



(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 등록특허공보(B1)

(45) 공고일자 2022년05월26일
(11) 등록번호 10-2402086
(24) 등록일자 2022년05월20일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)

C07D 495/04 (2006.01) C07D 311/78 (2006.01)
C07D 333/50 (2006.01) C07D 405/04 (2006.01)
C07D 409/12 (2006.01) C07D 491/048 (2006.01)
C07D 493/04 (2006.01) C07D 497/04 (2006.01)
C07D 498/04 (2006.01) H01L 51/00 (2006.01)
H01L 51/50 (2006.01)

(52) CPC특허분류

C07D 495/04 (2013.01)
C07D 311/78 (2013.01)

(21) 출원번호 10-2019-0128241

(22) 출원일자 2019년10월16일
심사청구일자 2021년08월30일

(65) 공개번호 10-2021-0045540

(43) 공개일자 2021년04월27일

(56) 선행기술조사문헌

KR1020150124911 A*
KR1020190075798 A
KR1020170076113 A
KR1020160139159 A

*는 심사관에 의하여 인용된 문헌

(73) 특허권자

덕산네오룩스 주식회사

충청남도 천안시 서북구 입장면 쑥골길 21-32

(72) 발명자

이세훈

충청남도 천안시 서북구 입장면 쑥골길 21-32

소기호

충청남도 천안시 서북구 입장면 쑥골길 21-32

(뒷면에 계속)

(74) 대리인

지상협

전체 청구항 수 : 총 12 항

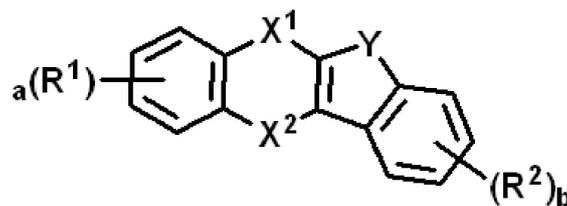
심사관 : 김상인

(54) 발명의 명칭 유기전기 소자용 화합물, 이를 이용한 유기전기소자 및 그 전자 장치

(57) 요약

본 발명은 유기전기소자용 화합물, 이를 이용한 유기전기소자 및 상기 유기전기소자를 포함하는 전자장치에 관한 것으로, 본 발명에 따르면 높은 발광효율, 낮은 구동전압 및 고내열성을 가지는 유기전기소자를 제공할 수 있고, 유기전기소자의 색순도 및 수명을 향상시킬 수 있다.

대표도 - 도4



(52) CPC특허분류

C07D 333/50 (2013.01)

C07D 405/04 (2013.01)

C07D 409/12 (2013.01)

C07D 491/048 (2013.01)

C07D 493/04 (2013.01)

C07D 497/04 (2013.01)

C07D 498/04 (2013.01)

C07D 513/04 (2013.01)

H01L 51/0071 (2013.01)

(72) 발명자

한승훈

충청남도 천안시 서북구 입장면 쑥골길 21-32

최태섭

충청남도 천안시 서북구 입장면 쑥골길 21-32

조석원

충청남도 천안시 서북구 입장면 쑥골길 21-32

오현지

충청남도 천안시 서북구 입장면 쑥골길 21-32

명세서

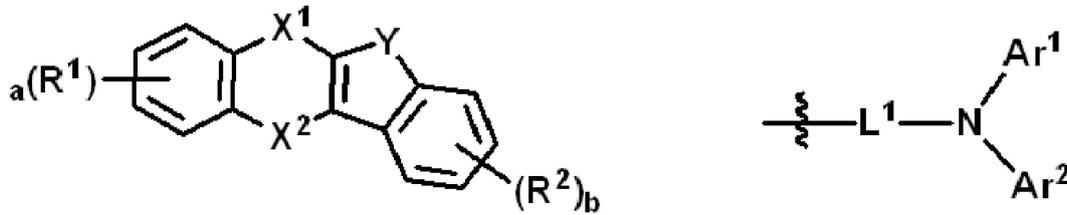
청구범위

청구항 1

하기 화학식 1로 표시되는 화합물:

<화학식 1>

<화학식 1-1>



상기 화학식 1에서,

- 1) X^1 및 X^2 는 서로 독립적으로 CR'R", NR, O 또는 S 중에서 선택되고; 단, X^1 또는 X^2 이 NR이고 다른 하나가 CR'R"인 경우는 제외되며,
- 2) Y는 CR^cR^d, O 또는 S 중에서 선택되고,
- 3) R, R', R", R^c 및 R^d는 서로 독립적으로 수소; C₆~C₆₀의 아릴기; 플루오렌일기; O, N, S, Si 및 P 중 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C₃~C₆₀의 헤테로고리기; C₁~C₃₀의 알킬기; C₂~C₆₀의 알케닐기; 또는 C₆~C₆₀의 아릴옥시기이거나, R'과 R"이 서로 결합하여 스파이로 고리를 형성할 수 있고,
- 4) R¹ 및 R²는 서로 독립적으로 수소; 중수소; 할로젠; 시아노기; 니트로기; C₆~C₆₀의 아릴기; 플루오렌일기; O, N, S, Si 및 P 중 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C₂~C₆₀의 헤테로고리기; C₃~C₆₀의 지방족고리와 C₆~C₆₀의 방향족고리의 융합고리기; C₁~C₃₀의 알킬기; C₂~C₂₀의 알켄일기; C₂~C₂₀의 알킨일기; C₁~C₃₀의 알콕실기; C₆~C₃₀의 아릴옥시기; 및 -L'(N(R^a)(R^b)); 및 화학식 1-1로 이루어진 군에서 선택되고,
- 5) R¹ 및 R²는 중 적어도 하나는 상기 화학식 1-1이고,
- 6) a 및 b는 서로 독립적으로 0~4의 정수이고; 단, a 및 b 중 적어도 하나는 1 이상이고; 상기 a 및 b가 2 이상인 경우, R¹ 및 R²가 각각 복수로서 서로 동일하거나 상이하며, 복수의 R¹끼리 또는 복수의 R²끼리 서로 결합하여 고리를 형성할 수 있고,
- 7) 상기 L'은 단일결합; C₆~C₆₀의 아릴렌기; 플루오렌일렌기; C₃~C₆₀의 지방족고리기; O, N, S, Si 및 P 중 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C₂~C₆₀의 헤테로고리기; 및 이들의 조합으로 이루어진 군에서 선택되며,
- 8) 상기 R^a 및 R^b는 서로 독립적으로 C₆~C₆₀의 아릴기; 플루오렌일기; C₃~C₆₀의 지방족고리기; O, N, S, Si 및 P 중 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C₂~C₆₀의 헤테로고리기; 및 이들의 조합으로 이루어진 군에서 선택되고,
- 9) L¹은 단일결합; C₆~C₆₀의 아릴렌기; 플루오렌일렌기; O, N, S, Si 및 P 중 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C₂~C₆₀의 헤테로고리기; C₃~C₆₀의 지방족고리와 C₆~C₆₀의 방향족고리의 융합고리기; 2개의 지방족 탄화수소기; 또는 이들의 조합이고,

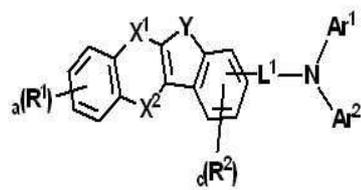
10) Ar¹ 및 Ar²는 서로 독립적으로 C₆~C₆₀의 아릴기; 플루오렌일기; O, N, S, Si 및 P 중 적어도 하나의 헤테로 원자를 포함하는 C₂~C₆₀의 헤테로고리기; C₃~C₆₀의 지방족고리와 C₆~C₆₀의 방향족고리의 융합고리기; C₁~C₆₀의 알킬기; C₂~C₂₀의 알켄일기; C₂~C₂₀의 알킨일기; C₁~C₃₀의 알콕실기; C₆~C₃₀의 아릴옥시기; 또는 이들의 조합; 또는 이웃한 기끼리 서로 결합하여 고리를 형성할 수 있고,

11) R, R', R'', R¹, R², R^a, R^b, R^c, R^d, Ar¹, Ar², L¹, L' 및 이웃한 기끼리 서로 결합하여 형성한 고리는 각각 중수소; 할로겐; C₁~C₂₀의 알킬기 또는 C₆~C₂₀의 아릴기로 치환 또는 비치환된 실란기; 실록산기; 붕소기; 게르마 늑기; 시아노기; 니트로기; C₁~C₂₀의 알킬싸이오기; C₁~C₂₀의 알콕시기; C₆~C₂₀의 아릴알콕시기; C₆~C₂₀의 아릴옥 시기; C₆~C₂₀의 아릴싸이오기; C₁~C₂₀의 알킬기; C₂~C₂₀의 알켄일기; C₂~C₂₀의 알킨일기; C₆~C₂₀의 아릴기; 중수소 로 치환 또는 비치환된 C₆~C₂₀의 아릴기; 플루오렌일기; O, N, S, Si 및 P로 이루어진 군에서 선택된 적어도 하 하나의 헤테로원자를 포함하는 C₂~C₂₀의 헤테로고리기; C₃~C₂₀의 지방족고리; C₇~C₂₀의 아릴알킬기; C₈~C₂₀의 아릴 알켄일기; 및 이들의 조합으로 이루어진 군에서 선택된 하나 이상의 치환기로 더 치환될 수 있다.

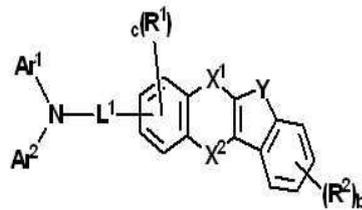
청구항 2

제 1 항에 있어서, 상기 화학식 1이 하기 화학식 2 내지 화학식 6 중 어느 하나로 표시되는 것을 특징으로 하는 화합물:

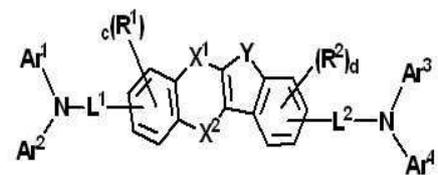
<화학식 2>



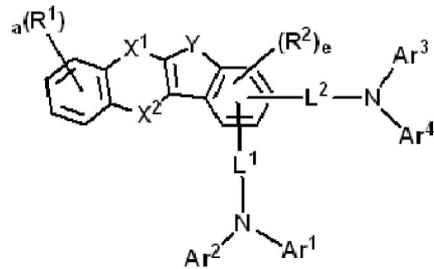
<화학식 3>



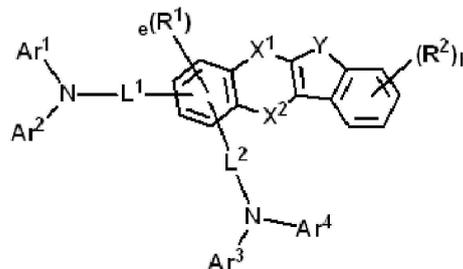
<화학식 4>



<화학식 5>



<화학식 6>



상기 화학식 2 내지 화학식 6에서,

상기 X¹, X², Y, R¹, R², L¹, Ar¹, Ar², a 및 b는 상기 제1항에서 정의된 것과 같고,

상기 c 및 d는 0~3의 정수이고, e는 0~2의 정수이고,

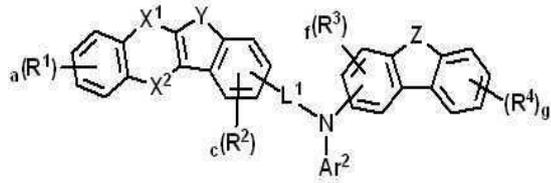
상기 L²는 상기 제1항에서의 L¹의 정의와 동일하고,

상기 Ar³ 및 Ar⁴는 상기 제1항에서의 Ar¹의 정의와 동일하다.

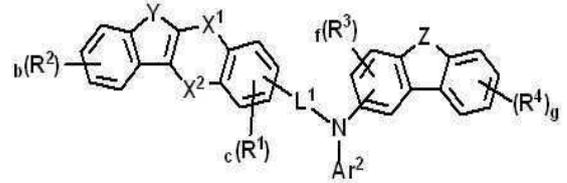
청구항 3

하기 화학식 7 내지 화학식 12 중 어느 하나로 표시되는 화합물:

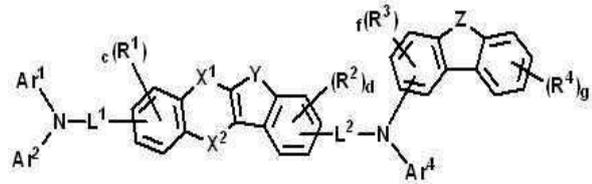
<화학식 7>



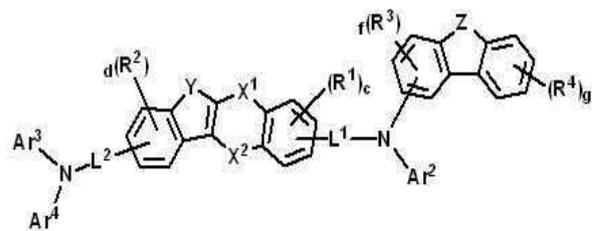
<화학식 8>



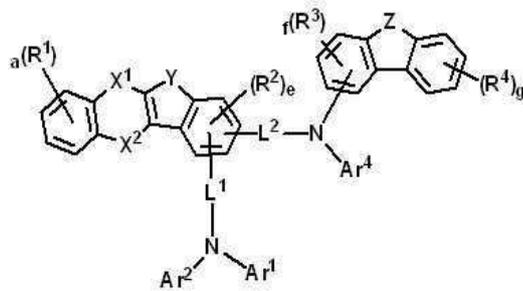
<화학식 9>



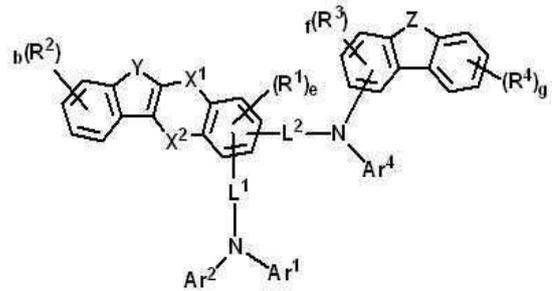
<화학식 10>



<화학식 11>



<화학식 12>



상기 화학식 7 내지 화학식 12에서,

- 1) X^1 및 X^2 는 서로 독립적으로 CR'R", NR, O 또는 S 중에서 선택되고,
- 2) Y는 CR^dR^d, O 또는 S 중에서 선택되고,
- 3) R, R', R", R^c 및 R^d는 서로 독립적으로 수소; C₆-C₆₀의 아릴기; 플루오렌일기; O, N, S, Si 및 P 중 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C₃-C₆₀의 헤테로고리; C₁-C₅₀의 알킬기; C₂-C₆₀의 알케닐기; 또는 C₆-C₆₀의 아릴옥시기이거나, R'과 R"이 서로 결합하여 스파이로 고리를 형성할 수 있고,
- 4) R¹-R⁴는 서로 독립적으로 수소; 중수소; 할로젠; 시아노기; 니트로기; C₆-C₆₀의 아릴기; 플루오렌일기; O, N, S, Si 및 P 중 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C₂-C₆₀의 헤테로고리; C₃-C₆₀의 지방족고리와 C₆-C₆₀의 방향족고리의 융합고리; C₁-C₅₀의 알킬기; C₂-C₂₀의 알켄일기; C₂-C₂₀의 알킨일기; C₁-C₃₀의 알콕실기; C₆-C₃₀의 아릴옥시기; 및 -L'-N(R^a)(R^b)로 이루어진 군에서 선택되고,
- 5) 상기 L'은 단일결합; C₆-C₆₀의 아릴렌기; 플루오렌일렌기; C₃-C₆₀의 지방족고리; O, N, S, Si 및 P 중 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C₂-C₆₀의 헤테로고리; 및 이들의 조합으로 이루어진 군에서 선택되며,
- 6) 상기 R^a 및 R^b는 서로 독립적으로 C₆-C₆₀의 아릴기; 플루오렌일기; C₃-C₆₀의 지방족고리; O, N, S, Si 및 P 중 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C₂-C₆₀의 헤테로고리; 및 이들의 조합으로 이루어진 군에서 선택되고,
- 7) a 및 b는 서로 독립적으로 0~4의 정수이고; 단, a 및 b 중 적어도 하나는 1 이상이고; 상기 a 및 b가 2이

상인 경우, R¹ 및 R²가 각각 복수로서 서로 동일하거나 상이하며, 복수의 R¹끼리 또는 복수의 R²끼리 서로 결합하여 고리를 형성할 수 있고,

8) 상기 c 및 d는 서로 독립적으로 0~3의 정수이고; e는 0~2의 정수이고; 상기 f는 0~3의 정수이고; g는 0~4의 정수이며,

9) L¹ 및 L²는 서로 독립적으로 단일결합; C₆~C₆₀의 아릴렌기; 플루오렌일렌기; O, N, S, Si 및 P 중 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C₂~C₆₀의 헤테로고리기; C₃~C₆₀의 지방족고리와 C₆~C₆₀의 방향족고리의 융합고리기; 2개의 지방족 탄화수소기; 또는 이들의 조합이고,

10) Ar¹~Ar⁴는 서로 독립적으로 C₆~C₆₀의 아릴기; 플루오렌일기; O, N, S, Si 및 P 중 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C₂~C₆₀의 헤테로고리기; C₃~C₆₀의 지방족고리와 C₆~C₆₀의 방향족고리의 융합고리기; C₁~C₆₀의 알킬기; C₂~C₂₀의 알켄일기; C₂~C₂₀의 알킨일기; C₁~C₃₀의 알콕실기; C₆~C₃₀의 아릴옥시기; 또는 이들의 조합; 또는 이웃한 기끼리 서로 결합하여 고리를 형성할 수 있고,

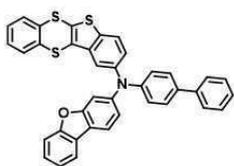
11) 상기 Z는 CR⁵R⁶, NR⁷, O 또는 S 중에서 선택되고; 단, 화학식 8에서, X¹ 및 X² 중 하나가 NR이고 다른 하나가 CR'R"인 경우, Z는 O 또는 S이며,

12) 상기 R⁵ 내지 R⁷은 서로 독립적으로 수소; C₆~C₆₀의 아릴기; 플루오렌일기; C₃~C₆₀의 헤테로고리기; C₁~C₅₀의 알킬기; C₂~C₆₀의 알케닐기; 또는 C₆~C₆₀의 아릴옥시기이거나; R⁵와 R⁶은 서로 결합하여 스파이로 고리를 형성할 수 있고,

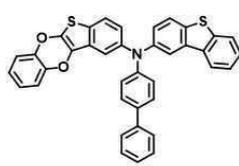
13) R, R', R'', R¹~R⁷, R^a~R^d, Ar¹~Ar⁴, L¹, L' 및 이웃한 기끼리 서로 결합하여 형성한 고리는 각각 중수소; 할로젠; C₁~C₂₀의 알킬기 또는 C₆~C₂₀의 아릴기로 치환 또는 비치환된 실란기; 실록산기; 붕소기; 게르마늄기; 시아노기; 니트로기; C₁~C₂₀의 알킬사이오기; C₁~C₂₀의 알콕시기; C₆~C₂₀의 아릴알콕시기; C₆~C₂₀의 아릴옥시기; C₆~C₂₀의 아릴사이오기; C₁~C₂₀의 알킬기; C₂~C₂₀의 알켄일기; C₂~C₂₀의 알킨일기; C₆~C₂₀의 아릴기; 중수소로 치환 또는 비치환된 C₆~C₂₀의 아릴기; 플루오렌일기; O, N, S, Si 및 P로 이루어진 군에서 선택된 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C₂~C₂₀의 헤테로고리기; C₃~C₂₀의 지방족고리기; C₇~C₂₀의 아릴알킬기; C₈~C₂₀의 아릴알켄일기; 및 이들의 조합으로 이루어진 군에서 선택된 하나 이상의 치환기로 더 치환될 수 있다.

청구항 4

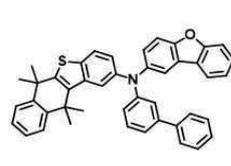
하기 P-1 내지 P-144 중 어느 하나로 표시되는 화합물:



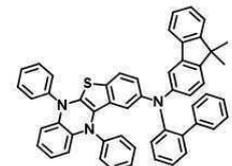
P-1



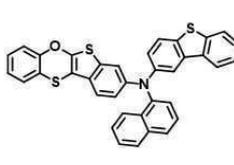
P-2



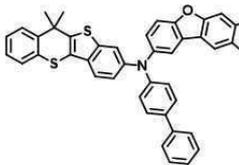
P-3



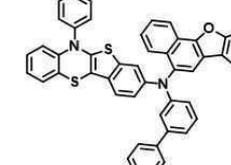
P-4



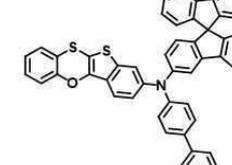
P-5



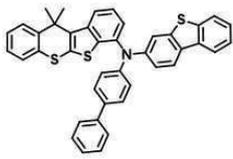
P-6



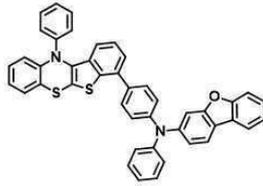
P-7



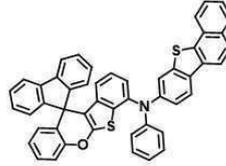
P-8



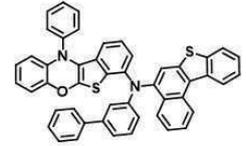
P-9



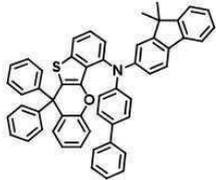
P-10



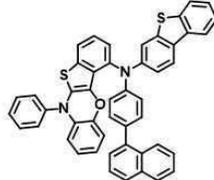
P-11



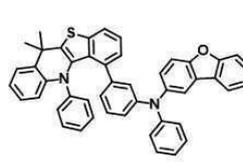
P-12



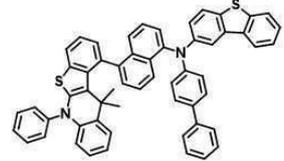
P-13



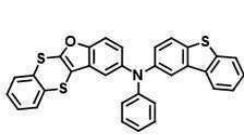
P-14



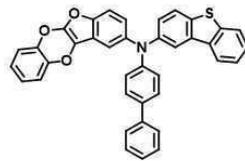
P-15



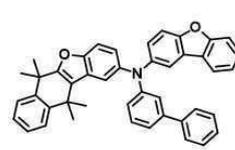
P-16



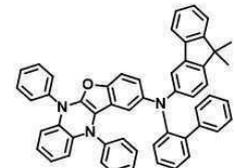
P-17



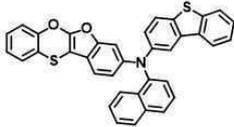
P-18



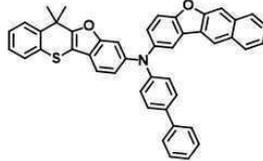
P-19



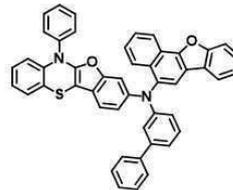
P-20



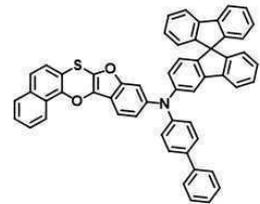
P-21



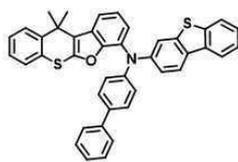
P-22



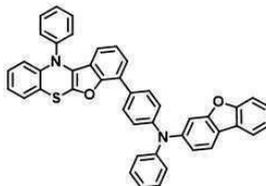
P-23



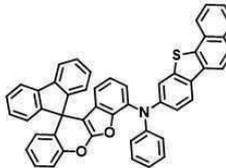
P-24



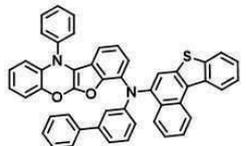
P-25



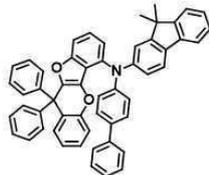
P-26



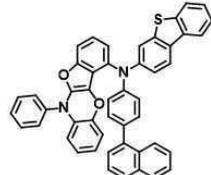
P-27



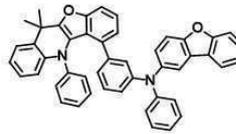
P-28



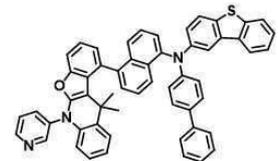
P-29



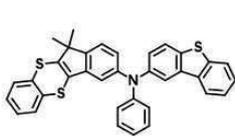
P-30



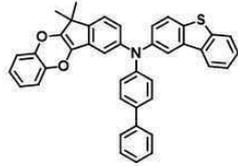
P-31



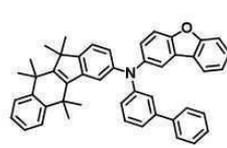
P-32



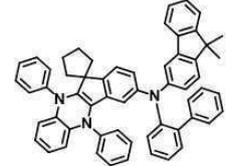
P-33



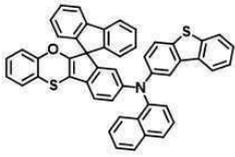
P-33



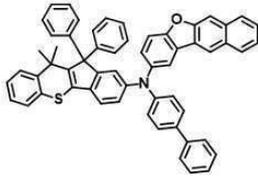
P-35



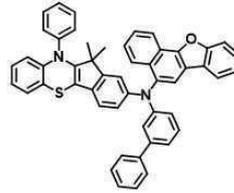
P-36



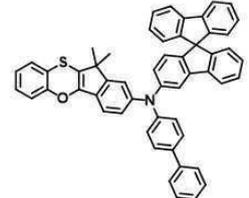
P-37



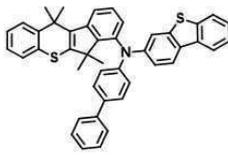
P-38



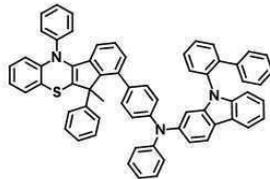
P-39



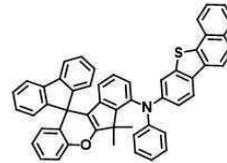
P-40



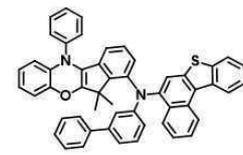
P-41



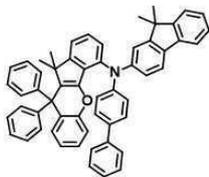
P-42



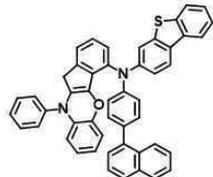
P-43



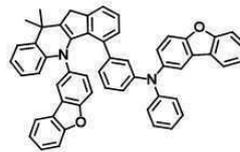
P-44



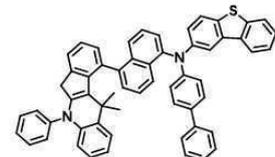
P-45



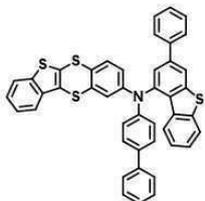
P-46



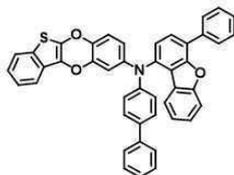
P-47



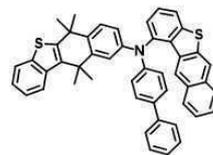
P-48



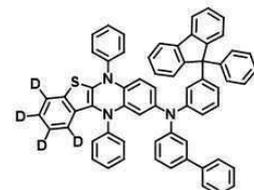
P-49



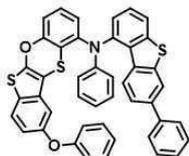
P-50



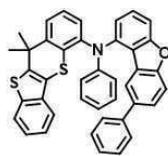
P-51



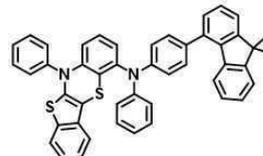
P-52



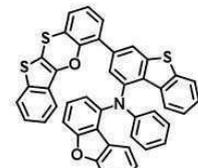
P-53



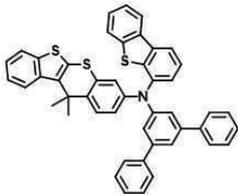
P-54



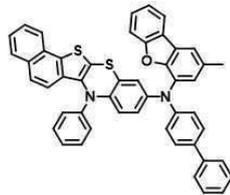
P-55



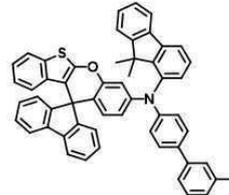
P-56



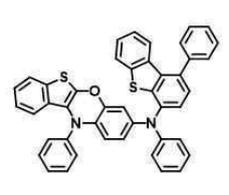
P-57



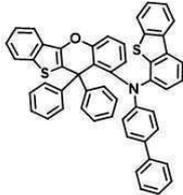
P-58



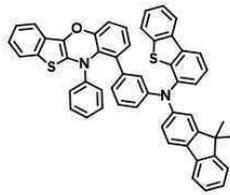
P-59



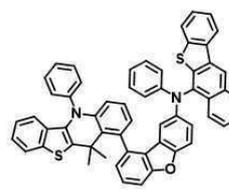
P-60



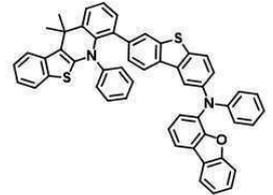
P-61



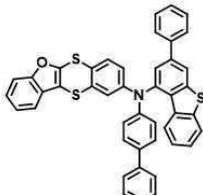
P-62



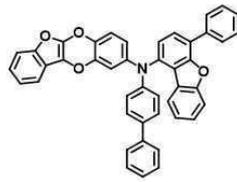
P-63



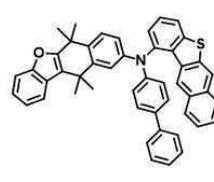
P-64



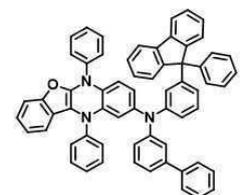
P-65



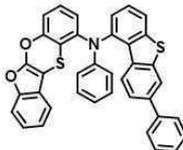
P-66



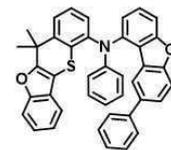
P-67



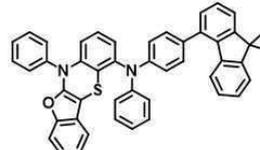
P-68



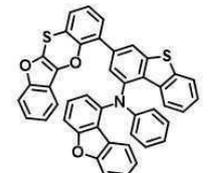
P-69



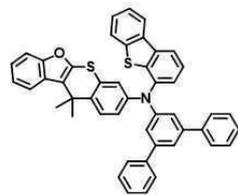
P-70



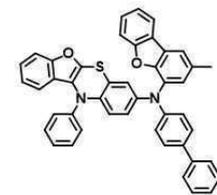
P-71



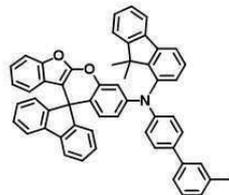
P-72



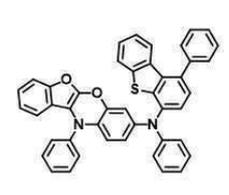
P-73



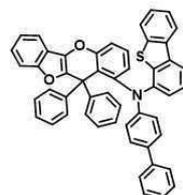
P-74



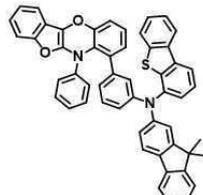
P-75



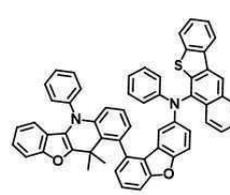
P-76



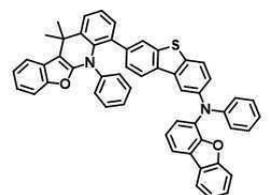
P-77



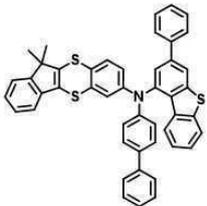
P-78



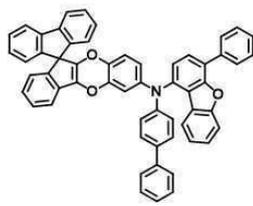
P-79



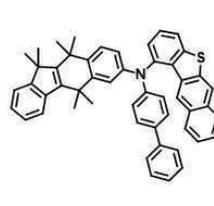
P-80



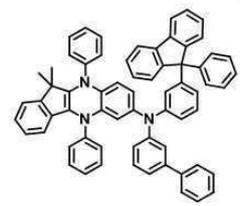
P-81



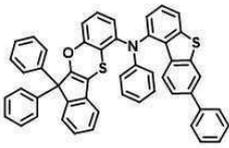
P-82



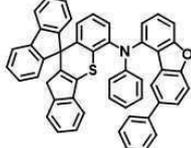
P-83



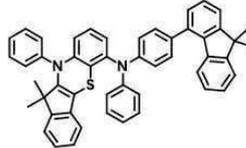
P-84



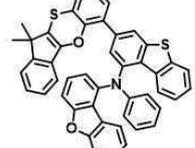
P-85



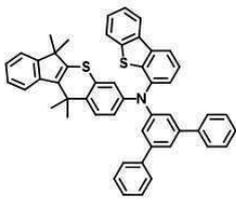
P-86



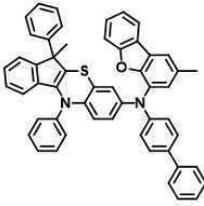
P-87



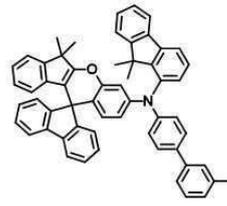
P-88



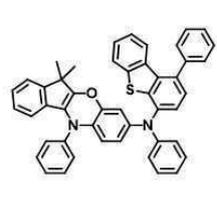
P-89



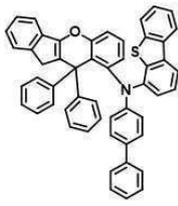
P-90



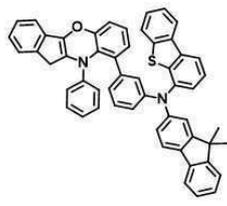
P-91



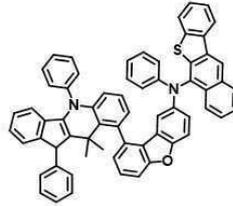
P-92



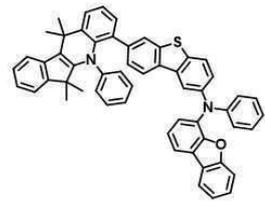
P-93



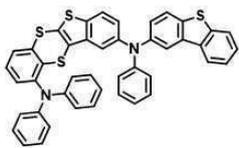
P-94



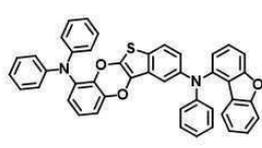
P-95



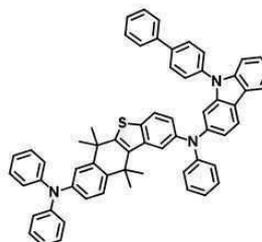
P-96



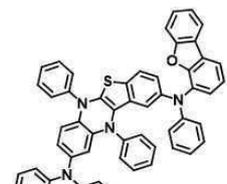
P-97



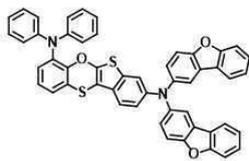
P-98



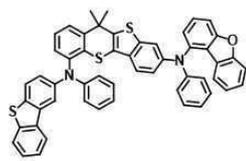
P-99



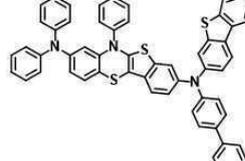
P-100



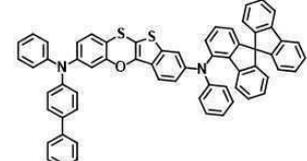
P-101



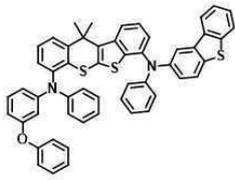
P-102



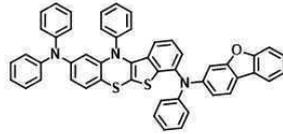
P-103



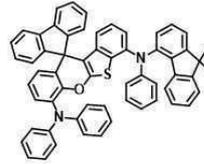
P-104



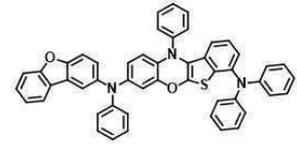
P-105



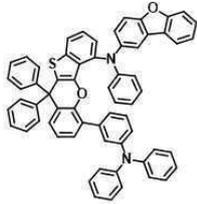
P-106



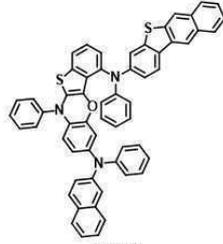
P-107



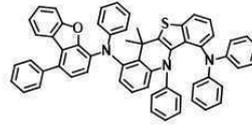
P-108



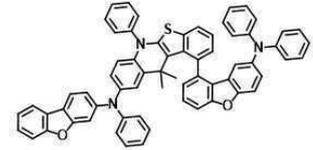
P-109



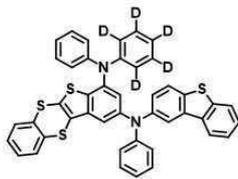
P-110



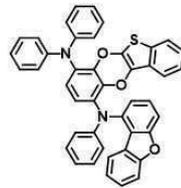
P-111



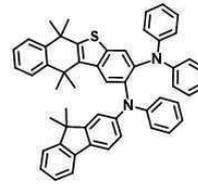
P-112



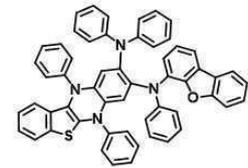
P-113



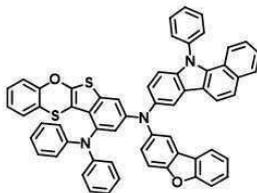
P-114



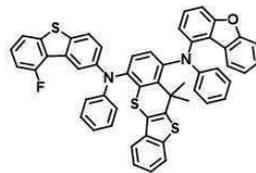
P-115



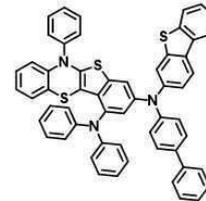
P-116



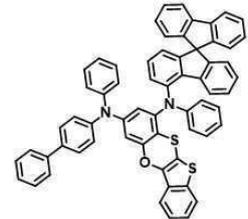
P-117



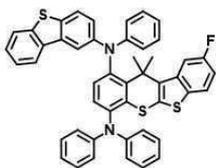
P-118



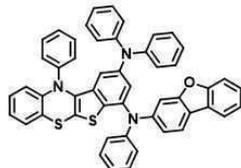
P-119



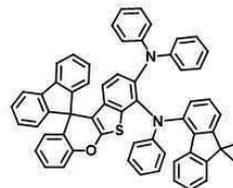
P-120



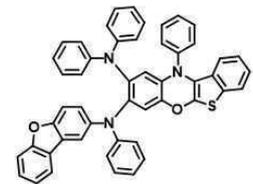
P-121



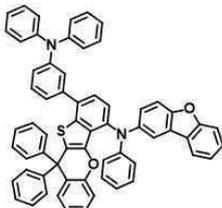
P-122



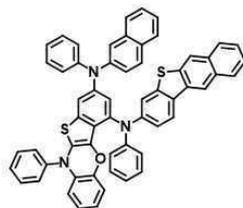
P-123



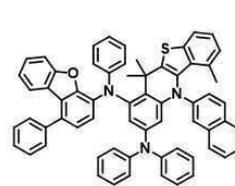
P-124



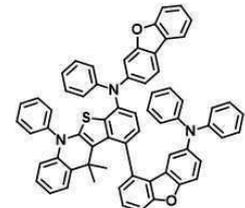
P-125



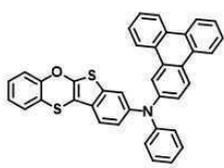
P-126



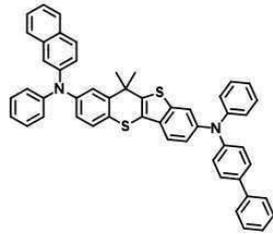
P-127



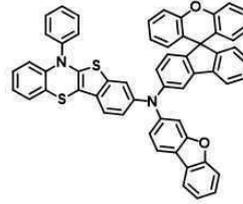
P-128



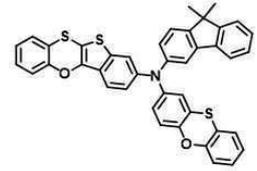
P-129



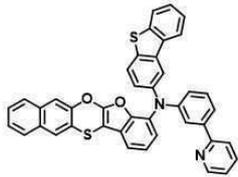
P-130



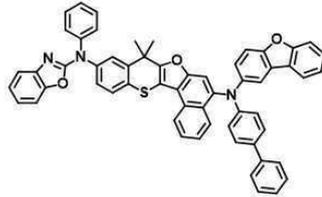
P-131



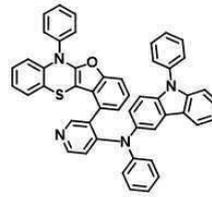
P-132



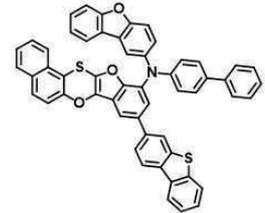
P-133



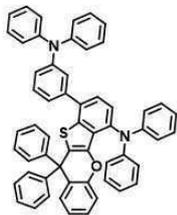
P-134



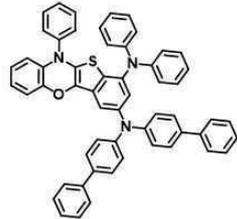
P-135



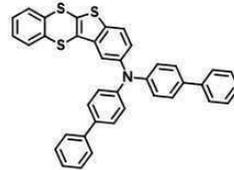
P-136



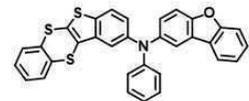
P-137



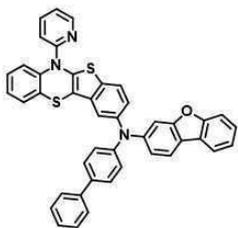
P-138



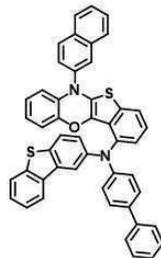
P-139



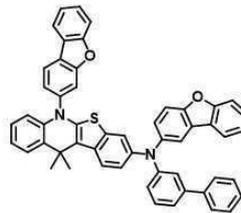
P-140



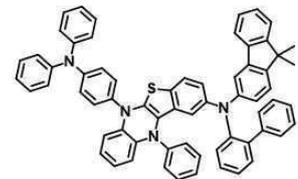
P-141



P-142



P-143



P-144

청구항 5

제1 전극; 제2 전극; 및 상기 제1 전극과 제2 전극 사이에 형성된 유기물층을 포함하고,

상기 유기물층은 제1항 또는 제3항의 화학식으로 표시되는 화합물을 단독 또는 혼합하여 포함하는 것으로 하는 유기전기소자.

청구항 6

제 5 항에 있어서,

상기 유기전기소자는 제1항 또는 제3항의 화학식으로 표시되는 화합물을 단독 또는 혼합하여 포함하는 캡핑층을 더 포함하며,

상기 캡핑층은 상기 제 1전극 또는 제 2전극의 양면 중에서 상기 유기물층과 접하지 않는 일면에 형성되는 것으로 특징으로 하는 유기전기소자.

청구항 7

제 5 항에 있어서,

상기 유기물층은 정공주입층, 정공수송층, 발광보조층, 발광층, 전자수송보조층, 전자수송층 및 전자주입층 중

적어도 하나를 포함하는 것을 특징으로 하는 유기전기소자.

청구항 8

제 7 항에 있어서,

상기 유기물층은 상기 정공수송층, 발광보조층 및 발광층 중 적어도 하나를 포함하는 것을 특징으로 하는 유기 전기소자.

청구항 9

제 5 항에 있어서,

상기 유기물층은 상기 양극 상에 순차적으로 형성된 정공수송층, 발광층 및 전자수송층을 포함하는 스택을 둘 이상 포함하는 것을 특징으로 하는 유기전기소자.

청구항 10

제 9 항에 있어서,

상기 유기물층은 상기 둘 이상의 스택 사이에 형성된 전하생성층을 더 포함하는 것을 특징으로 하는 유기전기소자.

청구항 11

제 5 항의 유기전기소자를 포함하는 디스플레이장치; 및 상기 디스플레이장치를 구동하는 제어부;를 포함하는 전자장치.

청구항 12

제 11 항에 있어서,

상기 유기전기소자는 유기전기발광소자, 유기태양전지, 유기감광체, 유기트랜지스터, 단색 조명용 소자 및 쿼터닷 디스플레이용 소자로 이루어진 군에서 선택되는 것을 특징으로 하는 전자장치.

발명의 설명

기술 분야

[0001] 본 발명은 유기전기소자용 화합물, 이를 이용한 유기전기소자 및 그 전자 장치에 관한 것이다.

배경 기술

[0002] 일반적으로 유기 발광 현상이란 유기 물질을 이용하여 전기에너지를 빛 에너지로 전환시켜주는 현상을 말한다. 유기 발광 현상을 이용하는 유기전기소자는 통상 양극과 음극 및 이 사이에 유기물층을 포함하는 구조를 가진다. 여기서 유기물층은 유기전기소자의 효율과 안정성을 높이기 위하여 각기 다른 물질로 구성된 다층의 구조로 이루어진 경우가 많으며, 예컨대 정공주입층, 정공수송층, 발광층, 전자수송층 및 전자주입층 등으로 이루어질 수 있다.

[0003] 유기전기소자에서 유기물층으로 사용되는 재료는 기능에 따라, 발광재료와 전하수송 재료, 예컨대 정공주입 재료, 정공수송 재료, 전자수송 재료, 전자주입 재료 등으로 분류될 수 있다. 그리고 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/도판트계를 사용할 수 있다. 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.

- [0005] 현재 휴대용 디스플레이 시장은 대면적 디스플레이로 그 크기가 증가하고 있는 추세이며, 이로 인해 기존 휴대용 디스플레이에서 요구하던 소비전력 보다 더 큰 소비전력이 요구되고 있다. 따라서, 배터리라는 제한적인 전력 공급원을 가지고 있는 휴대용 디스플레이 입장에서는 소비전력이 중요한 요소가 되었고, 효율과 수명 문제 또한 반드시 해결해야 하는 중요한 요소이다.
- [0006] 효율과 수명, 구동전압 등은 서로 연관이 있으며, 효율이 증가되면 상대적으로 구동전압이 떨어지고, 구동전압이 떨어지면서 구동시 발생하는 주울열(Joule heating)에 의한 유기물질의 결정화가 적어져 결과적으로 수명이 높아지는 경향을 나타낸다. 하지만 상기 유기물층을 단순히 개선한다고 하여 효율을 극대화시킬 수는 없다. 왜냐하면 각 유기물층 간의 에너지 준위 및 T1 값, 물질의 고유특성(이동도, 계면특성 등) 등이 최적의 조합을 이루었을 때 긴 수명과 높은 효율을 동시에 달성 할 수 있기 때문이다.
- [0007] 또한, 최근 유기 전기 발광소자에 있어 정공수송층에서의 발광 문제를 해결 하기 위해 정공수송층과 발광층 사이에 발광보조층을 사용하는 방법이 연구되고 있으며, 각각의 발광층(R, G, B)에 따라 원하는 물질적 특성이 상이하야, 각각의 발광층에 따른 발광보조층의 개발이 필요한 시점이다.
- [0008] 일반적으로 전자수송층에서 발광층으로 전자(electron)가 전달되고 정공(hole)이 정공수송층에서 발광층으로 전달되어 재조합(recombination)에 의해 엑시톤(exciton)이 생성된다.
- [0009] 하지만, 정공수송층에 사용되는 물질의 경우 낮은 HOMO 값을 가져야 하기 때문에 대부분 낮은 T1 값을 가지며, 이로 인해 발광층에서 생성된 엑시톤(exciton)이 정공수송층 계면 또는 정공수송층 쪽으로 넘어가게 되어 결과적으로 정공수송층 계면에서의 발광 또는 발광층 내 전하 불균형(charge unbalance)을 초래하여 정공수송층 계면에서 발광하게 된다.
- [0010] 정공수송층 계면에서 발광될 경우, 유기전기소자의 색순도 및 효율이 저하되고 수명이 짧아지는 문제점이 발생하게 된다. 따라서, 정공수송층 HOMO 에너지 준위와 발광층의 HOMO 에너지 준위 사이의 HOMO 준위를 갖는 물질이어야 하며, 높은 T1 값을 가지고, 적당한 구동전압 범위 내(full device의 blue 소자 구동전압 범위 내) 정공이동도(hole mobility)를 갖는 발광보조층의 개발이 절실히 요구된다.
- [0011] 하지만, 이는 단순히 발광보조층 물질의 코어에 대한 구조적 특성으로 이루어 질 수 없으며, 발광보조층 물질의 코어 및 sub-치환기의 특성 그리고 발광보조층과 정공수송층, 발광보조층과 발광층 간의 알맞은 조합이 이루어졌을 때 고효율 및 고수명의 소자가 구현될 수 있는 것이다.
- [0012] 한편, 소자 구동시 발생하는 주울열(Joule heating)에 대해서도 안정된 특성, 즉 높은 유리 전이온도를 갖는 발광층 및 발광보조층 재료에 대한 개발 역시 필요한 상태이다. 발광층 및 발광보조층 재료의 낮은 유리전이 온도는 소자 구동시 박막 표면의 균일도를 저하시키고, 소자 구동 시 발생하는 열로 인하여 물질이 변형될 수 있으며 이는 소자수명에 큰 영향을 미치는 것으로 보고되고 있다.
- [0013] 따라서, 증착시 오랫동안 견딜 수 있는 재료, 즉 내열특성이 강한 재료 개발이 필요하며, 유기전기소자가 갖는 우수한 특징들을 충분히 발휘하기 위해서는 소자 내 유기물층을 이루는 물질, 예컨대 정공주입 물질, 정공수송 물질, 발광 물질, 전자수송 물질, 전자주입 물질, 발광보조층 물질 등이 안정하고 효율적인 재료에 의하여 뒷받침되는 것이 선행되어야 하는데, 특히 발광보조층 및 발광층 등에 사용되는 재료에 대한 개발이 절실히 요구되고 있다.

발명의 내용

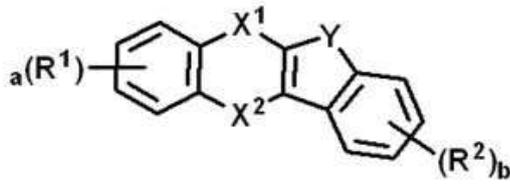
해결하려는 과제

- [0014] 본 발명은 고내열성을 갖고, 소자의 구동전압을 낮추고, 소자의 발광효율, 색순도 및 수명을 향상시킬 수 있는 화합물, 이를 이용한 유기전기소자 및 상기 유기전기소자를 포함하는 전자장치를 제공하는 것을 목적으로 한다.

과제의 해결 수단

- [0015] 일 측면에서, 본 발명은 하기 화학식으로 표시되는 화합물을 제공한다.

[0016] <화학식 1>



[0017]

[0018] 다른 측면에서, 본 발명은 상기 화학식으로 표시되는 화합물을 이용한 유기전기소자 및 그 전자장치를 제공한다.

발명의 효과

[0019] 본 발명에 따른 화합물을 이용함으로써 소자의 높은 발광효율, 낮은 구동전압, 고내열성을 달성할 수 있고, 소자의 색순도 및 수명을 향상시킬 수 있는 효과가 있다.

도면의 간단한 설명

[0020] 도 1 내지 도 3은 본 발명의 실시예들에 따른 유기전기소자를 개략적으로 도시한 것이다.

도 4는 본 발명의 일 측면에 따른 화학식을 나타낸다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

[0021] 이하, 첨부된 도면을 참조하여 본 발명의 바람직한 실시 형태를 설명한다.

[0022] 본 실시예들을 설명하기 위해, 각 도면의 구성요소들에 참조부호를 부가함에 있어서, 동일한 구성 요소들에 대해서는 비록 다른 도면상에 표시되더라도 가능한 한 동일한 부호를 가지도록 하고 있음에 유의해야 한다. 또한, 본 발명을 설명함에 있어, 관련된 공지 구성 또는 기능에 대한 구체적인 설명이 본 발명의 요지를 흐릴 수 있다고 판단되는 경우에는 그 상세한 설명은 생략한다. 아래에서 참조되는 도면들에서는 축적비가 적용되지 않는다.

[0023] 본 발명의 구성 요소를 설명하는 데 있어서, 제1, 제2, A, B, (a), (b) 등의 용어를 사용할 수 있다. 이러한 용어는 그 구성 요소를 다른 구성 요소와 구별하기 위한 것일 뿐, 그 용어에 의해 해당 구성 요소의 본질이나 차례 또는 순서 등이 한정되지 않는다.

[0024] 어떤 구성 요소가 다른 구성 요소에 "연결", "결합" 또는 "접속"된다고 기재된 경우, 그 구성 요소는 그 다른 구성 요소에 직접적으로 연결되거나 또는 접속될 수 있지만, 각 구성 요소 사이에 또 다른 구성 요소가 "연결", "결합" 또는 "접속"될 수도 있다고 이해되어야 할 것이다.

[0025] 또한, 층, 막, 영역, 판 등의 구성 요소가 다른 구성 요소 "위에" 또는 "상에" 있다고 하는 경우, 이는 다른 구성 요소 "바로 위에" 있는 경우뿐만 아니라 그 중간에 또 다른 구성 요소가 있는 경우도 포함할 수 있다고 이해되어야 할 것이다. 반대로, 어떤 구성 요소가 다른 부분 "바로 위에" 있다고 하는 경우에는 중간에 또 다른 부분이 없는 것을 뜻한다고 이해되어야 할 것이다.

[0026] 본 명세서 및 첨부된 청구의 범위에서 사용된 용어는, 본 발명의 사상을 이탈하지 않는 범위내에서, 달리 언급하지 않는 한 하기와 같다.

[0027] 본 출원에서 사용된 용어 "할로" 또는 "할로젠"은 다른 설명이 없는 한 불소(F), 염소(Cl), 브롬(Br), 및 요오드(I)를 포함한다.

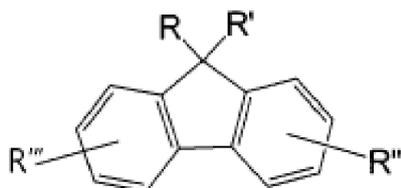
[0028] 본 출원에서 사용된 용어 "알킬" 또는 "알킬기"는 다른 설명이 없는 한 단일결합으로 연결된 1 내지 60의 탄소를 가지며, 직쇄 알킬기, 분지쇄 알킬기, 사이클로알킬(지환족)기, 알킬-치환된 사이클로알킬기, 사이클로알킬-치환된 알킬기를 비롯한 포화 지방족 작용기의 라디칼을 의미한다.

[0029] 본 출원에서 사용된 용어 "할로알킬기" 또는 "할로겐알킬기"는 다른 설명이 없는 한 할로젠이 치환된 알킬기를 의미한다.

[0030] 본 출원에서 사용된 용어 "알케닐" 또는 "알키닐"은 다른 설명이 없는 한 각각 이중결합 또는 삼중결합을 가지

며, 직쇄형 또는 측쇄형 사슬기를 포함하고, 2 내지 60의 탄소수를 가지나, 이에 한정되는 것은 아니다.

- [0031] 본 출원에서 사용된 용어 "사이클로알킬"은 다른 설명이 없는 한 3 내지 60의 탄소수를 갖는 고리를 형성하는 알킬을 의미하며, 여기에 한정되는 것은 아니다.
- [0032] 본 출원에서 사용된 용어 "알콕시기" 또는 "알킬옥시기"는 산소 라디칼이 결합된 알킬기를 의미하며, 다른 설명이 없는 한 1 내지 60의 탄소수를 가지나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0033] 본 출원에서 사용된 용어 "알켄옥실기", "알켄옥시기", "알켄일옥실기", 또는 "알켄일옥시기"는 산소 라디칼이 부착된 알켄일기를 의미하며, 다른 설명이 없는 한 2 내지 60의 탄소수를 가지나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0034] 본 출원에서 사용된 용어 "아릴기" 및 "아릴렌기"는 다른 설명이 없는 한 각각 6 내지 60의 탄소수를 가지나, 이에 한정되는 것은 아니다. 본 출원에서 아릴기 또는 아릴렌기는 단일 고리형, 고리 집합체, 접합된 여러 고리계 화합물 등을 포함한다. 예를 들면, 상기 아릴기는 페닐기, 바이페닐의 1가 작용기, 나프탈렌의 1가 작용기, 플루오렌일기, 치환된 플루오렌일기를 포함할 수 있고, 아릴렌기는 플루오렌일렌기, 치환된 플루오렌일렌기를 포함할 수 있다.
- [0035] 본 출원에서 사용된 용어 "고리 집합체(ring assemblies)"는 둘 또는 그 이상의 고리계(단일고리 또는 접합된 고리계)가 단일결합이나 또는 이중결합을 통해서 서로 직접 연결되어 있고, 이와 같은 고리 사이의 직접 연결의 수가 그 화합물에 들어 있는 고리계의 총 수보다 1개가 적은 것을 의미한다. 고리 집합체는 동일 또는 상이한 고리계가 단일결합이나 이중결합을 통해 서로 직접 연결될 수 있다.
- [0036] 본 출원에서 아릴기는 고리 집합체를 포함하므로, 아릴기는 단일 방향족고리인 벤젠고리가 단일결합에 의해 연결된 바이페닐, 터페닐을 포함한다. 또한, 아릴기는 방향족 단일 고리와 접합된 방향족 고리계가 단일결합에 의해 연결된 화합물도 포함하므로, 예를 들면, 방향족 단일 고리인 벤젠 고리와 접합된 방향족 고리계인 플루오렌이 단일결합에 의해 연결된 화합물도 포함한다.
- [0037] 본 출원에서 사용된 용어 "접합된 여러 고리계"는 적어도 두 개의 원자를 공유하는 접합된(fused) 고리 형태를 의미하며, 둘 이상의 탄화수소류의 고리계가 접합된 형태 및 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 헤테로고리계가 적어도 하나 접합된 형태 등을 포함한다. 이러한 접합된 여러 고리계는 방향족고리, 헤테로방향족고리, 지방족 고리 또는 이들 고리의 조합일 수 있다. 예를 들어 아릴기의 경우, 나프탈렌일기, 페난트렌일기, 플루오렌일기 등이 될 수 있으나, 이에 한정된 것은 아니다.
- [0038] 본 출원에서 사용된 용어 "스파이로 화합물"은 '스파이로 연결 (spiro union)'을 가지며, 스파이로 연결은 2개의 고리가 오로지 1개의 원자를 공유함으로써 이루어지는 연결을 의미한다. 이때, 두 고리에 공유된 원자를 '스파이로 원자'라 하며, 한 화합물에 들어 있는 스파이로 원자의 수에 따라 이들을 각각 '모노스파이로-', '다이스파이로-', '트라이스파이로-' 화합물이라 한다.
- [0039] 본 출원에서 사용된 용어 "플루오렌일기", "플루오렌일렌기", "플루오렌트리일기"는 다른 설명이 없는 한 각각 하기 구조에서 R, R', R" 및 R'"이 모두 수소인 1가, 2가 또는 3가의 작용기를 의미하며, "치환된 플루오렌일기", "치환된 플루오렌일렌기" 또는 "치환된 플루오렌트리일기"는 치환기 R, R', R", R'"중 적어도 하나가 수소 이외의 치환기인 것을 의미하며, R과 R'이 서로 결합되어 이들이 결합된 탄소와 함께 스파이로 화합물을 형성한 경우를 포함한다. 본 명세서에서는 1가, 2가, 3가 등과 같은 가수와 상관없이 플루오렌일기, 플루오렌일렌기, 플루오렌트리일기를 모두 플루오렌기라고 명명할 수도 있다.

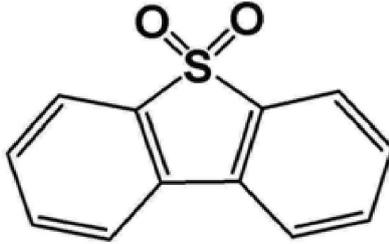


- [0040]
- [0041] 또한, 상기 R, R', R" 및 R'"은 각각 독립적으로, 1 내지 20의 탄소수를 가지는 알킬기, 1 내지 20의 탄소수를 가지는 알케닐기, 6 내지 30의 탄소수를 가지는 아릴기, 3 내지 30의 탄소수를 가지는 헤테로고리기일 수 있고, 예를 들면, 상기 아릴기는 페닐, 바이페닐, 나프탈렌, 안트라센 또는 페난트렌일 수 있으며, 상기 헤테로고리기는 피롤, 푸란, 티오펜, 피라졸, 이미다졸, 트리아졸, 피리딘, 피리미딘, 피리다진, 피라진, 트리아진, 인돌, 벤조퓨란, 퀴나졸린 또는 퀴녹살린일 수 있다. 예를 들면, 상기 치환된 플루오렌일기 및 플루오렌일렌기는 각각

9,9-디메틸플루오렌, 9,9-디페닐플루오렌 및 9,9'-스파이로바이[9H-플루오렌]의 1가 작용기 또는 2가 작용기일 수 있다.

[0042] 본 출원에서 사용된 용어 "헤테로고리기"는 "헤테로아릴기" 또는 "헤테로아릴렌기"와 같은 방향족 고리뿐만 아니라 비방향족 고리도 포함하며, 다른 설명이 없는 한 각각 하나 이상의 헤테로원자를 포함하는 탄소수 2 내지 60의 고리를 의미하나 여기에 한정되는 것은 아니다. 본 출원에서 사용된 용어 "헤테로원자"는 다른 설명이 없는 한 N, O, S, P 또는 Si를 나타내며, 헤테로고리기는 헤테로원자를 포함하는 단일고리형, 고리집합체, 접합된 여러 고리계, 스파이로 화합물 등을 의미한다.

[0043] 예를 들어, "헤테로고리기"는 고리를 형성하는 탄소 대신 하기 화합물과 같이 SO₂, P=O 등과 같은 헤테로원자 단을 포함하는 화합물도 포함할 수 있다.



[0044]

[0045] 본 출원에서 사용된 용어 "고리"는 단일환 및 다환을 포함하며, 탄화수소고리는 물론 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 헤테로고리를 포함하고, 방향족 및 비방향족 고리를 포함한다.

[0046] 본 출원에서 사용된 용어 "다환"은 바이페닐, 터페닐 등과 같은 고리 집합체(ring assemblies), 접합된(fused) 여러 고리계 및 스파이로 화합물을 포함하며, 방향족뿐만 아니라 비방향족도 포함하고, 탄화수소고리는 물론 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 헤테로고리를 포함한다.

[0047] 본 출원에서 사용된 용어 "지방족고리기"는 방향족탄화수소를 제외한 고리형 탄화수소를 의미하며, 단일고리형, 고리집합체, 접합된 여러 고리계, 스파이로 화합물 등을 포함하며, 다른 설명이 없는 한 탄소수 3 내지 60의 고리를 의미하나, 이에 한정되는 것은 아니다. 예컨대, 방향족고리인 벤젠과 비방향족고리인 사이클로헥산이 융합된 경우에도 지방족 고리에 해당한다.

[0048] 또한, 접두사가 연속으로 명명되는 경우 먼저 기재된 순서대로 치환기가 나열되는 것을 의미한다. 예를 들어, 아릴알콕시기의 경우 아릴기로 치환된 알콕시기를 의미하며, 알콕시카르보닐기의 경우 알콕시기로 치환된 카르보닐기를 의미하며, 또한 아릴카르보닐알켄일기의 경우 아릴카르보닐기로 치환된 알켄일기를 의미하며 여기서 아릴카르보닐기는 아릴기로 치환된 카르보닐기이다.

[0049] 또한 명시적인 설명이 없는 한, 본 출원에서 사용된 용어 "치환 또는 비치환된"에서 "치환"은 중수소, 할로젠, 아미노기, 니트릴기, 니트로기, C₁-C₂₀의 알킬기, C₁-C₂₀의 알콕시기, C₁-C₂₀의 알킬아민기, C₁-C₂₀의 알킬티오젠기, C₆-C₂₀의 아릴티오젠기, C₂-C₂₀의 알켄일기, C₂-C₂₀의 알킨일기, C₃-C₂₀의 사이클로알킬기, C₆-C₂₀의 아릴기, 중수소로 치환된 C₆-C₂₀의 아릴기, C₈-C₂₀의 아릴알켄일기, 실란기, 붕소기, 게르마늄기, 및 O, N, S, Si 및 P로 이루어진 군에서 선택된 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C₂-C₂₀의 헤테로고리기로 이루어진 군으로부터 선택되는 1개 이상의 치환기로 치환됨을 의미하며, 이들 치환기에 한정되는 것은 아니다.

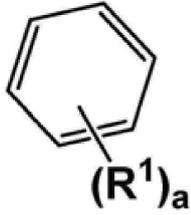
[0050] 본 출원에서 각 기호 및 그 치환기의 예로 예시되는 아릴기, 아릴렌기, 헤테로고리기 등에 해당하는 '작용기 명칭'은 '가수를 반영한 작용기의 명칭'을 기재할 수도 있지만, '모체 화합물 명칭'으로 기재할 수도 있다. 예컨대, 아릴 기의 일종인 '페난트렌'의 경우, 1가의 '기'는 '페난트릴(기)'로, 2가의 기는 '페난트릴렌(기)' 등과 같이 가수를 구분하여 기의 이름을 기재할 수도 있지만, 가수와 상관없이 모체 화합물 명칭인 '페난트렌'으로 기재할 수도 있다.

[0051] 유사하게, 피리미딘의 경우에도, 가수와 상관없이 '피리미딘'으로 기재하거나, 1가인 경우에는 피리미딘일(기)로, 2가의 경우에는 피리미딘일렌(기) 등과 같이 해당 가수의 '기의 이름'으로 기재할 수도 있다. 따라서, 본 출원에서 치환기의 종류를 모체 화합물 명칭으로 기재할 경우, 모체 화합물의 탄소 원자 및/또는 헤테로원자와 결합하고 있는 수소 원자가 탈리되어 형성되는 n가의 '기'를 의미할 수 있다.

[0052] 또한, 본 명세서에서는 화합물 명칭이나 치환기 명칭을 기재함에 있어 위치를 표시하는 숫자나 알파벳 등은 생

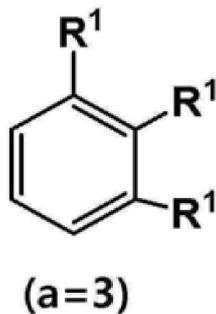
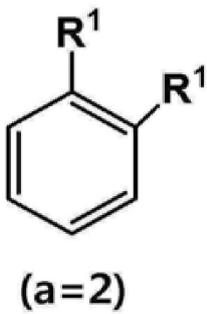
략할 수도 있다. 예컨대, 피리도[4,3-d]피리미딘을 피리도피리미딘으로, 벤조퓨로[2,3-d]피리미딘을 벤조퓨로피리미딘으로, 9,9-다이메틸-9H-플루오렌을 다이메틸플루오렌 등과 같이 기재할 수 있다. 따라서, 벤조[g]퀴녹살린이나 벤조[f]퀴녹살린을 모두 벤조퀴녹살린이라고 기재할 수 있다.

[0053] 또한 명시적인 설명이 없는 한, 본 출원에서 사용되는 화학식은 하기 화학식의 지수 정의에 의한 치환기 정의와 동일하게 적용된다.



[0054]

[0055] 여기서, a가 0의 정수인 경우 치환기 R¹은 부존재하는 것을 의미하는데, 즉 a가 0인 경우는 벤젠고리를 형성하는 탄소에 모두 수소가 결합된 것을 의미하며, 이때 탄소에 결합된 수소의 표시를 생략하고 화학식이나 화합물을 기재할 수 있다. 또한, a가 1의 정수인 경우 하나의 치환기 R¹은 벤젠 고리를 형성하는 탄소 중 어느 하나의 탄소에 결합하며, a가 2 또는 3의 정수인 경우 예컨대 아래와 같이 결합할 수 있고, a가 4 내지 6의 정수인 경우에도 이와 유사한 방식으로 벤젠 고리의 탄소에 결합하며, a가 2 이상의 정수인 경우 R¹은 서로 같거나 상이할 수 있다.



[0056]

[0057] 본 출원에서 다른 설명이 없는 한, 고리를 형성한다는 것은, 인접한 기가 서로 결합하여 단일고리 또는 접합된 여러고리를 형성하는 것을 의미하고, 단일고리 및 형성된 접합된 여러 고리는 탄화수소고리는 물론 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 헤테로고리를 포함하고, 방향족 및 비방향족 고리를 포함할 수 있다.

[0058] 또한, 본 명세서에서 다른 설명이 없는 한, 축합환을 표시할 때 '숫자-축합환'에서 숫자는 축합되는 고리의 개수를 나타낸다. 예컨대, 안트라센, 페난트렌, 벤조퀴나졸린 등과 같이 3개의 고리가 서로 축합한 형태는 3-축합환으로 표기할 수 있다.

[0059] 한편, 본 출원에서 사용된 용어 "다리걸친 고리 화합물(bridged bicyclic compound)"은 다른 설명이 없는 한, 2개의 고리가 3개 이상의 원자를 공유하여 고리를 형성한 화합물을 말한다. 이때 공유하는 원자는 탄소 또는 헤테로원자를 포함할 수 있다.

[0060] 이하, 본 발명의 화합물이 포함된 유기전기소자의 적층 구조에 대하여 도 1 내지 도 3을 참조하여 설명한다.

[0061] 도 1을 참조하면, 본 발명의 일 실시예에 따른 유기전기소자(100)는 기판(미도시) 상에 형성된 제1 전극(110), 제2 전극(170) 및 제1 전극(110)과 제2 전극(170) 사이에 본 발명에 따른 화합물을 포함하는 유기물층을 포함한다.

[0062] 상기 제1 전극(110)은 애노드(양극)이고, 제2 전극(170)은 캐소드(음극)일 수 있으며, 인버트형의 경우에는 제1 전극이 캐소드이고 제2 전극이 애노드일 수 있다.

[0063] 상기 유기물층은 정공주입층(120), 정공수송층(130), 발광층(140), 전자수송층(150) 및 전자주입층(160)을 포함할 수 있다. 구체적으로, 제1 전극(110) 상에 정공주입층(120), 정공수송층(130), 발광층(140), 전자수송층(150) 및 전자주입층(160)이 순차적으로 형성될 수 있다.

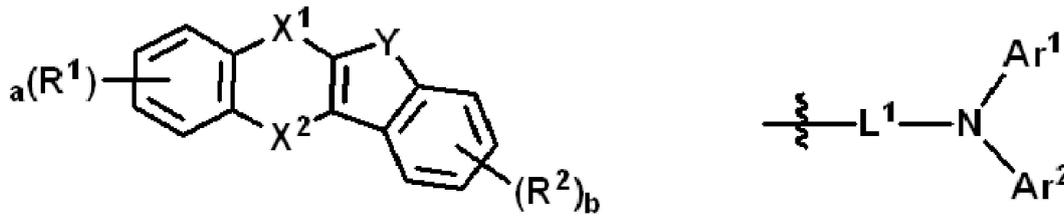
- [0064] 바람직하게는, 상기 제1 전극(110) 또는 제2 전극(170)의 양면 중에서 유기물층과 접하지 않는 일면에 캡핑층(180)이 형성될 수 있으며, 캡핑층(180)이 형성될 경우 유기전기소자의 광효율이 향상될 수 있다.
- [0065] 예를 들면, 제2 전극(170) 상에 캡핑층(180)이 형성될 수 있는데, 전면발광(top emission) 유기발광소자의 경우, 캡핑층(180)이 형성됨으로써 제2 전극(170)에서의 SPPs (surface plasmon polaritons)에 의한 광학에너지 손실을 줄일 수 있고, 배면발광(bottom emission) 유기발광소자의 경우, 캡핑층(180)이 제2 전극(170)에 대한 완충 역할을 수행할 수 있다.
- [0066] 한편, 정공수송층(130)과 발광층(140) 사이에 버퍼층(210)이나 발광보조층(220)이 더 형성될 수 있는데 이에 대해 도 2를 참조하여 설명한다.
- [0067] 도 2를 참조하면, 본 발명의 다른 실시예에 따른 유기전기소자(200)는 제1 전극(110) 상에 순차적으로 형성된 정공주입층(120), 정공수송층(130), 버퍼층(210), 발광보조층(220), 발광층(140), 전자수송층(150), 전자주입층(160), 제2 전극(170)을 포함할 수 있고, 제2 전극 상에 캡핑층(180)이 형성될 수 있다.
- [0068] 도 2에 도시되지는 않았으나, 발광층(140)과 전자수송층(150) 사이에 전자수송보조층이 더 형성될 수도 있다.
- [0069] 또한, 본 발명의 다른 실시예에 따르면 유기물층은 정공수송층, 발광층 및 전자수송층을 포함하는 스택이 복수개가 형성된 형태일 수도 있다. 이에 대해 도 3을 참조하여 설명한다.
- [0070] 도 3을 참조하면, 본 발명의 또 다른 실시예에 따른 유기전기소자(300)는 제1 전극(110)과 제2 전극(170) 사이에 다층으로 이루어진 유기물층의 스택(ST1, ST2)이 두 세트 이상 형성될 수 있고 유기물층의 스택 사이에 전하생성층(CGL)이 형성될 수도 있다.
- [0071] 구체적으로, 본 발명에 일 실시예에 따른 유기전기소자는 제1 전극(110), 제1 스택(ST1), 전하생성층(CGL: Charge Generation Layer), 제2 스택(ST2), 제2 전극(170) 및 캡핑층(180)을 포함할 수 있다.
- [0072] 상기 제1 스택(ST1)은 제1 전극(110) 상에 형성된 유기물층으로, 이는 제1 정공주입층(320), 제1 정공수송층(330), 제1 발광층(340) 및 제1 전자수송층(350)을 포함할 수 있다.
- [0073] 상기 제2 스택(ST2)은 제2 정공주입층(420), 제2 정공수송층(430), 제2 발광층(440) 및 제2 전자수송층(450)을 포함할 수 있다.
- [0074] 이와 같이 제1 스택과 제2 스택은 동일한 적층 구조를 갖는 유기물층일 수도 있지만 서로 다른 적층 구조의 유기물층일 수도 있다.
- [0075] 상기 제1 스택(ST1)과 제2 스택(ST2) 사이에는 전하 생성층(CGL)이 형성될 수 있다. 전하 생성층(CGL)은 제1 전하 생성층(360)과 제2 전하생성층(361)을 포함할 수 있다. 이러한 전하생성층(CGL)은 제1 발광층(340)과 제2 발광층(440) 사이에 형성되어 각각의 발광층에서 발생하는 전류 효율을 증가시키고, 전하를 원활하게 분배하는 역할을 한다.
- [0076] 상기 제1 발광층(340)에는 청색 호스트에 청색 형광 도펀트를 포함하는 발광 재료가 포함될 수 있고, 제2 발광층(440)에는 녹색 호스트에 그리니쉬 옐로우(greenish yellow) 도펀트와 적색 도펀트가 함께 도핑된 재료가 포함될 수 있으나, 본 발명의 실시예에 따른 제1 발광층(340) 및 제2 발광층(440)의 재료가 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0077] 이때, 제2 정공수송층(430)은 에너지 준위를 제2 발광층(440)의 삼중항(triplet) 여기상태 에너지 준위보다 높게 설정한 제2 스택(ST2)을 포함하여 이루어진다.
- [0078] 상기 제2 발광층(440)보다 제2 정공수송층(430)의 에너지 준위가 높기 때문에, 제2 발광층(440)의 삼중항 여기자(triplet exciton)가 제2 정공수송층(430)으로 넘어가 발광 효율이 떨어지는 것을 방지할 수 있다. 즉, 제2 정공수송층(430)은 고유의 제2 발광층(440)으로부터의 정공의 수송 기능을 함과 동시에 삼중항 여기자가 넘어오는 것을 방지하는 여기자 저지층(exciton blocking layer)로 기능할 수 있다.
- [0079] 또한, 여기자 저지층의 기능을 위해 제1 정공수송층(330) 또한, 제1 발광층(340)의 삼중항 여기 에너지 준위보다 높은 에너지 준위로 설정될 수 있다. 그리고, 제1 전자수송층(350)도 제1 발광층(340)의 삼중항 여기 상태의 에너지 준위보다 높은 에너지 준위로 설정하며, 제2 전자수송층(450)도 제2 발광층(440)의 삼중항 여기 상태의 에너지 준위보다 높은 에너지 준위로 설정되는 것이 바람직하다.
- [0080] 도 3에서, n은 1~5의 정수일 수 있는데, n이 2인 경우, 제2 스택(ST2) 상에 전하생성층(CGL)과 제3 스택이 추가

적으로 더 적층될 수 있다.

- [0081] 도 3과 같이 다층의 스택 구조 방식에 의해 발광층이 복수개 형성될 경우, 각각의 발광층에서 발광된 광의 혼합 효과에 의해 백색 광이 발광되는 유기전기발광소자를 제조할 수 있을 뿐만 아니라 다양한 색상의 광을 발광하는 유기전기발광소자를 제조할 수도 있다.
- [0082] 본 발명의 화학식 1에 의해 표시되는 화합물은 정공주입층(120, 320, 420), 정공수송층(130, 330, 430), 버퍼층(210), 발광보조층(220), 전자수송층(150, 350, 450), 전자주입층(160), 발광층(140, 340, 440) 또는 캡핑층(180)의 재료로 사용될 수 있으나, 바람직하게는 정공수송층(130, 330, 430), 발광보조층(220), 발광층(140, 340, 440) 및/또는 캡핑층(180)의 재료로 사용될 수 있다.
- [0083] 도 1 내지 도 3에 따른 유기전기소자는, 보호층(미도시) 및 봉지층(미도시)을 추가로 포함할 수 있다. 보호층은 캐핑층 상에 위치할 수 있고, 봉지층은 캐핑층 상에 위치하며, 상기 제1 전극, 제2 전극 및 유기물층을 보호하기 위하여 상기 제1 전극, 제2 전극 및 유기물층 중 하나 이상의 측면부를 덮도록 형성될 수 있다.
- [0084] 보호층은 봉지층이 균일하게 형성될 수 있도록 평탄화된 표면을 제공할 수 있으며, 봉지층의 제조과정에서 제1 전극, 제2전극 및 유기물층을 보호하는 역할을 수행할 수 있다.
- [0085] 봉지층은 유기전기소자 내부로 외부의 산소 및 수분이 침투를 막아 주는 역할을 수행할 수 있다.
- [0086] 한편, 동일 유사한 코어일지라도 어느 위치에 어느 치환기를 결합시키냐에 따라 밴드갭(band gap), 전기적 특성, 계면 특성 등이 달라질 수 있으므로, 코어의 선택 및 이에 결합된 서브(sub)-치환체의 조합에 대한 연구가 필요하며, 특히 각 유기물층 간의 에너지 준위 및 T1 값, 물질의 고유특성(이동도, 계면특성 등) 등이 최적의 조합을 이루었을 때 긴 수명과 높은 효율을 동시에 달성할 수 있다.
- [0087] 따라서, 본 발명에서는 화학식 1로 표시되는 화합물을 발광보조층(220), 발광층(140, 340, 440) 및/또는 캡핑층(180)의 재료로 사용함으로써, 각 유기물층 간의 에너지 레벨 및 T1 값, 물질의 고유특성(이동도, 계면특성 등) 등을 최적화하여 유기전기소자의 수명 및 효율을 동시에 향상시킬 수 있었다.
- [0088] 본 발명의 일 실시예에 따른 유기전기 발광소자는 다양한 증착법 (deposition)을 이용하여 제조될 수 있을 것이다. PVD나 CVD 등의 증착 방법을 사용하여 제조될 수 있는데, 예컨대, 기판 상에 금속 또는 전도성을 가지는 금속 산화물 또는 이들의 합금을 증착시켜 양극(110)을 형성하고, 그 위에 정공주입층(120, 320, 420), 정공수송층(130, 330, 430), 발광층(140, 340, 440), 전자수송층(150, 350, 450) 및 전자주입층(160)을 포함하는 유기물층을 형성한 후, 그 위에 음극(170)으로 사용할 수 있는 물질을 증착시킴으로써 제조될 수 있다. 또한, 정공수송층(130, 330, 430)과 발광층(140, 340, 440) 사이에 발광보조층(220)을, 발광층(140)과 전자수송층(150) 사이에 전자수송보조층(미도시)을 더 형성할 수도 있고 상술한 바와 같이 스택 구조로 형성할 수도 있다.
- [0089] 또한, 유기물층은 다양한 고분자 소재를 사용하여 증착법이 아닌 용액 공정 또는 솔벤트 프로세스(solvent process), 예컨대 스핀코팅 공정, 노즐 프린팅 공정, 잉크젯 프린팅 공정, 슬롯코팅 공정, 딥코팅 공정, 롤투롤 공정, 닥터 블레이딩 공정, 스크린 프린팅 공정, 또는 열 전사법 등의 방법에 의하여 더 적은 수의 층으로 제조할 수 있다. 본 발명에 따른 유기물층은 다양한 방법으로 형성될 수 있으므로, 그 형성방법에 의해 본 발명의 권리범위가 한정되는 것은 아니다.
- [0090] 본 발명의 일 실시예에 따른 유기전기소자는 사용되는 재료에 따라 전면 발광형, 후면 발광형 또는 양면 발광형일 수 있다.
- [0091] 본 발명의 일 실시예에 따른 유기전기소자는 유기전기발광소자, 유기태양전지, 유기감광체, 유기트랜지스터, 단색 조명용 소자 및 퀀텀닷 디스플레이용 소자 등을 포함할 수 있다.
- [0092] 본 발명의 다른 실시예는 상술한 본 발명의 유기전기소자를 포함하는 디스플레이장치와, 이 디스플레이장치를 제어하는 제어부를 포함하는 전자장치를 포함할 수 있다. 이때, 전자장치는 현재 또는 장래의 유무선 통신단말일 수 있으며, 휴대폰 등의 이동 통신 단말기, PDA, 전자사전, PMP, 리모콘, 네비게이션, 게임기, 각종 TV, 각종 컴퓨터 등 모든 전자장치를 포함한다.
- [0093] 이하, 본 발명의 일 측면에 따른 화합물에 대하여 설명한다.
- [0094] 본 발명의 일 측면에 따른 화합물은 하기 화학식 1로 표시된다.

[0095] <화학식 1>

<화학식 1-1>



[0096]

[0097] 상기 화학식 1에서,

[0098] 1) X^1 및 X^2 는 서로 독립적으로 CR'R^c, NR, O 또는 S 중에서 선택되고,

[0099] 2) Y는 CR^cR^d, O 또는 S 중에서 선택되고,

[0100] 3) R, R', R'', R^c 및 R^d는 서로 독립적으로 수소; C₆~C₆₀의 아릴기; 플루오렌일기; O, N, S, Si 및 P 중 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C₃~C₆₀의 헤테로고리기; C₁~C₅₀의 알킬기; C₂~C₆₀의 알케닐기; 또는 C₆~C₆₀의 아릴옥시기가거나, R'과 R''이 서로 결합하여 스파이로 고리를 형성할 수 있고,

[0101] 4) R¹ 및 R²는 서로 독립적으로 수소; 중수소; 할로젠; 시아노기; 니트로기; C₆~C₆₀의 아릴기; 플루오렌일기; O, N, S, Si 및 P 중 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C₂~C₆₀의 헤테로고리기; C₃~C₆₀의 지방족고리와 C₆~C₆₀의 방향족고리의 융합고리기; C₁~C₅₀의 알킬기; C₂~C₂₀의 알켄일기; C₂~C₂₀의 알킨일기; C₁~C₃₀의 알콕실기; C₆~C₃₀의 아릴옥시기; 및 -L'^a-N(R^a)(R^b); 및 화학식 1-1로 이루어진 군에서 선택되고,

[0102] 5) R¹ 및 R²는 중 적어도 하나는 상기 화학식 1-1이고,

[0103] 6) a 및 b는 서로 독립적으로 0~4의 정수이고; 단, a 및 b 중 적어도 하나는 1 이상이고; 상기 a 및 b가 2 이상인 경우, R¹ 및 R²가 각각 복수로서 서로 동일하거나 상이하며, 복수의 R¹끼리 또는 복수의 R²끼리 서로 결합하여 고리를 형성할 수 있고,

[0104] 7) 상기 L'^a는 단일결합; C₆~C₆₀의 아릴렌기; 플루오렌일렌기; C₃~C₆₀의 지방족고리기; O, N, S, Si 및 P 중 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C₂~C₆₀의 헤테로고리기; 및 이들의 조합으로 이루어진 군에서 선택되며,

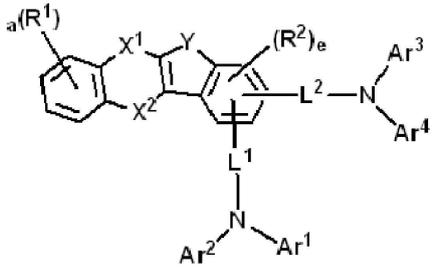
[0105] 8) 상기 R^a 및 R^b는 서로 독립적으로 C₆~C₆₀의 아릴기; 플루오렌일기; C₃~C₆₀의 지방족고리기; O, N, S, Si 및 P 중 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C₂~C₆₀의 헤테로고리기; 및 이들의 조합으로 이루어진 군에서 선택되고,

[0106] 9) L'¹은 단일결합; C₆~C₆₀의 아릴렌기; 플루오렌일렌기; O, N, S, Si 및 P 중 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C₂~C₆₀의 헤테로고리기; C₃~C₆₀의 지방족고리와 C₆~C₆₀의 방향족고리의 융합고리기; 2개의 지방족 탄화수소기; 또는 이들의 조합이고,

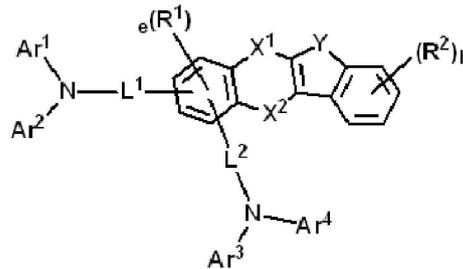
[0107] 10) Ar¹ 및 Ar²는 서로 독립적으로 C₆~C₆₀의 아릴기; 플루오렌일기; O, N, S, Si 및 P 중 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C₂~C₆₀의 헤테로고리기; C₃~C₆₀의 지방족고리와 C₆~C₆₀의 방향족고리의 융합고리기; C₁~C₆₀의 알킬기; C₂~C₂₀의 알켄일기; C₂~C₂₀의 알킨일기; C₁~C₃₀의 알콕실기; C₆~C₃₀의 아릴옥시기; 또는 이들의 조합; 또는 이웃한 기끼리 서로 결합하여 고리를 형성할 수 있고,

[0108] 11) R, R', R'', R¹, R², R^a, R^b, R^c, R^d, Ar¹, Ar², L¹, L'^a 및 이웃한 기끼리 서로 결합하여 형성한 고리는 각각 중수소; 할로젠; C₁~C₂₀의 알킬기 또는 C₆~C₂₀의 아릴기로 치환 또는 비치환된 실란기; 실록산기; 붕소기; 게르마늄기; 시아노기; 니트로기; C₁~C₂₀의 알킬싸이오기; C₁~C₂₀의 알콕시기; C₆~C₂₀의 아릴알콕시기; C₆~C₂₀의 아릴옥

[0119] <화학식 5>



<화학식 6>



[0120]

[0121] 상기 화학식 2 내지 화학식 6에서,

[0122] 상기 X¹, X², Y, R¹, R², L¹, Ar¹, Ar², a 및 b는 상기 화학식 1에서 정의된 것과 같고,

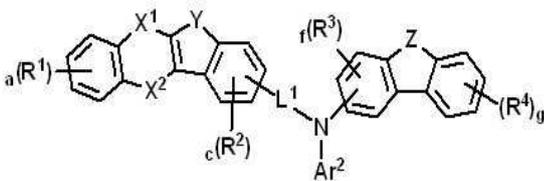
[0123] 상기 c 및 d는 0~3의 정수이고, e는 0~2의 정수이고,

[0124] 상기 L²는 상기 화학식 1에서의 L¹의 정의와 동일하고,

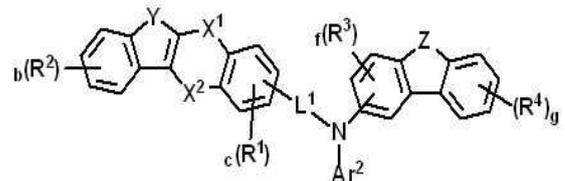
[0125] 상기 Ar³ 및 Ar⁴는 상기 화학식 1에서의 Ar¹의 정의와 동일하다.

[0126] 보다 바람직하게는, 상기 화학식 1이 하기 화학식 7 내지 화학식 12 중 어느 하나로 표시되는 될 수 있으며, 이에 한정되지 않는다.

[0127] <화학식 7>

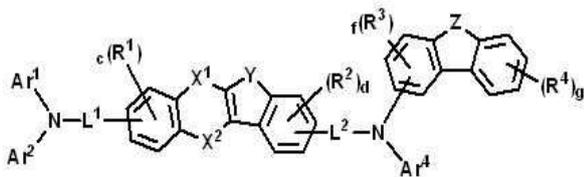


<화학식 8>

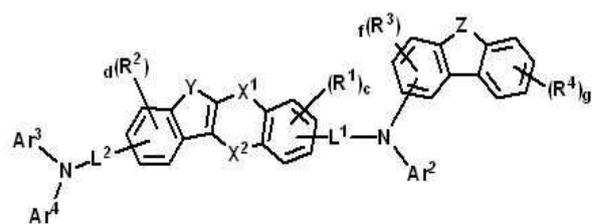


[0128]

[0129] <화학식 9>

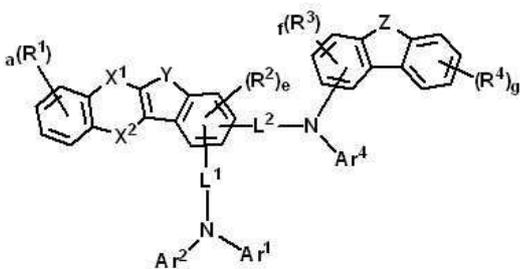


<화학식 10>

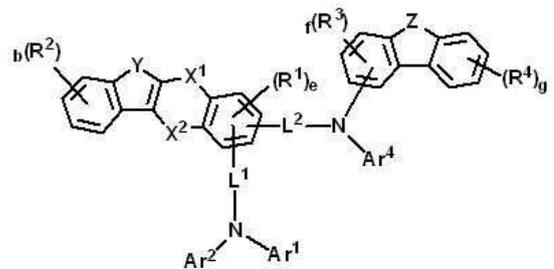


[0130]

[0131] <화학식 11>



<화학식 12>



[0132]

[0133] 상기 화학식 7 내지 화학식 12에서,

[0134] 상기 X¹, X², Y, R¹, R², L¹, Ar¹, Ar², a 및 b는 상기 화학식 1에서 정의된 것과 같고,

[0135] 상기 L², Ar³, Ar⁴, c, d 및 e는 상기 화학식 2 내지 화학식 6에서 정의된 것과 같고,

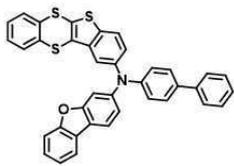
[0136] 상기 R³ 및 R⁴는 상기 화학식 1의 R¹의 정의와 같고,

[0137] 상기 Z는 CR⁵R⁶, NR⁷, O 또는 S 중에서 선택되고,

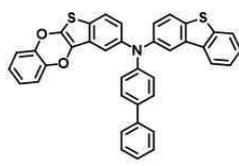
[0138] 상기 R⁵ 내지 R⁷은 서로 독립적으로 수소; C₆~C₆₀의 아릴기; 플루오렌일기; C₃~C₆₀의 헤테로고리기; C₁~C₅₀의 알킬기; C₂~C₆₀의 알케닐기; 또는 C₆~C₆₀의 아릴옥시기이거나; R⁵와 R⁶은 서로 결합하여 스피로고리를 형성할 수 있고,

[0139] 상기 f는 0-3의 정수이고, g는 0-4의 정수이다.

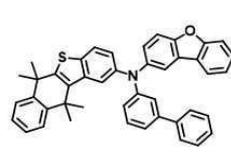
[0140] 한편, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 하기 P-1 내지 P-144 중 하나일 수 있으며, 이에 한정되지 않는다.



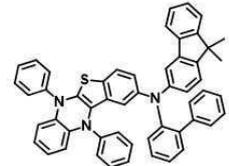
P-1



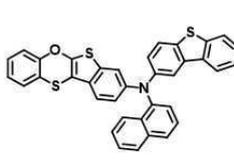
P-2



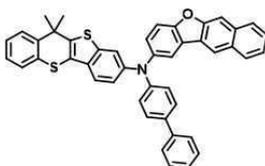
P-3



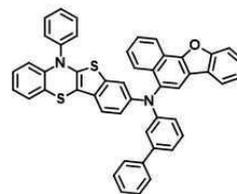
P-4



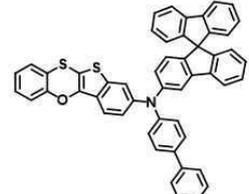
P-5



P-6

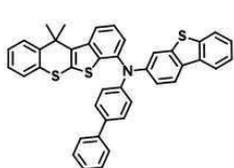


P-7

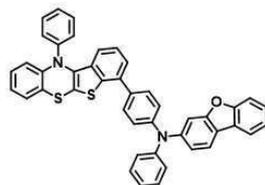


P-8

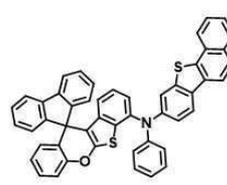
[0141]



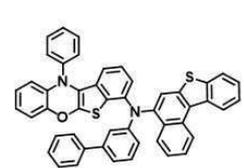
P-9



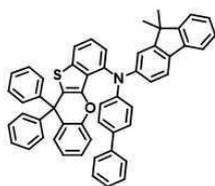
P-10



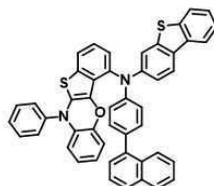
P-11



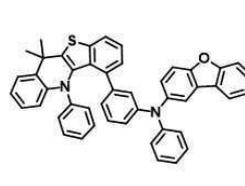
P-12



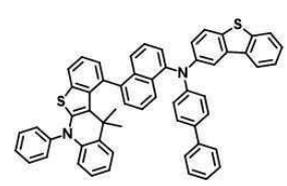
P-13



P-14

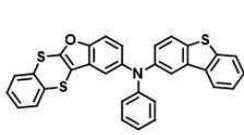


P-15

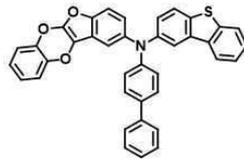


P-16

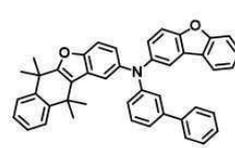
[0142]



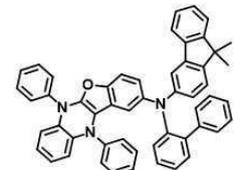
P-17



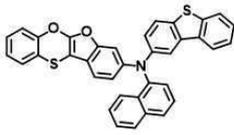
P-18



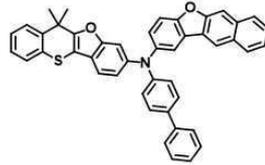
P-19



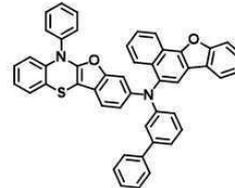
P-20



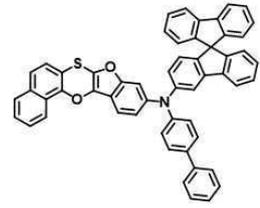
P-21



P-22

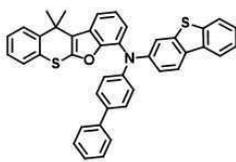


P-23

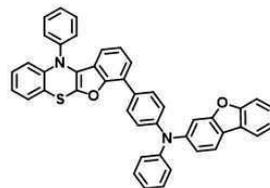


P-24

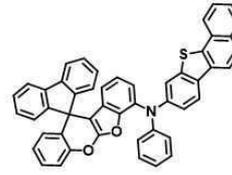
[0143]



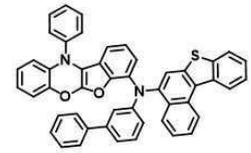
P-25



P-26

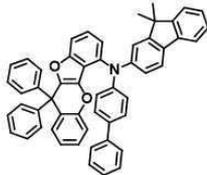


P-27

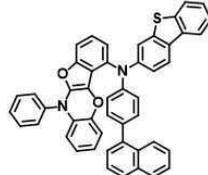


P-28

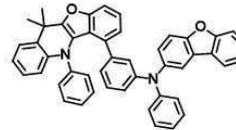
[0144]



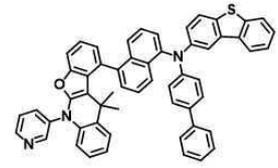
P-29



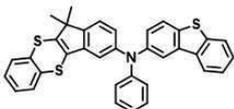
P-30



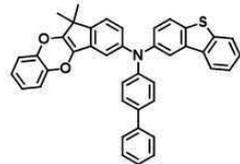
P-31



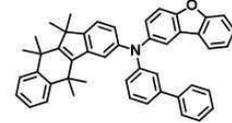
P-32



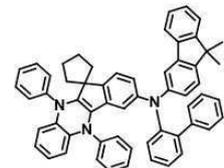
P-33



P-33

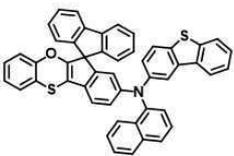


P-35

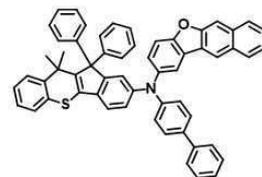


P-36

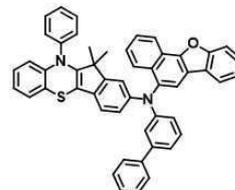
[0145]



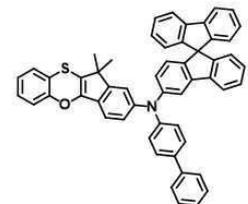
P-37



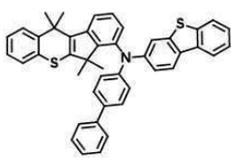
P-38



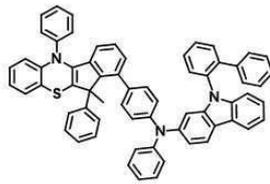
P-39



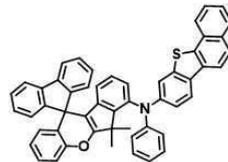
P-40



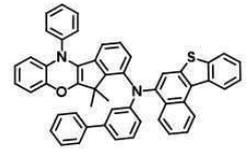
P-41



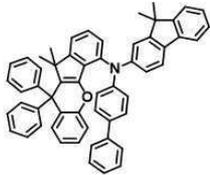
P-42



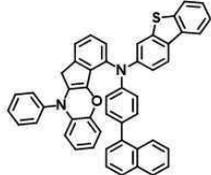
P-43



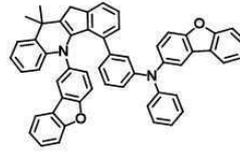
P-44



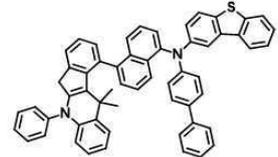
P-45



P-46

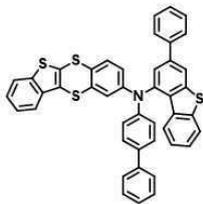


P-47

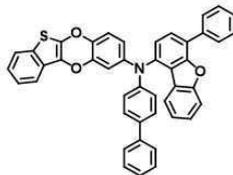


P-48

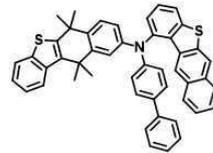
[0146]



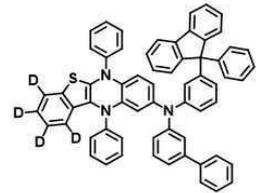
P-49



P-50

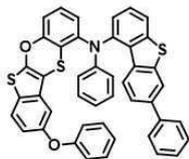


P-51

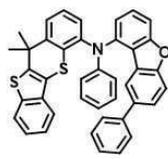


P-52

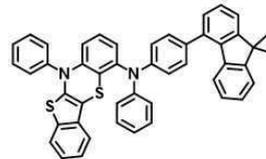
[0147]



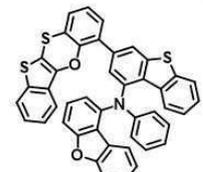
P-53



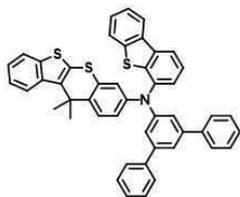
P-54



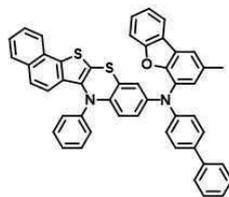
P-55



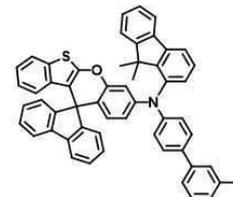
P-56



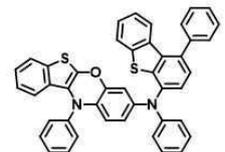
P-57



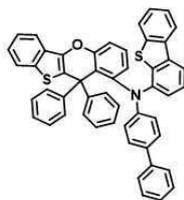
P-58



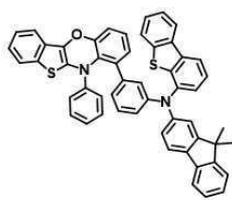
P-59



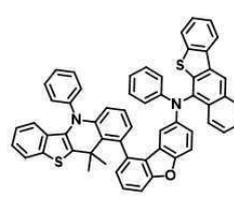
P-60



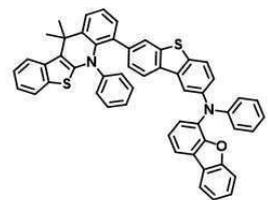
P-61



P-62

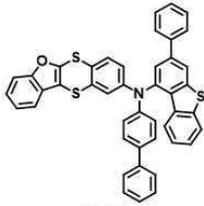


P-63

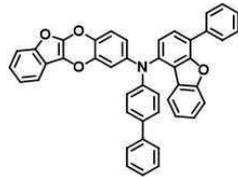


P-64

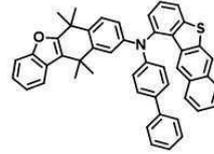
[0148]



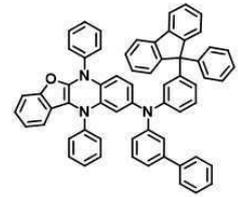
P-65



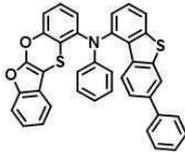
P-66



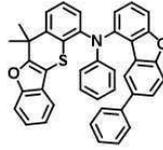
P-67



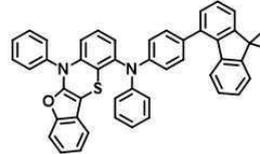
P-68



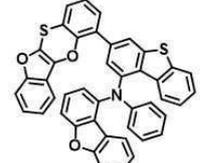
P-69



P-70

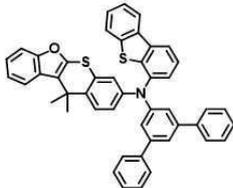


P-71

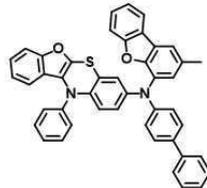


P-72

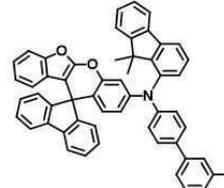
[0149]



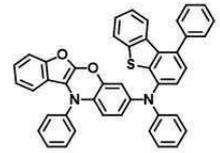
P-73



P-74

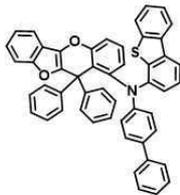


P-75

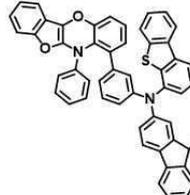


P-76

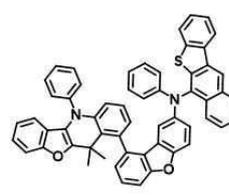
[0150]



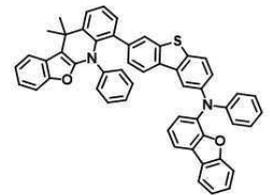
P-77



P-78

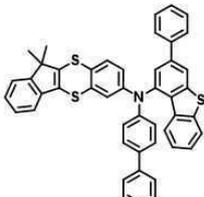


P-79

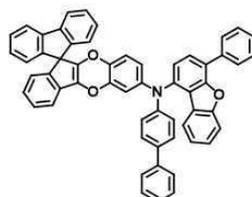


P-80

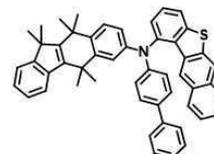
[0151]



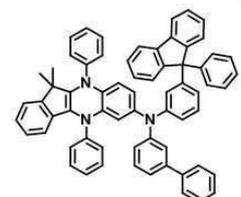
P-81



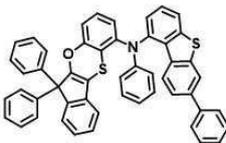
P-82



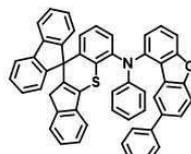
P-83



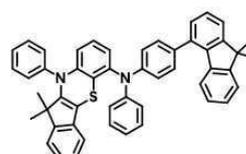
P-84



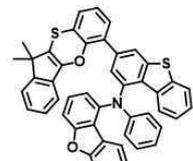
P-85



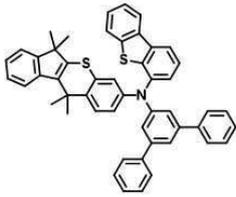
P-86



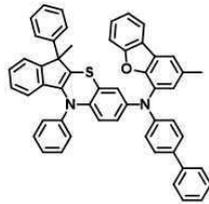
P-87



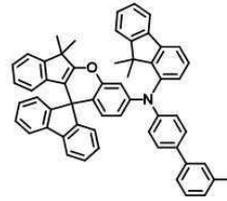
P-88



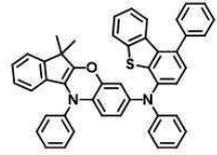
P-89



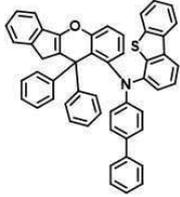
P-90



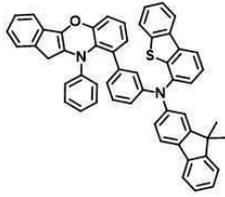
P-91



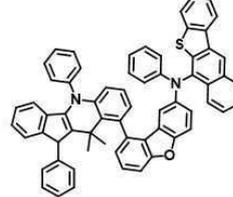
P-92



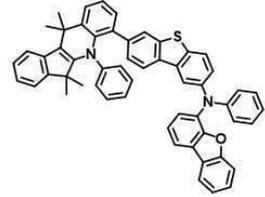
P-93



P-94

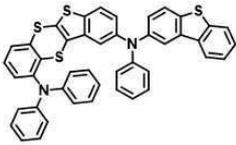


P-95

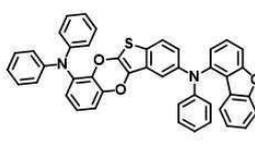


P-96

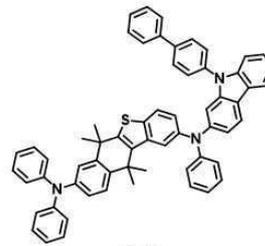
[0152]



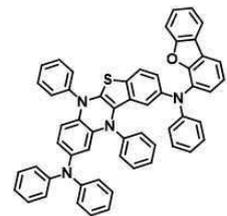
P-97



P-98

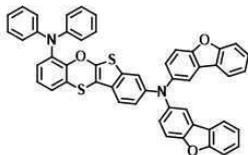


P-99

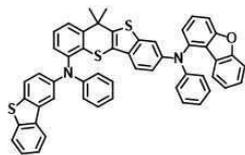


P-100

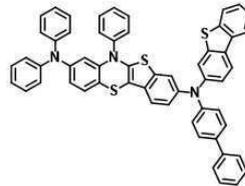
[0153]



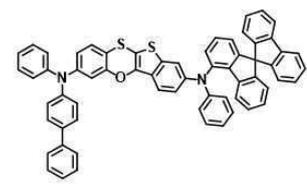
P-101



P-102

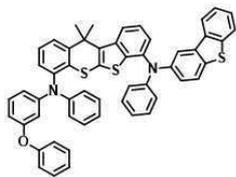


P-103

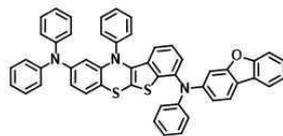


P-104

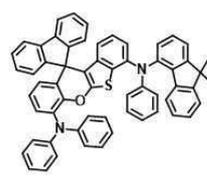
[0154]



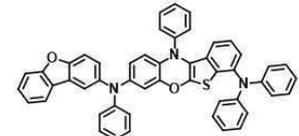
P-105



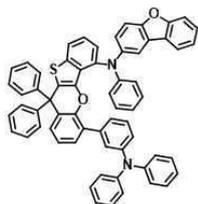
P-106



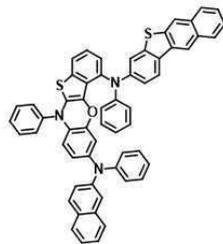
P-107



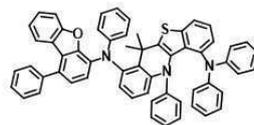
P-108



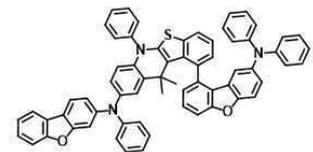
P-109



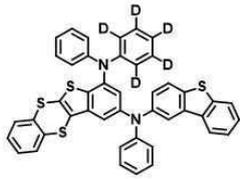
P-110



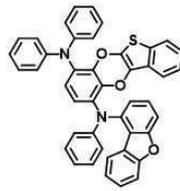
P-111



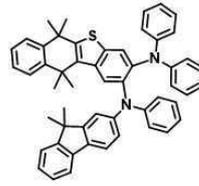
P-112



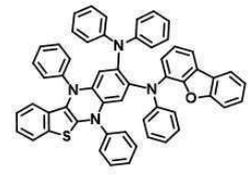
P-113



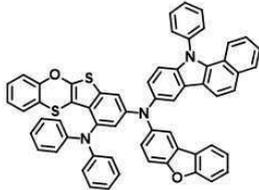
P-114



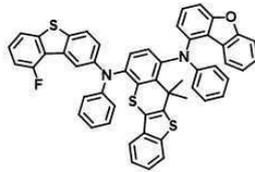
P-115



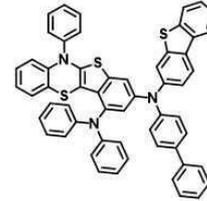
P-116



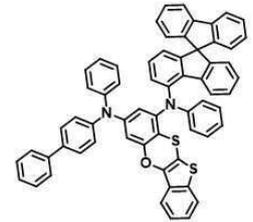
P-117



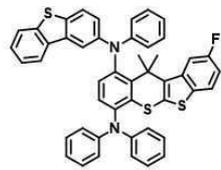
P-118



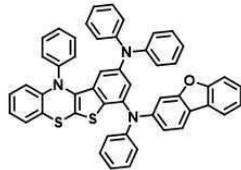
P-119



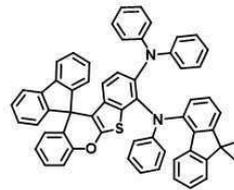
P-120



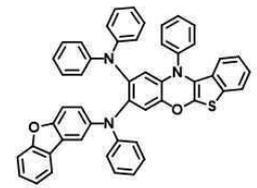
P-121



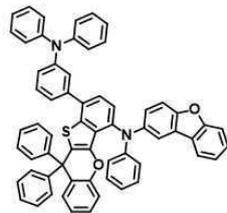
P-122



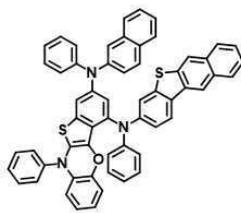
P-123



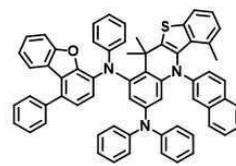
P-124



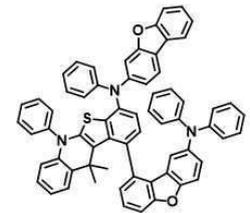
P-125



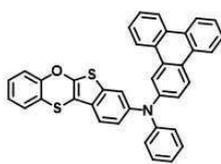
P-126



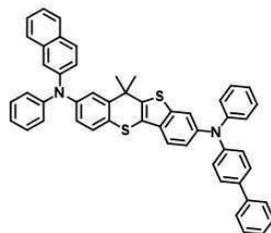
P-127



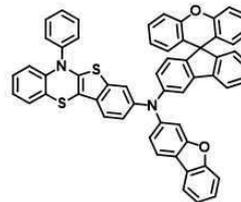
P-128



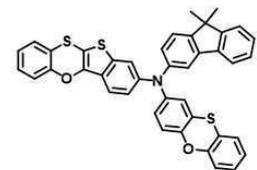
P-129



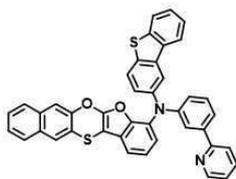
P-130



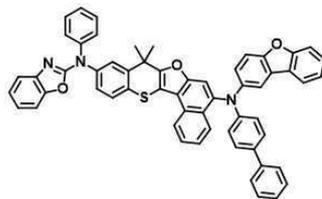
P-131



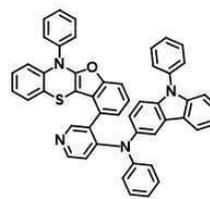
P-132



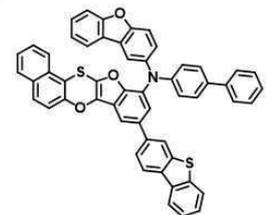
P-133



P-134



P-135

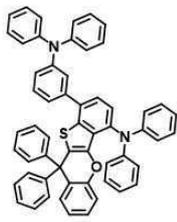


P-136

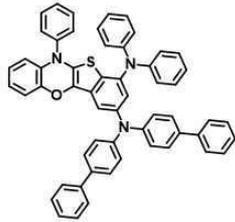
[0155]

[0156]

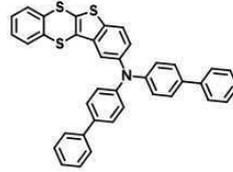
[0157]



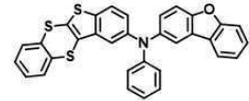
P-137



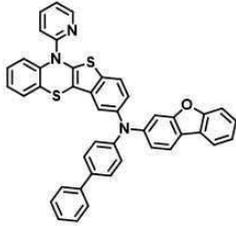
P-138



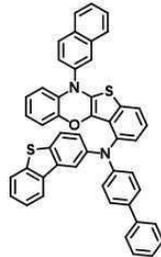
P-139



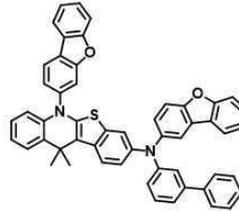
P-140



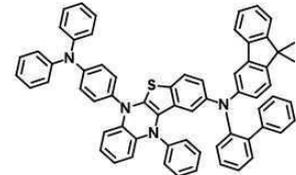
P-141



P-142



P-143



P-144

[0158]

[0159]

본 발명의 다른 구체예로서, 본 발명은 제1 전극; 제2 전극; 및 상기 제1 전극과 제2 전극 사이에 형성된 유기물층을 포함하는 유기전자소자를 제공하는 것이며, 상기 유기물층은 화학식 1로 표시되는 화합물을 단독 또는 혼합하여 포함한다.

[0160]

본 발명의 또 다른 구체예로서, 본 발명은 제1 전극; 제2 전극; 상기 제1 전극과 제2 전극 사이에 형성된 유기물층; 및 캡핑층을 포함하는 유기전자소자를 제공하는 것이며, 상기 캡핑층은 상기 제1 전극 및 제2 전극의 양면 중에서 상기 유기물층과 접하지 않는 일면에 형성되며, 상기 유기물층 또는 캡핑층은 화학식 1로 표시되는 화합물을 단독 또는 혼합하여 포함한다.

[0161]

상기 유기물층은 정공주입층, 정공수송층, 발광보조층, 발광층, 전자수송보조층, 전자수송층 및 전자주입층 중 적어도 하나를 포함한다. 즉, 상기 유기물층에 포함된 정공주입층, 정공수송층, 발광보조층, 발광층, 전자수송보조층, 전자수송층 또는 전자주입층 중 적어도 하나의 층이 화학식 (1)로 표시되는 화합물을 포함할 수 있다.

[0162]

바람직하게는, 상기 유기물층은 상기 정공수송층, 발광보조층 및 발광층 중 적어도 하나를 포함한다. 즉, 상기 화합물은 상기 정공수송층, 발광보조층 및 발광층 중 적어도 하나에 포함될 수 있다.

[0163]

상기 유기물층은 상기 양극 상에 순차적으로 형성된 정공수송층, 발광층 및 전자수송층을 포함하는 스택을 둘 이상 포함한다.

[0164]

바람직하게는, 상기 유기물층은 상기 둘 이상의 스택 사이에 형성된 전하생성층을 더 포함한다.

[0165]

본 발명의 또 다른 구체예로서, 본 발명은 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하는 유기전자소자를 포함하는 디스플레이장치와 상기 디스플레이장치를 구동하는 제어부를 포함하는 전자장치를 제공하는 것이다.

[0166]

본 발명의 구체예에서, 상기 화학식 1의 화합물은 단독으로 포함되거나, 상기 화합물이 서로 다른 2종 이상의 조합으로 포함되거나, 상기 화합물이 다른 화합물과 2종 이상의 조합으로 포함될 수 있다.

[0167]

이하에서는 본 발명에 따른 화학식 1로 표시되는 화합물의 합성에 및 유기전자소자의 제조에 관하여 실시예를 들어 구체적으로 설명하지만, 본 발명이 하기의 실시예로 한정되는 것은 아니다.

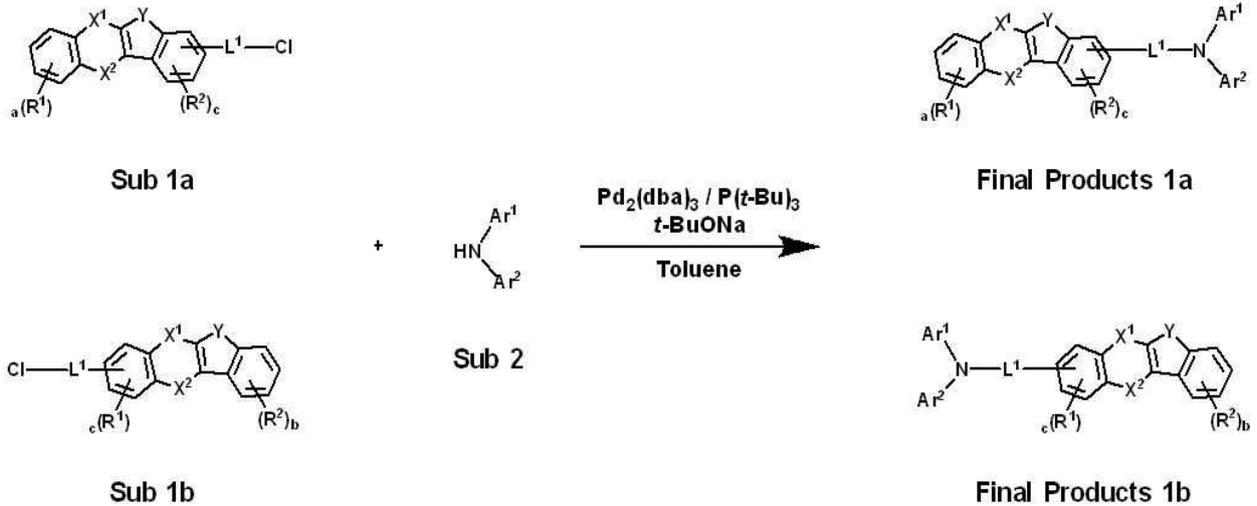
[0168]

<합성예>

[0169]

본 발명에 따른 상기 화학식 1로 표시되는 최종화합물(final product)은 하기 반응식 1과 같이 Sub 1a 또는 Sub 1b가 Sub 2와 반응하여 합성될 수 있으며, 이에 한정되는 것은 아니다.

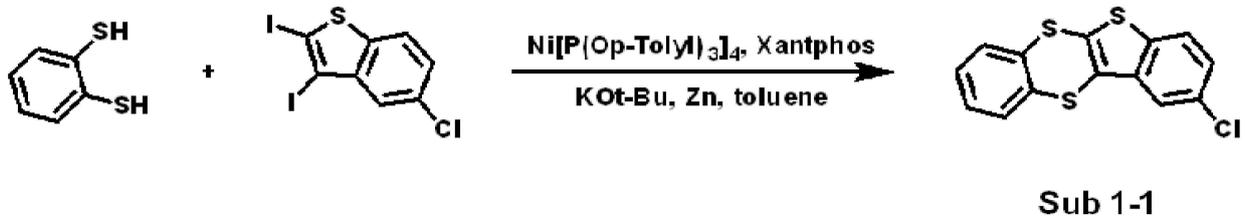
[0170] <반응식 1>



[0171]

[0172] I. Sub 1 합성 예시

[0173] 1. Sub 1-1 의 합성에

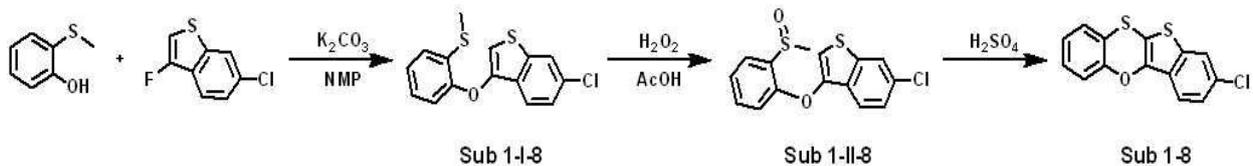


[0174]

[0175] 아르곤가스 분위기에서 Ni[P(Op-Tolyl)₃]₄ (5.18g, 3.52mmol), Xantphos (4.07g, 3.52mmol), Potassium t-butoxide (15.8g, 141mmol) 및 활성화된 아연 (4.60g, 35.2mmol)을 140ml의 무수 톨루엔에 녹인 후, Benzene-1,2-dithiol (10.0g, 70.3mmol) 및 5-Chloro-2,3-diodobenzothiophene (29.6g, 70.3mmol)을 첨가하고 110 °C에서 교반하였다. 반응이 완료되면, 에틸아세테이트로 추출한 후, 유기층을 농축한 후, 실리카겔 컬럼하여 생성물 15.3 g (수율: 62 %)를 얻었다.

[0176]

2. Sub 1-8의 합성에



[0177]

[0178] (1) Sub 1-I-8 합성

[0179] 2-(Methylthio)phenol (30.0 g, 214 mmol), 6-Chloro-3-fluorobenzothiophene (39.9g, 152 mmol) 및 K₂CO₃ (59.1 g, 428 mmol)를 N-Methyl-2-pyrrolidone 430 mL에 녹여 140 °C에서 교반하였다. 반응 종결 확인 후, 상온으로 냉각하여 물 2L에 천천히 투입해 CH₂Cl₂으로 추출하였다. 추출한 유기층을 실리카겔 컬럼하여 생성물 53.1g (수율: 81%)를 얻었다.

[0180]

(2) Sub 1-II-8 합성

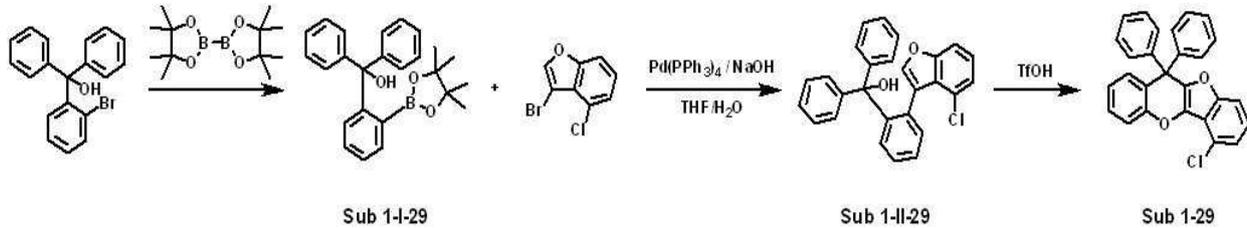
[0181] 상기 합성에서 얻어진 Sub 1-I-8 (30g, 97.8 mmol)을 아세트산 330 mL에 녹여 교반하였다. 교반 중인 용액에 H₂O₂ (11.6ml, 103 mmol)를 적가한 후, 상온에서 밤새 반응시켰다. 반응 종결 확인 후, 용액을 1M NaOH 수용액으로 중화시키고, 에틸아세테이트로 추출하여 농축한 뒤, 에탄올로 재결정하여 필터 및 건조하였다. 이 합성법

으로 생성물 30.0g (수율: 95%)를 얻었다.

[0182] (3) Sub 1-8 합성

[0183] 상기 합성에서 얻어진 Sub 1-II-8 (30.0g 92.9 mmol)을 50℃로 가열중인 황산 (150g)에 소량씩 첨가하여 반응시켰다. 반응 종결 확인 후, 1M NaOH 수용액으로 중화시키고, 형성된 고체를 필터하여 톨루엔에 녹인 후, 실리카겔 컬럼 및 재결정하였다. 이 합성법으로 생성물 14.5g (수율: 54%)를 얻었다.

[0184] 3. Sub 1-29의 합성에



[0185] (1) Sub 1-I-29 합성

[0186] (2-Bromophenyl)diphenylmethanol (30.0g 88.4 mmol), Bis(pinacolato)diboron (40.4g, 159 mmol), Pd(dppf)Cl₂ (1.94g, 2.65 mmol) 및 Potassium acetate (17.4g, 176.87 mmol)을 톨루엔 300ml에 녹여 환류 교반하였다. 반응 종결 확인 후, 물 100ml 2차례 투입하여 세척하였다. 유기층을 분리하여, 실리카겔 컬럼 및 재결정하였다. 이 합성법으로 생성물 23.9g (수율: 70%)을 얻었다.

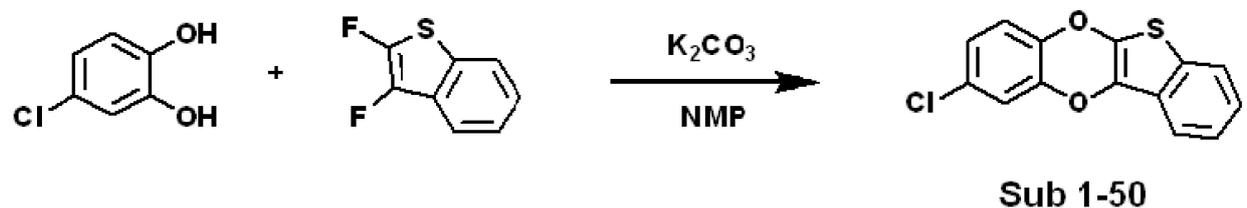
[0187] (2) Sub 1-II-29 합성

[0188] 상기 합성에서 얻어진 Sub 1-I-29 (23.9g, 61.9 mmol), 3-Bromo-4-chlorobenzofuran (14.3g, 61.9 mmol), Pd(PPh₃)₄ (2.14g, 1.86 mmol) 및 NaOH (4.95g, 124 mmol)을 THF 200ml 및 H₂O 50ml의 용액에 녹여 환류 교반 실시하였다. 반응 종결 확인 후, 유기층을 분리하여 물 50ml 2차례 투입하여 세척하였다. 분리한 유기층을 실리카겔 컬럼하여 생성물 19.1g (수율: 75%)을 얻었다.

[0189] (3) Sub 1-29의 합성

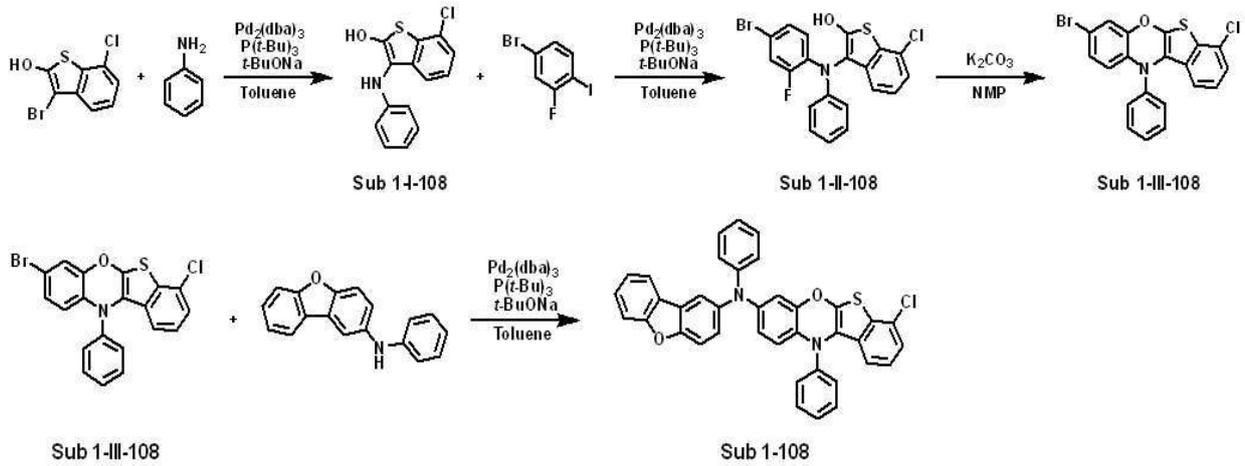
[0190] 상기 합성에서 얻어진 Sub 1-II-29 (19.1g 46.4 mmol)을 Trifluoromethanesulfonic acid 150ml에 소량씩 첨가하여 반응시켰다. 반응 종결 확인 후, 용액을 피리딘으로 중화시킨 후, 물 300ml에 투입하여 형성된 고체를 필터하였다. 필터하여 얻은 고체를 톨루엔에 녹인 후, 실리카겔 컬럼 및 재결정 하여 생성물 11.8g (수율: 62%)을 얻었다.

[0191] 4. Sub 1-50의 합성에



[0192] 4-Chlorobenzene-1,2-diol (20g, 138 mmol), 2,3-Difluorobenzo[b]thiophene (23.6g, 138 mmol) 및 K₂CO₃(57.4 g, 415 mmol)을 N-Methyl-2-pyrrolidone 460 mL에 녹여 110℃에서 교반하였다. 반응 종결 확인 후, 상온으로 냉각하여 물 2L에 천천히 투입해 고체를 형성시켜 필터하였다. 필터하여 얻은 고체를 톨루엔에 녹인 후, 실리카겔 컬럼 및 재결정하여 생성물 26.6g (수율: 70%)을 얻었다.

[0195] 5. Sub 1-108의 합성에



[0196]

[0197] (1) Sub 1-I-108 합성

[0198] 3-Bromo-7-chlorobenzo[b]thiophen-2-ol (40 g, 152 mmol), 아닐린 (21.2 g, 228 mmol), Pd₂(dba)₃ (4.17 g, 4.55 mmol) 및 t-BuONa (29.2 g, 304 mmol)를 둥근바닥플라스크에 넣고 무수 톨루엔 (500 mL)에 녹인 후, P(t-Bu)₃ (50wt% Sol.) (3.69 mL, 9.11 mmol)을 첨가하고, 50°C에서 2시간 가량 가열 및 교반하였다. 반응 종결 확인 후, 실온 냉각하여 CH₂Cl₂와 물로 추출한다. 분리한 유기층은 MgSO₄로 건조하고 농축한 후, 생성된 화합물을 실리카겔 컬럼으로 처리하였다. 이 합성법으로 생성물 34.7g (수율: 83%)을 얻었다.

[0199] (2) Sub 1-II-108 합성

[0200] Sub 1-I-108 (34.7 g, 126 mmol), 4-Bromo-2-fluoro-1-iodobenzene (49.2 g, 164 mmol), Pd₂(dba)₃ (3.46 g, 3.78 mmol) 및 t-BuONa (24.2 g, 252 mmol)를 둥근바닥플라스크에 넣고 무수 톨루엔 (420 mL)에 녹인 후, P(t-Bu)₃ (50wt% Sol.) (3.06 mL, 7.55 mmol)을 첨가하고, 50°C에서 1시간 가량 가열 및 교반하였다. 반응 종결 확인 후, 실온 냉각하여 CH₂Cl₂와 물로 추출한다. 분리한 유기층은 MgSO₄로 건조하고 농축한 후, 생성된 화합물을 실리카겔 컬럼으로 처리하였다. 이 합성법으로 생성물 48.0g (수율: 85%)을 얻었다.

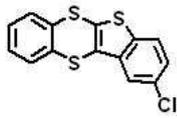
[0201] (3) Sub 1-III-108 합성

[0202] Sub 1-II-108 (48.0g, 107 mmol) 및 K₂CO₃ (29.6 g, 214 mmol)을 N-Methyl-2-pyrrolidone 360 mL에 녹여 140°C에서 교반하였다. 반응 종결 확인 후, 상온으로 냉각하여 물 2L에 천천히 투입해 고체를 형성시켜 필터하였다. 필터하여 얻은 고체를 톨루엔에 녹인 후, 실리카겔 컬럼 및 재결정하여 생성물 27.5g (수율: 60%)을 얻었다.

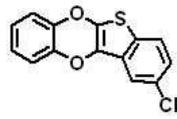
[0203] (4) Sub 1-108 합성

[0204] Sub 1-III-108 (27.5g, 64.1 mmol), N-phenyldibenzo[b,d]furan-2-amine (16.6 g, 64.1 mmol), Pd₂(dba)₃ (1.76 g, 1.92 mmol) 및 t-BuONa (12.3 g, 128 mmol)를 둥근바닥플라스크에 넣고 무수 톨루엔 (210 mL)에 녹인 후, P(t-Bu)₃ (50wt% Sol.) (1.56 mL, 3.85 mmol)을 첨가하고, 50°C에서 3시간 가량 가열 및 교반하였다. 반응 종결 확인 후, 실온 냉각하여 CH₂Cl₂와 물로 추출한다. 분리한 유기층은 MgSO₄로 건조하고 농축한 후, 생성된 화합물을 실리카겔 컬럼으로 처리하였다. 이 합성법으로 생성물 31.2g (수율: 80%)을 얻었다.

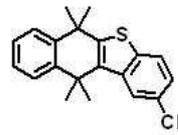
[0205] Sub 1에 속하는 화합물은 아래와 같은 화합물일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.



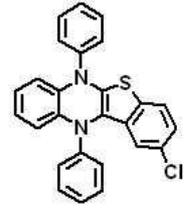
Sub 1-1



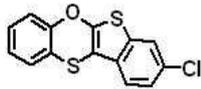
Sub 1-2



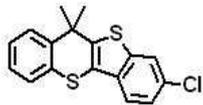
Sub 1-3



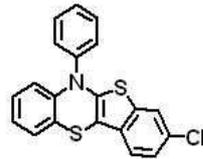
Sub 1-4



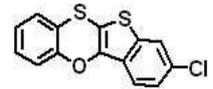
Sub 1-5



Sub 1-6

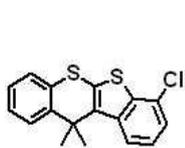


Sub 1-7

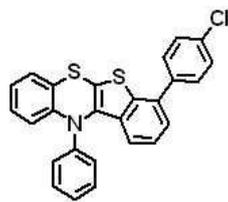


Sub 1-8

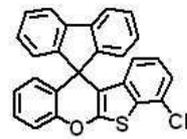
[0206]



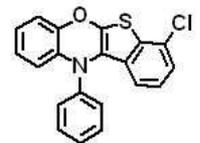
Sub 1-9



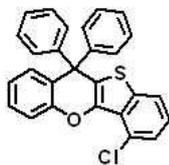
Sub 1-10



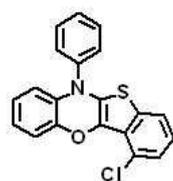
Sub 1-11



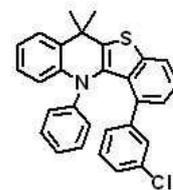
Sub 1-12



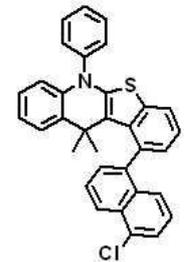
Sub 1-13



Sub 1-14

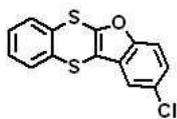


Sub 1-15

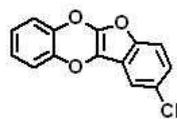


Sub 1-16

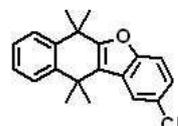
[0207]



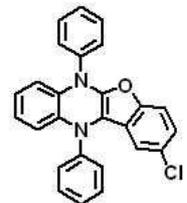
Sub 1-17



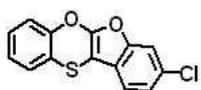
Sub 1-18



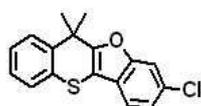
Sub 1-19



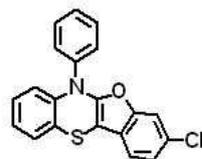
Sub 1-20



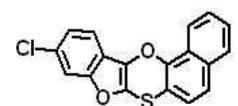
Sub 1-21



Sub 1-22

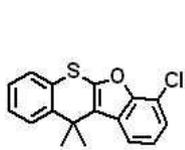


Sub 1-23

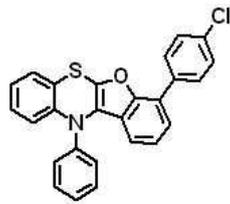


Sub 1-24

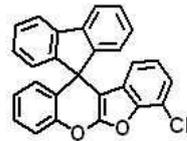
[0208]



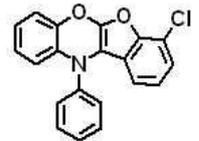
Sub 1-25



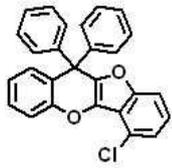
Sub 1-26



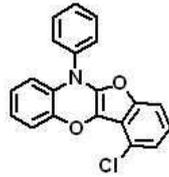
Sub 1-27



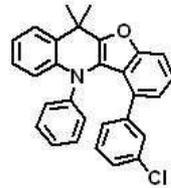
Sub 1-28



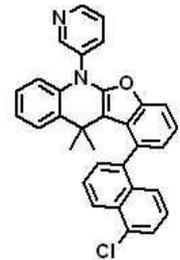
Sub 1-29



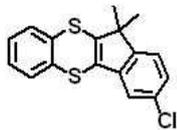
Sub 1-30



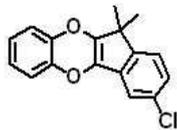
Sub 1-31



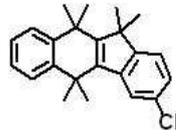
Sub 1-32



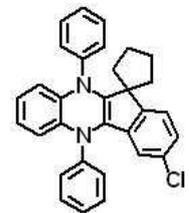
Sub 1-33



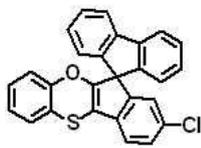
Sub 1-34



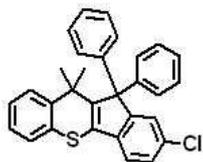
Sub 1-35



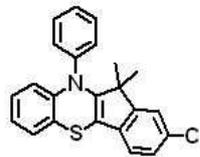
Sub 1-36



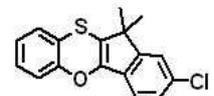
Sub 1-37



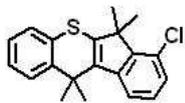
Sub 1-38



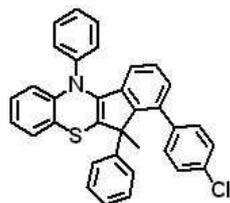
Sub 1-39



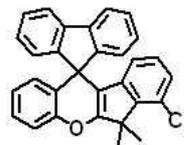
Sub 1-40



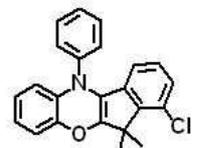
Sub 1-41



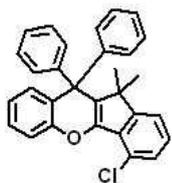
Sub 1-42



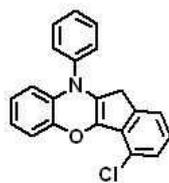
Sub 1-43



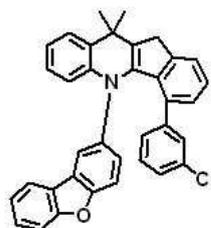
Sub 1-44



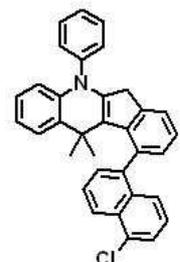
Sub 1-45



Sub 1-46



Sub 1-47

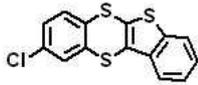


Sub 1-48

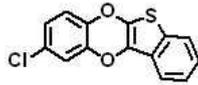
[0209]

[0210]

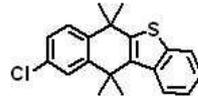
[0211]



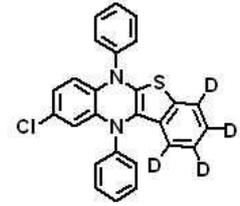
Sub 1-49



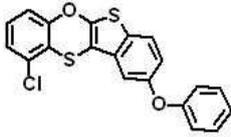
Sub 1-50



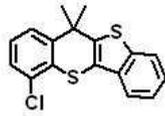
Sub 1-51



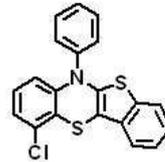
Sub 1-52



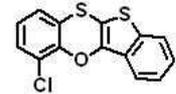
Sub 1-53



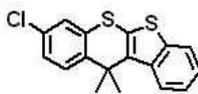
Sub 1-54



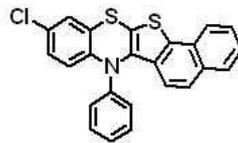
Sub 1-55



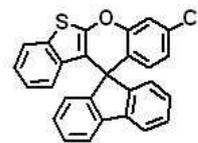
Sub 1-56



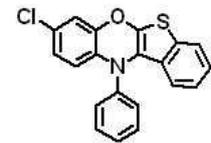
Sub 1-57



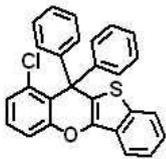
Sub 1-58



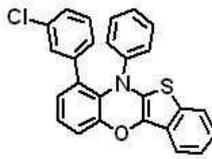
Sub 1-59



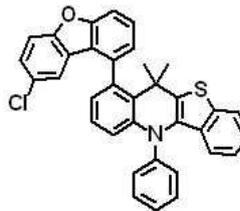
Sub 1-60



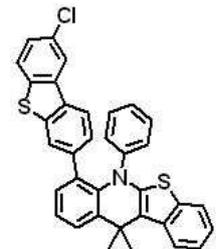
Sub 1-61



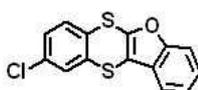
Sub 1-62



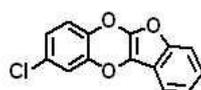
Sub 1-63



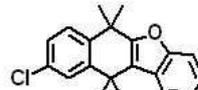
Sub 1-64



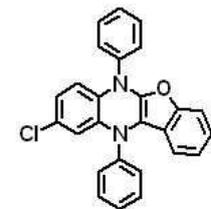
Sub 1-65



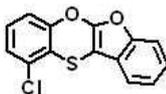
Sub 1-66



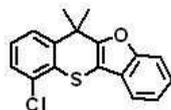
Sub 1-67



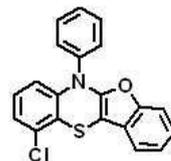
Sub 1-68



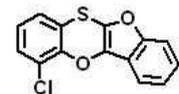
Sub 1-69



Sub 1-70



Sub 1-71

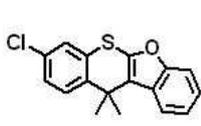


Sub 1-72

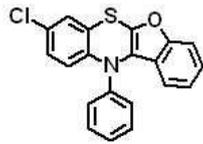
[0212]

[0213]

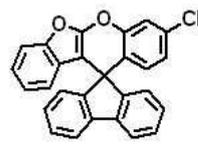
[0214]



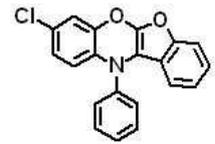
Sub 1-73



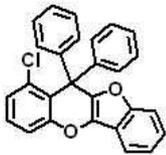
Sub 1-74



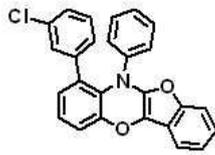
Sub 1-75



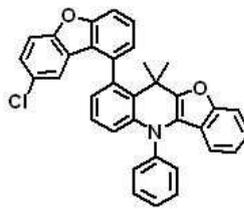
Sub 1-76



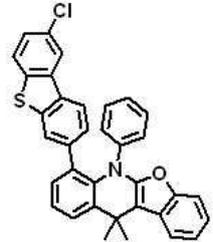
Sub 1-77



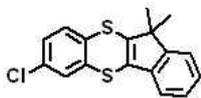
Sub 1-78



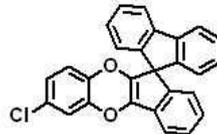
Sub 1-79



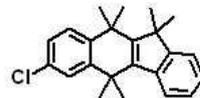
Sub 1-80



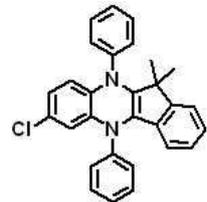
Sub 1-81



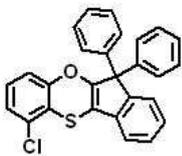
Sub 1-82



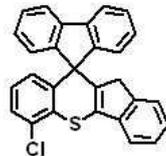
Sub 1-83



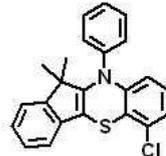
Sub 1-84



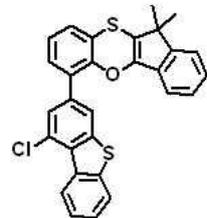
Sub 1-85



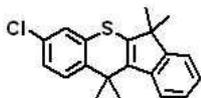
Sub 1-86



Sub 1-87



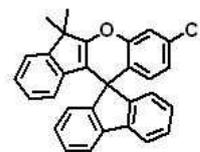
Sub 1-88



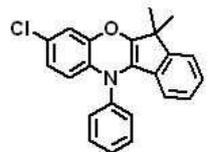
Sub 1-89



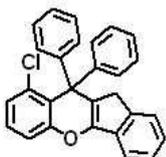
Sub 1-90



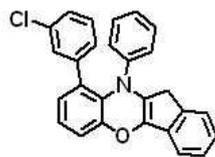
Sub 1-91



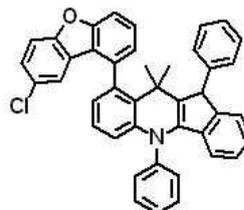
Sub 1-92



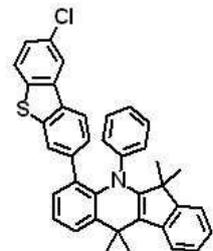
Sub 1-93



Sub 1-94



Sub 1-95

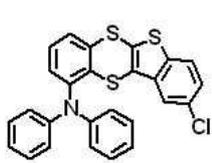


Sub 1-96

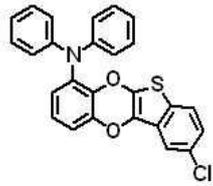
[0215]

[0216]

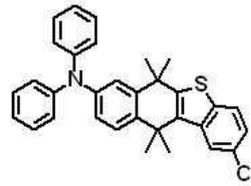
[0217]



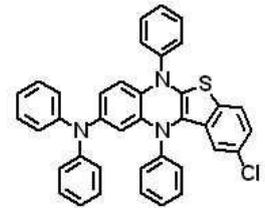
Sub 1-97



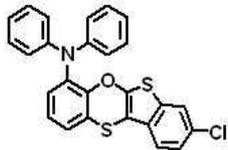
Sub 1-98



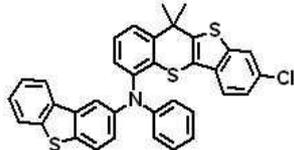
Sub 1-99



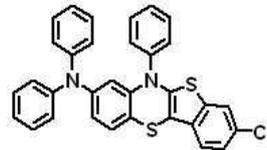
Sub 1-100



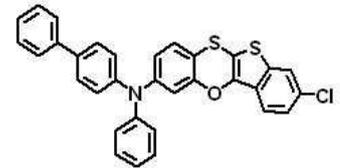
Sub 1-101



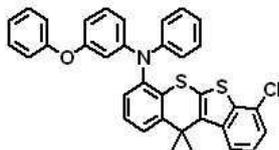
Sub 1-102



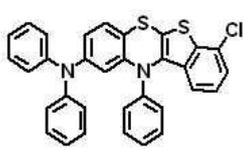
Sub 1-103



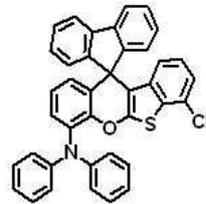
Sub 1-104



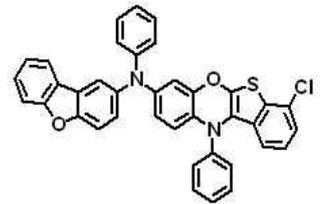
Sub 1-105



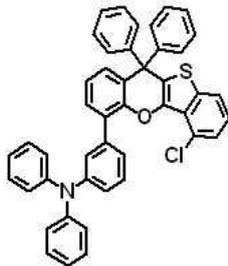
Sub 1-106



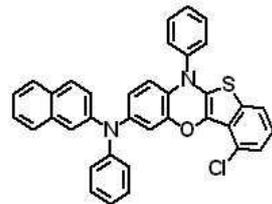
Sub 1-107



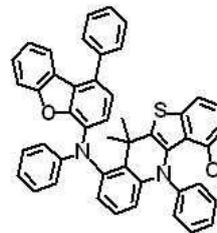
Sub 1-108



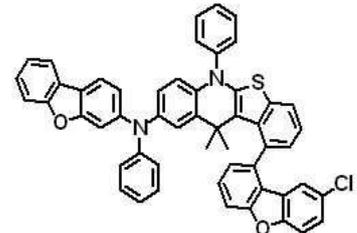
Sub 1-109



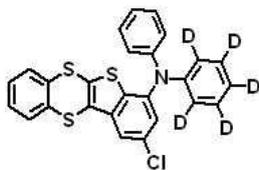
Sub 1-110



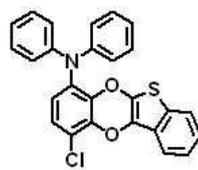
Sub 1-111



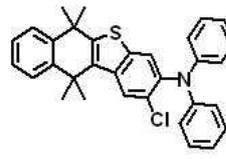
Sub 1-112



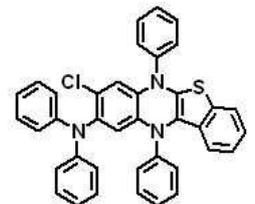
Sub 1-113



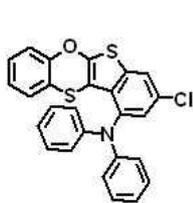
Sub 1-114



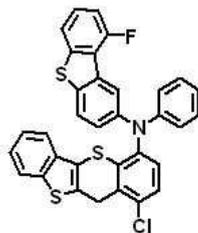
Sub 1-115



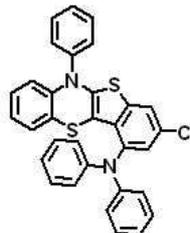
Sub 1-116



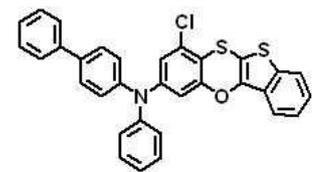
Sub 1-117



Sub 1-118



Sub 1-119



Sub 1-120

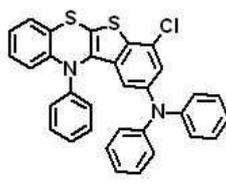
[0218]

[0219]

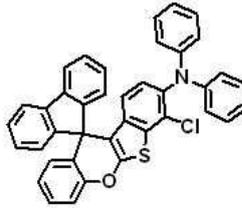
[0220]



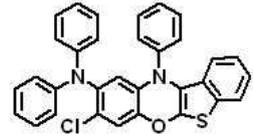
Sub 1-121



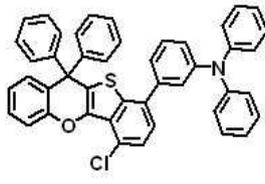
Sub 1-122



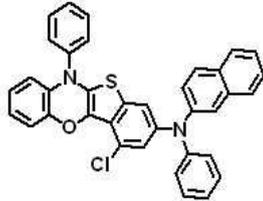
Sub 1-123



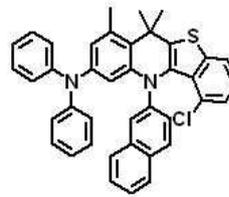
Sub 1-124



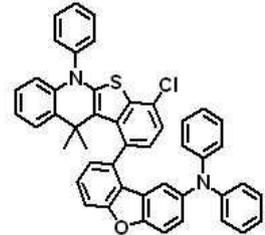
Sub 1-125



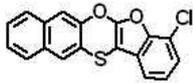
Sub 1-126



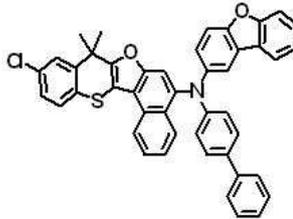
Sub 1-127



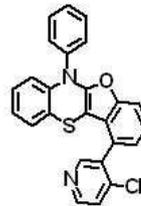
Sub 1-128



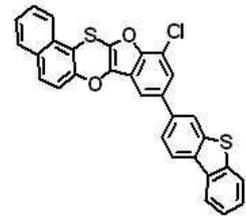
Sub 1-129



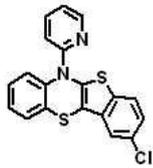
Sub 1-130



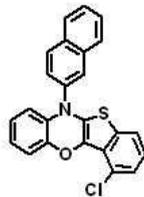
Sub 1-131



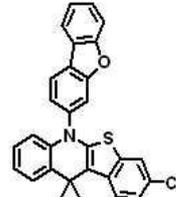
Sub 1-132



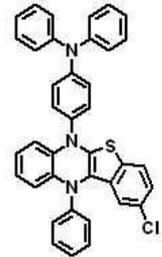
Sub 1-133



Sub 1-134



Sub 1-135



Sub 1-136

아래 표 1은 Sub 1에 속하는 일부 화합물의 FD-MS 값을 나타낸 것이다.

표 1

화합물	FD-MS	화합물	FD-MS
Sub 1-1	m/z=305.94 (C ₁₄ H ₇ ClS ₃ =306.84)	Sub 1-2	m/z=273.99 (C ₁₄ H ₇ ClO ₂ S=274.72)
Sub 1-3	m/z=326.09 (C ₂₀ H ₁₉ ClS=326.88)	Sub 1-4	m/z=424.08 (C ₂₆ H ₁₇ ClN ₂ S=424.95)
Sub 1-5	m/z=289.96 (C ₁₄ H ₇ ClOS ₂ =290.78)	Sub 1-6	m/z=316.01 (C ₁₇ H ₁₃ ClS ₂ =316.86)
Sub 1-7	m/z=365.01 (C ₂₀ H ₁₂ ClNS ₂ =365.89)	Sub 1-8	m/z=289.96 (C ₁₄ H ₇ ClOS ₂ =290.78)
Sub 1-9	m/z=316.01 (C ₁₇ H ₁₃ ClS ₂ =316.86)	Sub 1-10	m/z=441.04 (C ₂₆ H ₁₆ ClNS ₂ =441.99)
Sub 1-11	m/z=422.05 (C ₂₇ H ₁₅ ClOS=422.93)	Sub 1-12	m/z=349.03 (C ₂₀ H ₁₂ ClNOS=349.83)
Sub 1-13	m/z=424.07 (C ₂₇ H ₁₇ ClOS=424.94)	Sub 1-14	m/z=349.03 (C ₂₀ H ₁₂ ClNOS=349.83)
Sub 1-15	m/z=451.12 (C ₂₉ H ₂₂ ClNS=452.01)	Sub 1-16	m/z=501.13 (C ₃₃ H ₂₄ ClNS=502.07)
Sub 1-17	m/z=289.96 (C ₁₄ H ₇ ClOS ₂ =290.78)	Sub 1-18	m/z=258.01 (C ₁₄ H ₇ ClO ₃ =258.66)
Sub 1-19	m/z=310.11 (C ₂₀ H ₁₉ ClO=310.82)	Sub 1-20	m/z=408.10 (C ₂₆ H ₁₇ ClN ₂ O=408.89)

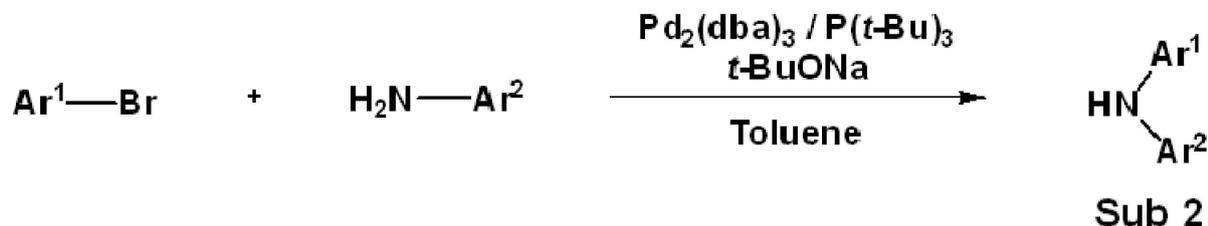
Sub 1-21	m/z=273.99 (C ₁₄ H ₇ C ₁₀ O ₂ S ₋ =274.72)	Sub 1-22	m/z=300.04 (C ₁₇ H ₁₃ C ₁₀ S=300.80)
Sub 1-23	m/z=349.03 (C ₂₀ H ₁₂ C ₁₀ NOS=349.83)	Sub 1-24	m/z=324.00 (C ₁₈ H ₉ C ₁₀ O ₂ S=324.78)
Sub 1-25	m/z=300.04 (C ₁₇ H ₁₃ C ₁₀ S=300.80)	Sub 1-26	m/z=425.06 (C ₂₆ H ₁₆ C ₁₀ NOS=425.93)
Sub 1-27	m/z=406.08 (C ₂₇ H ₁₅ C ₁₀ O ₂ =406.87)	Sub 1-28	m/z=333.06 (C ₂₀ H ₁₂ C ₁₀ N ₂ =333.77)
Sub 1-29	m/z=408.09 (C ₂₇ H ₁₇ C ₁₀ O ₂ =408.88)	Sub 1-30	m/z=333.06 (C ₂₀ H ₁₂ C ₁₀ N ₂ =333.77)
Sub 1-31	m/z=435.14 (C ₂₉ H ₂₂ C ₁₀ N=435.95)	Sub 1-32	m/z=486.15 (C ₃₂ H ₂₃ C ₁₀ N ₂ O=487.00)
Sub 1-33	m/z=316.01 (C ₁₇ H ₁₃ C ₁₀ S ₂ =316.86)	Sub 1-34	m/z=284.06 (C ₁₇ H ₁₃ C ₁₀ O ₂ =284.74)
Sub 1-35	m/z=336.16 (C ₂₃ H ₂₅ Cl=336.90)	Sub 1-36	m/z=460.17 (C ₃₁ H ₂₅ C ₁₀ N ₂ =461.01)
Sub 1-37	m/z=422.05 (C ₂₇ H ₁₅ C ₁₀ S=422.93)	Sub 1-38	m/z=450.12 (C ₃₀ H ₂₃ C ₁₀ S=451.02)
Sub 1-39	m/z=375.08 (C ₂₃ H ₁₈ C ₁₀ NS=375.91)	Sub 1-40	m/z=300.04 (C ₁₇ H ₁₃ C ₁₀ S=300.80)
Sub 1-41	m/z=326.09 (C ₂₀ H ₁₉ C ₁₀ S=326.88)	Sub 1-42	m/z=513.13 (C ₃₄ H ₂₄ C ₁₀ NS=514.08)
Sub 1-43	m/z=432.13 (C ₃₀ H ₂₁ C ₁₀ O=432.95)	Sub 1-44	m/z=359.11 (C ₂₃ H ₁₈ C ₁₀ N=359.85)
Sub 1-45	m/z=434.14 (C ₃₀ H ₂₂ C ₁₀ O=434.96)	Sub 1-46	m/z=331.08 (C ₂₁ H ₁₄ C ₁₀ N=331.80)
Sub 1-47	m/z=523.17 (C ₃₆ H ₂₆ C ₁₀ N=524.06)	Sub 1-48	m/z=483.18 (C ₃₄ H ₂₆ C ₁₀ N=484.04)
Sub 1-49	m/z=305.94 (C ₁₄ H ₇ C ₁₀ S ₃ =306.84)	Sub 1-50	m/z=273.99 (C ₁₄ H ₇ C ₁₀ S ₋ =274.72)
Sub 1-51	m/z=326.09 (C ₂₀ H ₁₉ C ₁₀ S=326.88)	Sub 1-52	m/z=428.11 (C ₂₆ H ₁₃ D ₄ C ₁₀ N ₂ S=428.97)
Sub 1-53	m/z=381.99 (C ₂₀ H ₁₁ C ₁₀ O ₂ S ₂ =382.88)	Sub 1-54	m/z=316.01 (C ₁₇ H ₁₃ C ₁₀ S ₂ =316.86)
Sub 1-55	m/z=365.01 (C ₂₀ H ₁₂ C ₁₀ NS ₂ =365.89)	Sub 1-56	m/z=289.96 (C ₁₄ H ₇ C ₁₀ S ₂ =290.78)
Sub 1-57	m/z=316.01 (C ₁₇ H ₁₃ C ₁₀ S ₂ =316.86)	Sub 1-58	m/z=415.03 (C ₂₄ H ₁₄ C ₁₀ NS ₂ =415.95)
Sub 1-59	m/z=422.05 (C ₂₇ H ₁₅ C ₁₀ S=422.93)	Sub 1-60	m/z=349.03 (C ₂₀ H ₁₂ C ₁₀ NOS=349.83)
Sub 1-61	m/z=424.07 (C ₂₇ H ₁₇ C ₁₀ S=424.94)	Sub 1-62	m/z=425.06 (C ₂₆ H ₁₆ C ₁₀ NOS=425.93)
Sub 1-63	m/z=541.13 (C ₃₅ H ₂₄ C ₁₀ NOS=542.09)	Sub 1-64	m/z=557.10 (C ₃₅ H ₂₄ C ₁₀ NS ₂ =558.15)
Sub 1-65	m/z=289.96 (C ₁₄ H ₇ C ₁₀ S ₂ =290.78)	Sub 1-66	m/z=258.01 (C ₁₄ H ₇ C ₁₀ O ₃ =258.66)
Sub 1-67	m/z=310.11 (C ₂₀ H ₁₉ C ₁₀ O=310.82)	Sub 1-68	m/z=408.10 (C ₂₆ H ₁₇ C ₁₀ N ₂ O=408.89)
Sub 1-69	m/z=273.99 (C ₁₄ H ₇ C ₁₀ O ₂ S=274.72)	Sub 1-70	m/z=300.04 (C ₁₇ H ₁₃ C ₁₀ S=300.80)
Sub 1-71	m/z=349.03 (C ₂₀ H ₁₂ C ₁₀ NOS=349.83)	Sub 1-72	m/z=273.99 (C ₁₄ H ₇ C ₁₀ O ₂ S=274.72)
Sub 1-73	m/z=300.04 (C ₁₇ H ₁₃ C ₁₀ S=300.80)	Sub 1-74	m/z=349.03 (C ₂₀ H ₁₂ C ₁₀ NOS=349.83)
Sub 1-75	m/z=406.08 (C ₂₇ H ₁₅ C ₁₀ O ₂ =406.87)	Sub 1-76	m/z=333.06 (C ₂₀ H ₁₂ C ₁₀ N ₂ =333.77)
Sub 1-77	m/z=408.09 (C ₂₇ H ₁₇ C ₁₀ O ₂ =408.88)	Sub 1-78	m/z=409.09 (C ₂₆ H ₁₆ C ₁₀ N ₂ O=409.87)
Sub 1-79	m/z=525.15 (C ₃₅ H ₂₄ C ₁₀ N ₂ O=526.03)	Sub 1-80	m/z=541.13 (C ₃₅ H ₂₄ C ₁₀ NOS=542.09)
Sub 1-81	m/z=316.01 (C ₁₇ H ₁₃ C ₁₀ S ₂ =316.86)	Sub 1-82	m/z=406.08 (C ₂₇ H ₁₅ C ₁₀ O ₂ =406.87)
Sub 1-83	m/z=336.16 (C ₂₃ H ₂₅ Cl=336.90)	Sub 1-84	m/z=434.15 (C ₂₉ H ₂₃ C ₁₀ N ₂ =434.97)
Sub 1-85	m/z=424.07 (C ₂₇ H ₁₇ C ₁₀ S=424.94)	Sub 1-86	m/z=420.07 (C ₂₃ H ₁₇ C ₁₀ S=420.95)
Sub 1-87	m/z=375.08 (C ₂₃ H ₁₈ C ₁₀ NS=375.91)	Sub 1-88	m/z=482.06 (C ₂₉ H ₁₉ C ₁₀ S ₂ =483.04)
Sub 1-89	m/z=326.09 (C ₂₀ H ₁₉ C ₁₀ S=326.88)	Sub 1-90	m/z=437.10 (C ₂₈ H ₂₀ C ₁₀ NS=437.99)
Sub 1-91	m/z=432.13 (C ₃₀ H ₂₁ C ₁₀ O=432.95)	Sub 1-92	m/z=359.11 (C ₂₃ H ₁₈ C ₁₀ N=359.85)
Sub 1-93	m/z=406.11 (C ₂₈ H ₁₉ C ₁₀ O=406.91)	Sub 1-94	m/z=407.11 (C ₂₇ H ₁₈ C ₁₀ N=407.90)
Sub 1-95	m/z=599.20 (C ₄₂ H ₃₀ C ₁₀ N=600.16)	Sub 1-96	m/z=567.18 (C ₃₈ H ₃₀ C ₁₀ NS=568.18)
Sub 1-97	m/z=473.01 (C ₂₆ H ₁₆ C ₁₀ NS ₃ =474.05)	Sub 1-98	m/z=441.06 (C ₂₆ H ₁₆ C ₁₀ N ₂ O ₂ S=441.93)
Sub 1-99	m/z=493.16 (C ₃₂ H ₂₈ C ₁₀ NS=494.09)	Sub 1-100	m/z=591.15 (C ₃₈ H ₂₆ C ₁₀ NS ₃ S=592.16)
Sub 1-101	m/z=457.04 (C ₂₆ H ₁₆ C ₁₀ NS ₂ =457.99)	Sub 1-102	m/z=589.08 (C ₃₈ H ₂₄ C ₁₀ NS ₃ =590.21)
Sub 1-103	m/z=532.08 (C ₃₂ H ₂₁ C ₁₀ N ₂ S ₂ =533.10)	Sub 1-104	m/z=533.07 (C ₃₂ H ₂₀ C ₁₀ NS ₂ =534.09)
Sub 1-105	m/z=575.11 (C ₃₅ H ₂₆ C ₁₀ NS ₂ =576.17)	Sub 1-106	m/z=532.08 (C ₃₂ H ₂₁ C ₁₀ N ₂ S ₂ =533.10)
Sub 1-107	m/z=589.13 (C ₃₈ H ₂₄ C ₁₀ NOS=590.14)	Sub 1-108	m/z=606.12 (C ₃₈ H ₂₃ C ₁₀ N ₂ O ₂ S=306.84)
Sub 1-109	m/z=667.17 (C ₄₅ H ₃₀ C ₁₀ NOS=668.25)	Sub 1-110	m/z=566.12 (C ₃₆ H ₂₃ C ₁₀ N ₂ O ₂ S=306.84)
Sub 1-111	m/z=708.20 (C ₄₇ H ₃₃ C ₁₀ N ₂ O ₂ S=306.84)	Sub 1-112	m/z=798.21 (C ₅₃ H ₃₅ C ₁₀ N ₂ O ₂ S=799.39)
Sub 1-113	m/z=478.04 (C ₂₆ H ₁₁ D ₅ C ₁₀ NS ₃ =479.08)	Sub 1-114	m/z=441.06 (C ₂₆ H ₁₆ C ₁₀ N ₂ O ₂ S=441.93)
Sub 1-115	m/z=493.16 (C ₃₂ H ₂₈ C ₁₀ NS=494.09)	Sub 1-116	m/z=591.15 (C ₃₈ H ₂₆ C ₁₀ NS ₃ S=592.16)

Sub 1-117	m/z=457.04 (C ₂₆ H ₁₆ ClNOS ₂ =457.99)	Sub 1-118	m/z=579.04 (C ₃₃ H ₁₉ ClFNS ₃ =580.15)
Sub 1-119	m/z=532.08 (C ₃₂ H ₂₁ ClN ₂ S ₂ =533.10)	Sub 1-120	m/z=533.07 (C ₃₂ H ₂₀ ClNOS ₂ =534.09)
Sub 1-121	m/z=501.08 (C ₂₉ H ₂₁ ClFNS ₂ =502.06)	Sub 1-122	m/z=532.08 (C ₃₂ H ₂₁ ClN ₂ S ₂ =533.10)
Sub 1-123	m/z=589.13 (C ₃₉ H ₂₄ ClNOS=590.14)	Sub 1-124	m/z=516.11 (C ₃₂ H ₂₁ ClN ₂ OS=517.04)
Sub 1-125	m/z=667.17 (C ₄₅ H ₃₀ ClNOS=668.25)	Sub 1-126	m/z=566.12 (C ₃₆ H ₂₃ ClN ₂ OS=567.10)
Sub 1-127	m/z=606.19 (C ₄₀ H ₃₁ ClN ₂ S=607.21)	Sub 1-128	m/z=708.20 (C ₄₇ H ₃₃ ClN ₂ OS=709.30)
Sub 1-129	m/z=324.00 (C ₁₈ H ₉ ClO ₂ S=324.78)	Sub 1-130	m/z=683.17 (C ₄₅ H ₃₀ ClNO ₂ S=683.25)
Sub 1-131	m/z=426.06 (C ₂₅ H ₁₅ ClN ₂ OS=426.92)	Sub 1-132	m/z=506.02 (C ₃₀ H ₁₅ ClO ₂ S ₂ =507.02)
Sub 1-133	m/z=366.01 (C ₁₉ H ₁₁ ClN ₂ S ₂ =366.88)	Sub 1-134	m/z=399.05 (C ₂₄ H ₁₄ ClNOS=399.89)
Sub 1-135	m/z=465.10 (C ₂₉ H ₂₀ ClNOS=466.00)	Sub 1-136	m/z=591.15 (C ₃₈ H ₂₆ ClN ₃ S=592.16)

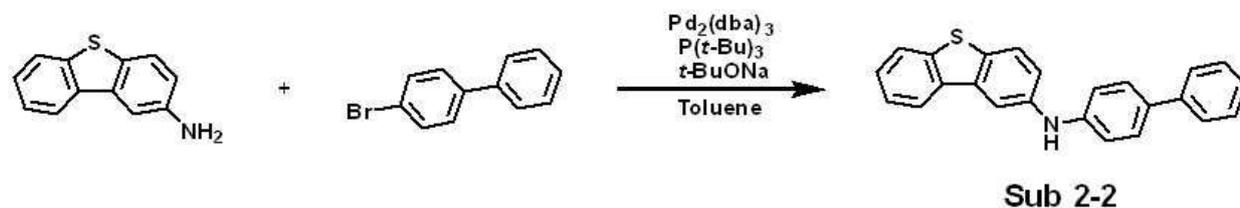
II. Sub 2의 합성 예시

상기 반응식 1의 Sub 2는 하기 반응식 2의 반응경로에 의해 합성될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

<반응식 2>

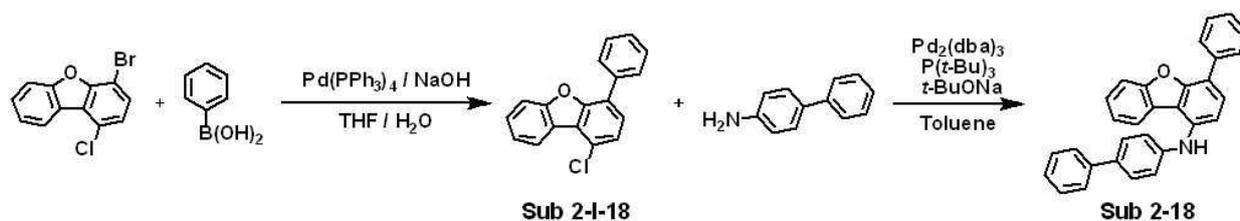


1. Sub 2-2의 합성예



Dibenzo[b,d]thiophen-2-amine (20 g, 100 mmol), 4-Bromo-1,1'-biphenyl (16.4 g, 70.3 mmol), Pd₂(dba)₃ (2.76 g, 3.01 mmol) 및 t-BuONa (19.3 g, 201 mmol)를 둥근바닥플라스크에 넣고 무수 톨루엔 (335 mL)에 녹인 후, P(t-Bu)₃ (50wt% Sol.) (2.44 mL, 6.02 mmol)을 첨가하고, 50°C에서 2시간 가량 가열 및 교반하였다. 반응 종결 확인 후, 실온 냉각하여 CH₂Cl₂와 물로 추출한다. 분리한 유기층은 MgSO₄로 건조하고 농축한 후, 생성된 화합물을 실리카겔 컬럼 (Hexane : CH₂Cl₂ = 3:1) 및 재결정(톨루엔)하여 생성물 20.2 g (수율: 82 %)을 얻었다.

2. Sub 2-18의 합성예



(1) Sub 2-I-18 합성

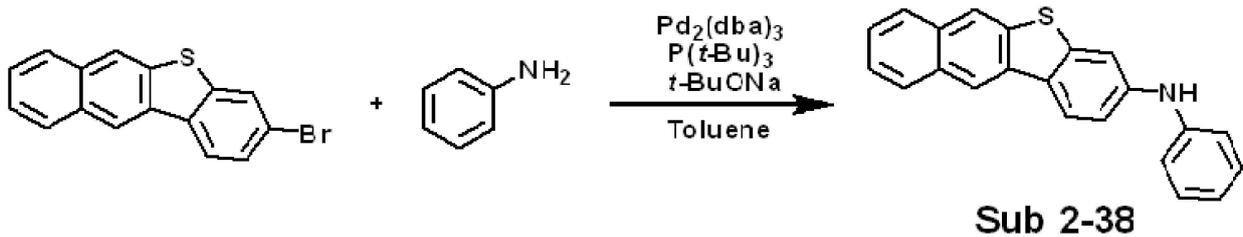
4-Bromo-1-chlorodibenzo[b,d]furan (25 g, 88.8 mmol), Phenylboronic acid (8.7 g, 71.0 mmol) 및 NaOH (7.1 g, 178 mmol)을 둥근바닥플라스크에 넣고 THF (296 mL)와 물 (74mL)로 녹인 후에, Pd(PPh₃)₄ (3.1 g, 2.66

mmol)을 첨가하고, 가열하여 6시간 가량 환류 및 교반하였다. 반응 종결 확인 후, 실온 냉각하여 에틸아세테이트와 물로 추출한 후, 유기층을 분리하여 MgSO₄로 건조하고 농축한 후, 생성된 화합물을 실리카겔 컬럼 (Hexane : CH₂Cl₂ = 10:1)하여 1-Chloro-4-phenyldibenzo-[b,d]furan을 15.2 g (수율: 77 %)을 얻었다.

[0238] (2) Sub 2-18 합성

[0239] 1-Chloro-4-phenyldibenzo[b,d]furan (15.2 g, 54.5 mmol), [1,1'-Biphenyl]-4-amine (12.0 g, 70.9 mmol), Pd₂(dba)₃ (1.50 g, 1.64 mmol) 및 t-BuONa (10.5 g, 109 mmol)를 둥근바닥플라스크에 넣고 무수 톨루엔 (182 mL)에 녹인 후, P(t-Bu)₃ (50wt% Sol.) (1.32 mL, 3.27 mmol)을 첨가하고, 110°C에서 2시간 가량 가열 및 교반하였다. 반응 종결 확인 후, 실온 냉각하여 CH₂Cl₂와 물로 추출한다. 분리한 유기층은 MgSO₄로 건조하고 농축한 후, 생성된 화합물을 실리카겔 컬럼 (Hexane : CH₂Cl₂ = 3:1) 및 재결정(톨루엔)하여 생성물 15.3 g (수율: 68 %)을 얻었다.

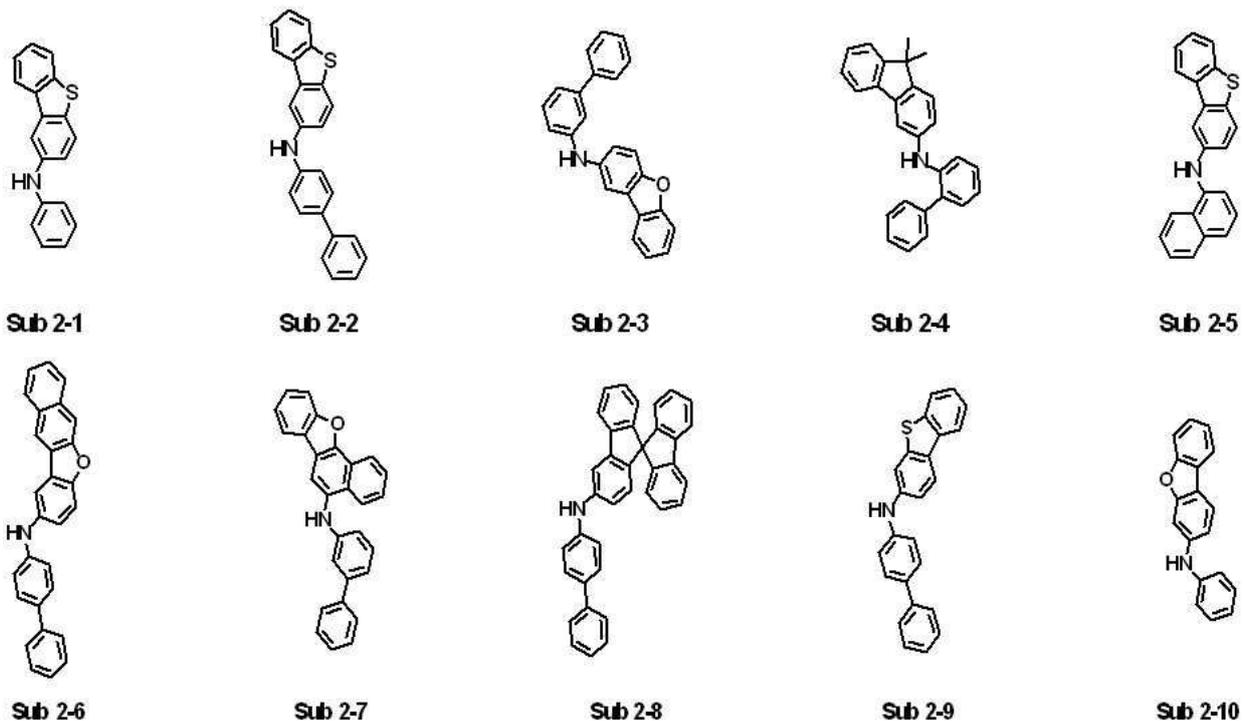
[0240] 3. Sub 2-38의 합성에



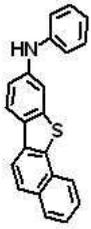
[0241]

[0242] 3-Bromobenzo[b]naphtho[2,3-d]thiophene (20 g, 63.9 mmol), 아닐린 (8.9 g, 95.8 mmol), Pd₂(dba)₃ (1.75 g, 1.92 mmol) 및 t-BuONa (12.3 g, 127 mmol)를 둥근바닥플라스크에 넣고 무수 톨루엔 (213 mL)에 녹인 후, P(t-Bu)₃ (50wt% Sol.) (1.55 mL, 3.83 mmol)을 첨가하고, 70°C에서 2시간 가량 가열 및 교반하였다. 반응 중 고체 형성이 확인되나 반응 종결 확인 후, 실온 냉각하여 고체를 필터 한다. 분리한 고체를 o-Dichlorobenzene에 가열하여 녹인 후, 용액을 목탄(charcoal)을 포함한 실리카겔 컬럼 및 재결정하였다. Sub 2-38 19.1 g (수율: 92 %)를 얻었다.

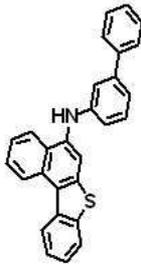
[0243] Sub 2에 속하는 화합물의 예시는 다음과 같으나, 이에 한정되는 것은 아니다.



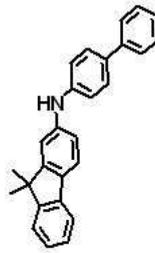
[0244]



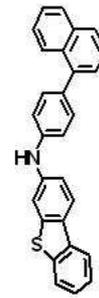
Sub 2-11



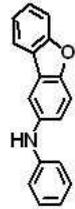
Sub 2-12



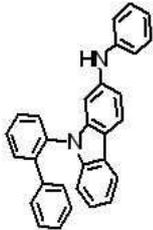
Sub 2-13



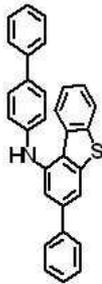
Sub 2-14



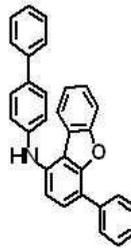
Sub 2-15



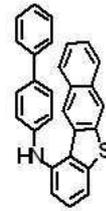
Sub 2-16



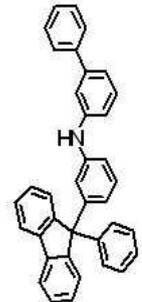
Sub 2-17



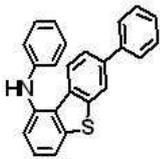
Sub 2-18



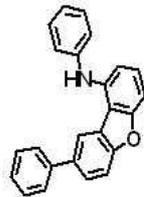
Sub 2-19



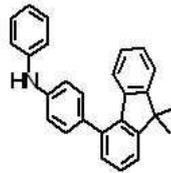
Sub 2-20



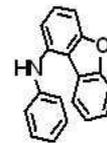
Sub 2-21



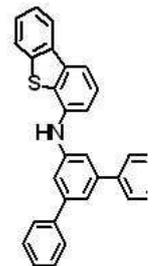
Sub 2-22



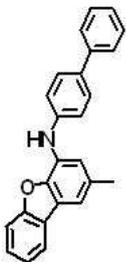
Sub 2-23



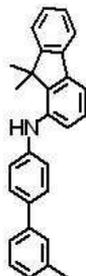
Sub 2-24



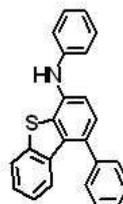
Sub 2-25



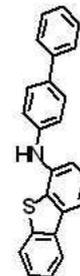
Sub 2-26



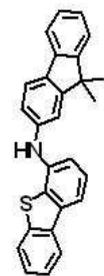
Sub 2-27



Sub 2-28



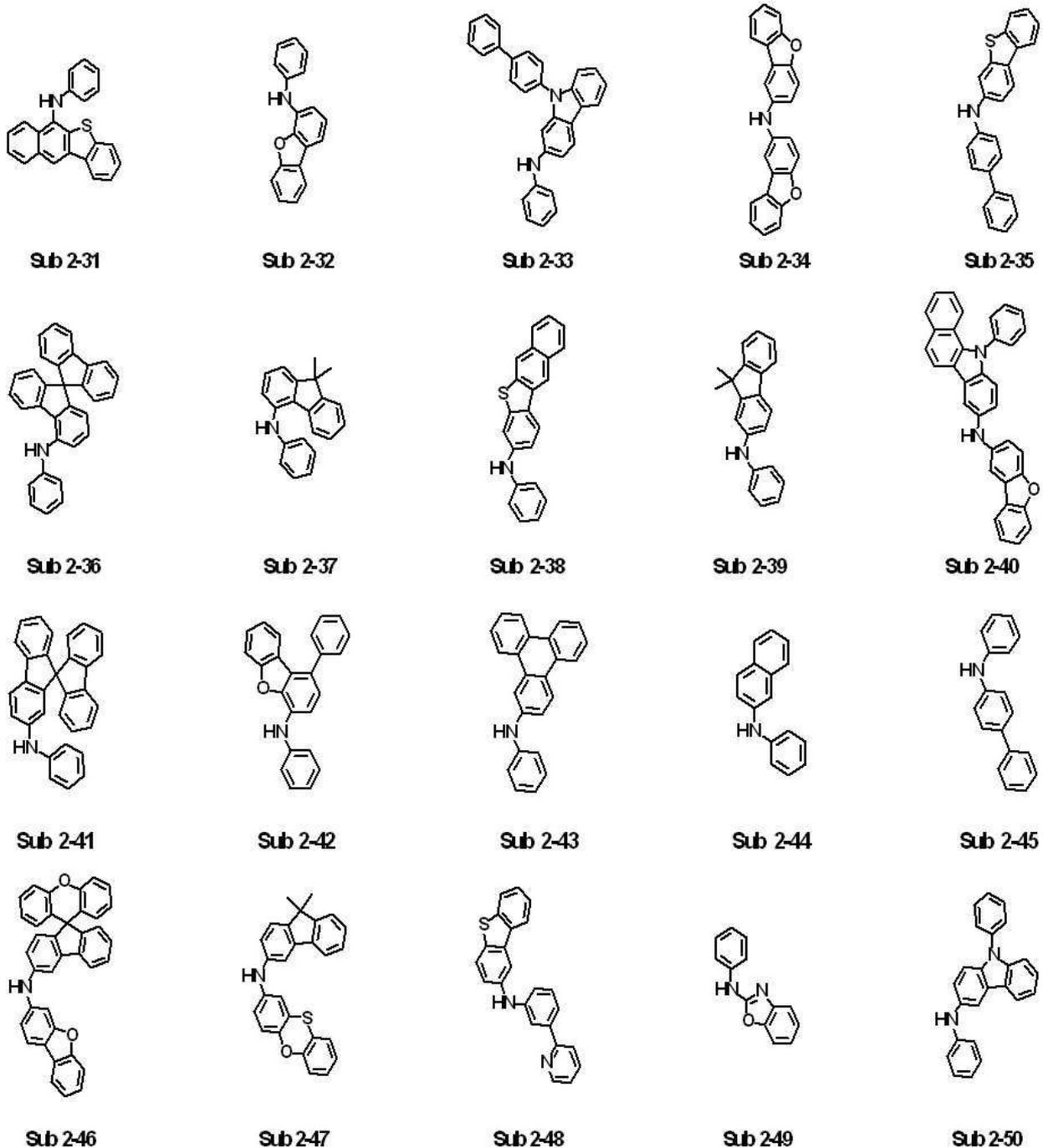
Sub 2-29



Sub 2-30

[0245]

[0246]



[0247]

[0248]

[0249]

아래 표 2는 Sub 2에 속하는 화합물의 FD-MS 값을 나타낸 것이다.

표 2

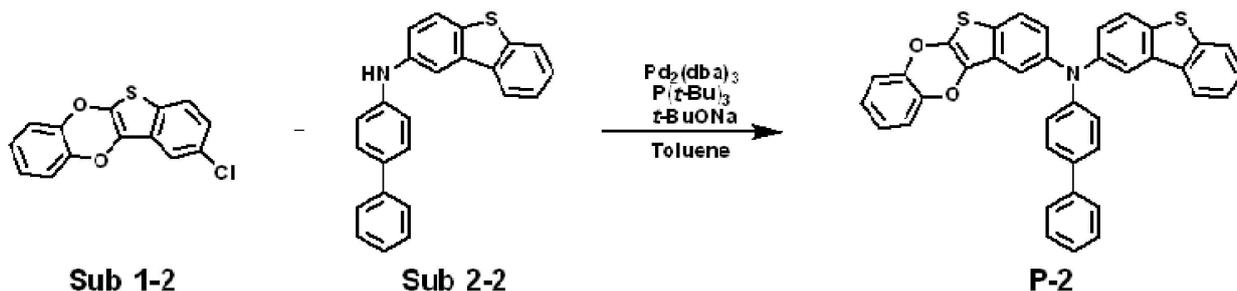
[0250]

화합물	FD-MS	화합물	FD-MS
Sub 2-1	m/z=275.08 (C ₁₈ H ₁₃ NS=275.37)	Sub 2-2	m/z=351.11 (C ₂₄ H ₁₇ NS=351.47)
Sub 2-3	m/z=335.13 (C ₂₄ H ₁₇ NO=335.41)	Sub 2-4	m/z=361.18 (C ₂₇ H ₂₃ N=361.49)
Sub 2-5	m/z=325.09 (C ₂₂ H ₁₅ NS=325.43)	Sub 2-6	m/z=385.15 (C ₂₈ H ₁₉ NO=385.47)
Sub 2-7	m/z=385.15 (C ₂₈ H ₁₉ NO=385.47)	Sub 2-8	m/z=483.20 (C ₃₇ H ₂₅ N=483.61)
Sub 2-9	m/z=351.11 (C ₂₄ H ₁₇ NS=351.47)	Sub 2-10	m/z=259.10 (C ₁₈ H ₁₃ NO=259.31)
Sub 2-11	m/z=325.09 (C ₂₂ H ₁₅ NS=325.43)	Sub 2-12	m/z=401.12 (C ₂₈ H ₁₉ NS=401.53)
Sub 2-13	m/z=361.18 (C ₂₇ H ₂₃ N=361.49)	Sub 2-14	m/z=401.12 (C ₂₈ H ₁₉ NS=401.53)
Sub 2-15	m/z=259.10 (C ₁₈ H ₁₃ NO=259.31)	Sub 2-16	m/z=410.18 (C ₃₀ H ₂₂ N ₂ =410.52)

Sub 2-17	m/z=427.14 (C ₃₀ H ₂₁ NS=427.57)	Sub 2-18	m/z=411.16 (C ₃₀ H ₂₁ NO=411.50)
Sub 2-19	m/z=401.12 (C ₂₈ H ₁₉ NS=401.53)	Sub 2-20	m/z=485.21 (C ₃₇ H ₂₇ N=485.63)
Sub 2-21	m/z=351.11 (C ₂₄ H ₁₇ NS=351.47)	Sub 2-22	m/z=335.13 (C ₂₄ H ₁₇ NO=335.41)
Sub 2-23	m/z=361.18 (C ₂₇ H ₂₃ N=361.49)	Sub 2-24	m/z=259.10 (C ₁₈ H ₁₃ NO=259.31)
Sub 2-25	m/z=427.14 (C ₃₀ H ₂₁ NS=427.57)	Sub 2-26	m/z=349.15 (C ₂₅ H ₁₉ NO=349.43)
Sub 2-27	m/z=375.20 (C ₂₈ H ₂₅ N=375.52)	Sub 2-28	m/z=351.11 (C ₂₄ H ₁₇ NS=351.47)
Sub 2-29	m/z=351.11 (C ₂₄ H ₁₇ NS=351.47)	Sub 2-30	m/z=391.14 (C ₂₇ H ₂₁ NS=391.53)
Sub 2-31	m/z=325.09 (C ₂₂ H ₁₅ NS=325.43)	Sub 2-32	m/z=259.10 (C ₁₈ H ₁₃ NO=259.31)
Sub 2-33	m/z=410.18 (C ₃₀ H ₂₂ N ₂ =410.52)	Sub 2-34	m/z=349.11 (C ₂₄ H ₁₅ NO ₂ =349.39)
Sub 2-35	m/z=351.11 (C ₂₄ H ₁₇ NS=351.47)	Sub 2-36	m/z=407.17 (C ₃₁ H ₂₁ N=407.52)
Sub 2-37	m/z=285.15 (C ₂₁ H ₁₉ N=285.39)	Sub 2-38	m/z=325.09 (C ₂₂ H ₁₅ NS=325.43)
Sub 2-39	m/z=285.15 (C ₂₁ H ₁₉ N=285.39)	Sub 2-40	m/z=474.17 (C ₃₄ H ₂₂ N ₂ O=474.56)
Sub 2-41	m/z=407.17 (C ₃₁ H ₂₁ N=407.52)	Sub 2-42	m/z=335.13 (C ₂₄ H ₁₇ NO=335.41)
Sub 2-43	m/z=319.14 (C ₂₄ H ₁₇ N=319.41)	Sub 2-44	m/z=219.10 (C ₁₆ H ₁₃ N=219.29)
Sub 2-45	m/z=245.12 (C ₁₈ H ₁₅ N=245.33)	Sub 2-46	m/z=513.17 (C ₃₇ H ₂₃ NO ₂ =513.60)
Sub 2-47	m/z=407.13 (C ₂₇ H ₂₁ NOS=407.53)	Sub 2-48	m/z=352.10 (C ₂₃ H ₁₆ N ₂ S=352.46)
Sub 2-49	m/z=210.08 (C ₁₃ H ₁₀ N ₂ O=210.24)	Sub 2-50	m/z=334.15 (C ₂₄ H ₁₈ N ₂ =334.42)

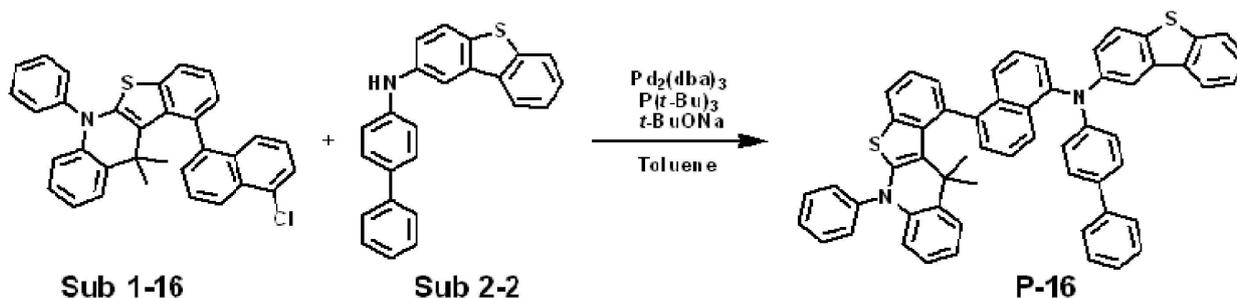
III. 최종화합물(Final products)의 합성 예시

1. P-2의 합성예



Sub 1-2 (10 g, 36.4 mmol), Sub 2-2 (12.8 g, 36.4 mmol), Pd₂(dba)₃ (1.00 g, 1.09 mmol) 및 t-BuONa (7.00 g, 72.8 mmol)를 둥근바닥플라스크에 넣고 무수 톨루엔 (121 mL)에 녹인 후, P(t-Bu)₃ (50wt% Sol.) (0.88 mL, 2.18 mmol)을 첨가하고, 110°C에서 4시간 가열 및 교반하였다. 반응 종결 확인 후, 실온 냉각하여 CH₂Cl₂와 물로 추출한다. 분리한 유기층은 MgSO₄로 건조하고 농축한 후, 생성된 화합물을 실리카겔 컬럼 (Hexane : CH₂Cl₂ = 4:1) 및 재결정하여 P-2를 15.2 g (수율: 72 %) 얻었다.

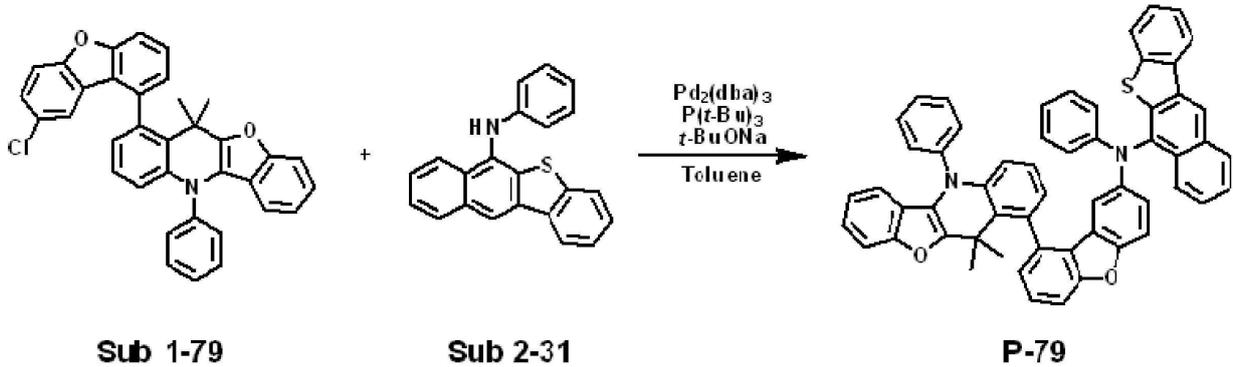
2. P-16의 합성예



Sub 1-16 (7.0 g, 13.9 mmol)과 Sub 2-2 (4.9g, 13.9 mmol), Pd₂(dba)₃ (0.38 g, 0.42 mmol), t-BuONa (2.68

g, 27.9 mmol), 무수 톨루엔 (46 mL) 및 P(t-Bu)₃ (50wt% Sol.) (0.34 mL, 0.84 mmol)을 상기 P-1의 방법에 따라 합성하여 P-16을 7.5 g (수율: 66 %) 얻었다.

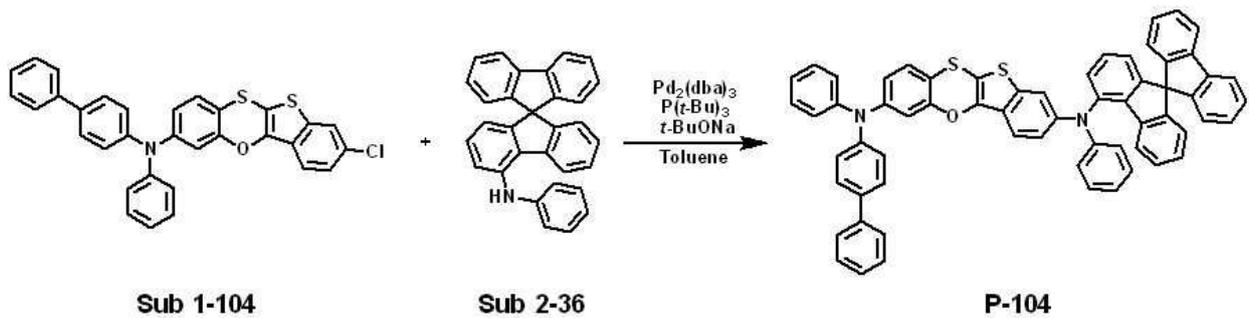
[0259] 3. P-79의 합성예



[0260]

[0261] Sub 1-79 (5.0 g, 9.51 mmol)과 Sub 2-31 (3.1g, 9.51 mmol), Pd₂(dba)₃ (0.26 g, 0.29 mmol), t-BuONa (1.83 g, 19.0 mmol), 무수 톨루엔 (32 mL) 및 P(t-Bu)₃ (50wt% Sol.) (0.23 mL, 0.57 mmol)을 상기 P-1의 방법에 따라 합성하여 P-79를 4.4 g (수율: 57 %) 얻었다.

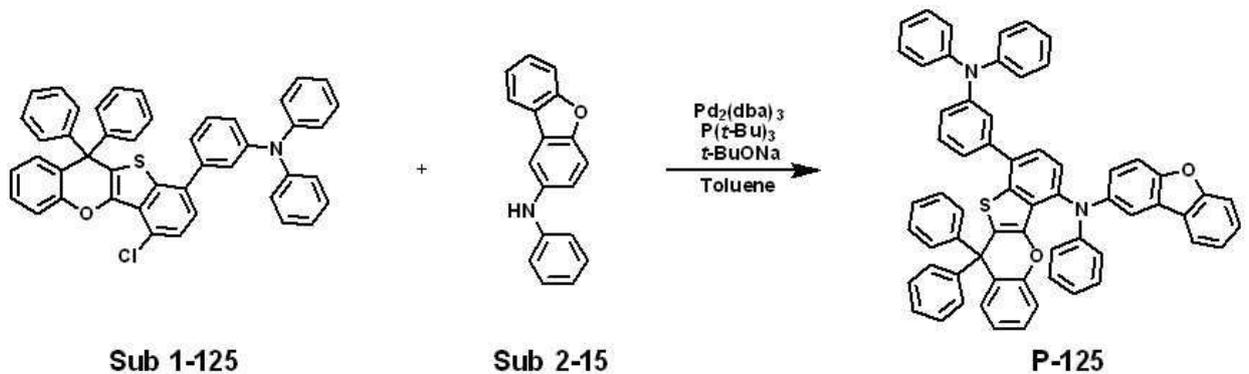
[0262] 4. P-104의 합성예



[0263]

[0264] Sub 1-104 (10.0 g, 18.7 mmol)과 Sub 2-36 (7.63g, 18.7 mmol), Pd₂(dba)₃ (0.51 g, 0.56 mmol), t-BuONa (3.60 g, 37.5 mmol), 무수 톨루엔 (62 mL) 및 P(t-Bu)₃ (50wt% Sol.) (0.45 mL, 1.12 mmol)을 상기 P-1의 방법에 따라 합성하여 P-104를 12.5 g (수율: 74 %) 얻었다.

[0265] 4. P-125의 합성예



[0266]

[0267] 한편, 상기와 같은 합성예에 따라 제조된 본 발명의 화합물 P-1 내지 P-144의 FD-MS 값은 하기 표 3과 같다.

표 3

[0268]

화합물	FD-MS	화합물	FD-MS
P-1	m/z=605.09 (C ₃₈ H ₂₃ NOS ₃ =605.79)	P-2	m/z=589.12 (C ₃₈ H ₂₃ NO ₂ S ₂ =589.73)

P-3	m/z=625.24 (C ₄₄ H ₃₅ NOS=625.83)	P-4	m/z=749.29 (C ₅₃ H ₃₉ N ₃ S=749.98)
P-5	m/z=579.08 (C ₃₆ H ₂₁ NOS ₃ =579.75)	P-6	m/z=665.18 (C ₄₅ H ₃₁ NOS ₂ =665.87)
P-7	m/z=714.18 (C ₄₈ H ₃₀ N ₂ OS ₂ =714.90)	P-8	m/z=737.18 (C ₅₁ H ₃₁ NOS ₂ =737.94)
P-9	m/z=631.15 (C ₄₁ H ₂₉ NS ₃ =631.87)	P-10	m/z=664.16 (C ₄₄ H ₂₈ N ₂ OS ₂ =664.84)
P-11	m/z=711.17 (C ₄₉ H ₂₉ NOS ₂ =711.90)	P-12	m/z=714.18 (C ₄₈ H ₃₀ N ₂ OS ₂ =714.90)
P-13	m/z=749.28 (C ₅₄ H ₃₉ NOS=749.97)	P-14	m/z=714.18 (C ₄₈ H ₃₀ N ₂ OS ₂ =714.90)
P-15	m/z=674.24 (C ₄₇ H ₃₄ N ₂ OS=674.86)	P-16	m/z=816.26 (C ₅₇ H ₄₀ N ₂ S ₂ =817.08)
P-17	m/z=529.06 (C ₃₂ H ₁₉ NOS ₃ =529.69)	P-18	m/z=573.14 (C ₃₈ H ₂₃ NO ₃ S=573.67)
P-19	m/z=609.27 (C ₄₄ H ₃₅ NO ₂ =609.77)	P-20	m/z=733.31 (C ₅₃ H ₃₉ N ₃ O=733.92)
P-21	m/z=563.10 (C ₃₆ H ₂₁ NO ₂ S ₂ =563.69)	P-22	m/z=649.21 (C ₄₅ H ₃₁ NO ₂ S=649.81)
P-23	m/z=698.20 (C ₄₈ H ₃₀ N ₂ O ₂ S=698.84)	P-24	m/z=771.22 (C ₅₅ H ₃₃ NO ₂ S=771.93)
P-25	m/z=615.17 (C ₄₁ H ₂₉ NOS ₂ =615.81)	P-26	m/z=648.19 (C ₄₄ H ₂₈ N ₂ O ₂ S=648.78)
P-27	m/z=695.19 (C ₄₉ H ₂₉ NO ₂ S=695.84)	P-28	m/z=698.20 (C ₄₈ H ₃₀ N ₂ O ₂ S=698.84)
P-29	m/z=733.30 (C ₅₄ H ₃₉ NO ₂ =733.91)	P-30	m/z=698.20 (C ₄₈ H ₃₀ N ₂ O ₂ S=698.84)
P-31	m/z=658.26 (C ₄₇ H ₃₄ N ₂ O ₂ =658.80)	P-32	m/z=801.28 (C ₅₆ H ₃₉ N ₃ OS=802.01)
P-33	m/z=555.11 (C ₃₅ H ₂₅ NS ₃ =555.77)	P-34	m/z=599.19 (C ₄₁ H ₂₉ NO ₂ S=599.75)
P-35	m/z=635.32 (C ₄₇ H ₄₁ NO=635.85)	P-36	m/z=785.38 (C ₅₈ H ₃₇ N ₃ =786.04)
P-37	m/z=711.17 (C ₄₉ H ₂₉ NOS ₂ =711.90)	P-38	m/z=799.29 (C ₅₈ H ₄₁ NOS=800.03)
P-39	m/z=724.25 (C ₅₁ H ₃₆ N ₂ OS=724.92)	P-40	m/z=747.26 (C ₅₄ H ₃₇ NOS=747.96)
P-41	m/z=641.22 (C ₄₄ H ₃₅ NS ₂ =641.89)	P-42	m/z=887.33 (C ₆₄ H ₄₅ N ₃ S=888.15)
P-43	m/z=721.24 (C ₅₂ H ₃₅ NOS=721.92)	P-44	m/z=724.25 (C ₅₁ H ₃₆ N ₂ OS=724.92)
P-45	m/z=759.35 (C ₅₇ H ₄₅ NO=759.99)	P-46	m/z=696.22 (C ₄₉ H ₃₂ N ₂ OS=696.87)
P-47	m/z=746.29 (C ₅₄ H ₃₈ N ₂ O ₂ =746.91)	P-48	m/z=798.31 (C ₅₈ H ₄₂ N ₂ S=799.05)
P-49	m/z=697.10 (C ₄₄ H ₂₇ NS ₄ =697.95)	P-50	m/z=649.17 (C ₄₄ H ₂₇ NO ₃ S=649.76)
P-51	m/z=691.24 (C ₄₈ H ₃₇ NS ₂ =691.95)	P-52	m/z=877.34 (C ₆₃ H ₃₉ D ₄ N ₃ S=878.14)
P-53	m/z=697.12 (C ₄₄ H ₂₇ NO ₂ S ₃ =697.89)	P-54	m/z=615.17 (C ₄₁ H ₂₉ NOS ₂ =615.81)
P-55	m/z=690.22 (C ₄₇ H ₃₄ N ₂ S ₂ =690.92)	P-56	m/z=695.10 (C ₄₄ H ₂₅ NO ₂ S ₃ =695.87)
P-57	m/z=707.18 (C ₄₇ H ₃₃ NS ₃ =707.97)	P-58	m/z=728.20 (C ₄₉ H ₃₂ N ₂ OS ₂ =728.93)
P-59	m/z=761.28 (C ₅₅ H ₃₉ NOS=761.98)	P-60	m/z=664.16 (C ₄₄ H ₂₈ N ₂ OS ₂ =664.84)
P-61	m/z=739.20 (C ₅₁ H ₃₃ NOS ₂ =739.95)	P-62	m/z=780.23 (C ₅₃ H ₃₆ N ₂ OS ₂ =781.00)
P-63	m/z=830.24 (C ₅₇ H ₃₈ N ₂ OS ₂ =831.06)	P-64	m/z=780.23 (C ₅₃ H ₃₆ N ₂ OS ₂ =781.00)
P-65	m/z=681.13 (C ₄₄ H ₂₇ NOS ₃ =681.89)	P-66	m/z=633.19 (C ₄₄ H ₂₇ NO ₄ =633.70)
P-67	m/z=675.26 (C ₄₈ H ₃₇ NOS=675.89)	P-68	m/z=857.34 (C ₆₃ H ₄₃ N ₃ O=858.06)
P-69	m/z=589.12 (C ₃₈ H ₂₃ NO ₂ S ₂ =589.73)	P-70	m/z=599.19 (C ₄₁ H ₂₉ NO ₂ S=599.75)
P-71	m/z=674.24 (C ₄₇ H ₃₄ N ₂ OS=674.86)	P-72	m/z=679.13 (C ₄₄ H ₂₅ NO ₃ S ₂ =679.81)
P-73	m/z=691.20 (C ₄₇ H ₃₃ NOS ₂ =691.91)	P-74	m/z=662.20 (C ₄₅ H ₃₀ N ₂ O ₂ S=662.81)
P-75	m/z=745.30 (C ₅₅ H ₃₉ NO ₂ =745.92)	P-76	m/z=648.19 (C ₄₄ H ₂₈ N ₂ O ₂ S=648.78)
P-77	m/z=723.22 (C ₅₁ H ₃₃ NO ₂ S=723.89)	P-78	m/z=764.25 (C ₅₃ H ₃₆ N ₂ O ₂ S=764.94)
P-79	m/z=814.27 (C ₅₇ H ₃₈ N ₂ O ₂ S=815.00)	P-80	m/z=764.25 (C ₅₃ H ₃₆ N ₂ O ₂ S=764.94)
P-81	m/z=707.18 (C ₄₇ H ₃₃ NS ₃ =707.97)	P-82	m/z=781.26 (C ₅₇ H ₃₅ NO ₃ =781.91)
P-83	m/z=701.31 (C ₅₁ H ₄₃ NS=701.97)	P-84	m/z=883.39 (C ₆₆ H ₄₉ N ₃ =884.14)
P-85	m/z=739.20 (C ₅₁ H ₃₃ NOS ₂ =739.95)	P-86	m/z=719.23 (C ₅₂ H ₃₃ NOS=719.90)
P-87	m/z=700.29 (C ₅₀ H ₄₀ N ₂ S=700.94)	P-88	m/z=705.18 (C ₄₇ H ₁₃ NO ₂ S ₂ =705.89)
P-89	m/z=717.25 (C ₅₀ H ₃₉ NS ₂ =717.99)	P-90	m/z=750.27 (C ₅₃ H ₃₈ N ₂ OS=750.96)
P-91	m/z=771.35 (C ₅₈ H ₄₅ NO=772.00)	P-92	m/z=674.24 (C ₄₇ H ₃₄ N ₂ OS=674.86)
P-93	m/z=721.24 (C ₅₂ H ₃₅ NOS=721.91)	P-94	m/z=762.27 (C ₅₄ H ₃₈ N ₂ OS=762.97)
P-95	m/z=888.32 (C ₆₄ H ₄₄ N ₂ OS=889.13)	P-96	m/z=790.30 (C ₅₆ H ₄₂ N ₂ OS=791.03)
P-97	m/z=712.11 (C ₄₄ H ₂₈ N ₂ S ₄ =712.96)	P-98	m/z=664.18 (C ₄₄ H ₂₈ N ₂ O ₃ S=664.78)

P-99	m/z=867.36 (C ₆₂ H ₄₉ N ₃ S=868.16)	P-100	m/z=814.28 (C ₅₆ H ₃₈ N ₄ OS=815.01)
P-101	m/z=770.17 (C ₅₀ H ₃₀ N ₂ O ₃ S ₂ =770.92)	P-102	m/z=812.20 (C ₅₃ H ₃₆ N ₂ O ₃ S ₃ =813.06)
P-103	m/z=847.21 (C ₅₆ H ₃₇ N ₃ S ₃ =848.11)	P-104	m/z=904.26 (C ₆₃ H ₄₀ N ₂ O ₂ S ₂ =905.15)
P-105	m/z=814.21 (C ₅₃ H ₃₈ N ₂ O ₃ S=815.08)	P-106	m/z=755.21 (C ₅₀ H ₃₃ N ₃ O ₂ S=755.95)
P-107	m/z=838.30 (C ₆₀ H ₄₂ N ₂ OS=839.07)	P-108	m/z=739.23 (C ₅₀ H ₃₃ N ₃ O ₂ S=739.89)
P-109	m/z=890.30 (C ₆₃ H ₄₂ N ₂ O ₂ S=891.10)	P-110	m/z=855.24 (C ₅₈ H ₃₇ N ₃ O ₂ S=856.07)
P-111	m/z=841.31 (C ₅₉ H ₄₃ N ₃ OS=842.07)	P-112	m/z=931.32 (C ₆₅ H ₄₅ N ₃ O ₂ S=932.15)
P-113	m/z=717.14 (C ₄₄ H ₂₃ D ₃ N ₂ S ₄ =856.07)	P-114	m/z=664.18 (C ₄₄ H ₂₈ N ₂ O ₃ S=664.78)
P-115	m/z=742.34 (C ₅₃ H ₄₆ N ₂ S=743.03)	P-116	m/z=814.28 (C ₅₆ H ₃₈ N ₄ OS=815.01)
P-117	m/z=895.23 (C ₆₀ H ₃₇ N ₂ O ₂ S ₂ =896.10)	P-118	m/z=830.19 (C ₅₃ H ₃₅ FN ₂ O ₃ S=831.05)
P-119	m/z=847.21 (C ₅₆ H ₃₇ N ₃ S ₃ =848.11)	P-120	m/z=904.26 (C ₆₃ H ₄₀ N ₂ O ₂ S ₂ =905.15)
P-121	m/z=740.18 (C ₄₇ H ₃₃ FN ₂ S ₃ =740.97)	P-122	m/z=755.21 (C ₅₀ H ₃₃ N ₃ O ₃ S=755.95)
P-123	m/z=838.30 (C ₆₀ H ₄₂ N ₂ OS=839.07)	P-124	m/z=739.23 (C ₅₀ H ₃₃ N ₃ O ₂ S=739.89)
P-125	m/z=890.30 (C ₆₃ H ₄₂ N ₂ O ₂ S=891.10)	P-126	m/z=855.24 (C ₅₈ H ₃₇ N ₃ O ₂ S=856.07)
P-127	m/z=905.34 (C ₆₄ H ₄₇ N ₃ OS=906.16)	P-128	m/z=931.32 (C ₆₅ H ₄₅ N ₃ O ₂ S=932.15)
P-129	m/z=573.12 (C ₃₈ H ₂₃ NOS ₂ =573.73)	P-130	m/z=742.25 (C ₅₁ H ₃₈ N ₂ S ₂ =743.00)
P-131	m/z=842.21 (C ₅₇ H ₃₄ N ₂ O ₂ S ₂ =843.03)	P-132	m/z=661.12 (C ₄₁ H ₂₇ NO ₂ S ₃ =661.85)
P-133	m/z=640.13 (C ₄₁ H ₂₄ N ₂ O ₂ S ₂ =640.78)	P-134	m/z=857.27 (C ₅₈ H ₃₉ N ₃ O ₃ S=858.03)
P-135	m/z=724.23 (C ₄₉ H ₃₂ N ₄ OS=724.88)	P-136	m/z=805.17 (C ₅₄ H ₃₁ NO ₃ S ₂ =805.97)
P-137	m/z=800.29 (C ₅₇ H ₄₀ N ₂ OS=801.02)	P-138	m/z=801.28 (C ₅₆ H ₃₉ N ₃ OS=802.01)
P-139	m/z=591.11 (C ₃₈ H ₂₅ NS ₃ =591.81)	P-140	m/z=529.06 (C ₃₂ H ₁₉ NOS ₃ =529.69)
P-141	m/z=665.16 (C ₄₃ H ₂₇ N ₃ O ₂ S=665.83)	P-142	m/z=714.18 (C ₄₈ H ₃₀ N ₂ O ₂ S=714.90)
P-143	m/z=764.25 (C ₅₃ H ₃₆ N ₂ O ₂ S=764.94)	P-144	m/z=916.36 (C ₆₅ H ₄₈ N ₄ S=917.19)

[0270] **유기전기소자의 제조평가**

[0271] **(실시예 1) 적색 유기전기발광소자 (발광보조층)**

[0272] 본 발명의 화합물을 발광보조층 물질로 사용하여 통상적인 방법에 따라 유기전계 발광소자를 제작하였다.

[0273] 먼저, 유리 기판에 형성된 ITO층(양극) 상에 4,4',4''-Tris[2-naphthyl(phenyl)amino]triphenylamine (이하, 2-TNATA)를 60 nm 두께로 진공증착하여 정공주입층을 형성한 후, 상기 정공주입층 위에 정공수송 화합물로서 N,N'-bis(1-naphthalenyl)-N,N'-bis-phenyl-(1,1'-biphenyl)-4,4'-diamine (이하, NPB)을 60 nm 두께로 진공 증착하여 정공수송층을 형성하였다.

[0274] 이어서, 상기 정공수송층 상에 본 발명의 화합물 P-1을 20nm 두께로 진공증착하여 발광보조층을 형성한 후, 상기 발광보조층 상에 4,4'-N,N'-dicarbazole-biphenyl (이하, CBP)를 호스트 물질로 사용하고, bis-(1-phenylisoquinolyl)iridium(III)acetylacetonate (이하, (piq)₂Ir(acac))을 도판트 물질로 사용하여, 95:5 중량 비로 도핑함으로써 상기 발광 보조층 위에 30nm 두께로 진공증착하여 발광층을 형성하였다.

[0275] 이어서, 상기 발광층 상에 (1,1'-biphenyl-4-olato)bis(2-methyl-8-quinolinolato)aluminum (이하, BALq)을 10 nm 두께로 진공증착하여 정공저지층을 형성하고, 상기 정공저지층 상에 tris-(8-hydroxyquinoline)aluminum (이하 "Alq₃"로 약기함)을 40 nm 두께로 진공증착하여 전자수송층을 형성하였다.

[0276] 이후, 할로젠화 알칼리 금속인 LiF를 0.2nm 두께로 증착하여 전자주입층을 형성하고, 이어서 Al을 150 nm의 두께로 증착하여 음극을 형성함으로써 유기전기발광소자를 제조하였다.

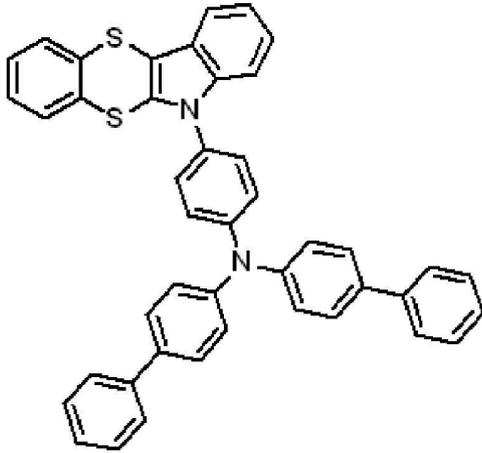
[0277] **(실시예 2) 내지 (실시예 17)**

[0278] 상기 실시예 1의 발광보조층 물질로 본 발명의 화합물 P-1 대신 하기 표 4에 기재된 본 발명의 화합물을 사용한 점을 제외하고는, 상기 실시예 1과 동일한 방법으로 유기전계발광소자를 제조하였다.

[0279] **(비교예 1)**

[0280] 상기 실시예 1의 발광보조층 물질로 본 발명의 화합물 P-1 대신 하기 비교화합물 1을 사용한 점을 제외하고는, 상기 실시예 1과 동일한 방법으로 유기전기발광소자를 제작하였다.

[0281] <비교화합물 1>



[0282] 상기 실시예 1~17 및 비교예 1에 따라 제조된 유기전기발광소자들에 순바이어스 직류전압을 가하여 포토리서치 (photoresearch)사의 PR-650으로 전기발광(EL) 특성을 측정하였으며, 그 측정 결과 2500cd/m² 기준 휘도에서 맥 사이언스사에서 제조된 수명 측정 장비를 통해 T95 수명을 측정하였다. 하기 표 4는 소자제작 및 평가한 결과를 나타낸다.

표 4

[0284]	화합물	Voltage (V)	Current Density (mA/cm ²)	Brightness (cd/m ²)	Efficiency (cd/A)	Lifetime T(95)	CIE	
							x	y
비교예 (1)	비교화합물 1	6.1	19.8	2500.0	12.6	80.7	0.63	0.33
실시예(1)	P-1	4.9	11.8	2500.0	21.5	113.9	0.62	0.32
실시예(2)	P-3	4.9	12.8	2500.0	18.6	113.5	0.64	0.32
실시예(3)	P-8	5.2	12.6	2500.0	17.5	114.2	0.60	0.31
실시예(4)	P-12	5.1	14.6	2500.0	17.4	106.2	0.62	0.33
실시예(5)	P-20	5.0	13.7	2500.0	20.7	107.4	0.63	0.34
실시예(6)	P-22	5.0	13.1	2500.0	18.7	112.1	0.63	0.33
실시예(7)	P-29	5.1	12.0	2500.0	18.3	113.6	0.63	0.34
실시예(8)	P-31	5.2	14.1	2500.0	18.1	106.9	0.62	0.31
실시예(9)	P-56	4.9	14.5	2500.0	17.6	103.2	0.60	0.34
실시예(10)	P-66	5.1	12.4	2500.0	17.5	113.9	0.61	0.34
실시예(11)	P-97	5.1	15.4	2500.0	18.0	111.8	0.62	0.31
실시예(12)	P-102	5.3	15.3	2500.0	16.9	108.1	0.60	0.32
실시예(13)	P-107	5.2	13.9	2500.0	16.0	112.1	0.60	0.32
실시예(14)	P-117	5.2	14.8	2500.0	16.7	107.4	0.63	0.32
실시예(15)	P-136	5.4	14.6	2500.0	16.6	111.2	0.64	0.32
실시예(16)	P-137	5.3	15.6	2500.0	17.9	109.2	0.63	0.33
실시예(17)	P-139	5.3	13.9	2500.0	17.0	109.8	0.65	0.33

[0286] 상기 표 4의 결과로부터 알 수 있듯이, 본 발명의 유기전기발광소자용 재료를 발광보조층 재료로 사용하여 적색 유기발광소자를 제작한 경우, 비교화합물 1을 사용한 비교예보다 유기전기발광소자의 구동전압을 낮출 수 있을 뿐만 아니라 발광 효율과 수명을 현저히 개선시킬 수 있음을 알 수 있다.

[0287] 비교화합물과 본 발명의 화합물을 비교해보면, 4환의 코어 골격이 유사하지만 코어의 한쪽 또는 양쪽 벤젠 고리에 1개 이상의 아민 그룹이 결합되는 것이 특징인 본 발명 화합물로 제작된 실시예 1 내지 실시예 17의 소자가 구동전압, 효율 그리고 수명 면에서 현저히 우수한 결과를 나타내는 것을 확인할 수 있었다

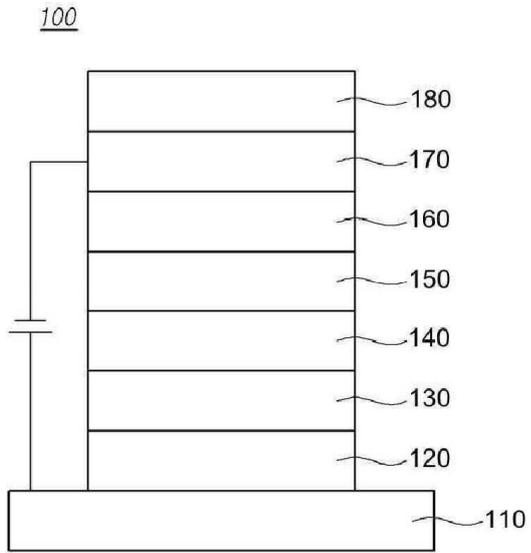
- [0288] 이러한 결과는 코어가 유사한 화합물일지라도 원소 및 치환기에 따라서 정공(hole) 특성, 광효율 특성, 에너지 레벨 (LUMO, HOMO레벨, T1레벨), 정공 주입 및 이동(hole injection & mobility) 특성, 전자 차폐(Electron blocking) 특성과 같은 화합물의 물성이 달라지게 되고, 이로 인해 전혀 다른 소자 결과가 도출될 수 있음을 시사하고 있다.
- [0289] 발광보조층의 경우에는 정공수송층과 발광층(호스트)과의 상호관계를 파악해야 하는바, 유사한 코어를 사용하더라도 본 발명의 화합물이 사용된 발광보조층에서 나타내는 특징을 유추하는 것은 통상의 기술자라 하더라도 매우 어려울 것이다.
- [0290] 아울러, 전술한 소자 제작의 평가 결과에서는 본 발명의 화합물을 발광보조층에만 적용한 소자 특성을 설명하였으나, 본 발명의 화합물을 정공수송층에 적용하거나 정공수송층과 발광보조층 모두 적용하여 사용될 수 있다.
- [0291] 이상의 설명은 본 발명을 예시적으로 설명한 것에 불과한 것으로, 본 발명이 속하는 기술분야에서 통상의 지식을 가지는 자라면 본 발명의 본질적인 특성에서 벗어나지 않는 범위에서 다른 화합물을 포함하여 성능을 개선시키는 방법 등 다양한 변형이 가능할 것이다.
- [0292] 따라서, 본 명세서에 개시된 실시예들은 본 발명을 한정하기 위한 것이 아니라 설명하기 위한 것이고, 이러한 실시예에 의하여 본 발명의 사상의 범위가 한정되는 것은 아니다. 본 발명의 보호범위는 아래의 청구범위에 의하여 해석되어야 하며, 그와 동등한 범위 내의 모든 기술은 본 발명의 권리범위에 포함하는 것으로 해석되어야 할 것이다.

부호의 설명

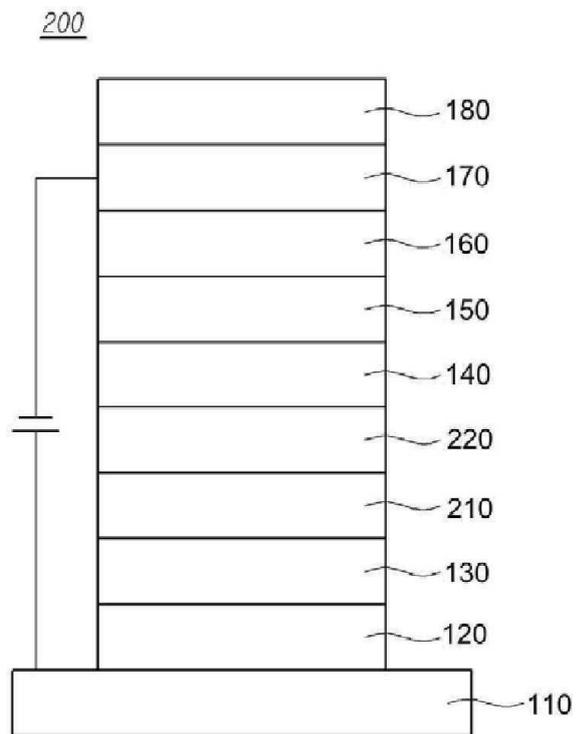
- [0293] 100, 200, 300: 유기전기소자 110: 제1 전극
- 120: 정공주입층 130: 정공수송층
- 140: 발광층 150: 전자수송층
- 160: 전자주입층 170: 제2 전극
- 180: 캡핑층 210: 버퍼층
- 220: 발광보조층 320: 제1 정공주입층
- 330: 제1 정공수송층 340: 제1 발광층
- 350: 제1 전자수송층 360: 제1 전하생성층
- 361: 제2 전하생성층 420: 제2 정공주입층
- 430: 제2 정공수송층 440: 제2 발광층
- 450: 제2 전자수송층 CGL: 전하생성층
- ST1: 제1 스택 ST2: 제2 스택

도면

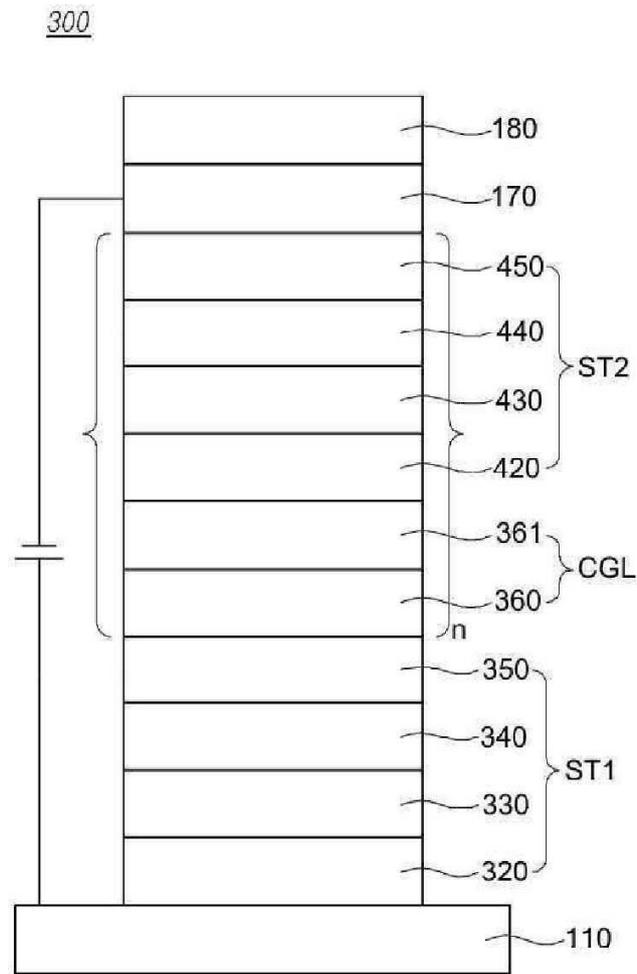
도면1



도면2



도면3



도면4

