



(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 공개특허공보(A)

(11) 공개번호 10-2020-0038232
(43) 공개일자 2020년04월10일

- | | |
|---|---|
| <p>(51) 국제특허분류(Int. Cl.)
H01L 51/00 (2006.01) C07D 403/04 (2006.01)
C07D 403/12 (2006.01) H01L 51/50 (2006.01)
H01L 51/52 (2006.01)</p> <p>(52) CPC특허분류
H01L 51/0069 (2013.01)
C07D 403/04 (2013.01)</p> <p>(21) 출원번호 10-2020-0040980(분할)</p> <p>(22) 출원일자 2020년04월03일
심사청구일자 2020년04월03일</p> <p>(62) 원출원 특허 10-2013-0122324
원출원일자 2013년10월15일
심사청구일자 2018년09월04일</p> | <p>(71) 출원인
덕산네오룩스 주식회사
충청남도 천안시 서북구 입장면 쑥골길 21-32</p> <p>(72) 발명자
박정환
충청남도 천안시 서북구 입장면 쑥골길 21-32</p> <p>이선희
충청남도 천안시 서북구 입장면 쑥골길 21-32
(뒷면에 계속)</p> <p>(74) 대리인
특허법인(유한)유일하이스트</p> |
|---|---|

전체 청구항 수 : 총 10 항

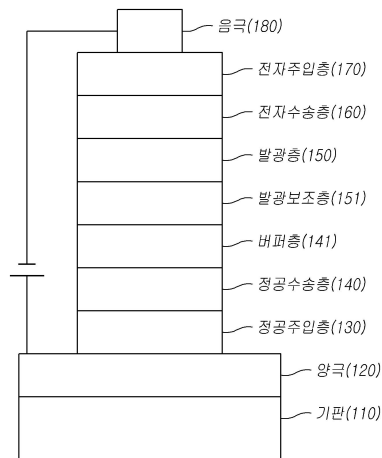
(54) 발명의 명칭 유기전기 소자용 화합물, 이를 이용한 유기전기소자 및 그 전자 장치

(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



(52) CPC특허분류

C07D 403/12 (2013.01)

H01L 51/0059 (2013.01)

H01L 51/0062 (2013.01)

H01L 51/0071 (2013.01)

H01L 51/5016 (2013.01)

H01L 51/5024 (2013.01)

H01L 51/5262 (2013.01)

(72) 발명자

김원삼

충청남도 천안시 서북구 입장면 쑥골길 21-32

변지훈

충청남도 천안시 서북구 입장면 쑥골길 21-32

정화순

충청남도 천안시 서북구 입장면 쑥골길 21-32

권재택

충청남도 천안시 서북구 입장면 쑥골길 21-32

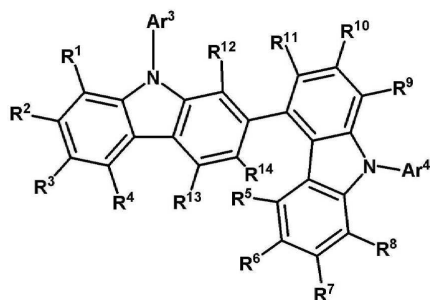
명세서

청구범위

청구항 1

하기 화학식 2로 표시되는 화합물.

<화학식 2>



[상기 화학식 2에서,

Ar³ 및 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~C₅₀의 알킬기; C₂~C₂₀의 알켄일기; C₂~C₂₀의 알킨일기; C₁~C₃₀의 알콕실기; 및 C₆~C₃₀의 아릴옥시기; 로 이루어진 군에서 선택되며, Ar³ 및 Ar⁴ 중 적어도 하나는 N을 포함하는 C₆~C₆₀의 헤테로고리기이고,

R¹ 내지 R¹⁴는 i) 서로 독립적으로 수소; 중수소; 할로젠; 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'-N(R_a)(R_b);로 이루어진 군에서 선택되거나, 또는 ii) 이웃하는 기끼리 서로 결합하여 고리를 형성하며,

상기 L'은 서로 독립적으로 단일결합; C₆~C₆₀의 아릴렌기; 플루오렌일렌기; C₃~C₆₀의 지방족고리와 C₆~C₆₀의 방향족고리의 융합고리기; 및 C₂~C₆₀의 헤테로고리기;로 이루어진 군에서 선택되며,

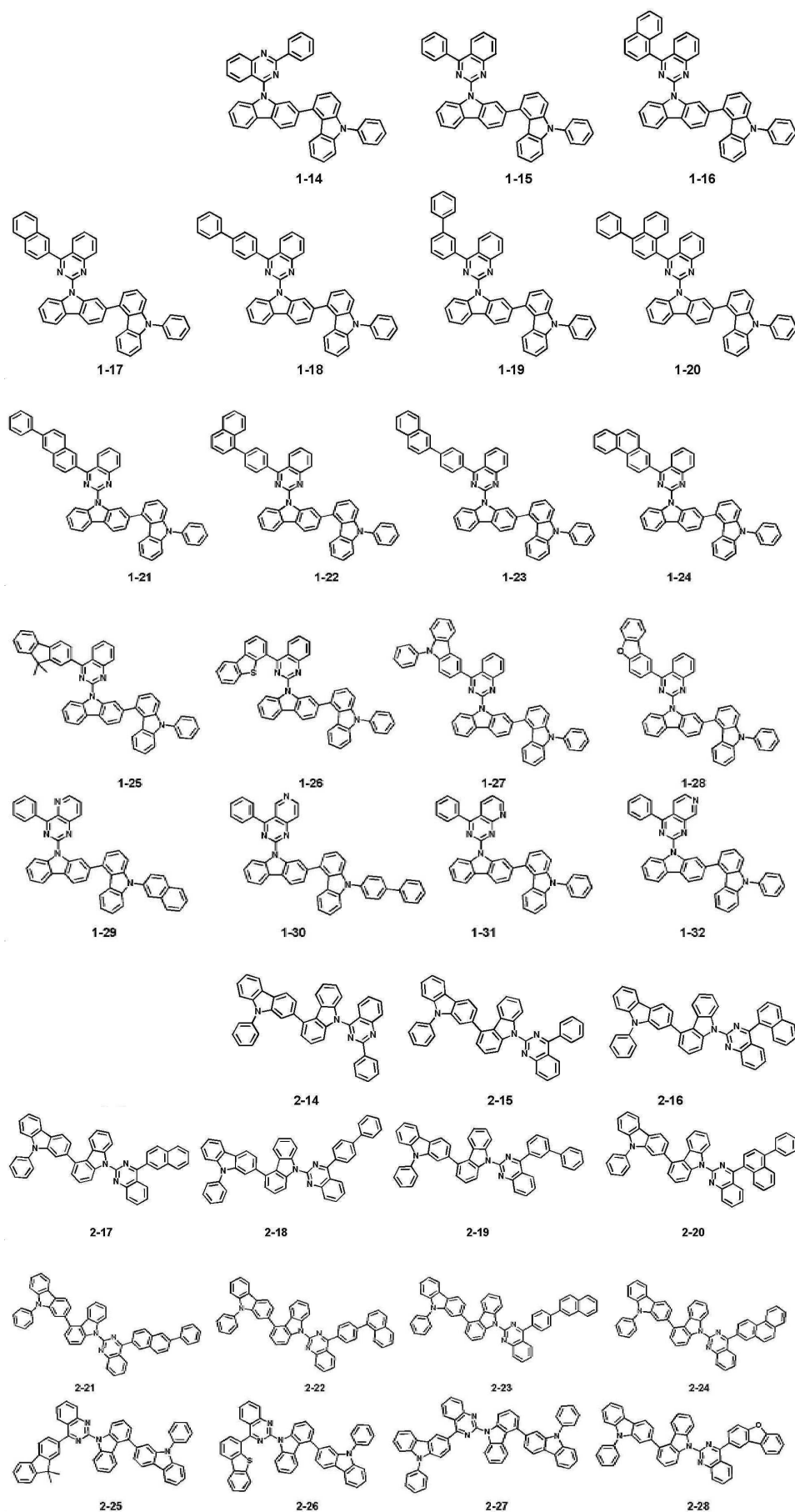
상기 R_a 및 R_b은 서로 독립적으로 C₆~C₆₀의 아릴기; 플루오렌일기; C₃~C₆₀의 지방족고리와 C₆~C₆₀의 방향족고리의 융합고리기; 및 O, N, S, Si 및 P 중 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C₂~C₆₀의 헤테로고리기;로 이루어진 군에서 선택된다.

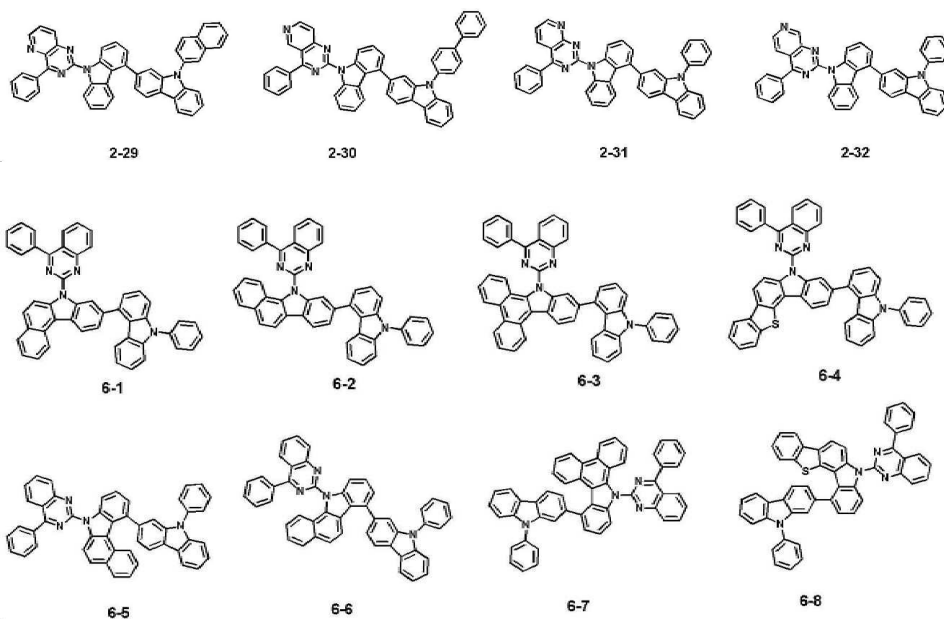
여기서 상기 아릴기, 플루오렌일기, 헤테로고리기, 융합고리기, 알킬기, 알켄일기, 알킨일기, 알콕실기, 아릴옥시기, 아릴렌기, 플루오렌일렌기는 각각 중수소; 할로젠; 실란기; 실록산기; 붕소기; 게르마늄기; 시아노기; 니트로기; -L'-N(R_a)(R_b); C₁~C₂₀의 알킬싸이오기; C₁~C₂₀의 알콕실기; C₁~C₂₀의 알킬기; C₂~C₂₀의 알켄일기; C₂~C₂₀의 알킨일기; C₆~C₂₀의 아릴기; 중수소로 치환된 C₆~C₂₀의 아릴기; 플루오렌일기; C₂~C₂₀의 헤테로고리기; C₃~C₂₀의 시클로알킬기; C₇~C₂₀의 아릴알킬기 및 C₈~C₂₀의 아릴알켄일로 이루어진 군에서 선택된 하나 이상의 치환기로 치환될 수 있다.]

청구항 2

제 1 항에 있어서,

하기 화합물 중 어느 하나인 것을 특징으로 하는 화합물.





청구항 3

제 1전극; 제 2전극; 및 상기 제 1전극과 제 2전극 사이에 위치하는 유기물층;을 포함하는 유기전기소자에 있어서,

상기 유기물층은 제 1 항 및 제 2 항 중 어느 한 항에 따르는 화합물을 포함하는 것을 특징으로 하는 유기전기소자.

청구항 4

제 3 항에 있어서,

상기 유기물층은 정공수송층을 포함하며, 상기 정공수송층은 상기 화합물을 포함하는 것을 특징으로 하는 유기전기소자.

청구항 5

제 3 항에 있어서,

상기 유기물층은 발광보조층을 포함하며, 상기 발광보조층은 상기 화합물을 포함하는 것을 특징으로 하는 유기전기소자.

청구항 6

제 3항에 있어서,

상기 유기물층은 발광층을 포함하며, 상기 화합물은 상기 발광층의 호스트 물질로 사용되는 것을 특징으로 하는 유기전기소자.

청구항 7

제 3 항에 있어서,

상기 제 1전극의 일측면 중 상기 유기물층과 반대되는 일측 또는 상기 제 2전극의 일측면 중 상기 유기물층과 반대되는 일측 중 적어도 하나에 형성되는 광효율 개선층을 더 포함하는 유기전기소자.

청구항 8

제 3 항에 있어서,

상기 유기물층은 스핀코팅 공정, 노즐 프린팅 공정, 잉크젯 프린팅 공정, 슬롯코팅 공정, 딥코팅 공정 및 롤투

를 공정 중 어느 하나에 의해 형성되는 것을 특징으로 하는 유기전기소자.

청구항 9

제 3 항의 유기전기소자를 포함하는 디스플레이장치; 및
상기 디스플레이장치를 구동하는 제어부;를 포함하는 전자장치.

청구항 10

제 9 항에 있어서,

상기 유기전기소자는 유기전기발광소자(OLED), 유기태양전지, 유기감광체(OPC), 유기트랜지스터(유기 TFT), 및 단색 또는 백색 조명용 소자 중 적어도 하나인 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 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 해결해야되는 상황이다.

[0005] 효율과 수명, 구동전압 등은 서로 연관이 있으며, 효율이 증가되면 상대적으로 구동전압이 떨어지고, 구동전압이 떨어지면서 구동시 발생하는 주열열(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 준위 및 T1 값, 물질의 고유특성(이동도, 계면특성 등) 등이 최적의 조합을 이루었을 때 긴 수명과 높은 효율을 동시에 달성할 수 있기 때문이다.

[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 발광 보조층의 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 정공수송층으로 넘어가게 되어 결과적으로 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 높은 T1 값을 가지며, 정공 수송층 HOMO 에너지 준위와 발광층의 HOMO 에너지 준위 사이의 HOMO 준위를 갖는 발광보조층이 개발이 절실히 요구된다.

[0011] 한편, 유기전기소자의 수명단축 원인 중 하나인 양극전극(ITO)으로부터 금속 산화물이 유기층으로 침투확산되는 것을 지연시키면서, 소자 구동시 발생하는 주열열(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 증착 방법에 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 발광보조층과 정공수송층의 재료에 대한 개발이 절실히 요구되고 있다.

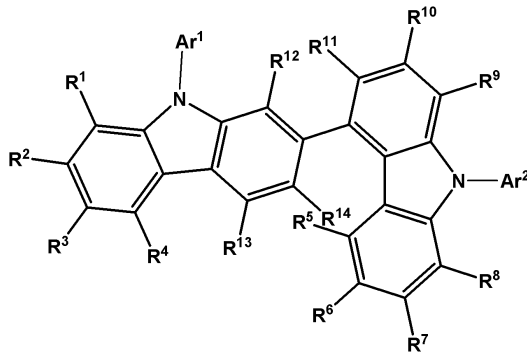
발명의 내용

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] 일 측면에서, 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.

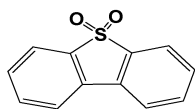
발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

[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] 본 명세서 및 첨부된 청구의 범위에서 사용된 바와 같이, 달리 언급하지 않는 한, 하기 용어의 의미는 하기와 같다:
- [0023] 본 명세서에서 사용된 용어 "할로" 또는 "할로젠"은 다른 설명이 없는 한 불소(F), 브롬(Br), 염소(Cl) 또는 요오드(I)이다.
- [0024] 본 발명에 사용된 용어 "알킬" 또는 "알킬기"는 다른 설명이 없는 한 1 내지 60의 탄소수의 단일결합을 가지며, 직쇄 알킬기, 분지쇄 알킬기, 사이클로알킬(지환족)기, 알킬-치환된 사이클로알킬기, 사이클로알킬-치환된 알킬기를 비롯한 포화 지방족 작용기의 라디칼을 의미한다.
- [0025] 본 발명에 사용된 용어 "할로알킬기" 또는 "할로젠알킬기"는 다른 설명이 없는 한 할로젠으로 치환된 알킬기를 의미한다.
- [0026] 본 발명에 사용된 용어 "헤테로알킬기"는 알킬기를 구성하는 탄소 원자 중 하나 이상이 헤테로원자로 대체된 것을 의미한다.
- [0027] 본 발명에 사용된 용어 "알켄일기" 또는 "알킨일기"는 다른 설명이 없는 한 각각 2 내지 60의 탄소수의 이중결합 또는 삼중결합을 가지며, 직쇄형 또는 측쇄형 사슬기를 포함하며, 여기에 제한되는 것은 아니다.
- [0028] 본 발명에 사용된 용어 "시클로알킬"은 다른 설명이 없는 한 3 내지 60의 탄소수를 갖는 고리를 형성하는 알킬을 의미하며, 여기에 제한되는 것은 아니다.
- [0029] 본 발명에 사용된 용어 "알콕실기", "알콕시기", 또는 "알킬옥시기"는 산소 라디칼이 부착된 알킬기를 의미하며, 다른 설명이 없는 한 1 내지 60의 탄소수를 가지며, 여기에 제한되는 것은 아니다.
- [0030] 본 발명에 사용된 용어 "알켄옥실기", "알켄옥시기", "알켄일옥실기", 또는 "알켄일옥시기"는 산소 라디칼이 부착된 알켄일기를 의미하며, 다른 설명이 없는 한 2 내지 60의 탄소수를 가지며, 여기에 제한되는 것은 아니다.
- [0031] 본 발명에 사용된 용어 "아릴옥실기" 또는 "아릴옥시기"는 산소 라디칼이 부착된 아릴기를 의미하며, 다른 설명이 없는 한 6 내지 60의 탄소수를 가지며, 여기에 제한되는 것은 아니다.
- [0032] 본 발명에 사용된 용어 "아릴기" 및 "아릴렌기"는 다른 설명이 없는 한 각각 6 내지 60의 탄소수를 가지며, 이에 제한되는 것은 아니다. 본 발명에서 아릴기 또는 아릴렌기는 단일 고리 또는 다중 고리의 방향족을 의미하며, 이웃한 치환기가 결합 또는 반응에 참여하여 형성된 방향족 고리를 포함한다. 예컨대, 아릴기는 페닐기, 비페닐기, 플루오렌기, 스퀴아로플루오렌기일 수 있다.
- [0033] 접두사 "아릴" 또는 "아르"는 아릴기로 치환된 라디칼을 의미한다. 예를 들어 아릴알킬기는 아릴기로 치환된 알킬기이며, 아릴알켄일기는 아릴기로 치환된 알켄일기이며, 아릴기로 치환된 라디칼은 본 명세서에서 설명한 탄소수를 가진다.
- [0034] 또한 접두사가 연속으로 명명되는 경우 먼저 기재된 순서대로 치환기가 나열되는 것을 의미한다. 예를 들어, 아릴알콕시기의 경우 아릴기로 치환된 알콕시기를 의미하며, 알콕실카르보닐기의 경우 알콕실기로 치환된 카르보닐기를 의미하며, 또한 아릴카르보닐알켄일기의 경우 아릴카르보닐기로 치환된 알켄일기를 의미하며 여기서 아릴카르보닐기는 아릴기로 치환된 카르보닐기이다.
- [0035] 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 2 내지 60의 아릴기 또는 아릴렌기를 의미하며, 여기에 제한되는 것은 아니며, 단일 고리 및 다중 고리 중 적어도 하나를 포함하며, 이웃한 작용기기가 결합하여 형성될 수도 있다.
- [0036] 본 발명에 사용된 용어 "헤테로고리기"는 다른 설명이 없는 한 하나 이상의 헤테로원자를 포함하고, 2 내지 60의 탄소수를 가지며, 단일 고리 및 다중 고리 중 적어도 하나를 포함하며, 헤테로지방족 고리 및 헤테로방향족 고리를 포함한다. 이웃한 작용기가 결합하여 형성될 수도 있다.
- [0037] 본 명세서에서 사용된 용어 "헤테로원자"는 다른 설명이 없는 한 N, O, S, P 또는 Si를 나타낸다.
- [0038] 또한 "헤테로고리기"는, 고리를 형성하는 탄소 대신 SO₂를 포함하는 고리도 포함할 수 있다. 예컨대, "헤테로고리기"는 다음 화합물을 포함한다.



[0039]

[0040]

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.

[0041]

다른 설명이 없는 한, 본 발명에 사용된 용어 "고리"는 탄소수 3 내지 60의 지방족고리 또는 탄소수 6 내지 60의 방향족고리 또는 탄소수 2 내지 60의 헤테로고리 또는 이들의 조합으로 이루어진 융합 고리를 말하며, 포화 또는 불포화 고리를 포함한다.

[0042]

전술한 헤테로화합물 이외의 그 밖의 다른 헤테로화합물 또는 헤테로라디칼은 하나 이상의 헤테로원자를 포함하며, 여기에 제한되는 것은 아니다.

[0043]

다른 설명이 없는 한, 본 발명에 사용된 용어 "카르보닐"이란 -COR'로 표시되는 것이며, 여기서 R'은 수소, 탄소수 1 내지 20의 알킬기, 탄소수 6 내지 30의 아릴기, 탄소수 3 내지 30의 사이클로알킬기, 탄소수 2 내지 20의 알켄일기, 탄소수 2 내지 20의 알킨일기, 또는 이들의 조합인 것이다.

[0044]

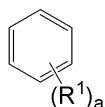
다른 설명이 없는 한, 본 발명에 사용된 용어 "에테르"란 -R-O-R'로 표시되는 것이며, 여기서 R 또는 R'은 각각 서로 독립적으로 수소, 탄소수 1 내지 20의 알킬기, 탄소수 6 내지 30의 아릴기, 탄소수 3 내지 30의 사이클로알킬기, 탄소수 2 내지 20의 알켄일기, 탄소수 2 내지 20의 알킨일기, 또는 이들의 조합인 것이다.

[0045]

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 알콕실기, C₁~C₂₀의 알킬아민기, C₁~C₂₀의 알킬티오펜기, C₆~C₂₀의 아릴티오펜기, C₂~C₂₀의 알켄일기, C₂~C₂₀의 알킨일기, C₃~C₂₀의 시클로알킬기, C₆~C₂₀의 아릴기, 중수소로 치환된 C₆~C₂₀의 아릴기, C₈~C₂₀의 아릴알켄일기, 실란기, 붕소기, 게르마늄기, 및 C₂~C₂₀의 헤테로고리기로 이루어진 군으로부터 선택되는 1개 이상의 치환기로 치환됨을 의미하며, 이들 치환기에 제한되는 것은 아니다.

[0046]

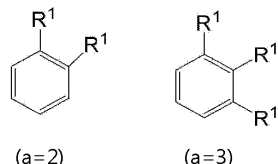
또한 명시적인 설명이 없는 한, 본 발명에서 사용되는 화학식은 하기 화학식의 지수 정의에 의한 치환기 정의와 동일하게 적용된다.



[0047]

[0048]

여기서, a가 0의 정수인 경우 치환기 R¹은 부존재하며, a가 1의 정수인 경우 하나의 치환기 R¹은 벤젠 고리를 형성하는 탄소 중 어느 하나의 탄소에 결합하며, a가 2 또는 3의 정수인 경우 각각 다음과 같이 결합하며 이때 R¹은 서로 동일하거나 다를 수 있으며, a가 4 내지 6의 정수인 경우 이와 유사한 방식으로 벤젠 고리의 탄소에 결합하며, 한편 벤젠 고리를 형성하는 탄소에 결합된 수소의 표시는 생략한다.



[0049]

[0050]

도 1은 본 발명에 일 실시예에 따른 유기전기소자에 대한 예시도이다.

[0051]

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 본 발명에 따른 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.

[0052]

유기물층은 제 1전극(120) 상에 순차적으로 정공주입층(130), 정공수송층(140), 발광층(150), 전자수송층(160)

및 전자주입층(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.

[0053] 또한, 미도시하였지만, 본 발명에 따른 유기전기소자는 제 1전극과 제 2전극 중 적어도 일면 중 상기 유기물층과 반대되는 일면에 형성된 보호층 또는 광효율 개선층(Capping layer)을 더 포함할 수 있다.

[0054] 상기 유기물층에 적용되는 본 발명에 따른 화합물은 정공주입층(130), 정공수송층(140), 전자수송층(160), 전자주입층(170), 발광층(150)의 호스트 또는 도펀트 또는 광효율 개선층의 재료로 사용될 수 있을 것이다. 바람직하게는, 본 발명의 화합물은 발광층(150), 정공수송층(140) 및/또는 발광보조층(151)으로 사용될 수 있을 것이다.

[0055] 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 준위 및 T1 값, 물질의 고유특성(이동도, 계면특성 등) 등이 최적의 조합을 이루었을 때 긴 수명과 높은 효율을 동시에 달성할 수 있다.

[0056] 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.

[0057] 따라서, 본 발명에서는 화학식 1로 표시되는 화합물을 사용하여 발광층, 정공수송층 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.

[0058] 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.

[0059] 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, 몰투몰 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 제한되는 것은 아니다.

[0060] 본 발명에 따른 유기전기소자는 사용되는 재료에 따라 전면 발광형, 후면 발광형 또는 양면 발광형일 수 있다.

[0061] WOLED(White Organic Light Emitting Device)는 고해상도 실현이 용이하고 공정성이 우수한 한편, 기존의 LCD의 칼라필터 기술을 이용하여 제조될 수 있는 이점이 있다. 주로 백라이트 장치로 사용되는 백색 유기발광소자에 대한 다양한 구조들이 제안되고 특허화되고 있다. 대표적으로, R(Red), G(Green), B(Blue) 발광부들을 상호평면적으로 병렬배치(side-by-side) 방식, R, G, B 발광층이 상하로 적층되는 적층(stacking) 방식이 있고, 청색(B) 유기발광층에 의한 전계발광과 이로부터의 광을 이용하여 무기형광체의 자발광(photo-luminescence)을 이용하는 색변환물질(color conversion material, CCM) 방식 등이 있는데, 본 발명은 이러한 WOLED에도 적용될 수 있을 것이다.

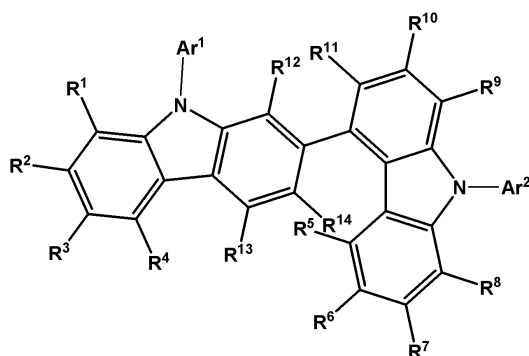
[0062] 또한, 본 발명에 따른 유기전기소자는 유기전기발광소자(OLED), 유기태양전지, 유기감광체(OPC), 유기트랜지스터(유기 TFT), 단색 또는 백색 조명용 소자 중 하나일 수 있다.

[0063] 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.

[0064] 이하, 본 발명의 일 측면에 따른 화합물에 대하여 설명한다.

[0065] 본 발명의 일측면에 따른 화합물은 하기 화학식 1로 표시된다.

[0066] <화학식 1>



[0067]

[0068] 상기 화학식 1에서,

[0069] 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 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 선택되며,

[0070] R¹ 내지 R¹⁴는 i) 서로 독립적으로 수소; 중수소; 할로젠; C₆~C₆₀의 아릴기; 플루오렌일기; O, N, S, Si 및 P 중 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C₂~C₆₀의 헤테로고리기; C₃~C₆₀의 i 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 선택되거나, 또는 ii) 이웃하는 기끼리 서로 결합하여 고리를 형성할 수 있다. 한편, 이웃하는 기끼리 서로 결합하여 고리를 형성하는 것은 R¹과 R², R²와 R³, R³과 R⁴, R⁵와 R⁶, R⁶과 R⁷, R⁷과 R⁸, R⁹와 R¹⁰, R¹⁰과 R¹¹ 및 R¹³과 R¹⁴가 서로 결합하여 고리를 형성하는 것을 의미하며, 상기 고리는 C₃~C₆₀의 지방족고리, C₆~C₆₀의 방향족고리, C₂~C₆₀의 헤테로고리 또는 이들의 조합으로 이루어진 융합 고리를 말하며, 포화 또는 불포화 고리를 포함한다.

[0071] 상기 L'은 서로 독립적으로 단일결합; C₆~C₆₀의 아릴렌기; 플루오렌일렌기; C₃~C₆₀의 지방족고리와 C₆~C₆₀의 방향족고리의 융합고리; 및 C₂~C₆₀의 헤테로고리;로 이루어진 군에서 선택되며,

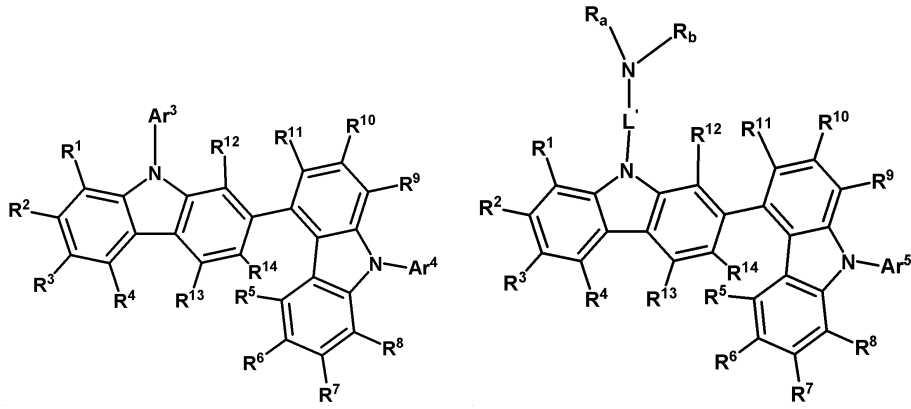
[0072] 상기 R_a 및 R_b는 서로 독립적으로 C₆~C₆₀의 아릴기; 플루오렌일기; C₃~C₆₀의 지방족고리와 C₆~C₆₀의 방향족고리의 융합고리; 및 O, N, S, Si 및 P 중 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 C₂~C₆₀의 헤테로고리;로 이루어진 군에서 선택된다.

[0073] 여기서 상기 아릴기, 플루오렌일기, 헤테로고리, 융합고리, 알킬기, 알켄일기, 알킨일기, 알콕실기, 아릴옥시기, 아릴렌기, 플루오렌일렌기는 각각 중수소; 할로젠; 실란기; 실록산기; 붕소기; 게르마늄기; 시아노기; 니트로기; -L'-N(R_a)(R_b); C₁~C₂₀의 알킬싸이오기; C₁~C₂₀의 알콕실기; C₁~C₂₀의 알킬기; C₂~C₂₀의 알켄일기; C₂~C₂₀의 알킨일기; C₆~C₂₀의 아릴기; 중수소로 치환된 C₆~C₂₀의 아릴기; 플루오렌일기; C₂~C₂₀의 헤테로고리; C₃~C₂₀의 시클로알킬기; C₇~C₂₀의 아릴알킬기 및 C₈~C₂₀의 아릴알켄일기로 이루어진 군에서 선택된 하나 이상의 치환기로 더욱 치환될 수 있으며, 또한 이들 치환기들은 서로 결합하여 고리를 형성할 수도 있으며, 상기 고리는 C₃~C₆₀의 지방족고리, C₆~C₆₀의 방향족고리, C₂~C₆₀의 헤테로고리 또는 이들의 조합으로 이루어진 융합 고리를 말하며, 포화 또는 불포화 고리를 포함한다.

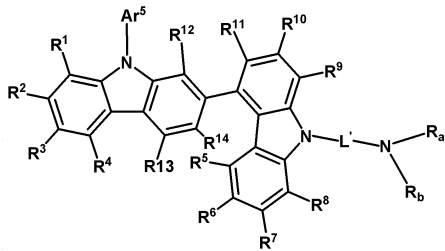
[0074] 구체적으로, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 하기 화학식 2 내지 화학식 4로 표시될 수 있다.

[0075] <화학식 2>

<화학식 3>



<화학식 4>

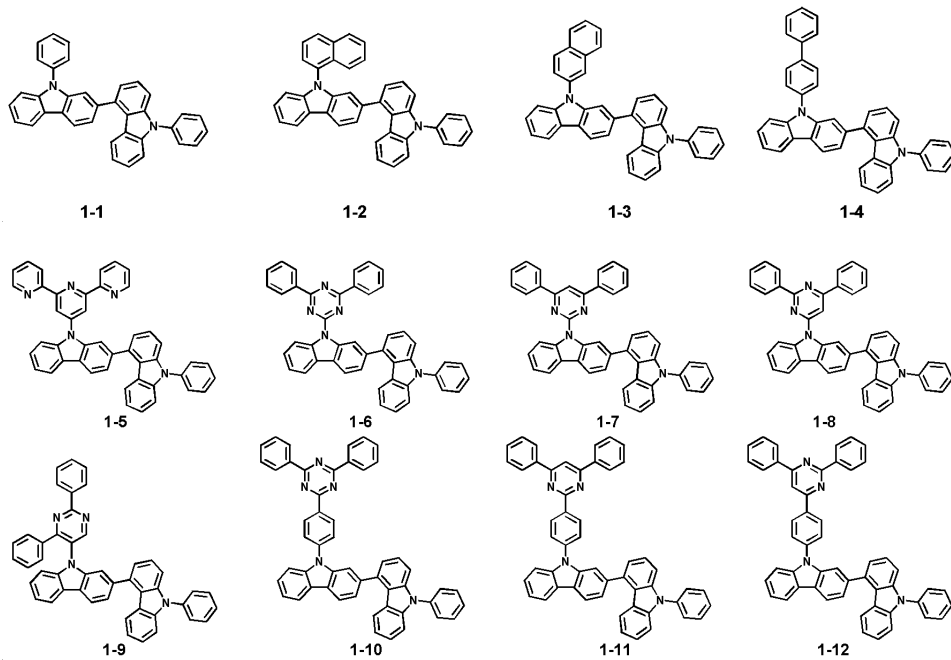


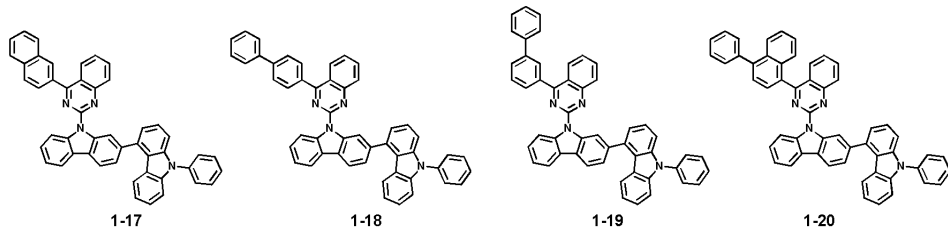
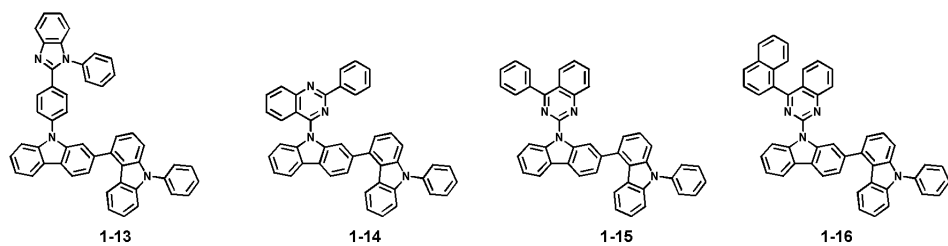
상기 화학식 2 내지 4에서,

R^1 내지 R^{14} , L' , R_a 및 R_b 는 상기 화학식 1의 정의와 동일하며,

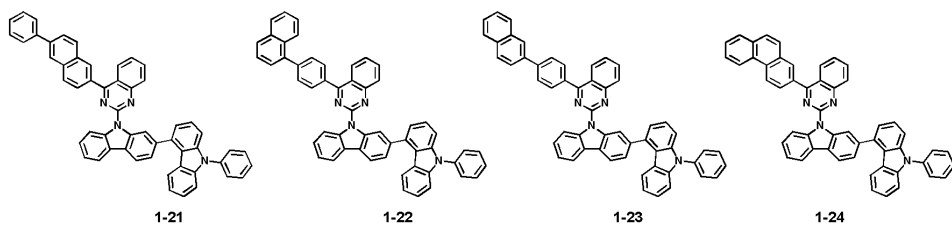
Ar^3 내지 Ar^5 는 서로 독립적으로 $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴기; 플루오렌일기; O, N, S, Si 및 P 중 적어도 하나의 헤테로원자를 포함하는 $C_2 \sim C_{60}$ 의 헤테로고리기; $C_3 \sim C_{60}$ 의 지방족고리와 $C_6 \sim C_{60}$ 의 방향족고리의 융합고리기; $C_1 \sim C_{50}$ 의 알킬기; $C_2 \sim C_{20}$ 의 알켄일기; $C_2 \sim C_{20}$ 의 알킨일기; $C_1 \sim C_{30}$ 의 알콕실기; 및 $C_6 \sim C_{30}$ 의 아릴옥시기;로 이루어진 군에서 선택된다.

보다 구체적으로, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 하기 화합물 중 어느 하나일 수 있다.

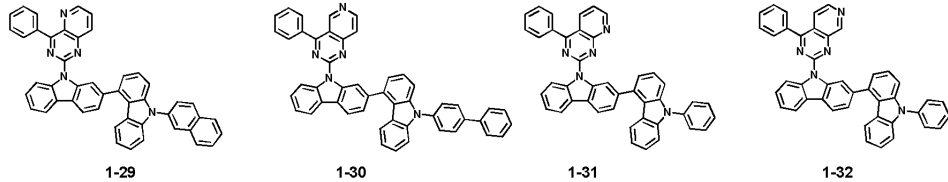
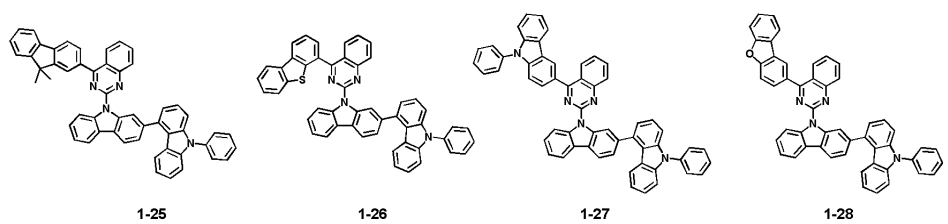




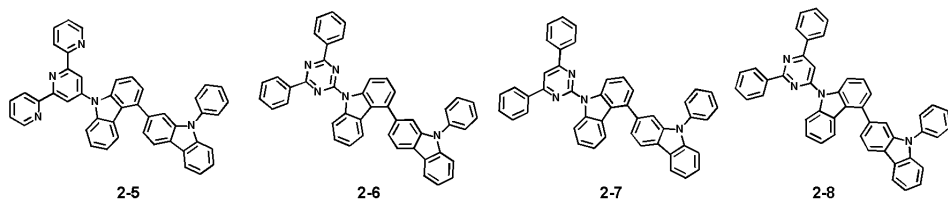
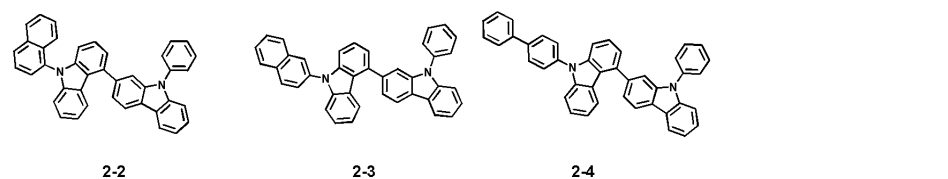
[0085]



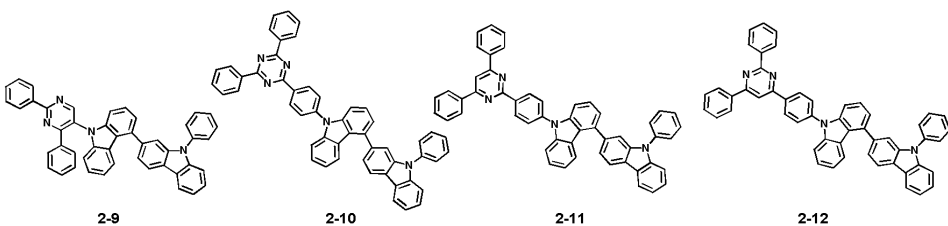
[0086]



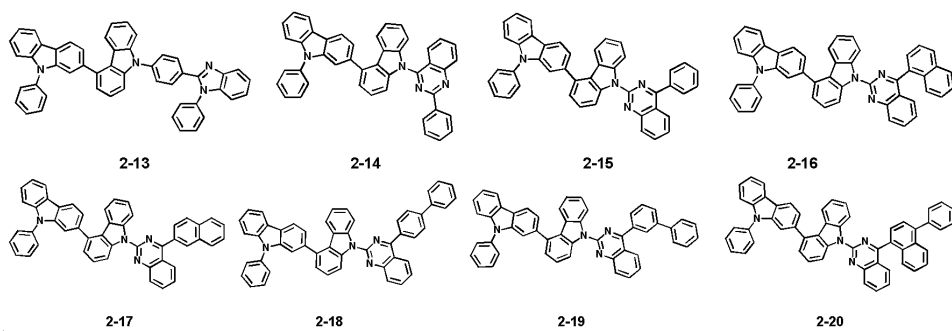
[0087]



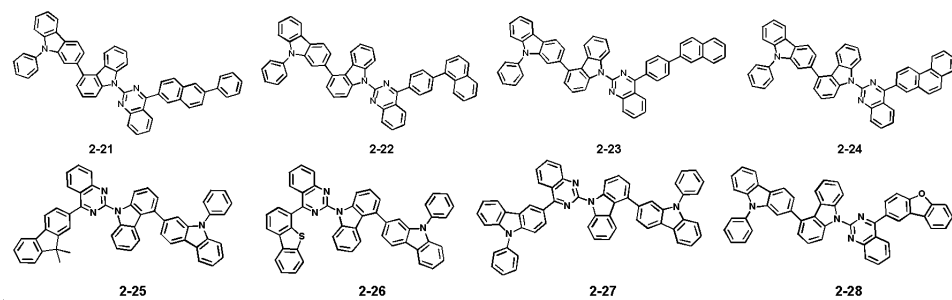
[0088]



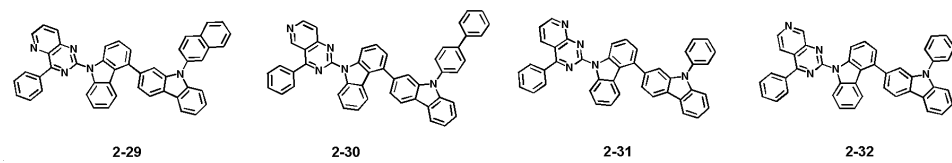
[0089]



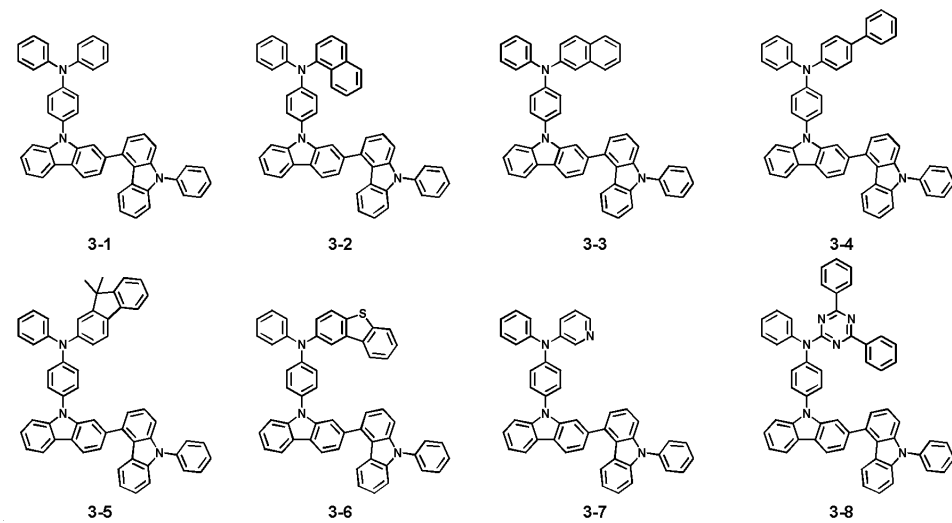
[0090]



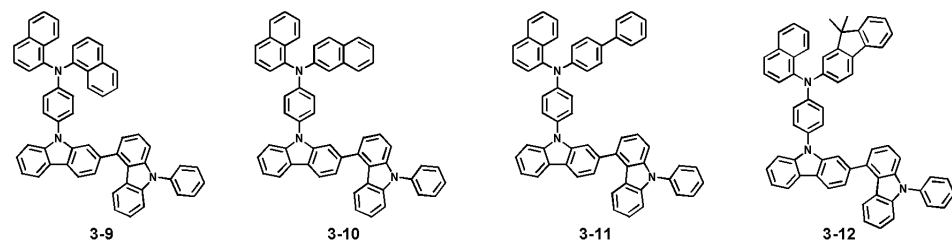
[0091]



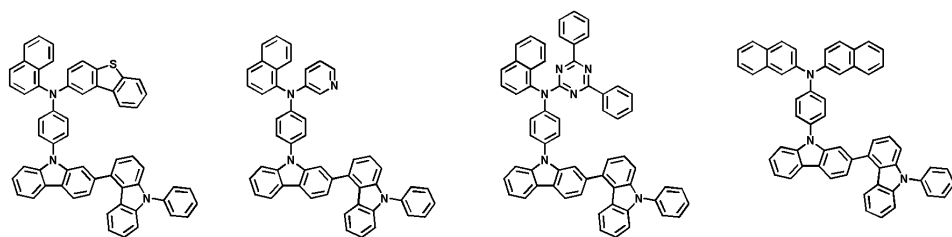
[0092]



[0093]



[0094]

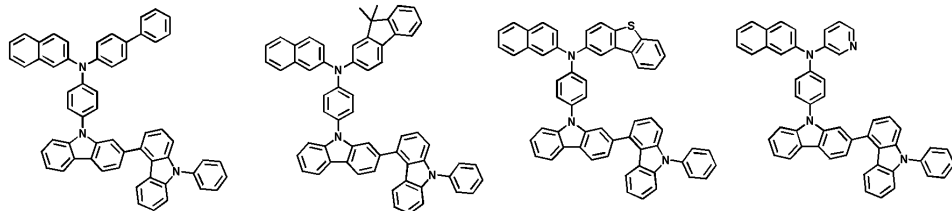


3-13

3-14

3-15

3-16

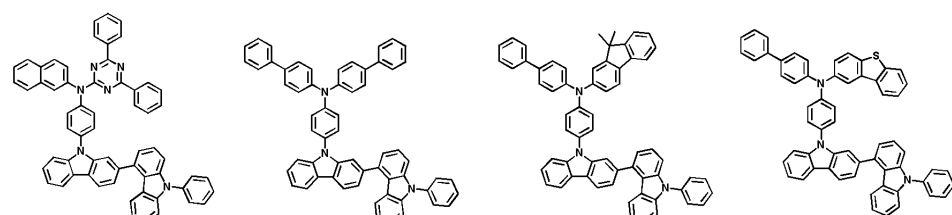


3-17

3-18

3-19

3-20

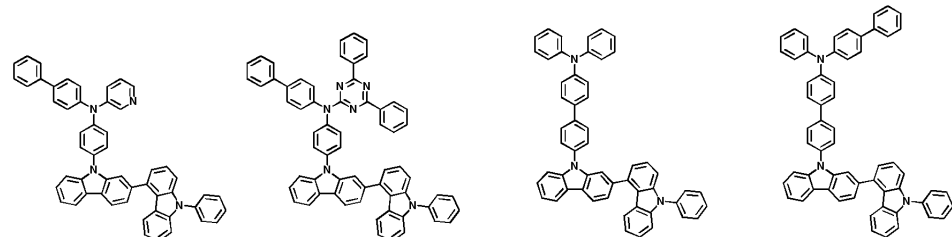


3-21

3-22

3-23

3-24

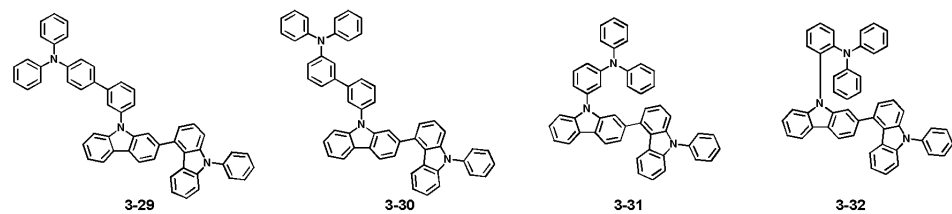


3-25

3-26

3-27

3-28

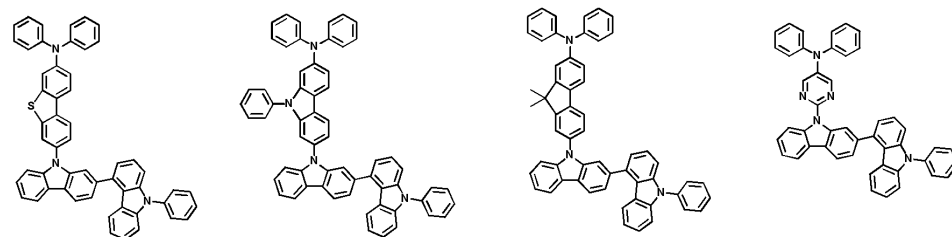


3-29

3-30

3-31

3-32

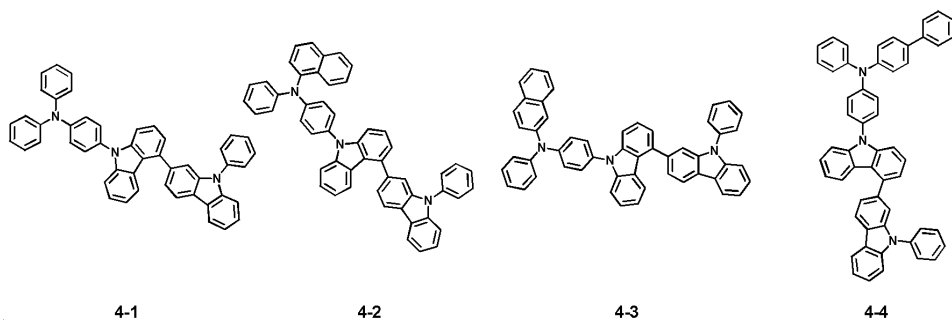


3-33

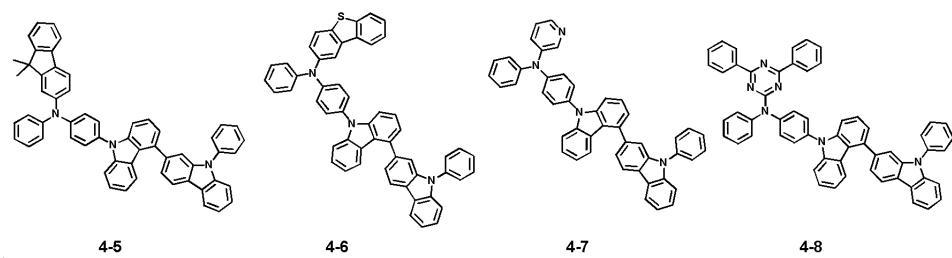
3-34

3-35

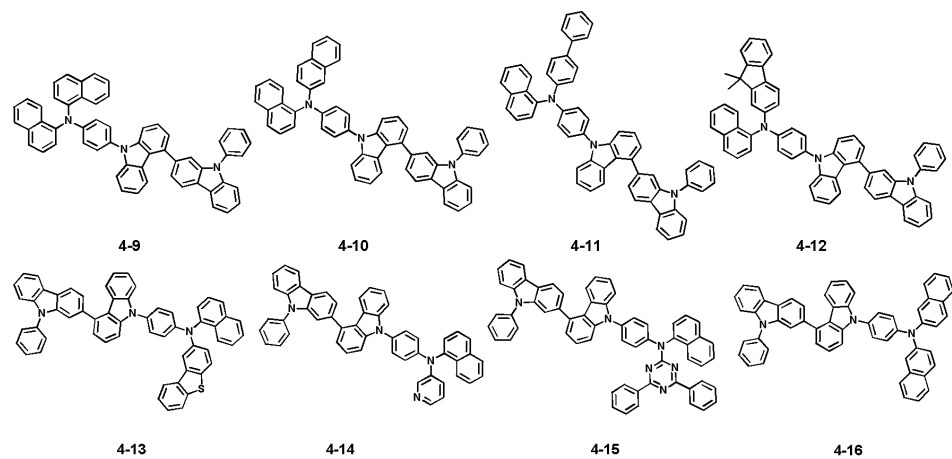
3-36



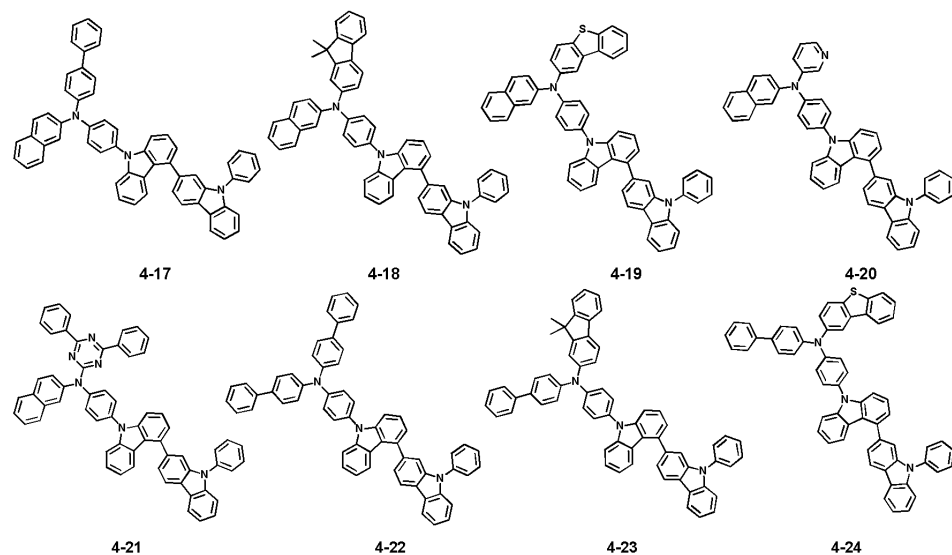
[0099]



[0100]

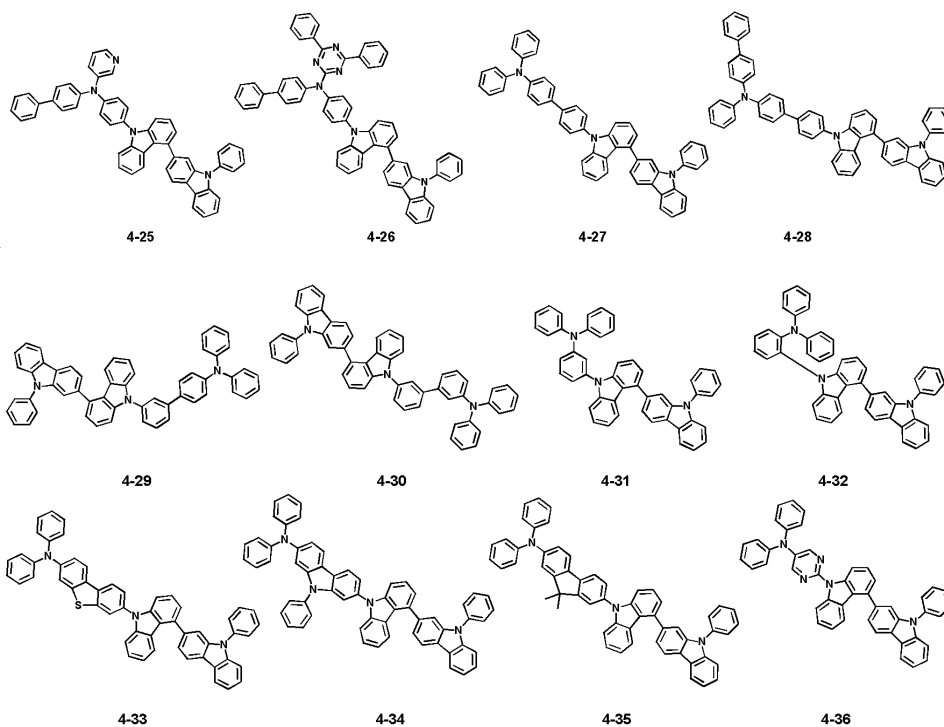


[0101]

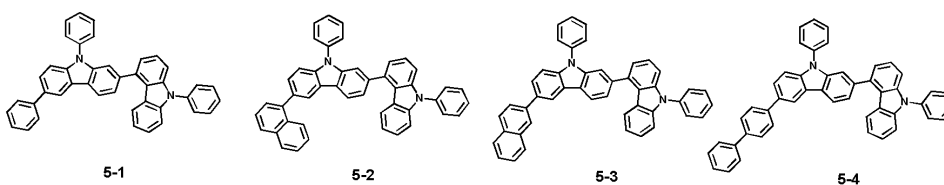


[0102]

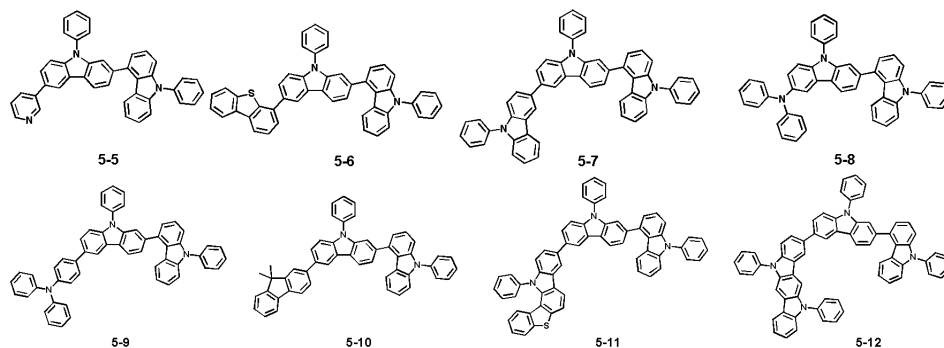
[0103]



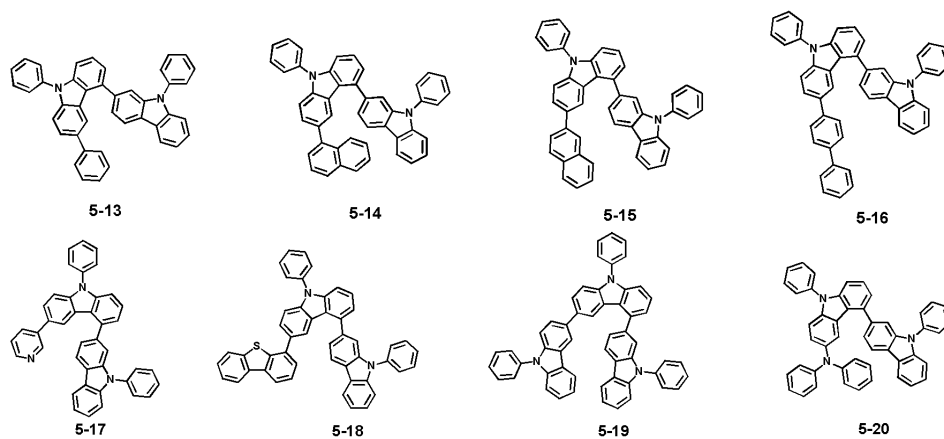
[0104]



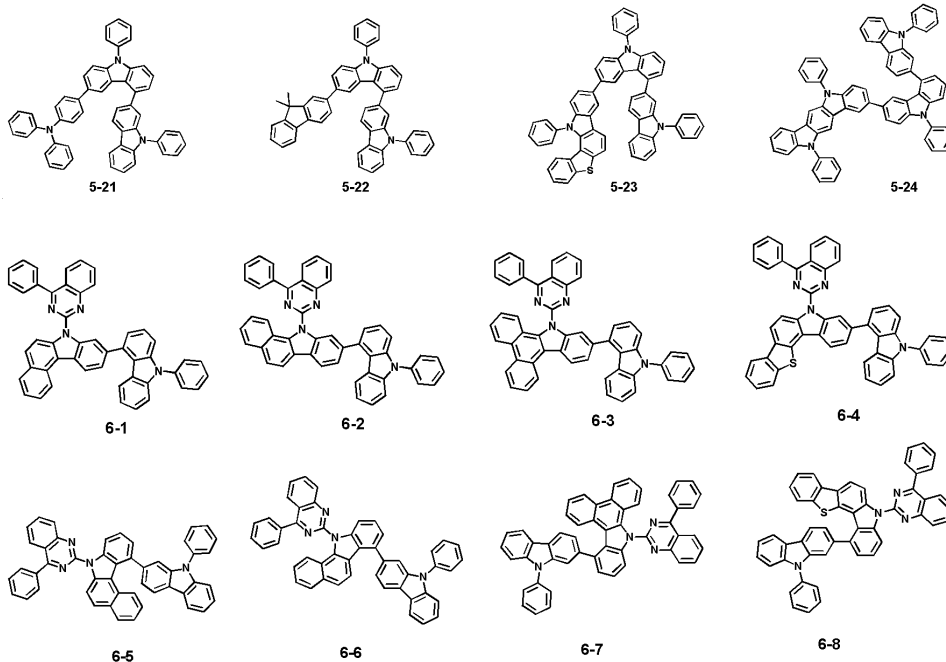
[0105]



[0106]



[0107]



본 발명의 또 다른 구체 예에서, 본 발명은 제 1전극; 제 2전극; 및 상기 제 1전극과 제 2전극 사이에 위치하는 유기물층;을 포함하는 유기전기소자에 있어서, 상기 유기물층은 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하는 유기전기소자를 제공한다. 구체적으로, 본 발명은 상기 유기물층에 상기 화학식 2 내지 화학식 4로 표시되는 화합물 중 하나를 포함하는 유기전기소자를 제공한다. 더욱 구체적으로, 본 발명은 상기 유기물층에 상기 개별 화학식으로 표시되는 화합물을 포함하는 유기전기소자를 제공한다.

본 발명의 또 다른 구체 예에서, 본 발명은 상기 유기물층에 적어도 정공수송층을 포함하며, 상기 정공수송층은 상기 화합물을 포함하는 것을 특징으로 하는 유기전기소자를 제공한다..

본 발명의 또 다른 구체 예에서, 본 발명은 상기 유기물층에 적어도 발광보조층을 포함하며, 상기 발광보조층은 상기 화합물을 포함하는 것을 특징으로 하는 유기전기소자를 제공한다.

본 발명의 또 다른 구체 예에서, 본 발명은 상기 유기물층에 적어도 발광층을 포함하며, 상기 화합물은 상기 발광층의 호스트 물질로 사용되는 것을 특징으로 하는 유기전기소자를 제공한다.

본 발명의 또 다른 구체 예에서, 본 발명은 상기 제 1전극의 일측면 중 상기 유기물층과 반대되는 일측 또는 상기 제 2전극의 일측면 중 상기 유기물층과 반대되는 일측 중 적어도 하나에 형성되는 광효율 개선층을 더 포함하는 유기전기소자를 제공한다.

본 발명의 또 다른 구체 예에서, 본 발명은 상기 유기물층이 스핀코팅 공정, 노즐 프린팅 공정, 잉크젯 프린팅 공정, 슬롯코팅 공정, 딥코팅 공정 및 롤투롤 공정 중 어느 하나에 의해 형성되는 유기전기소자를 제공한다.

본 발명의 또 다른 구체 예에서, 본 발명은 상기 유기물층을 포함하는 유기전기소자를 포함하는 디스플레이장치; 및 상기 디스플레이장치를 구동하는 제어부;를 포함하는 전자장치를 제공한다.

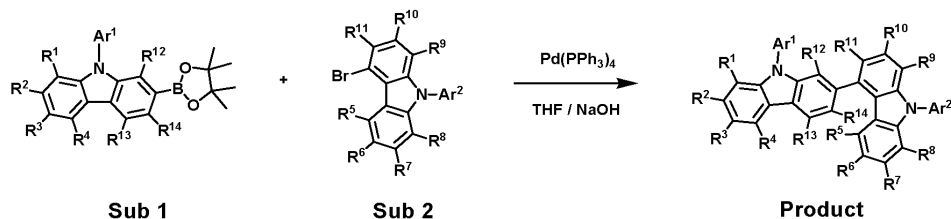
본 발명의 또 다른 구체 예에서, 본 발명에 따른 유기전기소자는 유기전기발광소자(OLED), 유기태양전지, 유기 감광체(OPC), 유기트랜지스터(유기 TFT), 및 단색 또는 백색 조명용 소자 중 적어도 하나일 수 있다.

이하에서, 본 발명에 따른 화학식 1로 표시되는 화합물의 합성에 및 유기전기소자의 제조예에 관하여 실시예를 들어 구체적으로 설명하지만, 본 발명이 하기의 실시예로 한정되는 것은 아니다.

합성예

본 발명에 따른 화학식 1로 표시되는 화합물(Product)은 하기 반응식 1과 같이 Sub 1과 Sub 2를 반응시켜 제조되며, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0121] <반응식 1>



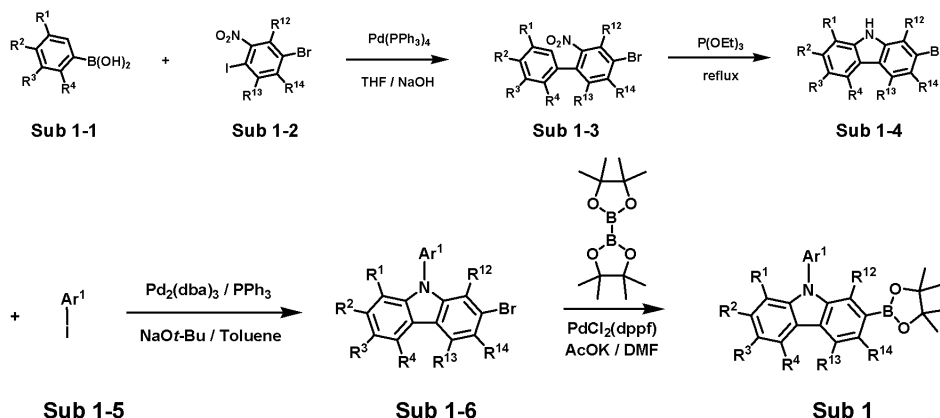
[0122]

[0123] I. 중간체의 합성

[0124] 1. Sub 1의 합성

[0125] 상기 반응식 1의 Sub 1은 하기 반응식 2의 반응경로에 의해 합성될 수 있으며, 이에 한정된 것은 아니다.

[0126] <반응식 2>



[0127]

[0128] (1) Sub 1-3 합성

[0129] 2L 둥근바닥플라스크에 phenylboronic acid (628mmol), THF (700mL), H₂O (350mL)을 넣고 녹인 후에 4-bromo-1-iodo-2-nitrobenzene (690mmol), NaOH (1035mmol), Pd(PPh₃)₄ (17.3mmol)을 순서대로 넣고 80℃에서 24시간 동안 반응을 진행한다. 반응이 완료되면 메틸렌클로라이드와 물, brine을 이용하여 추출하고 MgSO₄로 유기층을 건조한다. 얻어진 유기층을 silicagel column (메틸렌클로라이드 : 헥산 = 1 : 3)하여 4-bromo-2-nitro-1,1'-biphenyl을 얻었다.

[0130] (2) Sub 1-4 합성

[0131] 4-bromo-2-nitro-1,1'-biphenyl에 triethylphosphite를 넣고 160℃ ~ 165℃ 상태에서 14시간 동안 가열 환류시킨다. 반응이 완료되면 감압증류로 남은 triethylphosphite를 제거하고, MeOH : H₂O = 1:1 혼합용매로 희석시킨 후 생성된 고체를 여과한다. 얻어진 고체를 MeOH : H₂O = 1:1 혼합용매와 petroleum ether로 씻어준다. 상기 고체를 메틸렌클로라이드에 녹인 후에 MgSO₄로 건조하여 농축하고 silicagel column하여 2-bromo-9H-carbazole을 얻는다(petroleum ether : methylene chloride = 2:1).

[0132] (3) Sub 1-6 합성

[0133] 2-bromo-9H-carbazole (327mmol)과 iodobenzene (360mmol), 톨루엔 (2800mL)에 혼합 후에 Pd₂(dba)₃ (8.24g, 9mmol), PPh₃ (7.87g, 30mmol), NaOt-Bu (86.5g, 900mmol)을 각각 첨가한 뒤, 100℃에서 24시간 교반 환류시킨다. ether와 물로 추출한 후 유기층을 MgSO₄로 건조하고 농축한 후 생성된 유기물을 silicagel column 및 재결정하여 2-bromo-9-phenyl-9H-carbazole을 얻었다.

[0134] (4) Sub 1 합성

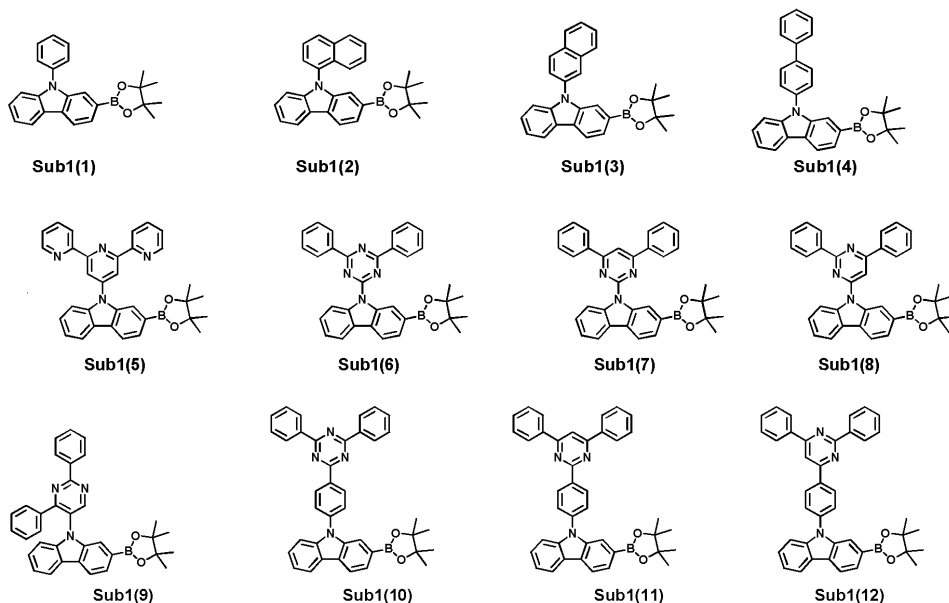
[0135] 2-bromo-9-phenyl-9H-carbazole (1당량)을 둥근바닥플라스크에 DMF로 녹인 후에, Bis(pinacolato)diboron (1.1

당량), Pd(dppf)Cl₂ (0.03당량), KOAc (3당량)를 첨가하고 90℃에서 교반하였다. 반응이 완료되면 증류를 통해 DMF를 제거하고 CH₂Cl₂와 물로 추출하였다. 유기층을 MgSO₄로 건조하고 농축한 후 생성된 화합물을silicagel column 및 재결정하여 9-phenyl-2-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-9H-carbazole를 얻었다.

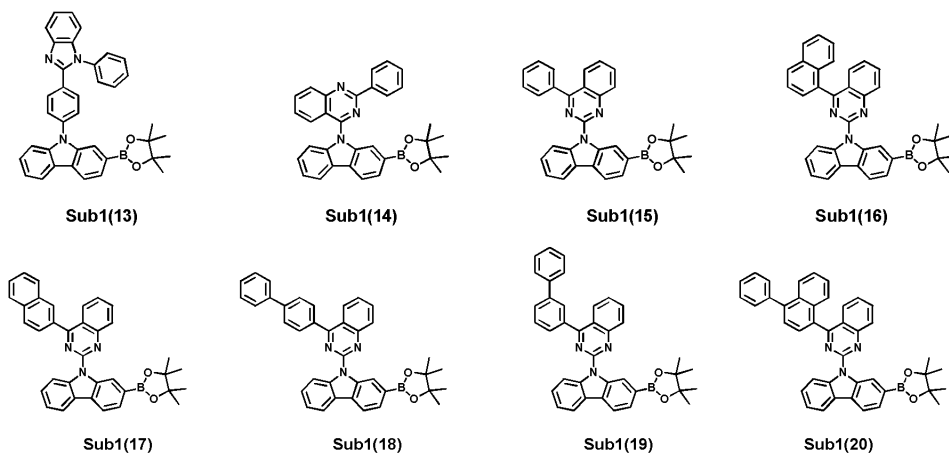
[0136]

Sub 1의 예시는 다음과 같으나 이에 한정되는 것은 아니며, 이들의 FD-MS는 하기 표 1과 같다.

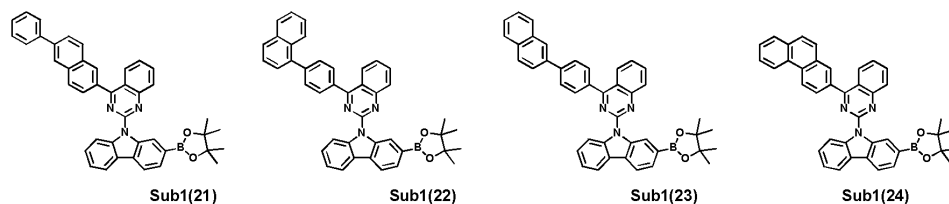
[0137]



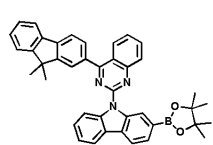
[0138]



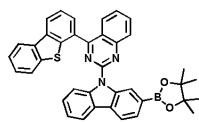
[0139]



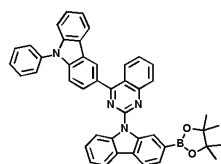
[0140]



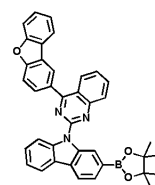
Sub1(25)



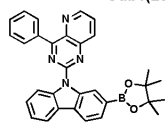
Sub1(26)



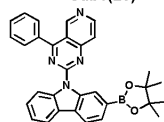
Sub1(27)



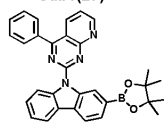
Sub1(28)



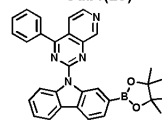
Sub1(29)



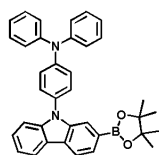
Sub1(30)



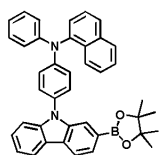
Sub1(31)



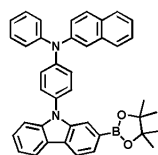
Sub1(32)



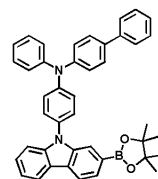
Sub1(33)



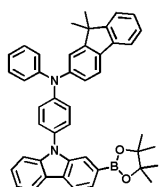
Sub1(34)



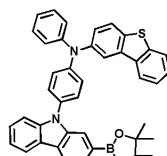
Sub1(35)



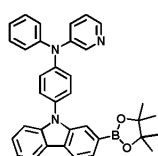
Sub1(36)



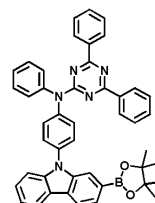
Sub1(37)



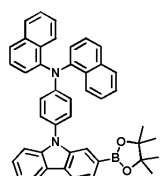
Sub1(38)



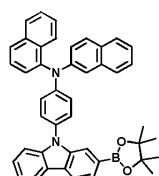
Sub1(39)



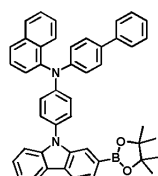
Sub1(40)



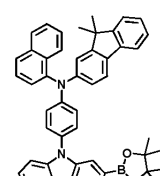
Sub1(41)



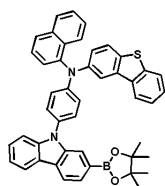
Sub1(42)



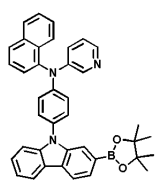
Sub1(43)



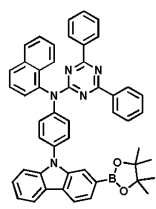
Sub1(44)



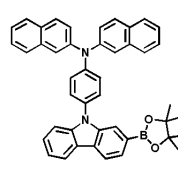
Sub1(45)



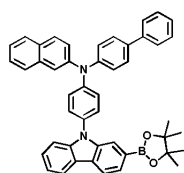
Sub1(46)



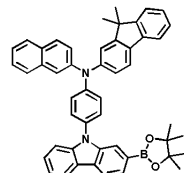
Sub1(47)



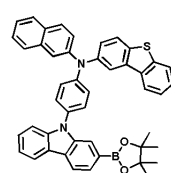
Sub1(48)



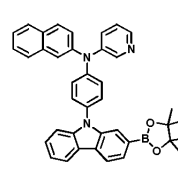
Sub1(49)



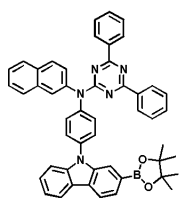
Sub1(50)



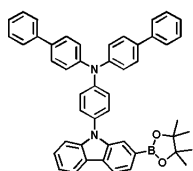
Sub1(51)



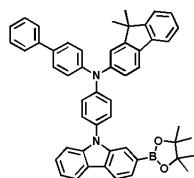
Sub1(52)



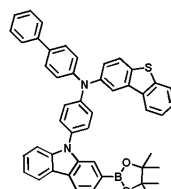
Sub1(53)



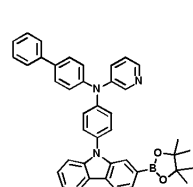
Sub1(54)



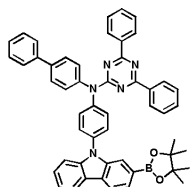
Sub1(55)



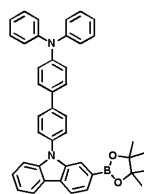
Sub1(56)



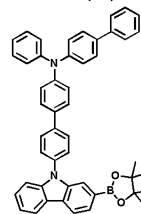
Sub1(57)



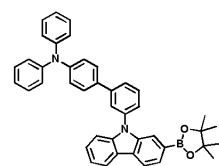
Sub1(58)



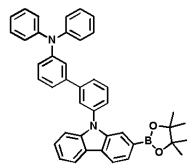
Sub1(59)



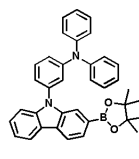
Sub1(60)



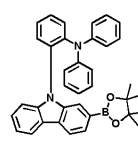
Sub1(61)



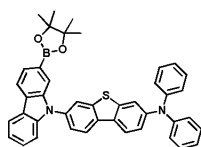
Sub1(62)



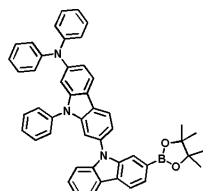
Sub1(63)



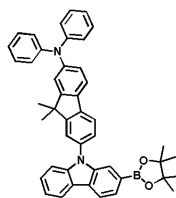
Sub1(64)



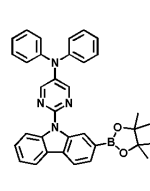
Sub1(65)



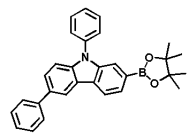
Sub1(66)



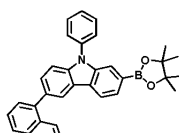
Sub1(67)



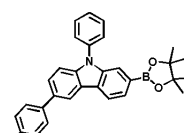
Sub1(68)



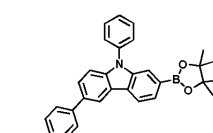
Sub1(69)



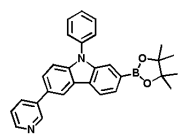
Sub1(70)



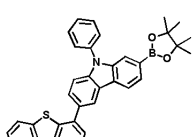
Sub1(71)



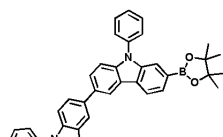
Sub1(72)



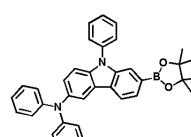
Sub1(73)



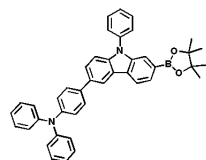
Sub1(74)



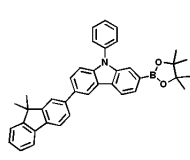
Sub1(75)



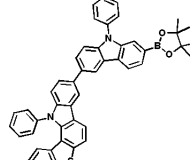
Sub1(76)



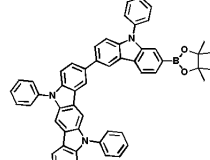
Sub1(77)



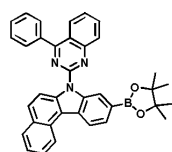
Sub1(78)



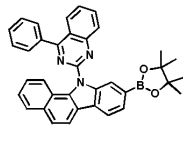
Sub1(79)



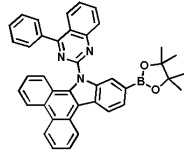
Sub1(80)



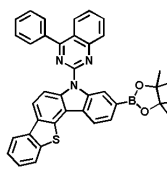
Sub1(81)



Sub1(82)



Sub1(83)



Sub1(84)

[0150] [표 1]

화합물	FD-MS	화합물	FD-MS
Sub 1(1)	m/z=369.19(C ₂₄ H ₂₄ BN ₂ O ₂ =369.26)	Sub 1(2)	m/z=419.21(C ₂₈ H ₂₆ BN ₂ O ₂ =419.32)
Sub 1(3)	m/z=419.21(C ₂₈ H ₂₆ BN ₂ O ₂ =419.32)	Sub 1(4)	m/z=445.22(C ₃₀ H ₂₈ BN ₂ O ₂ =445.36)
Sub 1(5)	m/z=524.24(C ₃₃ H ₂₉ BN ₄ O ₂ =524.4)	Sub 1(6)	m/z=524.24(C ₃₃ H ₂₉ BN ₄ O ₂ =524.4)
Sub 1(7)	m/z=523.24(C ₃₄ H ₃₀ BN ₃ O ₂ =523.4)	Sub 1(8)	m/z=523.24(C ₃₄ H ₃₀ BN ₃ O ₂ =523.4)
Sub 1(9)	m/z=523.24(C ₃₄ H ₃₀ BN ₃ O ₂ =523.4)	Sub 1(10)	m/z=600.27(C ₃₉ H ₃₃ BN ₄ O ₂ =600.52)
Sub 1(11)	m/z=533.27(C ₄₀ H ₃₄ BN ₃ O ₂ =599.5)	Sub 1(12)	m/z=533.27(C ₄₀ H ₃₄ BN ₃ O ₂ =599.5)
Sub 1(13)	m/z=561.26(C ₃₇ H ₃₂ BN ₃ O ₂ =561.5)	Sub 1(14)	m/z=497.23(C ₃₂ H ₂₈ BN ₃ O ₂ =497.39)
Sub 1(15)	m/z=497.23(C ₃₂ H ₂₈ BN ₃ O ₂ =497.4)	Sub 1(16)	m/z=547.24(C ₃₆ H ₃₀ BN ₃ O ₂ =547.45)
Sub 1(17)	m/z=547.24(C ₃₆ H ₃₀ BN ₃ O ₂ =547.5)	Sub 1(18)	m/z=573.26(C ₃₈ H ₃₂ BN ₃ O ₂ =573.49)
Sub 1(19)	m/z=573.26(C ₃₈ H ₃₂ BN ₃ O ₂ =573.5)	Sub 1(20)	m/z=623.27(C ₄₂ H ₃₄ BN ₃ O ₂ =623.55)
Sub 1(21)	m/z=623.27(C ₄₂ H ₃₄ BN ₃ O ₂ =623.6)	Sub 1(22)	m/z=623.27(C ₄₂ H ₃₄ BN ₃ O ₂ =623.55)
Sub 1(23)	m/z=623.27(C ₄₂ H ₃₄ BN ₃ O ₂ =623.6)	Sub 1(24)	m/z=597.26(C ₄₀ H ₃₂ BN ₃ O ₂ =597.51)
Sub 1(25)	m/z=613.29(C ₄₁ H ₃₆ BN ₃ O ₂ =613.6)	Sub 1(26)	m/z=603.22(C ₃₈ H ₃₀ BN ₃ O ₂ S=603.54)
Sub 1(27)	m/z=662.29(C ₄₄ H ₃₅ BN ₄ O ₂ =662.6)	Sub 1(28)	m/z=587.24(C ₃₈ H ₃₀ BN ₃ O ₃ =587.47)
Sub 1(29)	m/z=498.22(C ₃₁ H ₂₇ BN ₄ O ₂ =498.4)	Sub 1(30)	m/z=498.22(C ₃₁ H ₂₇ BN ₄ O ₂ =498.4)
Sub 1(31)	m/z=498.22(C ₃₁ H ₂₇ BN ₄ O ₂ =498.4)	Sub 1(32)	m/z=498.22(C ₃₁ H ₂₇ BN ₄ O ₂ =498.4)
Sub 1(33)	m/z=536.26(C ₃₆ H ₃₃ BN ₂ O ₂ =536.5)	Sub 1(34)	m/z=369.19(C ₂₄ H ₂₄ BN ₂ O ₂ =369.26)
Sub 1(35)	m/z=536.26(C ₃₆ H ₃₃ BN ₂ O ₂ =536.5)	Sub 1(36)	m/z=612.29(C ₄₂ H ₃₇ BN ₂ O ₂ =612.57)
Sub 1(37)	m/z=652.33(C ₄₅ H ₄₁ BN ₂ O ₂ =652.6)	Sub 1(38)	m/z=642.25(C ₄₂ H ₃₅ BN ₂ O ₂ S=642.62)
Sub 1(39)	m/z=537.26(C ₃₅ H ₃₂ BN ₃ O ₂ =537.5)	Sub 1(40)	m/z=691.31(C ₄₅ H ₃₈ BN ₅ O ₂ =691.63)
Sub 1(41)	m/z=636.29(C ₄₄ H ₃₇ BN ₂ O ₂ =636.6)	Sub 1(42)	m/z=636.29(C ₄₄ H ₃₇ BN ₂ O ₂ =636.6)
Sub 1(43)	m/z=662.31(C ₄₆ H ₃₉ BN ₂ O ₂ =662.6)	Sub 1(44)	m/z=702.34(C ₄₉ H ₄₃ BN ₂ O ₂ =702.69)
Sub 1(45)	m/z=692.3(C ₄₆ H ₃₇ BN ₂ O ₂ S=692.7)	Sub 1(46)	m/z=587.27(C ₃₉ H ₃₄ BN ₃ O ₂ =587.52)
Sub 1(47)	m/z=741.33(C ₄₉ H ₄₀ BN ₅ O ₂ =741.7)	Sub 1(48)	m/z=636.29(C ₄₄ H ₃₇ BN ₂ O ₂ =636.59)
Sub 1(49)	m/z=662.31(C ₄₆ H ₃₉ BN ₂ O ₂ =662.6)	Sub 1(50)	m/z=702.34(C ₄₉ H ₄₃ BN ₂ O ₂ =702.69)
Sub 1(51)	m/z=692.3(C ₄₆ H ₃₇ BN ₂ O ₂ S=692.7)	Sub 1(52)	m/z=587.27(C ₃₉ H ₃₄ BN ₃ O ₂ =587.52)
Sub 1(53)	m/z=741.33(C ₄₉ H ₄₀ BN ₅ O ₂ =741.7)	Sub 1(54)	m/z=688.33(C ₄₈ H ₄₁ BN ₂ O ₂ =688.66)
Sub 1(55)	m/z=728.36(C ₅₁ H ₄₅ BN ₂ O ₂ =728.7)	Sub 1(56)	m/z=718.28(C ₄₈ H ₃₉ BN ₂ O ₂ S=718.71)
Sub 1(57)	m/z=613.29(C ₄₁ H ₃₆ BN ₃ O ₂ =613.6)	Sub 1(58)	m/z=767.34(C ₅₁ H ₄₂ BN ₅ O ₂ =767.72)
Sub 1(59)	m/z=612.29(C ₄₂ H ₃₇ BN ₂ O ₂ =612.6)	Sub 1(60)	m/z=688.33(C ₄₈ H ₄₁ BN ₂ O ₂ =688.66)
Sub 1(61)	m/z=612.29(C ₄₂ H ₃₇ BN ₂ O ₂ =612.6)	Sub 1(62)	m/z=612.29(C ₄₂ H ₃₇ BN ₂ O ₂ =612.57)
Sub 1(63)	m/z=536.26(C ₃₆ H ₃₃ BN ₂ O ₂ =536.5)	Sub 1(64)	m/z=536.26(C ₃₆ H ₃₃ BN ₂ O ₂ =536.47)
Sub 1(65)	m/z=642.3(C ₄₂ H ₃₅ BN ₂ O ₂ S=642.6)	Sub 1(66)	m/z=701.32(C ₄₈ H ₄₀ BN ₃ O ₂ =701.66)
Sub 1(67)	m/z=652.33(C ₄₅ H ₄₁ BN ₂ O ₂ =652.6)	Sub 1(68)	m/z=538.25(C ₃₄ H ₃₁ BN ₄ O ₂ =538.45)
Sub 1(69)	m/z=445.22(C ₃₀ H ₂₈ BN ₂ O ₂ =445.36)	Sub 1(70)	m/z=495.24(C ₃₄ H ₃₀ BN ₂ O ₂ =495.42)

[0151]

Sub 1(71)	m/z=495.24(C ₃₄ H ₃₀ BN ₂ O ₂ =495.42)	Sub 1(72)	m/z=521.25(C ₃₆ H ₃₂ BN ₂ O ₂ =521.46)
Sub 1(73)	m/z=446.22(C ₂₉ H ₂₇ BN ₂ O ₂ =446.4)	Sub 1(74)	m/z=551.21(C ₃₆ H ₃₀ BN ₂ O ₂ S=551.50)
Sub 1(75)	m/z=610.28(C ₄₂ H ₃₅ BN ₂ O ₂ =610.6)	Sub 1(76)	m/z=536.26(C ₃₆ H ₃₃ BN ₂ O ₂ =536.47)
Sub 1(77)	m/z=612.29(C ₄₂ H ₃₇ BN ₂ O ₂ =612.6)	Sub 1(78)	m/z=561.28(C ₃₉ H ₃₆ BN ₂ O ₂ =561.52)
Sub 1(79)	m/z=716.27(C ₄₈ H ₃₇ BN ₂ O ₂ S=716.7)	Sub 1(80)	m/z=775.34(C ₅₄ H ₄₂ BN ₅ O ₂ =775.74)
Sub 1(81)	m/z=547.24(C ₃₆ H ₃₀ BN ₃ O ₂ =547.5)	Sub 1(82)	m/z=547.24(C ₃₆ H ₃₀ BN ₃ O ₂ =547.45)
Sub 1(83)	m/z=597.26(C ₄₀ H ₃₂ BN ₃ O ₂ =597.5)	Sub 1(84)	m/z=603.22(C ₃₈ H ₃₀ BN ₃ O ₂ S=603.54)

[0152]

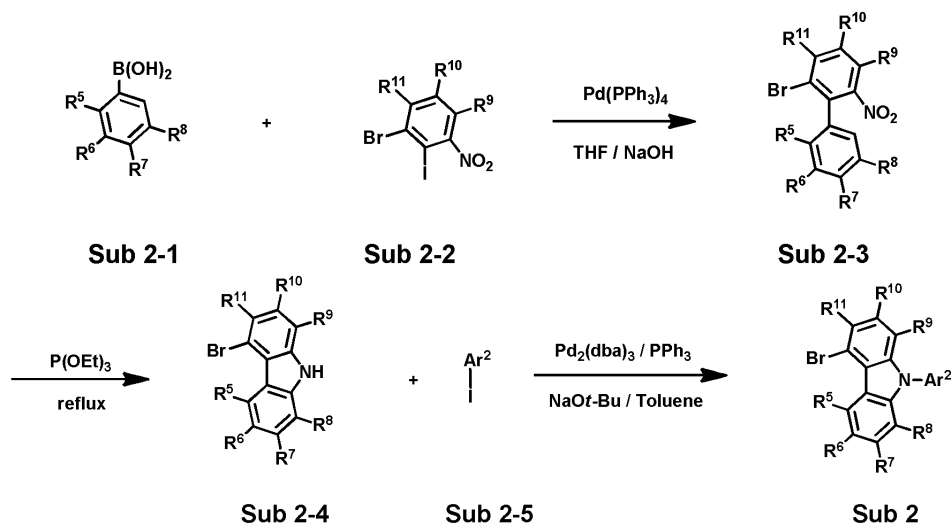
[0153]

2. Sub 2의 합성

[0154]

상기 반응식 1의 Sub 2는 하기 반응식 3의 반응경로에 의해 합성될 수 있으며, 이에 한정된 것은 아니다.

[0155] <반응식 3>



[0156]

[0157] (1) Sub 2-3 합성

[0158] 2L 둥근바닥플라스크에 phenylboronic acid (628mmol), THF (700mL), H₂O (350mL)을 넣고 녹인 후에 1-bromo-2-iodo-3-nitrobenzene (690mmol), NaOH (1035mmol), Pd(PPh₃)₄ (17.3mmol)을 순서대로 넣고 80℃에서 24시간 동안 반응을 진행한다. 반응이 완료되면 메틸렌클로라이드와 물, brine을 이용하여 추출하고 MgSO₄로 유기층을 건조한다. 얻어진 유기층을 silicagel column (메틸렌클로라이드 : 헥산 = 1 : 3)하여 2'-bromo-6'-nitro-1,2-dihydro-1,1'-biphenyl을 얻었다.

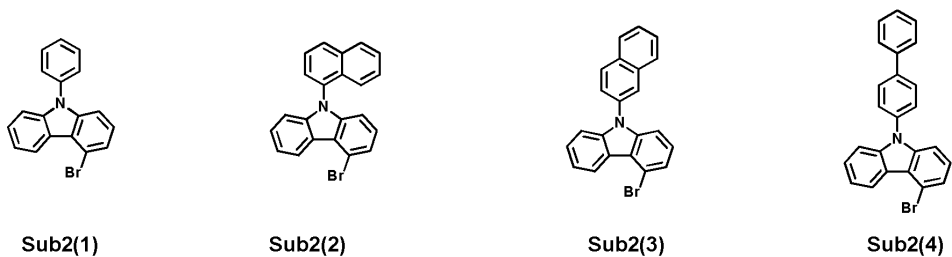
[0159] (2) Sub 2-4 합성

[0160] 2'-bromo-6'-nitro-1,2-dihydro-1,1'-biphenyl에 triethylphosphate를 넣고 160℃ ~ 165℃ 상태에서 14시간 동안 가열 환류시킨다. 반응이 완료되면 감압증류로 남은 triethylphosphate를 제거하고, MeOH : H₂O = 1:1 혼합용매로 희석시킨 후 생성된 고체를 여과한다. 얻어진 고체를 MeOH : H₂O = 1:1 혼합용매와 petroleum ether로 씻어준다. 상기 고체를 메틸렌클로라이드에 녹인 후에 MgSO₄로 건조하여 농축하고 silicagel column하여 4-bromo-9H-carbazole을 얻는다(petroleum ether : methylene chloride = 2:1).

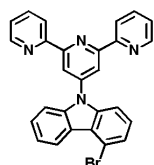
[0161] (3) Sub 2 합성

[0162] 4-bromo-9H-carbazole (327mmol)과 iodobenzene (360mmol), 톨루엔 (2800mL)에 혼합 후에 Pd₂(dba)₃ (8.24g, 9mmol), PPh₃ (7.87g, 30mmol), NaOt-Bu (86.5g, 900mmol)을 각각 첨가한 뒤, 100℃에서 24시간 교반 환류시킨다. ether와 물로 추출한 후 유기층을 MgSO₄로 건조하고 농축한 후 생성된 유기물을 silicagel column 및 재결정하여 4-bromo-9-phenyl-9H-carbazole을 얻었다.

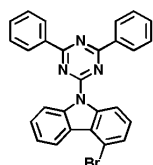
[0163] Sub 2의 예시는 다음과 같으나 이에 한정되는 것은 아니며, 이들의 FD-MS는 하기 표 2와 같다.



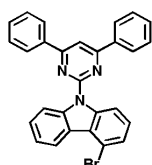
[0164]



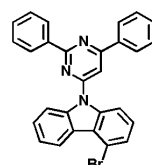
Sub2(5)



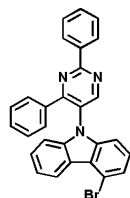
Sub2(6)



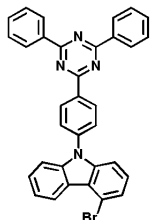
Sub2(7)



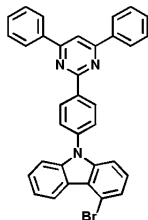
Sub2(8)



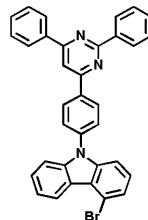
Sub2(9)



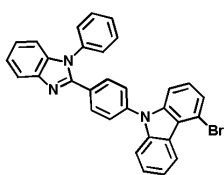
Sub2(10)



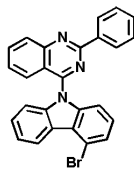
Sub2(11)



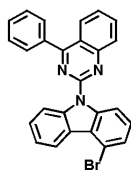
Sub2(12)



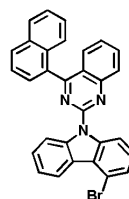
Sub2(13)



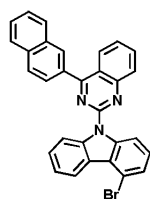
Sub2(14)



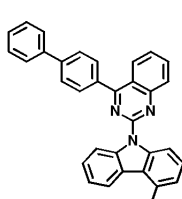
Sub2(15)



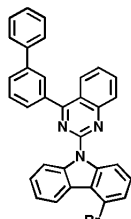
Sub2(16)



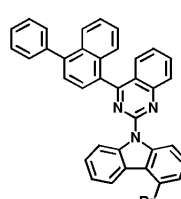
Sub2(17)



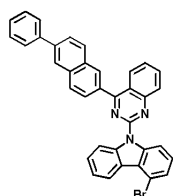
Sub2(18)



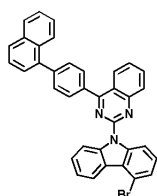
Sub2(19)



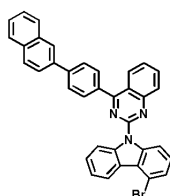
Sub2(20)



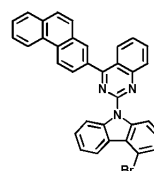
Sub2(21)



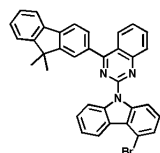
Sub2(22)



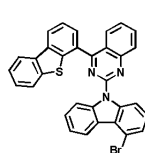
Sub2(23)



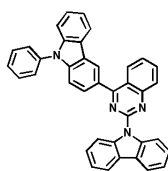
Sub2(24)



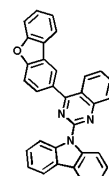
Sub2(25)



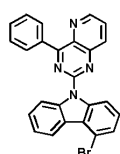
Sub2(26)



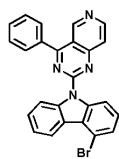
Sub2(27)



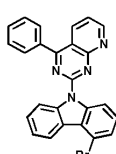
Sub2(28)



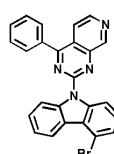
Sub1(29)



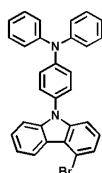
Sub2(30)



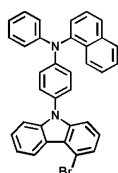
Sub2(31)



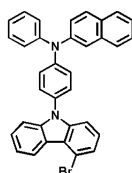
Sub2(32)



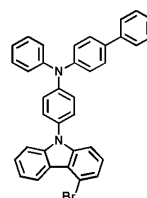
Sub2(33)



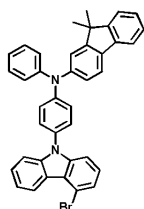
Sub2(34)



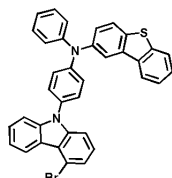
Sub2(35)



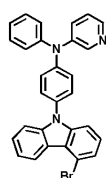
Sub2(36)



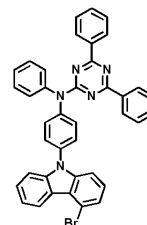
Sub2(37)



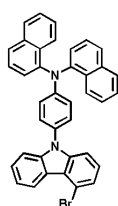
Sub2(38)



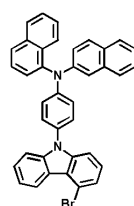
Sub2(39)



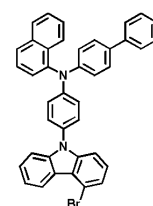
Sub2(40)



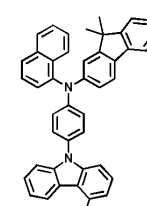
Sub2(41)



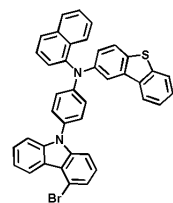
Sub2(42)



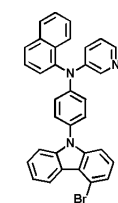
Sub2(43)



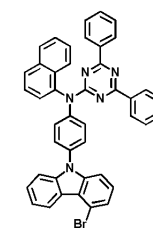
Sub2(44)



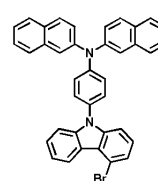
Sub2(45)



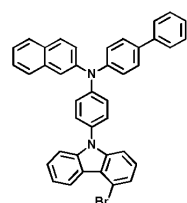
Sub2(46)



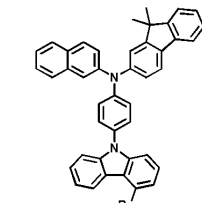
Sub2(47)



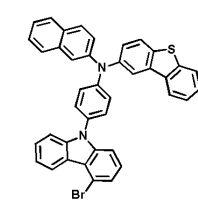
Sub2(48)



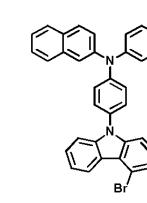
Sub2(49)



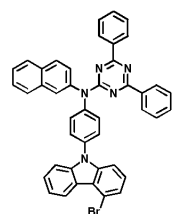
Sub2(50)



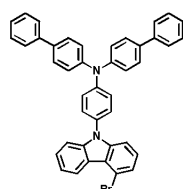
Sub2(51)



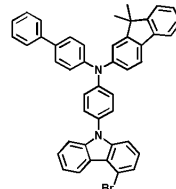
Sub2(52)



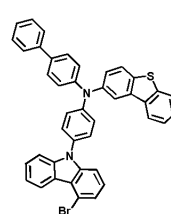
Sub2(53)



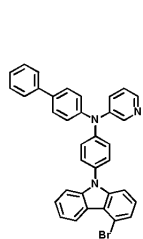
Sub2(54)



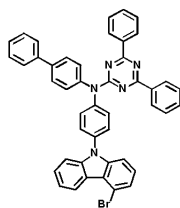
Sub2(55)



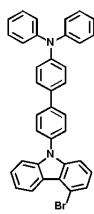
Sub2(56)



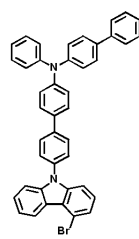
Sub2(57)



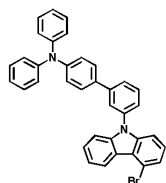
Sub2(58)



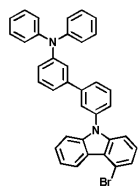
Sub2(59)



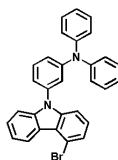
Sub2(60)



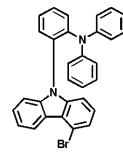
Sub2(61)



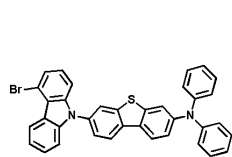
Sub2(62)



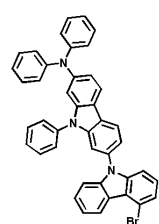
Sub2(63)



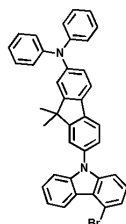
Sub2(64)



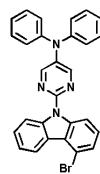
Sub2(65)



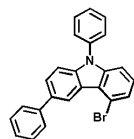
Sub2(66)



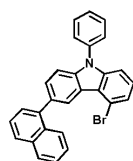
Sub2(67)



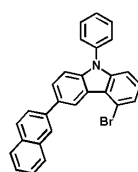
Sub2(68)



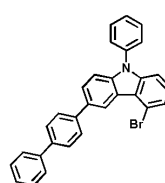
Sub2(69)



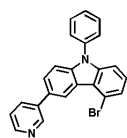
Sub2(70)



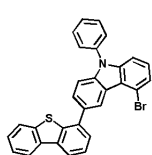
Sub2(71)



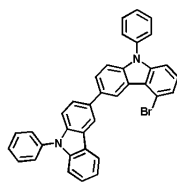
Sub2(72)



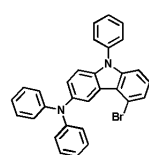
Sub2(73)



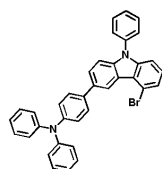
Sub2(74)



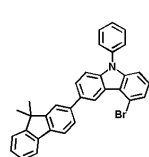
Sub2(75)



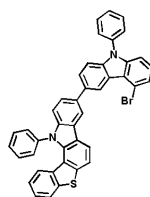
Sub2(76)



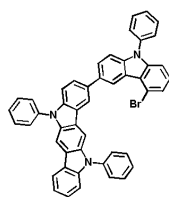
Sub2(77)



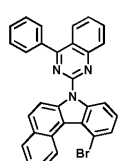
Sub2(78)



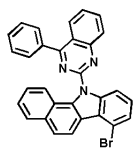
Sub2(79)



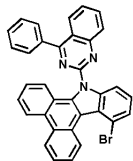
Sub2(80)



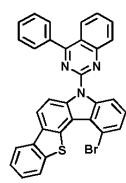
Sub2(81)



Sub2(82)



Sub2(83)



Sub2(84)

[0185] [표 2]

화합물	FD-MS	화합물	FD-MS
Sub 2(1)	m/z=321.02 (C ₁₈ H ₁₂ BrN=322.20)	Sub 2(2)	m/z=371.03 (C ₂₂ H ₁₄ BrN=372.26)
Sub 2(3)	m/z=371.03 (C ₂₂ H ₁₄ BrN=372.26)	Sub 2(4)	m/z=397.05 (C ₂₄ H ₁₆ BrN=398.29)
Sub 2(5)	m/z=476.06 (C ₂₇ H ₁₇ BrN ₄ =477.35)	Sub 2(6)	m/z=476.06 (C ₂₇ H ₁₇ BrN ₄ =477.35)
Sub 2(7)	m/z=475.07 (C ₂₈ H ₁₈ BrN ₃ =476.37)	Sub 2(8)	m/z=475.07 (C ₂₈ H ₁₈ BrN ₃ =476.37)
Sub 2(9)	m/z=475.07 (C ₂₈ H ₁₈ BrN ₃ =476.37)	Sub 2(10)	m/z=552.09 (C ₃₃ H ₂₁ BrN ₄ =553.45)
Sub 2(11)	m/z=551.10 (C ₃₄ H ₂₂ BrN ₃ =552.46)	Sub 2(12)	m/z=551.10 (C ₃₄ H ₂₂ BrN ₃ =552.46)
Sub 2(13)	m/z=513.08 (C ₃₁ H ₂₀ BrN ₃ =514.41)	Sub 2(14)	m/z=449.05 (C ₂₈ H ₁₆ BrN ₃ =450.33)
Sub 2(15)	m/z=449.05 (C ₂₈ H ₁₆ BrN ₃ =450.33)	Sub 2(16)	m/z=499.07 (C ₃₀ H ₁₈ BrN ₃ =500.39)
Sub 2(17)	m/z=499.07 (C ₃₀ H ₁₈ BrN ₃ =500.39)	Sub 2(18)	m/z=525.08 (C ₃₂ H ₂₀ BrN ₃ =526.43)
Sub 2(19)	m/z=525.08 (C ₃₂ H ₂₀ BrN ₃ =526.43)	Sub 2(20)	m/z=575.10 (C ₃₆ H ₂₂ BrN ₃ =576.48)
Sub 2(21)	m/z=575.10 (C ₃₆ H ₂₂ BrN ₃ =576.48)	Sub 2(22)	m/z=575.10 (C ₃₆ H ₂₂ BrN ₃ =576.48)
Sub 2(23)	m/z=575.10 (C ₃₆ H ₂₂ BrN ₃ =576.48)	Sub 2(24)	m/z=549.08 (C ₃₄ H ₂₀ BrN ₃ =550.45)
Sub 2(25)	m/z=565.12 (C ₃₅ H ₂₄ BrN ₃ =566.49)	Sub 2(26)	m/z=555.04 (C ₃₂ H ₁₈ BrN ₃ S=556.47)
Sub 2(27)	m/z=641.11(C ₃₈ H ₂₃ BrN ₄ =615.52)	Sub 2(28)	m/z=539.06 (C ₃₂ H ₁₈ BrN ₃ O=540.41)
Sub 2(29)	m/z=450.05 (C ₂₅ H ₁₅ BrN ₄ =451.32)	Sub 2(30)	m/z=450.05 (C ₂₅ H ₁₅ BrN ₄ =451.32)
Sub 2(31)	m/z=450.05 (C ₂₅ H ₁₅ BrN ₄ =451.32)	Sub 2(32)	m/z=450.05 (C ₂₅ H ₁₅ BrN ₄ =451.32)
Sub 2(33)	m/z=488.09 (C ₃₀ H ₂₁ BrN ₂ =489.41)	Sub 2(34)	m/z=538.10 (C ₃₄ H ₂₃ BrN ₂ =539.46)
Sub 2(35)	m/z=538.10 (C ₃₄ H ₂₃ BrN ₂ =539.46)	Sub 2(36)	m/z=564.12 (C ₃₆ H ₂₅ BrN ₂ =565.50)
Sub 2(37)	m/z=604.15 (C ₃₉ H ₂₉ BrN ₂ =605.56)	Sub 2(38)	m/z=594.08 (C ₃₆ H ₂₃ BrN ₂ S=595.55)
Sub 2(39)	m/z=489.08 (C ₂₉ H ₂₀ BrN ₃ =490.39)	Sub 2(40)	m/z=643.14 (C ₃₉ H ₂₆ BrN ₅ =644.56)
Sub 2(41)	m/z=588.12 (C ₃₈ H ₂₅ BrN ₂ =589.52)	Sub 2(42)	m/z=588.12 (C ₃₈ H ₂₅ BrN ₂ =589.52)
Sub 2(43)	m/z=614.14 (C ₄₀ H ₂₇ BrN ₂ =615.56)	Sub 2(44)	m/z=654.17 (C ₄₃ H ₃₁ BrN ₂ =655.62)
Sub 2(45)	m/z=644.09 (C ₄₀ H ₂₅ BrN ₂ S=645.6)	Sub 2(46)	m/z=539.10 (C ₃₃ H ₂₂ BrN ₃ =540.45)
Sub 2(47)	m/z=693.15 (C ₄₃ H ₂₈ BrN ₅ =694.62)	Sub 2(48)	m/z=588.12 (C ₃₈ H ₂₅ BrN ₂ =589.52)
Sub 2(49)	m/z=614.14 (C ₄₀ H ₂₇ BrN ₂ =615.56)	Sub 2(50)	m/z=654.17 (C ₄₃ H ₃₁ BrN ₂ =655.62)
Sub 2(51)	m/z=644.09 (C ₄₀ H ₂₅ BrN ₂ S=645.6)	Sub 2(52)	m/z=539.10 (C ₃₃ H ₂₂ BrN ₃ =540.45)
Sub 2(53)	m/z=693.15 (C ₄₃ H ₂₈ BrN ₅ =694.62)	Sub 2(54)	m/z=640.15 (C ₄₂ H ₂₉ BrN ₂ =641.60)
Sub 2(55)	m/z=680.18 (C ₄₅ H ₃₃ BrN ₂ =681.66)	Sub 2(56)	m/z=670.11 (C ₄₂ H ₂₇ BrN ₂ S=671.65)
Sub 2(57)	m/z=565.12 (C ₃₅ H ₂₄ BrN ₃ =566.49)	Sub 2(58)	m/z=719.17 (C ₄₅ H ₃₀ BrN ₅ =720.66)
Sub 2(59)	m/z=564.12 (C ₃₆ H ₂₅ BrN ₂ =565.50)	Sub 2(60)	m/z=640.15 (C ₄₂ H ₂₉ BrN ₂ =641.60)
Sub 2(61)	m/z=564.12 (C ₃₆ H ₂₅ BrN ₂ =565.50)	Sub 2(62)	m/z=564.12 (C ₃₆ H ₂₅ BrN ₂ =565.50)
Sub 2(63)	m/z=488.09 (C ₃₀ H ₂₁ BrN ₂ =489.41)	Sub 2(64)	m/z=488.09 (C ₃₀ H ₂₁ BrN ₂ =489.41)
Sub 2(65)	m/z=594.08 (C ₃₆ H ₂₃ BrN ₂ S=595.6)	Sub 2(66)	m/z=653.15 (C ₄₂ H ₂₈ BrN ₃ =654.60)
Sub 2(67)	m/z=604.15 (C ₃₉ H ₂₉ BrN ₂ =605.56)	Sub 2(68)	m/z=490.08 (C ₂₈ H ₁₉ BrN ₄ =491.38)
Sub 2(69)	m/z=397.05 (C ₂₄ H ₁₆ BrN=398.29)	Sub 2(70)	m/z=447.06 (C ₂₈ H ₁₈ BrN=448.35)

[0186]

Sub 2(71)	m/z=447.06 (C ₂₈ H ₁₈ BrN=448.35))	Sub 2(72)	m/z=473.08 (C ₃₀ H ₂₀ BrN=474.39)
Sub 2(73)	m/z=398.04 (C ₂₃ H ₁₅ BrN ₂ =399.28)	Sub 2(74)	m/z=503.03 (C ₃₀ H ₁₈ BrNS=504.44)
Sub 2(75)	m/z=562.10 (C ₃₆ H ₂₃ BrN ₂ =563.49)	Sub 2(76)	m/z=488.09 (C ₃₀ H ₂₁ BrN ₂ =489.41)
Sub 2(77)	m/z=564.12 (C ₃₆ H ₂₅ BrN ₂ =565.50)	Sub 2(78)	m/z=513.11 (C ₃₃ H ₂₄ BrN=514.45)
Sub 2(79)	m/z=668.09 (C ₄₂ H ₂₅ BrN ₂ S=699.6)	Sub 2(80)	m/z=727.16 (C ₄₈ H ₃₀ BrN ₃ =728.68)
Sub 2(81)	m/z=499.07 (C ₃₀ H ₁₈ BrN ₃ =500.39)	Sub 2(82)	m/z=499.07 (C ₃₀ H ₁₈ BrN ₃ =500.39)
Sub 2(83)	m/z=549.08 (C ₃₄ H ₂₀ BrN ₃ =550.45)	Sub 2(84)	m/z=555.04 (C ₃₂ H ₁₈ BrN ₃ S=556.47)

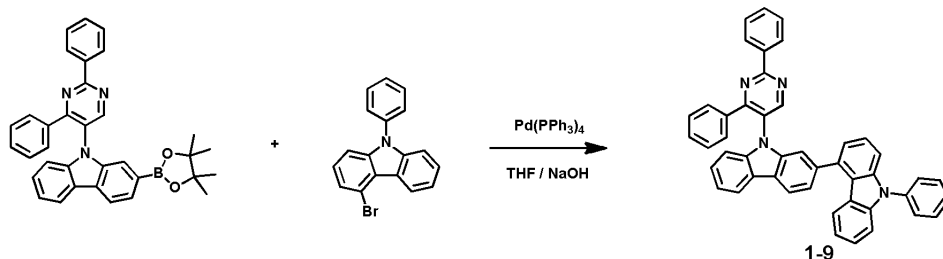
[0187]

[0188] II. 최종 생성물(Final Product)의 합성

[0189] 둥근바닥플라스크에 Sub 1 화합물 (1당량), Sub 2 화합물 (1.1당량), Pd(PPh₃)₄ (0.03~0.05당량), NaOH (3당량), THF (3mL/1mmol), 물 (1.5mL/1mmol)을 넣는다. 그런 후에 80℃ ~ 90℃ 상태에서 가열 환류시킨다. 반응이

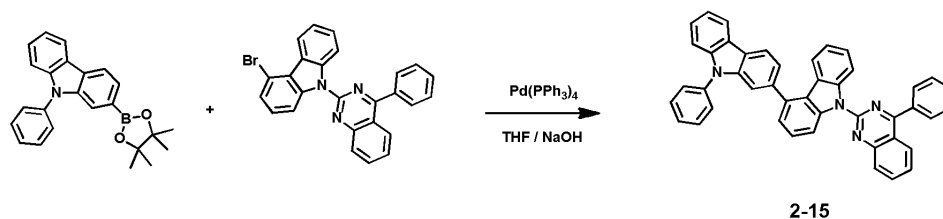
완료되면 상온에서 증류수를 넣어 희석시키고 메틸렌클로라이드와 물로 추출한다. 유기층을 $MgSO_4$ 로 건조하여 농축한 후 생성된 화합물을 silicagel column 및 재결정하여 최종 생성물을 얻었다.

1. 1-9 합성



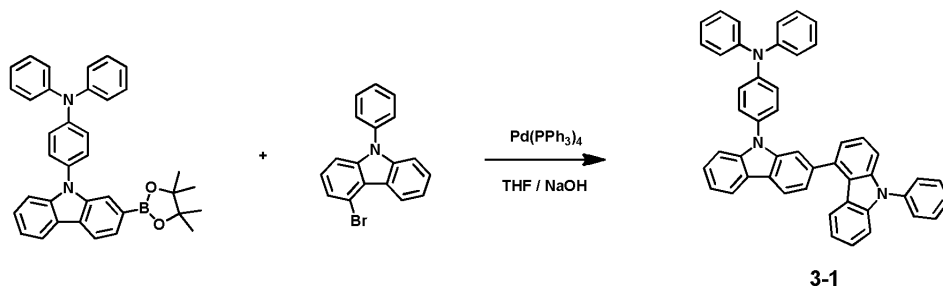
둥근바닥플라스크에 9-(2,4-diphenylpyrimidin-5-yl)-2-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-9H-carbazole (10.5g, 20mmol)을 넣고 4-bromo-9-phenyl-9H-carbazole (7.1g, 22mmol), $Pd(PPh_3)_4$ (0.03~0.05당량), NaOH (3당량), THF (3mL/1mmol), 물 (1.5mL/1mmol)을 넣는다. 그런 후에 80℃ ~ 90℃ 상태에서 가열 환류시킨다. 반응이 완료되면 상온에서 증류수를 넣어 희석시키고 메틸렌클로라이드와 물로 추출한다. 유기층을 $MgSO_4$ 로 건조하여 농축한 후 생성된 화합물을 silicagel column 및 재결정하여 생성물 10.0g (수율: 78%)을 얻었다.

2. 2-15 합성



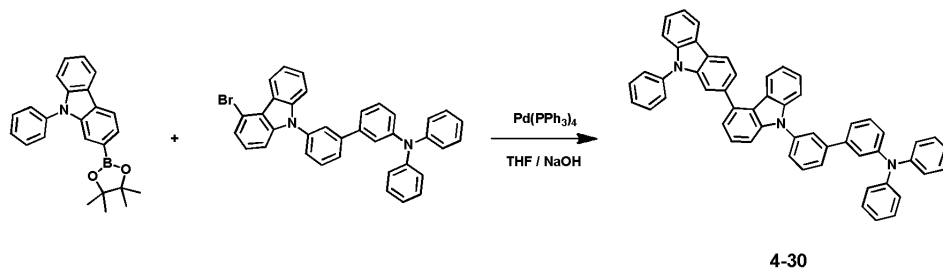
둥근바닥플라스크에 9-phenyl-2-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-9H-carbazole (7.4g, 20mmol)을 넣고 4-bromo-9-(4-phenylquinazolin-2-yl)-9H-carbazole (9.9g, 22mmol), $Pd(PPh_3)_4$ (0.03~0.05당량), NaOH (3당량), THF (3mL/1mmol), 물 (1.5mL/1mmol)을 넣는다. 그런 후에 80℃ ~ 90℃ 상태에서 가열 환류시킨다. 반응이 완료되면 상온에서 증류수를 넣어 희석시키고 메틸렌클로라이드와 물로 추출한다. 유기층을 $MgSO_4$ 로 건조하여 농축한 후 생성된 화합물을 silicagel column 및 재결정하여 생성물 9.2g (수율: 75%)을 얻었다.

3. 3-1 합성



둥근바닥플라스크에 N,N-diphenyl-4-(2-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-9H-carbazol-9-yl)aniline (10.7g, 20mmol)을 넣고 4-bromo-9-phenyl-9H-carbazole (7.1g, 22mmol), $Pd(PPh_3)_4$ (0.03~0.05당량), NaOH (3당량), THF (3mL/1mmol), 물 (1.5mL/1mmol)을 넣는다. 그런 후에 80℃ ~ 90℃ 상태에서 가열 환류시킨다. 반응이 완료되면 상온에서 증류수를 넣어 희석시키고 메틸렌클로라이드와 물로 추출한다. 유기층을 $MgSO_4$ 로 건조하여 농축한 후 생성된 화합물을 silicagel column 및 재결정하여 생성물 9.3g (수율: 71%)을 얻었다.

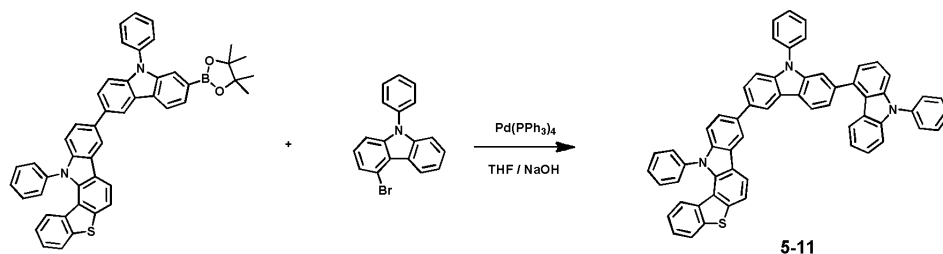
[0199] 4. 4-30 합성



[0200]

[0201] 둥근바닥플라스크에 9-phenyl-2-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-9H-carbazole (7.4g, 20mmol)을 넣고 3'-(4-bromo-9H-carbazol-9-yl)-N,N-diphenyl-[1,1'-biphenyl]-3-amine (12.4g, 22mmol), Pd(PPh₃)₄ (0.03~0.05당량), NaOH (3당량), THF (3mL/1mmol), 물 (1.5mL/1mmol)을 넣는다. 그런 후에 80℃ ~ 90℃ 상태에서 가열 환류시킨다. 반응이 완료되면 상온에서 증류수를 넣어 희석시키고 메틸렌클로라이드와 물로 추출한다. 유기층을 MgSO₄로 건조하여 농축한 후 생성된 화합물을 silicagel column 및 재결정하여 생성물 9.9g (수율: 68%)을 얻었다.

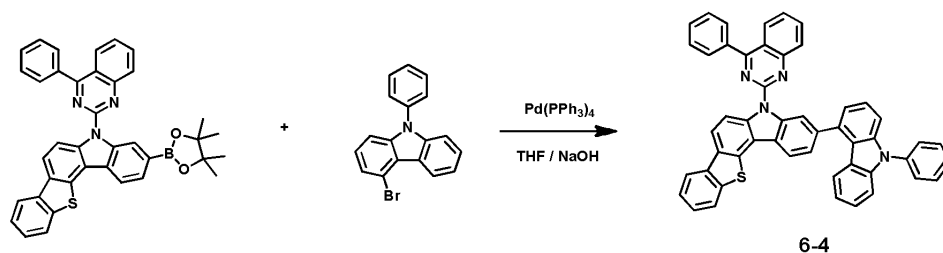
[0202] 5. 5-11 합성



[0203]

[0204] 둥근바닥플라스크에 12-phenyl-9-(9-phenyl-7-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-9H-carbazol-3-yl)-12H-benzo[4,5]thieno[3,2-a]carbazole (14.3g, 20mmol)을 넣고 4-bromo-9-phenyl-9H-carbazole (7.1g, 22mmol), Pd(PPh₃)₄ (0.03~0.05당량), NaOH (3당량), THF (3mL/1mmol), 물 (1.5mL/1mmol)을 넣는다. 그런 후에 80℃ ~ 90℃ 상태에서 가열 환류시킨다. 반응이 완료되면 상온에서 증류수를 넣어 희석시키고 메틸렌클로라이드와 물로 추출한다. 유기층을 MgSO₄로 건조하여 농축한 후 생성된 화합물을 silicagel column 및 재결정하여 생성물 11.1g (수율: 67%)을 얻었다.

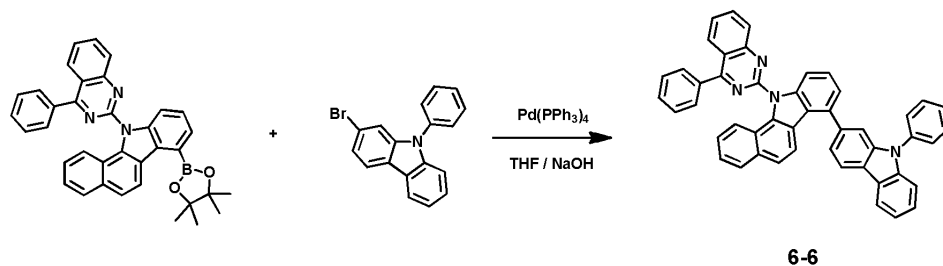
[0205] 6. 6-4 합성



[0206]

[0207] 둥근바닥플라스크에 5-(4-phenylquinazolin-2-yl)-3-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-5H-benzo[4,5]thieno[3,2-c]carbazole (12.1g, 20mmol)을 넣고 4-bromo-9-phenyl-9H-carbazole (7.1g, 22mmol), Pd(PPh₃)₄ (0.03~0.05당량), NaOH (3당량), THF (3mL/1mmol), 물 (1.5mL/1mmol)을 넣는다. 그런 후에 80℃ ~ 90℃ 상태에서 가열 환류시킨다. 반응이 완료되면 상온에서 증류수를 넣어 희석시키고 메틸렌클로라이드와 물로 추출한다. 유기층을 MgSO₄로 건조하여 농축한 후 생성된 화합물을 silicagel column 및 재결정하여 생성물 9.9g (수율: 69%)을 얻었다.

[0208] 7. 6-6 합성



[0209]

[0210] 둥근바닥플라스크에 11-(4-phenylquinazolin-2-yl)-7-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-11H-benzo[a]carbazole (10.9g, 20mmol)을 넣고 2-bromo-9-phenyl-9H-carbazole (7.1g, 22mmol), Pd(PPh₃)₄ (0.03~0.05당량), NaOH (3당량), THF (3mL/1mmol), 물 (1.5mL/1mmol)을 넣는다. 그런 후에 80℃ ~ 90℃ 상태에서 가열 환류시킨다. 반응이 완료되면 상온에서 증류수를 넣어 희석시키고 메틸렌클로라이드와 물로 추출한다. 유기층을 MgSO₄로 건조하여 농축한 후 생성된 화합물을 silicagel column 및 재결정하여 생성물 9.7g (수율: 73%)을 얻었다.

[0211] 상기와 같은 합성예에 따라 제조된 화학식 1의 최종 생성물의 FD-MS의 값은 하기 표 3과 같다.

[0212] [표 3]

화합물	FD-MS	화합물	FD-MS
1-1	m/z=484.19(C ₃₆ H ₂₄ N ₂ =484.59)	1-2	m/z=534.21(C ₄₀ H ₂₆ N ₂ =534.65)
1-3	m/z=534.21(C ₄₀ H ₂₆ N ₂ =534.65)	1-4	m/z=560.23(C ₄₂ H ₂₈ N ₂ =560.69)
1-5	m/z=639.24(C ₄₅ H ₂₉ N ₅ =639.75)	1-6	m/z=639.24(C ₄₅ H ₂₉ N ₅ =639.75)
1-7	m/z=638.25(C ₄₆ H ₃₀ N ₄ =638.76)	1-8	m/z=638.25(C ₄₆ H ₃₀ N ₄ =638.76)
1-9	m/z=638.25(C ₄₆ H ₃₀ N ₄ =638.76)	1-10	m/z=715.27(C ₅₁ H ₃₃ N ₅ =715.84)
1-11	m/z=714.28(C ₅₂ H ₃₄ N ₄ =714.85)	1-12	m/z=714.28(C ₅₂ H ₃₄ N ₄ =714.85)
1-13	m/z=676.26(C ₄₉ H ₃₂ N ₄ =676.81)	1-14	m/z=612.23(C ₄₄ H ₂₈ N ₄ =612.72)
1-15	m/z=612.23(C ₄₄ H ₂₈ N ₄ =612.72)	1-16	m/z=662.25(C ₄₈ H ₃₀ N ₄ =662.78)
1-17	m/z=662.25(C ₄₈ H ₃₀ N ₄ =662.78)	1-18	m/z=688.26(C ₅₀ H ₃₂ N ₄ =688.82)
1-19	m/z=688.26(C ₅₀ H ₃₂ N ₄ =688.82)	1-20	m/z=738.28(C ₅₄ H ₃₄ N ₄ =738.87)
1-21	m/z=738.28(C ₅₄ H ₃₄ N ₄ =738.87)	1-22	m/z=738.28(C ₅₄ H ₃₄ N ₄ =738.87)
1-23	m/z=738.28(C ₅₄ H ₃₄ N ₄ =738.87)	1-24	m/z=712.26(C ₅₂ H ₃₂ N ₄ =712.84)
1-25	m/z=728.29(C ₅₃ H ₃₆ N ₄ =728.88)	1-26	m/z=718.22(C ₅₀ H ₃₀ N ₄ S=718.87)
1-27	m/z=777.29(C ₅₆ H ₃₅ N ₅ =777.91)	1-28	m/z=702.24(C ₅₀ H ₃₀ N ₄ O=702.80)
1-29	m/z=663.24(C ₄₇ H ₂₉ N ₅ =663.77)	1-30	m/z=663.24(C ₄₇ H ₂₉ N ₅ =663.77)
1-31	m/z=663.24(C ₄₇ H ₂₉ N ₅ =663.77)	1-32	m/z=663.24(C ₄₇ H ₂₉ N ₅ =663.77)
		2-2	m/z=534.21(C ₄₀ H ₂₆ N ₂ =534.65)
2-3	m/z=534.21(C ₄₀ H ₂₆ N ₂ =534.65)	2-4	m/z=560.23(C ₄₂ H ₂₈ N ₂ =560.69)
2-5	m/z=639.24(C ₄₅ H ₂₉ N ₅ =639.75)	2-6	m/z=639.24(C ₄₅ H ₂₉ N ₅ =639.75)
2-7	m/z=638.25(C ₄₆ H ₃₀ N ₄ =638.76)	2-8	m/z=638.25(C ₄₆ H ₃₀ N ₄ =638.76)
2-9	m/z=638.25(C ₄₆ H ₃₀ N ₄ =638.76)	2-10	m/z=715.27(C ₅₁ H ₃₃ N ₅ =715.84)
2-11	m/z=714.28(C ₅₂ H ₃₄ N ₄ =714.85)	2-12	m/z=714.28(C ₅₂ H ₃₄ N ₄ =714.85)
2-13	m/z=676.26(C ₄₉ H ₃₂ N ₄ =676.81)	2-14	m/z=612.23(C ₄₄ H ₂₈ N ₄ =612.72)
2-15	m/z=612.23(C ₄₄ H ₂₈ N ₄ =612.72)	2-16	m/z=662.25(C ₄₈ H ₃₀ N ₄ =662.78)
2-17	m/z=662.25(C ₄₈ H ₃₀ N ₄ =662.78)	2-18	m/z=688.26(C ₅₀ H ₃₂ N ₄ =688.82)
2-19	m/z=688.26(C ₅₀ H ₃₂ N ₄ =688.82)	2-20	m/z=738.28(C ₅₄ H ₃₄ N ₄ =738.87)
2-21	m/z=738.28(C ₅₄ H ₃₄ N ₄ =738.87)	2-22	m/z=738.28(C ₅₄ H ₃₄ N ₄ =738.87)
2-23	m/z=738.28(C ₅₄ H ₃₄ N ₄ =738.87)	2-24	m/z=712.26(C ₅₂ H ₃₂ N ₄ =712.84)
2-25	m/z=728.29(C ₅₃ H ₃₆ N ₄ =728.88)	2-26	m/z=718.22(C ₅₀ H ₃₀ N ₄ S=718.87)
2-27	m/z=777.29(C ₅₆ H ₃₅ N ₅ =777.91)	2-28	m/z=702.24(C ₅₀ H ₃₀ N ₄ O=702.80)
2-29	m/z=663.24(C ₄₇ H ₂₉ N ₅ =663.77)	2-30	m/z=663.24(C ₄₇ H ₂₉ N ₅ =663.77)
2-31	m/z=663.24(C ₄₇ H ₂₉ N ₅ =663.77)	2-32	m/z=663.24(C ₄₇ H ₂₉ N ₅ =663.77)
3-1	m/z=651.27(C ₄₈ H ₃₃ N ₃ =651.80)	3-2	m/z=701.28(C ₅₂ H ₃₅ N ₃ =701.85)
3-3	m/z=701.28(C ₅₂ H ₃₅ N ₃ =701.85)	3-4	m/z=727.30(C ₅₄ H ₃₇ N ₃ =727.89)
3-5	m/z=767.33(C ₅₇ H ₄₁ N ₃ =767.96)	3-6	m/z=757.26(C ₅₄ H ₃₅ N ₃ S=757.94)
3-7	m/z=652.26(C ₄₇ H ₃₂ N ₄ =652.78)	3-8	m/z=806.32(C ₅₇ H ₃₈ N ₆ =806.95)

[0213]

3-9	m/z=751.30(C ₅₆ H ₃₇ N ₃ =751.91)	3-10	m/z=751.30(C ₅₆ H ₃₇ N ₃ =751.91)
3-11	m/z=777.31(C ₅₈ H ₃₉ N ₃ =777.95)	3-12	m/z=187.35(C ₆₁ H ₄₃ N ₃ =818.01)
3-13	m/z=807.27(C ₅₈ H ₃₇ N ₃ S=808.00)	3-14	m/z=702.28(C ₅₁ H ₃₄ N ₄ =702.84)
3-15	m/z=856.33(C ₆₁ H ₄₀ N ₆ =857.01)	3-16	m/z=751.30(C ₅₆ H ₃₇ N ₃ =751.91)
3-17	m/z=777.31(C ₅₈ H ₃₉ N ₃ =777.95)	3-18	m/z=817.35(C ₆₁ H ₄₃ N ₃ =818.01)
3-19	m/z=807.27(C ₅₈ H ₃₇ N ₃ S=808.00)	3-20	m/z=702.28(C ₅₁ H ₃₄ N ₄ =702.84)
3-21	m/z=856.33(C ₆₁ H ₄₀ N ₆ =857.01)	3-22	m/z=803.33(C ₆₀ H ₄₁ N ₃ =803.99)
3-23	m/z=843.36(C ₆₃ H ₄₅ N ₃ =844.05)	3-24	m/z=833.29(C ₆₀ H ₃₉ N ₃ S=834.04)
3-25	m/z=728.29(C ₅₃ H ₃₆ N ₄ =728.88)	3-26	m/z=882.35(C ₆₃ H ₄₂ N ₆ =883.05)
3-27	m/z=727.30(C ₅₄ H ₃₇ N ₃ =727.89)	3-28	m/z=803.33(C ₆₀ H ₄₁ N ₃ =803.99)
3-29	m/z=727.30(C ₅₄ H ₃₇ N ₃ =727.89)	3-30	m/z=727.30(C ₅₄ H ₃₇ N ₃ =727.89)
3-31	m/z=651.27(C ₄₈ H ₃₃ N ₃ =651.80)	3-32	m/z=651.27(C ₄₈ H ₃₃ N ₃ =651.80)
3-33	m/z=757.26(C ₅₄ H ₃₅ N ₃ S=757.94)	3-34	m/z=816.33(C ₆₀ H ₄₀ N ₄ =816.99)
3-35	m/z=767.33(C ₅₇ H ₄₁ N ₃ =767.96)	3-36	m/z=653.26(C ₄₆ H ₃₁ N ₅ =653.77)
4-1	m/z=651.27(C ₄₈ H ₃₃ N ₃ =651.80)	4-2	m/z=701.28(C ₅₂ H ₃₅ N ₃ =701.85)
4-3	m/z=701.28(C ₅₂ H ₃₅ N ₃ =701.85)	4-4	m/z=727.30(C ₅₄ H ₃₇ N ₃ =727.89)
4-5	m/z=767.33(C ₅₇ H ₄₁ N ₃ =767.96)	4-6	m/z=757.26(C ₅₄ H ₃₅ N ₃ S=757.94)
4-7	m/z=652.26(C ₄₇ H ₃₂ N ₄ =652.78)	4-8	m/z=806.32(C ₅₇ H ₃₈ N ₆ =806.95)
4-9	m/z=751.30(C ₅₆ H ₃₇ N ₃ =751.91)	4-10	m/z=751.30(C ₅₆ H ₃₇ N ₃ =751.91)
4-11	m/z=777.31(C ₅₈ H ₃₉ N ₃ =777.95)	4-12	m/z=187.35(C ₆₁ H ₄₃ N ₃ =818.01)
4-13	m/z=807.27(C ₅₈ H ₃₇ N ₃ S=808.00)	4-14	m/z=702.28(C ₅₁ H ₃₄ N ₄ =702.84)
4-15	m/z=856.33(C ₆₁ H ₄₀ N ₆ =857.01)	4-16	m/z=751.30(C ₅₆ H ₃₇ N ₃ =751.91)
4-17	m/z=777.31(C ₅₈ H ₃₉ N ₃ =777.95)	4-18	m/z=817.35(C ₆₁ H ₄₃ N ₃ =818.01)
4-19	m/z=807.27(C ₅₈ H ₃₇ N ₃ S=808.00)	4-20	m/z=702.28(C ₅₁ H ₃₄ N ₄ =702.84)
4-21	m/z=856.33(C ₆₁ H ₄₀ N ₆ =857.01)	4-22	m/z=803.33(C ₆₀ H ₄₁ N ₃ =803.99)
4-23	m/z=843.36(C ₆₃ H ₄₅ N ₃ =844.05)	4-24	m/z=833.29(C ₆₀ H ₃₉ N ₃ S=834.04)
4-25	m/z=728.29(C ₅₃ H ₃₆ N ₄ =728.88)	4-26	m/z=882.35(C ₆₃ H ₄₂ N ₆ =883.05)
4-27	m/z=727.30(C ₅₄ H ₃₇ N ₃ =727.89)	4-28	m/z=803.33(C ₆₀ H ₄₁ N ₃ =803.99)
4-29	m/z=727.30(C ₅₄ H ₃₇ N ₃ =727.89)	4-30	m/z=727.30(C ₅₄ H ₃₇ N ₃ =727.89)
4-31	m/z=651.27(C ₄₈ H ₃₃ N ₃ =651.80)	4-32	m/z=651.27(C ₄₈ H ₃₃ N ₃ =651.80)
4-33	m/z=757.26(C ₅₄ H ₃₅ N ₃ S=757.94)	4-34	m/z=816.33(C ₆₀ H ₄₀ N ₄ =816.99)
4-35	m/z=767.33(C ₅₇ H ₄₁ N ₃ =767.96)	4-36	m/z=653.26(C ₄₆ H ₃₁ N ₅ =653.77)
5-1	m/z=560.23(C ₄₂ H ₂₈ N ₂ =560.69)	5-2	m/z=610.24(C ₄₆ H ₃₀ N ₂ =610.74)
5-3	m/z=610.24(C ₄₆ H ₃₀ N ₂ =610.74)	5-4	m/z=636.26(C ₄₈ H ₃₂ N ₂ =636.78)
5-5	m/z=561.22(C ₄₁ H ₂₇ N ₃ =561.67)	5-6	m/z=666.21(C ₄₈ H ₃₀ N ₂ S=666.83)
5-7	m/z=725.28(C ₅₄ H ₃₅ N ₃ =725.88)	5-8	m/z=651.27(C ₄₈ H ₃₃ N ₃ =651.80)

5-9	m/z=727.30(C ₅₄ H ₃₇ N ₃ =727.89)	5-10	m/z=676.29(C ₅₁ H ₃₆ N ₂ =676.84)
5-11	m/z=831.27(C ₆₀ H ₃₇ N ₃ S=832.02)	5-12	m/z=890.34(C ₆₆ H ₄₂ N ₄ =891.07)
5-13	m/z=560.23(C ₄₂ H ₂₈ N ₂ =560.69)	5-14	m/z=610.24(C ₄₆ H ₃₀ N ₂ =610.74)
5-15	m/z=610.24(C ₄₆ H ₃₀ N ₂ =610.74)	5-16	m/z=636.26(C ₄₈ H ₃₂ N ₂ =636.78)
5-17	m/z=561.22(C ₄₁ H ₂₇ N ₃ =561.67)	5-18	m/z=666.21(C ₄₈ H ₃₀ N ₂ S=666.83)
5-19	m/z=725.28(C ₅₄ H ₃₅ N ₃ =725.88)	5-20	m/z=651.27(C ₄₈ H ₃₃ N ₃ =651.80)
5-21	m/z=727.30(C ₅₄ H ₃₇ N ₃ =727.89)	5-22	m/z=676.29(C ₅₁ H ₃₆ N ₂ =676.84)
5-23	m/z=831.27(C ₆₀ H ₃₇ N ₃ S=832.02)	5-24	m/z=890.34(C ₆₆ H ₄₂ N ₄ =891.07)
6-1	m/z=662.25(C ₄₈ H ₃₀ N ₄ =662.78)	6-2	m/z=662.25(C ₄₈ H ₃₀ N ₄ =662.78)
6-3	m/z=712.26(C ₅₂ H ₃₂ N ₄ =712.84)	6-4	m/z=718.22(C ₅₀ H ₃₀ N ₄ S=718.87)
6-5	m/z=662.25(C ₄₈ H ₃₀ N ₄ =662.78)	6-6	m/z=662.25(C ₄₈ H ₃₀ N ₄ =662.78)
6-7	m/z=712.26(C ₅₂ H ₃₂ N ₄ =712.84)	6-8	m/z=718.22(C ₅₀ H ₃₀ N ₄ S=718.87)

[0216] 유기전기소자의 제조평가

[0217] [실험예 I] 그린유기발광소자(정공수송층)

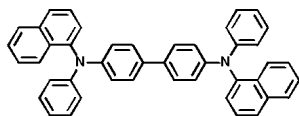
[0218] 유기 기판에 형성된 ITO층(양극) 위에 $N^1-(naphthalen-2-yl)-N^4,N^4-bis(4-(naphthalen-2-yl(phenyl)amino)phenyl)-N^1-phenylbenzene-1,4-diamine$ (이하, "2-TNATA"로 약기함)을 60nm 두께로 진공증착하여 정공주입층을 형성한 후, 상기 정공주입층 상에 본 발명에 따른 화합물을 60nm 두께로 진공증착하여 정공수송층을 형성하였다. 이어서, 상기 정공수송층 상에 4,4'-N,N'-dicarbazole-biphenyl (이하, "CBP"로 약기함)을 호스트로, tris(2-phenylpyridine)-iridium (이하, "Ir(ppy)₃"로 약기함)을 도판트로 하여 90:10 중량비로 도핑한 혼합물을 30nm 두께로 진공증착하여 발광층을 형성하였다. 이어서, 상기 발광층 상에 (1,1'-비스페닐)-4-올레이트)비스(2-메틸-8-퀴놀린올레이트)알루미늄 (이하 "BALq"로 약기함)을 10nm 두께로 진공증착하여 정공저지층을 형성하고, 상기 정공저지층 상에 트리스(8-퀴놀리놀)알루미늄 (이하 "Alq₃"로 약칭함)을 40nm 두께로 진공증착하여 전자수송층을 형성하였다. 이후, 상기 전자수송층 상에 할로젠화 알칼리 금속인 LiF를 0.2nm 두께로 증착하여 전자주입층을 형성하고, 이어서 Al을 150nm 두께로 증착하여 음극을 형성함으로써 유기전기발광소자를 제조하였다.

[0219] [비교예 I] 비교예 (1) ~ (4)

[0220] 비교예 (1)

[0221] 정공수송층 물질로 본 발명에 따른 화합물 대신 하기 비교화합물 A를 사용한 것을 제외하고는 상기 실험예 I 과 동일하게 유기전기발광소자를 제작하였다.

[0222] <비교화합물 A>

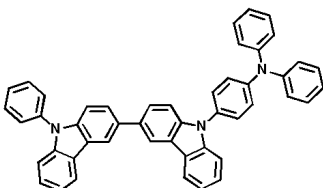


[0223]

[0224] 비교예 (2)

[0225] 정공수송층 물질로 본 발명에 따른 화합물 대신 하기 비교화합물 B를 사용한 것을 제외하고는 상기 실험예 I 과 동일하게 유기전기발광소자를 제작하였다.

[0226] <비교화합물 B>

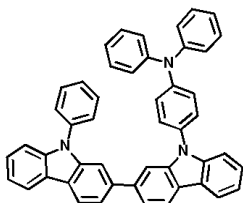


[0227]

[0228] 비교예 (3)

[0229] 정공수송층 물질로 본 발명에 따른 화합물 대신 하기 비교화합물 C를 사용한 것을 제외하고는 상기 실험예 I 과 동일하게 유기전기발광소자를 제작하였다.

[0230] <비교화합물 C>

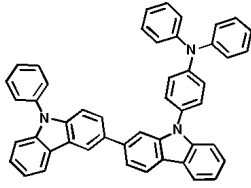


[0231]

[0232] 비교예 (4)

[0233] 정공수송층 물질로 본 발명에 따른 화합물 대신 하기 비교화합물 D를 사용한 것을 제외하고는 상기 실험예 I 과 동일하게 유기전기발광소자를 제작하였다.

[0234] <비교화합물 D>



[0235]

[0236] 이와 같이 제조된 실험예 I (실험예(1) 내지 실험예(76)) 및 비교예 I (비교예(1) 내지 비교예(4))에 의한 유기 전기발광소자들에 순바이어스 직류전압을 가하여 포토리서치(photoresearch)사의 PR-650으로 전기발광(EL) 특성을 측정하였으며, 또한 5000cd/m² 기준 휘도에서 맥사이언스사에서 제조된 수명 측정 장비를 통해 T95 수명을 측정하였다.

[0237] 하기 표 4는 본 발명에 따른 화합물을 적용한 실험예 I (실험예(1) 내지 실험예(76)) 및 비교예 I (비교예(1) 내지 비교예(4))에 대한 소자제작 및 그 평가 결과를 나타낸다.

[0238] [표 4]

	화합물	Voltage (V)	Current Density (mA/m ²)	Brightness (cd/m ²)	Efficiency (cd/A)	Lifetime T(95)	CIE (x, y)
비교예(1)	비교화합물 A	5.7	21.7	5000.0	23.0	68.3	(0.31, 0.60)
비교예(2)	비교화합물 B	5.3	17.6	5000.0	28.5	89.0	(0.31, 0.61)
비교예(3)	비교화합물 C	5.5	18.3	5000.0	27.3	80.7	(0.31, 0.60)
비교예(4)	비교화합물 D	5.6	18.3	5000.0	27.4	87.9	(0.33, 0.61)
실험예(1)	화합물(3-1)	5.0	11.7	5000.0	42.7	97.0	(0.30, 0.60)
실험예(2)	화합물(3-2)	5.2	11.2	5000.0	44.7	146.6	(0.31, 0.61)
실험예(3)	화합물(3-3)	5.0	15.9	5000.0	31.4	101.2	(0.31, 0.60)
실험예(4)	화합물(3-4)	5.3	13.9	5000.0	36.1	125.9	(0.33, 0.61)
실험예(5)	화합물(3-5)	5.2	11.1	5000.0	45.0	126.3	(0.32, 0.61)
실험예(6)	화합물(3-6)	5.1	14.3	5000.0	35.0	115.6	(0.33, 0.60)
실험예(7)	화합물(3-7)	5.2	14.7	5000.0	33.9	139.2	(0.32, 0.61)
실험예(8)	화합물(3-8)	5.1	16.0	5000.0	31.2	96.9	(0.31, 0.60)
실험예(9)	화합물(3-9)	5.0	15.1	5000.0	33.1	133.3	(0.31, 0.61)
실험예(10)	화합물(3-10)	5.2	15.5	5000.0	32.4	111.5	(0.31, 0.60)
실험예(11)	화합물(3-11)	5.1	11.3	5000.0	44.4	138.7	(0.33, 0.61)
실험예(12)	화합물(3-12)	5.3	11.5	5000.0	43.5	113.5	(0.30, 0.60)
실험예(13)	화합물(3-13)	5.3	11.6	5000.0	43.2	138.6	(0.31, 0.61)
실험예(14)	화합물(3-14)	5.2	11.2	5000.0	44.5	114.9	(0.31, 0.60)
실험예(15)	화합물(3-15)	5.1	13.7	5000.0	36.5	127.6	(0.33, 0.61)
실험예(16)	화합물(3-16)	5.1	15.0	5000.0	33.4	104.2	(0.32, 0.61)
실험예(17)	화합물(3-17)	5.1	11.2	5000.0	44.6	96.7	(0.33, 0.60)
실험예(18)	화합물(3-18)	5.1	11.2	5000.0	44.5	116.5	(0.32, 0.61)
실험예(19)	화합물(3-19)	5.1	13.8	5000.0	36.2	113.4	(0.31, 0.60)
실험예(20)	화합물(3-20)	5.0	13.9	5000.0	36.1	92.0	(0.31, 0.61)
실험예(21)	화합물(3-21)	5.2	14.1	5000.0	35.5	144.8	(0.31, 0.60)
실험예(22)	화합물(3-22)	5.1	16.1	5000.0	31.1	130.7	(0.33, 0.61)
실험예(23)	화합물(3-23)	5.0	12.6	5000.0	39.6	127.1	(0.30, 0.60)
실험예(24)	화합물(3-24)	5.2	14.4	5000.0	34.7	122.8	(0.31, 0.61)
실험예(25)	화합물(3-25)	5.2	11.7	5000.0	42.6	136.3	(0.31, 0.60)
실험예(26)	화합물(3-26)	5.1	11.1	5000.0	44.9	146.0	(0.33, 0.61)
실험예(27)	화합물(3-27)	5.2	12.2	5000.0	40.9	143.4	(0.32, 0.61)
실험예(28)	화합물(3-28)	5.2	13.8	5000.0	36.2	111.4	(0.33, 0.60)
실험예(29)	화합물(3-29)	5.2	12.2	5000.0	40.9	112.0	(0.31, 0.61)
실험예(30)	화합물(3-30)	5.2	11.2	5000.0	44.8	94.1	(0.31, 0.60)
실험예(31)	화합물(3-31)	5.1	11.3	5000.0	44.3	118.2	(0.33, 0.61)
실험예(32)	화합물(3-32)	5.2	13.2	5000.0	37.9	141.1	(0.32, 0.61)
실험예(33)	화합물(3-33)	5.1	11.8	5000.0	42.3	110.6	(0.33, 0.60)

[0239]

실험예(34)	화합물(3-34)	5.1	11.9	5000.0	42.1	108.9	(0.32, 0.61)
실험예(35)	화합물(3-35)	5.1	11.5	5000.0	43.6	148.7	(0.31, 0.60)
실험예(36)	화합물(3-36)	5.1	15.7	5000.0	31.8	122.5	(0.31, 0.61)
실험예(37)	화합물(4-1)	5.2	13.7	5000.0	36.6	104.3	(0.31, 0.60)
실험예(38)	화합물(4-2)	5.1	14.9	5000.0	33.7	120.6	(0.33, 0.61)
실험예(39)	화합물(4-3)	5.2	12.5	5000.0	40.0	133.3	(0.30, 0.60)
실험예(40)	화합물(4-4)	5.2	13.5	5000.0	37.1	91.1	(0.31, 0.61)
실험예(41)	화합물(4-5)	5.1	12.9	5000.0	38.8	104.3	(0.31, 0.60)
실험예(42)	화합물(4-6)	5.0	12.8	5000.0	39.0	92.4	(0.33, 0.61)
실험예(43)	화합물(4-7)	5.2	13.0	5000.0	38.3	106.2	(0.32, 0.61)
실험예(44)	화합물(4-8)	5.3	15.4	5000.0	32.4	102.1	(0.33, 0.60)
실험예(45)	화합물(4-9)	5.1	13.6	5000.0	36.6	138.1	(0.32, 0.61)
실험예(46)	화합물(4-10)	5.0	15.5	5000.0	32.2	121.7	(0.31, 0.60)
실험예(47)	화합물(4-11)	5.1	13.7	5000.0	36.6	136.2	(0.31, 0.61)
실험예(48)	화합물(4-12)	5.1	16.0	5000.0	31.3	137.8	(0.31, 0.60)
실험예(49)	화합물(4-13)	5.3	12.7	5000.0	39.4	133.8	(0.33, 0.61)
실험예(50)	화합물(4-14)	5.1	15.9	5000.0	31.5	117.2	(0.30, 0.60)
실험예(51)	화합물(4-15)	5.2	14.1	5000.0	35.3	125.6	(0.31, 0.61)
실험예(52)	화합물(4-16)	5.1	12.6	5000.0	39.8	94.0	(0.31, 0.60)
실험예(53)	화합물(4-17)	5.2	12.9	5000.0	38.8	102.5	(0.33, 0.61)
실험예(54)	화합물(4-18)	5.1	14.5	5000.0	34.5	97.1	(0.32, 0.61)
실험예(55)	화합물(4-19)	5.2	12.1	5000.0	41.4	132.2	(0.33, 0.60)
실험예(56)	화합물(4-20)	5.1	11.4	5000.0	44.0	90.6	(0.32, 0.61)
실험예(57)	화합물(4-21)	5.0	15.3	5000.0	32.7	90.5	(0.31, 0.60)
실험예(58)	화합물(4-22)	5.0	11.6	5000.0	43.2	110.5	(0.33, 0.61)
실험예(59)	화합물(4-23)	5.3	15.7	5000.0	31.9	149.9	(0.30, 0.60)
실험예(60)	화합물(4-24)	5.0	14.7	5000.0	34.1	94.5	(0.31, 0.61)
실험예(61)	화합물(4-25)	5.3	12.7	5000.0	39.4	112.1	(0.31, 0.60)
실험예(62)	화합물(4-26)	5.1	13.3	5000.0	37.6	123.1	(0.33, 0.61)
실험예(63)	화합물(4-27)	5.2	12.6	5000.0	39.7	141.6	(0.32, 0.61)
실험예(64)	화합물(4-28)	5.1	11.3	5000.0	44.1	135.6	(0.33, 0.60)
실험예(65)	화합물(4-29)	5.2	12.5	5000.0	40.0	141.0	(0.32, 0.61)
실험예(66)	화합물(4-30)	5.1	12.3	5000.0	40.5	131.6	(0.31, 0.60)
실험예(67)	화합물(4-31)	5.1	12.5	5000.0	40.1	121.7	(0.31, 0.61)
실험예(68)	화합물(4-32)	5.2	13.6	5000.0	36.7	144.1	(0.31, 0.60)
실험예(69)	화합물(4-33)	5.0	14.6	5000.0	34.2	111.8	(0.33, 0.61)
실험예(70)	화합물(4-34)	5.2	13.2	5000.0	37.8	106.7	(0.30, 0.60)
실험예(71)	화합물(4-35)	5.2	13.4	5000.0	37.4	97.3	(0.31, 0.61)
실험예(72)	화합물(4-36)	5.0	11.1	5000.0	44.9	129.0	(0.31, 0.60)

실험예(73)	화합물(5-8)	5.1	13.3	5000.0	37.6	104.0	(0.33, 0.61)
실험예(74)	화합물(5-9)	5.0	11.4	5000.0	43.9	140.1	(0.32, 0.61)
실험예(75)	화합물(5-20)	5.1	13.2	5000.0	37.8	111.6	(0.33, 0.61)
실험예(76)	화합물(5-21)	5.3	15.8	5000.0	31.7	110.3	(0.30, 0.60)

상기 표 4의 결과로부터 알 수 있듯이, 본 발명의 유기전기발광소자용 재료를 정공수송층으로 사용한 유기전기 발광소자는 높은 발광효율, 낮은 구동전압 및 수명을 현저히 개선시킬 수 있다.

즉, NPB인 비교화합물A, 3-3'위치에 치환된 Biscarbazole인 비교화합물 B, 2-2'위치에 치환된 Biscarbazole인 비교화합물 C, 2-3'위치에 치환된 Biscarbazole인 비교화합물D 보다 2-4'위치에 치환된 Biscarbazole인 불 발 명에 따른 화합물이 우수한 소자결과를 나타내었다.

[0244] <비교화합물 B> <비교화합물 C> <비교화합물 D> <1-1>

[0245]

[0246]

이는 화합물의 꺾인 위치로 설명할 수 있는데, 상기 그림(화학식 중 굵은 부분)과 같이 비교화합물 B는 meta, 비교화합물 C는 para, 비교화합물 D는 meta인 반면 자사 발명 화합물은 ortho 위치로 비교 화합물들에 비해 꺾인 각도가 가장 큰 것을 확인할 수 있다.

[0247]

이는 2개의 카바졸이 연결된 위치에 따른 결합각에 따라 밴드갭(band gap) 및 T1 값의 차이가 발생하여, 효율 및 수명에 따른 차이가 발생하는 것으로, 효율 및 수명은 o-(ortho) > m-(meta) > p-(para) 순서로 나타나는 것을 확인할 수 있다.

[0248]

따라서, 밴드갭(band gap)과 T1 값이 커질수록 전자차단(electron blocking) 능력이 커지며, 비교적 낮은 HOMO 값을 갖게 되며, 이로 인해 발광층 내 전하균형(charge balance)이 좋아져 효율 및 수명이 상승한 것으로 판단된다.

[0249]

[실험예 II] 레드유기발광소자(발광보조층)

[0250]

유기 기판에 형성된 ITO층(양극) 위에 2-TNATA를 60nm 두께로 진공증착하여 정공주입층을 형성한 후, 상기 정공주입층 상에 4,4-비스[N-(1-나프틸)-N-페닐아미노]비페닐 (이하 "NPD"로 약기함)을 60nm 두께로 진공증착하여 정공수송층을 형성하였다. 다음으로, 상기 정공수송층 상에 본 발명에 따른 화합물을 20nm 두께로 진공증착하여 발광보조층을 형성하였다. 이어서, 상기 발광보조층 상에 CBP를 호스트로, bis-(1-phenylisoquinolyl)iridium(III)acetylacetonate (이하 "(piq)₂Ir(acac)"로 약기함)를 도판트로 하여 95:5 중량 비로 도핑한 혼합물을 30nm 두께로 진공증착하여 발광층을 형성하였다. 이어서, 상기 발광층 상에 BAlq를 10nm 두께로 진공증착하여 정공저지층을 형성하고, 상기 정공저지층 상에 Alq₃을 40nm 두께로 진공증착하여 전자수송층을 형성하였다. 이후, 상기 전자수송층 상에 할로젠화 알칼리 금속인 LiF를 0.2nm 두께로 증착하여 전자주입층을 형성하고, 이어서 Al을 150nm 두께로 증착하여 음극을 형성함으로써 유기전기발광소자를 제조하였다.

[0251]

[비교예 II] 비교예 (5) ~ (8)

[0252]

비교예 (5)

[0253]

발광보조층을 형성하지 않은 것을 제외하고는 상기 실험예 II와 동일하게 유기전기발광소자를 제작하였다.

[0254]

비교예 (6)

[0255]

발광보조층 물질로 본 발명에 따른 화합물 대신 상기 비교화합물 B를 사용한 것을 제외하고는 상기 실험예 II와 동일하게 유기전기발광소자를 제작하였다.

[0256]

비교예 (7)

[0257]

발광보조층 물질로 본 발명에 따른 화합물 대신 상기 비교화합물 C를 사용한 것을 제외하고는 상기 실험예 II와 동일하게 유기전기발광소자를 제작하였다.

[0258]

비교예 (8)

[0259]

발광보조층 물질로 본 발명에 따른 화합물 대신 상기 비교화합물 D를 사용한 것을 제외하고는 상기 실험예 II와 동일하게 유기전기발광소자를 제작하였다.

[0260]

이와 같이 제조된 실험예 II(실험예(77) 내지 실험예(114)) 및 비교예 II(비교예(5) 내지 비교예(8))에 의한 유기전기발광소자들에 순바이어스 직류전압을 가하여 포토리서치(photorsearch)사의 PR-650으로 전기발광(EL) 특성을 측정하였으며, 또한 2500cd/m² 기준 휘도에서 맥사이언스사에서 제조된 수명 측정 장비를 통해 T95 수명을 측정하였다.

[0261]

하기 표 5는 본 발명에 따른 화합물을 적용한 실험예 II(실험예(77) 내지 실험예(114)) 및 비교예 II(비교예(5) 내지 비교예(8))에 대한 소자제작 및 그 평가 결과를 나타낸다.

[0262] [표 5]

	화합물	Voltage (V)	Current Density (mA/cm ²)	Brightness (cd/m ²)	Efficiency (cd/A)	Lifetime T(95)	CIE (x, y)
비교예(5)	-	6.5	34.2	2500.0	7.3	78.7	(0.66, 0.32)
비교예(6)	비교화합물 B	6.5	26.8	2500.0	9.3	94.6	(0.67, 0.32)
비교예(7)	비교화합물 C	6.7	27.3	2500.0	9.2	97.1	(0.66, 0.32)
비교예(8)	비교화합물 D	6.4	25.6	2500.0	9.8	92.5	(0.66, 0.33)
실험예(77)	화합물(3-1)	6.5	18.4	2500.0	13.6	108.6	(0.65, 0.32)
실험예(78)	화합물(3-2)	6.6	24.3	2500.0	10.3	135.4	(0.66, 0.32)
실험예(79)	화합물(3-3)	6.5	22.8	2500.0	11.0	133.9	(0.66, 0.33)
실험예(80)	화합물(3-4)	6.3	23.6	2500.0	10.6	121.2	(0.66, 0.32)
실험예(81)	화합물(3-5)	6.4	22.5	2500.0	11.1	101.5	(0.65, 0.32)
실험예(82)	화합물(3-6)	6.4	16.8	2500.0	14.9	118.9	(0.66, 0.32)
실험예(83)	화합물(3-7)	6.5	18.7	2500.0	13.4	119.6	(0.66, 0.32)
실험예(84)	화합물(3-8)	6.7	21.8	2500.0	11.5	113.7	(0.67, 0.32)
실험예(85)	화합물(3-9)	6.5	17.9	2500.0	14.0	112.8	(0.66, 0.32)
실험예(86)	화합물(3-10)	6.6	22.8	2500.0	11.0	138.8	(0.66, 0.32)
실험예(87)	화합물(3-11)	6.4	20.5	2500.0	12.2	116.9	(0.66, 0.33)
실험예(88)	화합물(3-12)	6.7	19.1	2500.0	13.1	108.6	(0.66, 0.32)
실험예(89)	화합물(3-13)	6.4	19.0	2500.0	13.2	104.1	(0.65, 0.32)
실험예(90)	화합물(3-14)	6.6	21.1	2500.0	11.9	142.6	(0.66, 0.32)
실험예(91)	화합물(3-15)	6.6	19.2	2500.0	13.0	149.3	(0.66, 0.32)
실험예(92)	화합물(3-16)	6.7	17.2	2500.0	14.6	143.2	(0.67, 0.32)
실험예(93)	화합물(3-17)	6.6	17.2	2500.0	14.5	117.5	(0.66, 0.32)
실험예(94)	화합물(3-18)	6.4	17.2	2500.0	14.5	120.0	(0.67, 0.32)
실험예(95)	화합물(3-19)	6.6	19.4	2500.0	12.9	123.7	(0.66, 0.32)
실험예(96)	화합물(3-20)	6.5	19.5	2500.0	12.8	126.8	(0.66, 0.32)
실험예(97)	화합물(3-21)	6.4	22.8	2500.0	11.0	123.4	(0.66, 0.33)
실험예(98)	화합물(3-22)	6.6	16.7	2500.0	15.0	109.0	(0.66, 0.32)
실험예(99)	화합물(3-23)	6.3	21.7	2500.0	11.5	102.4	(0.65, 0.32)
실험예(100)	화합물(3-24)	6.4	17.9	2500.0	14.0	133.2	(0.66, 0.32)
실험예(101)	화합물(3-25)	6.5	23.3	2500.0	10.7	119.6	(0.66, 0.32)
실험예(102)	화합물(3-26)	6.6	22.5	2500.0	11.1	143.8	(0.67, 0.32)
실험예(103)	화합물(3-27)	6.4	18.7	2500.0	13.4	120.6	(0.66, 0.32)
실험예(104)	화합물(3-28)	6.6	16.8	2500.0	14.8	139.2	(0.67, 0.32)
실험예(105)	화합물(3-29)	6.4	17.0	2500.0	14.7	138.5	(0.66, 0.32)
실험예(106)	화합물(3-30)	6.6	19.1	2500.0	13.1	119.7	(0.66, 0.32)
실험예(107)	화합물(3-31)	6.3	24.1	2500.0	10.4	130.8	(0.66, 0.33)
실험예(108)	화합물(3-32)	6.4	20.6	2500.0	12.1	137.6	(0.66, 0.32)
실험예(109)	화합물(3-33)	6.7	22.4	2500.0	11.2	131.6	(0.65, 0.32)

[0263]

실험예(110)	화합물(3-34)	6.5	17.8	2500.0	14.0	126.4	(0.66, 0.32)
실험예(111)	화합물(3-35)	6.6	18.7	2500.0	13.3	149.7	(0.66, 0.32)
실험예(112)	화합물(3-36)	6.5	17.8	2500.0	14.0	123.5	(0.67, 0.32)
실험예(113)	화합물(5-8)	6.4	20.3	2500.0	12.3	121.8	(0.66, 0.32)
실험예(114)	화합물(5-9)	6.4	18.5	2500.0	13.5	146.4	(0.67, 0.32)

[0264]

[0265] [실험예 III] 그린유기발광소자(발광보조층)

[0266]

유기 기판에 형성된 ITO층(양극) 위에 2-TNATA를 60nm 두께로 진공증착하여 정공주입층을 형성한 후, 상기 정공주입층 상에 NPD를 60nm 두께로 진공증착하여 정공수송층을 형성하였다. 다음으로, 상기 정공수송층 상에 본 발명에 따른 화합물을 20nm 두께로 진공증착하여 발광보조층을 형성하였다. 이어서, 상기 발광보조층 상에 CBP를 호스트로, Ir(ppy)₃을 도판트로 하여 95:5 중량비로 도핑한 혼합물을 30nm 두께로 진공증착하여 발광층을 형성하였다. 이어서, 상기 발광층 상에 BA1q를 10nm 두께로 진공증착하여 정공저지층을 형성하고, 상기 정공저지층

상에 Alq_3 을 40nm 두께로 진공증착하여 전자수송층을 형성하였다. 이후, 상기 전자수송층 상에 할로젠화 알칼리 금속인 LiF를 0.2nm 두께로 증착하여 전자주입층을 형성하고, 이어서 Al을 150nm 두께로 증착하여 음극을 형성함으로써 유기전기발광소자를 제조하였다.

[0267] **[비교예 III] 비교예 (9) ~ (12)**

[0268] **비교예 (9)**

[0269] 발광보조층을 형성하지 않은 것을 제외하고는 상기 실험예 III과 동일하게 유기전기발광소자를 제작하였다.

[0270] **비교예 (10)**

[0271] 발광보조층 물질로 본 발명에 따른 화합물 대신 상기 비교화합물 B를 사용한 것을 제외하고는 상기 실험예 III과 동일하게 유기전기발광소자를 제작하였다.

[0272] **비교예 (11)**

[0273] 발광보조층 물질로 본 발명에 따른 화합물 대신 상기 비교화합물 C를 사용한 것을 제외하고는 상기 실험예 III과 동일하게 유기전기발광소자를 제작하였다.

[0274] **비교예 (12)**

[0275] 발광보조층 물질로 본 발명에 따른 화합물 대신 상기 비교화합물 D를 사용한 것을 제외하고는 상기 실험예 III과 동일하게 유기전기발광소자를 제작하였다.

[0276] 이와 같이 제조된 실험예 III(실험예(115) 내지 실험예(152)) 및 비교예III(비교예(9) 내지 비교예(12))에 의한 유기전기발광소자들에 순바이어스 직류전압을 가하여 포토리서치(photoresearch)사의 PR-650으로 전기발광(EL) 특성을 측정하였으며, 또한 5000cd/m² 기준 휘도에서 맥사이언스사에서 제조된 수명 측정 장비를 통해 T95 수명을 측정하였다.

[0277] 하기 표 6은 본 발명에 따른 화합물을 적용한 실험예 III(실험예(115) 내지 실험예(152)) 및 비교예 III(비교예 (9) 내지 비교예(12))에 대한 소자제작 및 그 평가 결과를 나타낸다.

[0278] [표 6]

	화합물	Voltage (V)	Current Density (mA/cm ²)	Brightness (cd/m ²)	Efficiency (cd/A)	Lifetime T(95)	CIE (x, y)
비교예(9)	-	5.8	21.7	5000.0	23.0	68.3	(0.31, 0.60)
비교예(10)	비교화합물 B	5.9	14.5	5000.0	34.5	92.8	(0.31, 0.61)
비교예(11)	비교화합물 C	5.7	14.9	5000.0	33.6	90.0	(0.31, 0.60)
비교예(12)	비교화합물 D	5.7	14.5	5000.0	34.4	94.3	(0.33, 0.61)
실험예(115)	화합물(4-1)	5.7	12.3	5000.0	40.8	132.8	(0.30, 0.60)
실험예(116)	화합물(4-2)	5.8	11.4	5000.0	43.7	129.3	(0.31, 0.61)
실험예(117)	화합물(4-3)	5.7	10.6	5000.0	47.2	116.2	(0.31, 0.60)
실험예(118)	화합물(4-4)	5.9	11.6	5000.0	43.2	123.2	(0.33, 0.61)
실험예(119)	화합물(4-5)	5.7	10.4	5000.0	48.3	149.6	(0.32, 0.61)
실험예(120)	화합물(4-6)	5.7	11.9	5000.0	42.0	129.8	(0.33, 0.60)
실험예(121)	화합물(4-7)	5.8	10.4	5000.0	47.9	116.0	(0.32, 0.61)
실험예(122)	화합물(4-8)	5.9	10.8	5000.0	46.2	144.5	(0.31, 0.60)
실험예(123)	화합물(4-9)	5.9	11.3	5000.0	44.1	147.0	(0.31, 0.61)
실험예(124)	화합물(4-10)	5.9	11.7	5000.0	42.6	102.1	(0.31, 0.60)
실험예(125)	화합물(4-11)	5.6	10.5	5000.0	47.8	118.2	(0.33, 0.61)
실험예(126)	화합물(4-12)	5.8	10.7	5000.0	46.9	131.6	(0.30, 0.60)
실험예(127)	화합물(4-13)	5.7	11.5	5000.0	43.4	134.5	(0.31, 0.61)
실험예(128)	화합물(4-14)	5.6	12.5	5000.0	40.0	125.4	(0.31, 0.60)
실험예(129)	화합물(4-15)	5.9	10.9	5000.0	46.1	124.0	(0.33, 0.61)
실험예(130)	화합물(4-16)	5.8	11.5	5000.0	43.6	118.5	(0.32, 0.61)
실험예(131)	화합물(4-17)	5.5	11.1	5000.0	45.2	148.9	(0.33, 0.60)
실험예(132)	화합물(4-18)	5.9	10.3	5000.0	48.6	120.9	(0.32, 0.61)
실험예(133)	화합물(4-19)	5.6	10.8	5000.0	46.1	114.6	(0.31, 0.60)
실험예(134)	화합물(4-20)	5.6	12.3	5000.0	40.8	145.6	(0.31, 0.61)
실험예(135)	화합물(4-21)	5.7	12.4	5000.0	40.4	133.8	(0.31, 0.60)
실험예(136)	화합물(4-22)	5.9	10.4	5000.0	48.1	114.6	(0.33, 0.61)
실험예(137)	화합물(4-23)	5.7	10.9	5000.0	45.9	141.9	(0.30, 0.60)
실험예(138)	화합물(4-24)	5.7	10.4	5000.0	48.2	104.6	(0.31, 0.61)
실험예(139)	화합물(4-25)	5.6	11.0	5000.0	45.5	136.6	(0.31, 0.60)
실험예(140)	화합물(4-26)	5.6	12.0	5000.0	41.7	105.4	(0.33, 0.61)
실험예(141)	화합물(4-27)	5.7	12.1	5000.0	41.4	113.2	(0.32, 0.61)
실험예(142)	화합물(4-28)	5.6	10.2	5000.0	49.1	104.6	(0.33, 0.60)
실험예(143)	화합물(4-29)	5.8	10.4	5000.0	47.9	148.1	(0.32, 0.61)
실험예(144)	화합물(4-30)	5.6	11.5	5000.0	43.6	105.6	(0.31, 0.60)
실험예(145)	화합물(4-31)	5.6	11.5	5000.0	43.4	140.9	(0.31, 0.61)
실험예(146)	화합물(4-32)	5.9	10.3	5000.0	48.6	138.8	(0.31, 0.60)
실험예(147)	화합물(4-33)	5.7	10.7	5000.0	46.7	103.1	(0.33, 0.61)

[0279]

실험예(148)	화합물(4-34)	5.7	12.3	5000.0	40.6	111.8	(0.30, 0.60)
실험예(149)	화합물(4-35)	5.6	11.4	5000.0	43.9	147.0	(0.31, 0.61)
실험예(150)	화합물(4-36)	5.9	11.7	5000.0	42.6	117.3	(0.31, 0.60)
실험예(151)	화합물(5-20)	5.7	10.3	5000.0	48.5	113.0	(0.33, 0.61)
실험예(152)	화합물(5-21)	5.8	10.9	5000.0	45.7	134.6	(0.32, 0.61)

[0280]

[0281]

상기 표 5 및 표 6의 결과로부터 알 수 있듯이, 본 발명의 유기전기발광소자용 재료를 발광보조층으로 사용할 경우 발광효율 및 수명을 현저히 개선시키는 것을 확인 할 수 있었다. 이는 상기 실험예 I에서 설명하였듯이 2-4' 위치에 치환된 Bis-Carbazole인 본 발명에 따른 화합물은 높은 T1 에너지 레벨과 비교적 낮은 HOMO 에너지 레벨을 갖고 있어 발광층 내 전하균형(charge balance)이 좋아져 효율 및 수명이 증가되는 것으로 판단된다.

[0282]

[실험예 IV] 그린유기발광소자(인광호스트)

[0283]

유기 기판에 형성된 ITO층(양극) 위에 2-TNATA를 60nm 두께로 진공증착하여 정공주입층을 형성한 후, 상기 정공

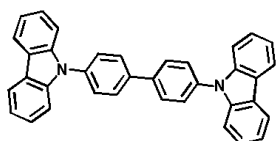
주입층 상에 NPD를 60nm 두께로 진공증착하여 정공수송층을 형성하였다. 이어서, 상기 정공수송층 상에 본 발명에 따른 화합물을 호스트로, Ir(ppy)₃을 도판트로 하여 95:5 중량비로 도핑한 혼합물을 30nm 두께로 진공증착하여 발광층을 형성하였다. 이어서, 상기 발광층 상에 BAlq를 10nm 두께로 진공증착하여 정공저지층을 형성하고, 상기 정공저지층 상에 Alq₃을 40nm 두께로 진공증착하여 전자수송층을 형성하였다. 이후, 상기 전자수송층 상에 할로젠화 알칼리 금속인 LiF를 0.2nm 두께로 증착하여 전자주입층을 형성하고, 이어서 Al을 150nm 두께로 증착하여 음극을 형성함으로써 유기전기발광소자를 제조하였다.

[비교예 IV] 비교예 (13) ~ (16)

비교예 (13)

발광층의 호스트 물질로 본 발명에 따른 화합물 대신 하기 비교화합물 E를 사용한 것을 제외하고는 상기 실험예 IV와 동일하게 유기전기발광소자를 제작하였다.

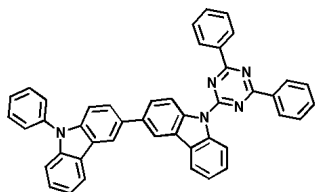
<비교화합물 E>



비교예 (14)

발광층의 호스트 물질로 본 발명에 따른 화합물 대신 하기 비교화합물 F를 사용한 것을 제외하고는 상기 실험예 IV와 동일하게 유기전기발광소자를 제작하였다.

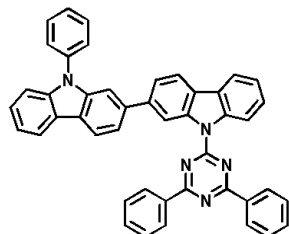
<비교화합물 F>



비교예 (15)

발광층의 호스트 물질로 본 발명에 따른 화합물 대신 하기 비교화합물 G를 사용한 것을 제외하고는 상기 실험예 IV와 동일하게 유기전기발광소자를 제작하였다.

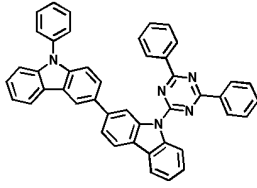
<비교화합물 G>



비교예 (16)

발광층의 호스트 물질로 본 발명에 따른 화합물 대신 하기 비교화합물 H를 사용한 것을 제외하고는 상기 실험예 IV와 동일하게 유기전기발광소자를 제작하였다.

[0299] <비교화합물 H>



[0300]

[0301] 이와 같이 제조된 실험예 IV(실험예(153) 내지 실험예(179)) 및 비교예 IV(비교예(13) 내지 비교예(16))에 의한 유기전기발광소자들에 순바이어스 직류전압을 가하여 포토리서치(photoresearch)사의 PR-650으로 전기발광(EL) 특성을 측정하였으며, 또한 5000cd/m² 기준 휘도에서 맥사이언스사에서 제조된 수명 측정 장비를 통해 T95 수명을 측정하였다.

[0302] 하기 표 7은 본 발명에 따른 화합물을 적용한 실험예 IV(실험예(153) 내지 실험예(179)) 및 비교예 IV(비교예(13) 내지 비교예(16))에 대한 소자제작 및 그 평가 결과를 나타낸다.

[0303] [표 7]

	화합물	Voltage (V)	Current Density (mA/cm ²)	Brightness (cd/m ²)	Efficiency (cd/A)	Lifetime T(95)	CIE (x, y)
비교예(13)	비교화합물 E	5.8	21.7	5000.0	23.0	68.3	(0.31, 0.60)
비교예(14)	비교화합물 F	5.5	14.2	5000.0	35.1	93.1	(0.31, 0.61)
비교예(15)	비교화합물 G	5.6	13.2	5000.0	37.8	90.7	(0.31, 0.60)
비교예(16)	비교화합물 H	5.5	11.9	5000.0	42.0	90.8	(0.33, 0.61)
실험예(153)	화합물(1-1)	5.0	9.1	5000.0	54.9	131.4	(0.30, 0.60)
실험예(154)	화합물(1-2)	5.0	10.9	5000.0	45.7	104.6	(0.31, 0.61)
실험예(155)	화합물(1-3)	5.1	9.9	5000.0	50.6	105.2	(0.31, 0.60)
실험예(156)	화합물(1-4)	5.2	11.3	5000.0	44.4	118.8	(0.33, 0.61)
실험예(157)	화합물(1-5)	4.9	10.6	5000.0	47.0	115.1	(0.32, 0.61)
실험예(158)	화합물(1-6)	5.0	10.8	5000.0	46.5	130.3	(0.33, 0.60)
실험예(159)	화합물(1-7)	4.9	10.0	5000.0	49.9	102.0	(0.32, 0.61)
실험예(160)	화합물(1-8)	5.1	9.1	5000.0	55.0	103.9	(0.31, 0.60)
실험예(161)	화합물(1-9)	4.9	11.9	5000.0	41.9	149.8	(0.31, 0.61)
실험예(162)	화합물(1-10)	5.0	10.5	5000.0	47.7	111.1	(0.31, 0.60)
실험예(163)	화합물(1-11)	4.8	9.3	5000.0	53.8	138.7	(0.33, 0.61)
실험예(164)	화합물(1-12)	4.9	10.9	5000.0	45.8	136.5	(0.30, 0.60)
실험예(165)	화합물(1-13)	5.0	12.4	5000.0	40.3	143.1	(0.31, 0.61)
실험예(166)	화합물(1-14)	4.9	11.5	5000.0	43.6	130.9	(0.31, 0.60)
실험예(167)	화합물(2-2)	5.0	10.2	5000.0	48.9	110.8	(0.32, 0.61)
실험예(168)	화합물(2-3)	5.2	10.8	5000.0	46.5	109.3	(0.33, 0.60)
실험예(169)	화합물(2-4)	5.2	10.0	5000.0	50.0	102.4	(0.32, 0.61)
실험예(170)	화합물(2-5)	5.0	9.8	5000.0	51.0	116.2	(0.31, 0.60)
실험예(171)	화합물(2-6)	5.0	10.8	5000.0	46.2	140.1	(0.31, 0.61)
실험예(172)	화합물(2-7)	5.1	9.5	5000.0	52.6	142.7	(0.31, 0.60)
실험예(173)	화합물(2-8)	4.9	9.5	5000.0	52.8	115.2	(0.33, 0.61)
실험예(174)	화합물(2-9)	4.8	9.1	5000.0	54.8	114.4	(0.30, 0.60)
실험예(175)	화합물(2-10)	5.0	11.9	5000.0	42.1	144.3	(0.31, 0.61)
실험예(176)	화합물(2-11)	5.2	11.6	5000.0	43.1	145.3	(0.31, 0.60)
실험예(177)	화합물(2-12)	5.0	10.2	5000.0	48.8	133.6	(0.33, 0.61)
실험예(178)	화합물(2-13)	5.1	11.8	5000.0	42.4	126.5	(0.32, 0.61)
실험예(179)	화합물(2-14)	5.0	10.1	5000.0	49.7	130.1	(0.33, 0.60)

[0304]

[0305] [실험예 V] 레드유기발광소자(인광호스트)

[0306] 유기 기판에 형성된 ITO층(양극) 위에 2-TNATA를 60nm 두께로 진공증착하여 정공주입층을 형성한 후, 상기 정공주입층 상에 NPD를 60nm 두께로 진공증착하여 정공수송층을 형성하였다. 이어서, 상기 정공주입층 상에 본 발명

에 따른 화합물을 호스트로, $(\text{piq})_2\text{Ir}(\text{acac})$ 를 도판트로 하여 95:5 중량비로 도핑한 혼합물을 30nm 두께로 진공 증착하여 발광층을 형성하였다. 이어서, 상기 발광층 상에 BAlq 를 10nm 두께로 진공증착하여 정공저지층을 형성하고, 상기 정공저지층 상에 Alq_3 를 40nm 두께로 진공증착하여 전자수송층을 형성하였다. 이후, 상기 전자수송층 상에 할로젠화 알칼리 금속인 LiF 를 0.2nm 두께로 증착하여 전자주입층을 형성하고, 이어서 Al 을 150nm 두께로 증착하여 음극을 형성함으로써 유기전기발광소자를 제조하였다.

[0307] **[비교예 V] 비교예 (17) ~ (20)**

[0308] **비교예 (17)**

[0309] 발광층의 호스트 물질로 본 발명에 따른 화합물 대신 상기 비교화합물 E를 사용한 것을 제외하고는 상기 실험예 V와 동일하게 유기전기발광소자를 제작하였다.

[0310] **비교예 (18)**

[0311] 발광층의 호스트 물질로 본 발명에 따른 화합물 대신 상기 비교화합물 F를 사용한 것을 제외하고는 상기 실험예 V와 동일하게 유기전기발광소자를 제작하였다.

[0312] **비교예 (19)**

[0313] 발광층의 호스트 물질로 본 발명에 따른 화합물 대신 상기 비교화합물 G를 사용한 것을 제외하고는 상기 실험예 V와 동일하게 유기전기발광소자를 제작하였다.

[0314] **비교예 (20)**

[0315] 발광층의 호스트 물질로 본 발명에 따른 화합물 대신 상기 비교화합물 H를 사용한 것을 제외하고는 상기 실험예 V와 동일하게 유기전기발광소자를 제작하였다.

[0316] 이와 같이 제조된 실험예 V(실험예(180) 내지 실험예(237)) 및 비교예 V(비교예(17) 내지 비교예(20))에 의한 유기전기발광소자들에 순바이어스 직류전압을 가하여 포토리서치(photoresarch)사의 PR-650으로 전기발광(EL) 특성을 측정하였으며, 또한 $2500\text{cd}/\text{m}^2$ 기준 휘도에서 맥사이언스사에서 제조된 수명 측정 장비를 통해 T95 수명을 측정하였다.

[0317] 하기 표 8은 본 발명에 따른 화합물을 적용한 V(실험예(180) 내지 실험예(237)) 및 비교예 V(비교예(17) 내지 비교예(20))에 대한 소자제작 및 그 평가 결과를 나타낸다.

[0318] [표 8]

	화합물	Voltage (V)	Current Density (mA/cm ²)	Brightness (cd/m ²)	Efficiency (cd/A)	Lifetime T(95)	CIE (x, y)
비교예(17)	비교화합물 E	6.5	34.2	2500.0	7.3	78.7	(0.66, 0.32)
비교예(18)	비교화합물 F	6.2	25.9	2500.0	9.7	93.5	(0.67, 0.32)
비교예(19)	비교화합물 G	6.3	25.3	2500.0	9.9	91.4	(0.66, 0.32)
비교예(20)	비교화합물 H	6.3	26.8	2500.0	9.3	89.8	(0.66, 0.33)
실험예(180)	화합물(1-15)	5.9	21.7	2500.0	11.5	109.5	(0.65, 0.32)
실험예(181)	화합물(1-16)	5.8	20.2	2500.0	12.4	109.3	(0.66, 0.32)
실험예(182)	화합물(1-17)	5.8	21.3	2500.0	11.7	142.4	(0.66, 0.33)
실험예(183)	화합물(1-18)	5.8	22.4	2500.0	11.2	138.4	(0.66, 0.32)
실험예(184)	화합물(1-19)	5.9	18.1	2500.0	13.8	129.6	(0.65, 0.32)
실험예(185)	화합물(1-20)	5.9	20.1	2500.0	12.4	114.7	(0.66, 0.32)
실험예(186)	화합물(1-21)	5.9	24.7	2500.0	10.1	116.3	(0.66, 0.32)
실험예(187)	화합물(1-22)	5.9	16.8	2500.0	14.8	112.2	(0.67, 0.32)
실험예(188)	화합물(1-23)	5.9	16.8	2500.0	14.9	140.1	(0.66, 0.32)
실험예(189)	화합물(1-24)	6.0	23.4	2500.0	10.7	110.7	(0.66, 0.31)
실험예(190)	화합물(1-25)	5.9	17.0	2500.0	14.7	124.3	(0.66, 0.33)
실험예(191)	화합물(1-26)	6.0	18.1	2500.0	13.8	111.0	(0.66, 0.32)
실험예(192)	화합물(1-27)	5.7	21.9	2500.0	11.4	149.6	(0.65, 0.32)
실험예(193)	화합물(1-28)	5.9	18.7	2500.0	13.4	144.8	(0.66, 0.32)
실험예(194)	화합물(1-29)	5.8	24.1	2500.0	10.4	131.7	(0.66, 0.32)
실험예(195)	화합물(1-30)	5.7	21.8	2500.0	11.4	135.7	(0.67, 0.32)
실험예(196)	화합물(1-31)	5.7	18.6	2500.0	13.4	146.0	(0.66, 0.32)
실험예(197)	화합물(1-32)	5.8	17.4	2500.0	14.4	111.6	(0.67, 0.32)
실험예(198)	화합물(2-15)	6.0	20.2	2500.0	12.4	147.9	(0.66, 0.32)
실험예(199)	화합물(2-16)	5.9	18.6	2500.0	13.5	112.9	(0.66, 0.32)
실험예(200)	화합물(2-17)	5.9	23.4	2500.0	10.7	100.4	(0.66, 0.33)
실험예(201)	화합물(2-18)	5.9	20.3	2500.0	12.3	128.9	(0.66, 0.32)
실험예(202)	화합물(2-19)	5.8	25.0	2500.0	10.0	120.6	(0.65, 0.32)
실험예(203)	화합물(2-20)	5.9	17.4	2500.0	14.4	143.8	(0.66, 0.32)
실험예(204)	화합물(2-21)	6.0	18.7	2500.0	13.3	119.4	(0.66, 0.32)
실험예(205)	화합물(2-22)	5.8	18.1	2500.0	13.8	149.7	(0.67, 0.32)
실험예(206)	화합물(2-23)	6.0	18.9	2500.0	13.2	111.1	(0.66, 0.32)
실험예(207)	화합물(2-24)	5.9	19.5	2500.0	12.8	105.4	(0.67, 0.32)
실험예(208)	화합물(2-25)	5.7	17.2	2500.0	14.6	108.6	(0.66, 0.32)
실험예(209)	화합물(2-26)	5.8	21.6	2500.0	11.6	128.3	(0.66, 0.32)
실험예(210)	화합물(2-27)	5.8	19.7	2500.0	12.7	110.4	(0.66, 0.33)
실험예(211)	화합물(2-28)	5.8	23.3	2500.0	10.7	107.8	(0.66, 0.32)
실험예(212)	화합물(2-29)	5.8	18.6	2500.0	13.4	146.7	(0.65, 0.32)

[0319]

실험예(213)	화합물(2-30)	5.8	17.8	2500.0	14.0	130.2	(0.66, 0.32)
실험예(214)	화합물(2-31)	6.0	19.6	2500.0	12.8	111.7	(0.66, 0.32)
실험예(215)	화합물(2-32)	5.9	25.0	2500.0	10.0	140.2	(0.67, 0.32)
실험예(216)	화합물(5-1)	5.8	24.6	2500.0	10.1	138.3	(0.66, 0.32)
실험예(217)	화합물(5-2)	5.8	22.4	2500.0	11.2	134.6	(0.67, 0.32)
실험예(218)	화합물(5-3)	5.8	22.8	2500.0	11.0	138.1	(0.66, 0.32)
실험예(219)	화합물(5-4)	6.0	22.8	2500.0	11.0	129.2	(0.67, 0.32)
실험예(220)	화합물(5-5)	5.8	24.9	2500.0	10.0	100.2	(0.66, 0.32)
실험예(221)	화합물(5-6)	6.0	18.8	2500.0	13.3	103.9	(0.66, 0.33)
실험예(222)	화합물(5-7)	5.8	23.8	2500.0	10.5	111.7	(0.65, 0.32)
실험예(223)	화합물(5-13)	5.9	21.9	2500.0	11.4	104.5	(0.66, 0.32)
실험예(224)	화합물(5-14)	5.8	23.0	2500.0	10.9	148.4	(0.66, 0.33)
실험예(225)	화합물(5-15)	5.9	17.1	2500.0	14.7	132.1	(0.66, 0.32)
실험예(226)	화합물(5-16)	5.8	16.7	2500.0	15.0	134.4	(0.65, 0.32)
실험예(227)	화합물(5-17)	6.0	19.6	2500.0	12.8	135.9	(0.66, 0.32)
실험예(228)	화합물(5-18)	5.9	18.8	2500.0	13.3	146.4	(0.66, 0.32)
실험예(229)	화합물(5-19)	5.9	21.0	2500.0	11.9	147.6	(0.67, 0.32)
실험예(230)	화합물(6-1)	5.9	19.7	2500.0	12.7	101.8	(0.66, 0.32)
실험예(231)	화합물(6-2)	5.9	18.1	2500.0	13.8	144.7	(0.66, 0.32)
실험예(232)	화합물(6-3)	5.9	21.7	2500.0	11.5	122.3	(0.66, 0.33)
실험예(233)	화합물(6-4)	5.9	21.5	2500.0	11.6	135.3	(0.66, 0.32)
실험예(234)	화합물(6-5)	5.9	18.1	2500.0	13.8	106.0	(0.65, 0.32)
실험예(235)	화합물(6-6)	5.7	21.8	2500.0	11.5	140.6	(0.66, 0.32)
실험예(236)	화합물(6-7)	5.8	16.8	2500.0	14.9	100.6	(0.66, 0.32)
실험예(237)	화합물(6-8)	6.0	17.3	2500.0	14.4	104.9	(0.67, 0.32)

[0320]

[0321]

상기 표 7 및 표 8의 결과로부터 알 수 있듯이, 본 발명의 유기전기발광소자용 재료를 인광호스트로 사용한 유기전기발광소자는 높은 발광효율, 낮은 구동전압 및 수명을 현저히 개선시킬 수 있다.

[0322]

이는 넓은 밴드갭(band gap)을 갖는 자사발명 물질인 2,4'-bis carbazole의 경우 정공수송층으로부터 정공을 원활히 받을 수 있는 HOMO 값을 가져서 비교적 낮은 구동전압을 나타내는 것으로 판단되며, 또한 높은 T1 값으로 인하여 발광층 내 도판트(dopant) 물질과의 에너지 교환(energy transfer)이 잘 이루어져 높은 발광효율 및 수명을 갖는 것으로 판단된다.

[0323]

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 실시예들은 본 발명을 한정하기 위한 것이 아니라 설명하기 위한 것이고, 이러한 실시예에 의하여 본 발명의 사상과 범위가 한정되는 것은 아니다. 본 발명의 보호범위는 아래의 청구범위에 의하여 해석되어야 하며, 그와 동등한 범위 내에 있는 모든 기술은 본 발명의 권리범위에 포함하는 것으로 해석되어야 할 것이다.

부호의 설명

[0324]

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

