



(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 등록특허공보(B1)

(45) 공고일자 2018년09월19일
(11) 등록번호 10-1900287
(24) 등록일자 2018년09월13일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)
C07D 495/04 (2006.01) C09K 11/06 (2006.01)
H01L 51/50 (2006.01)
(21) 출원번호 10-2013-0146114
(22) 출원일자 2013년11월28일
심사청구일자 2018년01월12일
(65) 공개번호 10-2014-0075592
(43) 공개일자 2014년06월19일
(30) 우선권주장
1020120143954 2012년12월11일 대한민국(KR)
(56) 선행기술조사문헌
KR1020140013614 A*
JP2012004116 A*
KR1020130073700 A*
*는 심사관에 의하여 인용된 문헌

(73) 특허권자
덕산네오룩스 주식회사
충청남도 천안시 서북구 입장면 쑥골길 21-32
(72) 발명자
장재완
충남 천안시 서북구 성거읍 천흥3길 21, 신비텔
13동 203호
이선희
충청남도 천안시 서북구 성정공원 6길 23-6, 406
호
(뒷면에 계속)
(74) 대리인
김정은

전체 청구항 수 : 총 8 항

심사관 : 송이화

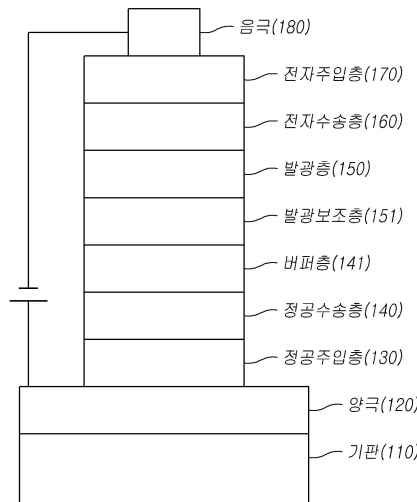
(54) 발명의 명칭 유기전기 소자용 화합물, 이를 이용한 유기전기소자 및 그 전자 장치

(57) 요약

본 발명은 소자의 발광효율, 안정성 및 수명을 향상시킬 수 있는 신규 화합물 및 이를 이용한 유기전기소자, 그 전자 장치를 제공한다.

대표도 - 도1

100



(72) 발명자

김원삼

충남 천안시 서북구 성거읍 천홍3길 19-1, 신비텔
12동 202호

김혜령

충남 천안시 서북구 성거읍 천홍3길 19-1, 신비텔
302호

박정환

경기 화성시 동탄공원로 21-12, 907동 2401호 (능
동, 푸른마을포스코더샵아파트)

이규민

충남 천안시 서북구 입장면 외유리1길 19-1,

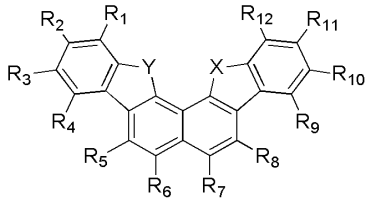
명세서

청구범위

청구항 1

하기 화학식으로 표시되는 화합물:

<화학식 1>



상기 화학식에서,

R₁ 내지 R₄, 및 R₉ 내지 R₁₂는 서로 독립적으로 수소 또는 -L-N(Ar₁)(Ar₂)이고, 이들 중에서 적어도 하나는 -L-N(Ar₁)(Ar₂)이며,

R₅ 내지 R₈은 수소이며,

X는 N(R'), S, O, C(R')(R'') 또는 Si(R')(R'')이고,

Y는 S, O, C(R')(R'') 또는 Si(R')(R'')이며,

X가 N(R')인 경우, R'은 C₆~C₆₀의 아릴기; O, N, S, Si 및 P 중 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C₂~C₆₀의 헤테로고리기; 및 -L-N(Ar₁)(Ar₂)로 이루어진 군에서 선택되며,

상기 C(R')(R'')과 Si(R')(R'')에서, R' 및 R''는 서로 독립적으로, C₆~C₆₀의 아릴기; O, N, S, Si 및 P 중 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C₂~C₆₀의 헤테로고리기; C₁~C₅₀의 알킬기; 및 -L-N(Ar₁)(Ar₂)로 이루어진 군에서 선택되며,

상기 L은 단일결합; C₆~C₆₀의 아릴렌기; 및 O, N, S, Si 및 P 중 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C₂~C₆₀의 헤테로고리기로 이루어진 군에서 선택되며, 이들 각각(단일결합 제외)은 니트로기, 시아노기, 할로젠기, C₁~C₂₀의 알킬기, C₆~C₂₀의 아릴기, C₂~C₂₀의 헤테로고리기, 및 아미노기로 이루어진 군에서 선택되는 하나 이상의 치환기로 더 치환될 수 있으며,

상기 Ar₁과 Ar₂는 서로 독립적으로, C₆~C₆₀의 아릴기; 또는 O, N, S, Si 및 P 중 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C₂~C₆₀의 헤테로고리기;이며,

상기 R', R'', Ar₁ 및 Ar₂가 아릴기인 경우, 이들 각각은 중수소, 할로젠, 실란기, 붕소기, 게르마늄기, 시아노기, 니트로기, C₁~C₂₀의 알킬싸이오기, C₁~C₂₀의 알킬기, C₂~C₂₀의 알켄일기(alkenyl), C₂~C₂₀의 알카인일기(alkynyl), C₆~C₂₀의 아릴기, 중수소로 치환된 C₆~C₂₀의 아릴기, C₂~C₂₀의 헤테로고리기, C₃~C₂₀의 시클로알킬기, C₇~C₂₀의 아릴알킬기 및 C₈~C₂₀의 아릴알켄일기로 이루어진 군에서 선택된 하나 이상의 치환기로 더 치환될 수 있고,

상기 R', R'', Ar₁ 및 Ar₂가 헤테로고리기인 경우, 이들 각각은 중수소, 할로젠, 실란기, 시아노기, 니트로기, C₁~C₂₀의 알킬기, C₂~C₂₀의 알켄일기(alkenyl), C₆~C₂₀의 아릴기, 중수소로 치환된 C₆~C₂₀의 아릴기, C₂~C₂₀의 헤테로고리기, C₃~C₂₀의 시클로알킬기, C₇~C₂₀의 아릴알킬기 및 C₈~C₂₀의 아릴알켄일기로 이루어진 군에서 선택된 하나

이상의 치환기로 더 치환될 수 있고,

상기 R' 및 R"이 알킬기인 경우, 이들 각각은 할로젠, 실란기, 붕소기, 시아노기, C₁-C₂₀의 알킬기, C₂-C₂₀의 알켄일기(alkenyl), C₆-C₂₀의 아릴기, 중수소로 치환된 C₆-C₂₀의 아릴기, C₂-C₂₀의 헤테로고리기, C₇-C₂₀의 아릴알킬기 및 C₈-C₂₀의 아릴알켄일기로 이루어진 군에서 선택된 하나 이상의 치환기로 치환될 수 있다.

청구항 2

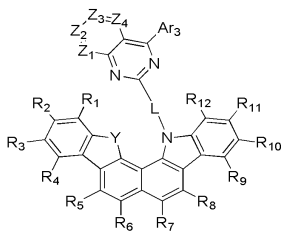
제 1항에 있어서,

X가 N(R')일 때, Y는 S, C(R')(R") 또는 Si(R')(R")인 것을 특징으로 하는 화합물.

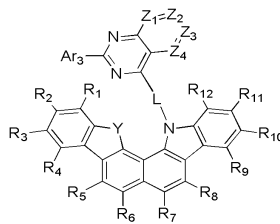
청구항 3

하기 화학식 중 하나로 표시되는 화합물:

<화학식 2>



<화학식 3>



상기 화학식에서,

Y는 N(R'), S, O, C(R')(R") 또는 Si(R')(R")이고, 여기서 R' 및 R"는 서로 독립적으로 C₆-C₆₀의 아릴기; O, N, S, Si 및 P 중 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C₂-C₆₀의 헤테로고리기; C₁-C₅₀의 알킬기; 및 -L-N(Ar₁)(Ar₂)로 이루어진 군에서 선택되며,

R₁ 내지 R₁₂는 서로 독립적으로 수소; 중수소; C₆-C₆₀의 아릴기; O, N, S, Si 및 P 중 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C₂-C₆₀의 헤테로고리기; C₁-C₅₀의 알킬기; 및 -L-N(Ar₁)(Ar₂)로 이루어진 군에서 선택되며,

Ar₃는 C₆-C₆₀의 아릴기; 또는 O, N, S, Si 및 P 중 적어도 하나의 헤테로 원자를 포함하는 C₂-C₆₀의 헤테로고리기;이며,

Z₁-Z₄는 서로 독립적으로 C(R')이고, 여기서 R'은 수소; C₆-C₆₀의 아릴기; O, N, S, Si 및 P 중 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C₂-C₆₀의 헤테로고리기; C₁-C₅₀의 알킬기; 및 -L-N(Ar₁)(Ar₂)로 이루어진 군에서 선택되며,

상기 L은 단일결합; C₆-C₆₀의 아릴렌기; 및 O, N, S, Si 및 P 중 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C₂-C₆₀의 헤테로고리기로 이루어진 군에서 선택되며, 이들 각각(단일결합 제외)은 니트로기, 시아노기, 할로젠기, C₁-C₂₀의 알킬기, C₆-C₂₀의 아릴기, C₂-C₂₀의 헤테로고리기, 및 아미노기로 이루어진 군에서 선택되는 하나 이상의 치환기로 더 치환될 수 있으며,

상기 Ar₁과 Ar₂는 서로 독립적으로, C₆-C₆₀의 아릴기; 또는 O, N, S, Si 및 P 중 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C₂-C₆₀의 헤테로고리기;이며,

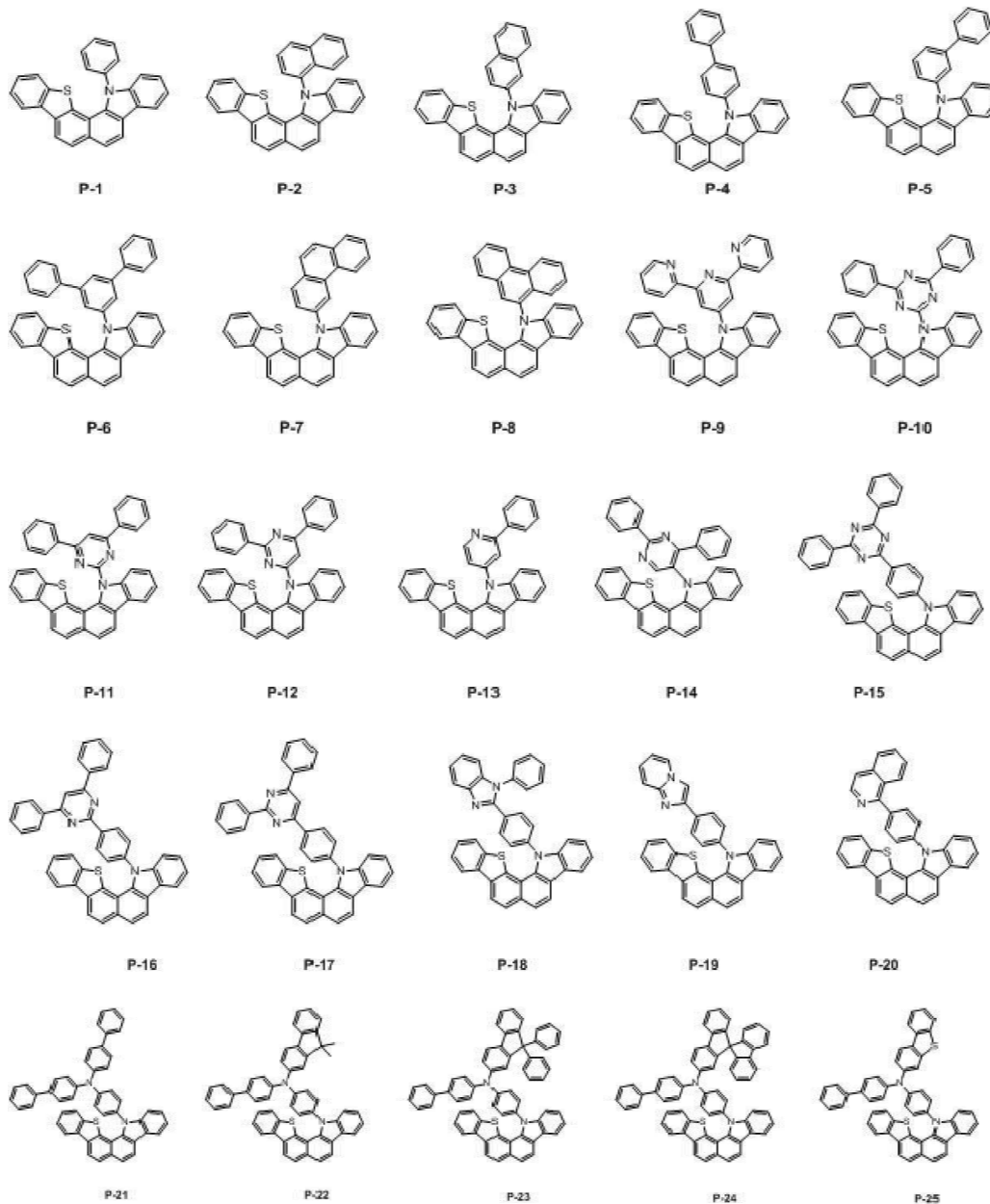
상기 R₁ 내지 R₁₂, R', R", Ar₁ 및 Ar₂가 아릴기인 경우, 이들 각각은 중수소, 할로젠, 실란기, 붕소기, 게르마늄기, 시아노기, 니트로기, C₁-C₂₀의 알킬싸이오기, C₁-C₂₀의 알킬기, C₂-C₂₀의 알켄일기(alkenyl), C₂-C₂₀의 알카인일기(alkynyl), C₆-C₂₀의 아릴기, 중수소로 치환된 C₆-C₂₀의 아릴기, C₂-C₂₀의 헤테로고리기, C₃-C₂₀의 시클로알킬기, C₇-C₂₀의 아릴알킬기 및 C₈-C₂₀의 아릴알켄일기로 이루어진 군에서 선택된 하나 이상의 치환기로 더 치환될 수 있고,

상기 R₁ 내지 R₁₂, R', R'', Ar₁ 및 Ar₂가 헤테로고리기인 경우, 이들 각각은 중수소, 할로젠, 실란기, 시아노기, 니트로기, C₁~C₂₀의 알킬기, C₂~C₂₀의 알켄일기(alkenyl), C₆~C₂₀의 아릴기, 중수소로 치환된 C₆~C₂₀의 아릴기, C₂~C₂₀의 헤테로고리기, C₃~C₂₀의 시클로알킬기, C₇~C₂₀의 아릴알킬기 및 C₈~C₂₀의 아릴알켄일기로 이루어진 군에서 선택된 하나 이상의 치환기로 더 치환될 수 있고,

상기 R₁ 내지 R₁₂, R', R''이 알킬기인 경우, 이들 각각은 할로젠, 실란기, 붕소기, 시아노기, C₁~C₂₀의 알킬기, C₂~C₂₀의 알켄일기(alkenyl), C₆~C₂₀의 아릴기, 중수소로 치환된 C₆~C₂₀의 아릴기, C₂~C₂₀의 헤테로고리기, C₇~C₂₀의 아릴알킬기 및 C₈~C₂₀의 아릴알켄일기로 이루어진 군에서 선택된 하나 이상의 치환기로 치환될 수 있다.

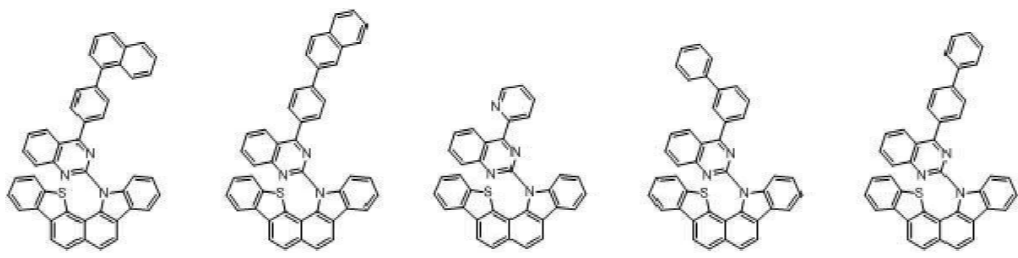
청구항 4

하기 화합물 중 하나인 것을 특징으로 하는 화합물:

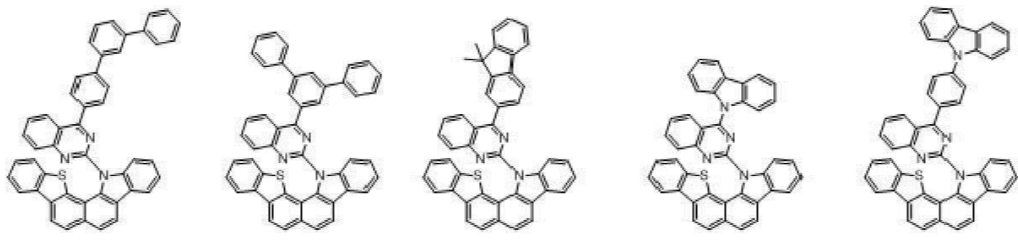




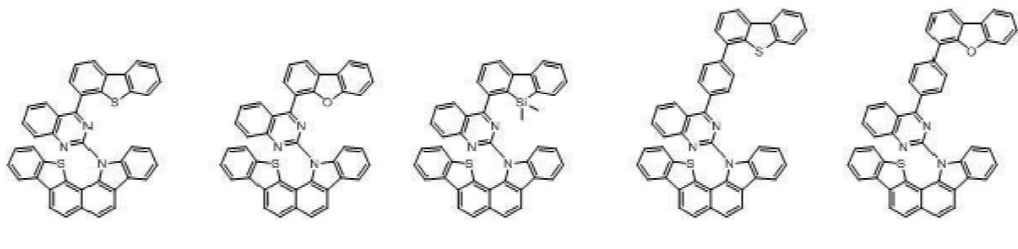
P-26 P-27 P-28 P-29 P-30



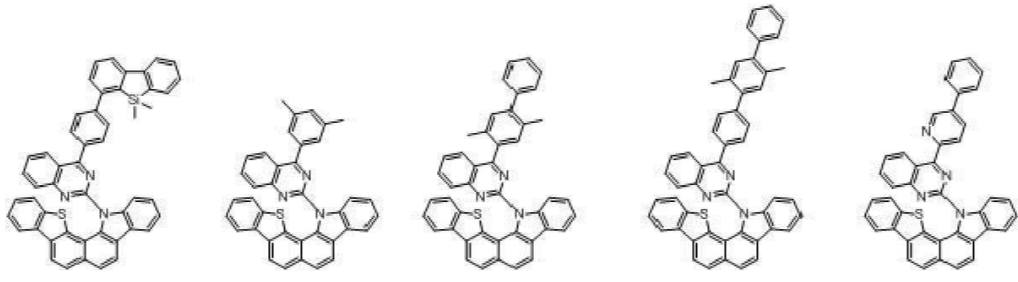
P-31 P-32 P-33 P-34 P-35



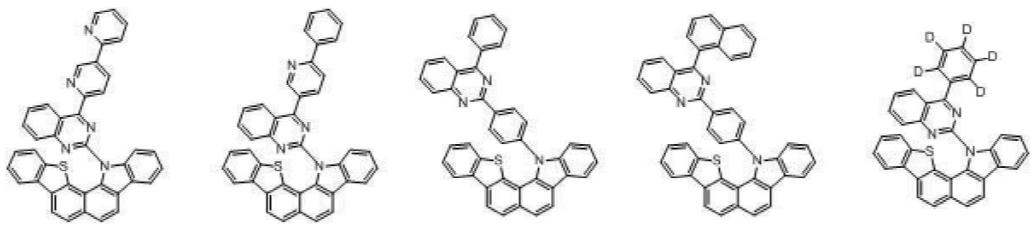
P-36 P-37 P-38 P-39 P-40



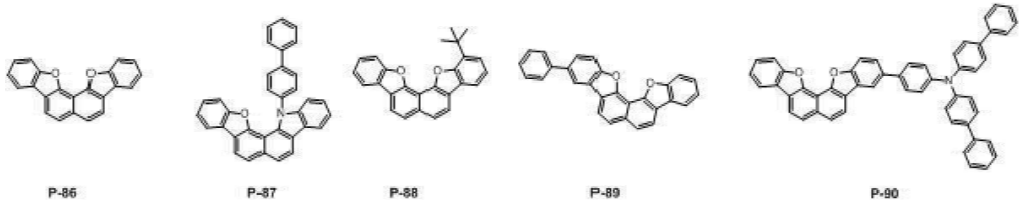
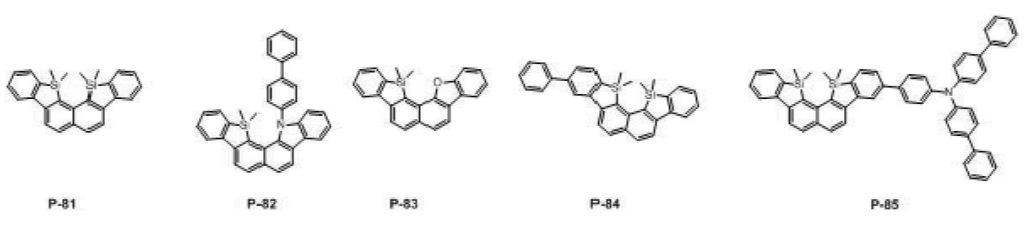
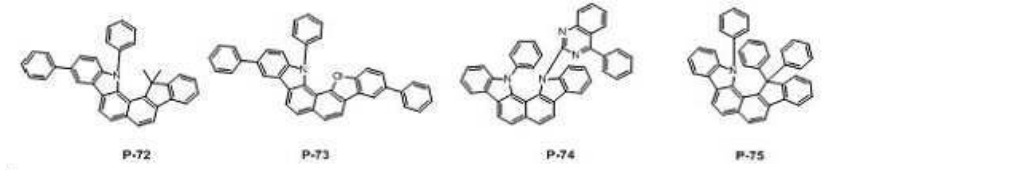
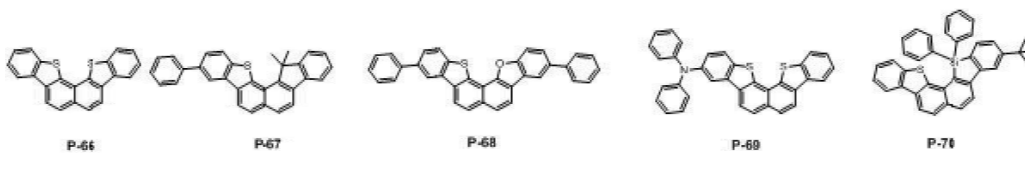
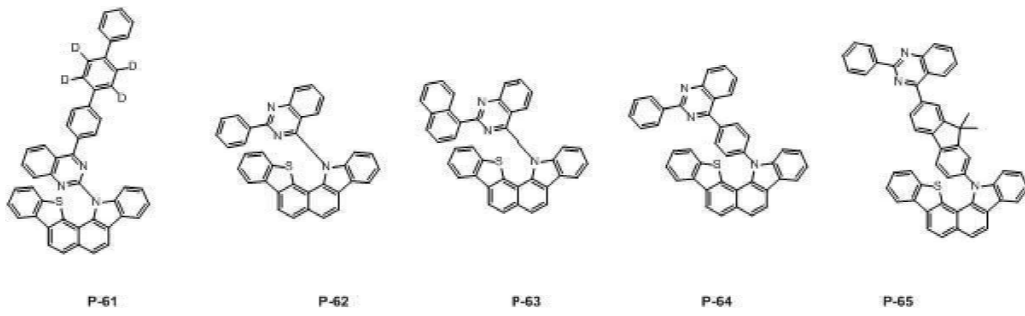
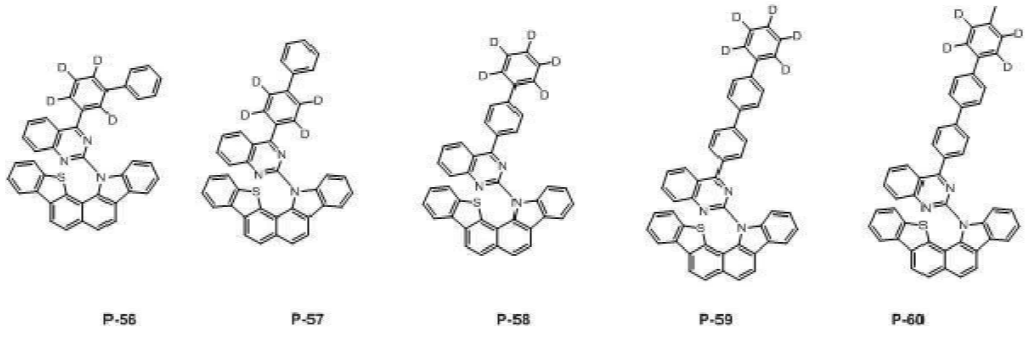
P-41 P-42 P-43 P-44 P-45

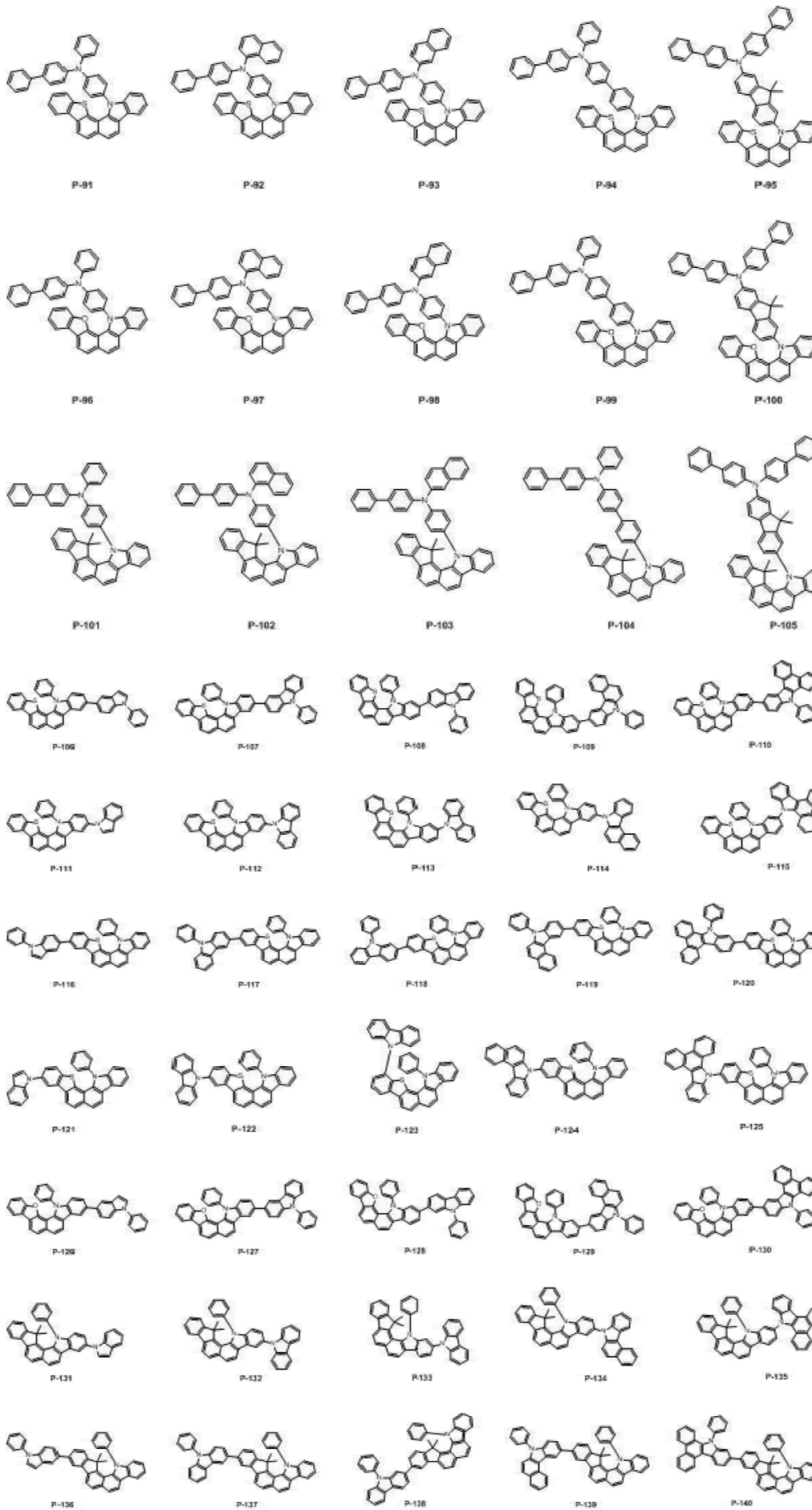


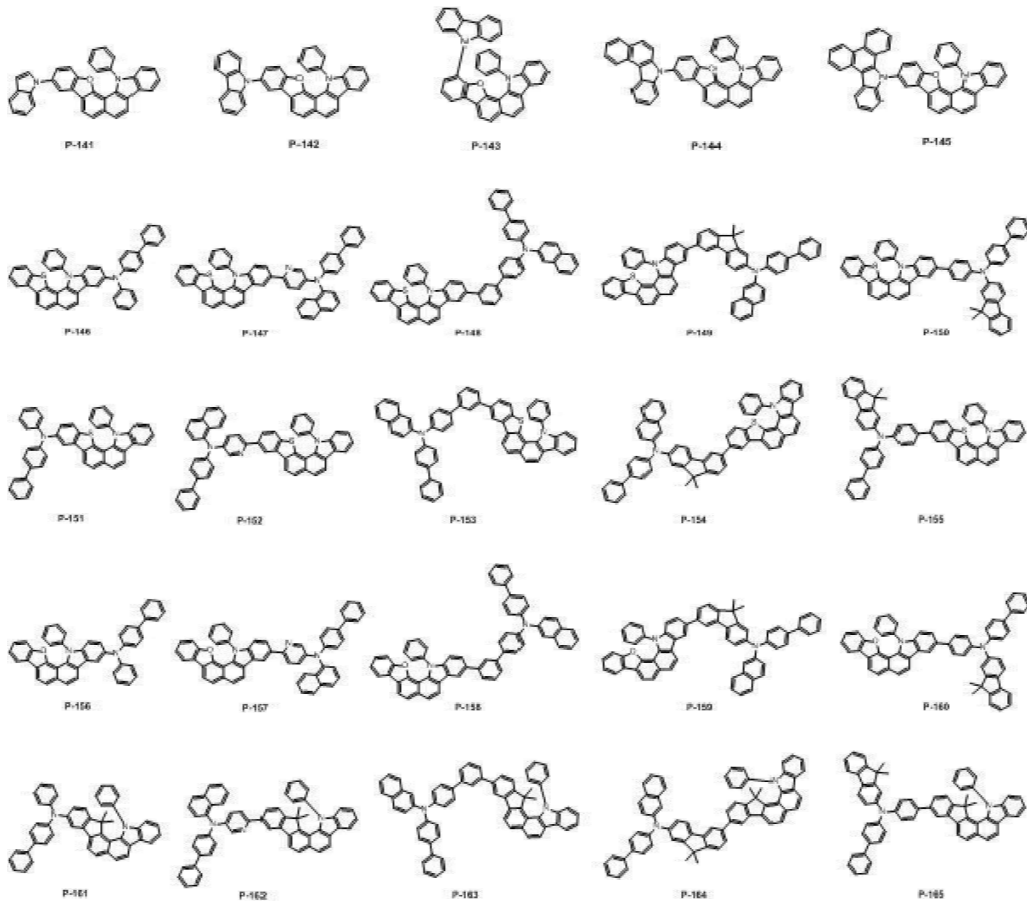
P-46 P-47 P-48 P-49 P-50



P-51 P-52 P-53 P-54 P-55







청구항 5

제 1전극, 제 2전극, 및 상기 제 1전극과 제 2전극 사이에 위치하는 유기물층을 포함하는 유기전기소자에 있어서,

상기 유기물층은 제 1항 내지 제 4항 중 어느 한 항의 화합물을 함유하는 것을 특징으로 하는 유기전기소자.

청구항 6

제 5항에 있어서,

상기 화합물을 포함하는 유기물층은 발광층, 정공수송층 또는 발광보조층인 것을 특징으로 하는 유기전기소자.

청구항 7

제 5항의 유기전기소자를 포함하는 디스플레이장치; 및

상기 디스플레이장치를 제어하는 제어부; 를 포함하는 전자장치.

청구항 8

제 7항에 있어서,

상기 유기전기소자는 유기전기발광소자(OLED), 유기태양전지, 유기감광체(OPC), 유기트랜지스터(유기 TFT), 또는 단색 조명용 소자인 것을 특징으로 하는 전자장치.

발명의 설명

기술분야

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

[0001]

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 유기물 층은 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, 발광 재료와 전하수송 재료, 예컨대 정공주입 재료, 정공수송 재료, 전자수송 재료, 전자주입 재료 등으로 분류될 수 있다.
- [0004] 유기 전기 발광소자에 있어 가장 문제시되는 것은 수명과 효율인데, 디스플레이가 대면적화되면서 이러한 효율이나 수명 문제는 반드시 해결해야 되는 상황이다.
- [0005] 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.
- [0006] 하지만 상기 유기물층을 단순히 개선한다고 하여 효율을 극대화시킬 수는 없다. 왜냐하면 각 유기물층 간의 에너지 level 및 T1 값, 물질의 고유특성(mobility, 계면특성 등) 등이 최적의 조합을 이루었을 때 긴 수명과 높은 효율을 동시에 달성할 수 있기 때문이다. 따라서 높은 열적 안정성을 가지며 발광층 내에서 효율적으로 전하 균형(charge balance)을 이룰 수 있는 발광 재료의 개발이 필요한 실정이며, 그 중에서도 특히 발광층의 호스트 물질에 대한 개발이 절실히 요구되고 있다.
- [0007] 또한, 최근 유기 전기 발광소자에 있어 정공수송층에서의 발광 문제를 해결하기 위해서는 반드시 정공수송층과 발광층 사이에 발광보조층이 존재하여야 하며, 각각의 발광층(R, G, B)에 따른 서로 다른 발광보조층의 개발이 필요한 시점이다.
- [0008] 일반적으로 전자수송층에서 발광층으로 전자(electron)이 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 정공수송층으로 넘어가게 되어 결과적으로 발광층 내 전하불균형(charge unbalance)을 초래하여 정공수송층 계면에서 발광하게 된다.
- [0010] 정공수송층 계면에서 발광될 경우, 유기전기소자의 색순도 및 효율이 저하되고 수명이 짧아지는 문제점이 발생하게 된다. 따라서 높은 T1 값을 가지며, 정공 수송층 HOMO 에너지 level과 발광층의 HOMO 에너지 level 사이의 HOMO level를 갖는 발광보조층이 개발이 절실히 요구된다.
- [0011] 한편, 유기전기소자의 수명단축 원인 중 하나인 양극전극(ITO)으로부터 금속 산화물이 유기층으로 침투확산되는 것을 지연시키면서, 소자 구동시 발생하는 주울열(Joule heating)에 대해서도 안정된 특성, 즉 높은 유리 전이 온도를 갖는 정공 주입층 재료에 대한 개발이 필요하다. 정공수송층 재료의 낮은 유리전이 온도는 소자 구동시, 박막 표면의 균일도를 저하시키는 특성이 있는바, 이는 소자수명에 큰 영향을 미치는 것으로 보고되고 있다. 또한, OLED 소자는 주로 증착방법에 의해 형성되는데, 증착시 오랫동안 견딜 수 있는 재료, 즉 내열특성이 강한 재료 개발이 필요한 실정이다.
- [0012] 즉, 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 하나, 아직까지 안정되고 효율적인 유기전기소자용 유기물층 재료의 개발이 충분히 이루어지지 않은 상태이다. 따라서, 새로운 재료의 개발이 계속 요구되고 있으며, 특히 발광층, 발광보조층 및 정공수송층의 재료에 대한 개발이 절실히 요구되고 있다.

발명의 내용

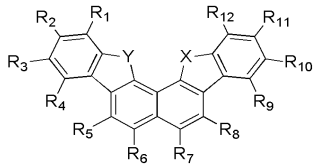
해결하려는 과제

- [0013] 본 발명은 소자의 높은 발광효율, 낮은 구동전압, 고내열성, 색순도 및 수명을 향상시킬 수 있는 화합물, 이를

이용한 유기전기소자 및 그 전자장치를 제공하는 것을 목적으로 한다.

과제의 해결 수단

[0014] 일측면에서, 본 발명은 하기 화학식으로 표시되는 화합물을 제공한다.



[0015]

[0016] 다른 측면에서, 본 발명은 상기 화학식으로 표시되는 화합물을 이용한 유기전기소자 및 그 전자장치를 제공한다.

발명의 효과

[0017] 본 발명에 따른 화합물을 이용함으로써 소자의 높은 발광효율, 낮은 구동전압, 고내열성을 달성할 수 있고, 소자의 색순도 및 수명을 크게 향상시킬 수 있다.

도면의 간단한 설명

[0018] 도 1은 본 발명에 따른 유기전기발광소자의 예시도이다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

[0019] 이하, 본 발명의 실시예를 첨부된 도면을 참조하여 상세하게 설명한다.

[0020] 각 도면의 구성요소들에 참조부호를 부가함에 있어서, 동일한 구성요소들에 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.

[0021] 또한, 본 발명의 구성 요소를 설명하는 데 있어서, 제 1, 제 2, 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. 어떤 구성 요소가 다른 구성요소에 "연결", "결합" 또는 "접속"된다고 기재된 경우, 그 구성 요소는 그 다른 구성요소에 직접적으로 연결되거나 또는 접속될 수 있지만, 각 구성 요소 사이에 또 다른 구성 요소가 "연결", "결합" 또는 "접속"될 수도 있다고 이해되어야 할 것이다.

[0022] 한편, 본 명세서에서 사용된 용어 "할로" 또는 "할로겐"은 다른 설명이 없는 한 불소, 염소, 브롬, 및 요오드를 포함한다.

[0023] 본 발명에 사용된 용어 "알킬" 또는 "알킬기"는 다른 설명이 없는 한 1 내지 60의 탄소수를 가지며, 여기에 제한되는 것은 아니다.

[0024] 본 발명에 사용된 용어 "알케닐" 또는 "알키닐"은 다른 설명이 없는 한 각각 2 내지 60의 탄소수의 이중결합 또는 삼중결합을 가지며, 여기에 제한되는 것은 아니다.

[0025] 본 발명에 사용된 용어 "시클로알킬"은 다른 설명이 없는 한 3 내지 60의 탄소수를 갖는 고리를 형성하는 알킬을 의미하며, 여기에 제한되는 것은 아니다.

[0026] 본 발명에 사용된 용어 "알콕시기"는 다른 설명이 없는 한 1 내지 60의 탄소수를 가지며, 여기에 제한되는 것은 아니다.

[0027] 본 발명에 사용된 용어 "아릴기" 및 "아릴렌기"는 다른 설명이 없는 한 각각 6 내지 60의 탄소수를 가지며, 이에 제한되는 것은 아니다.

[0028] 본 발명에서 아릴기 또는 아릴렌기는 단일 고리 또는 다중 고리의 방향족을 의미하며, 이웃한 치환기가 결합 또는 반응에 참여하여 형성된 방향족 링을 포함한다. 예컨대, 아릴기는 페닐기, 비페닐기, 플루오렌기, 스퀘아로플루오렌기일 수 있다.

- [0029] 본 명세서에서 사용된 용어 "헤테로알킬"은 다른 설명이 없는 한 하나 이상의 헤테로원자를 포함하는 알킬을 의미한다. 본 발명에 사용된 용어 "헤테로아릴기" 또는 "헤테로아릴렌기"는 다른 설명이 없는 한 각각 하나 이상의 헤테로원자를 포함하는 탄소수 3 내지 60의 아릴기 또는 아릴렌기를 의미하며, 여기에 제한되는 것은 아니며, 단일 고리뿐만 아니라 다중 고리를 포함하며, 이웃한 기가 결합하여 형성될 수도 있다.
- [0030] 본 발명에 사용된 용어 "헤테로시클로알킬", "헤테로고리기"는 다른 설명이 없는 한 하나 또는 그 이상의 헤테로원자를 포함하고, 2 내지 60의 탄소수를 가지며, 단일 고리뿐만 아니라 다중 고리를 포함하며, 이웃한 기가 결합하여 형성될 수도 있다. 또한, "헤테로고리기"는 헤테로원자를 포함하는 지환족 및/또는 방향족을 의미할 수 있다.
- [0031] 본 명세서에서 사용된 용어 "헤테로원자"는 다른 설명이 없는 한 N, O, S, P 및 Si를 나타낸다.
- [0032] 다른 설명이 없는 한, 본 발명에 사용된 용어 "지방족"은 탄소수 1 내지 60의 지방족 탄화수소를 의미하며, "지방족고리"는 탄소수 3 내지 60의 지방족 탄화수소 고리를 의미한다.
- [0033] 다른 설명이 없는 한, 본 발명에 사용된 용어 "포화 또는 불포화 고리"는 포화 또는 불포화 지방족고리 또는 탄소수 6 내지 60의 방향족고리 또는 헤테로고리를 의미한다.
- [0034] 전술한 헤테로화합물 이외의 그 밖의 다른 헤테로화합물 또는 헤테로라디칼은 하나 이상의 헤테로원자를 포함하며, 여기에 제한되는 것은 아니다.
- [0035] 또한 명시적인 설명이 없는 한, 본 발명에서 사용된 용어 "치환 또는 비치환된"에서 "치환"은 중수소, 할로젠, 아미노기, 니트릴기, 니트로기, C₁-C₂₀의 알킬기, C₁-C₂₀의 알콕시기, C₁-C₂₀의 알킬아민기, C₁-C₂₀의 알킬티오펜기, C₆-C₂₀의 아릴티오펜기, C₂-C₂₀의 알켄일기, C₂-C₂₀의 알킨일기, C₃-C₂₀의 시클로알킬기, C₆-C₆₀의 아릴기, 중수소로 치환된 C₆-C₂₀의 아릴기, C₈-C₂₀의 아릴알켄일기, 실란기, 붕소기, 게르마늄기, 및 C₅-C₂₀의 헤테로고리기로 이루어진 군으로부터 선택되는 1개 이상의 치환기로 치환됨을 의미하며, 이들 치환기에 제한되는 것은 아니다.
- [0036] 도 1은 본 발명에 일 실시예에 따른 유기전기소자에 대한 예시도이다.
- [0037] 도 1을 참조하면, 본 발명에 따른 유기전기소자(100)는 기판(110) 상에 형성된 제 1전극(120), 제 2전극(180) 및 제 1전극(110)과 제 2전극(180) 사이에 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하는 유기물층을 구비한다. 이때, 제 1전극(120)은 애노드(양극)이고, 제 2전극(180)은 캐소드(음극)일 수 있으며, 인버트형의 경우에는 제 1전극이 캐소드이고 제 2전극이 애노드일 수 있다.
- [0038] 유기물층은 제 1전극(120) 상에 순차적으로 정공수송층(130), 정공수송층(140), 발광층(150), 전자수송층(160) 및 전자수입층(170)을 포함할 수 있다. 이때, 발광층(150)을 제외한 나머지 층들이 형성되지 않을 수 있다. 정공저지층, 전자저지층, 발광보조층(151), 버퍼층(141) 등을 더 포함할 수도 있고, 전자수송층(160) 등이 정공저지층의 역할을 할 수도 있을 것이다.
- [0039] 또한, 미도시하였지만, 본 발명에 따른 유기전기소자는 제 1전극과 제 2전극 중 적어도 일면 중 상기 유기물층과 반대되는 일면에 형성된 보호층을 더 포함할 수 있다.
- [0040] 상기 유기물층에 적용되는 본 발명에 따른 화합물은 정공수입층(130), 정공수송층(140), 전자수송층(160), 전자수입층(170), 발광층(150)의 호스트 또는 도펀트 또는 캐핑층의 재료로 사용될 수 있을 것이다. 바람직하게는, 본 발명의 화합물은 발광층(150), 정공수송층(140) 및/또는 발광보조층(151)으로 사용될 수 있을 것이다.
- [0041] 한편, 동일한 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 조합도 아주 중요하며, 특히 각 유기물층 간의 에너지 level 및 T1 값, 물질의 고유특성(mobility, 계면특성 등) 등이 최적의 조합을 이루었을 때 긴 수명과 높은 효율을 동시에 달성할 수 있다.
- [0042] 이미 설명한 것과 같이, 최근 유기 전기 발광소자에 있어 정공수송층에서의 발광 문제를 해결하기 위해서는 정공수송층과 발광층 사이에 발광보조층이 형성하는 것이 바람직하며, 각각의 발광층(R, G, B)에 따른 서로 다른 발광 보조층의 개발이 필요한 시점이다. 한편, 발광보조층의 경우 정공수송층 및 발광층(호스트)과의 상호관계를 파악해야하므로 유사한 코어를 사용하더라도 사용되는 유기물층이 달라지면 그 특징을 유추하기는 매우 어려울 것이다.

[0043] 따라서, 본 발명에서는 화학식 1로 표시되는 화합물을 사용하여 발광층 또는 발광보조층을 형성함으로써 각 유기물층 간의 에너지 레벨(level) 및 T1 값, 물질의 고유특성(mobility, 계면특성 등) 등을 최적화하여 유기전기소자의 수명 및 효율을 동시에 향상시킬 수 있다.

[0044] 본 발명의 일 실시예에 따른 유기전기발광소자는 PVD(physical vapor deposition) 방법을 이용하여 제조될 수 있다. 예컨대, 기판 상에 금속 또는 전도성을 가지는 금속 산화물 또는 이들의 합금을 증착시켜 양극(120)을 형성하고, 그 위에 정공주입층(130), 정공수송층(140), 발광층(150), 전자수송층(160) 및 전자주입층(170)을 포함하는 유기물층을 형성한 후, 그 위에 음극(180)으로 사용할 수 있는 물질을 증착시킴으로써 제조될 수 있다.

[0045] 또한, 유기물층은 다양한 고분자 소재를 사용하여 증착법이 아닌 용액 공정 또는 솔벤트 프로세스(solvent process), 예컨대 스핀 코팅, 딥 코팅, 닥터 블레이딩, 스크린 프린팅, 잉크젯 프린팅 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 제한되는 것은 아니다.

[0046] 본 발명에 따른 유기전기소자는 사용되는 재료에 따라 전면 발광형, 후면 발광형 또는 양면 발광형일 수 있다.

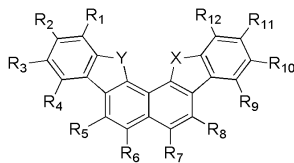
[0047] 또한, 본 발명에 따른 유기전기소자는 유기전기발광소자(OLED), 유기태양전지, 유기감광체(OPC), 유기트랜지스터(유기 TFT), 단색 또는 백색 조명용 소자 중 하나일 수 있다.

[0048] 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.

[0049] 이하, 본 발명의 일 측면에 따른 화합물에 대하여 설명한다.

[0050] 본 발명의 일측면에 따른 화합물은 하기 화학식 1로 표시된다.

[0051] <화학식 1>



[0052]

[0053] 상기 화학식에서, R₁ 내지 R₁₂는 i) 서로 독립적으로 수소; 중수소; 삼중수소; 할로젠; C₆~C₆₀의 아틸기; O, N, S, Si 및 P 중 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C₂~C₆₀의 헤테로고리기; C₁~C₅₀의 알킬기; C₂~C₂₀의 알켄일기; C₁~C₃₀의 알콕시기; 플루오렌일기 및 -L-N(Ar₁)(Ar₂)로 이루어진 군에서 선택되거나, 또는 ii) 이웃한 기끼리 서로 결합하여 적어도 하나의 고리를 형성한다. 이때, 고리를 형성하지 않는 기는 i)에서 정의된 것과 같다.

[0054] 여기서, '이웃한 기끼리 서로 결합하여 적어도 하나의 고리를 형성한다'라 함은 R₁과 R₂끼리, R₂와 R₃끼리, R₃과 R₄끼리, R₅와 R₆끼리, R₇과 R₈끼리, R₉와 R₁₀끼리, R₁₀과 R₁₁끼리 및/또는 R₁₁과 R₁₂끼리 서로 결합하여 적어도 하나의 고리 화합물을 형성하는 것을 의미한다. 이때, 이웃한 기끼리 서로 결합하여 고리를 형성한다는 자체가 중요하므로, 이들이 어떤 치환기이고 어떤 반응을 통해 고리가 형성되는지에 의해 본 발명의 권리범위가 제한되지는 않는다. 이때, 고리는 공지 반응(Heck reaction이나 Chem. Eur. J. 2009, 15, 742, Molecules. 2008, 13, 3236-3245, J. Am. Chem. Soc. 2008, 130, 472-480, Tetrahedron Letters. 1997, 38, 4761-4764 등에 기재된 반응)에 의해 형성될 수 있을 것이다.

[0055] R₁~R₁₂ 중 이웃한 기끼리 서로 결합하여 형성된 고리는 단환 또는 다환의 방향족고리 또는 헤테로 원자를 적어도 하나 포함하는 헤테로고리일 수 있을 뿐만 아니라 방향족고리와 지방족 고리가 융합된 형태일 수도 있다. 예시적으로, R₁과 R₄ 중 이웃한 기끼리 서로 결합하여 벤젠, 나프탈렌, 페난트렌 등과 같은 방향족고리를 형성할 수 있는데, 이때 형성되는 방향족고리의 핵탄소수는 6 내지 60인 것이 바람직하다. 예컨대, R₁과 R₂가 서로 결합하여 벤젠고리를 형성하고, R₃과 R₄가 서로 결합하여 벤젠고리를 형성하면 이들이 결합된 모핵의 벤젠링과 함께 페

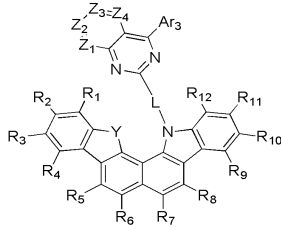
난트렌 형태가 형성될 수 있을 것이다.

- [0056] 또한, R_1 - R_{12} 중 이웃한 기끼리 서로 결합하여 싸이오펜, 퓨란, 피리딘, 인돌, 퀴놀린 등과 같은 헤테로고리를 형성할 수 있는데, 이때 핵탄소수는 2 내지 60일 수 있다. 또한, 다환고리인 경우 서로 융합된(fused) 형태일 수도 있고 복수개의 환이 서로 융합되지 않은 형태일 수도 있으며, 융합된 형태와 비융합된 형태가 혼합된 환일 수도 있다.
- [0057] X 및 Y는 서로 독립적으로, NR', S, O, CR'R" 또는 SiR'R"이고, 여기서 R' 및 R"는 i) 서로 독립적으로, C_6 - C_{60} 의 아릴기; O, N, S, Si 및 P 중 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C_2 - C_{60} 의 헤테로고리기; 플루오렌일기; C_1 - C_{50} 의 알킬기 및 $-L-N(Ar_1)(Ar_2)$ 로 이루어진 군에서 선택되거나, 또는 ii) R' 및 R"이 서로 결합하여 이들이 결합된 C 또는 Si와 함께 스파이로(Spiro) 화합물을 형성할 수 있다.
- [0058] 상기 $-L-N(Ar_1)(Ar_2)$ 중의 L은 단일결합; C_6 - C_{60} 의 아릴렌기; 플루오렌일렌기; O, N, S, Si 및 P 중 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C_2 - C_{60} 의 헤테로고리기; 및 2가의 지방족 탄화수소기로 이루어진 군에서 선택된다. 이때, 이들(단일결합 제외) 각각은 니트로기, 시아노기, 할로젠기, C_1 - C_{20} 의 알킬기, C_6 - C_{20} 의 아릴기, C_2 - C_{20} 의 헤테로고리기, C_1 - C_{20} 의 알콕시기 및 아미노기로 이루어진 군에서 선택되는 하나 이상의 치환기로 치환될 수 있다. 여기서 '단일결합'이라 함은 L이 부존재하는 경우를 의미하므로, 결국 R_1 내지 R_{12} 가 $-N(Ar_1)(Ar_2)$ 인 것을 의미한다.
- [0059] 또한, Ar_1 과 Ar_2 는 서로 독립적으로, C_6 - C_{60} 의 아릴기; O, N, S, Si 및 P 중 적어도 하나의 헤테로 원자를 포함하는 C_2 - C_{60} 의 헤테로고리기; C_1 - C_{50} 의 알킬기; C_2 - C_{20} 의 알켄일기; C_1 - C_{30} 의 알콕시기 및 플루오렌일기로 이루어진 군에서 선택될 수 있다.
- [0060] 한편, 상기 R_1 내지 R_{12} , R', R", Ar_1 및 Ar_2 가 아릴기인 경우, 이들 각각은 중수소, 할로젠, 실란기, 붕소기, 게르마늄기, 시아노기, 니트로기, C_1 - C_{20} 의 알킬싸이오기, C_1 - C_{20} 의 알콕실기, C_1 - C_{20} 의 알킬기, C_2 - C_{20} 의 알켄일기(alkenyl), C_2 - C_{20} 의 알카인일기(alkynyl), C_6 - C_{20} 의 아릴기, 중수소로 치환된 C_6 - C_{20} 의 아릴기, C_2 - C_{20} 의 헤테로고리기, C_3 - C_{20} 의 시클로알킬기, C_7 - C_{20} 의 아릴알킬기 및 C_8 - C_{20} 의 아릴알켄일기로 이루어진 군에서 선택된 하나 이상의 치환기로 치환될 수 있고,
- [0061] 상기 R_1 내지 R_{12} , R', R", Ar_1 및 Ar_2 가 헤테로고리기인 경우, 이들 각각은 중수소, 할로젠, 실란기, 시아노기, 니트로기, C_1 - C_{20} 의 알콕실기, C_1 - C_{20} 의 알킬기, C_2 - C_{20} 의 알켄일기(alkenyl), C_6 - C_{20} 의 아릴기, 중수소로 치환된 C_6 - C_{20} 의 아릴기, C_2 - C_{20} 의 헤테로고리기, C_3 - C_{20} 의 시클로알킬기, C_7 - C_{20} 의 아릴알킬기 및 C_8 - C_{20} 의 아릴알켄일기로 이루어진 군에서 선택된 하나 이상의 치환기로 치환될 수 있고,
- [0062] 상기 R_1 내지 R_{12} , R', R", Ar_1 및 Ar_2 가 플루오렌일기인 경우, 이들 각각은 중수소, 할로젠, 실란기, 시아노기, C_1 - C_{20} 의 알킬기, C_2 - C_{20} 의 알켄일기(alkenyl), C_6 - C_{20} 의 아릴기, 중수소로 치환된 C_6 - C_{20} 의 아릴기, C_2 - C_{20} 의 헤테로고리기 및 C_3 - C_{20} 의 시클로알킬기로 이루어진 군에서 선택된 하나 이상의 치환기로 치환될 수 있고,
- [0063] 상기 R_1 내지 R_{12} , R', R", Ar_1 및 Ar_2 가 알킬기인 경우, 이들 각각은 할로젠, 실란기, 붕소기, 시아노기, C_1 - C_{20} 의 알콕실기, C_1 - C_{20} 의 알킬기, C_2 - C_{20} 의 알켄일기(alkenyl), C_6 - C_{20} 의 아릴기, 중수소로 치환된 C_6 - C_{20} 의 아릴기, C_2 - C_{20} 의 헤테로고리기, C_7 - C_{20} 의 아릴알킬기 및 C_8 - C_{20} 의 아릴알켄일기로 이루어진 군에서 선택된 하나 이상의 치환기로 치환될 수 있고,
- [0064] 상기 R_1 내지 R_{12} , Ar_1 및 Ar_2 가 알켄일기인 경우, 이들 각각은 중수소, 할로젠, 실란기, 시아노기, C_1 - C_{20} 의 알콕실기, C_1 - C_{20} 의 알킬기, C_2 - C_{20} 의 알켄일기(alkenyl), C_6 - C_{20} 의 아릴기, 중수소로 치환된 C_6 - C_{20} 의 아릴기, C_2 - C_{20} 의 헤테로고리기, C_3 - C_{20} 의 시클로알킬기, C_7 - C_{20} 의 아릴알킬기 및 C_8 - C_{20} 의 아릴알켄일기로 이루어진 군에서 선택된 하나 이상의 치환기로 치환될 수 있고,
- [0065] 상기 R_1 내지 R_{12} , Ar_1 및 Ar_2 가 알콕실기인 경우, 이들 각각은 중수소, 할로젠, 실란기, C_1 - C_{20} 의 알킬기, C_6 - C_{20}

의 아릴기, 중수소로 치환된 C₆~C₂₀의 아릴기, C₂~C₂₀의 헤테로고리기 및 C₃~C₂₀의 시클로알킬기로 이루어진 군에서 선택된 하나 이상의 치환기로 치환될 수 있다.

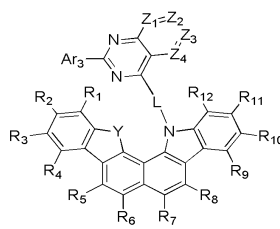
[0066] 한편, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 하기 화학식 중 하나로 표시될 수 있다.

[0067] <화학식 2>



[0068]

<화학식 3>

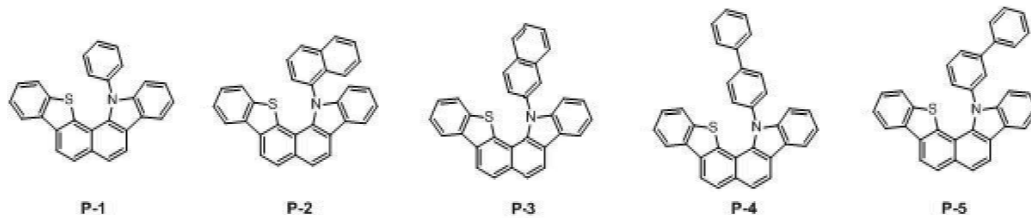


[0069] 상기 화학식에서, Ar₃는 C₆~C₆₀의 아릴기; C₂~C₂₀의 알켄일기; O, N, S, Si 및 P 중 적어도 하나의 헤테로 원자를 포함하는 C₂~C₆₀의 헤테로고리기; C₁~C₅₀의 알킬기; 및 C₁~C₂₀의 알킬기로 치환 또는 비치환된 플루오렌일기로 이루어진 군에서 선택되고, Z₁~Z₄는 서로 독립적으로, CR' 또는 N이다.

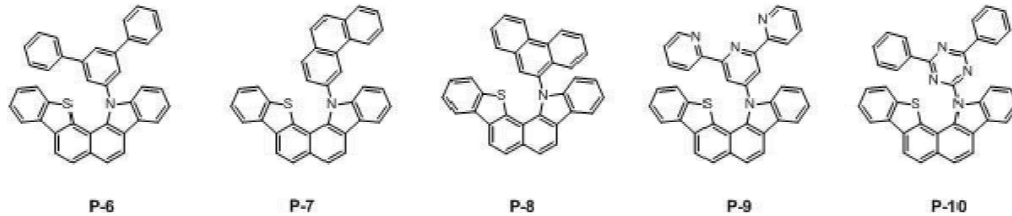
[0070] 상기 화학식 중의 다른 기호인 R₁ 내지 R₁₂, Y 및 L과 상기 R'는 화학식 1에서 정의된 것과 같다.

[0071] 보다 구체적으로, 상기 화학식 1로 표시되는 화학식은 하기 화합물 중 하나일 수 있다.

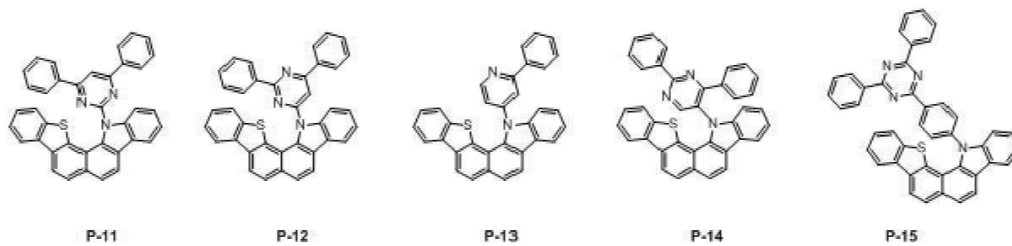
[0072]



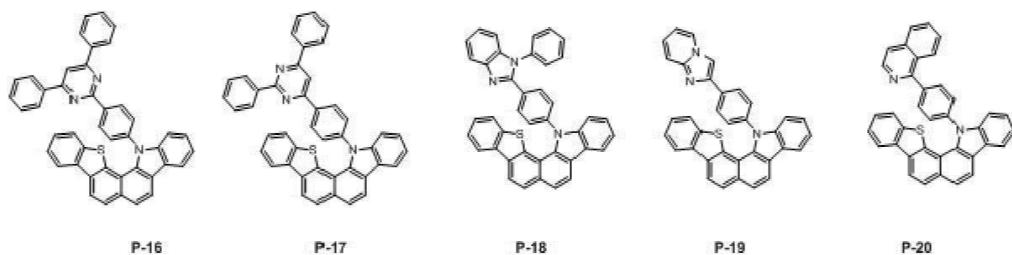
[0073]

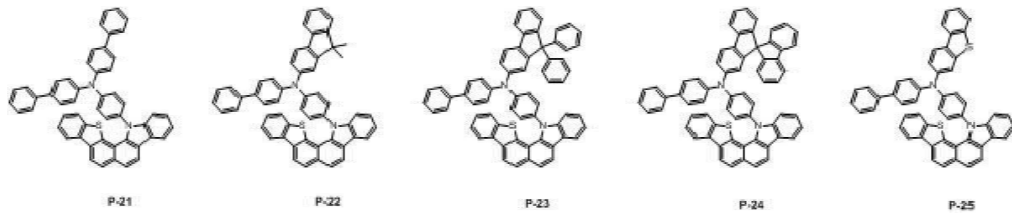


[0074]

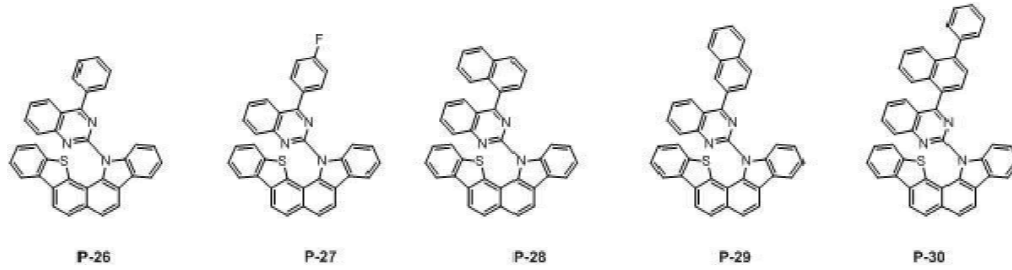


[0075]

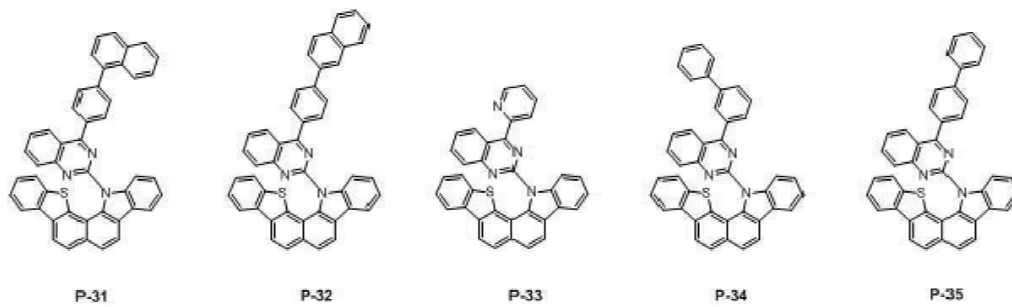




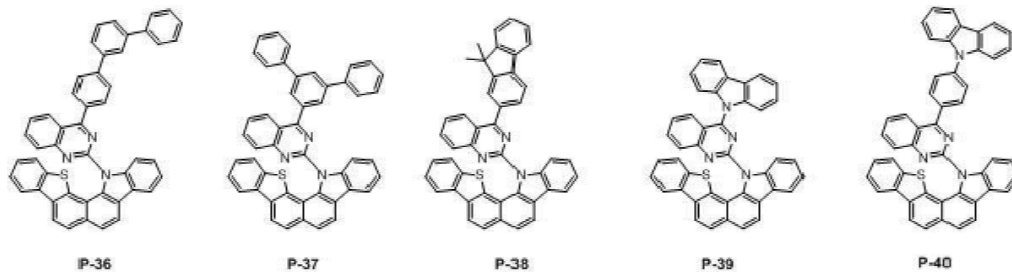
[0076]



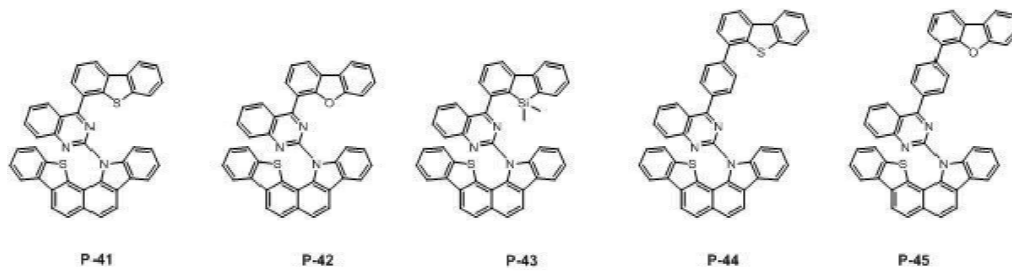
[0077]



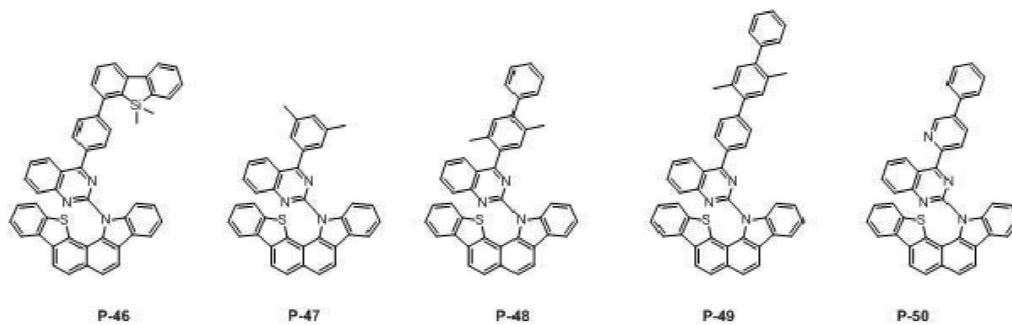
[0078]



[0079]



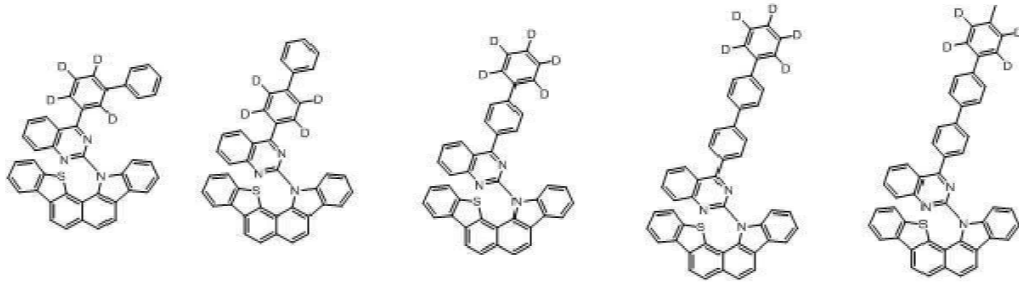
[0080]



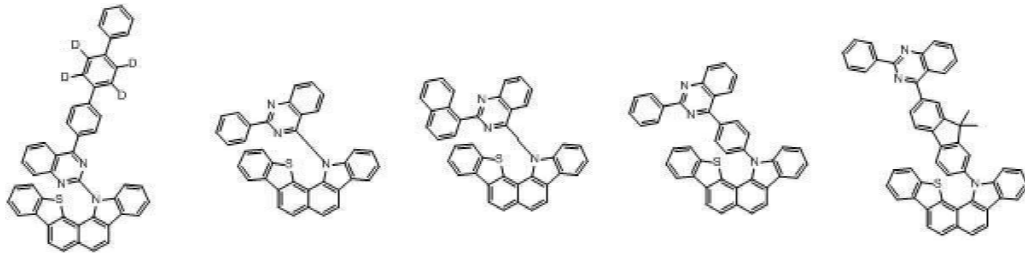
[0081]



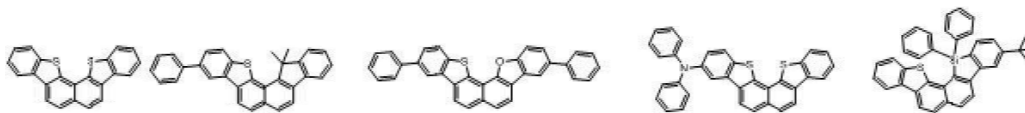
P-51 P-52 P-53 P-54 P-55



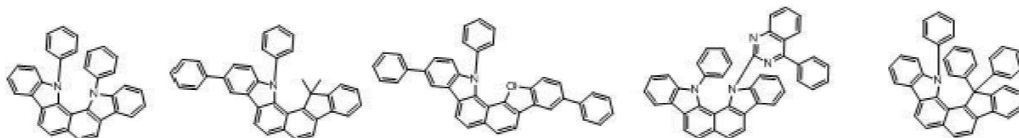
P-56 P-57 P-58 P-59 P-60



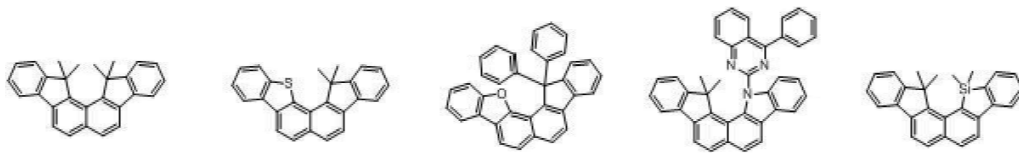
P-61 P-62 P-63 P-64 P-65



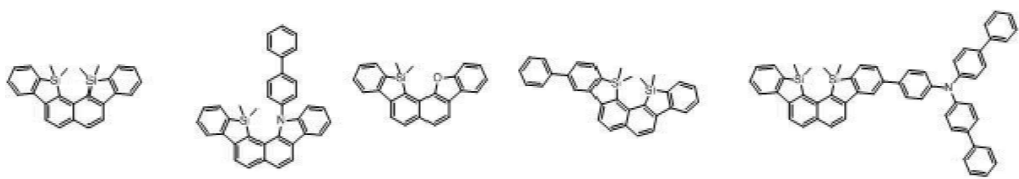
P-66 P-67 P-68 P-69 P-70



P-71 P-72 P-73 P-74 P-75

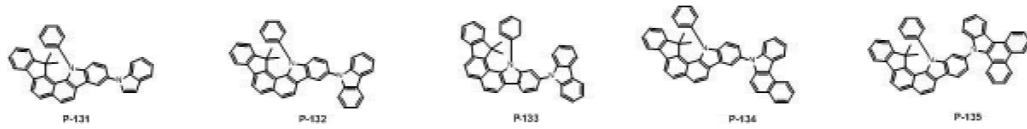


P-76 P-77 P-78 P-79 P-80

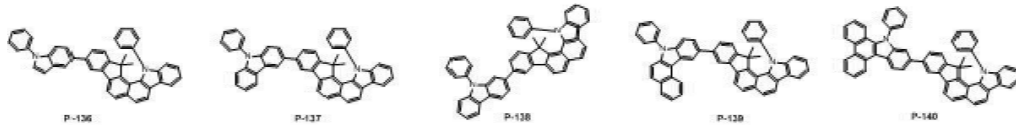


P-81 P-82 P-83 P-84 P-85

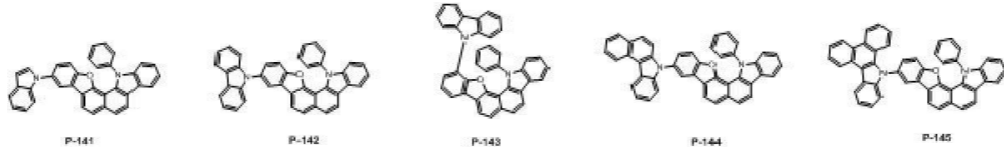
[0098]



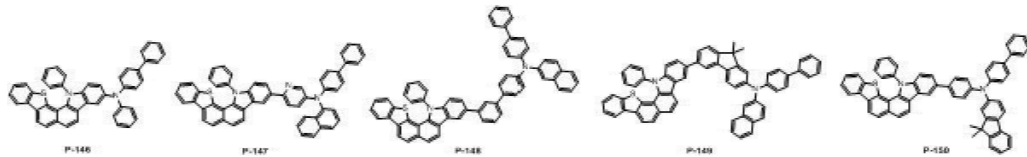
[0099]



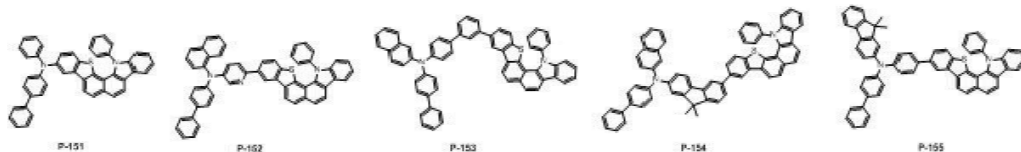
[0100]



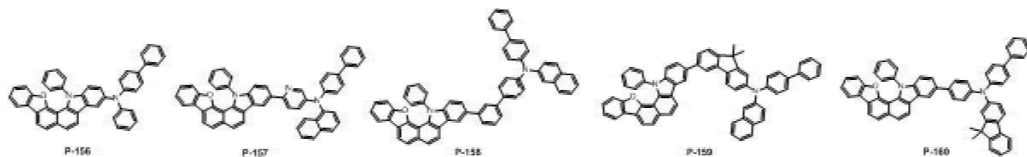
[0101]



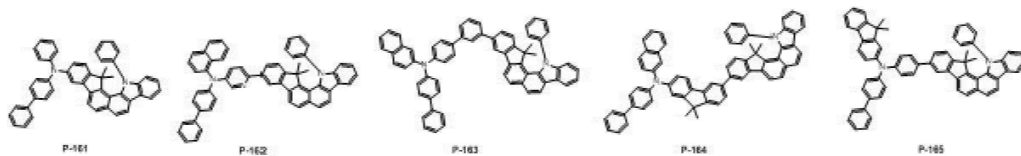
[0102]



[0103]



[0104]



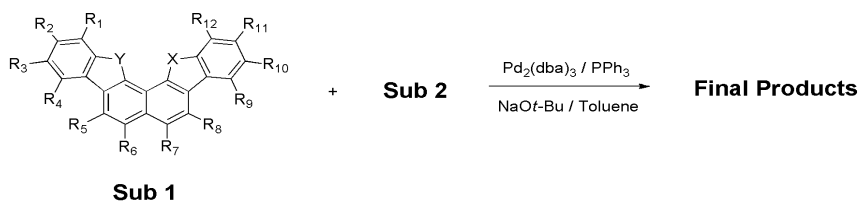
[0105] 이하, 본 발명에 따른 화학식 1로 표시되는 화합물의 합성에 및 유기전기소자의 제조에 관하여 실시예를 들어 구체적으로 설명하지만, 본 발명이 하기의 실시예로 한정되는 것은 아니다.

[0106] **합성예**

[0107] 본 발명에 따른 화합물(final products)은 하기 반응식 1과 같이 Sub 1과 Sub 2가 반응하여 제조된다.

[0108] **Product 합성법 예시**

[0109] <반응식 1>

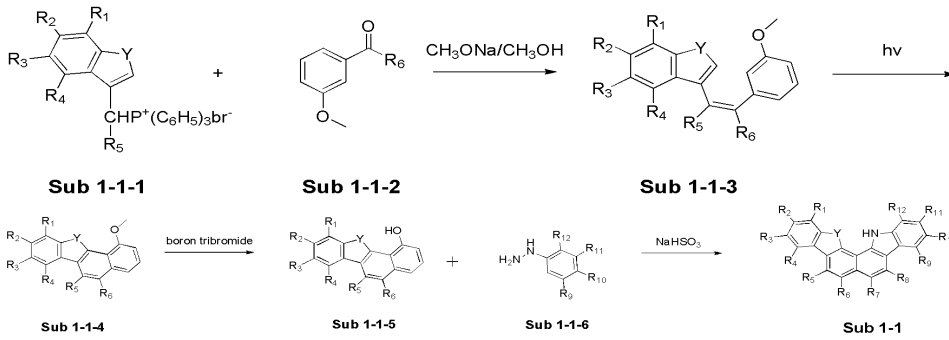


[0110]

[0111] **1. Sub 1의 합성예**

[0112] 반응식 1의 Sub 1은 하기 반응식 2, 3, 4의 반응경로에 의해 합성될 수 있고, 이에 한정된 것은 아니다.

[0113] <반응식 2>



[0114]

[0115] **(1) Sub 1-1-3 합성**

[0116] 둥근바닥플라스크에 Sub 1-1-1(1당량), Sub 1-1-2(1당량)을 메탄올에 넣고 교반시켰다. 이 용액에 sodium methoxide를 넣고 상온에서 24시간 동안 교반시켰다. 그 후 Dichloromethane과 물로 추출한 후 유기층을 건조하고 농축한 후 생성된 유기물을 silicagel column 및 재결정하여 Sub 1-1-3을 얻었다.

[0117] **(2) Sub 1-1-4 합성**

[0118] 둥근바닥플라스크에 Sub 1-1-3(1당량), iodine을 dry benzene에 넣은 후 UV 램프로 용액에 거품이 발생하는 동안 UV를 처리하며 TLC로 모니터링한다. 7시간 후에 감압 상태에서 용매를 제거한 후 에탄올로 재결정하여 Sub 1-1-4를 얻었다.

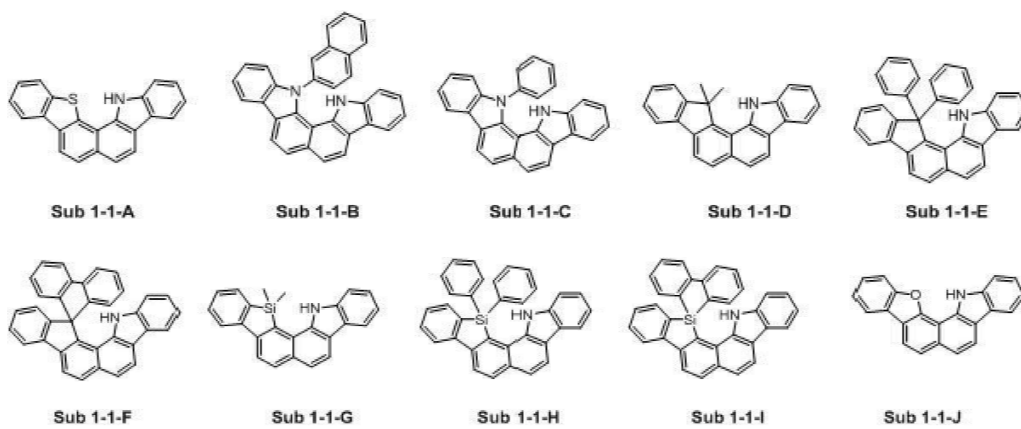
[0119] **(3) Sub 1-1-5 합성**

[0120] Sub 1-1-4(1당량), boron tribromide를 Dichloromethane에 상온에서 12시간 동안 교반한다. 그 후 ether와 물로 추출한 후 유기층을 MgSO₄로 건조하고 농축한 후 생성된 유기물을 silicagel column 및 재결정하여 Sub 1-1-5를 얻었다.

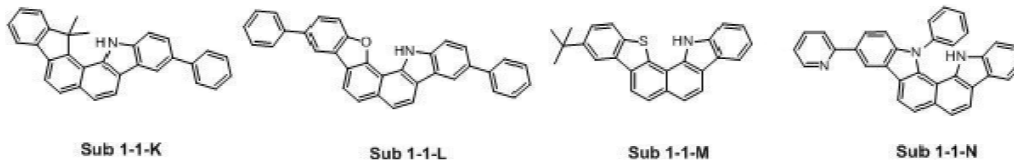
[0121] **(4) Sub 1-1 합성**

[0122] Sub 1-1-5(1당량), Sub 1-1-6(3당량), NaHSO₃(5당량)을 증류수에 넣고 100℃로 15시간 동안 교반환류 시켰다. 냉각 후 증류수를 더 넣어주고 생성된 고체를 감압여과하였다. 얻어진 고체를 염산 수용액에 넣고 100℃로 가열하였다. 1시간 메틸클로라이드로 추출하고 증류수와 NaOH 수용액으로 씻어준 후 생성된 유기물을 silicagel column 및 재결정하여 Sub 1-1을 얻었다.

[0123] Sub 1-1의 예시는 다음과 같으나, 이에 한정되는 것은 아니다. 하기 Sub 1-1의 예시적 화합물에 대한 FD-MS 값은 표 1과 같다.



[0125]



[0126]

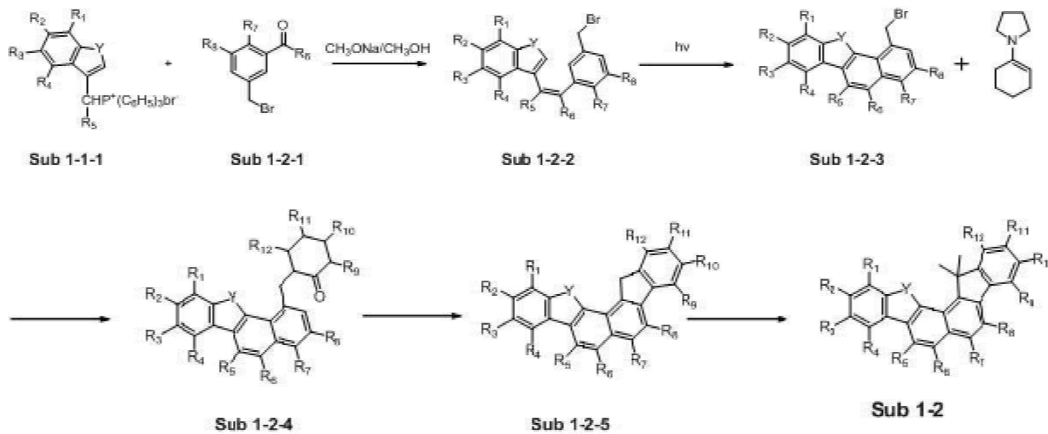
[0127] [표 1]

화합물	FD-MS	화합물	FD-MS
Sub 1-1-A	m/z=323.08(C ₂₂ H ₁₃ NS=323.41)	Sub 1-1-B	m/z=432.16(C ₃₂ H ₂₀ N ₂ =432.51)
Sub 1-1-C	m/z=382.15(C ₂₈ H ₁₈ N ₂ =382.46)	Sub 1-1-D	m/z=333.15(C ₂₅ H ₁₉ N=333.43)
Sub 1-1-E	m/z=457.18(C ₃₅ H ₂₃ N=457.56)	Sub 1-1-F	m/z=455.17(C ₃₅ H ₂₁ N=455.55)
Sub 1-1-G	m/z=349.13(C ₂₄ H ₁₉ NSi=349.50)	Sub 1-1-H	m/z=473.16(C ₃₄ H ₂₃ NSi=473.64)
Sub 1-1-I	m/z=471.14(C ₃₄ H ₂₁ NSi=471.62)	Sub 1-1-J	m/z=307.10(C ₂₂ H ₁₃ NO=307.34)
Sub 1-1-K	m/z=409.18(C ₃₁ H ₂₃ N=409.52)	Sub 1-1-L	m/z=459.16(C ₃₄ H ₂₁ NO=459.54)
Sub 1-1-M	m/z=379.14(C ₂₆ H ₂₁ NS=379.52)	Sub 1-1-N	m/z=459.17(C ₃₃ H ₂₁ N ₃ =459.54)

[0128]

[0129]

<반응식 3>



[0130]

[0131]

[0132]

(5) Sub 1-2-2 합성

[0133]

둥근바닥플라스크에 Sub 1-1-1(1당량), Sub 1-2-1(1당량)을 메탄올에 넣고 교반시켰다. 이 용액에 sodium methoxide를 넣고 상온에서 24시간 동안 교반시켰다. 그 후 Dichloromethane와 물로 추출한 후 유기층을 건조하고 농축한 후 생성된 유기물을 silicagel column 및 재결정하여 Sub 1-2-2를 얻었다.

[0134]

(6) Sub 1-2-3 합성

[0135]

둥근바닥플라스크에 Sub 1-2-2(1당량), iodine을 dry benzene에 넣은 후 UV 램프로 용액에 거품이 발생하는 동안 UV를 처리하며 TLC로 모니터링한다. 7시간 후에 감압 상태에서 용매를 제거한 후 에탄올로 재결정하여 Sub 1-2-3을 얻었다.

[0136]

(7) Sub 1-2-4 합성

[0137]

Sub 1-2-3(1당량)을 디옥산에 녹인 후 1-피롤리디노-1-시클로헥센(1.1당량)을 첨가하여 18시간 동안 환류시켰다. 물을 첨가하고 2시간 동안 가열시킨 후 에테르와 5% HCl, 5% NaHCO₃ 용액으로 Work-up 한 후 생성된 유기물을 silicagel column 및 재결정하여 Sub 1-2-4를 얻었다.

[0138]

(8) Sub 1-2-5 합성

[0139]

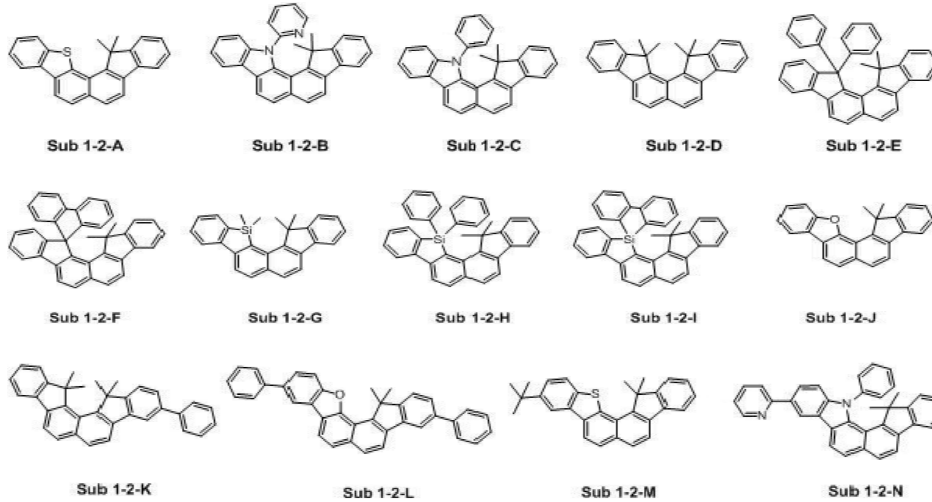
Sub 1-2-4를 CHCl₃와 10% 메탄설폰산 혼합용액 70ml에 녹인 후 상온에서 2시간 동안 교반시켰다. 바이카보네이트 용액으로 반응을 종결시킨 후 메틸렌클로라이드, NaHCO₃과 물로 Work-up하였다. 용매를 날리고 컬럼크로마토그래피로 분리한 후 트리글라임에 10% Pd/C와 함께 녹여 16시간 동안 환류시켰다. 그 후 헥산으로 컬럼크로마토

그래피하여 Sub 1-2-5를 얻었다.

(9) Sub 1-2 합성

Sub 1-2-5(1당량)을 테트라히드로푸란에 녹이고 -78℃로 온도를 낮춘 다음 n-BULi(1.1당량(1.6M in hexane))을 천천히 적가해주었다. 1시간 반응 후 요오드메탄(1.3당량)을 가한 다음 온도를 서서히 올려 실온에서 1시간 동안 교반하고 다시 온도를 -78℃로 낮추고 n-BULi(1.1당량(1.6M in hexane))을 천천히 적가해주었다. 1시간 반응 후 요오드메탄(1.3당량)을 가한 다음 온도를 서서히 올려 실온에서 15시간 동안 교반한 다음 NH₂Cl 수용액과 증류수를 가해 반응을 종료하고, 유기층을 감압제거시킨 후 헥산으로 재결정하여 Sub 1-2를 얻었다.

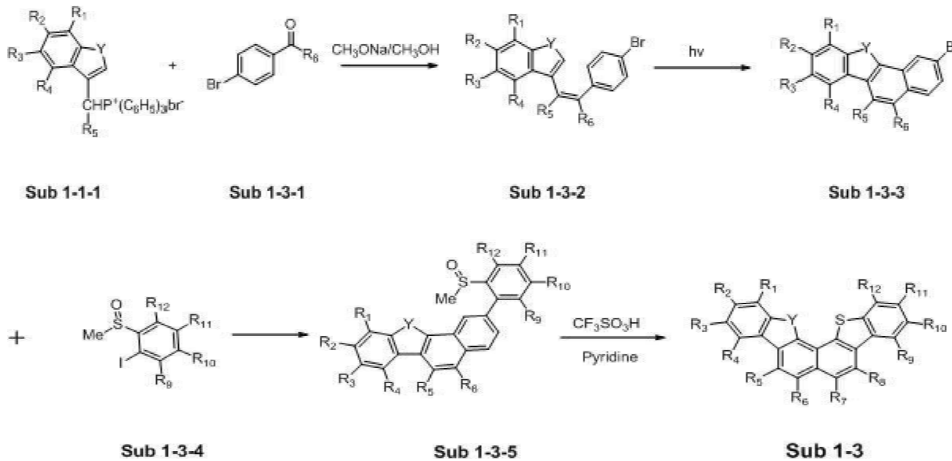
Sub 1-2의 예시는 다음과 같으나, 이에 한정되는 것은 아니다. 하기 Sub 1-2의 예시적 화합물에 대한 FD-MS 값은 표 2와 같다.



[표 2]

화합물	FD-MS	화합물	FD-MS
Sub 1-2-A	m/z=350.11(C ₂₅ H ₁₈ S=350.48)	Sub 1-2-B	m/z=410.18(C ₃₀ H ₂₂ N ₂ =410.51)
Sub 1-2-C	m/z=409.18(C ₃₁ H ₂₃ N=409.52)	Sub 1-2-D	m/z=360.19(C ₂₈ H ₂₄ =360.49)
Sub 1-2-E	m/z=484.22(C ₃₈ H ₂₈ =484.63)	Sub 1-2-F	m/z=482.20(C ₃₈ H ₂₆ =482.61)
Sub 1-2-G	m/z=376.16(C ₂₇ H ₂₄ Si=376.56)	Sub 1-2-H	m/z=500.20(C ₃₇ H ₂₈ Si=500.70)
Sub 1-2-I	m/z=498.18(C ₃₇ H ₂₆ Si=498.69)	Sub 1-2-J	m/z=334.14(C ₂₅ H ₁₈ O=334.41)
Sub 1-2-K	m/z=436.22(C ₃₄ H ₂₈ =436.59)	Sub 1-2-L	m/z=486.20(C ₃₇ H ₂₆ O=486.60)
Sub 1-2-M	m/z=406.18(C ₂₉ H ₂₆ S=406.58)	Sub 1-2-N	m/z=486.21(C ₃₆ H ₂₆ N ₂ =486.61)

<반응식 4>



(10) Sub 1-3-2 합성

[0152] 둥근바닥플라스크에 Sub 1-1-1(1당량), Sub 1-3-1(1당량)을 메탄올에 넣고 교반시켰다. 이 용액에 sodium methoxide를 넣고 상온에서 24시간 동안 교반시켰다. 그 후 Dichloromethane와 물로 추출한 후 유기층을 건조하고 농축한 후 생성된 유기물을 silicagel column 및 재결정하여 Sub 1-3-2을 얻었다.

[0153] **(11) Sub 1-3-3 합성**

[0154] 둥근바닥플라스크에 Sub 1-3-2화합물 1당량, iodine을 dry benzene에 넣은 후 UV 램프로 용액에 거품이 발생하는 동안 UV를 처리하며 TLC로 모니터링한다. 7시간 후에 감압 상태에서 용매를 제거한 후 에탄올로 재결정하여 Sub 1-3-3을 얻었다.

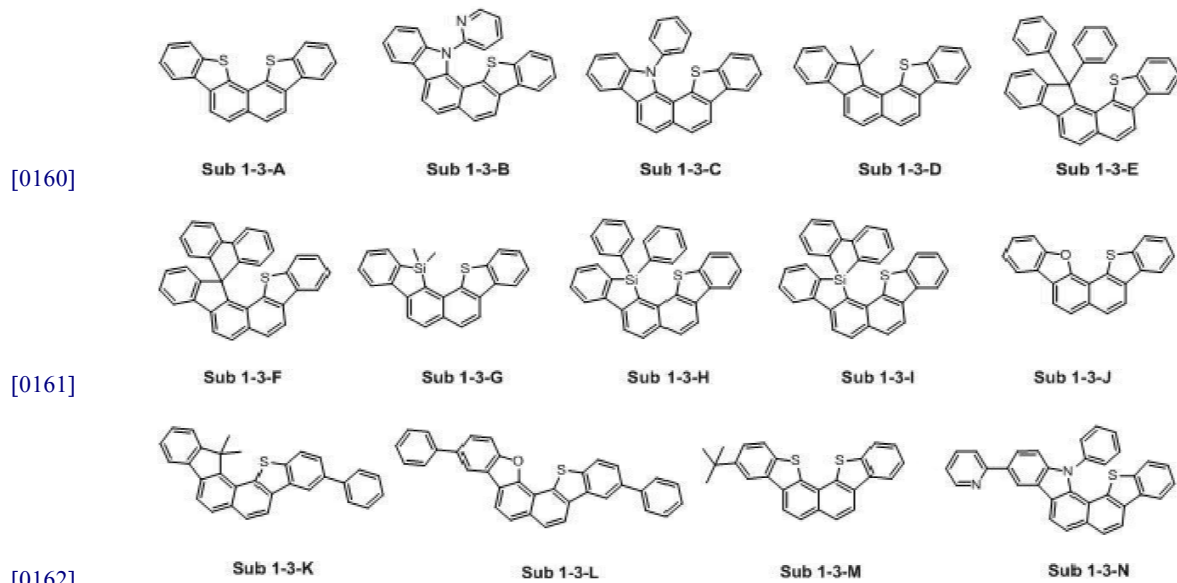
[0155] **(12) Sub 1-3-5 합성**

[0156] Sub 1-3-3(1당량)과 Sub 1-3-4(1당량), Ph(PPh₃), NaCO₃를 무수 THF와 소량의 물에 녹이고 난 후, 24시간 동안 환류시켰다. 반응이 종료되면 반응물의 온도를 상온으로 식히고, CH₂Cl₂로 추출하고 물로 닦아주었다. 소량의 물을 무수 MgSO₄로 제거하고 감압여과 후, 유기용매를 농축하여 생성된 생성물을 컬럼크로마토그래피를 이용하여 분리하여 원하는 Sub 1-3-5를 얻었다.

[0157] **(13) Sub 1-3 합성법**

[0158] Sub 1-3-5를 trifluoromethanesulfonic acid 용매에 녹인 후, 상온에서 48시간 동안 교반시켰다. 반응이 종료되면 반응물을 물과 pyridine 의 혼합용매에 붓고, 20분 동안 환류시켰다. 반응물의 온도를 상온으로 식히고, CH₂Cl₂로 추출하고 닦아주었다. 소량의 물을 무수 MgSO₄로 제거하고 감압여과 후, 유기용매를 농축하여 생성된 생성물을 컬럼크로마토그래피를 이용하여 분리하여 원하는 Sub 1-3을 얻었다.

[0159] Sub 1-3의 예시는 다음과 같으나, 이에 한정되는 것은 아니다. 하기 Sub 1-3의 예시적 화합물에 대한 FD-MS 값은 표 3과 같다.



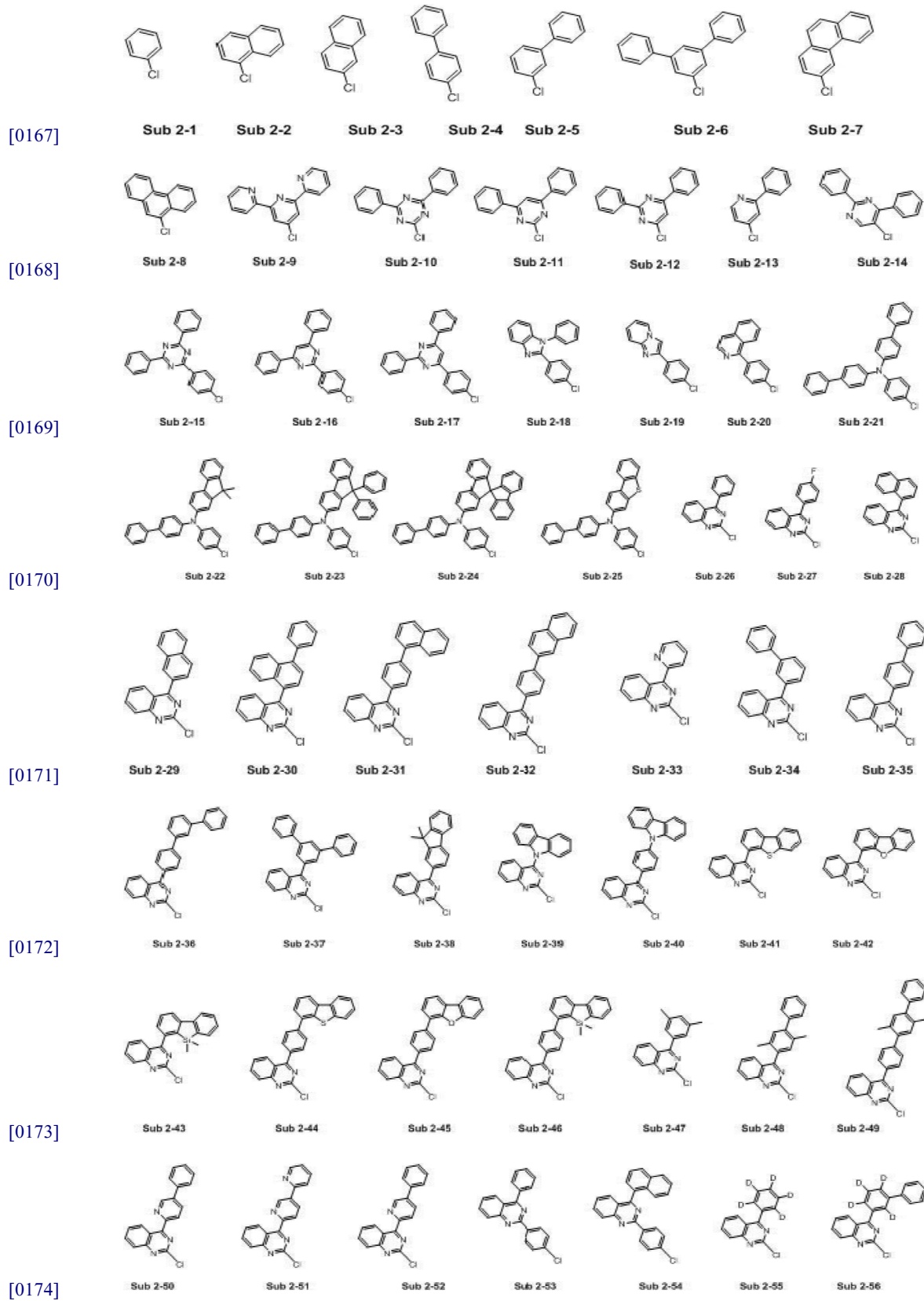
[0162] [표 3]

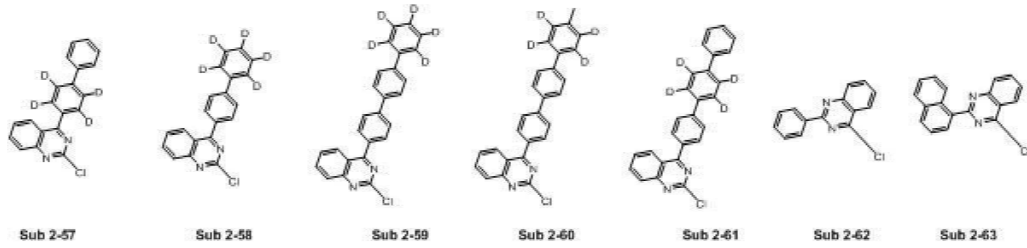
화합물	FD-MS	화합물	FD-MS
Sub 1-3-A	m/z=340.04(C ₂₂ H ₁₂ S ₂ =340.46)	Sub 1-3-B	m/z=400.10(C ₂₇ H ₀₃ N ₂ S=400.49)
Sub 1-3-C	m/z=399.11(C ₂₈ H ₁₇ NS=399.51)	Sub 1-3-D	m/z=350.11(C ₂₅ H ₁₅ S=350.48)
Sub 1-3-E	m/z=474.14(C ₃₅ H ₂₂ S=474.61)	Sub 1-3-F	m/z=472.13(C ₃₅ H ₂₀ S=472.60)
Sub 1-3-G	m/z=366.09(C ₂₄ H ₁₈ SSi=366.55)	Sub 1-3-H	m/z=490.12(C ₃₄ H ₂₂ SSi=490.69)
Sub 1-3-I	m/z=488.11(C ₃₄ H ₂₀ SSi=488.67)	Sub 1-3-J	m/z=324.06(C ₂₂ H ₁₂ OS=324.40)
Sub 1-3-K	m/z=426.14(C ₃₁ H ₂₂ S=426.57)	Sub 1-3-L	m/z=476.12(C ₃₄ H ₂₀ OS=476.59)
Sub 1-3-M	m/z=396.10 (C ₂₆ H ₂₀ S ₂ =396.57)	Sub 1-3-N	m/z=476.13(C ₃₃ H ₂₀ N ₂ S=476.59)

[0164]

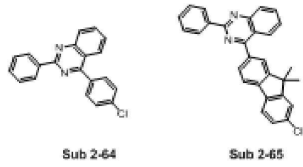
[0165] 2. Sub 2의 예

[0166] Sub 2의 예시는 다음과 같으나, 이에 한정되는 것은 아니다. 하기 Sub 2의 예시적 화합물에 대한 FD-MS 값은 표 4와 같다.





[0175]



[0176]

[0177]

[표 4]

화합물	FD-MS	화합물	FD-MS
Sub 2-1	m/z=112.01(C ₆ H ₅ Cl=112.56)	Sub 2-2	m/z=162.02(C ₁₀ H ₇ Cl=162.62)
Sub 2-3	m/z=188.04(C ₁₂ H ₉ Cl=188.65)	Sub 2-4	m/z=188.04(C ₁₂ H ₉ Cl=188.65)
Sub 2-5	m/z=188.04(C ₁₂ H ₉ Cl=188.65)	Sub 2-6	m/z=212.04(C ₁₄ H ₉ Cl=212.67)
Sub 2-7	m/z=212.04(C ₁₄ H ₉ Cl=212.67)	Sub 2-8	m/z=212.04(C ₁₄ H ₉ Cl=212.67)
Sub 2-9	m/z=267.06(C ₁₅ H ₁₀ CIN ₃ =267.71)	Sub 2-10	m/z=267.06(C ₁₅ H ₁₀ CIN ₃ =267.71)
Sub 2-11	m/z=266.06(C ₁₆ H ₁₁ CIN ₂ =266.72)	Sub 2-12	m/z=266.06(C ₁₆ H ₁₁ CIN ₂ =266.72)
Sub 2-13	m/z=189.03(C ₁₁ H ₈ CIN=189.64)	Sub 2-14	m/z=266.06(C ₁₆ H ₁₁ CIN ₂ =266.72)
Sub 2-15	m/z=343.09(C ₂₁ H ₁₄ CIN ₃ =343.81)	Sub 2-16	m/z=342.09(C ₂₂ H ₁₅ CIN ₂ =342.82)
Sub 2-17	m/z=342.09(C ₂₂ H ₁₅ CIN ₂ =342.82)	Sub 2-18	m/z=304.08(C ₁₉ H ₁₃ CIN ₂ =304.77)
Sub 2-19	m/z=228.05(C ₁₃ H ₉ CIN ₂ =228.68)	Sub 2-20	m/z=239.05(C ₁₅ H ₁₀ CIN=239.70)
Sub 2-21	m/z=431.14(C ₃₀ H ₂₂ CIN=431.96)	Sub 2-22	m/z=471.18(C ₃₃ H ₂₆ CIN=472.02)
Sub 2-23	m/z=595.21(C ₄₃ H ₃₀ CIN=596.16)	Sub 2-24	m/z=593.19(C ₄₃ H ₂₈ CIN=594.14)
Sub 2-25	m/z=461.10(C ₃₀ H ₂₀ CINS=462.00)	Sub 2-26	m/z=240.05(C ₁₄ H ₉ CIN ₂ =240.69)
Sub 2-27	m/z=258.04(C ₁₄ H ₈ ClFN ₂ =258.68)	Sub 2-28	m/z=290.06(C ₁₈ H ₁₁ CIN ₂ =290.75)
Sub 2-29	m/z=290.06(C ₁₈ H ₁₁ CIN ₂ =290.75)	Sub 2-30	m/z=366.09(C ₂₄ H ₁₅ CIN ₂ =366.84)
Sub 2-31	m/z=366.09(C ₂₄ H ₁₅ CIN ₂ =366.84)	Sub 2-32	m/z=366.09(C ₂₄ H ₁₅ CIN ₂ =366.84)
Sub 2-33	m/z=241.04(C ₁₃ H ₈ CIN ₃ =241.68)	Sub 2-34	m/z=316.08(C ₂₀ H ₁₃ CIN ₂ =316.78)
Sub 2-35	m/z=316.08(C ₂₀ H ₁₃ CIN ₂ =316.78)	Sub 2-36	m/z=392.11(C ₂₆ H ₁₇ CIN ₂ =392.88)
Sub 2-37	m/z=392.11(C ₂₆ H ₁₇ CIN ₂ =392.88)	Sub 2-38	m/z=356.11(C ₂₃ H ₁₇ CIN ₂ =356.85)
Sub 2-39	m/z=329.07(C ₂₀ H ₁₂ CIN ₃ =329.78)	Sub 2-40	m/z=405.10(C ₂₆ H ₁₆ CIN ₃ =405.88)
Sub 2-41	m/z=346.03(C ₂₀ H ₁₁ CIN ₂ S=346.83)	Sub 2-42	m/z=330.06(C ₂₀ H ₁₁ CIN ₂ O=330.77)
Sub 2-43	m/z=372.08(C ₂₂ H ₁₇ CIN ₂ Si=372.92)	Sub 2-44	m/z=422.06(C ₂₆ H ₁₅ CIN ₂ S=422.93)
Sub 2-45	m/z=406.09(C ₂₆ H ₁₅ CIN ₂ O=406.86)	Sub 2-46	m/z=448.12(C ₂₈ H ₂₁ CIN ₂ Si=449.02)
Sub 2-47	m/z=268.08(C ₁₆ H ₁₃ CIN ₂ =268.74)	Sub 2-48	m/z=420.14(C ₂₈ H ₂₁ CIN ₂ =344.84)
Sub 2-49	m/z=420.14(C ₂₈ H ₂₁ CIN ₂ =420.93)	Sub 2-50	m/z=317.07(C ₁₉ H ₁₂ CIN ₃ =317.77)
Sub 2-51	m/z=318.07(C ₁₈ H ₁₁ CIN ₄ =318.76)	Sub 2-52	m/z=317.07(C ₁₉ H ₁₂ CIN ₃ =317.77)
Sub 2-53	m/z=316.08(C ₂₀ H ₁₃ CIN ₂ =316.78)	Sub 2-54	m/z=366.09(C ₂₄ H ₁₅ CIN ₂ =366.84)
Sub 2-55	m/z=245.08(C ₁₄ H ₄ D ₅ CIN ₂ =245.72)	Sub 2-56	m/z=320.10(C ₂₀ H ₅ D ₄ CIN ₂ =320.81)
Sub 2-57	m/z=320.10(C ₂₀ H ₅ D ₄ CIN ₂ =320.81)	Sub 2-58	m/z=320.10(C ₂₀ H ₅ D ₄ CIN ₂ =320.81)
Sub 2-59	m/z=397.14(C ₂₆ H ₁₂ D ₅ CIN ₂ =397.9)	Sub 2-60	m/z=410.15(C ₂₇ H ₁₅ D ₄ CIN ₂ =410.93)
Sub 2-61	m/z=396.13(C ₂₆ H ₁₃ D ₄ CIN ₂ =396.9)	Sub 2-62	m/z=240.05(C ₁₄ H ₉ CIN ₂ =240.69)
Sub 2-63	m/z=290.06(C ₁₈ H ₁₁ CIN ₂ =290.75)	Sub 2-64	m/z=316.08(C ₂₀ H ₁₃ CIN ₂ =316.78)

[0178]

[0179]

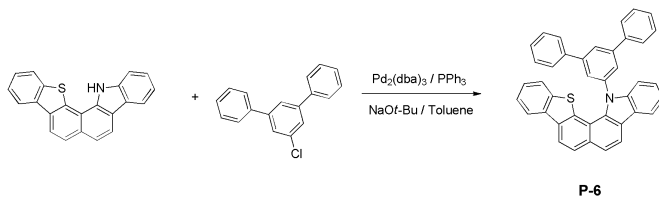
[0180]

Sub 2-65	m/z=432.14(C ₂₉ H ₂₁ CIN ₂ =432.94)		
----------	--	--	--

Products의 합성

[0181] Sub 1(1당량)과 Sub 2(1.1당량)을 톨루엔에 넣고 Pd₂(dba)₃ (0.05당량), PPh₃ (0.1당량), NaO*t*-Bu(3당량)을 각각 첨가한 뒤, 100℃에서 24시간 교반 환류시킨다. ether와 물로 추출한 후 유기층을 MgSO₄로 건조하고 농축한 후 생성된 유기물을 silicagel column 및 재결정하여 최종 생성물을 얻었다

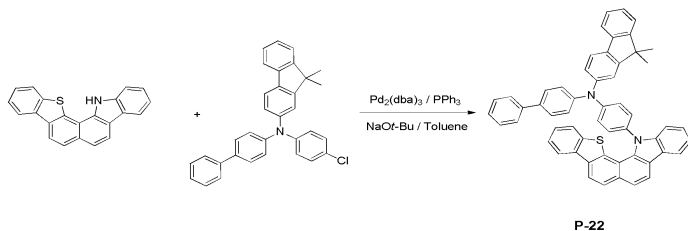
[0182] **1. P-6의 합성**



[0183]

[0184] 14H-benzo[4',5']thieno[3',2':5,6]benzo[1,2-a]carbazole(6.5g, 20mmol), 5'-chloro-1,1':3,1''-terphenyl(6.4g, 24mmol)을 톨루엔에 넣고 Pd₂(dba)₃(1.0g, 1mmol), PPh₃(0.5g, 2mmol), NaO*t*-Bu(5.8g, 60mmol)을 각각 첨가한 뒤, 100℃에서 24시간 교반 환류시킨다. ether와 물로 추출한 후 유기층을 MgSO₄로 건조하고 농축한 후 생성된 유기물을 silicagel column 및 재결정하여 최종 Product 7.1g(수율 64%)를 얻었다.

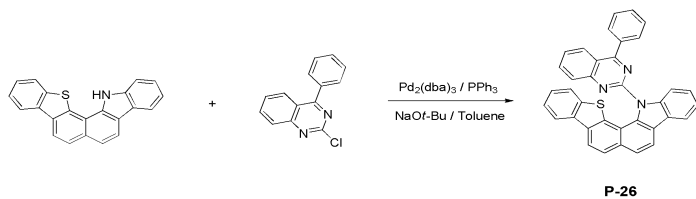
[0185] **2. P-22의 합성**



[0186]

[0187] 14H-benzo[4',5']thieno[3',2':5,6]benzo[1,2-a]carbazole(6.5g, 20mmol), N-([1,1'-biphenyl]-4-yl)-N-(4-chlorophenyl)-9,9-dimethyl-9H-fluoren-2-amine(11.3g, 24mmol)을 톨루엔에 넣고 Pd₂(dba)₃(1.0g, 1mmol), PPh₃(0.5g, 2mmol), NaO*t*-Bu(5.8g, 60mmol)을 각각 첨가한 뒤, 100℃에서 24시간 교반 환류시킨다. ether와 물로 추출한 후 유기층을 MgSO₄로 건조하고 농축한 후 생성된 유기물을 silicagel column 및 재결정하여 최종 Product 9.3g(수율 61%)를 얻었다.

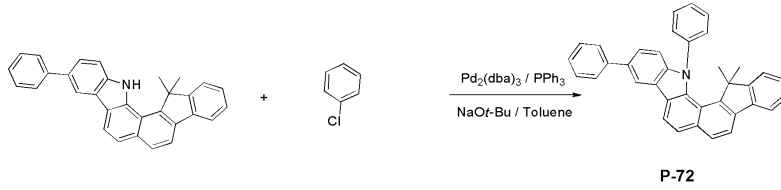
[0188] **3. P-26의 합성**



[0189]

[0190] 14H-benzo[4',5']thieno[3',2':5,6]benzo[1,2-a]carbazole(6.5g, 20mmol), 2-chloro-4-phenylquinazoline(5.8g, 24mmol)을 톨루엔에 넣고 Pd₂(dba)₃(1.0g, 1mmol), PPh₃(0.5g, 2mmol), NaO*t*-Bu(5.8g, 60mmol)을 각각 첨가한 뒤, 100℃에서 24시간 교반 환류시킨다. ether와 물로 추출한 후 유기층을 MgSO₄로 건조하고 농축한 후 생성된 유기물을 silicagel column 및 재결정하여 최종 Product 6.6g(수율 63%)를 얻었다.

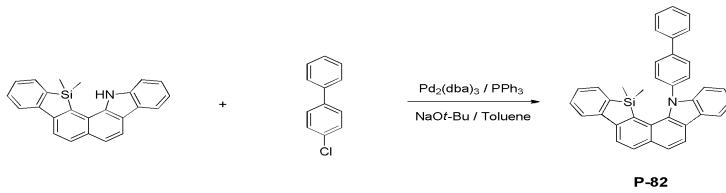
[0191] **4. P-72의 합성**



[0192]

[0193] 14,14-dimethyl-10-phenyl-13,14-dihydrofluoreno[1,2-a]carbazole(8.2g, 20mmol), chlorobenzene(2.7g, 24mmol)을 톨루엔에 넣고 Pd₂(dba)₃(1.0g, 1mmol), PPh₃(0.5g, 2mmol), NaOt-Bu(5.8g, 60mmol)을 각각 첨가한 뒤, 100℃에서 24시간 교반 환류시킨다. ether와 물로 추출한 후 유기층을 MgSO₄로 건조하고 농축한 후 생성된 유기물을 silicagel column 및 재결정하여 최종 Product 5.6g(수율 58%)를 얻었다.

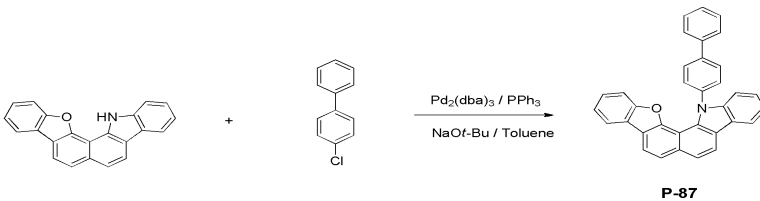
[0194] **5. P-82의 합성**



[0195]

[0196] 14,14-dimethyl-13,14-dihydrobenzo[4',5']silolo[3',2':5,6]benzo[1,2-a]carbazole(7.0g, 20mmol), 4-chloro-1,1'-biphenyl(4.5g, 24mmol)을 톨루엔에 넣고 Pd₂(dba)₃(1.0g, 1mmol), PPh₃(0.5g, 2mmol), NaOt-Bu(5.8g, 60mmol)을 각각 첨가한 뒤, 100℃에서 24시간 교반 환류시킨다. ether와 물로 추출한 후 유기층을 MgSO₄로 건조하고 농축한 후 생성된 유기물을 silicagel column 및 재결정하여 최종 Product 5.5g(수율 55%)를 얻었다.

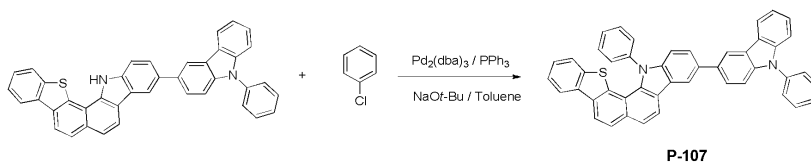
[0197] **6. P-87의 합성**



[0198]

[0199] 14H-benzo[2,3]benzofuro[7,6-a]carbazole(6.1g, 20mmol), 4-chloro-1,1'-biphenyl(4.5g, 24mmol)을 톨루엔에 넣고 Pd₂(dba)₃(1.0g, 1mmol), PPh₃(0.5g, 2mmol), NaOt-Bu(5.8g, 60mmol)을 각각 첨가한 뒤, 100℃에서 24시간 교반 환류시킨다. ether와 물로 추출한 후 유기층을 MgSO₄로 건조하고 농축한 후 생성된 유기물을 silicagel column 및 재결정하여 최종 Product 5.4g(수율 59%)를 얻었다.

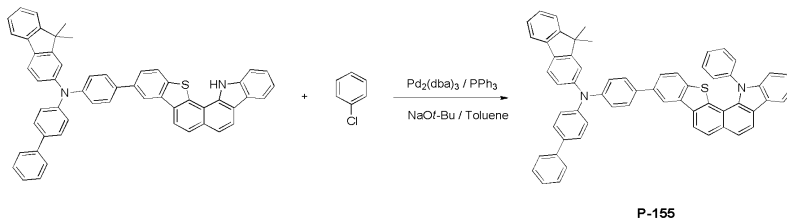
[0200] **7. P-107의 합성**



[0201]

[0202] 3-(9-phenyl-9H-carbazol-3-yl)-14H-benzo[4',5']thieno[3',2':5,6]benzo[1,2-a]carbazole(11.3g, 20mmol), chlorobenzene(2.7g, 24mmol)을 톨루엔에 넣고 Pd₂(dba)₃(1.0g, 1mmol), PPh₃(0.5g, 2mmol), NaOt-Bu(5.8g, 60mmol)을 각각 첨가한 뒤, 100℃에서 24시간 교반 환류시킨다. ether와 물로 추출한 후 유기층을 MgSO₄로 건조하고 농축한 후 생성된 유기물을 silicagel column 및 재결정하여 최종 Product 7.9g(수율 62%)를 얻었다.

[0203] 8. P-155의 합성



[0204]

[0205] N-(4-(14H-benzo[4',5']thieno[3',2':5,6]benzo[1,2-a]carbazol-10-yl)phenyl)-N-([1,1'-biphenyl]-4-yl)-9,9-dimethyl-9H-fluoren-2-amine(15.2g, 20mmol), chlorobenzene(2.7g, 24mmol)을 톨루엔에 넣고 Pd₂(dba)₃(1.0g, 1mmol), PPh₃(0.5g, 2mmol), NaOt-Bu(5.8g, 60mmol)을 각각 첨가한 뒤, 100℃에서 24시간 교반 환류시킨다. ether와 물로 추출한 후 유기층을 MgSO₄로 건조하고 농축한 후 생성된 유기물을 silicagel column 및 재결정하여 최종 Product 10.5g(수율 63%)를 얻었다.

[0206] [표 5]

화합물	FD-MS	화합물	FD-MS
P-1	m/z=399.11(C ₂₈ H ₁₇ NS=558.71)	P-2	m/z=449.12(C ₃₂ H ₁₉ NS=449.56)
P-3	m/z=449.12(C ₃₂ H ₁₉ NS=449.56)	P-4	m/z=475.14(C ₃₄ H ₂₁ NS=475.60)
P-5	m/z=475.14(C ₃₄ H ₂₁ NS=475.60)	P-6	m/z=551.17(C ₄₀ H ₂₅ NS=551.70)
P-7	m/z=551.17(C ₄₀ H ₂₅ NS=551.70)	P-8	m/z=551.17(C ₄₀ H ₂₅ NS=551.70)
P-9	m/z=554.16(C ₃₇ H ₂₂ N ₄ S=554.66)	P-10	m/z=554.16(C ₃₇ H ₂₂ N ₄ S=554.66)
P-11	m/z=553.16(C ₃₈ H ₂₃ N ₃ S=553.67)	P-12	m/z=553.16(C ₃₈ H ₂₃ N ₃ S=553.67)
P-13	m/z=476.13(C ₃₃ H ₂₀ N ₂ S=476.59)	P-14	m/z=553.16(C ₃₈ H ₂₃ N ₃ S=553.67)
P-15	m/z=630.19(C ₄₃ H ₂₆ N ₄ S=630.76)	P-16	m/z=629.19(C ₄₄ H ₂₇ N ₃ S=629.77)
P-17	m/z=629.19(C ₄₄ H ₂₇ N ₃ S=629.77)	P-18	m/z=591.18(C ₄₁ H ₂₅ N ₃ S=591.72)
P-19	m/z=515.15(C ₃₅ H ₂₁ N ₃ S=515.63)	P-20	m/z=526.15(C ₃₇ H ₂₂ N ₂ S=526.65)
P-21	m/z=718.24(C ₅₂ H ₃₄ N ₂ S=718.90)	P-22	m/z=758.28(C ₅₅ H ₃₈ N ₂ S=758.97)
P-23	m/z=882.31(C ₆₅ H ₄₂ N ₂ S=883.11)	P-24	m/z=880.29(C ₆₅ H ₄₀ N ₂ S=881.09)
P-25	m/z=748.20(C ₅₂ H ₃₂ N ₂ S ₂ =748.95)	P-26	m/z=527.15(C ₃₆ H ₂₁ N ₃ S=527.64)
P-27	m/z=545.14(C ₃₆ H ₂₀ FN ₃ S=545.63)	P-28	m/z=577.16(C ₄₀ H ₂₃ N ₃ S=577.70)
P-29	m/z=577.16(C ₄₀ H ₂₃ N ₃ S=577.70)	P-30	m/z=653.19(C ₄₆ H ₂₇ N ₃ S=656.79)
P-31	m/z=653.19(C ₄₆ H ₂₇ N ₃ S=656.79)	P-32	m/z=653.19(C ₄₆ H ₂₇ N ₃ S=656.79)
P-33	m/z=528.14(C ₃₅ H ₂₀ N ₄ S=528.63)	P-34	m/z=603.18(C ₄₂ H ₂₅ N ₃ S=603.73)
P-35	m/z=603.18(C ₄₂ H ₂₅ N ₃ S=603.73)	P-36	m/z=679.21(C ₄₈ H ₂₉ N ₃ S=679.83)
P-37	m/z=679.21(C ₄₈ H ₂₉ N ₃ S=679.83)	P-38	m/z=643.21(C ₄₅ H ₂₉ N ₃ S=643.80)
P-39	m/z=616.17(C ₄₂ H ₂₄ N ₄ S=616.73)	P-40	m/z=692.20(C ₄₈ H ₂₈ N ₄ S=692.83)
P-41	m/z=633.13(C ₄₂ H ₂₃ N ₃ S ₂ =633.78)	P-42	m/z=617.16(C ₄₂ H ₂₃ N ₃ OS=617.72)
P-43	m/z=659.19(C ₄₄ H ₂₉ N ₃ SSi=659.87)	P-44	m/z=709.16(C ₄₈ H ₂₇ N ₃ S ₂ =709.88)
P-45	m/z=693.19(C ₄₈ H ₂₇ N ₃ OS=693.81)	P-46	m/z=735.22(C ₅₀ H ₃₃ N ₃ SSi=735.97)
P-47	m/z=555.18(C ₃₈ H ₂₅ N ₃ S=555.69)	P-48	m/z=631.21(C ₄₄ H ₂₉ N ₃ S=631.79)
P-49	m/z=707.24(C ₅₀ H ₃₃ N ₃ S=707.88)	P-50	m/z=604.17(C ₄₁ H ₂₄ N ₄ S=604.72)
P-51	m/z=605.17(C ₄₀ H ₂₃ N ₅ S=605.71)	P-52	m/z=604.17(C ₄₁ H ₂₄ N ₄ S=604.72)
P-53	m/z=603.18(C ₄₂ H ₂₅ N ₃ S=603.73)	P-54	m/z=653.19(C ₄₆ H ₂₇ N ₃ S=653.79)
P-55	m/z=532.18(C ₃₆ H ₁₆ N ₃ S=532.67)	P-56	m/z=607.20(C ₄₂ H ₂₁ D ₄ N ₃ S=607.76)
P-57	m/z=607.20(C ₄₂ H ₂₁ D ₄ N ₃ S=607.76)	P-58	m/z=608.21(C ₄₂ H ₂₀ D ₅ N ₃ S=608.76)
P-59	m/z=684.24(C ₄₈ H ₂₄ D ₅ N ₃ S=684.86)	P-60	m/z=697.25(C ₄₉ H ₂₇ D ₄ N ₃ S=697.88)
P-61	m/z=683.23(C ₄₈ H ₂₅ D ₄ N ₃ S=683.85)	P-62	m/z=527.15(C ₃₆ H ₂₁ N ₃ S=527.64)
P-63	m/z=577.16(C ₄₀ H ₂₃ N ₃ S=577.70)	P-64	m/z=603.18(C ₄₂ H ₂₅ N ₃ S=603.73)
P-65	m/z=719.24(C ₅₁ H ₃₃ N ₃ S=719.89)	P-66	m/z=340.04(C ₂₂ H ₁₂ S ₂ =340.46)
P-67	m/z=426.14(C ₃₁ H ₂₂ S=426.57)	P-68	m/z=476.12(C ₃₄ H ₂₀ OS=476.59)
P-69	m/z=507.11(C ₃₄ H ₂₁ NS ₂ =507.67)	P-70	m/z=546.18(C ₃₈ H ₃₀ SSi=546.80)

[0207]

P-71	m/z=458.18(C ₃₄ H ₂₂ N ₂ =458.55)	P-72	m/z=485.21(C ₃₇ H ₂₇ N=485.62)
P-73	m/z=535.19(C ₄₀ H ₂₅ NO=535.63)	P-74	m/z=586.22(C ₄₂ H ₃₄ N ₄ =586.68)
P-75	m/z=533.21(C ₄₁ H ₂₇ N=533.66)	P-76	m/z=360.19(C ₂₈ H ₂₄ =360.49)
P-77	m/z=350.11(C ₂₅ H ₁₈ S=350.48)	P-78	m/z=458.17(C ₃₅ H ₂₂ O=458.55)
P-79	m/z=537.22(C ₃₉ H ₂₇ N ₃ =537.65)	P-80	m/z=376.16(C ₂₇ H ₂₄ Si=376.56)
P-81	m/z=392.14(C ₂₆ H ₂₄ Si ₂ =392.64)	P-82	m/z=501.19(C ₃₆ H ₂₇ NSi=501.69)
P-83	m/z=350.11(C ₂₄ H ₁₈ OSi=350.48)	P-84	m/z=468.17(C ₃₂ H ₂₈ Si ₂ =468.74)
P-85	m/z=787.31(C ₅₆ H ₄₅ NSi ₂ =788.13)	P-86	m/z=308.08(C ₂₂ H ₁₂ O ₂ =308.33)
P-87	m/z=459.16(C ₃₄ H ₂₁ NO=459.54)	P-88	m/z=364.15(C ₂₅ H ₂₀ O ₂ =364.44)
P-89	m/z=384.12(C ₂₈ H ₁₆ O ₂ =364.43)	P-90	m/z=703.25(C ₅₂ H ₃₃ NO ₂ =703.82)
P-91	m/z=642.21(C ₄₆ H ₃₀ N ₂ S=642.81)	P-92	m/z=692.23(C ₅₀ H ₃₂ N ₂ S=692.87)
P-93	m/z=692.23(C ₅₀ H ₃₂ N ₂ S=692.87)	P-94	m/z=718.24(C ₅₂ H ₃₄ N ₂ S=718.90)
P-95	m/z=834.31(C ₆₁ H ₄₂ N ₂ S=835.06)	P-96	m/z=626.24(C ₄₆ H ₃₀ N ₂ S=626.74)
P-97	m/z=676.25(C ₅₀ H ₃₂ N ₂ O=676.80)	P-98	m/z=676.25(C ₅₀ H ₃₂ N ₂ O=676.80)
P-99	m/z=702.27(C ₅₂ H ₃₄ N ₂ O=702.84)	P-100	m/z=818.33(C ₆₁ H ₄₂ N ₂ O=819.00)
P-101	m/z=652.29(C ₄₉ H ₃₆ N ₂ =652.82)	P-102	m/z=702.30(C ₅₃ H ₃₈ N ₂ =702.88)
P-103	m/z=702.30(C ₅₃ H ₃₈ N ₂ =702.88)	P-104	m/z=728.32(C ₅₅ H ₄₀ N ₂ =728.92)
P-105	m/z=844.38(C ₆₄ H ₄₈ N ₂ =845.08)	P-106	m/z=590.18(C ₄₂ H ₂₆ N ₂ S=590.73)
P-107	m/z=640.20(C ₄₆ H ₂₈ N ₂ S=640.79)	P-108	m/z=640.20(C ₄₆ H ₂₈ N ₂ S=640.79)
P-109	m/z=690.21(C ₅₀ H ₃₀ N ₂ S=690.85)	P=110	m/z=740.23(C ₅₄ H ₃₂ N ₂ S=740.91)
P-111	m/z=514.15(C ₃₆ H ₂₂ N ₂ S=514.64)	P=112	m/z=564.17(C ₄₀ H ₂₄ N ₂ S=564.70)
P-113	m/z=564.17(C ₄₀ H ₂₄ N ₂ S=564.70)	P=114	m/z=614.18(C ₄₄ H ₂₆ N ₂ S=614.76)
P-115	m/z=664.20(C ₄₈ H ₂₈ N ₂ S=664.81)	P=116	m/z=590.18(C ₄₂ H ₂₆ N ₂ S=590.73)
P-117	m/z=640.20(C ₄₆ H ₂₈ N ₂ S=640.79)	P=118	m/z=640.20(C ₄₆ H ₂₈ N ₂ S=640.79)
P-119	m/z=690.21(C ₅₀ H ₃₀ N ₂ S=690.85)	P-120	m/z=740.23(C ₅₄ H ₃₂ N ₂ S=740.91)
P-121	m/z=514.15(C ₃₆ H ₂₂ N ₂ S=514.64)	P-122	m/z=564.17(C ₄₀ H ₂₄ N ₂ S=564.70)
P-123	m/z=564.17(C ₄₀ H ₂₄ N ₂ S=564.70)	P-124	m/z=614.18(C ₄₄ H ₂₆ N ₂ S=614.76)
P-125	m/z=664.20(C ₄₈ H ₂₈ N ₂ S=664.81)	P-126	m/z=574.20(C ₄₂ H ₂₆ N ₂ O=574.67)
P-127	m/z=624.22(C ₄₆ H ₂₈ N ₂ O=624.73)	P-128	m/z=624.22(C ₄₆ H ₂₈ N ₂ O=624.73)
P-129	m/z=674.24(C ₅₀ H ₃₀ N ₂ O=674.79)	P-130	m/z=724.25(C ₅₄ H ₃₂ N ₂ O=724.84)
P-131	m/z=524.23(C ₃₉ H ₂₈ N ₂ =524.65)	P-132	m/z=574.24(C ₄₃ H ₃₀ N ₂ =574.71)
P-133	m/z=574.24(C ₄₃ H ₃₀ N ₂ =574.7)	P-134	m/z=624.26(C ₄₇ H ₃₂ N ₂ =624.77)
P-135	m/z=674.27(C ₅₁ H ₃₄ N ₂ =674.83)	P-136	m/z=600.26(C ₄₅ H ₃₂ N ₂ =600.75)
P-137	m/z=650.27(C ₄₉ H ₃₄ N ₂ =650.81)	P-138	m/z=650.27(C ₄₉ H ₃₄ N ₂ =650.81)
P-139	m/z=700.29(C ₅₃ H ₃₆ N ₂ =700.87)	P-140	m/z=750.30(C ₅₇ H ₃₈ N ₂ =750.93)
P-141	m/z=498.17(C ₃₆ H ₂₇ N ₂ O=498.57)	P-142	m/z=548.19(C ₄₀ H ₂₄ N ₂ O=548.63)

[0208]

P-143	m/z=548.19(C ₄₀ H ₂₄ N ₂ O=548.63)	P-144	m/z=598.20(C ₄₄ H ₂₆ N ₂ O=598.69)
P-145	m/z=648.22(C ₄₈ H ₂₈ N ₂ O=648.75)	P-146	m/z=642.21(C ₄₆ H ₃₀ N ₂ S=642.81)
P-147	m/z=769.26(C ₅₅ H ₃₅ N ₃ S=769.95)	P-148	m/z=844.29(C ₆₂ H ₄₀ N ₂ S=845.06)
P-149	m/z=884.32(C ₆₅ H ₄₄ N ₂ S=885.12)	P-150	m/z=834.31(C ₆₁ H ₄₂ N ₂ S=835.06)
P-151	m/z=642.21(C ₄₆ H ₃₀ N ₂ S=642.81)	P-152	m/z=769.26(C ₅₅ H ₃₅ N ₃ S=769.95)
P-153	m/z=844.29(C ₆₂ H ₄₀ N ₂ S=845.06)	P-154	m/z=884.32(C ₆₅ H ₄₄ N ₂ S=885.12)
P-155	m/z=834.31(C ₆₁ H ₄₂ N ₂ S=835.06)	P-156	m/z=626.24(C ₄₆ H ₃₀ N ₂ O=626.74)
P-157	m/z=753.28(C ₅₅ H ₃₅ N ₃ O=753.89)	P-158	m/z=828.31(C ₆₂ H ₄₀ N ₂ O=828.99)
P-159	m/z=868.35(C ₆₅ H ₄₄ N ₂ O=869.06)	P-160	m/z=818.33(C ₆₁ H ₄₂ N ₂ O=819.00)
P-161	m/z=652.29(C ₄₉ H ₃₆ N ₂ =652.82)	P-162	m/z=779.33(C ₅₈ H ₄₁ N ₃ =779.97)
P-163	m/z=854.37(C ₆₅ H ₄₆ N ₂ =855.07)	P-164	m/z=894.40(C ₆₈ H ₅₀ N ₂ =895.14)
P-165	m/z=844.38(C ₆₄ H ₄₈ N ₂ =845.08)		

[0209]

[0210]

유기전기소자의 제조평가

[0211]

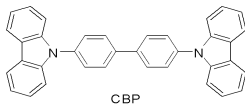
[실례 1] 레드 유기 발광 소자의 제작 및 시험 (인광 레드 호스트)

[0212] 합성을 통해 얻은 본 발명의 화합물(P-26 내지 P-90 중 하나)을 발광층의 발광 호스트 물질로 사용하여 통상적인 방법에 따라 유기전기 발광소자를 제작하였다. 먼저, 유리 기판에 형성된 ITO층(양극) 위에 N¹-(naphthalen-2-yl)-N⁴,N⁴-bis(4-(naphthalen-2-yl(phenyl)amino)phenyl)-N¹-phenylbenzene-1,4-diamine(이하, 2-TNATA로 약기함)을 진공 증착하여 60nm 두께의 정공주입층을 형성하였다. 이어서, 상기 정공주입층 상에 4,4-비스[N-(1-나프틸)-N-페닐아미노]비페닐(이하, -NPD로 약기함)을 20nm 두께로 진공 증착하여 정공수송층을 형성하였다. 다음으로, 정공 수송층 상부에 본 발명의 화합물(P-26~P-90 중 하나)을 호스트 물질로, (piq)₂Ir(acac)[bis-(1-phenylisoquinolyl)iridium(III)acetylacetonate]를 도펀트물질로 사용하여 95:5 중량비로 도핑하여 30nm 두께로 발광층을 증착하였다. 이후 (1,1'-비스페닐)-4-올레이트비스(2-메틸-8-퀴놀린올레이트)알루미늄(이하, BAlq로 약기함)을 10 nm 두께로 진공증착하여 정공저지층을 형성하고, 트리스(8-퀴놀리놀)알루미늄(이하, Alq₃로 약칭함)을 40nm 두께로 성막하여 전자수송층을 형성하였다. 이어서, 전자수송층 상에 할로젠화 알칼리 금속인 LiF를 0.2 nm 두께로 증착하여 전자주입층을 형성한 후, Al을 150nm의 두께로 증착하여 음극을 형성함으로써 유기전기 발광소자를 제조하였다.

[0213] [비교예 1]

[0214] 발광층의 호스트 물질로 본 발명에 따른 화합물 대신 하기 비교화합물 1을 사용한 점을 제외하고는 실험예 1과 동일한 방법으로 유기전기 발광소자를 제작하였다.

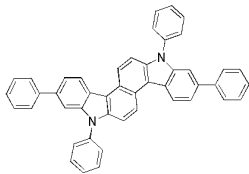
[0215] <비교 화합물 1> CBP



[0216] [비교예 2]

[0218] 발광층의 호스트 물질로 본 발명에 따른 화합물 대신 하기 비교화합물 2를 사용한 점을 제외하고는 실험예 1과 동일한 방법으로 유기전기 발광소자를 제작하였다.

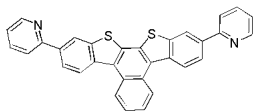
[0219] <비교 화합물 2>



[0220] [비교예 3]

[0222] 발광층의 호스트 물질로 본 발명에 따른 화합물 대신 하기 비교화합물 3을 사용한 점을 제외하고는 실험예 1과 동일한 방법으로 유기전기 발광소자를 제작하였다.

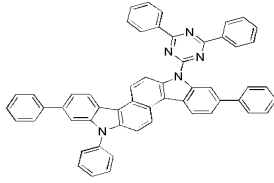
[0223] <비교 화합물 3>



[0224] [비교예 4]

[0226] 발광층의 호스트 물질로 본 발명에 따른 화합물 대신 하기 비교화합물 4를 사용한 점을 제외하고는 실험예 1과 동일한 방법으로 유기전기 발광소자를 제작하였다.

[0227] <비교 화합물 4>



[0228]

[0229] 실험예 1 및 비교예들에 의해 제조된 유기전기발광소자들에 순바이어스 직류전압을 가하여 포토리서치 (photoresearch)사의 PR-650으로 전기발광(EL) 특성을 측정된 결과를 하기 표 6에 나타내었다. 이때 수명은 300cd/m² 기준 휘도에서 맥사이언스사에서 제조된 수명 측정 장비를 통해 T90 수명을 측정하였다.

[0230] [표 6]

	화합물	Voltage	Current Density	Brightness (cd/m ²)	Efficiency	Lifetime T(90)	CIE (x, y)
비교예(1)	비교화합물(1)	6.5	6.5	300.0	4.6	54.2	(0.66, 0.32)
비교예(2)	비교화합물(2)	6.1	6.6	300.0	4.5	89.8	(0.67, 0.32)
비교예(3)	비교화합물(3)	6.2	7.4	300.0	4.1	83.4	(0.66, 0.32)
비교예(4)	비교화합물(4)	5.9	5.8	300.0	5.2	93.7	(0.66, 0.32)
실시예(1)	화합물(P-26)	5.3	4.7	300.0	6.4	101.5	(0.65, 0.32)
실시예(2)	화합물(P-27)	5.3	4.3	300.0	6.9	119.8	(0.66, 0.32)
실시예(3)	화합물(P-28)	5.6	4.4	300.0	6.8	143.9	(0.66, 0.33)
실시예(4)	화합물(P-29)	5.4	4.9	300.0	6.1	142.9	(0.66, 0.32)
실시예(5)	화합물(P-30)	5.8	4.7	300.0	6.4	138.5	(0.65, 0.32)
실시예(6)	화합물(P-31)	5.6	5.0	300.0	6.0	132.6	(0.66, 0.32)
실시예(7)	화합물(P-32)	5.7	4.7	300.0	6.4	115.9	(0.66, 0.32)
실시예(8)	화합물(P-33)	5.7	4.5	300.0	6.7	99.9	(0.67, 0.32)
실시예(9)	화합물(P-34)	5.4	4.8	300.0	6.2	122.7	(0.66, 0.32)
실시예(10)	화합물(P-35)	5.5	4.5	300.0	6.6	143.7	(0.66, 0.33)
실시예(11)	화합물(P-36)	5.6	4.4	300.0	6.7	98.7	(0.66, 0.32)
실시예(12)	화합물(P-37)	5.6	4.8	300.0	6.3	117.4	(0.65, 0.32)
실시예(13)	화합물(P-38)	5.3	4.6	300.0	6.5	128.3	(0.66, 0.32)
실시예(14)	화합물(P-39)	5.4	4.8	300.0	6.3	145.8	(0.66, 0.33)
실시예(15)	화합물(P-40)	5.6	4.8	300.0	6.2	132.2	(0.66, 0.32)
실시예(16)	화합물(P-41)	5.6	4.5	300.0	6.7	109.0	(0.65, 0.32)
실시예(17)	화합물(P-42)	5.4	4.8	300.0	6.3	94.6	(0.66, 0.32)
실시예(18)	화합물(P-43)	5.4	4.4	300.0	6.8	112.1	(0.66, 0.32)
실시예(19)	화합물(P-44)	5.5	4.3	300.0	6.9	133.9	(0.66, 0.32)
실시예(20)	화합물(P-45)	5.4	4.7	300.0	6.4	135.3	(0.67, 0.32)
실시예(21)	화합물(P-46)	5.5	4.6	300.0	6.6	116.0	(0.66, 0.32)
실시예(22)	화합물(P-47)	5.8	4.3	300.0	7.0	137.8	(0.66, 0.33)
실시예(23)	화합물(P-48)	5.5	4.8	300.0	6.3	127.7	(0.66, 0.32)
실시예(24)	화합물(P-49)	5.6	4.5	300.0	6.6	109.3	(0.65, 0.32)
실시예(25)	화합물(P-50)	5.7	4.3	300.0	6.9	119.1	(0.66, 0.32)
실시예(26)	화합물(P-51)	5.5	4.9	300.0	6.1	90.2	(0.66, 0.33)
실시예(27)	화합물(P-52)	5.8	4.9	300.0	6.2	124.7	(0.66, 0.32)
실시예(28)	화합물(P-53)	5.5	4.4	300.0	6.8	124.0	(0.65, 0.32)
실시예(29)	화합물(P-54)	5.7	4.9	300.0	6.1	149.1	(0.66, 0.32)
실시예(30)	화합물(P-55)	5.4	4.4	300.0	6.8	135.1	(0.66, 0.32)

[0231]

실시예(31)	화합물(P-56)	5.7	4.6	300.0	6.5	106.6	(0.67, 0.32)
실시예(32)	화합물(P-57)	5.6	4.7	300.0	6.4	99.7	(0.66, 0.32)
실시예(33)	화합물(P-58)	5.6	4.6	300.0	6.6	93.2	(0.66, 0.33)
실시예(34)	화합물(P-59)	5.7	4.3	300.0	6.9	129.4	(0.66, 0.32)
실시예(35)	화합물(P-60)	5.4	4.3	300.0	7.0	99.1	(0.65, 0.32)
실시예(36)	화합물(P-61)	5.4	4.8	300.0	6.2	112.7	(0.66, 0.32)
실시예(37)	화합물(P-62)	5.4	4.8	300.0	6.3	109.9	(0.66, 0.33)
실시예(38)	화합물(P-63)	5.7	4.5	300.0	6.7	119.8	(0.66, 0.32)
실시예(39)	화합물(P-64)	5.5	4.4	300.0	6.8	140.2	(0.65, 0.32)
실시예(40)	화합물(P-65)	5.5	5.0	300.0	6.0	127.6	(0.66, 0.32)
실시예(41)	화합물(P-66)	5.9	5.0	300.0	6.0	107.9	(0.66, 0.32)
실시예(42)	화합물(P-67)	5.9	5.4	300.0	5.6	120.7	(0.66, 0.32)
실시예(43)	화합물(P-68)	6.0	5.5	300.0	5.5	96.5	(0.67, 0.32)
실시예(44)	화합물(P-69)	6.0	5.0	300.0	6.0	127.9	(0.66, 0.32)
실시예(45)	화합물(P-70)	6.0	6.0	300.0	5.0	92.6	(0.66, 0.33)
실시예(46)	화합물(P-71)	5.9	5.7	300.0	5.3	123.5	(0.66, 0.32)
실시예(47)	화합물(P-72)	5.9	5.3	300.0	5.6	102.7	(0.65, 0.32)
실시예(48)	화합물(P-73)	5.9	5.2	300.0	5.8	143.9	(0.66, 0.32)
실시예(49)	화합물(P-74)	6.0	5.6	300.0	5.3	108.9	(0.66, 0.33)
실시예(50)	화합물(P-75)	6.0	5.2	300.0	5.7	118.2	(0.66, 0.32)
실시예(51)	화합물(P-76)	5.9	5.1	300.0	5.9	140.9	(0.65, 0.32)
실시예(52)	화합물(P-77)	5.8	5.8	300.0	5.1	108.1	(0.66, 0.32)
실시예(53)	화합물(P-78)	5.8	5.3	300.0	5.6	94.9	(0.66, 0.32)
실시예(54)	화합물(P-79)	6.0	5.3	300.0	5.6	97.6	(0.67, 0.32)
실시예(55)	화합물(P-80)	5.9	5.6	300.0	5.4	106.1	(0.66, 0.32)
실시예(56)	화합물(P-81)	5.9	6.0	300.0	5.0	128.2	(0.66, 0.33)
실시예(57)	화합물(P-82)	6.0	5.3	300.0	5.7	97.9	(0.66, 0.32)
실시예(58)	화합물(P-83)	5.8	5.1	300.0	5.8	112.2	(0.65, 0.32)
실시예(59)	화합물(P-84)	5.9	5.0	300.0	6.0	121.1	(0.66, 0.32)
실시예(60)	화합물(P-85)	5.9	5.1	300.0	5.9	127.4	(0.66, 0.33)
실시예(61)	화합물(P-86)	5.9	5.0	300.0	6.0	117.9	(0.66, 0.32)
실시예(62)	화합물(P-87)	5.8	5.0	300.0	6.0	107.9	(0.65, 0.32)
실시예(63)	화합물(P-88)	5.9	5.4	300.0	5.6	120.7	(0.66, 0.32)
실시예(64)	화합물(P-89)	6.0	5.5	300.0	5.5	96.5	(0.66, 0.32)
실시예(65)	화합물(P-90)	5.9	5.0	300.0	6.0	127.9	(0.66, 0.32)

[0232]

[0233]

상기 표 6의 결과로부터 알 수 있듯이, 본 발명의 유기전기발광소자용 재료를 이용한 유기전기발광소자는 레드 발광층 재료로 사용되어 높은 발광효율 및 수명, 색순도를 현저히 개선시킬 수 있다. 특히 본 발명의 화합물과 구조가 비슷한 비교화합물 2, 비교화합물 3과 본 발명의 화합물의 소자 결과를 비교해 보면, 퀴나졸린이 치환되어 있는 본 발명의 화합물이 적용된 소자가 더 높은 효율과 높은 수명을 나타내는 것을 확인할 수 있다.

[0234]

[실례 2] 그린 유기 발광 소자의 제작 및 시험 (인광 그린 호스트)

[0235]

합성을 통해 얻은 본 발명의 화합물(P-1~P-20, P-106~P145 중 하나)을 발광층의 발광 호스트 물질로 사용하여 통상적인 방법에 따라 유기전기 발광소자를 제작하였다. 먼저, 유리 기판에 형성된 ITO층(양극) 위에 2-TNATA를 진공 증착하여 60 nm 두께의 정공주입층을 형성하였다. 이어서, 상기 정공주입층 상에 NPD를 20 nm 두께로 진공 증착하여 정공수송층을 형성하였다. 다음으로, 정공 수송층 상부에 본 발명의 화합물을 호스트 물질로, Ir(ppy)₃ [tris(2-phenylpyridine)-iridium]을 도펀트물질로 사용하여 95:5 중량비로 도포하여 30nm 두께로 발광층을 증착하였다. 이후 BA1q를 10 nm 두께로 진공증착하여 정공저지층을 형성하고, Alq₃을 40nm 두께로 성막하여 전자수송층을 형성하였다. 이어서, 전자수송층 상에 할로젠화 알칼리 금속인 LiF를 0.2 nm 두께로 증착하여 전자주입층을 형성한 후, Al을 150nm의 두께로 증착하여 음극을 형성함으로써 유기전기 발광소자를 제조하였다.

[0236]

[비교예 5]

- [0237] 발광층의 호스트 물질로 본 발명에 따른 화합물 대신 상기 비교화합물 1을 사용한 점을 제외하고는 실험예 2와 동일한 방법으로 유기전기 발광소자를 제작하였다.
- [0238] **[비교예 6]**
- [0239] 발광층의 호스트 물질로 본 발명에 따른 화합물 대신 상기 비교화합물 2를 사용한 점을 제외하고는 실험예 2와 동일한 방법으로 유기전기 발광소자를 제작하였다.
- [0240] **[비교예 7]**
- [0241] 발광층의 호스트 물질로 본 발명에 따른 화합물 대신 상기 비교화합물 3을 사용한 점을 제외하고는 실험예 2와 동일한 방법으로 유기전기 발광소자를 제작하였다.
- [0242] **[비교예 8]**
- [0243] 발광층의 호스트 물질로 본 발명에 따른 화합물 대신 상기 비교화합물 4를 사용한 점을 제외하고는 실험예 2와 동일한 방법으로 유기전기 발광소자를 제작하였다.
- [0244] 실험예 2 및 비교예들에 의해 제조된 유기전기발광소자들에 순바이어스 직류전압을 가하여 포토리서치 (photoresearch)사의 PR-650으로 전기발광(EL) 특성을 측정한 결과를 하기 표 7에 나타내었다. 이때 수명은 300cd/m^2 기준 휘도에서 맥사이언스사에서 제조된 수명 측정 장비를 통해 T90 수명을 측정하였다.

[0245] [표 7]

	화합물	Voltage	Current Density	Brightness (cd/m ²)	Efficiency	Lifetime T(90)	CIE (x, y)
비교예(5)	비교화합물(1)	6.3	7.7	300.0	3.9	60.3	(0.31, 0.60)
비교예(6)	비교화합물(2)	5.9	7.8	300.0	3.8	62.5	(0.32, 0.61)
비교예(7)	비교화합물(3)	5.8	6.8	300.0	4.4	55.7	(0.31, 0.61)
비교예(8)	비교화합물(4)	5.6	6.1	300.0	4.9	70.1	(0.32, 0.61)
실시예(66)	화합물(P-1)	5.3	5.6	300.0	5.4	131.1	(0.33, 0.61)
실시예(67)	화합물(P-2)	5.5	4.8	300.0	6.3	137.8	(0.33, 0.60)
실시예(68)	화합물(P-3)	5.3	5.0	300.0	6.0	110.5	(0.33, 0.60)
실시예(69)	화합물(P-4)	5.5	5.8	300.0	5.2	99.1	(0.31, 0.61)
실시예(70)	화합물(P-5)	5.3	4.8	300.0	6.2	130.8	(0.31, 0.60)
실시예(71)	화합물(P-6)	5.5	5.1	300.0	5.9	107.7	(0.33, 0.61)
실시예(72)	화합물(P-7)	5.3	5.8	300.0	5.2	123.3	(0.32, 0.60)
실시예(73)	화합물(P-8)	5.3	5.6	300.0	5.4	133.3	(0.32, 0.61)
실시예(74)	화합물(P-9)	5.3	4.8	300.0	6.2	135.0	(0.33, 0.60)
실시예(75)	화합물(P-10)	5.5	4.9	300.0	6.1	134.7	(0.30, 0.60)
실시예(76)	화합물(P-11)	5.3	4.6	300.0	6.5	105.1	(0.30, 0.61)
실시예(77)	화합물(P-12)	5.4	5.9	300.0	5.1	125.4	(0.32, 0.61)
실시예(78)	화합물(P-13)	5.4	5.1	300.0	5.8	97.6	(0.31, 0.61)
실시예(79)	화합물(P-14)	5.4	5.3	300.0	5.7	117.6	(0.31, 0.60)
실시예(80)	화합물(P-15)	5.5	4.9	300.0	6.1	123.5	(0.31, 0.60)
실시예(81)	화합물(P-16)	5.3	5.1	300.0	5.9	91.4	(0.32, 0.61)
실시예(82)	화합물(P-17)	5.4	5.0	300.0	6.0	96.2	(0.31, 0.61)
실시예(83)	화합물(P-18)	5.4	5.1	300.0	5.9	114.4	(0.33, 0.60)
실시예(84)	화합물(P-19)	5.3	4.7	300.0	6.3	124.2	(0.31, 0.60)
실시예(85)	화합물(P-20)	5.5	4.8	300.0	6.3	127.7	(0.32, 0.61)
실시예(86)	화합물(P-106)	5.6	4.5	300.0	6.7	135.0	(0.31, 0.60)
실시예(87)	화합물(P-107)	5.5	4.8	300.0	6.3	119.0	(0.32, 0.61)
실시예(88)	화합물(P-108)	5.6	4.8	300.0	6.2	101.1	(0.31, 0.61)
실시예(89)	화합물(P-109)	5.3	5.2	300.0	5.8	124.5	(0.33, 0.61)
실시예(90)	화합물(P-110)	5.5	4.7	300.0	6.4	115.8	(0.33, 0.60)
실시예(91)	화합물(P-111)	5.5	4.8	300.0	6.2	116.4	(0.33, 0.60)
실시예(92)	화합물(P-112)	5.3	4.5	300.0	6.7	104.2	(0.31, 0.61)
실시예(93)	화합물(P-113)	5.5	5.8	300.0	5.2	146.8	(0.31, 0.60)
실시예(94)	화합물(P-114)	5.5	5.8	300.0	5.2	99.5	(0.33, 0.61)
실시예(95)	화합물(P-115)	5.5	5.7	300.0	5.2	107.0	(0.32, 0.60)
실시예(96)	화합물(P-116)	5.5	4.6	300.0	6.5	149.6	(0.32, 0.61)

[0246]

실시예(97)	화합물(P-117)	5.4	5.6	300.0	5.4	143.7	(0.33, 0.60)
실시예(98)	화합물(P-118)	5.6	5.7	300.0	5.3	105.7	(0.30, 0.60)
실시예(99)	화합물(P-119)	5.4	4.4	300.0	6.8	118.0	(0.30, 0.61)
실시예(100)	화합물(P-120)	5.4	4.4	300.0	6.8	140.0	(0.32, 0.61)
실시예(101)	화합물(P-121)	5.6	4.4	300.0	6.9	144.9	(0.31, 0.61)
실시예(102)	화합물(P-122)	5.5	4.6	300.0	6.5	90.2	(0.31, 0.60)
실시예(103)	화합물(P-123)	5.5	4.6	300.0	6.6	144.4	(0.31, 0.60)
실시예(104)	화합물(P-124)	5.3	5.8	300.0	5.1	97.1	(0.32, 0.61)
실시예(105)	화합물(P-125)	5.6	4.6	300.0	6.6	110.7	(0.31, 0.61)
실시예(106)	화합물(P-126)	5.4	5.7	300.0	5.3	123.2	(0.33, 0.60)
실시예(107)	화합물(P-127)	5.6	4.5	300.0	6.6	116.8	(0.31, 0.60)
실시예(108)	화합물(P-128)	5.4	5.7	300.0	5.2	145.1	(0.32, 0.61)
실시예(109)	화합물(P-129)	5.5	4.5	300.0	6.7	128.4	(0.31, 0.60)
실시예(110)	화합물(P-130)	5.4	4.5	300.0	6.7	125.8	(0.32, 0.61)
실시예(111)	화합물(P-131)	5.4	4.3	300.0	7.0	116.3	(0.31, 0.61)
실시예(112)	화합물(P-132)	5.3	5.9	300.0	5.1	92.7	(0.33, 0.61)
실시예(113)	화합물(P-133)	5.5	4.7	300.0	6.3	119.6	(0.33, 0.60)
실시예(114)	화합물(P-134)	5.6	4.9	300.0	6.1	118.7	(0.33, 0.60)
실시예(115)	화합물(P-135)	5.4	4.3	300.0	7.0	147.3	(0.31, 0.61)
실시예(116)	화합물(P-136)	5.6	4.6	300.0	6.5	124.6	(0.31, 0.60)
실시예(117)	화합물(P-137)	5.5	4.5	300.0	6.7	146.9	(0.33, 0.61)
실시예(118)	화합물(P-138)	5.5	5.5	300.0	5.5	119.5	(0.32, 0.60)
실시예(119)	화합물(P-139)	5.4	4.4	300.0	6.8	142.9	(0.32, 0.61)
실시예(120)	화합물(P-140)	5.4	4.6	300.0	6.5	147.0	(0.33, 0.60)
실시예(121)	화합물(P-141)	5.4	5.3	300.0	5.7	139.1	(0.30, 0.60)
실시예(122)	화합물(P-142)	5.6	4.6	300.0	6.5	107.3	(0.30, 0.61)
실시예(123)	화합물(P-143)	5.4	5.2	300.0	5.8	93.7	(0.32, 0.61)
실시예(124)	화합물(P-144)	5.4	5.6	300.0	5.3	134.2	(0.31, 0.61)
실시예(125)	화합물(P-145)	5.4	5.7	300.0	5.3	116.0	(0.31, 0.60)

[0247]

[0248]

상기 표 7의 결과로부터 알 수 있듯이, 본 발명의 유기전기발광소자용 재료를 이용한 유기전기발광소자는 그린 발광층 재료로 사용되어 높은 발광효율 및 수명, 색순도를 현저히 개선시킬 수 있다. 특히 본 발명 화합물과 구조가 비슷한 비교화합물 2, 비교화합물 3과 본 발명 화합물의 소자 결과를 비교해 보면 본 발명의 화합물을 이용한 소자가 더 높은 효율과 높은 수명을 나타내는 것을 확인할 수 있다.

[0249]

[실험예 3] 그린 유기 발광 소자의 제작 및 시험 (발광보조층)

[0250]

합성을 통해 얻은 본 발명의 화합물(P-21~P-25 중 하나)을 발광보조층 물질로 사용하여 통상적인 방법에 따라 유기전기 발광소자를 제작하였다. 먼저, 유리 기판에 형성된 ITO층(양극) 위에 2-TNATA를 진공증착하여 60 nm 두께의 정공주입층을 형성한 후, 정공주입층 상에 NPD를 20 nm 두께로 진공증착하여 정공수송층을 형성하였다. 이후, 정공수송층 상에 본 발명 화합물(P-21~P-25)을 20nm의 두께로 진공증착하여 발광보조층을 형성하였다. 발광보조층을 형성한 후, 발광보조층 상부에 CBP[4,4'-N,N'-dicarbazole-biphenyl]를 호스트 물질로, Ir(ppy)₃[tris(2-phenylpyridine)-iridium]을 도펀트 물질로 사용하여 95:5 중량으로 도핑함으로써 30nm 두께의 발광층을 증착하였다. 이어서, 발광층 상에 BA1q를 10 nm 두께로 진공증착하여 정공저지층을 형성하고, Alq₃를 40 nm 두께로 성막하여 전자수송층을 형성하였다. 이후, 할로젠화 알칼리 금속인 LiF를 0.2 nm 두께로 증착하여 전자주입층을 형성한 후, Al을 150 nm의 두께로 증착하여 음극을 형성함으로써 유기전기 발광소자를 제조하였다.

[0251]

[비교예 9]

[0252]

발광보조층을 형성하지 않은 점을 제외하고, 상기 실험예 3과 동일하게 유기전기 발광소자를 제작하였다.

[0253]

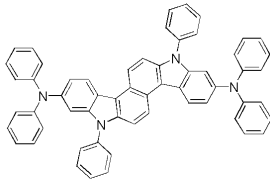
[비교예 10]

[0254]

본 발명의 화합물 대신 하기 비교화합물 5를 발광보조층 물질로 사용한 점을 제외하고, 상기 실험예 3과 동일하

게 유기전기 발광소자를 제작하였다.

[0255] <비교 화합물 5>

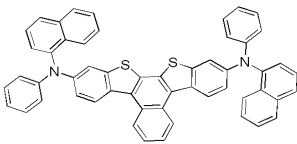


[0256]

[0257] **[비교예 11]**

[0258] 본 발명의 화합물 대신 하기 비교화합물 6을 발광보조층 물질로 사용한 점을 제외하고, 상기 실험예 3과 동일하게 유기전기 발광소자를 제작하였다.

[0259] <비교 화합물 6>



[0260]

[0261] 실험예 3 및 비교예들에 의해 제조된 유기전기발광소자들에 순바이어스 직류전압을 가하여 포토리서치 (photoresearch)사의 PR-650으로 전기발광(EL) 특성을 측정된 결과를 하기 표 8에 나타내었다. 이때 수명은 300cd/m² 기준 휘도에서 맥사이언스사에서 제조된 수명 측정 장비를 통해 T90 수명을 측정하였다.

[0262] [표 8]

	화합물	Voltage	Current Density	Brightness (cd/m ²)	Efficiency	Lifetime T(90)	CIE (x, y)
비교예(9)	발광보조층 없음	6.3	9.0	300.0	3.3	62.8	(0.66, 0.32)
비교예(10)	비교화합물 (5)	6.2	8.0	300.0	3.8	76.3	(0.67, 0.32)
비교예(11)	비교화합물 (6)	6.2	8.5	300.0	3.5	58.2	(0.66, 0.32)
실시예(126)	화합물(P-21)	5.8	6.5	300.0	4.6	139.7	(0.66, 0.33)
실시예(127)	화합물(P-22)	5.9	7.3	300.0	4.1	104.2	(0.66, 0.32)
실시예(128)	화합물(P-23)	5.9	6.1	300.0	4.9	127.5	(0.65, 0.32)
실시예(129)	화합물(P-24)	5.8	6.0	300.0	5.0	125.3	(0.66, 0.32)
실시예(130)	화합물(P-25)	5.8	6.3	300.0	4.8	100.4	(0.66, 0.33)

[0263]

[0264] 상기 표 8의 결과로부터 알 수 있듯이, 발광보조층이 사용되지 않은 소자, 비교화합물 5, 비교화합물 6을 발광 보조층 재료로 사용한 경우에 비해 본 발명의 화합물을 발광보조층 재료로 사용한 경우, 소자의 구동전압을 낮출 수 있었고, 발광효율 및 수명을 현저히 개선시킬 수 있었다. 이는 본 발명의 화합물이 단독으로 발광보조층으로 사용될 경우 높은 T1 에너지 레벨을 가지며, 깊은 HOMO 에너지 레벨로 인해 유기전기발광소자의 구동전압을 낮추고, 발광효율 및 소자수명을 향상시키는 것으로 설명할 수 있다.

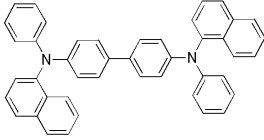
[0265] **[실험예 4] 그린 유기 발광 소자의 제작 및 시험 (정공수송층)**

[0266] 합성을 통해 얻은 본 발명의 화합물(P-91~P-105, P-146~P-165 중 하나)을 정공수송층 물질로 사용하여 통상적인 방법에 따라 유기전기 발광소자를 제작하였다. 먼저, 유기 기판에 형성된 ITO층(양극)위에 2-TNATA를 진공증착하여 60nm 두께의 정공주입층을 형성하고, 이어서 본 발명의 화합물(P-91~P-105, P-146~P-165)을 20nm 두께로 진공증착하여 정공수송층을 형성하였다. 다음으로, 정공수송층 상에 CBP[4,4'-N,N'-dicarbazole-biphenyl]를 호스트 물질로, Ir(ppy)₃[tris(2-phenylpyridine)-iridium]을 도펀트 물질로 사용하여 90:10 중량으로 도핑함으로써 30nm 두께의 발광층을 증착하였다. 이어서 BA1q를 10 nm 두께로 진공증착하여 정공저지층을 형성하고, Alq₃를 40 nm 두께로 성막하여 전자수송층을 형성하였다. 이후, 전자수송층 상에 할로젠화 알칼리 금속인 LiF를 0.2 nm 두께로 증착하여 전자주입층을 형성하고, 이어서 Al을 150 nm의 두께로 증착하여 음극을 형성함으로써 유기 전기 발광소자를 제조하였다.

[0267] [비교예 12]

[0268] 본 발명의 화합물 대신 하기 비교화합물 7을 정공수송층 물질로 사용한 점을 제외하고, 상기 실험예 4와 동일하게 유기전기 발광소자를 제작하였다.

[0269] <비교 화합물 7> NPB



[0270]

[0271] [비교예 13]

[0272] 본 발명의 화합물 대신 상기 비교화합물 5를 정공수송층 물질로 사용한 점을 제외하고, 상기 실험예 4와 동일하게 유기전기 발광소자를 제작하였다.

[0273] [비교예 14]

[0274] 본 발명의 화합물 대신 상기 비교화합물 6을 정공수송층 물질로 사용한 점을 제외하고, 상기 실험예 4와 동일하게 유기전기 발광소자를 제작하였다.

[0275] 실험예 4 및 비교예들에 의해 제조된 유기전기 발광소자들에 순바이어스 직류전압을 가하여 포토리서치 (photoresearch)사의 PR-650으로 전기발광(EL) 특성을 측정한 결과를 하기 표 9에 나타내었다. 이때, 수명은 300cd/m^2 기준 휘도에서 맥사이언스사에서 제조된 수명 측정 장비를 통해 T90 수명을 측정하였다.

[0276] [표 9]

	화합물	Voltage	Current Density	Brightness (cd/m ²)	Efficiency	Lifetime T(90)	CIE (x, y)
비교예(12)	비교화합물 (7)	5.7	7.0	300.0	4.3	75.4	(0.33, 0.61)
비교예(13)	비교화합물 (5)	5.5	5.6	300.0	5.3	94.3	(0.32, 0.60)
비교예(14)	비교화합물 (6)	5.3	5.8	300.0	5.2	90.8	(0.31, 0.61)
실시예(131)	화합물(P-91)	4.7	4.9	300.0	6.2	121.3	(0.31, 0.61)
실시예(132)	화합물(P-92)	4.7	4.6	300.0	6.5	125.8	(0.31, 0.60)
실시예(133)	화합물(P-93)	4.7	4.4	300.0	6.9	98.6	(0.33, 0.61)
실시예(134)	화합물(P-94)	4.6	4.4	300.0	6.8	116.6	(0.32, 0.60)
실시예(135)	화합물(P-95)	4.9	4.6	300.0	6.5	121.8	(0.32, 0.61)
실시예(136)	화합물(P-96)	4.8	4.9	300.0	6.1	149.7	(0.33, 0.60)
실시예(137)	화합물(P-97)	4.7	4.9	300.0	6.1	109.1	(0.30, 0.60)
실시예(138)	화합물(P-98)	4.8	4.6	300.0	6.6	103.7	(0.30, 0.61)
실시예(139)	화합물(P-99)	4.8	4.3	300.0	7.0	131.8	(0.32, 0.61)
실시예(140)	화합물(P-100)	4.6	4.8	300.0	6.3	103.7	(0.31, 0.61)
실시예(141)	화합물(P-101)	4.6	5.0	300.0	6.0	142.2	(0.31, 0.60)
실시예(142)	화합물(P-102)	4.8	4.5	300.0	6.7	120.0	(0.31, 0.60)
실시예(143)	화합물(P-103)	4.8	4.7	300.0	6.3	101.2	(0.32, 0.61)
실시예(144)	화합물(P-104)	4.5	4.5	300.0	6.7	127.7	(0.31, 0.61)
실시예(145)	화합물(P-105)	4.6	4.3	300.0	6.9	98.0	(0.33, 0.60)
실시예(146)	화합물(P-146)	4.6	5.0	300.0	6.0	101.0	(0.31, 0.60)
실시예(147)	화합물(P-147)	4.8	4.9	300.0	6.1	93.1	(0.32, 0.61)
실시예(148)	화합물(P-148)	4.7	4.5	300.0	6.6	104.8	(0.32, 0.61)
실시예(149)	화합물(P-149)	4.6	4.8	300.0	6.3	107.9	(0.33, 0.60)
실시예(150)	화합물(P-150)	4.8	4.4	300.0	6.9	138.7	(0.30, 0.61)
실시예(151)	화합물(P-151)	4.6	4.3	300.0	7.0	108.7	(0.31, 0.61)
실시예(152)	화합물(P-152)	4.6	4.6	300.0	6.5	102.7	(0.31, 0.60)
실시예(153)	화합물(P-153)	4.5	4.5	300.0	6.6	125.1	(0.33, 0.61)
실시예(154)	화합물(P-154)	4.7	4.9	300.0	6.2	142.7	(0.32, 0.61)
실시예(155)	화합물(P-155)	4.8	4.9	300.0	6.1	129.1	(0.33, 0.60)
실시예(156)	화합물(P-156)	4.6	4.4	300.0	6.8	103.5	(0.30, 0.61)
실시예(157)	화합물(P-157)	4.6	4.4	300.0	6.8	119.1	(0.31, 0.61)
실시예(158)	화합물(P-158)	4.6	4.7	300.0	6.3	138.8	(0.31, 0.60)
실시예(159)	화합물(P-159)	4.8	5.0	300.0	6.1	137.7	(0.33, 0.61)
실시예(160)	화합물(P-160)	4.7	4.3	300.0	7.0	148.1	(0.32, 0.60)
실시예(161)	화합물(P-161)	4.7	4.5	300.0	6.6	132.7	(0.32, 0.61)

[0277]

실시예(162)	화합물(P-162)	5.0	4.6	300.0	6.5	134.1	(0.33, 0.60)
실시예(163)	화합물(P-163)	4.9	4.5	300.0	6.6	114.6	(0.30, 0.60)
실시예(164)	화합물(P-164)	4.7	5.0	300.0	6.1	146.6	(0.30, 0.61)
실시예(165)	화합물(P-165)	5.0	4.6	300.0	6.6	140.7	(0.32, 0.61)

[0278]

[0279]

상기 표 9의 결과로부터 알 수 있듯이, 본 발명의 화합물을 정공수송층 재료로 사용할 경우 비교예들에 비해 구동전압을 낮출 수 있고, 발광효율, 수명 및 색순도를 현저히 향상시킬 수 있다. 특히 본 발명 화합물과 구조가 비슷한 비교화합물 5, 비교화합물 6과 발명화합물의 소자 결과를 비교해 보면 본 발명의 화합물이 적용된 소자가 더 높은 발광효율, 높은 수명과 낮은 구동전압을 나타내는 것을 확인하였다.

[0280]

본 발명의 화합물들을 유기전기발광소자의 다른 유기물층들, 예를 들어 정공주입층, 전자주입층, 전자수송층에 사용되더라도 동일한 효과를 얻을 수 있는 것은 자명하다.

[0281]

이상의 설명은 본 발명을 예시적으로 설명한 것에 불과한 것으로, 본 발명이 속하는 기술분야에서 통상의 지식을 가지는 자라면 본 발명의 본질적인 특성에서 벗어나지 않는 범위에서 다양한 변형이 가능할 것이다. 따라서, 본 명세서에 개시된 실시 예들은 본 발명을 한정하기 위한 것이 아니라 설명하기 위한 것이고, 이러한 실시 예에 의하여 본 발명의 사상과 범위가 한정되는 것은 아니다. 본 발명의 보호범위는 아래의 청구범위에 의하여 해

석되어야 하며, 그와 동등한 범위 내에 있는 모든 기술은 본 발명의 권리범위에 포함하는 것으로 해석되어야 할 것이다.

부호의 설명

- | | | |
|--------|-------------|------------|
| [0282] | 100: 유기전기소자 | 110: 기판 |
| | 120: 제 1전극 | 130: 정공주입층 |
| | 140: 정공수송층 | 141: 버퍼층 |
| | 150: 발광층 | 151: 발광보조층 |
| | 160: 전자수송층 | 170: 전자주입층 |
| | 180: 제 2전극 | |

도면

도면1

100

