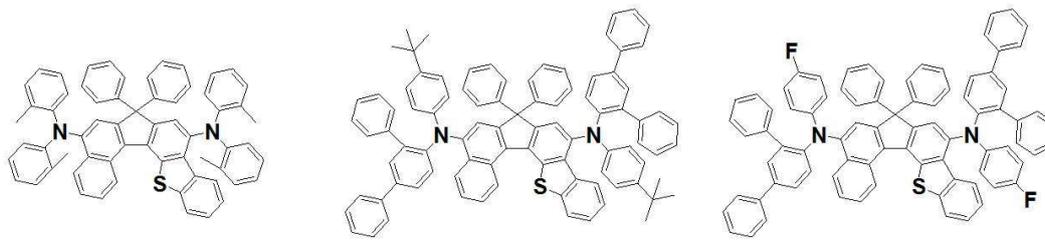
[0289]

[0290] <화학식 229 > <화학식 230 > <화학식 231>



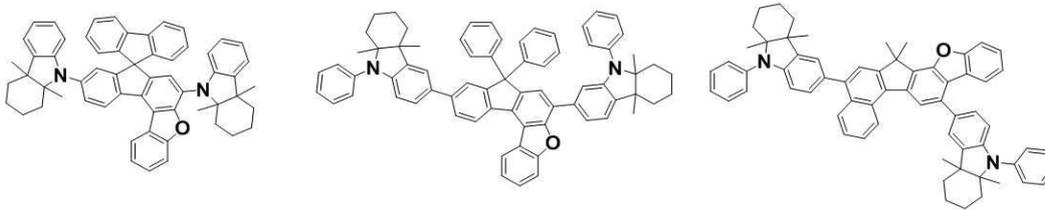
[0291]

[0292] <화학식 232 > <화학식 233 > <화학식 234>



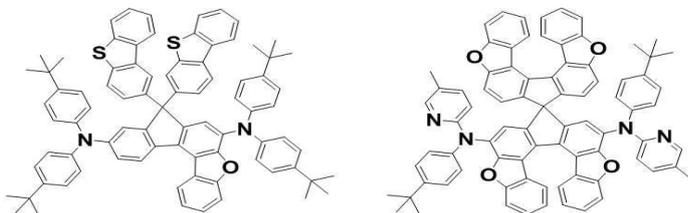
[0293]

[0294] <화학식 235 > <화학식 236 > <화학식 237>



[0295]

[0296] <화학식 238 > <화학식 239>



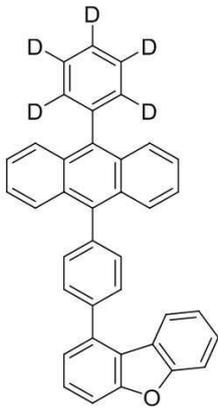
[0297]

[0298] 또한, 본 발명에서 상기 [D]로 표시되는 화합물은하기 [화합물1] 내지 [화합물 138] 중에서 선택되는 어느 하나의 유기 화합물일 수 있다.

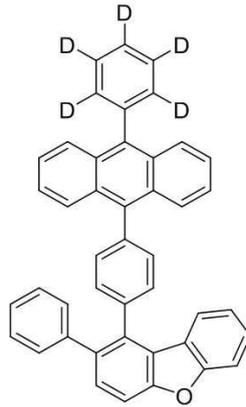
[0299] 여기서 호스트로 사용된 화합물들인 하기 [화합물 1] 내지 [화합물 138] 로 표시되는 화합물들은 상기 그림 1에 서와 같이, 안트라센 고리의 9번 위치에 결합하는 연결기 L이 치환 또는 비치환된 디벤조퓨란의 어느 한쪽 페닐 고리의 1번 또는 2번 위치의 탄소원자와 결합하는 구조를 갖는 것을 특징으로 한다.

[0300]

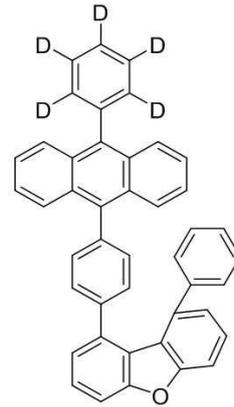
<화합물1>



<화합물2>



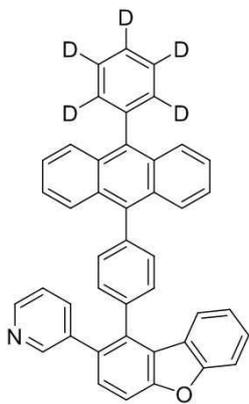
<화합물3>



[0301]

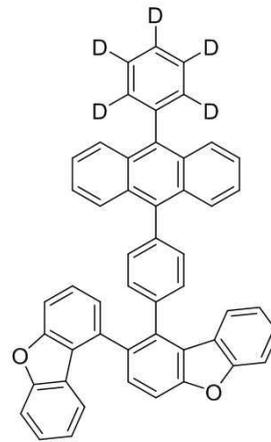
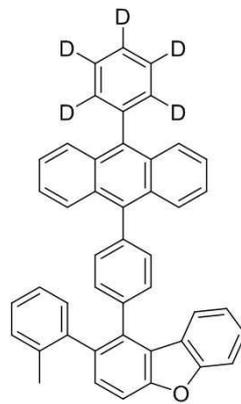
[0302]

<화합물4>



<화합물5>

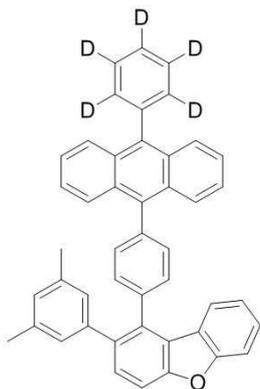
<화합물6>



[0303]

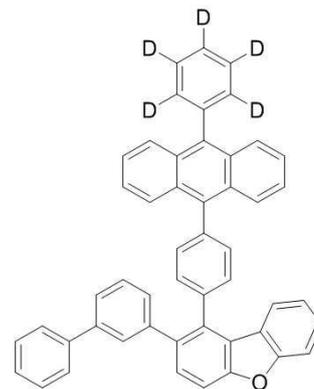
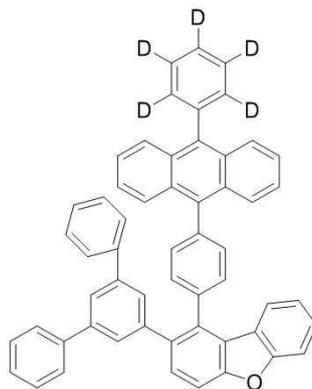
[0304]

<화합물7>



<화합물8>

<화합물9>



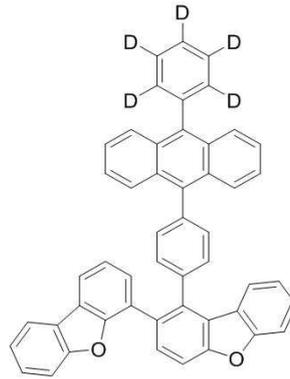
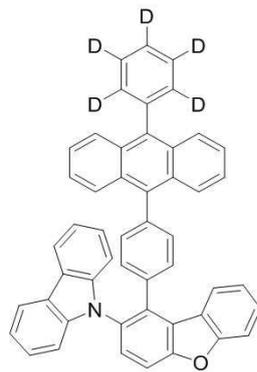
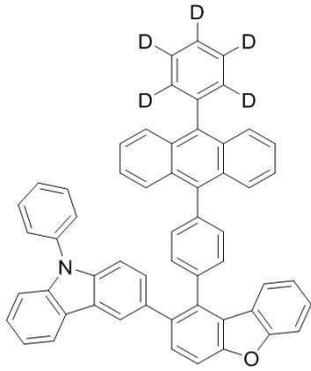
[0305]

[0306]

<화합물10>

<화합물11>

<화합물12>



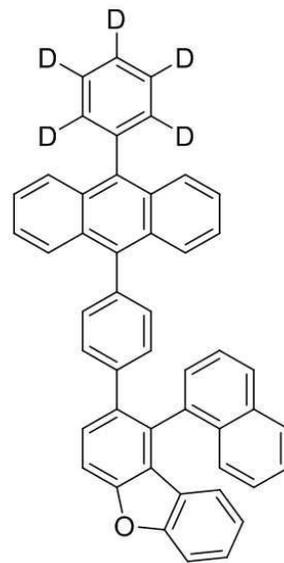
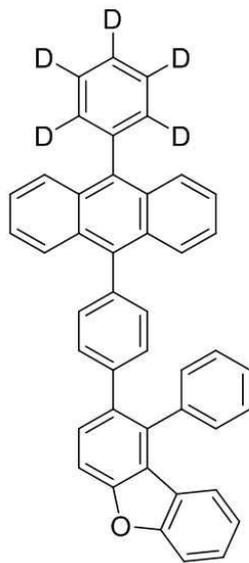
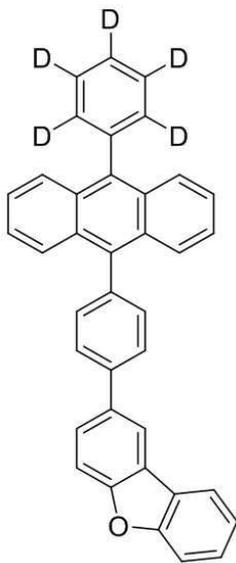
[0307]

[0308]

<화합물 13>

<화합물14>

<화합물15>



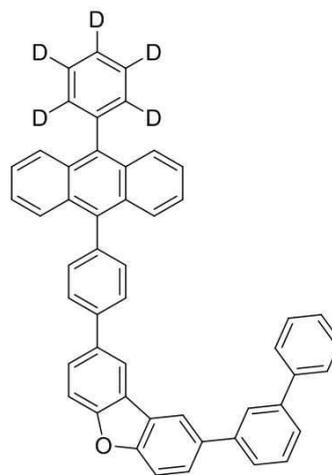
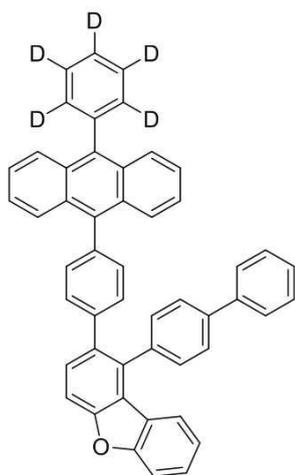
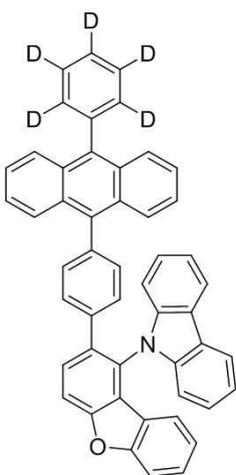
[0309]

[0310]

<화합물16>

<화합물 17>

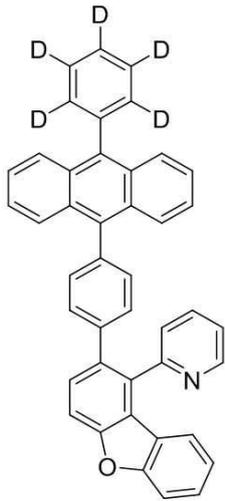
<화합물18>



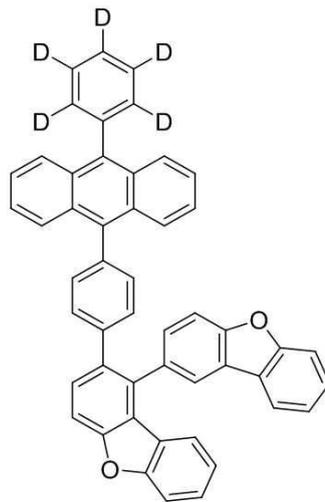
[0311]

[0312]

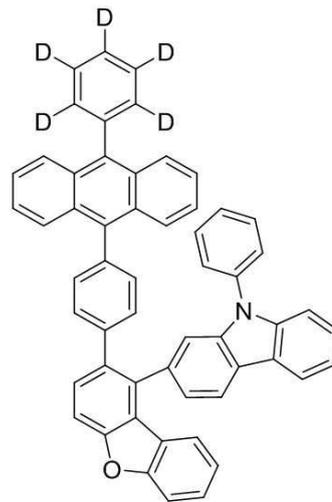
<화합물19>



<화합물20>



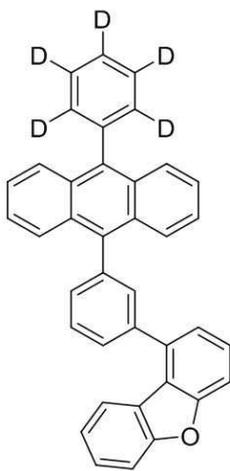
<화합물21>



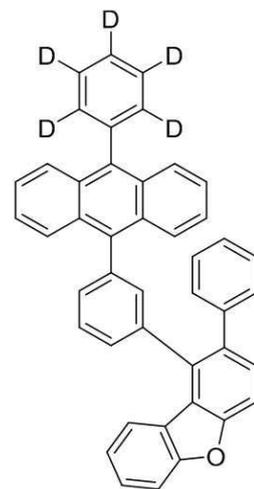
[0313]

[0314]

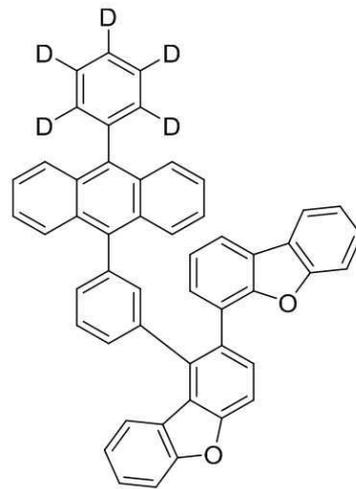
<화합물22>



<화합물23>



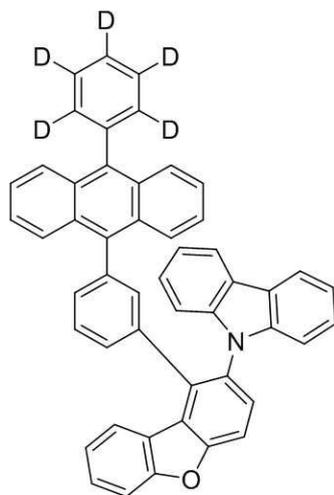
<화합물24>



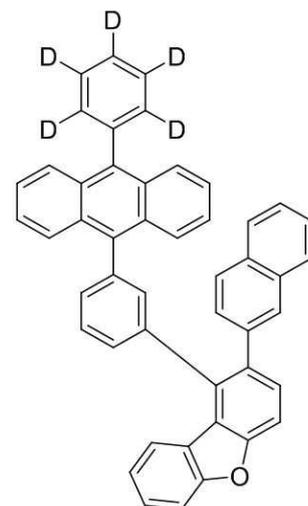
[0315]

[0316]

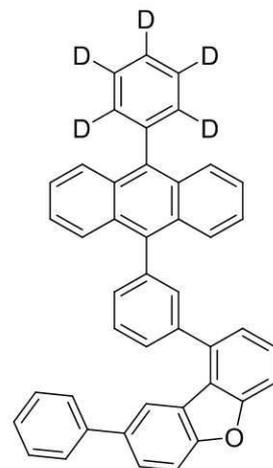
<화합물25>



<화합물26>



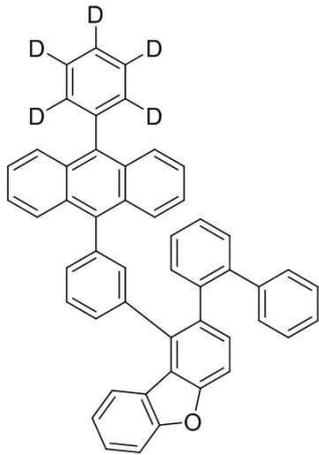
<화합물27>



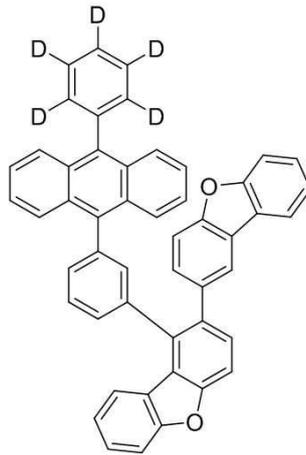
[0317]

[0318]

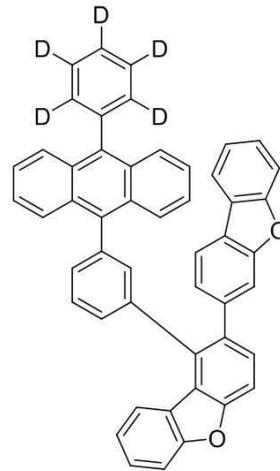
<화합물28>



<화합물29>



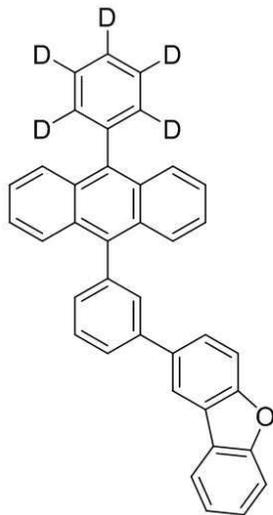
<화합물30>



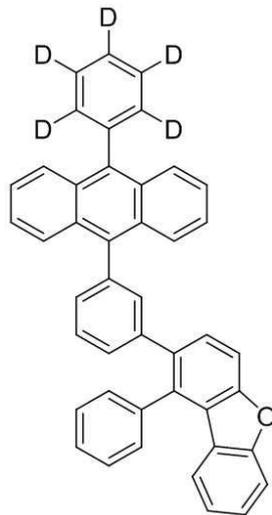
[0319]

[0320]

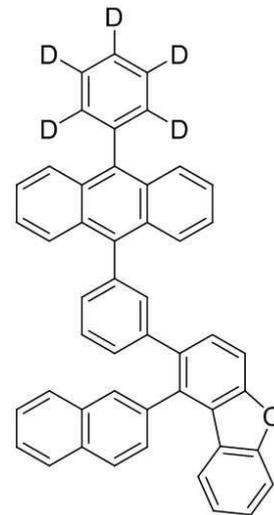
<화합물31>



<화합물32>



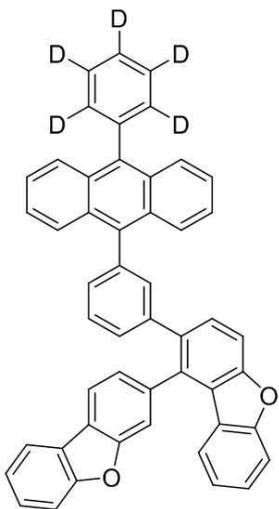
<화합물33>



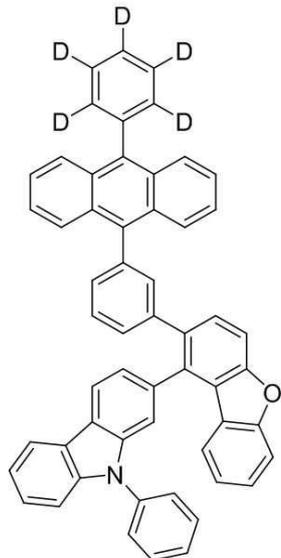
[0321]

[0322]

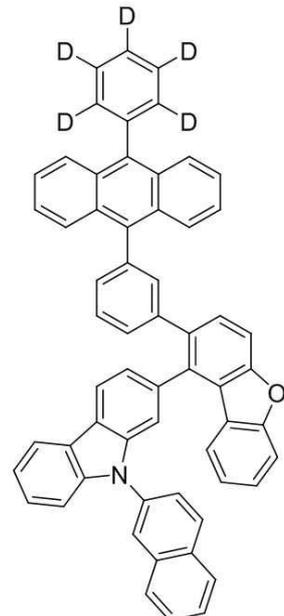
<화합물34>



<화합물35>



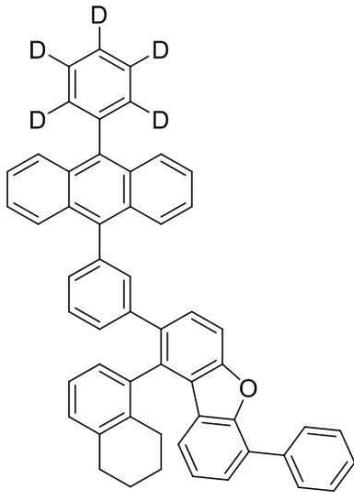
<화합물36>



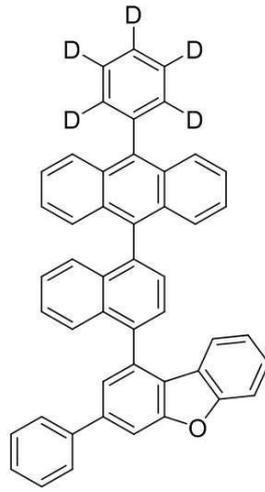
[0323]

[0324]

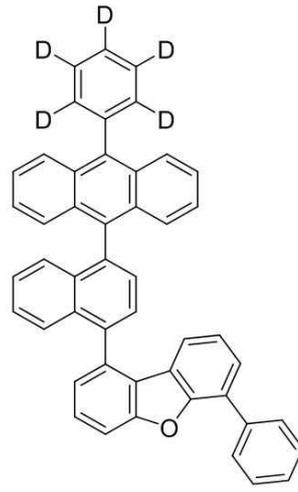
<화합물37>



<화합물38>



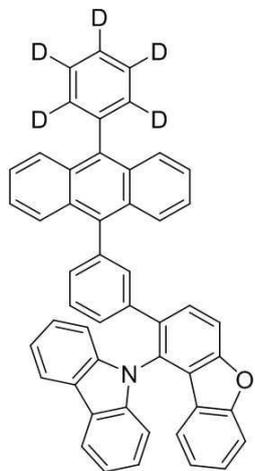
<화합물39>



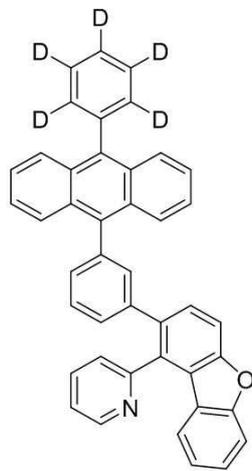
[0325]

[0326]

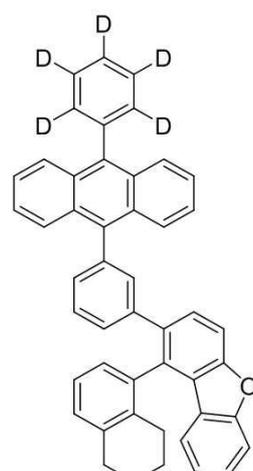
<화합물40>



<화합물 41>



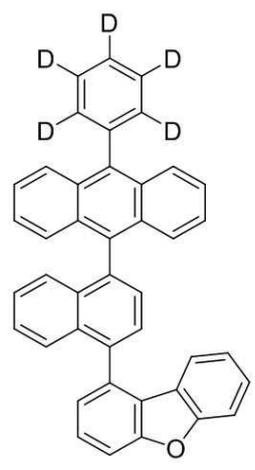
<화합물42>



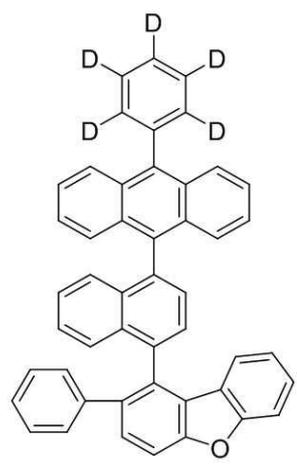
[0327]

[0328]

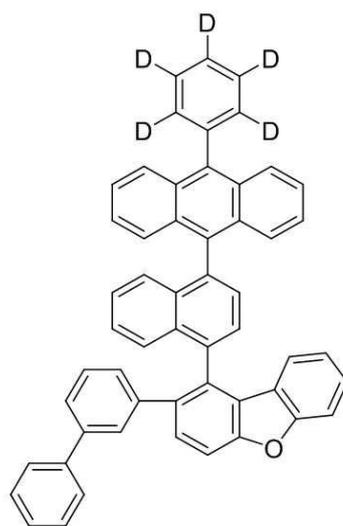
<화합물43>



<화합물 44>



<화합물45>



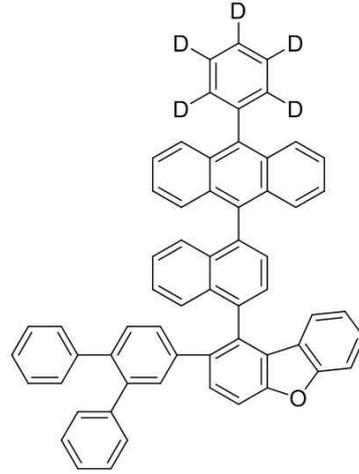
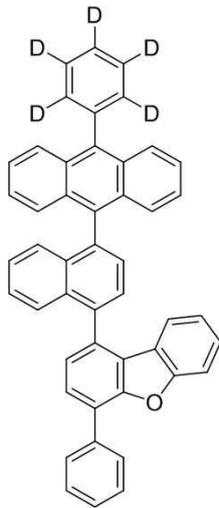
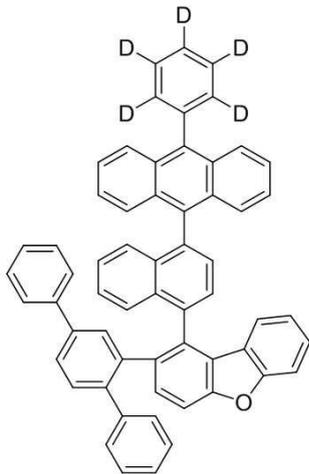
[0329]

[0330]

<화합물46>

<화합물47>

<화합물48>



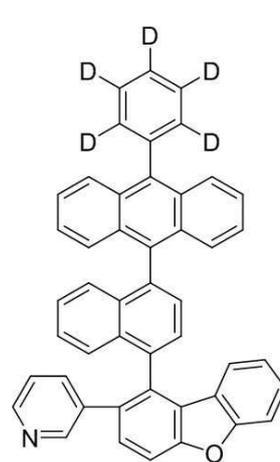
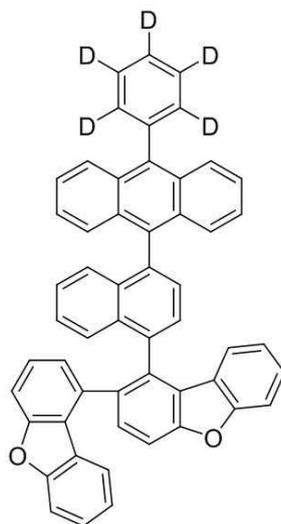
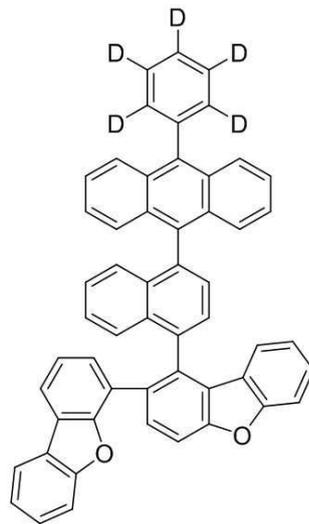
[0331]

[0332]

<화합물49>

<화합물50>

<화합물51>



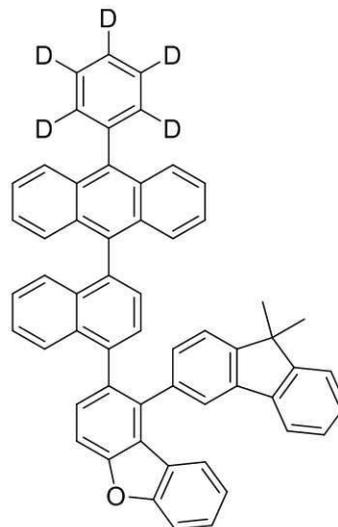
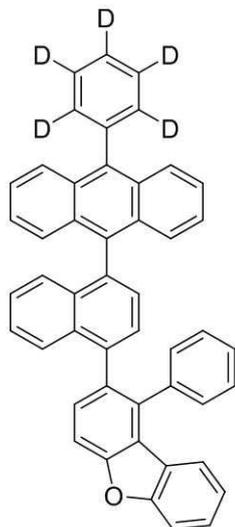
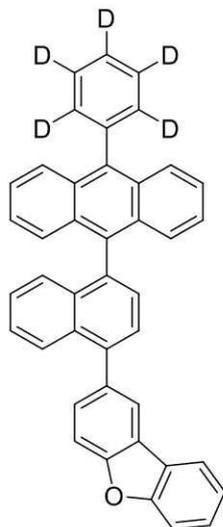
[0333]

[0334]

<화합물52>

<화합물53>

<화합물54>



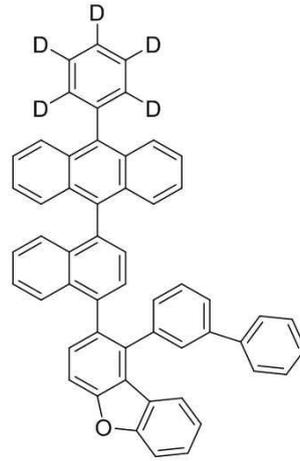
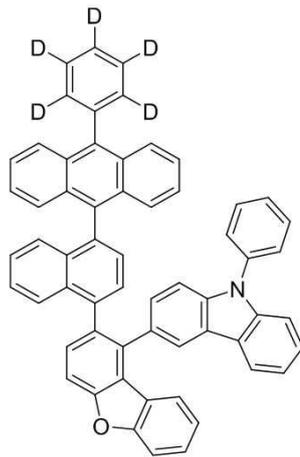
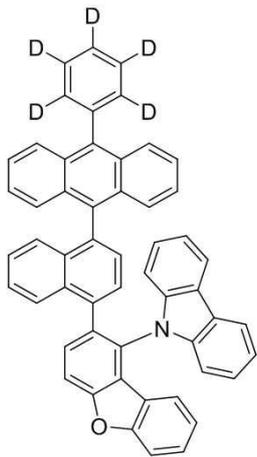
[0335]

[0336]

<화합물55>

<화합물 56>

<화합물57>



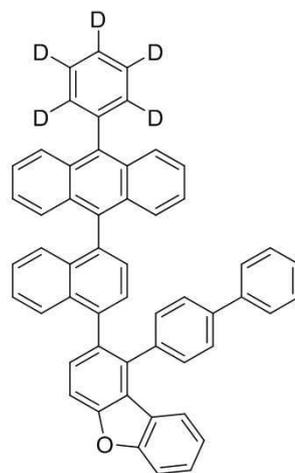
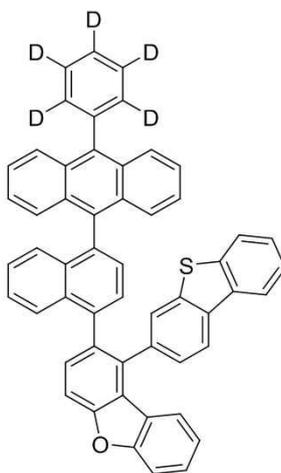
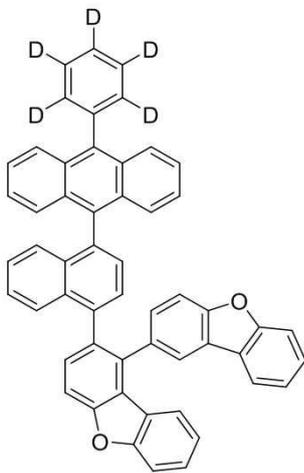
[0337]

[0338]

<화합물58>

<화합물59>

<화합물60>



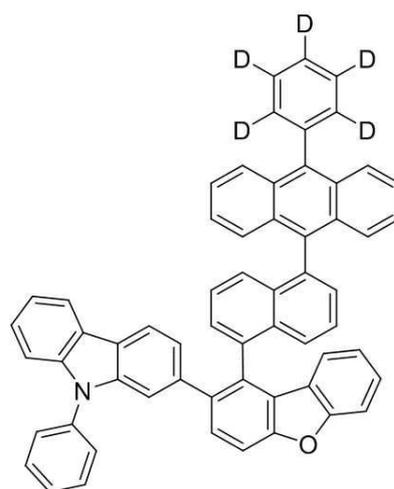
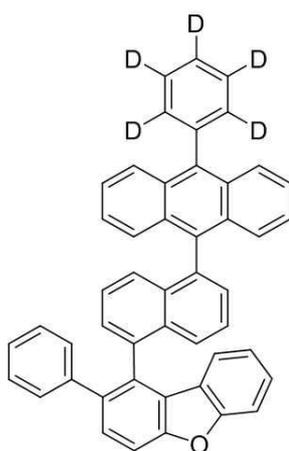
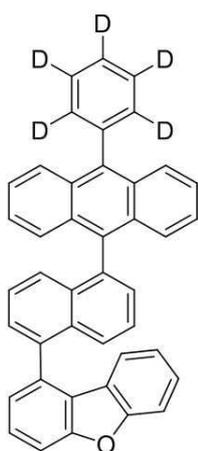
[0339]

[0340]

<화합물 61>

<화합물 62>

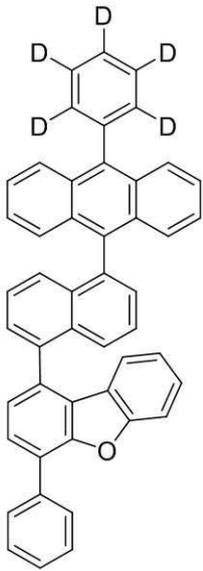
<화합물 63>



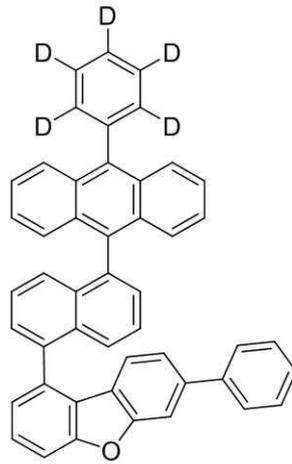
[0341]

[0342]

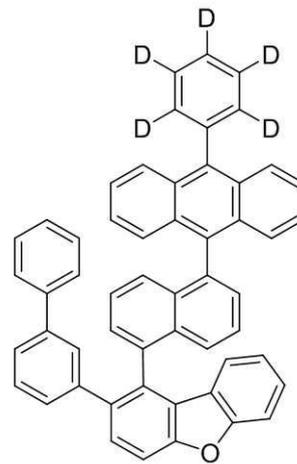
<화합물 64>



<화합물 65>



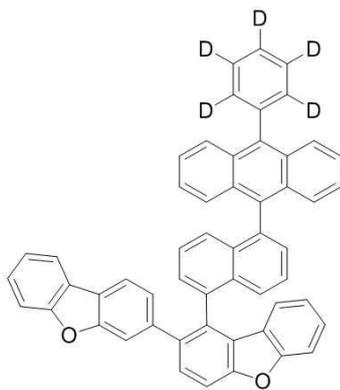
<화합물 66>



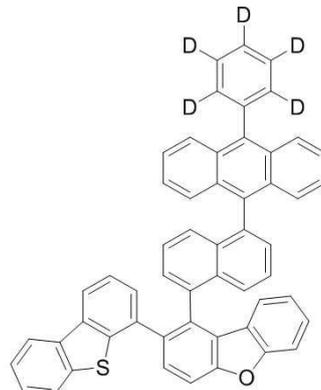
[0343]

[0344]

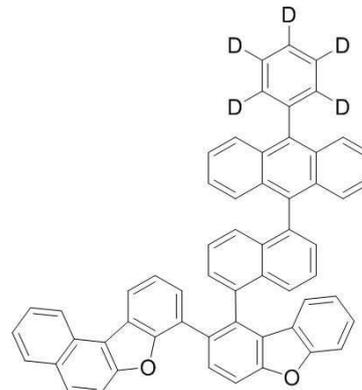
<화합물 67>



<화합물 68>



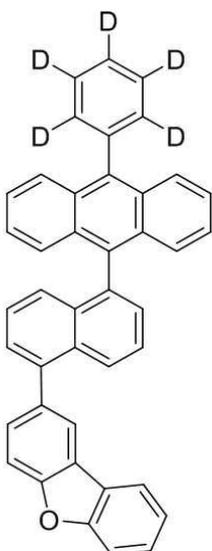
<화합물 69>



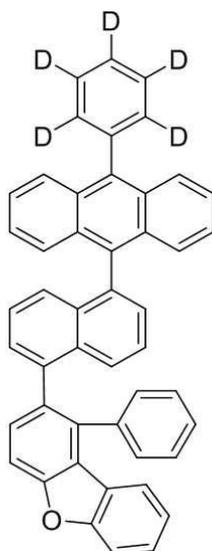
[0345]

[0346]

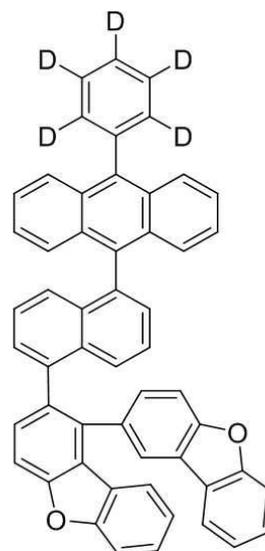
<화합물 70>



<화합물 71>



<화합물 72>



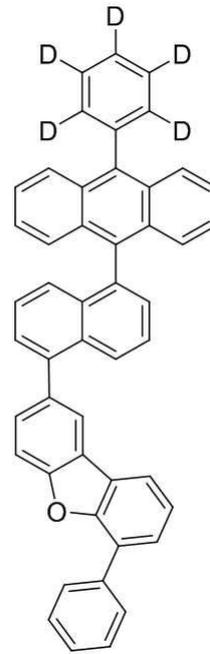
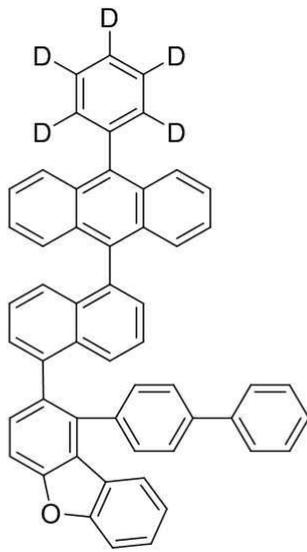
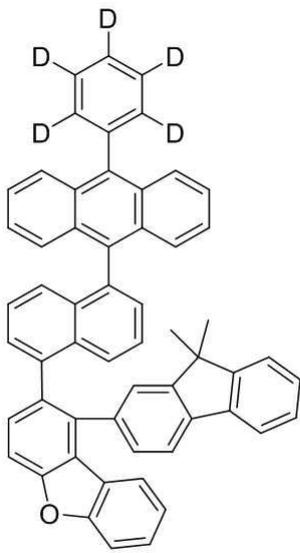
[0347]

[0348]

<화합물 73>

<화합물74>

<화합물75>



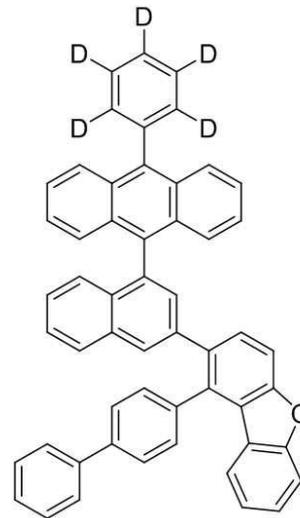
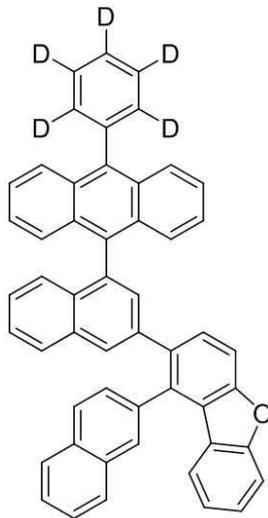
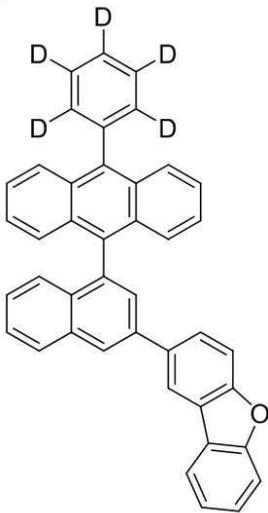
[0349]

[0350]

<화합물76>

<화합물 77>

<화합물 78>



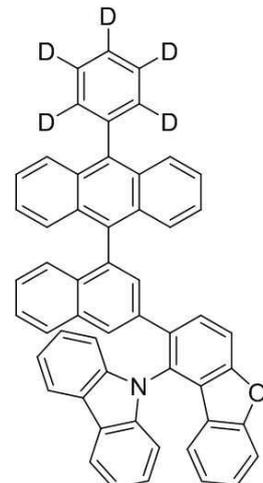
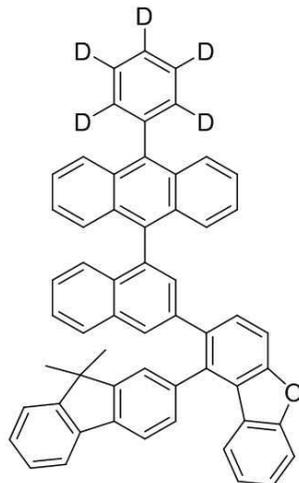
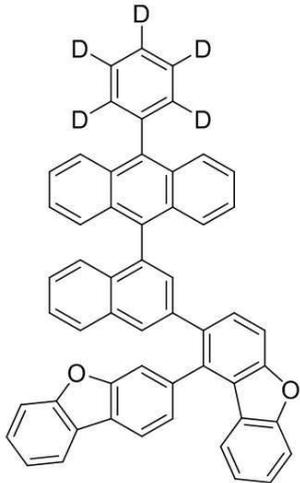
[0351]

[0352]

<화합물79>

<화합물80>

<화합물81>



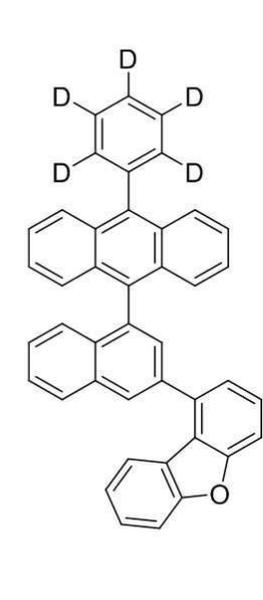
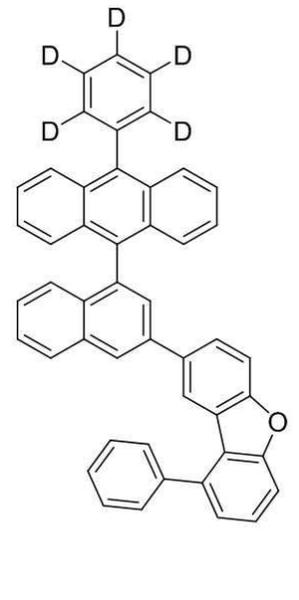
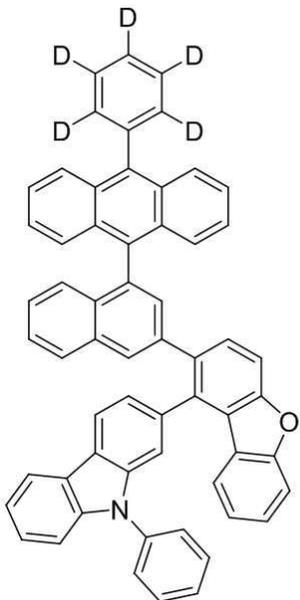
[0353]

[0354]

<화합물82>

<화합물83>

<화합물84>



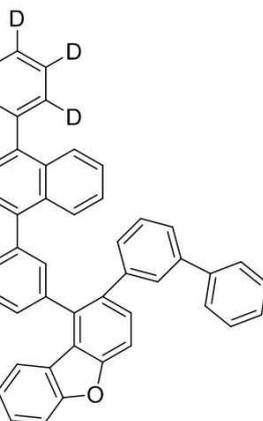
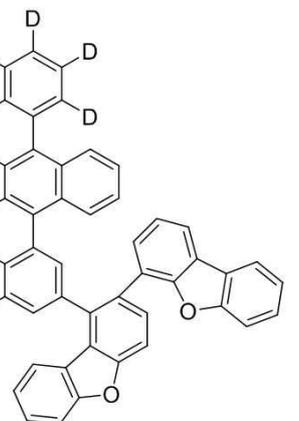
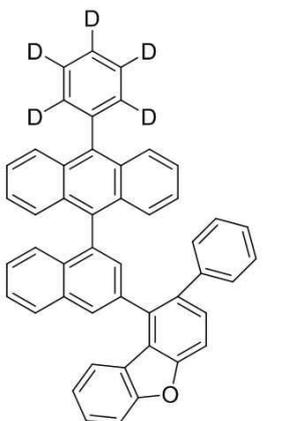
[0355]

[0356]

<화합물85>

<화합물86>

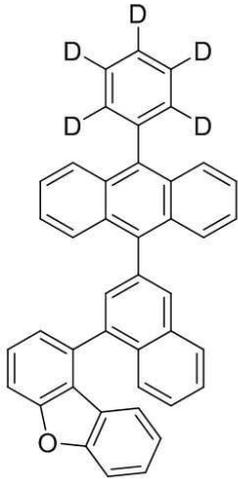
<화합물87>



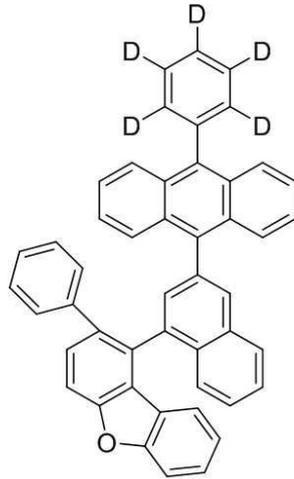
[0357]

[0358]

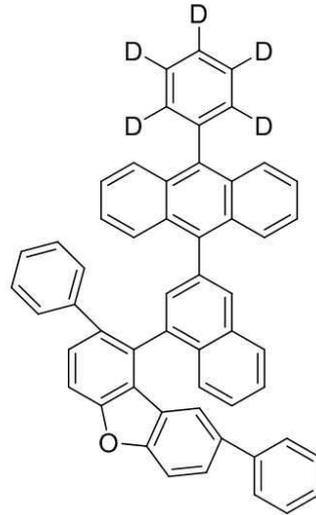
<화합물88>



<화합물89>



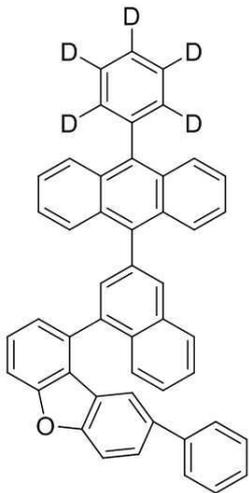
<화합물90>



[0359]

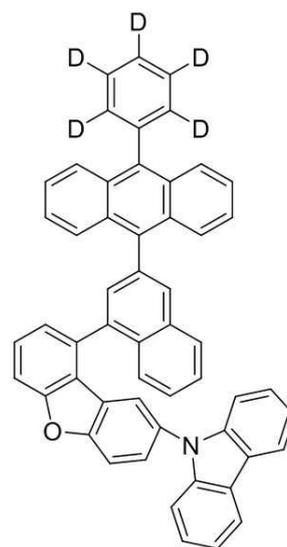
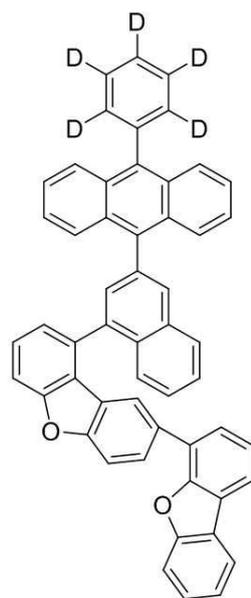
[0360]

<화합물91>



<화합물 92>

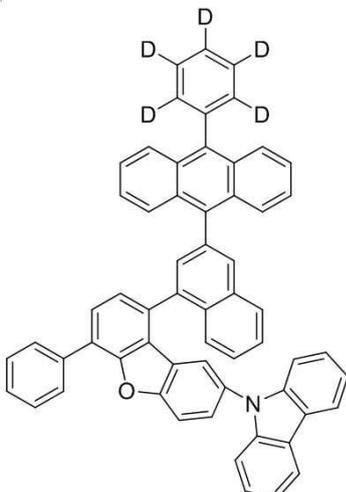
<화합물93>



[0361]

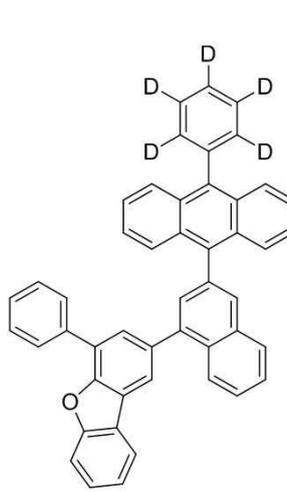
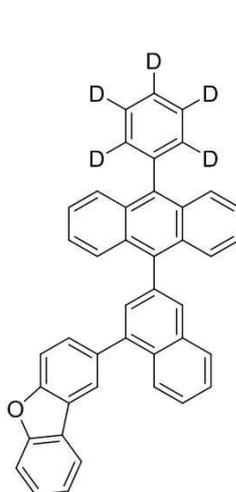
[0362]

<화합물94>



<화합물95>

<화합물96>



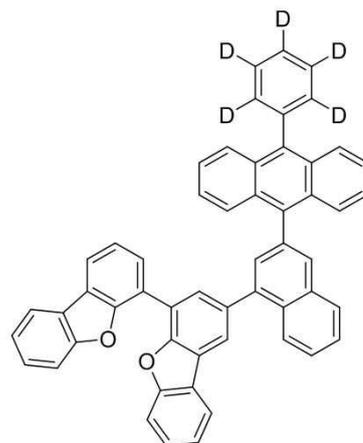
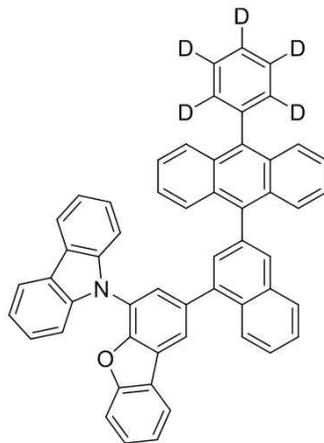
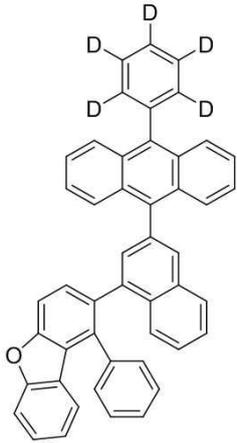
[0363]

[0364]

<화합물97>

<화합물98>

<화합물99>



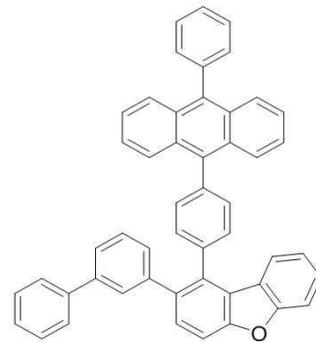
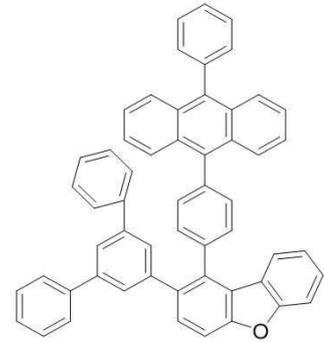
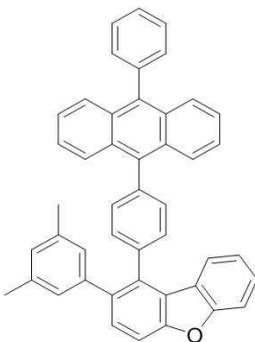
[0365]

[0366]

<화합물 100>

<화합물 101>

<화합물 102>



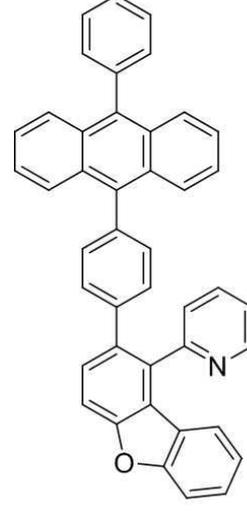
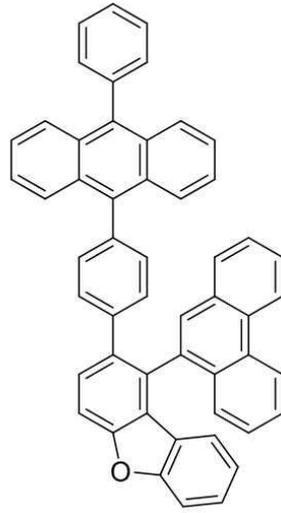
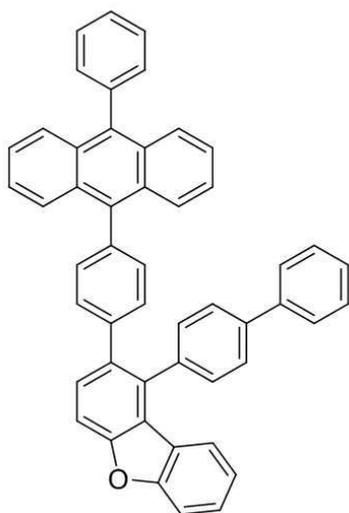
[0367]

[0368]

<화합물 103>

<화합물 104>

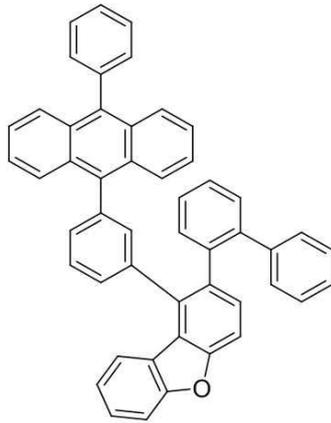
<화합물 105>



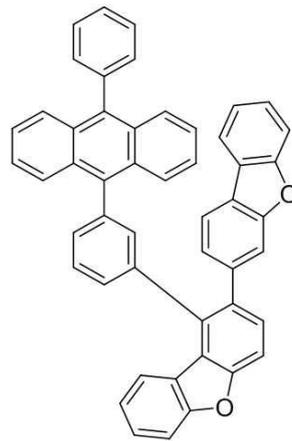
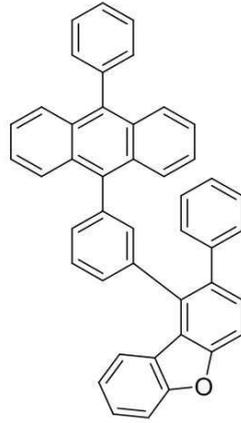
[0369]

[0370]

<화합물 106> <화합물 107>



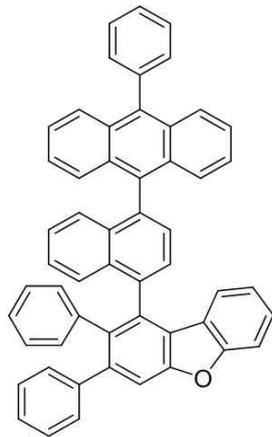
<화합물 108>



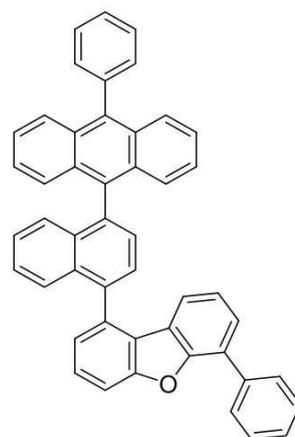
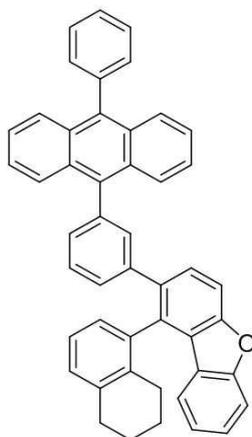
[0371]

[0372]

<화합물 109> <화합물 110>



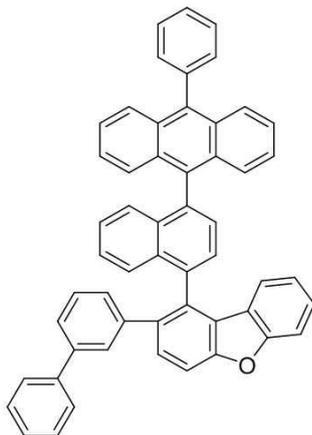
<화합물 111>



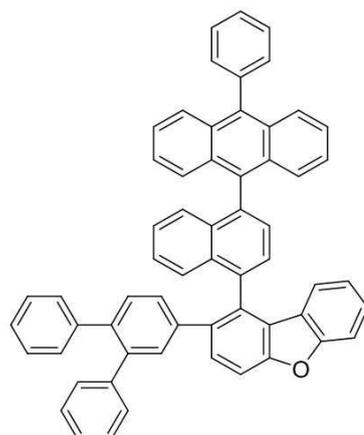
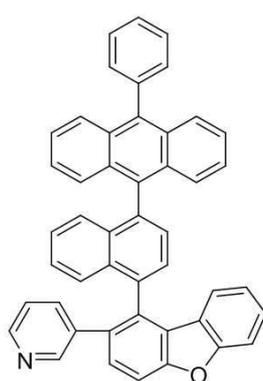
[0373]

[0374]

<화합물 112> <화합물 113>

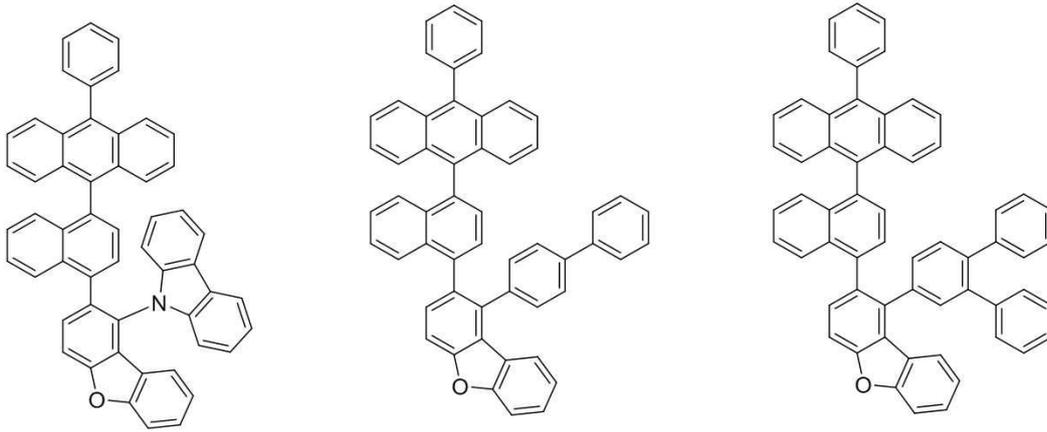


<화합물 114>



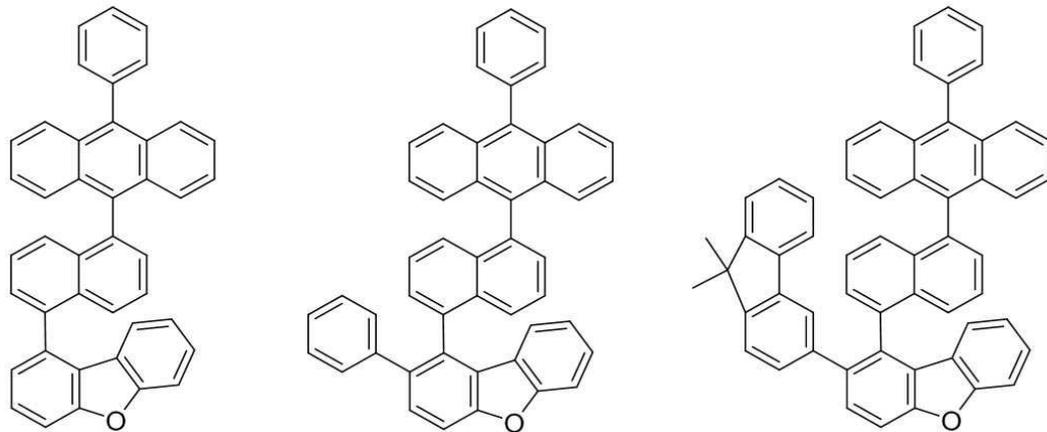
[0375]

[0376] <화합물 115> <화합물 116> <화합물 117>



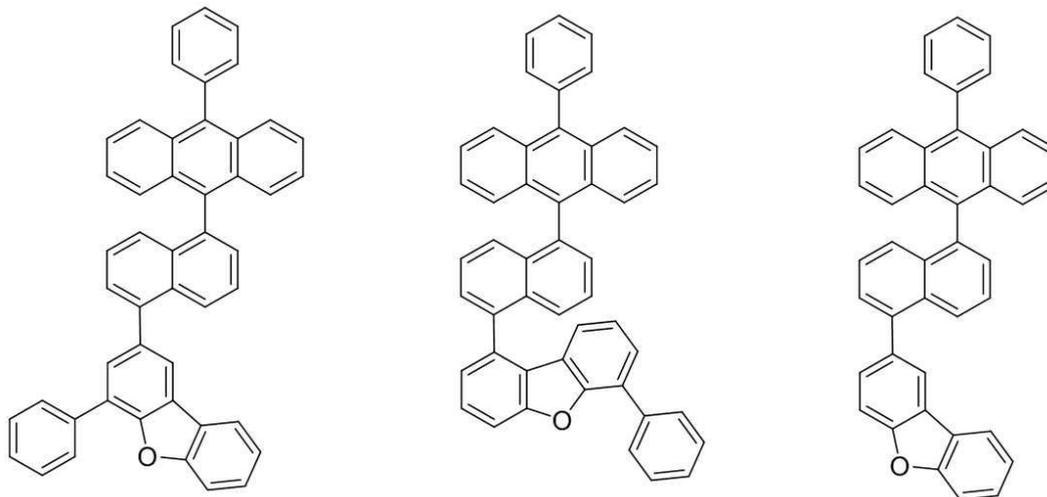
[0377]

[0378] <화합물 118> <화합물 119> <화합물 120>



[0379]

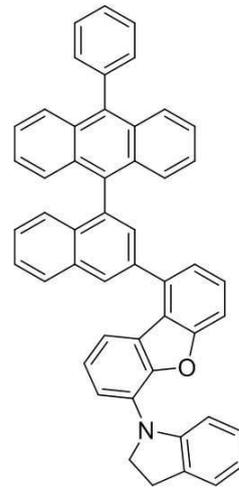
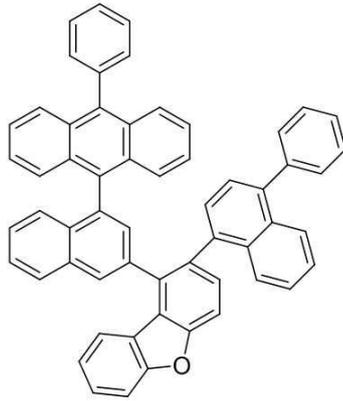
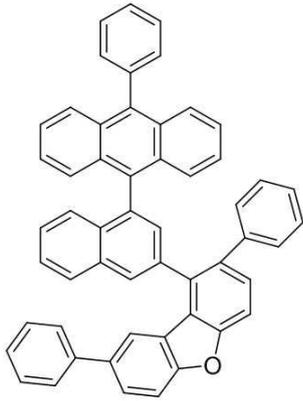
[0380] <화합물 121> <화합물 122> <화합물 123>



[0381]

[0382]

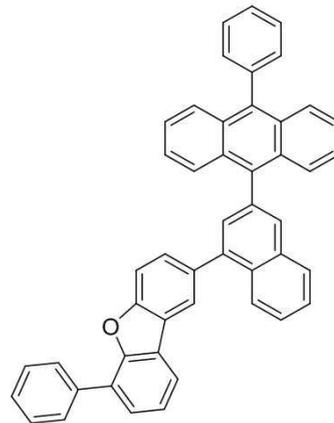
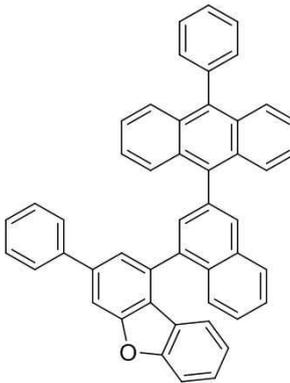
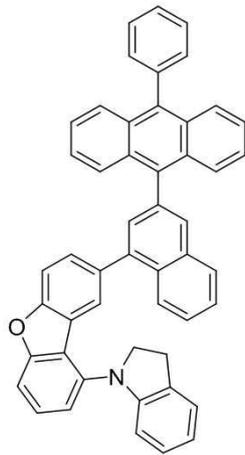
<화합물 124> <화합물 125> <화합물 126>



[0383]

[0384]

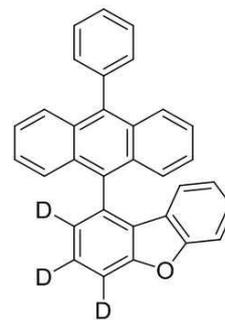
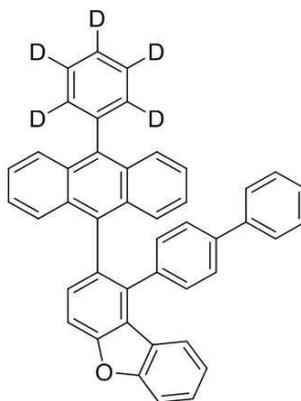
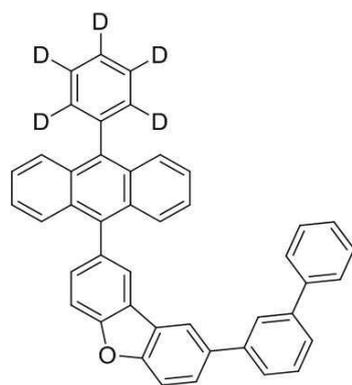
<화합물 127> <화합물 128> <화합물 129>



[0385]

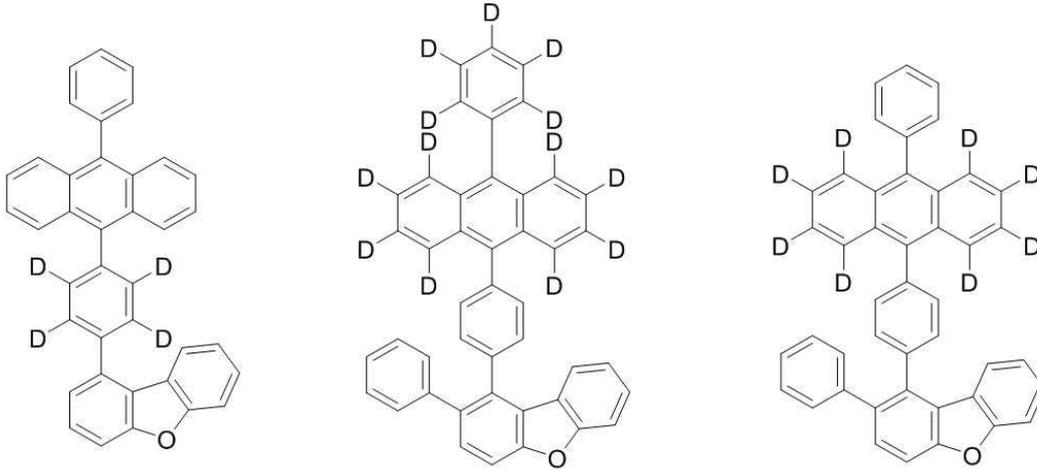
[0386]

<화합물 130> <화합물 131> <화합물 132>



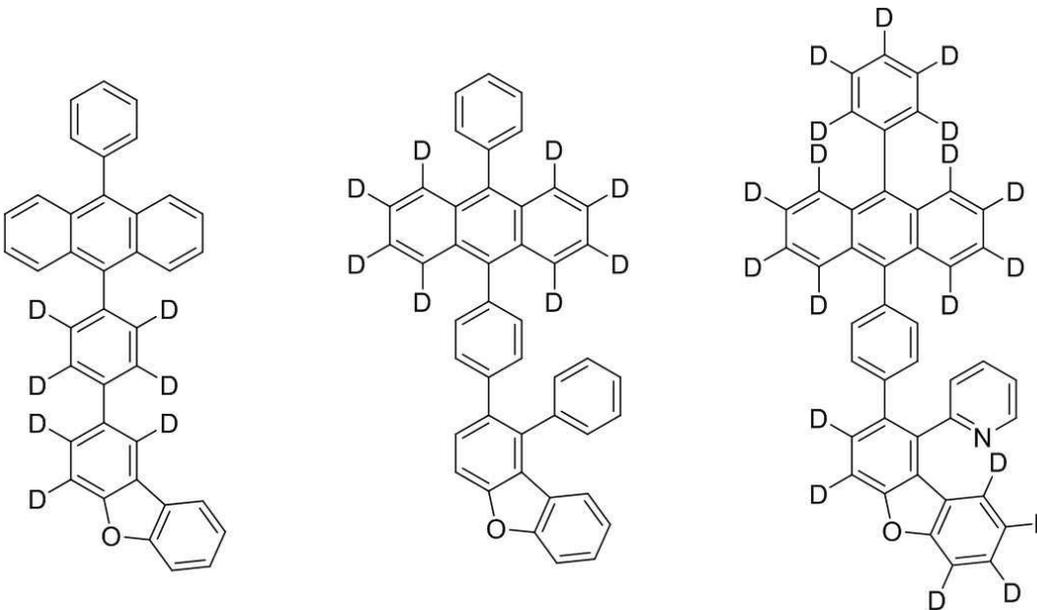
[0387]

[0388] <화합물 133> <화합물 134> <화합물 135>



[0389]

[0390] <화합물 136> <화합물 137> <화합물 138>



[0391]

[0392] 보다 바람직한 본 발명의 일 실시예로서, 본 발명은 제1전극; 상기 제1전극에 대향된 제2전극; 및 상기 제1전극과 상기 제2전극 사이에 개재되는 유기층;을 포함하고, 본 발명에서의 상기 [화학식 A] 또는 [화학식 B]로 표시되는 아민 화합물 중 적어도 하나를 발광층내 도판트로서 포함하며, 또한 [화학식 D]로 표시되는 화합물 중 적어도 하나를 발광층내 호스트로서 포함할 수 있다.

[0393] 이때, 본 발명에서 "(유기층이) 유기 화합물을 1종 이상 포함한다"란, "(유기층이) 본 발명의 범주에 속하는 1종의 유기 화합물 또는 상기 유기 화합물의 범주에 속하는 서로 다른 2종 이상의 화합물을 포함할 수 있다"로 해석될 수 있다.

[0394] 이때, 상기 발광층내 도판트의 함량은 통상적으로 호스트 약 100 중량부를 기준으로 하여 약 0.01 내지 약 20 중량부의 범위에서 선택될 수 있으며, 이에 한정되는 것은 아니다.

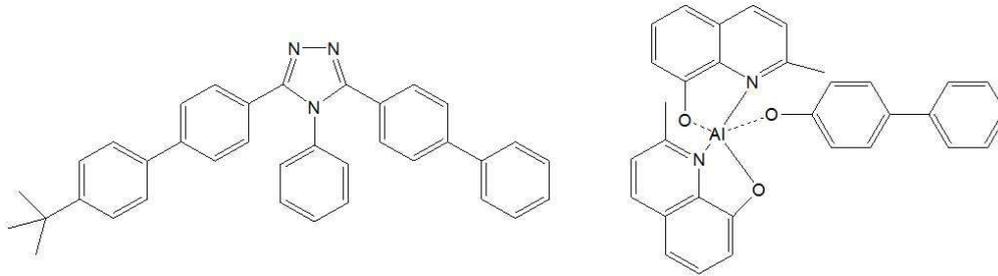
[0395] 또한 상기 발광층은 상기 도판트와 호스트 이외에도 다양한 호스트와 다양한 도판트 물질을 추가로 포함할 수 있다.

[0396] 상기 호스트와 도판트를 포함하는 발광층에 본 발명에서의 상기 [화학식 A] 또는 [화학식 B]로 표시되는 아민 화합물의 치환기의 적절한 선택과 사용되는 호스트 화합물로서 [화학식 D]로 표시되는 화합물의 적절한 선택을 통해장수명및 저전압으로 구동되는 소자를 구현할 수 있고, 또한상기 발광층에서 발광되는 빛의 색좌표의 CIEy 값을 조절할 수 있다.

[0397] 한편, 본 발명에서의 유기발광소자는 양극과 음극사이에 적어도 두 개 이상의 발광층을 가지며, 상기 발광층이 인광재료를 포함하는 발광층을 적어도 하나 이상 포함하며, 또한, 상기 화학식 A 또는 화학식 B로 표시되는 화합물을 도판트로서 사용하고 화학식 D로 표시되는 화합물을 호스트로서 포함하는 발광층;을 적어도 하나 이상 포함할 수 있다.

[0398] 또한, 상기 본 발명의 유기발광소자는 발광층 이외에 정공 주입층, 정공 수송층, 정공 주입 기능 및 정공 수송 기능을 동시에 갖는 기능층, 발광층, 전자 수송층, 및 전자 주입층 중 적어도 하나의 층을 추가적으로 포함할 수 있다.

[0399] 한편 본 발명에서 상기 전자수송층 재료로는 전자주입전극(Cathode)로 부터 주입된 전자를 안정하게 수송하는 기능을 하는것으로서 공지의 전자수송물질을 이용할 수 있다. 공지의 전자수송물질의 예로는, 퀴놀린유도체, 트 히트리스(8-퀴놀리노레이트)알루미늄(Alq3), TAZ, Balq, 베릴륨비스(벤조퀴놀리-10-노에이트)(beryllium bis(benzoquinolin-10-olate: Bebq2), ADN, 화합물 201, 화합물 202, BCP, 옥사디아졸유도체인 PBD, BMD, BND 등과 같은 재료를 사용할 수도 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

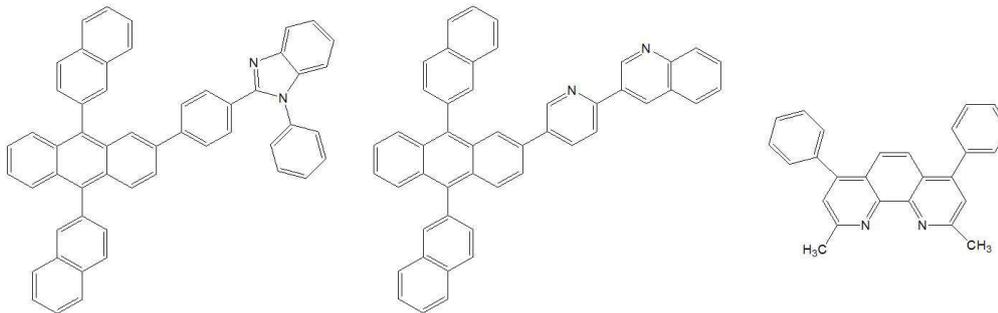


[0400]

[0401]

TAZ

BAlq



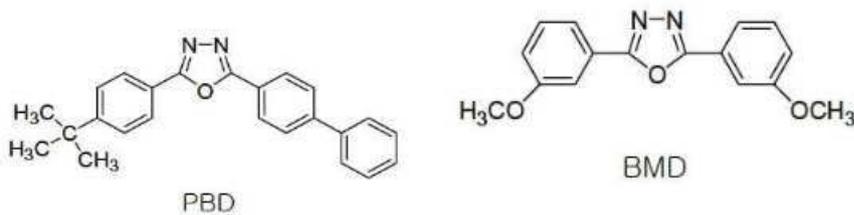
[0402]

[0403]

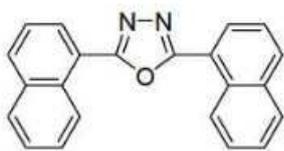
<화합물 201>

<화합물 202>

< BCP >



[0404]



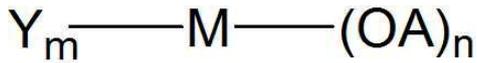
BND

[0405]

[0406]

또한, 본 발명에서 사용되는 전자 수송층은 화학식 F로 표시되는 유기 금속 화합물이 단독 또는 상기 전자수송층 재료와 혼합으로 사용될 수 있다.

[0407] [화학식 F]



[0408]

[0409] 상기 [화학식 F]에서,

[0410] Y는 C, N, O 및 S에서 선택되는 어느 하나가 상기 M에 직접 결합되어 단일결합을 이루는 부분과, C, N, O 및 S에서 선택되는 어느 하나가 상기 M에 배위결합을 이루는 부분을 포함하며, 상기 단일결합과 배위결합에 의해 길레이트된 리간드이고

[0411] 상기 M은 알칼리 금속, 알칼리 토금속, 알루미늄(Al) 또는 붕소(B)원자이고, 상기 OA는 상기 M과 단일결합 또는 배위결합 가능한 1가의 리간드로서,

[0412] 상기 O는 산소이며,

[0413] A는 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 50의 아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 30의 알케닐기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 20의 알키닐기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 30의 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 5 내지 30의 시클로알케닐기 및 치환 또는 비치환되고 이종 원자로 O, N, S 및 Si에서 선택되는 어느 하나 이상을 갖는 탄소수 2 내지 50의 헤테로아릴기 중에서 선택되는 어느 하나이고,

[0414] 상기 M이 알칼리 금속에서 선택되는 하나의 금속인 경우에는 m=1, n=0이고,

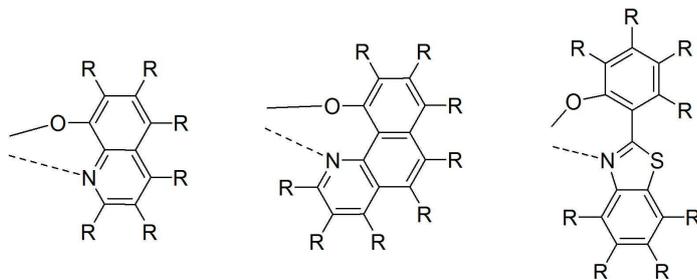
[0415] 상기 M이 알칼리 토금속에서 선택되는 하나의 금속인 경우에는 m=1, n=1이거나, 또는 m=2, n=0이고,

[0416] 상기 M이 붕소 또는 알루미늄인 경우에는 m = 1 내지 3중 어느 하나이며, n은 0 내지 2 중 어느 하나로서 m+n=3을 만족하며;

[0417] 상기 '치환 또는 비치환된'에서의 '치환'은 중수소, 시아노기, 할로젠기, 히드록시기, 니트로기, 알킬기, 알콕시기, 알킬아미노기, 아릴아미노기, 헤테로 아릴아미노기, 알킬실릴기, 아릴실릴기, 아릴옥시기, 아릴기, 헤테로아릴기, 게르마늄, 인 및 보론으로 이루어진 군에서 선택된 1개 이상의 치환기로 치환되는 것을 의미한다.

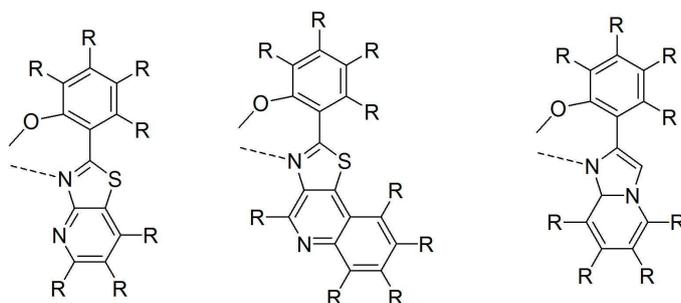
[0418] 본 발명에서 Y 는 각각 동일하거나 상이하며, 서로 독립적으로 하기 [구조식C1] 내지 [구조식 C39]부터 선택되는 어느 하나일 수 있으나, 이에 한정된 것은 아니다.

[0419] [구조식C1][구조식C2][구조식C3]



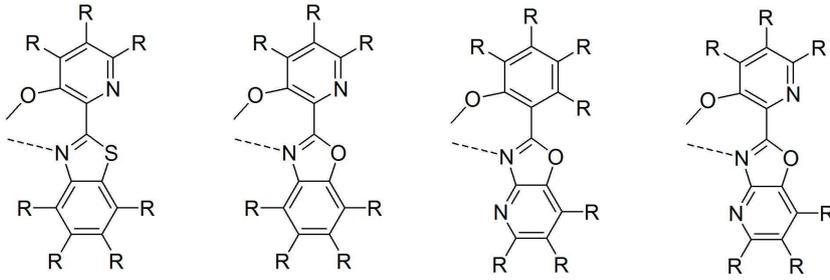
[0420]

[0421] [구조식C4][구조식C5][구조식C6]



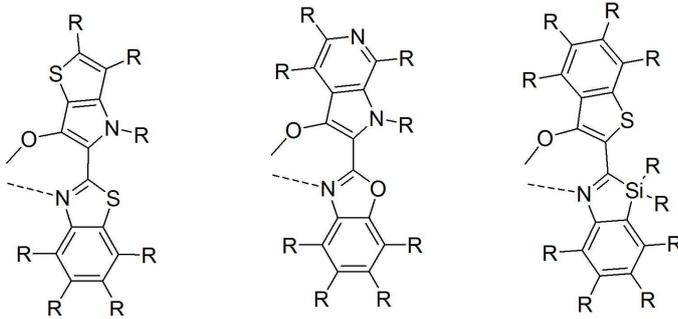
[0422]

[0423] [구조식C7][구조식C8][구조식C9][구조식C10]



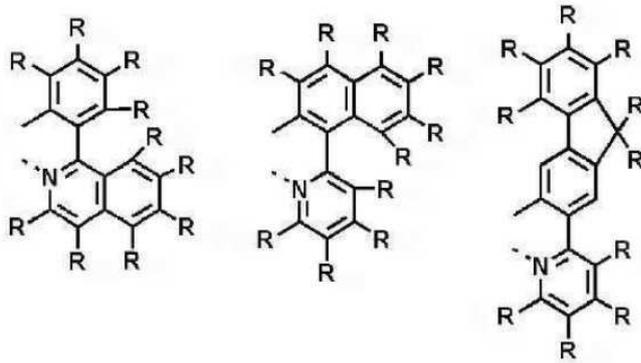
[0424]

[0425] [구조식C11] [구조식C12] [구조식C13]



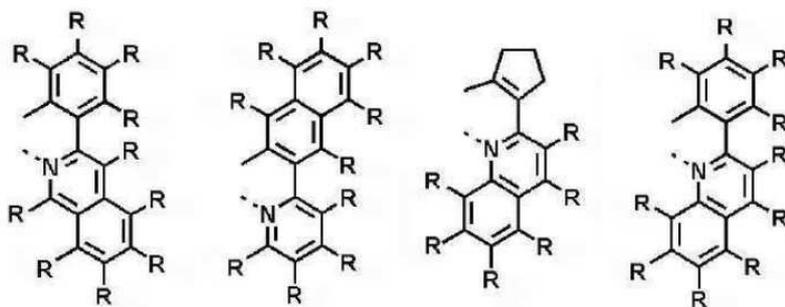
[0426]

[0427] [구조식C14][구조식C15][구조식C16]



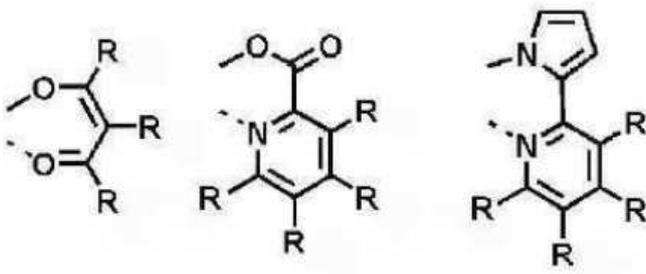
[0428]

[0429] [구조식C17][구조식C18][구조식C19][구조식C20]



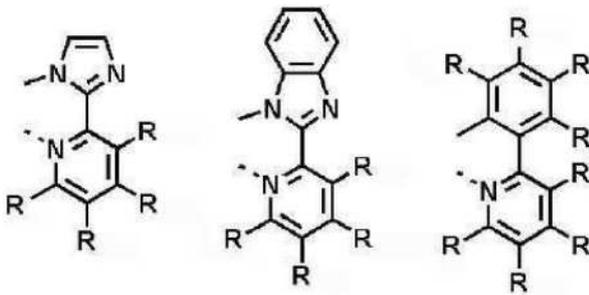
[0430]

[0431] [구조식C21] [구조식C22] [구조식C23]



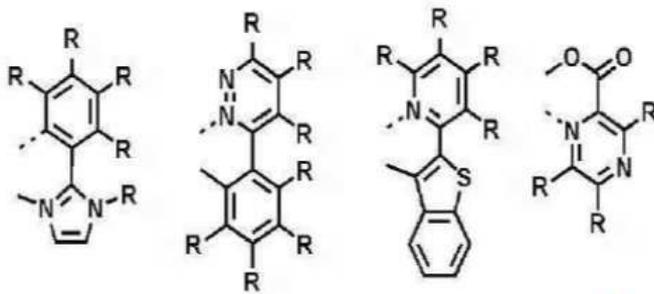
[0432]

[0433] [구조식C24][구조식C25][구조식C26]



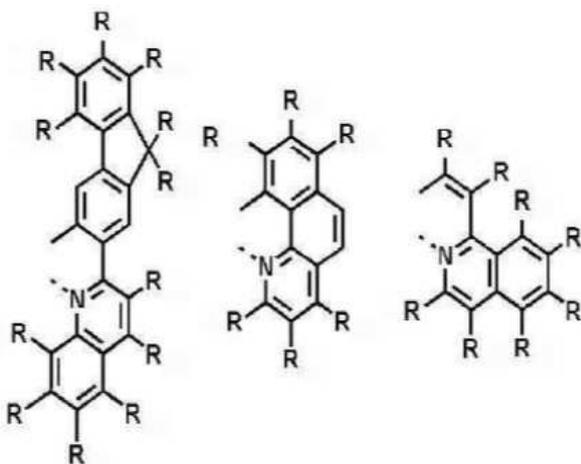
[0434]

[0435] [구조식C27][구조식C28][구조식C29][구조식C30]



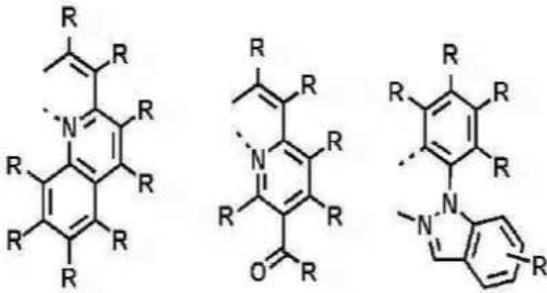
[0436]

[0437] [구조식C31] [구조식C32] [구조식C33]



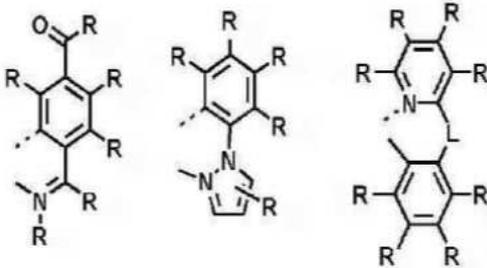
[0438]

[0439] [구조식C34][구조식C35][구조식C36]



[0440]

[0441] [구조식C37][구조식C38][구조식C39]



[0442]

[0443] 상기 [구조식C1] 내지 [구조식 C39]에서,

[0444] R은 서로 동일하거나 상이하며, 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로겐, 시아노기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 30의 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알콕시기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 30의 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 30의 알케닐기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬아미노기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 알킬실릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴아미노기 및 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴실릴기중에서 선택되고, 인접한 치환체와 알킬렌 또는 알케닐렌으로 연결되어 스피로고리 또는 융합고리를 형성할 수 있다.

[0445] 이하 본 발명의 유기 발광 소자를 도 1을 통해 설명하고자 한다.

[0446] 도 1은 본 발명의 유기 발광 소자의 구조를 나타내는 단면도이다. 본 발명에 따른 유기 발광 소자는 애노드(20), 정공수송층(40), 유기발광층(50), 전자수송층(60) 및 캐소드(80)을 포함하며, 필요에 따라 정공주입층(30)과 전자주입층(70)을 더 포함할 수 있으며, 그 이외에도 1층 또는 2층의 중간층을 더 형성하는 것도 가능하며, 정공저지층 또는 전자저지층을 더 형성시킬 수도 있다.

[0447] 도 1을 참조하여 본 발명의 유기 발광 소자 및 그 제조방법에 대하여 살펴보면 다음과 같다. 먼저 기판(10) 상부에 애노드 전극용 물질을 코팅하여 애노드(20)를 형성한다. 여기에서 기판(10)으로는 통상적인 유기 EL 소자에서 사용되는 기판을 사용하는데 투명성, 표면 평활성, 취급용이성 및 방수성이 우수한 유기 기판 또는 투명 플라스틱 기판이 바람직하다. 그리고, 애노드 전극용 물질로는 투명하고 전도성이 우수한 산화인듐주석(ITO), 산화인듐아연(IZO), 산화주석(SnO₂), 산화아연(ZnO) 등을 사용한다.

[0448] 상기 애노드(20) 전극 상부에 정공 주입층 물질을 진공열 증착, 또는 스프인 코팅하여 정공주입층(30)을 형성한다. 그 다음으로 상기 정공주입층(30)의 상부에 정공수송층 물질을 진공 열증착 또는 스프인 코팅하여 정공수송층(40)을 형성한다.

[0449] 상기 정공주입층 재료는 당업계에서 통상적으로 사용되는 것인 한 특별히 제한되지 않고 사용할 수 있으며, 예를 들어 2-TNATA [4,4',4''-tris(2-naphthylphenyl-phenylamino)-triphenylamine], NPD[N,N'-di(1-naphthyl)-N,N'-diphenylbenzidine], TPD[N,N'-diphenyl-N,N'-bis(3-methylphenyl)-1,1'-biphenyl-4,4'-diamine], DNTPD[N,N'-diphenyl-N,N'-bis-[4-(phenyl-m-tolyl-amino)-phenyl]-biphenyl-4,4'-diamine] 등을 사용할 수 있다. 하지만 본 발명이 반드시 이에 한정되는 것은 아니다.

[0450] 또한 상기 정공수송층의 재료로서 당업계에 통상적으로 사용되는것인 한 특별히 제한되지 않으며, 예를 들어, N,N'-비스(3-메틸페닐)-N,N'-디페닐-[1,1-비페닐]-4,4'-디아민(TPD) 또는 N,N'-디(나프탈렌-1-일)-N,N'-디페닐벤지딘(a-NPD) 등을 사용할 수 있다. 하지만 본 발명이 반드시 이에 한정되는 것은 아니다.

[0451] 이어서, 상기 정공수송층(40)의 상부에 유기발광층(50)을 적층하고 상기 유기발광층(50)의 상부에 선택적으로 정공저지층(미도시)을 진공 증착 방법, 또는 스핀 코팅 방법으로서 박막을 형성할 수 있다. 상기 정공저지층은 정공이 유기발광층을 통과하여 캐소드로 유입되는 경우에는 소자의 수명과 효율이 감소되기 때문에 HOMO(Highest Occupied Molecular Orbital) 레벨이 매우 낮은 물질을 사용함으로써 이러한 문제를 방지하는 역할을 한다. 이 때, 사용되는 정공 저지 물질은 특별히 제한되지는 않으나 전자수송능력을 가지면서 발광 화합물보다 높은 이온화 포텐셜을 가져야 하며 대표적으로 BA1q, BCP, TPBI 등이 사용될 수 있다.

[0452] 이러한 정공저지층 위에 전자수송층(60)을 진공 증착 방법, 또는 스핀 코팅 방법을 통해 증착한 후에 전자주입층(70)을 형성하고 상기 전자주입층(70)의 상부에 캐소드 형성용 금속을 진공 열증착하여 캐소드(80) 전극을 형성함으로써 유기 EL 소자가 완성된다. 여기에서 캐소드 형성용 금속으로는 리튬(Li), 마그네슘(Mg), 알루미늄(Al), 알루미늄-리튬(Al-Li), 칼슘(Ca), 마그네슘-인듐(Mg-In), 마그네슘-은(Mg-Ag) 등을 사용할 수 있으며, 전면 발광 소자를 얻기 위해서는 ITO, IZO를 사용한 투과형 캐소드를 사용할 수 있다.

[0453] 또한, 본 발명의 구체적인 예에 의하면, 상기 발광층의 두께는 50 내지 2,000 Å인 것이 바람직하다.

[0454] 또한, 본 발명에서 상기 정공주입층, 정공수송층, 정공 주입 기능 및 정공 수송 기능을 동시에 갖는 기능층, 전자저지층, 발광층, 정공저지층, 전자수송층 및 전자주입층으로부터 선택된 하나 이상의 층은 단분자 증착방식 또는 용액공정에 의하여 형성될 수 있다. 여기서 상기 증착 방식은 상기 각각의 층을 형성하기 위한 재료로 사용되는 물질을 진공 또는 저압상태에서 가열 등을 통해 증발시켜 박막을 형성하는 방법을 의미하고, 상기 용액 공정은 상기 각각의 층을 형성하기 위한 재료로 사용되는 물질을 용매와 혼합하고 이를 잉크젯 인쇄, 롤투롤 코팅, 스크린 인쇄, 스프레이 코팅, 딥 코팅, 스핀 코팅 등과 같은 방법을 통하여 박막을 형성하는 방법을 의미한다.

[0455] 또한 본 발명에서의 상기 유기 발광 소자는 평판 디스플레이 장치; 플렉시블 디스플레이 장치; 단색 또는 백색의 평판 조명용 장치; 및 단색 또는 백색의 플렉시블 조명용 장치;에서 선택되는 어느 하나의 장치에 사용될 수 있다.

[0456] 이하, 바람직한 실시예를 들어 본 발명을 더욱 상세하게 설명한다. 그러나, 이들 실시예는 본 발명을 보다 구체적으로 설명하기 위한 것으로, 본 발명의 범위가 이에 의하여 제한되지 않는다는 것은 당업계의 통상의 지식을 가진 자에게 자명할 것이다.

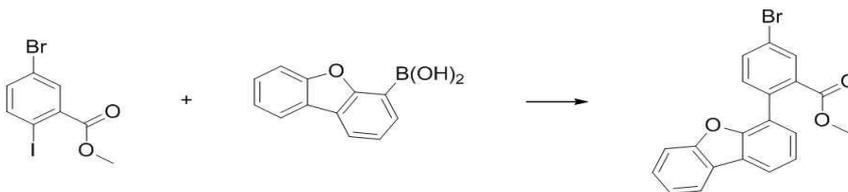
[0457] (실시예)I.도판트 화합물의 제조에

[0458] 합성예 1: 화학식 1의 합성

[0459] 합성예 1-(1): [중간체 1-a]의 합성

[0460] 하기 반응식 1에 따라, [중간체 1-a]를 합성하였다.

[0461] <반응식 1>



[0462]

[0463]

<중간체 1-a>

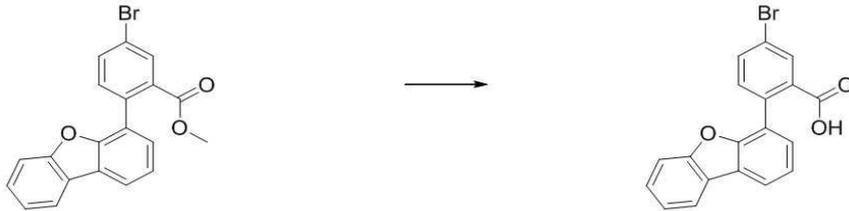
[0464] 500mL 둥근바닥플라스크 반응기에 메틸 5-브로모-2-아이오도벤조에이트(25.0g, 73mmol), 4-디벤조퓨란보론산(18.7g, 88mmol), 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐(1.7g, 0.15mmol), 포타슘카보네이트(20.2 g, 146.7mmol)

을 넣고 톨루엔 125 mL, 테트라하이드로퓨란 125mL, 물 50 mL를 넣었다. 반응기의 온도를 80도로 승온시키고 10 시간교반시켰다. 반응이 종료되면 반응기의 온도를 실온으로 낮추고 에틸아세테이트로 추출하고 유기층을 분리하였다. 유기층은 감압농축 후 컬럼크로마토그래피로 분리하여 중간체 1-a를 얻었다.(75.0g, 60.1%)

[0465] 합성예 1-(2): 중간체 1-b의 합성

[0466] 하기 반응식 2에 따라 중간체 1-b를 합성하였다:

[0467] <반응식 2>



[0468] <중간체 1-a>

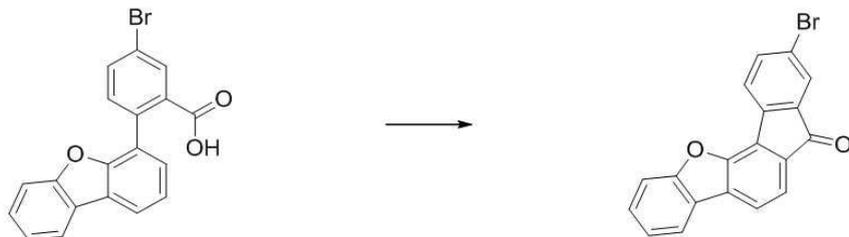
<중간체 1-b>

[0470] 500mL 둥근바닥플라스크 반응기에 <중간체 1-a> (17.0g, 45mmol), 수산화나트륨(2.14g, 54mmol), 에탄올 170ml 을 넣고 48시간 환류 교반 하였다. 얇은막 크로마토그래피로 반응 종결 확인 후 실온으로 냉각 하였다. 냉각된 용액에 2-노말 염산을 적가, 산성화하여 생성된 고체는 30분 교반 후 여과하였다. 디클로로메탄과 노말헥산으로 재결정 하여 <중간체 1-b>를 얻었다. (14.5g, 88.6%)

[0471] 합성예 1-(3): 중간체 1-c의 합성

[0472] 하기 반응식 3에 따라 중간체 1-c를 합성하였다:

[0473] <반응식 3>



[0474] <중간체 1-b>

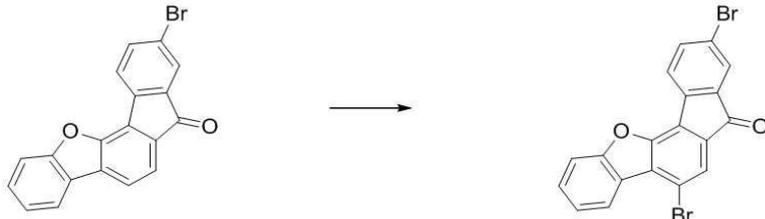
<중간체 1-c>

[0476] 250ml 둥근바닥플라스크 반응기에 <중간체 1-b> (14.5g, 39mmol), 메탄설폰산 145ml를 넣고 80도로 승온 하여 3시간 교반 하였다. 얇은막크로마토그래피로 반응 종결확인 후 실온으로 냉각 시켰다. 반응 용액은 얼음물 150ml에 천천히 적가 후 30분 교반 하였다. 생성된 고체는 여과 후 물과 메탄올로 씻어 주었다. <중간체 1-c> 얻었다. (11.50g, 83.4%)

[0477] 합성예 1-(4): 중간체 1-d의 합성

[0478] 하기 반응식 4에 따라 중간체 1-d를 합성하였다:

[0479] <반응식 4>



[0480]

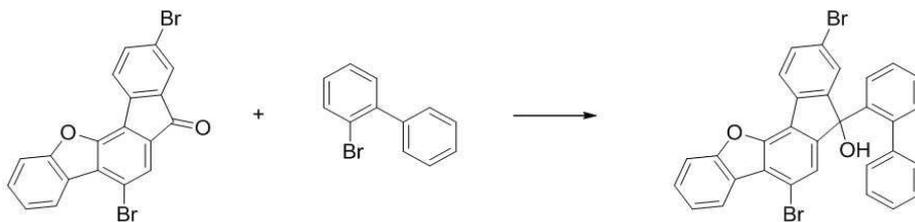
[0481] <중간체 1-c> <중간체 1-d>

[0482] 1L 둥근바닥플라스크 반응기에 <중간체1-c>(11.5g, 33mmol), 디클로로메탄 300ml을 넣고 상온 교반 하였다. 브롬(3.4ml, 66mmol)은 디클로로메탄 50ml에 희석하여 적가하였고, 8시간 상온 교반 하였다. 반응 완료 후 반응 용기에 아세톤 100ml을 넣고 교반하였다. 생성된 고체는 여과 후 아세톤으로 씻어 주었다. 고체는 모노클로로벤젠으로 재결정하여 <중간체 1-d>(11.0g, 78%)얻었다.

[0483] 합성예 1-(5): 중간체 1-e의 합성

[0484] 하기 반응식 5에 따라 중간체 1-e를 합성하였다:

[0485] <반응식 5>



[0486]

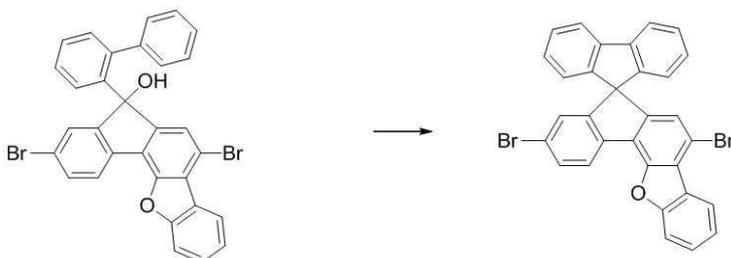
[0487] <중간체 1-d> <중간체 1-e>

[0488] 250ml 둥근바닥플라스크 반응기에 2-브로모바이페닐 (8.4g, 0.036mol)과 테트라하이드로퓨란 110ml을 넣고 질소 분위기에서 -78도로 냉각 하였다. 냉각된 반응 용액에 노말부틸리튬 (19.3ml, 0.031mol)을 동일 온도에서 적가 하였다. 반응용액은 2시간 교반 후 <중간체 1-d>(11.0g, 0.026mol)를 조금씩 넣고 상온에서 교반 하였다. 반응 용액색이 변하면 TLC로 반응 종결을 확인하였다. H₂O 50ml을 넣어 반응 종료 하고 에틸아세테이트와 물로 추출 하였다. 유기층 분리하여 감압 농축 후 아세토나이트릴로 재결정하여 <중간체 1-e>를 얻었다. (12.2g, 81.5%)

[0489] 합성예 1-(6): 중간체 1-f의 합성

[0490] 하기 반응식 6에 따라 중간체 1-f를 합성하였다:

[0491] <반응식 6>



[0492]

[0493] <중간체 1-e> <중간체 1-f>

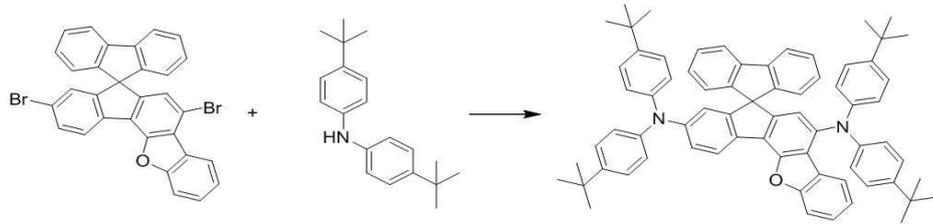
[0494] 250ml 둥근바닥플라스크 반응기에 <중간체 1-e> (12.0g, 0.021mol)과 아세트산 120ml , 황산 2ml을 넣고 5시간

환류 교반 하였다. 고체가 생성되면 얇은막크로마토그래피로 반응 종결 확인 후 실온으로 냉각 하였다. 생성된 고체는 여과 후 H₂O, 메탄올로 씻어준 후 모노클로로벤젠에 녹여 실리카겔 여과, 농축 후 상온 냉각하여 <중간체 1-f> 얻었다. (10.7g, 90%)

[0495] 합성예 1-(7): 화학식 1의 합성

[0496] 하기 반응식 7에 따라 화학식 1을 합성하였다:

[0497] <반응식 7>



[0498]

[0499] <중간체 1-f>

<화학식 1>

[0500] 250ml 둥근바닥플라스크 반응기에 <중간체 1-f> (5.0g, 0.009mol), 비스(4-터셔리부틸페닐)아민 (6.0g, 0.021mol), 팔라듐(II)아세테이트 (0.08g, 0.4mmol), 소듐터셔리부톡사이드(3.4g, 0.035mol), 트리터셔리부틸포스핀(0.07g, 0.4mmol), 톨루엔 60ml을 넣고 2시간 환류 교반하였다. 반응완료 후 상온 냉각 하였다. 반응 용액은 디클로로메탄과 물로 추출하였다. 유기층은 분리하여 마그네슘설페이트로 무수처리 후 감압 농축하였다. 물질은 컬럼크로마토그래피로 분리정제 후 디클로로메탄과 아세톤으로 재결정하여 <화학식 1> (3.1g, 36%)을 얻었다.

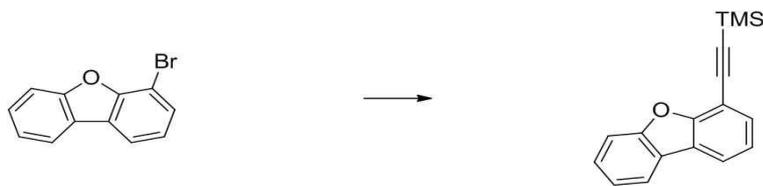
[0501] MS (MALDI-TOF) : m/z 964.5 [M⁺]

[0502] 합성예 2: 화학식 33의 합성

[0503] 합성예2-(1): 중간체 2-a의 합성

[0504] 하기 반응식 8에 따라, 중간체 2-a를 합성하였다:

[0505] <반응식 8>



[0506]

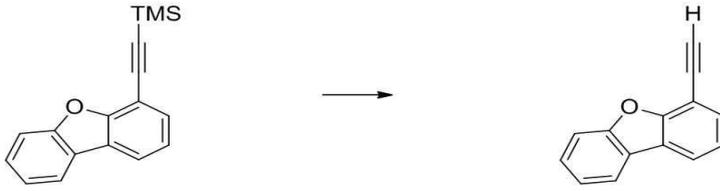
[0507] <중간체 2-a>

[0508] 2L 둥근바닥플라스크 반응기에 4-브로모디벤조퓨란(100.0g, 0.405mol), 에틸닐 트리메틸실란 (47.7g, 0.486mol), [1,1'-비스(디페닐포스피노)페로센]디클로로팔라듐 (9.92g, 0.012mol), 요오드화구리(2.31g, 0.012mol), 트리페닐포스핀(10.6g, 0.040mol), 트리에틸아민 700ml을 넣고 질소분위기에서 5시간 환류교반 하였다. 반응완료 후 상온으로 냉각하고 헵탄 500ml 넣어 반응 종료하였다. 셀라이트와 실리카겔패드를 깔고 여과하였다. 여액은 감압 농축하여 <중간체 2-a>(130g, 84%)얻었다.

[0509] 합성예2-(2): 중간체 2-b의 합성

[0510] 하기 반응식 9에 따라, 중간체 2-b를 합성하였다:

[0511] <반응식 9>



[0512]

[0513] <중간체 2-a>

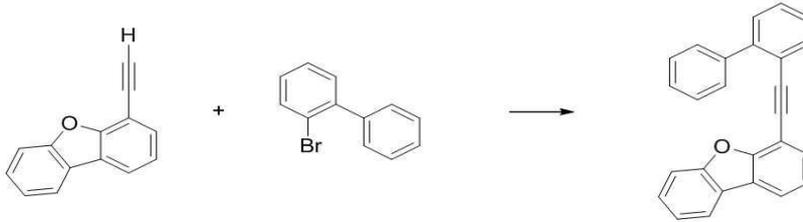
<중간체 2-b>

[0514] 2L 둥근바닥플라스크 반응기에 <중간체 2-a>(130g, 0.492mol), 탄산칼륨(101.9g, 0.738mol), 메탄올 650ml, 테트라하이드로퓨란 650ml을 넣고 실온에서 2시간 교반 하였다. 반응완료 후 헵탄 500ml을 넣어 반응을 종료하였다. 반응용액은 여과하고 여액은 에틸아세테이트와 물로 추출하였다. 유기층을 분리하여 마그네슘설페이트로 무수처리 후 여과하여 감압농축 하였다. 오일형태의 <중간체 2-b>(82g, 84%)얻었다.

[0515] 합성예2-(3): 중간체 2-c의 합성

[0516] 하기 반응식 10에 따라, 중간체 2-c를 합성하였다:

[0517] <반응식 10>



[0518]

[0519] <중간체 2-b>

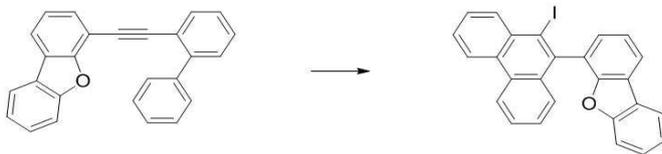
<중간체 2-c>

[0520] 2L 둥근바닥플라스크 반응기에 2-브로모바이페닐(66.0g, 0.283mol), <중간체 2-b>(65.3g, 0.340mol), [1,1'-비스(디페닐포스피노)페로센]디크로로팔라듐 (6.94g, 0.008mol), 요오드화구리(1.62g, 0.008mol), 트리페닐포스핀 (7.4g, 0.028mol), 트리에틸아민 500ml을 넣고 질소분위기에서 5시간 환류교반 하였다. 반응완료 후 상온으로 냉각하고 헵탄 400ml 넣어 반응 종료하였다. 셀라이트와 실리카겔패드를 깔고 여과하였다. 여액은 감압 농축하고 생성된 고체를 여과하여 <중간체 2-c>(80g, 82%)얻었다.

[0521] 합성예2-(4): 중간체 2-d의 합성

[0522] 하기 반응식 11에 따라, 중간체 2-d를 합성하였다:

[0523] <반응식 11>



[0524]

[0525] <중간체 2-c>

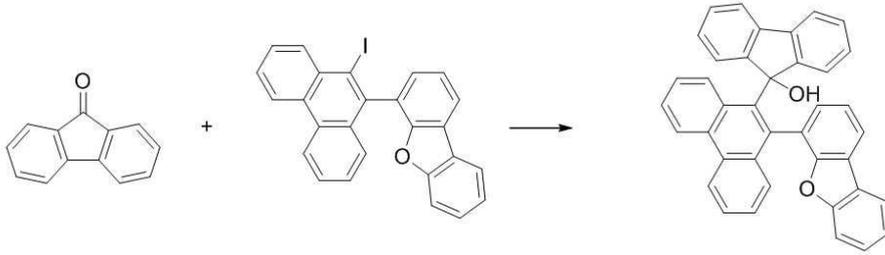
<중간체 2-d>

[0526] 2L 둥근바닥플라스크 반응기에 <중간체 2-c>(80.0g, 0.232mol)을 디클로로메탄 960ml에 녹여 넣고 질소분위기에서 -78도로 냉각하였다. 냉각된 용액에 일염화아이오딘 (278.4ml, 0.279mol)을 적가하고 상온에서 12시간 교반 하였다. 반응 완료 후 소듐사이오설페이트 포화 수용액을 넣고 교반하였다. 디클로로메탄과 물로 추출하여 유기층을 분리하고 감압농축하였다. 메탄올로 결정을 잡아 <중간체 2-d>(67g, 61.3%)얻었다.

[0527] 합성예2-(5): 중간체 2-e의 합성

[0528] 하기 반응식 12에 따라, 중간체 2-e를 합성하였다:

[0529] <반응식 12>



[0530]

[0531] <중간체 2-d>

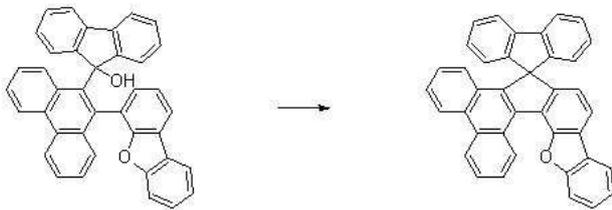
<중간체 2-e>

[0532] 500ml 둥근바닥플라스크 반응기에 <중간체 2-d>(54.8g, 0.117mol)과 테트라하이드로퓨란을 150ml 넣어 녹인 후 질소분위기에서 -78도로 냉각하였다. 냉각된 용액에 1.6몰 노말부틸리튬(62.4ml, 0.1mol)을 적가하고 동일온도에서 1시간 교반하였다. 9-플로오레논 (15.0g, 0.083mol)을 테트라하이드로퓨란 50ml에 녹여 적가하고 상온에서 8시간 교반하였다. 반응 완료 후 에틸아세테이트와 물로 추출하였다. 유기층은 분리하여 마그네슘설페이트로 무수처리 후 여과하여 감압농축 하였다. 오일형태의 <중간체 2-e>(33.2g, 76%)를 얻었다.

[0533] 합성예2-(6): 중간체 2-f의 합성

[0534] 하기 반응식 13에 따라, 중간체 2-f를 합성하였다:

[0535] <반응식 13>



[0536]

[0537] <중간체 2-e>

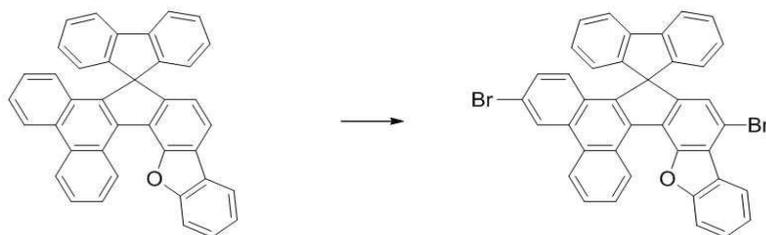
<중간체 2-f>

[0538] 1L 둥근바닥플라스크 반응기에 <중간체 2-e> (33.3g, 0.063mol)과 아세트산 330ml, 황산 3ml을 넣고 3시간 환류 교반 하였다. 얇은막크로마토그래피로 반응 종결 확인 후 실온으로 냉각 하였다. 생성된 고체는 여과 후 H₂O, 메탄올로 씻어준다. <중간체 2-f>를 얻었다. (28.6g, 88%)

[0539] 합성예2-(7): 중간체 2-g의 합성

[0540] 하기 반응식 14에 따라, 중간체 2-g를 합성하였다:

[0541] <반응식 14>



[0542]

[0543] <중간체 2-f>

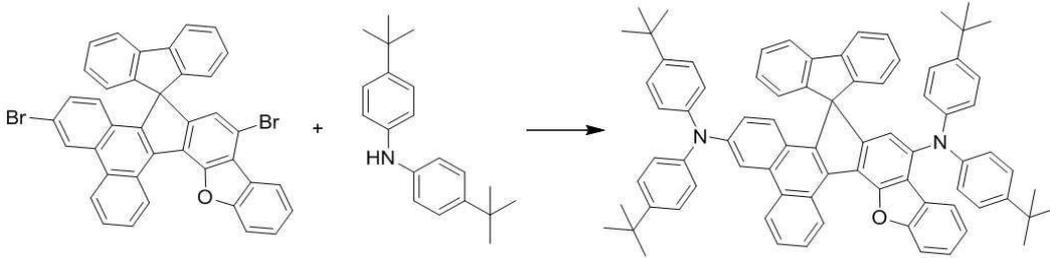
<중간체 2-g>

[0544] 1L 둥근바닥플라스크 반응기에 <중간체 2-f>(20.0g, 0.039mol)와 디클로로메탄 200ml을 넣어 녹였다. 실온에서 교반하는 중에 브롬(6ml, 0.118mol)을 디클로로메탄 40ml에 희석하여 적가하였다. 상온에서 12시간 교반하였으며 반응 완료 후 메탄올 100ml을 넣어 생성된 고체를 여과하고 메탄올로 씻어주었다. 물질은 1,2-디클로로벤젠과 아세톤으로 재결정하여 <중간체 2-g>(16g, 60%)를 얻었다.

[0545] 합성예2-(8): 화학식 33의 합성

[0546] 하기 반응식 15에 따라, 화학식 33을 합성하였다:

[0547] <반응식 15>



[0548] <중간체 2-g>

<화학식 33>

[0550] 상기 합성예 1-(7)에서 <중간체 1-f> 대신 <중간체 2-g>사용한 것을 제외하고는, 동일한 방법을 이용하여 <화학식 33> (2.5 g, 31%)을 얻었다.

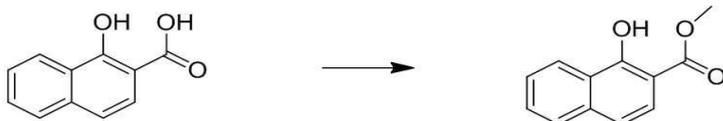
[0551] MS (MALDI-TOF) : m/z 1064.5 [M⁺]

[0552] 합성예 3: 화학식 49의 합성

[0553] 합성예3-(1): 중간체 3-a의 합성

[0554] 하기 반응식 16에 따라, 중간체 3-a를 합성하였다:

[0555] <반응식 16>



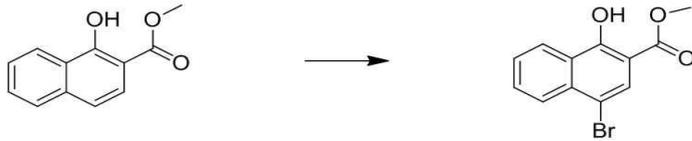
[0556] <중간체 3-a>

[0558] 2L 둥근바닥플라스크 반응기에 1-하이드록시 2-나프탈산 (50g, 266mmol), 메탄올 1000ml, 황산 100ml을 넣고 100시간 환류 교반 하였다. TLC로 반응 종결 확인 후 상온 냉각하였다. 용액은 감압 농축 후 디클로로메탄과 물로 추출하였다. 유기층을 분리하여 마그네슘설페이트로 무수처리 후 여과, 감압 농축 후 헵탄을 과량 넣어 결정화 하여 <중간체 3-a>(39g, 72.6%)얻었다.

[0559] 합성예3-(2): 중간체 3-b의 합성

[0560] 하기 반응식 17에 따라 중간체 3-b를 합성하였다:

[0561] <반응식 17>



[0562]

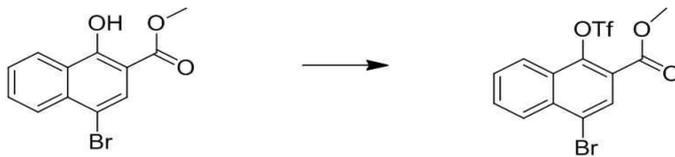
[0563] <중간체 3-a> <중간체 3-b>

[0564] 1L 둥근바닥플라스크 반응기에 <중간체 3-a> (39.0g, 193mmol), 아세트산 390ml을 넣고 상온 교반하였다. 아세트산 80ml에 브롬 (11.8ml, 231mmol)을 희석하여 반응용액에 적가 하였다. 반응용액은 실온에서 5시간 교반하였다. 반응 완료후 생성된 고체를 여과하였고, 헵탄 슬러리 후 <중간체 3-b>(50g, 90%)를 얻었다.

[0565] 합성예3-(3): 중간체 3-c의 합성

[0566] 하기 반응식 18에 따라 중간체 3-c를 합성하였다:

[0567] <반응식 18>



[0568]

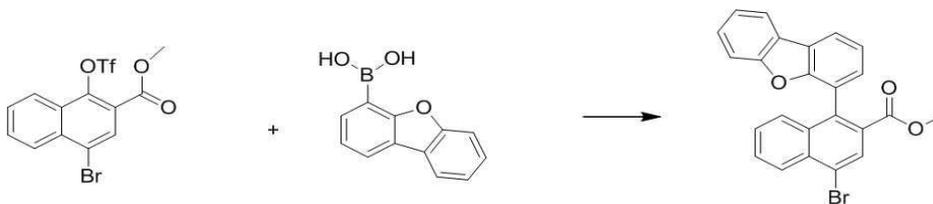
[0569] <중간체 3-b> <중간체 3-c>

[0570] 2L 둥근바닥플라스크 반응기에 <중간체 3-b> (50g, 178mmol)과 디클로로메탄을 넣고 교반 하였다. 질소분위기에서 피리딘 (28.1g, 356mmol)을 반응용액에 넣고 상온에서 20분 교반 하였다. 반응 용액은 0도로 냉각 후 질소분위기에서 트리플루오로메탄설포닉 언하이드라이드 (65.24g, 231mmol)을 적가하였다. 3시간 교반 후 TLC로 반응 종결 확인, 물 20ml을 넣고 10분 교반하였다. 반응 용액은 감압 농축 후 컬럼분리하여 <중간체 3-c>(45g, 61%)를 얻었다.

[0571] 합성예3-(4): 중간체 3-d의 합성

[0572] 하기 반응식 19에 따라 중간체 3-d를 합성하였다:

[0573] <반응식 19>



[0574]

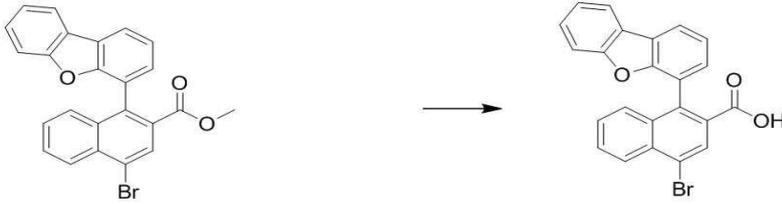
[0575] <중간체 3-c> <중간체 3-d>

[0576] 1L 둥근바닥플라스크 반응기에 <중간체 3-c> (45.0g, 0.109mol), 4-디벤조보론산 (25.4g, 0.120mol), 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐(2.5g, 0.22mmol), 포타슘카보네이트(30.1 g, 0.218mol)을 넣고 톨루엔 300 mL, 에탄올 130mL, 물 90 mL를 넣었다. 반응기의 온도를 80도로 승온시키고 5시간교반시켰다. 반응이 종료되면 반응기의 온도를 실온으로 낮추고 에틸아세이트로 추출하고 유기층을 분리하였다. 유기층은 감압농축 후 컬럼크로마토그래피로 분리하여 중간체 3-d를 얻었다.(22.0g, 46.1%)

[0577] 합성예3-(5): 중간체 3-e의 합성

[0578] 하기 반응식 20에 따라 중간체3-e를 합성하였다:

[0579] <반응식 20>



[0580]

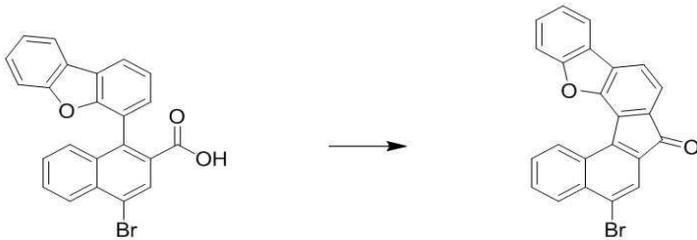
[0581] <중간체 3-d> <중간체 3-e>

[0582] 1L 둥근바닥플라스크 반응기에 <중간체 3-d> (22.0, 0.051mol), 수산화나트륨(2.65g, 0.066mol)을 넣고 48시간 환류 교반 하였다. 반응 완료 후 실온으로 냉각 하였다. 냉각된 용액에 2-노말 염산을 적가, 산성화하여 생성된 고체는 30분 교반 후 여과하였다. 디클로로메탄과 노말헥산으로 재결정 하여 <중간체 3-e>를 얻었다. (17.6g, 82.7%)

[0583] 합성예3-(6): 중간체 3-f의 합성

[0584] 하기 반응식 21에 따라 중간체 3-f를 합성하였다:

[0585] <반응식 21>



[0586]

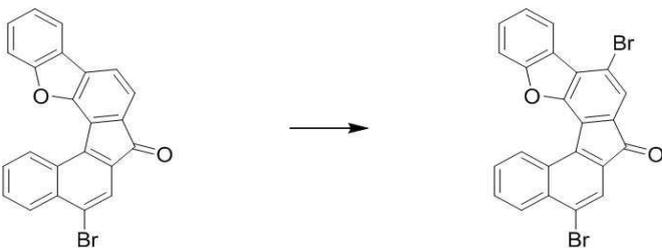
[0587] <중간체 3-e> <중간체 3-f>

[0588] 500ml 둥근바닥플라스크 반응기에 <중간체 3-e> (17.6g, 0.042mol), 메탄설폰산 170ml를 넣고 80도로 승온 하여 3시간 교반 하였다. 얇은막크로마토그래피로 반응 종결확인 후 실온으로 냉각 시켰다. 반응 용액은 얼음물 150ml에 천천히 적가 후 30분 교반 하였다. 생성된 고체는 여과 후 물과 메탄올로 씻어 주었다. 고체는 모노클로로벤젠에 녹여 실리카겔패드에서 여과하였다. 여액은 가열 농축 후 아세톤으로 재결정하여 <중간체 3-f>를 얻었다. (12g, 71%)

[0589] 합성예3-(7): 중간체 3-g의 합성

[0590] 하기 반응식 22에 따라 중간체 3-g를 합성하였다:

[0591] <반응식 22>



[0592]

[0593] <중간체 3-f> <중간체 3-g>

[0594] 1L 둥근바닥플라스크 반응기에 <중간체 3-f>(12.0g, 0.030mol)와 디클로로메탄 360ml을 넣었다. 실온에서 교반

[0612] 상기 합성예 1-(7)에서 <중간체1-f> 대신 <중간체 3-i>사용한 것을 제외하고는, 동일한 방법을 이용하여 <화학식 49> (3.0 g, 36.1%)을 얻었다.

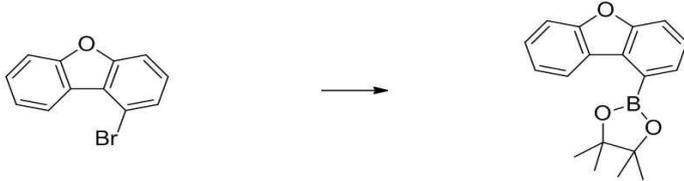
[0613] MS (MALDI-TOF) : m/z 1014.5 [M⁺]

[0614] 합성예 4: 화학식 76의 합성

[0615] 합성예4-(1): 중간체 4-a의 합성

[0616] 하기 반응식 26에 따라, 중간체 4-a를 합성하였다:

[0617] <반응식 26>



[0618]

[0619] <중간체 4-a>

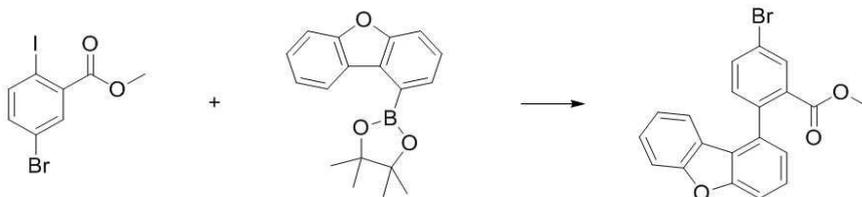
[0620] 500ml 등근바닥플라스크 반응기에 1-브로모디벤조퓨란(20.0g, 0.081mmol), 비스(피나콜라토)디보론(26.7g, 0.105mol), [1,1'-비스(디페닐포스포노)페로센]디크로로팔라듐 (1.3g, 0.002mol), 포타슘아세테이트 (19.9g, 0.202mol), 1,4-다이옥산 200ml을 넣고 10시간 환류 교반하였다.

[0621] 반응 완료 후 셀라이트 패드를 여과하였다. 여액은 감압 농축 후 컬럼분리하였고 디클로로메탄과헵탄으로 재결정하여 <중간체 4-a> (17.0g, 70%)를 얻었다.

[0622] 합성예4-(2): 중간체 4-b의 합성

[0623] 하기 반응식 27에 따라, 중간체 4-b를 합성하였다:

[0624] <반응식 27>



[0625]

[0626] <중간체 4-a>

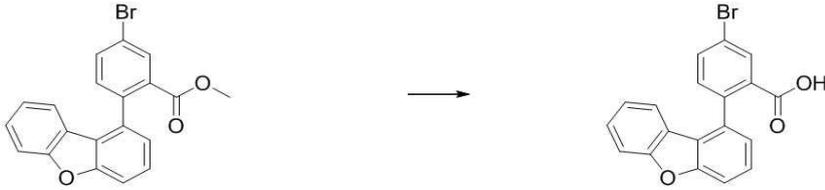
<중간체 4-b>

[0627] 상기 합성예 1-(1)에서 4-디벤조보론산 대신 <중간체 4-a>사용한 것을 제외하고는, 동일한 방법을 이용하여 <중간체 4-b> (13.1 g, 68.9%)을 얻었다

[0628] 합성예4-(3): 중간체 4-c의 합성

[0629] 하기 반응식 28에 따라, 중간체 4-c를 합성하였다:

[0630] <반응식 28>



[0631]

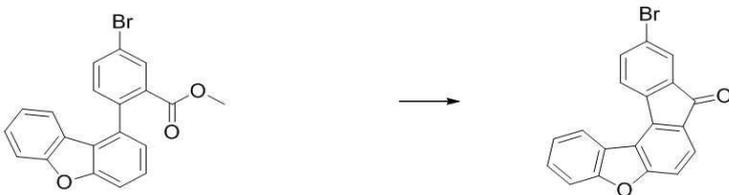
[0632] <중간체 4-b> <중간체 4-c>

[0633] 상기 합성예 1-(2)에서 <중간체 1-a> 대신 <중간체 4-b>사용한 것을 제외하고는, 동일한 방법을 이용하여 <중간체 4-c> (11 g, 87%)을 얻었다

[0634] 합성예4-(4): 중간체 4-d의 합성

[0635] 하기 반응식 29에 따라, 중간체 4-d를 합성하였다:

[0636] <반응식 29>



[0637]

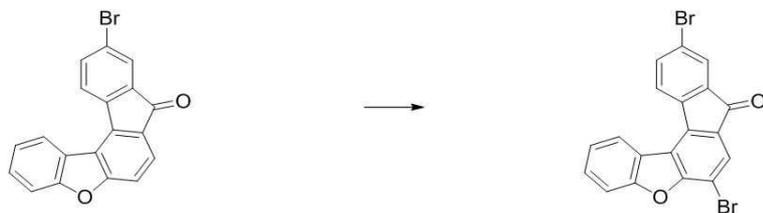
[0638] <중간체 4-c> <중간체 4-d>

[0639] 상기 합성예 1-(3)에서 <중간체 1-b> 대신 <중간체 4-c>사용한 것을 제외하고는, 동일한 방법을 이용하여 <중간체 4-d> (9.0 g, 86%)을 얻었다

[0640] 합성예4-(5): 중간체 4-e의 합성

[0641] 하기 반응식 30에 따라, 중간체 4-e를 합성하였다:

[0642] <반응식 30>



[0643]

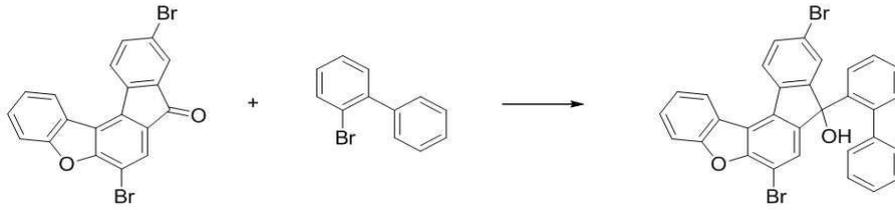
[0644] <중간체 4-d> <중간체 4-e>

[0645] 상기 합성예 1-(4)에서 <중간체 1-c> 대신 <중간체 4-d>사용한 것을 제외하고는, 동일한 방법을 이용하여 <중간체 4-e> (6.7g, 60.7%)을 얻었다

[0646] 합성예4-(6): 중간체 4-f의 합성

[0647] 하기 반응식 31에 따라, 중간체 4-f를 합성하였다:

[0648] <반응식 31>



[0649]

[0650] <중간체 4-e>

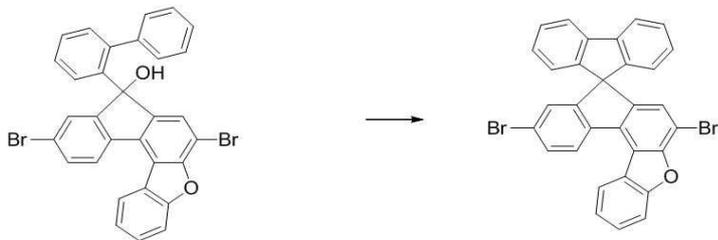
<중간체 4-f>

[0651] 상기 합성에 1-(5)에서 <중간체 1-d> 대신 <중간체 4-e>사용한 것을 제외하고는, 동일한 방법을 이용하여 <중간체 4-f> (5.2g, 55%)을 얻었다

[0652] 합성예4-(7): 중간체 4-g의 합성

[0653] 하기 반응식 32에 따라 중간체 4-g를 합성하였다:

[0654] <반응식 32>



[0655]

[0656] <중간체 4-f>

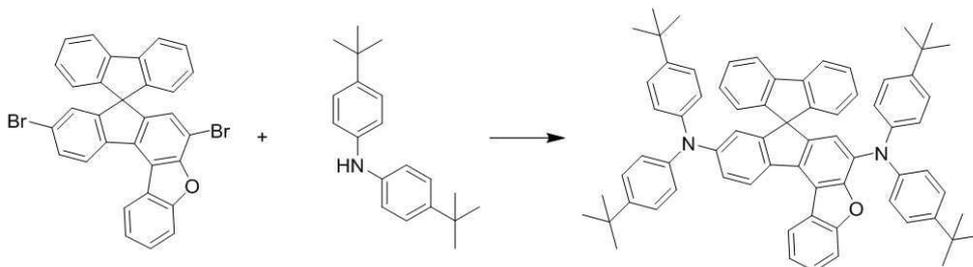
<중간체 4-g>

[0657] 상기 합성에 1-(6)에서 <중간체 1-e> 대신 <중간체 4-f>사용한 것을 제외하고는, 동일한 방법을 이용하여 <중간체 4-g> (4.3g, 85.3%)을 얻었다

[0658] 합성예4-(8): 화학식 76의 합성

[0659] 하기 반응식 33에 따라 화학식 76를 합성하였다:

[0660] <반응식 33>



[0661]

[0662] <중간체 4-g>

<화학식 76>

[0663] 상기 합성에 1-(7)에서 <중간체 1-f> 대신 <중간체 4-g>사용한 것을 제외하고는, 동일한 방법을 이용하여 <화학식 76> (2.5g, 34%)을 얻었다.

[0664] MS (MALDI-TOF) : m/z 964.5 [M⁺]

[0665] 합성예 5: 화학식 89의 합성

[0666] 합성예5-(1): 중간체 5-a의 합성

[0667] 하기 반응식 34에 따라, 중간체 5-a를 합성하였다:

[0668] <반응식 34>



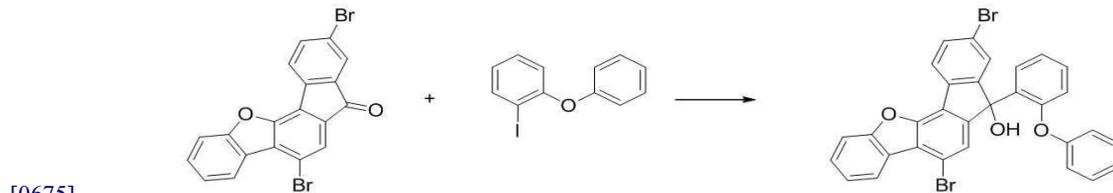
[0670] <중간체 5-a>

[0671] 1L 둥근바닥플라스 반응기에 2-펜옥시아닐린 (25.0, 0.135mol)과 염산 30ml, 물 150ml을 넣고 0도로 냉각하여 1시간 교반 하였다. 동일 온도에서 소듐나이트리트(11.2g, 0.162mol)수용액 75ml을 반응용액에 적가 후 1시간 교반하였다. 요오드화칼륨(44.8g, 0.270mol) 수용액 75ml을 적가 할 때 반응 용액의 온도가 5도를 넘지않게 주의하며 적가하였다. 5시간 상온에서 교반해주고 반응 완료 후 소듐사이오설페이트 수용액으로 씻은 후 에틸아세테이트와 물로 추출 하였다. 유기층은 분리 감압농축 후 컬럼크로마토그래피로 분리 정제하여 <중간체 5-a>(22.6g, 56.5%)를 얻었다.

[0672] 합성예5-(2): 중간체 5-b의 합성

[0673] 하기 반응식 35에 따라, 중간체 5-b를 합성하였다:

[0674] <반응식 35>



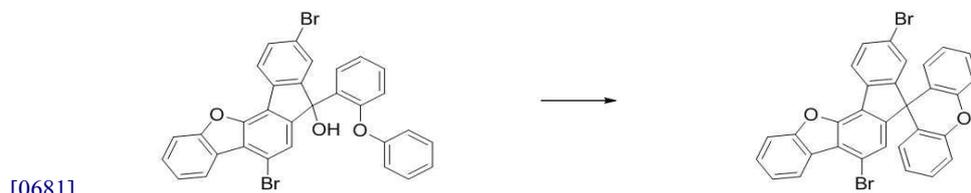
[0676] <중간체 3-g> <중간체 5-a> <중간체 5-b>

[0677] 상기 합성예 1-(5)에서 <중간체 1-d> 대신 <중간체 3-g>을 2-브로모바이페닐 대신 <중간체5-a>사용한 것을 제외하고는, 동일한 방법을 이용하여 <중간체 5-b> (19.6 g, 70.4%)을 얻었다.

[0678] 합성예5-(3): 중간체 5-c의 합성

[0679] 하기 반응식 36에 따라, 중간체 5-c를 합성하였다:

[0680] <반응식 36>



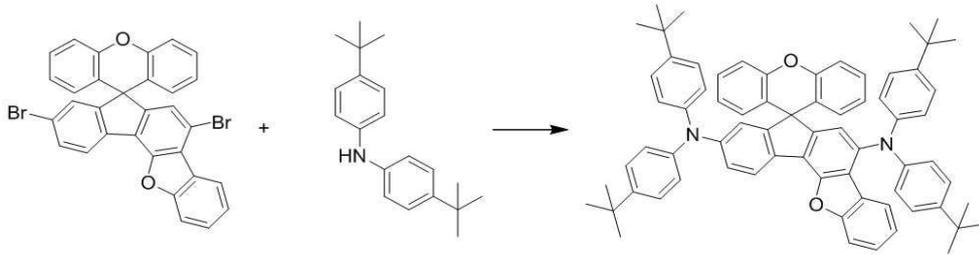
[0682] <중간체 5-b> <중간체 5-c>

[0683] 상기 합성예 1-(6)에서 <중간체 1-e> 대신 <중간체 5-b>사용한 것을 제외하고는, 동일한 방법을 이용하여 <중간체 5-c> (14.2 g, 74.7%)을 얻었다.

[0684] 합성예5-(4): 화학식 89의 합성

[0685] 하기 반응식 37에 따라, 화학식 89를 합성하였다:

[0686] <반응식 37>



[0687]

[0688] <중간체 5-c> <화학식 89>

[0689] 상기 합성예 1-(7)에서 <중간체 1-f> 대신 <중간체 5-c>를 비스(4-터셔리부틸페닐)아민대신 1,1'-(4-메틸페닐-4-터셔리부틸페닐)아민 사용한 것을 제외하고는, 동일한 방법을 이용하여 <화학식 89> (2.4 g, 28%)을 얻었다.

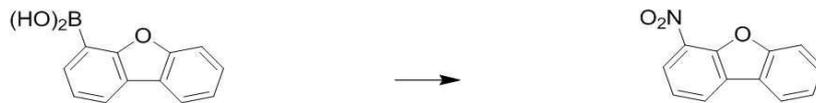
[0690] MS (MALDI-TOF) : m/z 980.5 [M⁺]

[0691] 합성예 6: 화학식 97의 합성

[0692] 합성예6-(1): 중간체 6-a의 합성

[0693] 하기 반응식 38에 따라, 중간체 6-a를 합성하였다:

[0694] <반응식 38>



[0695]

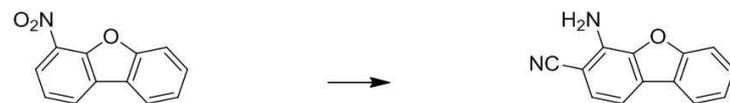
[0696] <중간체 6-a>

[0697] 2L 둥근바닥플라스크 반응기에 4-디벤조보론산(85.0g, 0.401mol), 비스무스(III)나이트레이트 펜타하이드레이트 (99.2g, 0.200mol), 톨루엔 400ml을 넣고 질소분위기에서 70도로 3시간 교반하였다. 반응완료 후 상온 냉각하고 생성된 고체를 여과하였다. 톨루엔으로 씻어준 후 <중간체 6-a>(61.5g, 72%)를 얻었다.

[0698] 합성예6-(2): 중간체 6-b의 합성

[0699] 하기 반응식 39에 따라 중간체 6-b를 합성하였다:

[0700] <반응식 39>



[0701]

[0702] <중간체 6-a> <중간체 6-b>

[0703] 2L 둥근바닥플라스크 반응기에 에틸시아노아세테이트(202.9g, 1.794mol)와 디메틸포름아마이드 500ml을 넣었다. 수산화칼륨 (67.10g, 1.196mol), 사이안화칼륨(38.95g, 0.598mol)을 넣고 디메틸포름아마이드 200ml을 넣고 상온 교반 하였다. 반응 용액에 <중간체 6-a>(127.5g, 0.737mol)을 조금씩 넣은 후 50도에서 72시간 교반하였다. 반응 완료 후 수산화나트륨 수용액(25%) 200ml을 넣고 환류 교반하였다. 3시간 교반 후 상온 냉각 하였고, 에틸 아세테이트와 물로 추출 하였다. 유기층은 분리하여 감압 농축 하였고 컬럼크로마토그래피로 분리정제하여 <중간체 6-b>(20.0g, 16%)얻었다.

[0704] 합성예6-(3): 중간체 6-c의 합성

[0705] 하기 반응식 40에 따라 중간체 6-c를 합성하였다:

[0706] <반응식 40>



[0707]

[0708] <중간체 6-b> <중간체 6-c>

[0709] 2L 둥근바닥플라스크 반응기에 <중간체 6-b>(20.0g, 0.096mol), 에탄올 600ml, 수산화칼륨 수용액(142.26g, 2.53mol) 170ml을 넣고 12시간 환류 교반하였다. 반응이 완료되면 상온 냉각하였다. 반응 용액에 6노말 염산 400ml을 넣고 산성화하였고 생성된 고체는 20분 교반 후 여과하였다. 고체는 에탄올로 씻어준 후 <중간체 6-c>(17.0g, 88.5%)얻었다.

[0710] 합성예6-(4): 중간체 6-d의 합성

[0711] 하기 반응식 41에 따라 중간체 6-d를 합성하였다:

[0712] <반응식 41>



[0713]

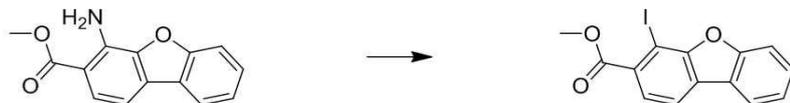
[0714] <중간체 6-c> <중간체 6-d>

[0715] 2L 둥근바닥플라스크 반응기에 <중간체 6-c>(17.0g, 0.075mol), 황산 15ml을 넣고 72시간 환류교반하였다. 반응 완료 후 상온 냉각 후 에틸아세테이트와 물로 추출하였다. 유기층은 분리하여 탄산수소나트륨 수용액으로 씻어 주었다. 유기층은 감압 농축중에 메탄올을 과량 넣고 생성된 고체를 여과하여 <중간체 6-d>(14.0 77.6%)를 얻었다.

[0716] 합성예6-(5): 중간체 6-e의 합성

[0717] 하기 반응식 42에 따라 중간체 6-d를 합성하였다:

[0718] <반응식 42>



[0719]

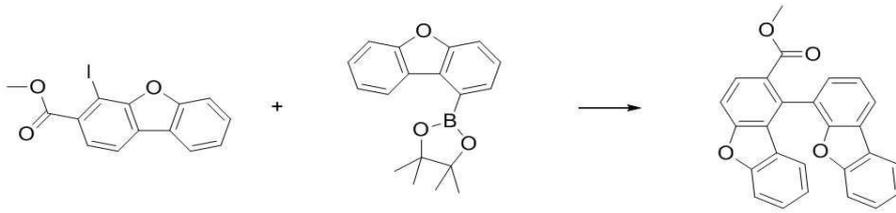
[0720] <중간체 6-d> <중간체 6-e>

[0721] 상기 합성예 5-(1)에서 2-펜옥시아닐린대신 <중간체 6-d>사용한 것을 제외하고는, 동일한 방법을 이용하여 <중간체 6-e> (9.1g, 48%)을 얻었다.

[0722] 합성예6-(6): 중간체 6-f의 합성

[0723] 하기 반응식 43에 따라 중간체 6-f를 합성하였다:

[0724] <반응식 43>



[0725]

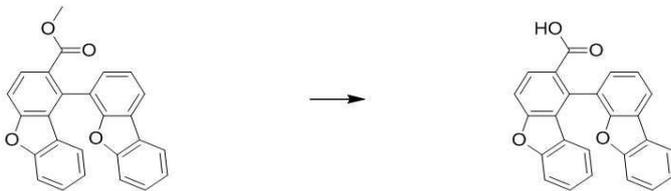
[0726] <중간체 6-e> <중간체 4-a> <중간체 6-f>

[0727] 상기 합성에 4-(2)에서 메틸 5-브로모-2-아이오도벤조에이트 대신 <중간체 6-e>사용한 것을 제외하고는, 동일한 방법을 이용하여 <중간체 6-f> (5.3 g, 52.3%)를 얻었다.

[0728] 합성예6-(7): 중간체 6-g의 합성

[0729] 하기 반응식 44에 따라 중간체 6-g를 합성하였다:

[0730] <반응식 44>



[0731]

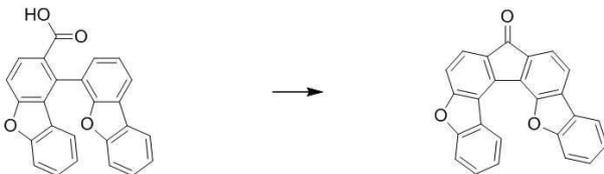
[0732] <중간체 6-f > <중간체 6-g>

[0733] 상기 합성예 1-(2)에서 <중간체 1-a>대신 <중간체 6-f>사용한 것을 제외하고는, 동일한 방법을 이용하여 <중간체 6-g> (4.5g, 88.1%)를 얻었다.

[0734] 합성예6-(8): 중간체 6-h의 합성

[0735] 하기 반응식 45에 따라 중간체 6-h를 합성하였다:

[0736] <반응식 45>



[0737]

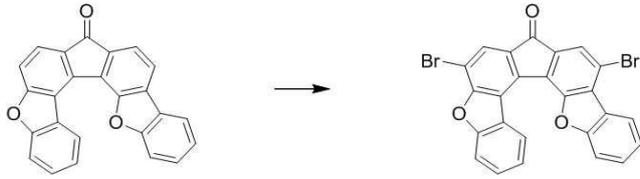
[0738] <중간체 6-g> <중간체 6-h>

[0739] 상기 합성예 1-(3)에서 <중간체 1-b>대신 <중간체 6-g>사용한 것을 제외하고는, 동일한 방법을 이용하여 <중간체 6-h> (3.8g, 88.8%)를 얻었다.

[0740] 합성예6-(9): 중간체 6-i의 합성

[0741] 하기 반응식 46에 따라 중간체 6-i를 합성하였다:

[0742] <반응식 46>



[0743]

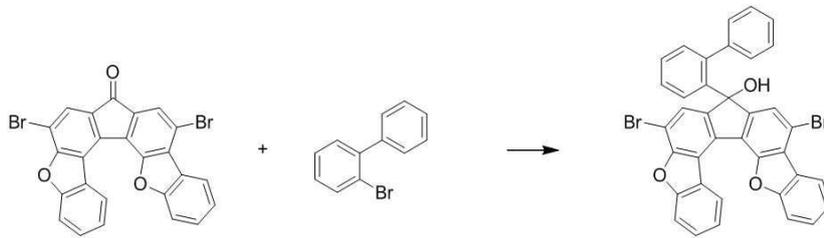
[0744] <중간체 6-h> <중간체 6-i>

[0745] 상기 합성예 1-(4)에서 <중간체 1-c>대신 <중간체 6-h>사용한 것을 제외하고는, 동일한 방법을 이용하여 <중간체 6-i> (3g, 55%)를 얻었다

[0746] 합성예6-(10): 중간체 6-j의 합성

[0747] 하기 반응식 47에 따라 중간체 6-j를 합성하였다:

[0748] <반응식 47>



[0749]

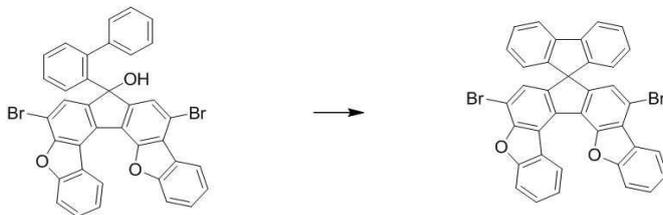
[0750] <중간체 6-i> <중간체 6-j>

[0751] 상기 합성예 1-(5)에서 <중간체 1-d>대신 <중간체 6-i>사용한 것을 제외하고는, 동일한 방법을 이용하여 <중간체 6-j> (2.5g, 64%)를 얻었다

[0752] 합성예6-(10): 중간체 6-k의 합성

[0753] 하기 반응식 48에 따라 중간체 6-k를 합성하였다:

[0754] <반응식 48>



[0755]

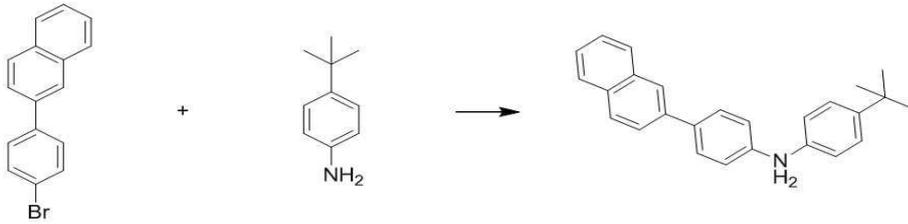
[0756] <중간체 6-j> <중간체 6-k>

[0757] 상기 합성예 1-(6)에서 <중간체 1-e>대신 <중간체 6-j>사용한 것을 제외하고는, 동일한 방법을 이용하여 <중간체 6-k> (2.2g, 90.4%)를 얻었다

[0758] 합성예6-(11): 중간체 6-l의 합성

[0759] 하기 반응식 49에 따라 중간체 6-l를 합성하였다:

[0760] <반응식 49>



[0761]

[0762]

<중간체 6-1>

[0763]

250ml 둥근바닥플라스크 반응기에 1-브로모-4-(2-나프틸)벤젠 (10.0g, 0.035mol), 4-터셔리부틸아닐린 (5.8g, 0.039mol), 트리스(디벤질리덴아세톤)디팔라듐(0) (0.65g, 0.0007mol), 소듐터셔리부톡사이드(6.79g, 0.0706mol), 2,2'-비스(디페닐포스포노)-1,1'-비나프탈렌(0.44g, 0.0007mol) 톨루엔 100ml을 넣고 3시간 환류 교반하였다. 반응 완료 후 상온 냉각 후 에틸아세테이트와 물로 추출하였다. 유기층은 분리하여 마그네슘설페이트로 무수처리 후 감압 농축 하였다. 컬럼크로마토그래피로 분리 정제하여 <중간체 6-1>(10g, 80%)을 얻었다.

[0764]

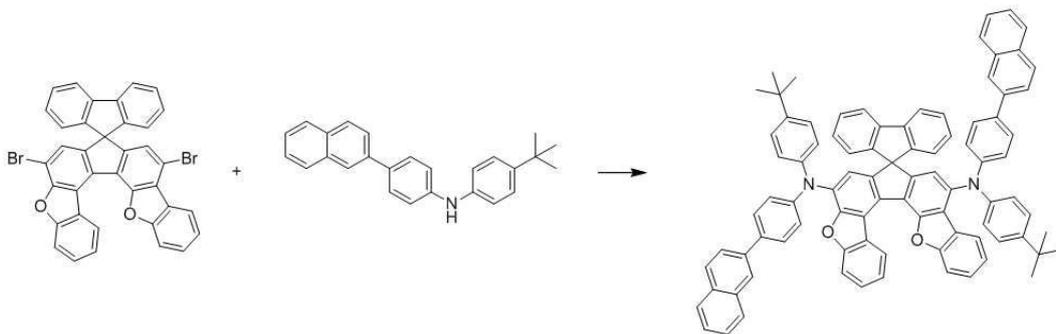
합성예6-(12): 화학식 97의 합성

[0765]

하기 반응식 50에 따라 화학식 97을 합성하였다:

[0766]

<반응식 50>



[0767]

[0768]

<중간체 6-k> <중간체 6-1> <화학식 97>

[0769]

상기 합성예 1-(7)에서 <중간체 1-f> 대신 <중간체 6-k>를 비스(4-터셔리부틸페닐)아민대신 <중간체 6-1>사용한 것을 제외하고는, 동일한 방법을 이용하여 <화학식 97> (1.6 g, 38%)을 얻었다.

[0770]

MS (MALDI-TOF) : m/z 1194.5 [M^+]

[0771]

II. 호스트 화합물의 제조예

[0772]

합성예 1: 화합물 1의 합성

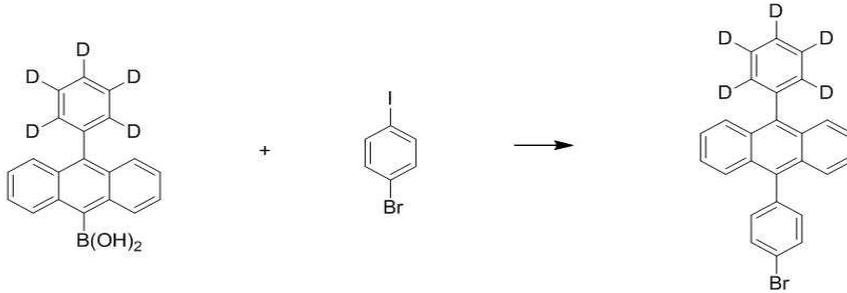
[0773]

합성예 1-(1): 중간체 1-a의 합성

[0774]

하기 반응식 1에 따라, 중간체 1-a를 합성하였다:

[0775] <반응식 1>



[0776]

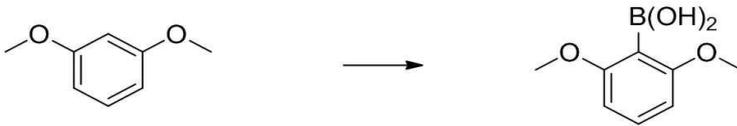
[0777] <중간체 1-a>

[0778] 500mL 둥근바닥플라스크 반응기에 (10-페닐(d5)-안트라센-9-보론산 (38.6g, 127mmol), 1-브로모-4-아이오도벤젠 (30.0g, 106 mmol), 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐 (3.43g, 3 mmol), 포타슘카보네이트(27.35 g, 197.9mmol)을 넣고 톨루엔 150 mL, 테트라하이드로퓨란 150mL, 물 60 mL를 넣었다. 반응기의 온도를 90도로 승온시키고 밤새 교반시켰다. 반응이 종료되면 반응기의 온도를 실온으로 낮추고 에틸아세테이트로 추출하고 유기층을 분리하였다. 유기층은 감압농축 후 컬럼크로마토그래피로 분리하여 <중간체 1-a>를 얻었다.(35.0g, 79.7%)

[0779] 합성예 1-(2): 중간체 1-b의 합성

[0780] 하기 반응식 2에 따라 중간체 1-b를 합성하였다:

[0781] <반응식 2>



[0782]

[0783] <중간체 1-b>

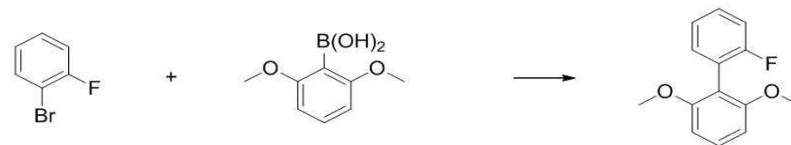
[0784] 잘 건조된 2L 둥근바닥플라스크 반응기에 1,3-디메톡시벤젠 (100.0g, 0.724mol), 테트라하이드로퓨란 800ml을 넣어 녹였다. 반응 용액은 질소분위기에서 -10도로 냉각 후 노말부틸리튬 (543ml, 0.868mol)을 천천히 적가하였다. 동일 온도에서 4시간 교반 후 -78도로 냉각 하였다. 동일 온도를 유지하며 트리메틸보레이트(112.8g, 1.086mol)을 30분 동안 천천히 적가 후 상온에서 밤새 교반하였다. 반응 완료 후 2노말 염산을 천천히 적가하여 산성화 하였다. 물과 에틸아세테이트로 추출하여 유기층 분리후 마그네슘설페이트로 수분을 제거하였다. 물질은 감압 농축한 후 헵탄으로 결정화였다. 생성된 고체는 여과 후 헵탄으로 씻어주어

[0785] <중간체 1-b>를 얻었다.(92.0g, 69%)

[0786] 합성예 1-(3): 중간체 1-c의 합성

[0787] 하기 반응식 3에 따라 중간체 1-c를 합성하였다:

[0788] <반응식 3>



[0789]

[0790] <중간체 1-b> <중간체 1-c>

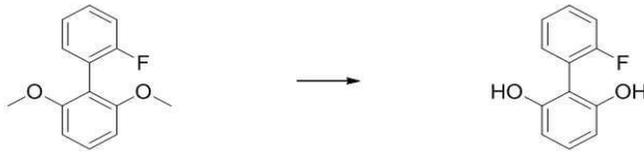
[0791] 2L 둥근바닥플라스크 반응기에 1-브로모-2-플루오로 벤젠 (80.0g, 0.457mol), <중간체 1-b> (91.5g, 0.503mol), 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐 (11.6g, 0.01mol), 포타슘카보네이트 (126.4 g, 0.914mol)을 넣

고 톨루엔 400 mL, 테트라하이드로퓨란 400mL, 물 160 mL를 넣었다. 반응기의 온도를 80도로 승온시키고 밤새 교반시켰다. 반응이 종료되면 반응기의 온도를 실온으로 낮추고 에틸아세테이트로 추출하고 유기층을 분리하였다. 유기층은 감압농축 후 컬럼크로마토그래피로 분리하여 <중간체 1-c>를 얻었다. (85.0g, 80%)

[0792] 합성예 1-(4): 중간체 1-d의 합성

[0793] 하기 반응식 4에 따라 중간체 1-d를 합성하였다:

[0794] <반응식 4>



[0795]

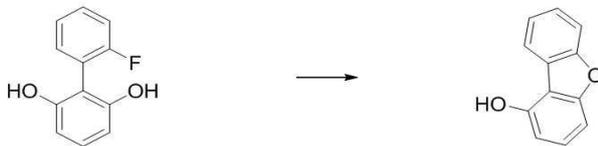
[0796] <중간체 1-c> <중간체 1-d>

[0797] 2L 둥근바닥플라스크 반응기에 <중간체 1-c> (85.0g, 0.366mol)을 넣고 아세트산 510ml, 브롬화수소산 340ml을 넣고 밤새 환류 교반하였다. 반응이 완료되면 상온으로 냉각 후 차가운 물 1000ml에 조금씩 적가 하였다. 용액은 물과 에틸아세테이트로 추출하여 유기층을 분리하였다. 유기층은 탄산수소나트륨 수용액 400ml로 씻은 후 감압 농축 하였다. 물질은 컬럼크로마토그래피로 분리정제하여 <중간체 1-d>를 얻었다. (71g, 95%)

[0798] 합성예 1-(5): 중간체 1-e의 합성

[0799] 하기 반응식 5에 따라 중간체 1-e를 합성하였다:

[0800] <반응식 5>



[0801]

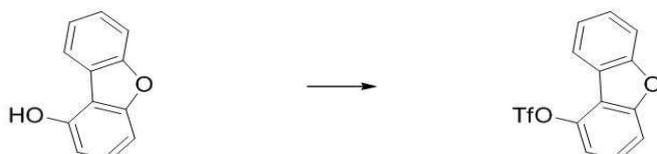
[0802] <중간체 1-d> <중간체 1-e>

[0803] 2L 둥근바닥플라스크 반응기에 <중간체 1-d> (71.0, 39mmol), 탄산칼륨(96.1g, 0.695mol), 1-메틸-2-피롤리디논 1060ml 을 넣고 120도에서 밤새 교반 하였다. 반응 완료되면 상온 냉각 후 차가운 물 1000ml에 적가하였다. 물과 에틸아세테이트로 추출 후 유기층을 분리 감압농축 하였다. 물질은 컬럼크로마토그래피로 분리 정제하여 <중간체 1-e>를 얻었다. (60.0g, 93.7%)

[0804] 합성예 1-(6): 중간체 1-f의 합성

[0805] 하기 반응식 6에 따라 중간체 1-f를 합성하였다:

[0806] <반응식 6>



[0807]

[0808] <중간체 1-e> <중간체 1-f>

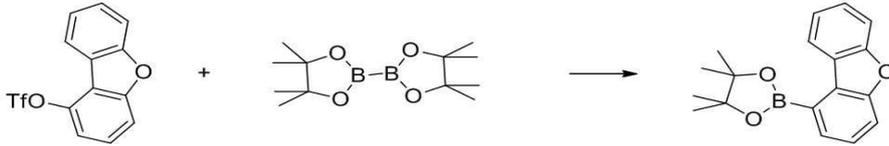
[0809] 2L 둥근바닥플라스크 반응기에 <중간체 1-e> (60.0g, 0.326mol)와 메틸렌클로라이드 600ml을 넣어 녹인 후 피리딘 (38.7g, 0.489mol)을 천천히 넣어 상온에서 30분 교반 하였다. 반응 용액은 0도로 냉각 후 트리플루오로메탄

설포닐 언하이드라이드 (137.8g, 0.489mol)을 동일 온도 유지하며 적가하였다. 상온에서 5시간 교반 후 반응 용액에 물 100ml을 천천히 넣고 10분 교반하였다. 물과 에틸아세테이트로 추출하여 유기층 분리 감압 농축 하였다. 물질은 컬럼크로마토그래피로 분리 정제하여 <중간체 1-f>를 얻었다. (87g, 84.5%)

[0810] 합성예 1-(7): 중간체 1-g의 합성

[0811] 하기 반응식 7에 따라 중간체 1-g를 합성하였다:

[0812] <반응식 7>



[0813]

[0814] <중간체 1-f>

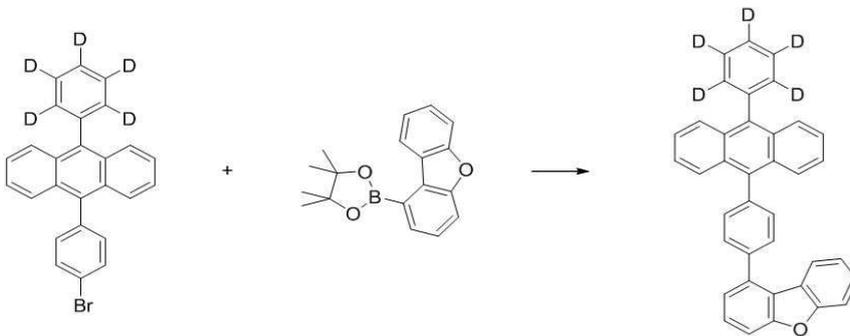
<중간체 1-g>

[0815] 2L 둥근바닥플라스크 반응기에 <중간체 1-f> (87.0g, 0.275mol), 비스(피나콜라토)디보론 (83.8g, 0.330mol), 1,1'-비스(디페닐포스포노)페로센-팔라듐(II)디클로라이드 (4.5g, 0.006mol), 포타슘아세테이트 (54.0g, 0.550mol), 1,4-다이옥산 870ml을 넣고 밤새 환류 교반하였다. 반응 완료 후 셀라이트 패드를 통과시켜 여액을 감압 농축 하였다. 물질은 컬럼크로마토그래피로 분리 정제하여 <중간체 1-g>를 얻었다. (65.3g, 80.7%)

[0816] 합성예 1-(8): 화합물 1의 합성

[0817] 하기 반응식 8에 따라 화합물 1을 합성하였다:

[0818] <반응식 8>



[0819]

[0820] <중간체 1-a>

<중간체 1-g>

<화합물 1>

[0821] 250mL 둥근바닥플라스크 반응기에 <중간체 1-a> (5.5g, 13mmol), <중간체 1-g> (4.7g, 16 mmol), 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐 (0.46g, 3mmol), 포타슘카보네이트 (3.67 g, 26.5mmol)을 넣고 톨루엔 30 mL, 1,4-다이옥산 30mL, 물 11 mL를 넣었다. 반응기의 온도를 90도로 승온시키고 밤새 교반시켰다. 반응이 종료되면 반응기의 온도를 실온으로 낮추고 에틸아세테이트로 추출하고 유기층을 분리하였다. 유기층은 감압농축 후 컬럼크로마토그래피로 분리하였다. 톨루엔과 아세톤으로 재결정하여 <화합물 1>를 얻었다.(3.2g, 48%)

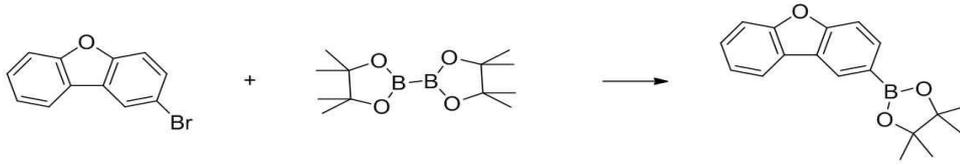
[0822] MS : m/z 502.2 [M⁺]

[0823] 합성예 2: 화합물 13의 합성

[0824] 합성예 2-(1): <중간체2-a>의 합성

[0825] 하기 반응식 9에 따라 중간체 2-a를 합성하였다:

[0826] <반응식 9>



[0827]

[0828]

<중간체 2-a>

[0829]

2L 둥근바닥플라스크 반응기에 2-브로모디벤조퓨란 (70.0g, 0.283mol), 비스(피나콜라토)디보론 (86.3g, 0.340mol), 1,1'-비스(디페닐포스포노)페로센-팔라듐(II)디클로라이드 (4.6g, 0.006mol), 포타슘아세테이트 (56.6g, 0.567mol), 1,4-다이옥산 700ml을 넣고 밤새 환류 교반하였다. 반응 완료 후 셀라이트 패드를 통과시켜 여액을 감압 농축 하였다. 물질은 컬럼크로마토그래피로 분리 정제하여 <중간체 2-a>를 얻었다. (66.4g, 79%)

[0830]

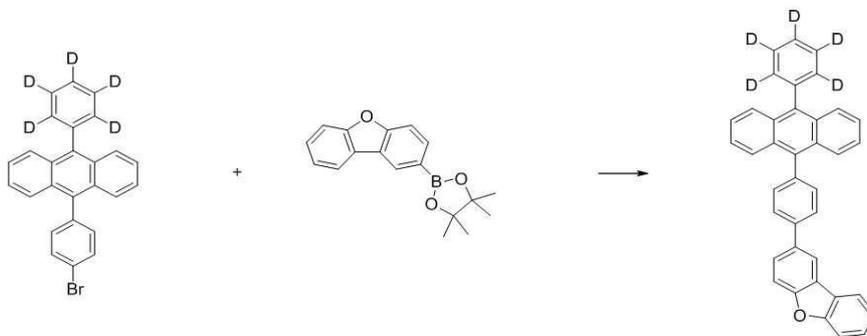
합성예 2-(2): 화합물 13의 합성

[0831]

하기 반응식 10에 따라 화합물 13을 합성하였다:

[0832]

<반응식 10>



[0833]

[0834]

<중간체 1-a> <중간체 2-a> <화합물 13>

[0835]

상기 합성예 1-(8)에서 <중간체 1-g>대신 <중간체 2-a>사용한 것을 제외하고는, 동일한 방법을 이용하여 <화합물 13> (3.0 g, 66.1%)를 얻었다.

[0836]

MS : m/z 502.2 [M⁺]

[0837]

합성예 3: 화합물 22의 합성

[0838]

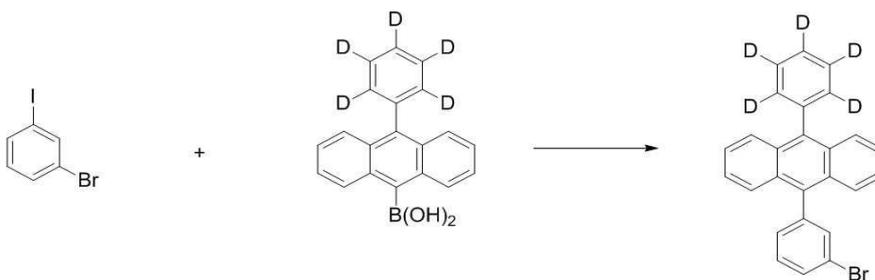
합성예 3-(1): 중간체 3-a의 합성

[0839]

하기 반응식 11에 따라 중간체 3-a를 합성하였다:

[0840]

<반응식 11>



[0841]

[0842]

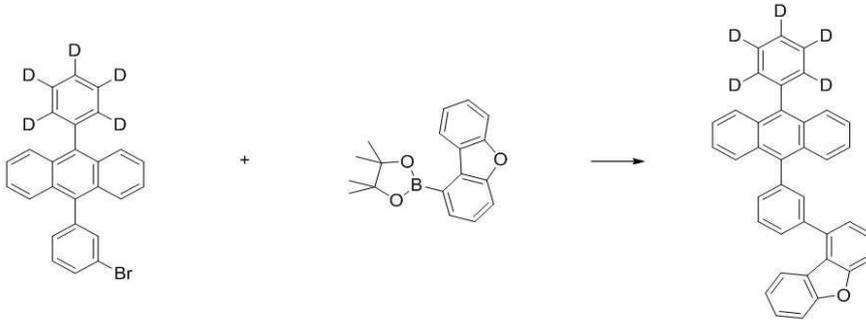
<중간체 3-a>

[0843] 상기 합성예 1-(1)에서 1-브로모-4-아이오도벤젠 대신 1-브로모-3-아이오도벤젠 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법을 이용하여 <중간체 3-a> (32 g, 72.8%)를 얻었다.

[0844] 합성예 3-(2): 화합물 22의 합성

[0845] 하기 반응식 12에 따라 화합물 22을 합성하였다:

[0846] <반응식 12>



[0847]

[0848] <중간체 3-a> <중간체 1-g> <화합물 22>

[0849] 상기 합성예 1-(8)에서 <중간체 1-a>대신 <중간체 3-a>사용한 것을 제외하고는, 동일한 방법을 이용하여 <화합물 22> (3.5 g, 57.8%)를 얻었다.

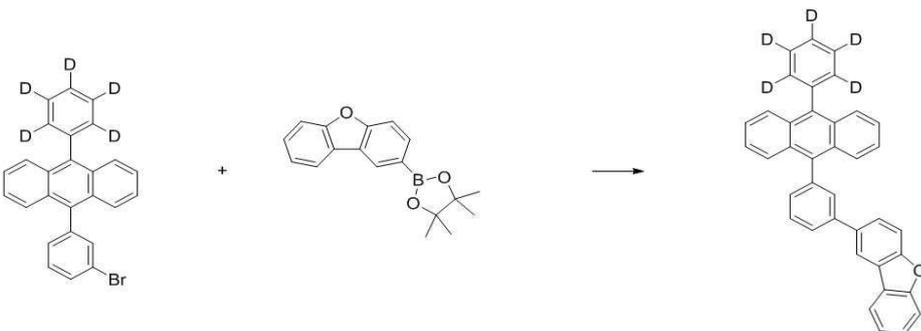
[0850] MS : m/z 502.2 [M⁺]

[0851] 합성예 4: 화합물 31의 합성

[0852] 합성예 4-(1): 화합물 31의 합성

[0853] 하기 반응식 13에 따라 화합물 31를 합성하였다:

[0854] <반응식 13>



[0855]

[0856] <중간체 3-a> <중간체 2-a> <화합물 31>

[0857] 상기 합성예 2-(2)에서 <중간체 1-a>대신 <중간체 3-a>사용한 것을 제외하고는, 동일한 방법을 이용하여 <화합물 31> (2.7 g, 44.6%)를 얻었다.

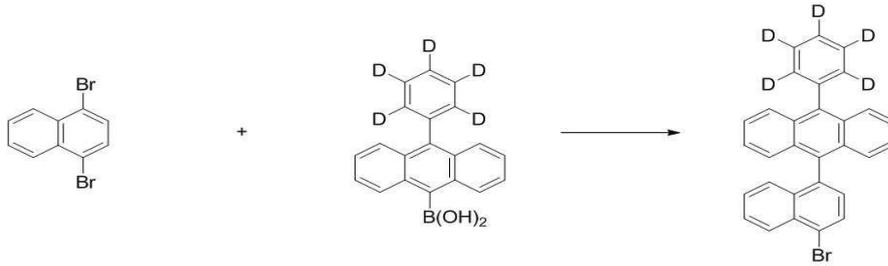
[0858] MS : m/z 502.2 [M⁺]

[0859] 합성예 5: 화합물 43의 합성

[0860] 합성예 5-(1): 중간체 5-a의 합성

[0861] 하기 반응식 14에 따라 중간체 5-a를 합성하였다:

[0862] <반응식 14>



[0863]

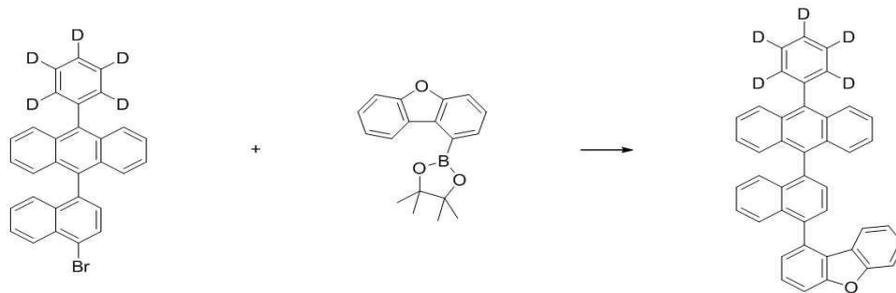
[0864] <중간체 5-a>

[0865] 상기 합성예 1-(1)에서 1-브로모-4-아이오도벤젠 대신 1,4-디브로모나프탈렌 사용한 것을 제외하고는 동일한 방법을 이용하여 <중간체 5-a> (29 g, 59.5%)를 얻었다.

[0866] 합성예 5-(2): 화합물 43의 합성

[0867] 하기 반응식 15에 따라 화합물 43를 합성하였다:

[0868] <반응식 15>



[0869]

[0870] <중간체 5-a> <중간체 1-g> <화합물 43>

[0871] 상기 합성예 1-(8)에서 <중간체 1-a>대신 <중간체 5-a>사용한 것을 제외하고는, 동일한 방법을 이용하여 <화합물 43> (4.2 g, 69.4%)를 얻었다.

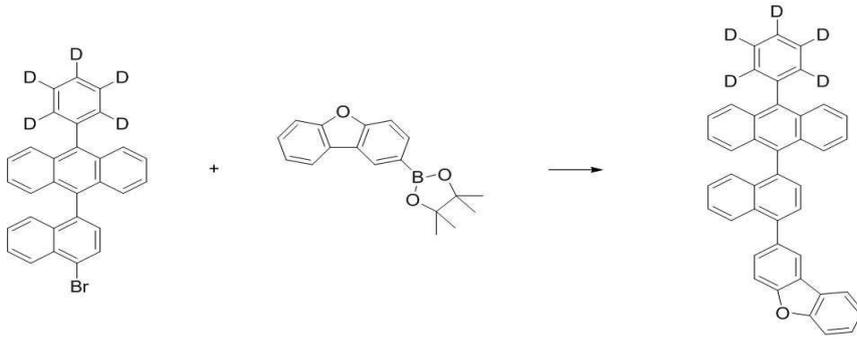
[0872] MS : m/z 552.2 [M⁺]

[0873] 합성예 6: 화합물 52의 합성

[0874] 합성예 6-(1): 화합물 52의 합성

[0875] 하기 반응식 16에 따라 화합물 52를 합성하였다:

[0876] <반응식 16>



[0877]

[0878] <중간체 5-a> <중간체 2-a> <화합물 52>

[0879] 상기 합성예 2-(2)에서 <중간체 1-a>대신 <중간체 5-a>사용한 것을 제외하고는, 동일한 방법을 이용하여 <화합물 52> (4.0 g, 67.4%)를 얻었다.

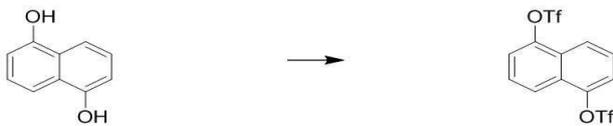
[0880] MS : m/z 552.2 [M⁺]

[0881] 합성예 7: 화합물 61의 합성

[0882] 합성예 7-(1): 중간체 7-a의 합성

[0883] 하기 반응식 17에 따라 중간체 7-a를 합성하였다:

[0884] <반응식 17>



[0885]

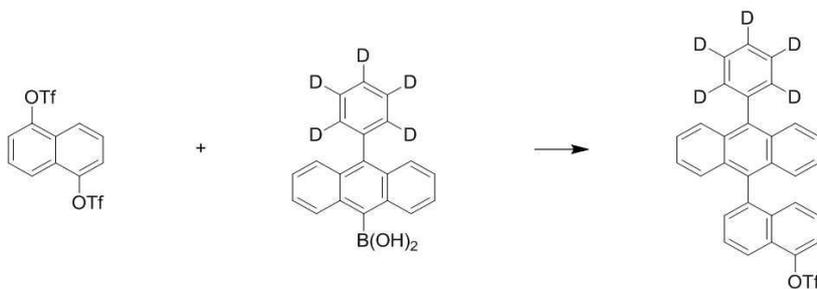
[0886] <중간체 7-a>

[0887] 상기 합성예 1-(6)에서 <중간체 1-e> 대신 1,4-디하이드록시나프탈렌 사용한 것을 제외하고는, 동일한 방법을 이용하여 <중간체 7-a> (244 g, 95%)를 얻었다.

[0888] 합성예 7-(2): 중간체 7-b의 합성

[0889] 하기 반응식 18에 따라 중간체 7-b를 합성하였다:

[0890] <반응식 18>



[0891]

[0892] <중간체 7-a>

<중간체 7-b>

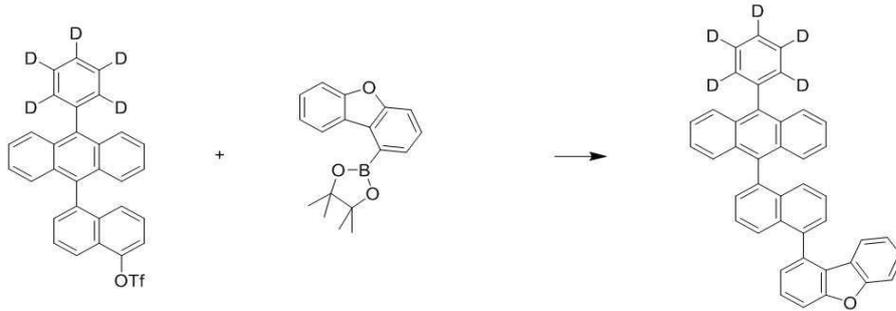
[0893] 2L 둥근바닥플라스크 반응기에 <중간체 7-a> (110.0g, 0.259mol), 10-페닐(d5)-안트라센-9-보론산 (78.6g, 0.259mol), 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐 (6.0g, 5 mmol), 포타슘카보네이트(71.7 g, 0.519mol)을 넣고 톨루엔 770 mL, 에탄올 330mL, 물 220 mL를 넣었다. 반응기의 온도를 60도로 승온시키고 1시간 교반시켰다.

반응이 종료되면 반응기의 온도를 실온으로 낮추고 생성된 고체를 여과하였다. 여액은 물과 에틸아세테이트로 추출하여 유기층 분리 감압 농축 하였다. 물질은 톨루엔에 녹여 메탄올로 재결정하여 <중간체 7-b>를 얻었다. (100.0g, 72.3%)

[0894] 합성예 7-(3): 화합물 61의 합성

[0895] 하기 반응식 19에 따라 화합물 61을 합성하였다:

[0896] <반응식 19>



[0897]

[0898] <중간체 7-b> <중간체 1-g> <화합물 61>

[0899] 상기 합성예 1-(8)에서 <중간체 1-a>대신 <중간체 7-b>사용한 것을 제외하고는, 동일한 방법을 이용하여 <화합물 61> (2.8g, 54%)를 얻었다.

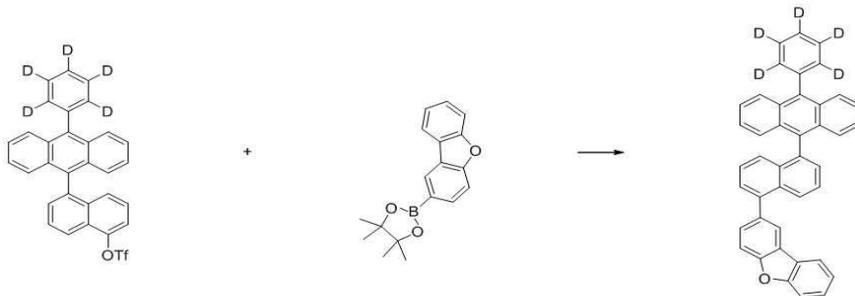
[0900] MS : m/z 552.2 [M⁺]

[0901] 합성예 8: 화합물 70의 합성

[0902] 합성예 8-(1): 화합물 70의 합성

[0903] 하기 반응식 20에 따라 화합물 70를 합성하였다.

[0904] <반응식 20>



[0905]

[0906] <중간체 7-b> <중간체 2-a> <화합물 70>

[0907] 상기 합성예 2-(2)에서 <중간체 1-a>대신 <중간체 7-b>사용한 것을 제외하고는, 동일한 방법을 이용하여 <화합물 70> (2.4 g, 46%)를 얻었다.

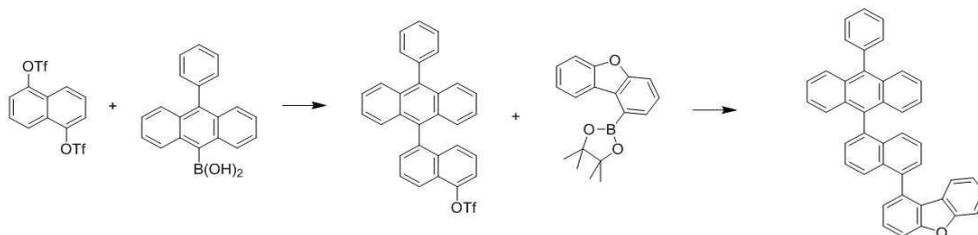
[0908] MS : m/z 552.2 [M⁺]

[0909] 합성예 9: 화합물 118의 합성

[0910] 합성예 9-(1): 화합물 118의 합성

[0911] 하기 반응식 21에 따라 화합물 118을 합성하였다

[0912] <반응식 21>



[0913]

[0914] <중간체 9-a>

<화합물 118>

[0915] 상기 합성예 7-(2) 및 7-(3)에서 각각 10-페닐(d5)-안트라센-9-보론산, <중간체 7-b> 대신 10-페닐(H5)-안트라센-9-보론산, <중간체 9-a> 를 사용한 것을 제외하고는, 동일한 방법을 이용하여 <화합물 118> (3.5g, 58%)를 얻었다.

[0916] MS : m/z 547.2 [M⁺]

[0917] 합성예 10: 화합물 84의 합성

[0918] 합성예 10-(1): 화합물 84의 합성

[0919] 하기 반응식 22에 따라 중간체10-a를 합성하였다

[0920] <반응식 22>



[0921]

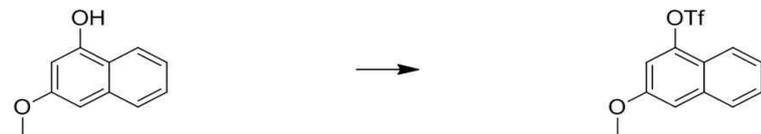
[0922] <중간체 10-a>

[0923] 1L 둥근바닥 플라스크 반응기에 1,2-디하이드록시나프탈렌 (50.0g 0.312mol), 염산17ml, 메탄올 500ml을 넣고 상온에서 3일 교반 하였다. 반응 완료 후 감압 농축하여 컬럼크로마토그래피로 분리 정제하여 <중간체 10-a> (40.0g, 73%)를 얻었다.

[0924] 합성예 10-(2): 중간체 10-b의 합성

[0925] 하기 반응식 23에 따라 중간체10-b를 합성하였다

[0926] <반응식 23>



[0927]

[0928] <중간체 10-a>

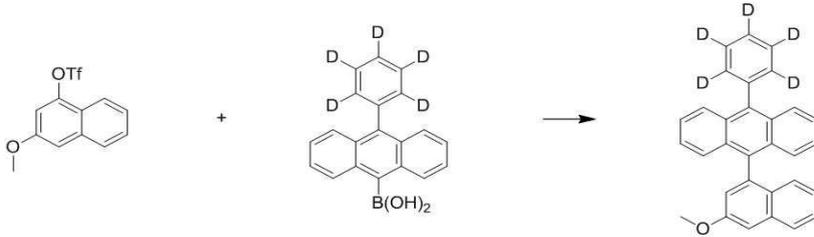
<중간체 10-b>

[0929] 상기 합성예 1-(6)에서 <중간체 1-e> 대신 <중간체 10-a>사용한 것을 제외하고는, 동일한 방법을 이용하여 <중간체 10-b> (65.2 g, 92%)를 얻었다.

[0930] 합성예 10-(3): 중간체 10-c의 합성

[0931] 하기 반응식 24에 따라 중간체 10-c을 합성하였다

[0932] <반응식 24>



[0933]

[0934] <중간체 10-b>

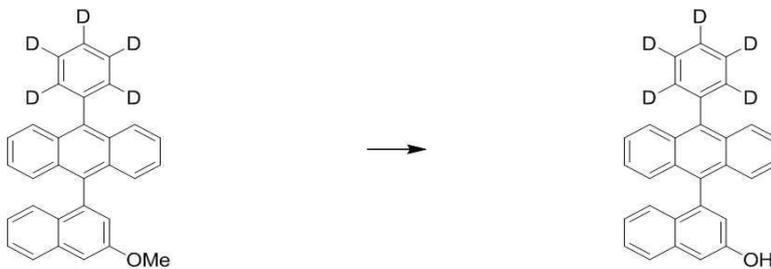
<중간체 10-c>

[0935] 상기 합성에 7-(2)에서 <중간체 7-a>대신 <중간체 10-b>사용한 것을 제외하고는, 동일한 방법을 이용하여 <중간체 10-c> (12.0g, 59%)를 얻었다.

[0936] 합성예 10-(4): 중간체 10-d의 합성

[0937] 하기 반응식 25에 따라 중간체 10-d을 합성하였다

[0938] <반응식 25>



[0939]

[0940] <중간체 10-b>

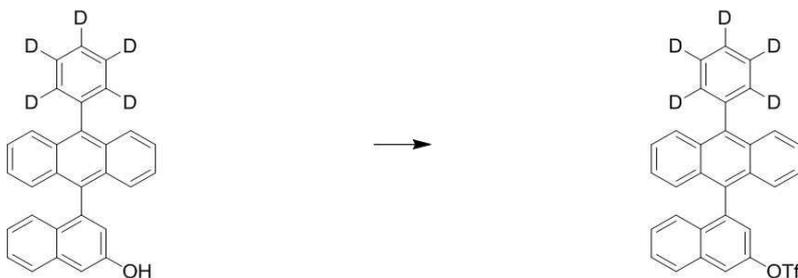
<중간체 10-d>

[0941] 500ml 둥근바닥플라스크 반응기에 <중간체 10-b> (12.0g, 0.028mol), 디클로로메탄 180ml를 넣어 녹인 후 0도로 냉각 하였다. 냉각된 반응용액에 보론트로마이드(43.3g, 0.043mol)을 천천히 적가 후 상온에서 교반하였다. 반응완료 후 반응 용액을 0도로 냉각하였다. 반응 용액에 물 20ml을 천천히 적가 후 물과 에틸아세테이트로 추출하였다. 유기층 분리하여 감압농축 후 아세토나이트릴과 아세톤으로 재결정하여 <중간체 10-d> (10.0g, 86.2%)를 얻었다.

[0942] 합성예 10-(5): 중간체 10-e의 합성

[0943] 하기 반응식 26에 따라 중간체 10-e을 합성하였다

[0944] <반응식 26>



[0945]

[0946] <중간체 10-d>

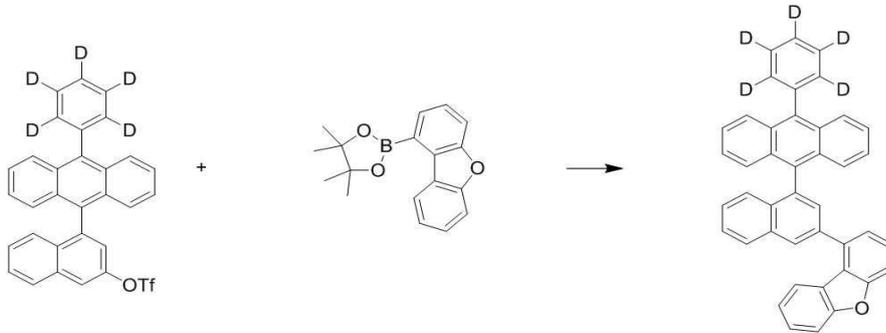
<중간체 10-e>

[0947] 상기 합성예 1-(6)에서 <중간체 1-e> 대신 <중간체 10-d>사용한 것을 제외하고는, 동일한 방법을 이용하여 <중간체 10-e> (11.2 g, 84%)를 얻었다.

[0948] 합성예 10-(6): 화학식 84의 합성

[0949] 하기 반응식 27에 따라 화학식 84를 합성하였다

[0950] <반응식 27>



[0951]

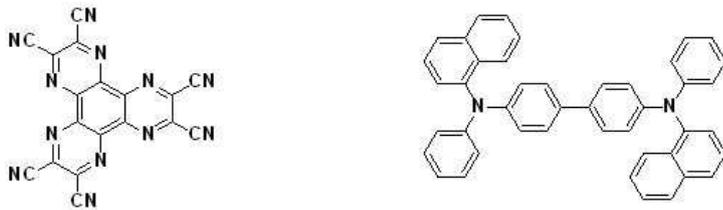
[0952] <중간체 10-e> <중간체 1-g> <화합물 84>

[0953] 상기 합성예1-(8)에서 <중간체 1-a>대신 <중간체 10-e>사용한 것을 제외하고는, 동일한 방법을 이용하여 <화합물 84> (3.8g, 54%)를 얻었다.

[0954] MS : m/z 552.2 [M⁺]

[0955] 실시예 1 ~ 7: 유기발광소자의 제조

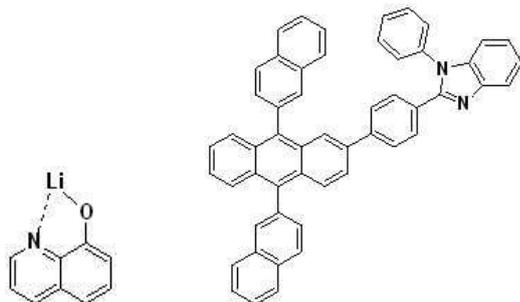
[0956] ITO 글래스의 발광면적이 2mm×2mm 크기가 되도록 패터닝한 후 세정하였다. 상기 ITO 글래스를 진공 챔버에 장착한 후 베이스 압력이 1×10⁻⁷ torr가 되도록 한 후 상기 ITO 위에 HAT-CN(50 Å), α-NPD(600 Å) 순으로 성막하였다. 발광층은 하기 표1에 기재된 호스트와 도판트(3 wt%)를 혼합하여 성막(200Å)한 다음, 이후에 전자 수송층으로 [화학식 E-1]과 [화학식 E-2]을 1:1의 비로 300 Å, 전자 주입층으로 [화학식 E-1]을 10 Å, Al (1000 Å)의 순서로 성막하여 유기발광소자를 제조하였다. 상기 유기발광 소자의 발광특성은 0.4mA에서 측정하였다.



[0957]

[0958] [HAT-CN]

[α-NPD]

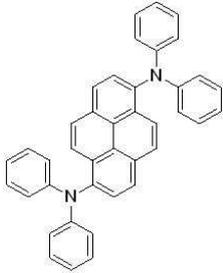


[0959]

[0960] [화학식E-1] [화학식E-2]

[0961] 비교예 1 ~ 7

[0962] 상기 실시예 1 내지 7에서 사용된 도판트 화합물 대신 도판트로서 하기 [BD1]을 사용한 것 이외에는 동일하게 유기발광소자를 제작하였으며, [BD1]의 구조는 다음과 같다.

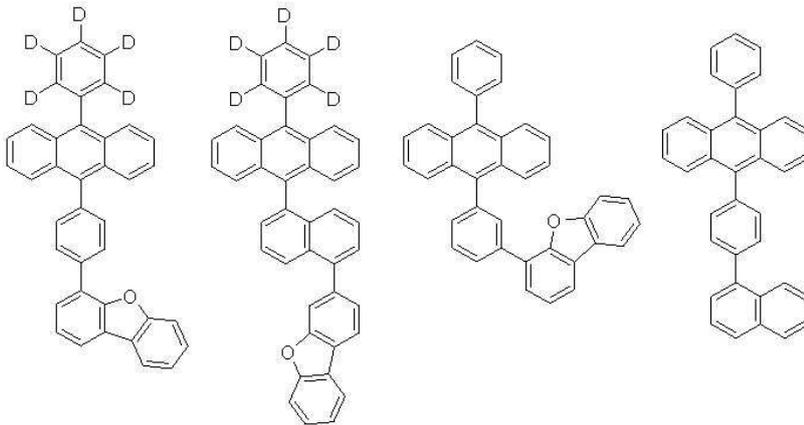


[0963]

[0964] [BD1]

[0965] 비교예 8 ~ 11

[0966] 상기 비교예1에서 사용된 호스트 화합물 대신 하기 [BH1] 내지 [BH4]로표시되는 호스트 화합물을 사용한 것 이외에는 동일하게 유기발광소자를 제작하였으며, 상기 [BH1] 내지 [BH4]의 구조는 다음과 같다.



[0967]

[0968] [BH1] [BH2] [BH3] [BH4]

[0969] 실시예 1 내지 7과, 비교예 1 내지 11에 따라 제조된 유기발광소자에 대하여, 구동전압, 효율 및 수명을 측정한 결과를 하기 [표 1]에 나타내었다. 여기서, T97은 휘도가 초기휘도에 비해 97%로 감소하는데 소요되는 시간을 의미한다.

표 1

[0970]

	호스트	도판트	구동전압(V)	효율(cd/A)	T97(hr)
실시예1	화합물1	화학식1	3.58	5.7	40
실시예2	화합물13	화학식33	3.54	6.5	50
실시예3	화합물22	화학식49	3.73	6.2	52
실시예4	화합물31	화학식76	3.76	6.4	55
실시예5	화합물84	화학식97	3.62	7.0	52
실시예6	화합물52	화학식97	3.53	6.7	47
실시예7	화합물70	화학식97	3.5	6.5	40
비교예1	화합물1	BD1	3.6	5.5	25
비교예2	화합물13	BD1	3.55	6.0	30
비교예3	화합물22	BD1	3.73	5.8	35
비교예4	화합물31	BD1	3.75	6.2	37

비교예5	화합물84	BD1	3.6	6.5	35
비교예6	화합물52	BD1	3.53	6.2	30
비교예7	화합물70	BD1	3.51	6.1	25
비교예8	BH1	BD1	3.97	6.2	30
비교예9	BH2	BD1	3.83	7.3	20
비교예10	BH3	BD1	3.98	6.5	30
비교예11	BH4	BD1	3.9	7.0	35

[0971] 상기 표 1에서 보는 바와 같이 본 발명에 의한 유기발광소자는 종래기술에 의한 비교예 1 내지 비교예 11의 화합물들을 호스트 및 도판트로서 사용한 유기발광소자보다 유기발광소자의 저전압 구동이 가능하며, 장수명의 효과를 보여주고 있어 유기발광 소자로서 응용가능성이 높은 것을 알 수 있다.

도면

도면1

80
70
60
50
40
30
20
10

【심사관 직권보정사항】

【직권보정 1】

【보정항목】 청구범위

【보정세부항목】 제 5항 내지 제 10항, 제 13항

【변경전】

유기발광 화합물

【변경후】

유기 발광 소자