(12) 특허협력조약에 의하여 공개된 국제출원

(19) 세계지식재산권기구
국제사무국

(43) 국제공개일
2014 년 12 월 24 일 (24.12.2014)

WIPO | PCT

(10) 국제공개번호
WO 2014/204234 A1

(51) 국제특허분류:
C07D 213/04 (2006.01) *C09K 11/06* (2006.01)
C07C 15/28 (2006.01) *H01L 51/50* (2006.01)

(21) 국제출원번호: PCT/KR2014/005421

(22) 국제출원일: 2014 년 6 월 19 일 (19.06.2014)

(25) 출원언어: 한국어

(26) 공개언어: 한국어

(30) 우선권정보:
10-2013-0070307 2013 년 6 월 19 일 (19.06.2013) KR

(71) 출원인: **경상대학교산학협력단 (INDUSTRY-ACADEMIC COOPERATION FOUNDATION GYEONGSANG NATIONAL UNIVERSITY)** [KR/KR]; 660-701 경상남도 진주시 진주대로 501, Gyeongsangnam-do (KR).

(72) 발명자: **김윤희 (KIM, Yun Hi)**; 660-779 경상남도 진주시 평거로 57, 110 동 1301 호, Gyeongsangnam-do (KR). **권순기 (KWON, Soon Ki)**; 660-776 경상남도 진주시 내동로 348 번길 10, 101 동 1103 호, Gyeongsangnam-do (KR). **이윤지 (LEE, Yun-Ji)**; 642- 751 경상남도 창원시 성산구 대정로 73, 114- 303, Gyeongsangnam-do (KR).

(74) 대리인: **권오식 (KWON, Oh-Sig)** 등; 302-828 대전시 서구 한밭대로 809 10 층, Daejeon (KR).

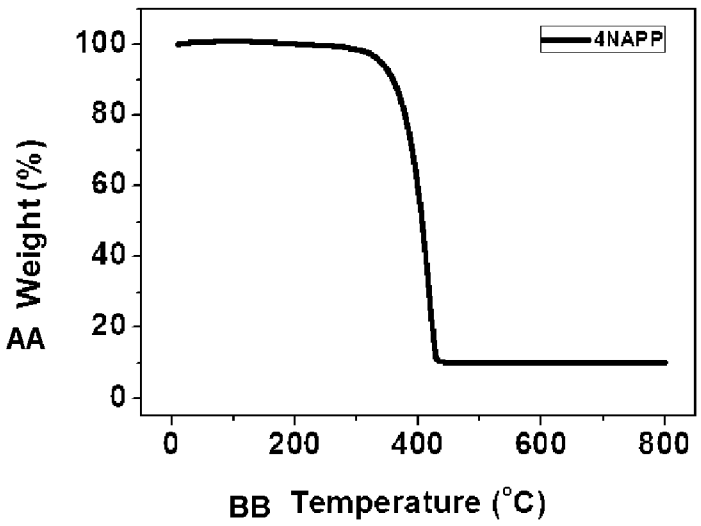
(81) 지정국 (별도의 표시가 없는 한, 가능한 모든 종류의 국내 권리의 보호를 위하여): AE, AG, AL, AM, AO, AT, AU, AZ, BA, BB, BG, BH, BN, BR, BW, BY, BZ, CA, CH, CL, CN, CO, CR, CU, CZ, DE, DK, DM, DO, DZ, EC, EE, EG, ES, FI, GB, GD, GE, GH, GM, GT, HN, HR, HU, ID, IL, IN, IR, IS, JP, KE, KG, KN, KP, KZ, LA, LC, LK, LR, LS, LT, LU, LY, MA, MD, ME, MG, MK, MN, MW, MX, MY, MZ, NA, NG, NI, NO, NZ, OM, PA, PE, PG, PH, PL, PT, QA, RO, RS, RU, RW, SA, SC, SD, SE, SG, SK, SL, SM, ST, SV, SY, TH, TJ, TM, TN, TR, TT, TZ, UA, UG, US, UZ, VC, VN, ZA, ZM, ZW.

(84) 지정국 (별도의 표시가 없는 한, 가능한 모든 종류의 역내 권리의 보호를 위하여): ARIPO (BW, GH, GM, KE, LR, LS, MW, MZ, NA, RW, SD, SL, SZ, TZ, UG, ZM, ZW), 유라시아 (AM, AZ, BY, KG, KZ, RU, TJ, TM), 유럽 (AL, AT, BE, BG, CH, CY, CZ, DE, DK, EE, ES, FI, FR, GB, GR, HR, HU, IE, IS, IT, LT, LU, LV, MC, MK, MT, NL, NO, PL, PT, RO, RS, SE, SI, SK, SM, TR), OAPI (BF, BJ, CF, CG, CI, CM, GA, GN, GQ, GW, KM, ML, MR, NE, SN, TD, TG).

공개:
— 국제조사보고서와 함께 (조약 제 21 조(3))

(54) Title: PHENYLANTHRACENE DERIVATIVE AND ORGANIC LIGHT EMITTING DEVICE CONTAINING SAME

(54) 발명의 명칭 : 페닐안트라센 유도체 및 이를 포함하는 유기 발광소자



AA ... Weight (%)
BB ... Temperature (°C)

(57) Abstract: The present invention relates to a phenylanthracene derivative and an organic light emitting device containing the same in a light emitting layer. The organic light emitting device containing the phenylanthracene derivative according to the present invention has high thermal stability and remarkable luminous efficiency.

(57) 요약서: 본 발명은 페닐안트라센 유도체 및 이를 발광층에 포함하는 유기 발광 소자에 관한 것으로, 본 발명에 따른 페닐안트라센 유도체를 포함하는 유기 발광 소자는 높은 열적안정성과 우수한 발광효율을 가진다.

WO 2014/204234 A1

명세서

발명의 명칭: 페닐안트라센 유도체 및 이를 포함하는 유기 발광소자

기술분야

[1] 본 발명은 신규한 페닐안트라센 유도체 및 이를 발광층에 포함하는 유기 발광소자에 관한 것으로, 보다 상세하게 비대칭의 고도로 뒤틀린 페닐안트라센 유도체에 관한 것이다.

배경기술

[2] 요즘 IT 분야의 발전이 크고 빠르게 이루어지면서 디스플레이 분야는 그에 맞춰 정보를 표현해내는 능력의 고도화가 필요하게 되었고 이에 디스플레이 분야도 함께 성장하게 되었다. 최근까지 TV나 노트북, 휴대폰의 표시 창으로 주로 쓰여 왔던 액정(Liquid Crystal Display, LCD)의 경우에는 뒤에서 빛을 비추어 주는 백 라이트 방식이므로 두꺼울 뿐만 아니라 낮은 색순도와 발광효율, 좁은 시야각 때문에 옆에서 보면 보이지 않는다는 점, 느린 반응속도로 인해 잔상이 남는 점 등의 많은 단점을 갖고 있었다. 이에 대한 해결책으로 많은 기업들은 유기 발광 소자(Organic Light-Emitting Diode, OLED)에 대한 연구를 활발히 진행하였다. OLED는 자체 발광형으로 백라이드가 필요하지 않을 뿐만 아니라, 반응속도도 LCD에 비해 빠르고 낮은 직류 구동전압, 넓은 시야각, 경량박형, Flexible display 제작 가능성 등 거의 모든 면에 있어서 LCD보다 우수하여 차세대 디스플레이로 관심을 받아왔으며 최근엔 기술을 적용한 제품이 출시되면서 디스플레이 핵심기술로 인정받고 있다. 그러나 아직 효율과 색순도의 문제점이 남아 있어 OLED의 보다 쉬운 실용화를 위해 청색 유기 발광 재료 개발이 시급하다.

[3] 유기 EL 소자의 구조는 일반적으로 양극(anode), 정공 주입층(hole injection layer, HIL), 정공 수송층(hole transfer layer, HTL), 발광층(emission layer, EML), 전자 수송층(electron transfer layer, ETL), 전자 주입층(electron injection layer, EIL), 그리고 음극(cathode)으로 구분할 수 있으며 이러한 박막 층들은 고 진공(10^{-6}~10^{-7} Torr)상태에서 가열 증착(thermal evaporation)에 의하여 형성된다. 발광 메커니즘은 먼저 양극에서 정공이, 음극에서 전자가 주입되고, 이들이 발광층에서 만나 불안정한 여기자(exciton)을 형성한다. 이 불안정한 여기자가 다시 안정해지면서 에너지를 내놓는데, 이 에너지는 빛 에너지로 방출된다. 이러한 원리에 의해 OLED가 구동되므로 발광재료도 중요하지만, 전자와 정공이 발광층에서 만나야 하는 것 또한 필수적이므로 전자 및 정공을 주입, 전달하는 역할도 중요하다.

[4] OLED에서 방출되는 빛의 색깔을 결정하는 것은 발광재료의 HOMO-LUMO 사이의 에너지 준위 차이에 의해 결정되는 것으로 에너지 차이가 커지면

단파장의 빛, 에너지 차이가 작아지면 장파장의 빛을 방출하게 된다. HOMO-LUMO 사이 에너지 간격은 분자의 콘쥬게이션(conjugation) 길이를 변화시켜서 조절할 수 있음을 LCAO(Linear Combination of Atomic Orbital, 원자궤도함수 선형조합) 방식을 사용하여 보일 수 있다. 결국 콘쥬게이션(conjugation)이 길어지면 밴드갭(Band Gap)의 크기는 작아지고, 그에 해당하는 파장의 길이는 길어진다. OLED가 자연의 모든 색을 표시하기 위해서는 빛의 삼원색인 빨강색, 녹색, 파랑색이 필요하다. 그런데 현재 OLED의 실용화를 위해 고효율의 청색 발광의 개발이 가장 문제가 되고 있는데 이는 다른 재료에 비해 청색 발광물질이 낮은 색순도 및 수명으로 인해 전체 디바이스의 성능을 저하시키는 문제점이 있다.

[5] 한편, 대한민국공개특허 제 2008-0051625호 “안트라센 유도체 및 이를 포함하는 유기전계발광소자”에 관한 것으로, 안트라센 유도체를 포함하는 유기전계발광소자에 대하여 기재되어 있으나, 본 발명과는 그 구조가 상이하고, 색순도 및 발광효율면에서 그 효과가 충분하지 않다.

발명의 상세한 설명

기술적 과제

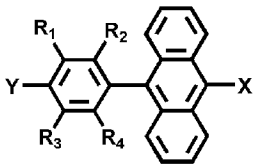
[6] 본 발명은 페닐안트라센 유도체에 관한 것으로, 더욱 구체적으로 안트라센 골격에 안트라센 유도체의 분자 내에 고도의 뒤틀림을 줄 수 있는 작용기로 치환시켜 높은 열 안정성, 광학적 특성 및 화학적 안정성을 가지며, 분자 내 또는 분자 간 상호작용을 최소로 하여 높은 발광효율을 가질 수 있는 페닐안트라센 유도체를 제공한다.

[7] 또한 본 발명은 상기의 페닐안트라센 유도체를 포함하여 높은 색순도와 높은 발광 효율의 특성을 갖는 안트라센 유도체 및 이를 발광재료(청색 발광 재료 및 청색 형광 호스트)로 포함하는 유기 발광 소자를 제공한다.

과제 해결 수단

[8] 상기의 목적을 달성하기 위한 본 발명의 일 양태로, 본 발명은 하기 화학식 1로 표시되는 페닐안트라센 유도체를 제공한다.

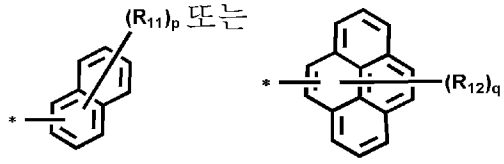
[9] [화학식 1]

[10] 

[11] [상기 화학식 1에서,

[12] R_1 내지 R_4는 서로 독립적으로 수소, C_1-C_{30}알킬, C_1-C_{30}알콕시 또는 C_6-C_{30} 아릴이며;

[13]



이며, R_{11} 및 R_{12}는서로 독립적으로 수소, C_1-C_{30}알킬 또는 C_1-C_{30}알콕시이며;

[14] Y는 C_6-C_{30}아릴 또는 C_3-C_{30}헤테로아릴이며;

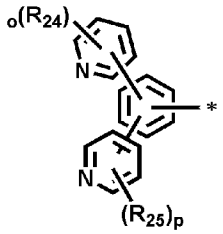
[15] p는 1 내지 7의 정수이며;

[16] q는 1 내지 9의 정수이며, 상기 p 및 q가 2이상인 경우 각 R_{11} 와 R_{12}는 서로 동일하거나 상이할 수 있으며;

[17] Y의 아릴 또는 헤테로아릴은 C_1-C_{30}알킬, C_1-C_{30}알콕시, C_3-C_{30}헤테로아릴 또는 C_6-C_{30}아릴로 더 치환될 수 있다.]

[18] 바람직하게는 상기 화학식 1에서 Y는 하기 구조에서 선택될 수 있다.

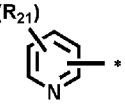
[19] 

[20] 

[21] [상기 식에서 R_{21} 내지 R_{25}는 서로 독립적으로 수소, C_1-C_{30}알킬, C_1-C_{30}알콕시 또는 C_6-C_{30}아릴이며;

[22] o 및 p는 1 내지 4의 정수이며;

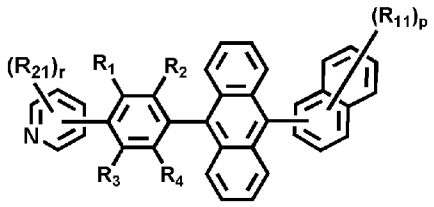
[23] r은 1 내지 6의 정수이며, o, p 및 q가 둘이상인 경우 R_{21} 내지 R_{25}는 서로 동일하거나 상이할 수 있다.]

[24] 보다 바람직하게는 Y는  (여기서 R_{21}은 서로 독립적으로 수소, C_1-C_{30}알킬, C_1-C_{30}알콕시 또는 C_6-C_{30}아릴이며;

[25] o는 1 내지 4의 정수이다.)일 수 있다.

[26] 바람직하게는 상기 화학식 1의 페닐안트라센 유도체는 이를 포함하는 유기발광소자의 열적 안정성과 효율을 높이기 위한 측면에서 하기 화학식 2로 표시될 수 있다.

[27] [화학식 2]

[28] 

[29] [상기 화학식 2에서,

[30] R_1 내지 R_4는 서로 독립적으로 수소, C_1-C_{30}알킬, C_1-C_{30}알콕시 또는 C_6-C_{30} 아릴이며;

[31] R_{11} 또는 R_{21}은 서로 독립적으로 수소, C_1-C_{30}알킬 또는 C_1-C_{30}알콕시이며;

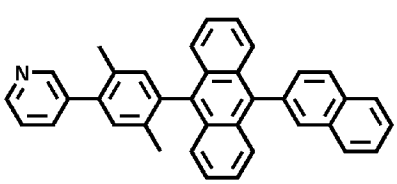
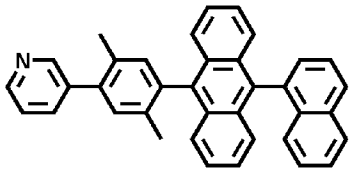
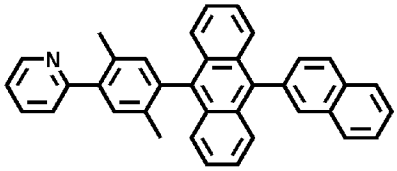
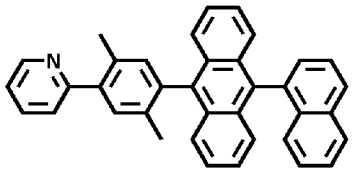
[32] r은 1 내지 4의 정수이며,

[33] p는 1 내지 7의 정수이며, 상기 r 및 p가 2이상인 경우 각 R_{11} 또는 R_{21}은 서로 상이하거나 동일할 수 있다.]

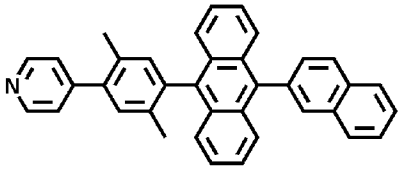
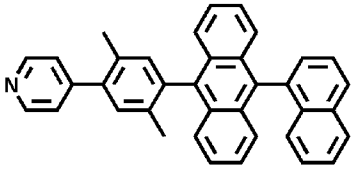
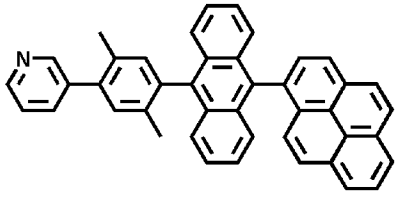
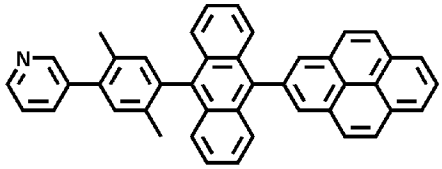
[34] 바람직하게는 본 발명의 일 실시예에 따른 페닐안트라센 유도체는 이를 포함하는 유기발광소자의 열적 안정성과 효율을 높이기 위해서 상기 화학식 1에서 R_1 또는 R_4는 수소이며, R_2 내지 R_3은 수소 또는 C_1-C_{30}알킬, 보다 바람직하게 C_1-C_{12}알킬일 수 있다.

[35] 본 발명의 상기 화학식 1로 표시되는 페닐 안트라센 유도체는 하기 화합물에서 선택될 수 있으나, 이에 한정이 있는 것은 아니다.

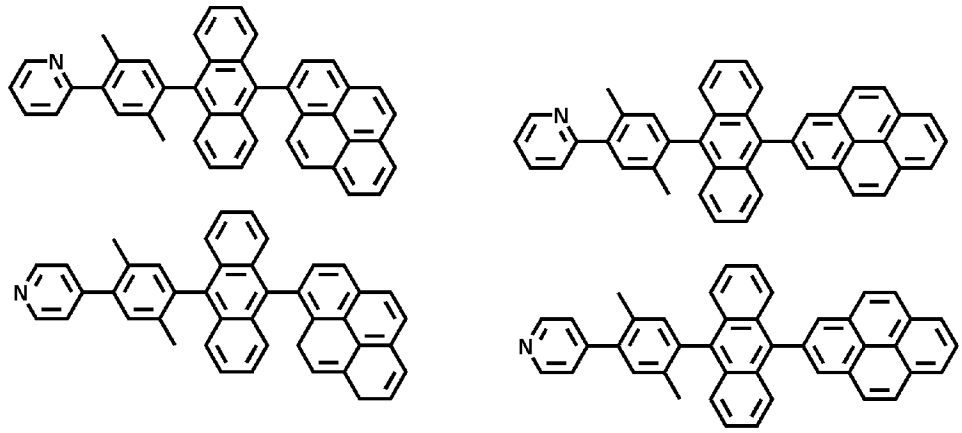
[36]

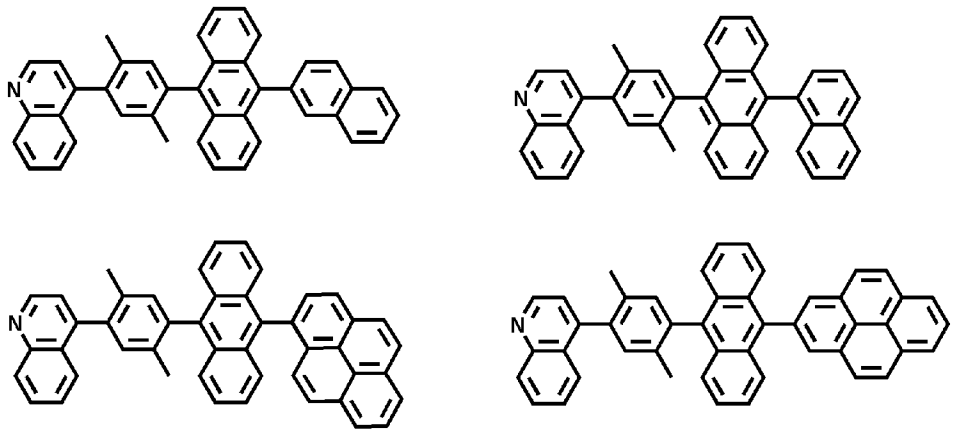
[37]

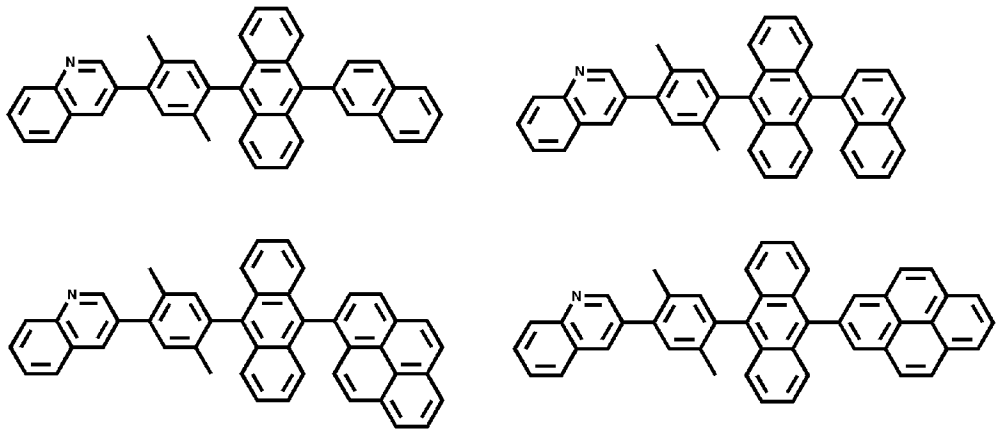
[38]



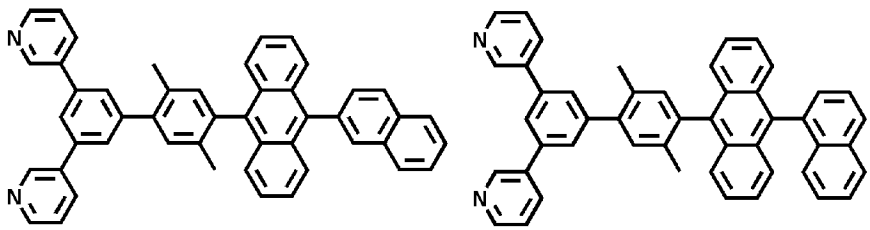
[39]



[40]



[41]



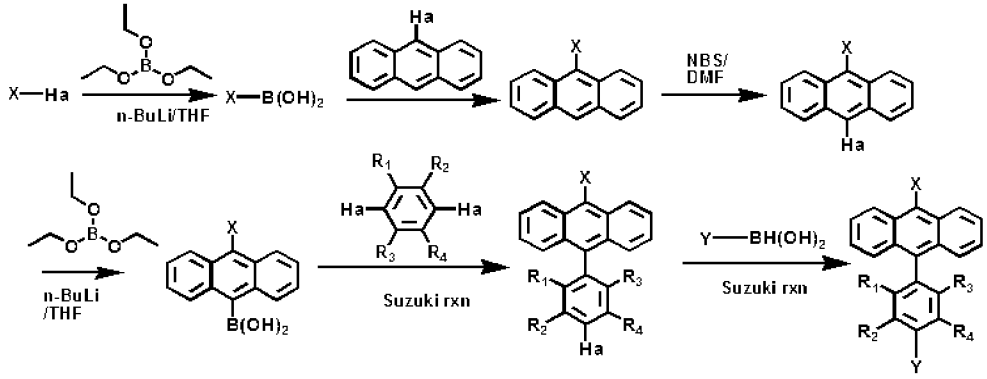
[42] 또한 본 발은 양극, 음극 및 양 전극 사이의 발광층을 포함하는 유기 발광 소자에 있어서, 본 발명에 따른 페닐안트라센 유도체를 발광층에 포함하는 유기 발광 소자를 제공한다.

[43] 또한 본 발명은 본 발명에 따른 페닐안트라센 유도체를 전자 수송능력을 가지는 발광 재료로 사용하는 유기 발광 소자에 관한 것이다.

[44]

[45] 본 발명에 따른 페닐안트라센 유도체는 일예로, 하기 반응식 1에 따라 제조될 수 있으나, 이외에 당업자가 인식할 수 있는 합성방법으로 제조할 수 있음은 물론이다.

[46] [반응식 1]

[47] 

[48] [상기 반응식 1에서,

[49] X, R_1 내지 R_4, 및 Y는 상기 화학식 1에서의 정의 동일하며;

[50] Ha는 할로겐이다.]

[51] 또한 본 발명은 양극, 음극 및 양 전극 사이의 발광층을 포함하는 유기 발광 소자에 있어서, 본 발명에 따른 페닐안트라센 유도체를 발광층에 포함하는 유기 발광 소자를 제공한다. 본 발명에 따른 페닐안트라센 유도체는 전자 수송 능력을 갖는 발광 재료로써, 이를 포함하는 유기 발광 소자는 양자효율이 높고, 구동전압을 낮추며, 발광효율을 높인다.

[52] 본 발명에 따른 페닐안트라센 유도체는 안트라센골격과 안트라센이 가지는 치환기가 높은 회전장애를 가짐으로 인해 고도로 뒤틀린 구조를 가지며, 이로 인해 높은 유리전이 온도를 나타내며 안트라센 분자간 상호작용이 최대한 억제되어 높은 색순도의 발광 스펙트럼을 나태날 수 있다.

[53] 따라서 본 발명에 따른 페닐안트라센 유도체를 포함하는 OLED는 소자 구동시 발생하는 구동열에 의한 열화 문제와 유기막 형성용 물질의 낮은 순도와 파이-스태킹(π-stacking)으로 인한 발광 특성 저하 및 색순도 감소 문제를 해결할 수 있으며, 발광 효율이 개선되는 동시에, 소자의 안정성이 향상되고, 강한 뒤틀림으로 인한 분자간 간섭이 줄어드는 이유로 인해서 고효율 고색순도의 전기 발광 소자를 제공할 수 있다.

발명의 효과

[54] 본 발명에 따른 페닐안트라센 유도체는 비대칭의 구조를 가지며, 안트라센골격과 안트라센이 가지는 치환기, 특히 피리디닐페닐과 나프탈레닐 또는 피리디닐페닐과 파이레닐이 높은 회전장애를 가져 고도로 뒤틀린 구조를 나타내며 이로 인해 높은 유리전이 온도를 나타내고, 안트라센 분자간 상호작용이 최대한 억제되어 높은 색순도의 발광 스펙트럼을 나타낸다.

[55] 따라서 본 발명에 따른 비대칭 페닐안트라센 유도체를 이용하여 발광층과 같은 유기막을 형성한 OLED는 구동시 발생하는 열에 의한 문제, 유기막 형성 물질의 낮은 순도, π-stacking으로 인한 발광 특성 저하 및 색순도 저하 문제를 해결함으로써 발광 효율이 개선되는 동시에, 소자의 안정성이 향상되고, 고도의 뒤틀림으로 인한 분자간 간섭이 줄어들어 고효율 고색순도의 발광 소자를 구성할 수 있다.

[56] 또한, 본 발명에 따른 비대칭 페닐안트라센 유도체는 종래 알려져 있는 청색 형광 재료의 호스트 물질로 사용될 수 있어 본 발명의 OLED는 우수한 청색의 색순도를 구현할 수 있다.

도면의 간단한 설명

[57] 도 1은 실시예 1에서 제조된 화합물 1의 열중량분석(TGA) 그래프이며,

[58] 도 2는 실시예 1에서 제조된 화합물 1의 시차열량분석(DSC) 그래프이며,

[59] 도 3은 실시예 1에서 제조된 화합물 1의 액체상태의 UV 흡수 및 PL 스펙트럼 및 고체 상태의 PL 스펙트럼을 나타낸 그래프이며,

[60] 도 4는 실시예 1에서 제조된 화합물 1의 순환식 전압전류법 (Cyclic Voltammetry) 곡선 그래프이다.

[61] 도 5는 실시예 1에서 제조된 화합물 1의 DFT(Density Functional Theory) 측정결과를 나타낸 도면이다.

[62] 도 6은 실시예 2에서 제조된 화합물 2의 DFT측정결과를 나타낸 도면이다.

[63] 도 7은 실시예 3에서 제조된 화합물 3의 DFT측정결과를 나타낸 도면이다.

발명의 실시를 위한 형태

[64] 이하에서, 본 발명의 상세한 이해를 위하여 본 발명의 대표 화합물을 들어 본 발명에 따른 페닐안트라센 유도체, 이의 제조방법 및 소자의 발광특성을 설명하나, 이는 단지 그 실시 양태를 예시하기 위한 것일 뿐, 본 발명의 범위를 한정하는 것은 아니다.

[65]

[66] 이하 물성은 다음과 같은 방법으로 측정하였다,

[67] 1. 페닐안트라센 유도체의 열적성질 평가

[68] 열적성질을 질소 분위기 하에서 40 ℃부터 700 ℃까지 분(min)당 10 ℃로 가열하여 열중량분석(TGA) 및 시차열량분석(DSC)에 의해 측정하였다.

[69] 2. 페닐안트라센 유도체의 흡광 및 발광측정

[70] 페닐안트라센 유도체를 농도를 10^{-5}M로 제조하여 UV-VIS 및 PL 스펙트럼을 측정하였다.

[71] 3. 페닐안트라센 유도체의 전기화학적 특성평가

[72] 페닐안트라센 유도체를 농도를 10^{-5}M로 제조하여 순환식 전압전류법(cyclic voltammetry)을 통하여 측정하였다.

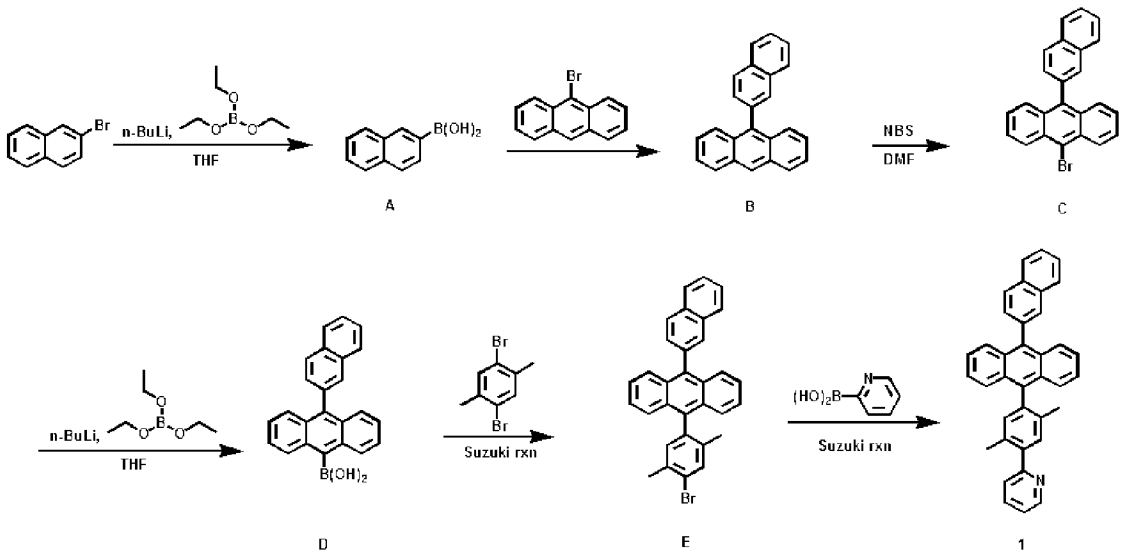
[73] 4. 페닐안트라센 유도체의 전자밀도측정

[74] B3LYP 이론을 탑재한 Spartna'08 프로그램으로 6-31G**을 기본으로 HOMO와 LUMO 값을 측정하였다.

[75]

[76] **[실시예 1] 화합물 1의 제조**

[77]



[78] **화합물 A의 제조**

[79] 500 mL 3구 플라스크에 2-브로모나프탈렌(20.0 g, 96.6 mmol)와 테트라하이드로퓨란(THF;tetrahydrofuran) (100 mL)를 첨가하였다. 그리고 -78 ℃까지 냉각시킨 후 주사기를 이용하여 n-부틸리튬(n-Butyllithium) (2.5 M in hexanes, 42.4 mL, 106.2 mmol)를 30분 동안 반응기 안에 천천히 첨가하고, 1시간 후 트리에틸보레이트 (18 mL, 106.2 mmol)를 넣고 12시간 더 교반시켰다. 반응을 종결시키기 위해 2 M 염산용액을 100 mL를 첨가하고, 1시간 후 메틸렌클로라이드 200mL 와 증류수 150mL 를 첨가하여 추출하였다. 추출된 유기층을 마그네슘설페이트으로 수분을 제거 한 뒤 evaporate 시켰다. 그리고 과량의 n-헥산으로 씻어준 후 글라스필터로 필터하여 흰색의 화합물 A(2.85 g, 77,4%)을 얻었으며, 얻어진 화합물 A의 구조는 ^{1}H-NMR로 확인하였다.

[80] ^{1}H NMR (300 MHz, $CDCl_3$): δ 8.38 (s, 1H), 8.17 (s, 2H), 7.83-7.94 (m, 4H), 7.47-7.55 (m, 2H)

[81] **화합물 B의 제조**

[82] 500 mL 3구 플라스크에 화합물A (30.10 g, 175.01 mmol), 9-브로모안트라센(30.0 g, 116.67 mmol), $Pd(PPh_3)_4$ (1.02 g, 0.01 mmol) 및 포타슘카보네이트 용액(2 M, 100 mL)를 첨가하고, 테트라하이드로퓨란(THF;tetrahydrofuran) (250 mL)를 첨가하여 용해시킨 후 온도 85 ℃에서 24시간 반응시켰다. 반응 종결 후 클로로포름(300mL × 2)로 추출한 후 유기층의 수분을 제거한 후, 유기용매를 제거 하였다. 그리고 헥산을 이용하여 컬럼크로마토그래피로 분리하여 화합물 B(수율:67%)를 얻었으며, 얻어진 화합물 B의 구조는 ^{1}H-NMR로 확인하였다.

[83] ^{1}H NMR (300 MHz, $CDCl^3$): δ 8.54 (s, 1H), 7.98-8.09(m, 4H), 7.89-7.95 (m, 2H), 7.69-7.72 (m, 2H), 7.57-7.61 (m, 3H), 7.44-7.50 (m, 2H), 7.30-7.34 (m, 2H)

[84] **화합물 C의 제조**

[85] 500 mL 3구 플라스크에 화합물 B (9 g, 29.51 mmol)를 디메틸아마이드(50mL)에 용해시키고, N-브로모석신이미드(5.7 g, 32.46 mmol)가 용해된 디메틸아마이드(200 mL)용액을 천천히 첨가하였으며, 모두 첨가한 후 반응기를 2시간동안 교반시켰다. 그리고 증류수를 첨가하고 반응물을 글라스필터에 필터한 후 수득된 화합물을 증류수 2L로 씻어주고 건조시켜 화합물 C를 얻었으며, 얻어진 화합물 C의 구조는 ^{1}H-NMR로 확인하였다.

[86] ^{1}H NMR (300 MHz, $CDCl_3$): δ 8.67-8.65 (d, 2H), 7.99-8.07 (m, 2H), 7.84-7.89 (m, 2H), 7.64-7.66 (d, 2H), 7.56-7.60 (m, 4H), 7.50-7.52 (m, 1H), 7.32-7.35 (m, 2H)

[87] **화합물 D의 제조**

[88] 500mL 3구 플라스크에 화합물 C (20 g, 52.18 mmol)를 테트라하이드로퓨란(THF;tetrahydrofuran) (200 mL)에 첨가하여 용해 시켰다. 그리고 -78 ℃까지 냉각시킨 후 주사기를 이용하여 n-부틸리튬 (2.5 M in hexanes, 23.0 mL, 57.40 mmol)를 20분 동안 천천히 첨가하였다. 그리고 1시간 교반시킨 후 트리에틸보레이트(9.7 mL, 57.40 mmol)를 첨가하고, 12시간 더 교반시켰다. 반응을 종결시키기 위해 2 M 염산용액을 180 mL 첨가하고, 1시간 후 메틸렌 클로라이드 200mL와 증류수 150 mL을 첨가하여 유기층만 추출하였으며, 유기층을 마그네슘설페이트로 수분을 제거 한 뒤 evaporate 시켰다. 이렇게 얻은 물질을 과량의 n-헥산으로 씻어준 후 글라스필터로 필터하였으며, 50 ℃로 가열한 톨루엔으로 씻어 여과한 뒤 건조하여 흰색의 화합물 D를 얻었으며, 얻어진 화합물 D의 구조는 1H-NMR로 확인하였다.

[89] ^{1}H NMR (300 MHz, $CDCl_3$): δ 5.25 (s, 2H), 7.35 (t, 2H), 7.51-7.47 (m, 3H), 7.67 (t, 2H), 7.70 (d, 2H), 7.89 (m, 2H), 8.06-8.00 (m, 2H), 8.19 (d, 2H)

[90] **화합물 E의 제조**

[91] 100mL 3구 플라스크에 화합물 D (1 g, 2.87 mmol), 2,5-디브로모-1,4-디메틸벤젠(1.12 g, 4.31 mmol), $Pd(PPh_3)_4$ (0.09 g, 0.03 mmol) 및 수산화나트륨 수용액(2 M, 4.3 mL)를 첨가한 후 테트라하이드로퓨란(20 mL) 및 톨루엔 (10 mL)를 첨가하여 혼합하였다. 그리고 온도 85℃에서 12시간 반응시킨다. 반응 종결 후 클로로포름(300mL × 2)로 추출하였으며, 추출한 유기층의 수분을 제거한 후 용매를 제거하였다. 그리고 시료에 에테르를 채워넣어 교반시켜 1차 정제한 뒤 헥산:클로로포름=5:1로 컬럼크로마토그래피하여 화합물 G를 얻었으며, 얻어진 화합물 G의 구조는 ^{1}H-NMR로 확인하였다.

[92] ^{1}H NMR (300 MHz, $CDCl_3$): δ 8.03-8.12 (m, 3H), 7.93-7.98 (m, 2H) 7.74-7.76 (m, 2H), 7.68 (s, 1H), 7.58-7.64 (m, 5H), 7.30-7.40 (m, 4H), 7.22(d, 1H), 2.48 (s, 1H), 1.58 (s, 1H);

[93] **화합물 1의 제조**

[94] 250 mL 3구 플라스크에 화합물 G (3.2 g, 6.57 mmol), 4-피리딘보로닉에시드 (1.6 g, 13.13 mmol), $Pd(PPh_3)_4$ (0.08 g, 0.06 mmol), 수산화나트륨 용액(2 M, 25 ml)을 첨가한 후 테트라하이드로퓨란(100 mL)를 첨가하여 용해시킨 후 온도를 90 ℃에서 36시간 반응시켰다. 반응 종결 후 클로로포름(300mL × 2)로 추출한 후 유기층의 수분을 제거하고, 용매를 제거하였다. 그리고 컬럼크로마토그래피로 분리하여 화합물 1를 얻었으며, 얻어진 화합물 1의 구조는 ^{1}H-NMR로 확인하였다.

[95] ^{1}H NMR (300 MHz, $CDCl_3$): δ 8.85 (d, 2H), 7.98-8.11 (m, 4H), 7.75-7.78 (d, 2H), 7.63-7.69 (m, 51H), 7.49-7.51 (d, 2H), 7.34-7.44 (m, 5H), 7.29 (s, 1H), 2.40 (s, 3H), 1.98 (s, 3H); HRMS (EI) m/z calcd for $C_{37}H_{27}N$ (M^+): 485.2143; found 465.2144

[96] 상기 제조된 화합물 1의 물성을 상기에서 기재된 방법으로 측정하여 도 1 내지 도 4의 그래프를 얻었다.

[97] 도 1에서 보이는 바와 같이 페닐안트라센 유도체인 화합물인 1의 경우 5% 무게 감소하는 부분이 약 320℃로 측정되었으며, 이는 본 발명에서 합성된 페닐안트라센 유도체가 매우 우수한 열안정성을 가지고 있다는 것을 알 수 있다.

[98] 도 2에서는 첫 번째 가열 구간에서 약 289℃에서 피크가 나타나는 것을 확인하여 결정성을 가지는 물질임을 알 수 있다.

[99] 또한 도 3에서 보이는 바와 같이 실시예 1에서 제조된 화합물 1의 액체상태의 UV 스펙트럼을 측정시 약 260nm에서 흡광되는 것을 알 수 있으며, 또한 PL스펙트럼 측정시 약 430nm에서 발광하는 것을 알 수 있었다.

[100] 전기화학적 특성은 순환식 전압전류법(cyclic voltammetry)을 통하여 측정하였으며 그 결과를 하기 도 4에 나타내었다. 하기 도 4를 살펴보면 HOMO는 5.59 eV이고, LUMO는 2.59 eV이였으며, 밴드갭은 3.0으로 측정 되었다.

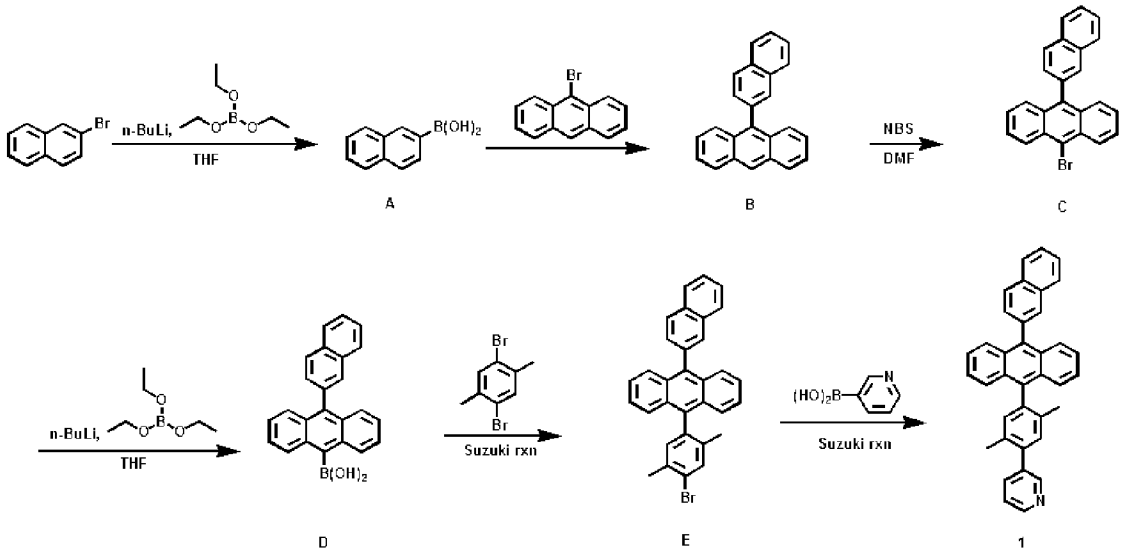
[101] 또한 도 5에서 보이는 바와 같이 본 발명의 실시예 1에서 제조된 화합물 1은 안트라센골격에 피리디닐기가 아니라 피리디닐페닐기가 치환되어 있어, 피리디닐기가 전자끌기 작용기임에도 불구하고 피리디닐과 안트라센골격사이에 존재하는 페닐기가 피리디닐기의 전자끌기효과를 차단시켜 안트라센골격에 전자밀도가 집중되어 높은 색순도와 발광효율을 나타낸다.

[102] 즉, 본 발명의 화합물 1은 안트라센골격의 한쪽에 피리디닐페닐기가 치환되어 있고 한쪽은 나프탈레닐기가 치환되어 있어 고도의 비틀린 구조를 가지면서도 전자밀도 안트라센 골격에 집중되어 색순도와 발광효율이 매우 높다.

[103]

[104] [실시예 2] 화합물 2의 제조

[105]



[106] **화합물 A의 제조**

[107] 500 mL 3구 플라스크에 2-브로모나프탈렌(20.0 g, 96.6 mmol)와 테트라하이드로퓨란(THF;tetrahydrofuran) (100 mL)를 첨가하였다. 그리고 -78 ℃까지 냉각시킨 후 주사기를 이용하여 n-부틸리튬(n-Butyllithium) (2.5 M in hexanes, 42.4 mL, 106.2 mmol)를 30분 동안 반응기 안에 천천히 첨가하고, 1시간 후 트리에틸보레이트 (18 mL, 106.2 mmol)를 넣고 12시간 더 교반시켰다. 반응을 종결시키기 위해 2 M 염산용액을 100 mL를 첨가하고, 1시간 후 메틸렌클로라이드 200mL 와 증류수 150mL 를 첨가하여 추출하였다. 추출된 유기층을 마그네슘설페이트으로 수분을 제거 한 뒤 evaporate 시켰다. 그리고 과량의 n-헥산으로 씻어준 후 글라스필터로 필터하여 흰색의 화합물 A(2.85 g, 77,4%)을 얻었으며, 얻어진 화합물 A의 구조는 ^{1}H-NMR로 확인하였다.

[108] ^{1}H NMR (300 MHz, $CDCl_3$): δ 8.38 (s, 1H), 8.17 (s, 2H), 7.83-7.94 (m, 4H), 7.47-7.55 (m, 2H)

[109] **화합물 B의 제조**

[110] 500 mL 3구 플라스크에 화합물A (30.10 g, 175.01 mmol), 9-브로모안트라센(30.0 g, 116.67 mmol), $Pd(PPh_3)_4$ (1.02 g, 0.01 mmol) 및 포타슘카보네이트 용액(2 M, 100 mL)를 첨가하고, 테트라하이드로퓨란(THF;tetrahydrofuran) (250 mL)를 첨가하여 용해시킨 후 온도 85 ℃에서 24시간 반응시켰다. 반응 종결 후 클로로포름(300mL × 2)로 추출한 후 유기층의 수분을 제거한 후, 유기용매를 제거 하였다. 그리고 헥산을 이용하여 컬럼크로마토그래피로 분리하여 화합물 B(수율:67%)를 얻었으며, 얻어진 화합물 B의 구조는 ^{1}H-NMR로 확인하였다.

[111] ^{1}H NMR (300 MHz, $CDCl_3$): δ 8.54 (s, 1H), 7.98-8.09(m, 4H), 7.89-7.95 (m, 2H), 7.69-7.72 (m, 2H), 7.57-7.61 (m, 3H), 7.44-7.50 (m, 2H), 7.30-7.34 (m, 2H)

[112] **화합물 C의 제조**

[113] 500 mL 3구 플라스크에 화합물 B (9 g, 29.51 mmol)를 디메틸아마이드(50mL)에

용해시키고, N-브로모석신이미드(5.7 g, 32.46 mmol)가 용해된 디메틸아마이드(200 mL)용액을 천천히 첨가하였으며, 모두 첨가한 후 반응기를 2시간동안 교반시켰다. 그리고 증류수를 첨가하고 반응물을 글라스필터에 필터한 후 수득된 화합물을 증류수 2L로 씻어주고 건조시켜 화합물 C를 얻었으며, 얻어진 화합물 C의 구조는 ^{1}H-NMR로 확인하였다.

[114] ^{1}H NMR (300 MHz, $CDCl_3$): δ 8.67-8.65 (d, 2H), 7.99-8.07 (m, 2H), 7.84-7.89 (m, 2H), 7.64-7.66 (d, 2H), 7.56-7.60 (m, 4H), 7.50-7.52 (m, 1H), 7.32-7.35 (m, 2H)

[115] **화합물 D의 제조**

[116] 500mL 3구 플라스크에 화합물 C (20 g, 52.18 mmol)를 테트라하이드로퓨란(THF;tetrahydrofuran) (200 mL)에 첨가하여 용해 시켰다. 그리고 -78 ℃까지 냉각시킨 후 주사기를 이용하여 n-부틸리튬 (2.5 M in hexanes, 23.0 mL, 57.40 mmol)를 20분 동안 천천히 첨가하였다. 그리고 1시간 교반시킨 후 트리에틸보레이트(9.7 mL, 57.40 mmol)를 첨가하고, 12시간 더 교반시켰다. 반응을 종결시키기 위해 2 M 염산용액을 180 mL 첨가하고, 1시간 후 메틸렌 클로라이드 200mL와 증류수 150 mL을 첨가하여 유기층만 추출하였으며, 유기층을 마그네슘설페이트로 수분을 제거 한 뒤 evaporate 시켰다. 이렇게 얻은 물질을 과량의 n-헥산으로 씻어준 후 글라스필터로 필터하였으며, 50 ℃로 가열한 톨루엔으로 씻어 여과한 뒤 건조하여 흰색의 화합물 D를 얻었으며, 얻어진 화합물 D의 구조는 1H-NMR로 확인하였다.

[117] ^{1}H NMR (300 MHz, $CDCl_3$): δ 5.25 (s, 2H), 7.35 (t, 2H), 7.51-7.47 (m, 3H), 7.67 (t, 2H), 7.70 (d, 2H), 7.89 (m, 2H), 8.06-8.00 (m, 2H), 8.19 (d, 2H)

[118] **화합물 E의 제조**

[119] 100mL 3구 플라스크에 화합물 D (1 g, 2.87 mmol), 2,5-디브로모-1,4-디메틸벤젠(1.12 g, 4.31 mmol), $Pd(PPh_3)_4$ (0.09 g, 0.03 mmol) 및 수산화나트륨 수용액(2 M, 4.3 mL)를 첨가한 후 테트라하이드로퓨란(20 mL) 및 톨루엔 (10 mL)를 첨가하여 혼합하였다. 그리고 온도 85℃에서 12시간 반응시킨다. 반응 종결 후 클로로포름(300mL × 2)로 추출하였으며, 추출한 유기층의 수분을 제거한 후 용매를 제거하였다. 그리고 시료에 에테르를 채워넣어 교반시켜 1차 정제한 뒤 헥산:클로로포름=5:1로 컬럼크로마토그래피하여 화합물 G를 얻었으며, 얻어진 화합물 G의 구조는 ^{1}H-NMR로 확인하였다.

[120] ^{1}H NMR (300 MHz, $CDCl_3$): δ 8.03-8.12 (m, 3H), 7.93-7.98 (m, 2H) 7.74-7.76 (m, 2H), 7.68 (s, 1H), 7.58-7.64 (m, 5H), 7.30-7.40 (m, 4H), 7.22(d, 1H), 2.48 (s, 1H), 1.58 (s, 1H);

[121] **화합물 2의 제조**

[122] 250 mL 3구 플라스크에 화합물 G (3.2 g, 6.57 mmol), 2-피리딘보로닉에시드 (1.6 g, 13.13 mmol), $Pd(PPh_3)_4$ (0.08 g, 0.06 mmol), 수산화나트륨 용액(2 M, 25 ml)을 첨가한 후 테트라하이드로퓨란(100 mL)를 첨가하여 용해시킨 후 온도를

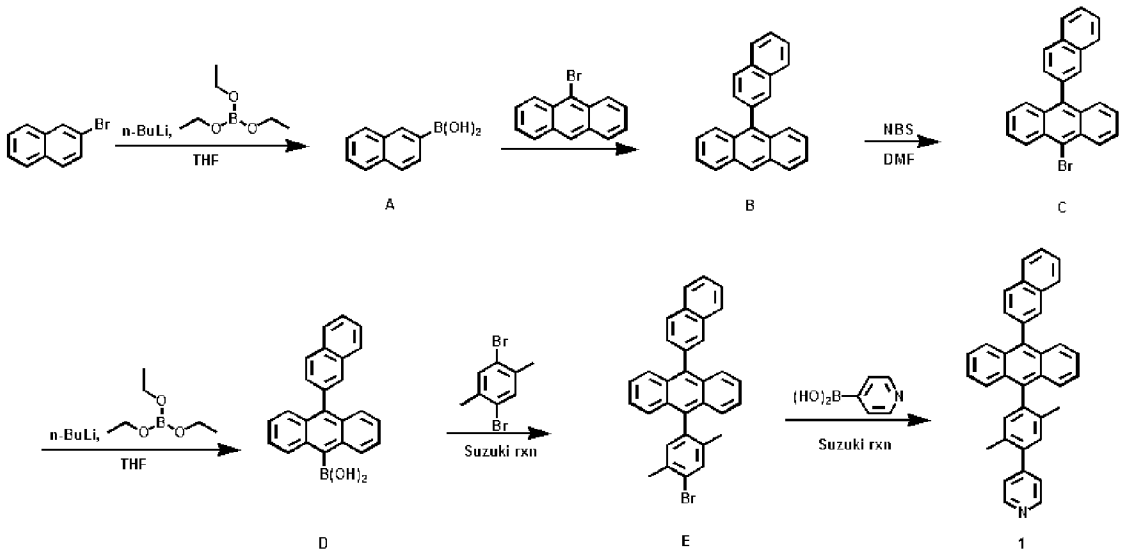
90 ℃에서 36시간 반응시켰다. 반응 종결 후 클로로포름(300mL × 2)로 추출한 후 유기층의 수분을 제거하고, 용매를 제거하였다. 그리고 컬럼크로마토그래피로 분리하여 화합물 2를 얻었으며, 얻어진 화합물 1의 구조는 ^{1}H-NMR로 확인하였다.

[123] ^{1}H NMR (300 MHz, $CDCl_3$): δ 8.83 (d, 2H), 7.98-8.11 (m, 4H), 7.75-7.78 (d, 2H), 7.63-7.69 (m, 51H), 7.49-7.51 (d, 2H), 7.34-7.44 (m, 5H), 7.29 (s, 1H), 2.40 (s, 3H), 1.98 (s, 3H); HRMS (EI) m/z calcd for C37H27N (M^+): 485.2143; found 465.2144

[124]

[125] [실시예 3] 화합물 3의 제조

[126]



[127] **화합물 A의 제조**

[128] 500 mL 3구 플라스크에 2-브로모나프탈렌(20.0 g, 96.6 mmol)와 테트라하이드로퓨란(THF;tetrahydrofuran) (100 mL)를 첨가하였다. 그리고 -78 ℃까지 냉각시킨 후 주사기를 이용하여 n-부틸리튬(n-Butyllithium) (2.5 M in hexanes, 42.4 mL, 106.2 mmol)를 30분 동안 반응기 안에 천천히 첨가하고, 1시간 후 트리에틸보레이트 (18 mL, 106.2 mmol)를 넣고 12시간 더 교반시켰다. 반응을 종결시키기 위해 2 M 염산용액을 100 mL를 첨가하고, 1시간 후 메틸렌클로라이드 200mL 와 증류수 150mL 를 첨가하여 추출하였다. 추출된 유기층을 마그네슘설페이트으로 수분을 제거 한 뒤 evaporate 시켰다. 그리고 과량의 n-헥산으로 씻어준 후 글라스필터로 필터하여 흰색의 화합물 A(2.85 g, 77,4%)을 얻었으며, 얻어진 화합물 A의 구조는 ^{1}H-NMR로 확인하였다.

[129] ^{1}H NMR (300 MHz, $CDCl_3$): δ 8.38 (s, 1H), 8.17 (s, 2H), 7.83-7.94 (m, 4H), 7.47-7.55 (m, 2H)

[130] **화합물 B의 제조**

[131] 500 mL 3구 플라스크에 화합물A (30.10 g, 175.01 mmol), 9-브로모안트라센(30.0 g, 116.67 mmol), $Pd(PPh_3)_4$ (1.02 g, 0.01 mmol) 및 포타슘카보네이트 용액(2 M, 100 mL)를 첨가하고,

테트라하이드로퓨란(THF;tetrahydrofuran) (250 mL)를 첨가하여 용해시킨 후 온도 85 ℃에서 24시간 반응시켰다. 반응 종결 후 클로로포름(300mL × 2)로 추출한 후 유기층의 수분을 제거한 후, 유기용매를 제거 하였다. 그리고 헥산을 이용하여 컬럼크로마토그래피로 분리하여 화합물 B(수율:67%)를 얻었으며, 얻어진 화합물 B의 구조는 ^{1}H-NMR로 확인하였다.

[132] ^{1}H NMR (300 MHz, $CDCl_3$): δ 8.54 (s, 1H), 7.98-8.09(m, 4H), 7.89-7.95 (m, 2H), 7.69-7.72 (m, 2H), 7.57-7.61 (m, 3H), 7.44-7.50 (m, 2H), 7.30-7.34 (m, 2H)

[133] **화합물 C의 제조**

[134] 500 mL 3구 플라스크에 화합물 B (9 g, 29.51 mmol)를 디메틸아마이드(50mL)에 용해시키고, N-브로모석신이미드(5.7 g, 32.46 mmol)가 용해된 디메틸아마이드(200 mL)용액을 천천히 첨가하였으며, 모두 첨가한 후 반응기를 2시간동안 교반시켰다. 그리고 증류수를 첨가하고 반응물을 글라스필터에 필터한 후 수득된 화합물을 증류수 2L로 씻어주고 건조시켜 화합물 C를 얻었으며, 얻어진 화합물 C의 구조는 ^{1}H-NMR로 확인하였다.

[135] ^{1}H NMR (300 MHz, $CDCl_3$): δ 8.67-8.65 (d, 2H), 7.99-8.07 (m, 2H), 7.84-7.89 (m, 2H), 7.64-7.66 (d, 2H), 7.56-7.60 (m, 4H), 7.50-7.52 (m, 1H), 7.32-7.35 (m, 2H)

[136] **화합물 D의 제조**

[137] 500mL 3구 플라스크에 화합물 C (20 g, 52.18 mmol)를 테트라하이드로퓨란(THF;tetrahydrofuran) (200 mL)에 첨가하여 용해 시켰다. 그리고 -78 ℃까지 냉각시킨 후 주사기를 이용하여 n-부틸리튬 (2.5 M in hexanes, 23.0 mL, 57.40 mmol)를 20분 동안 천천히 첨가하였다. 그리고 1시간 교반시킨 후 트리에틸보레이트(9.7 mL, 57.40 mmol)를 첨가하고, 12시간 더 교반시켰다. 반응을 종결시키기 위해 2 M 염산용액을 180 mL 첨가하고, 1시간 후 메틸렌 클로라이드 200mL와 증류수 150 mL을 첨가하여 유기층만 추출하였으며, 유기층을 마그네슘설페이트로 수분을 제거 한 뒤 evaporate 시켰다. 이렇게 얻은 물질을 과량의 n-헥산으로 씻어준 후 글라스필터로 필터하였으며, 50 ℃로 가열한 톨루엔으로 씻어 여과한 뒤 건조하여 흰색의 화합물 D를 얻었으며, 얻어진 화합물 D의 구조는 1H-NMR로 확인하였다.

[138] ^{1}H NMR (300 MHz, $CDCl_3$): δ 5.25 (s, 2H), 7.35 (t, 2H), 7.51-7.47 (m, 3H), 7.67 (t, 2H), 7.70 (d, 2H), 7.89 (m, 2H), 8.06-8.00 (m, 2H), 8.19 (d, 2H)

[139] **화합물 E의 제조**

[140] 100mL 3구 플라스크에 화합물 D (1 g, 2.87 mmol), 2,5-디브로모-1,4-디메틸벤젠(1.12 g, 4.31 mmol), $Pd(PPh_3)_4$ (0.09 g, 0.03 mmol) 및 수산화나트륨 수용액(2 M, 4.3 mL)를 첨가한 후 테트라하이드로퓨란(20 mL) 및 톨루엔 (10 mL)를 첨가하여 혼합하였다. 그리고 온도 85℃에서 12시간 반응시킨다. 반응 종결 후 클로로포름(300mL × 2)로 추출하였으며, 추출한 유기층의 수분을 제거한 후 용매를 제거하였다. 그리고 시료에 에테르를 채워넣어 교반시켜 1차 정제한 뒤 헥산:클로로포름=5:1로

컬럼크로마토그래피하여 화합물 G를 얻었으며, 얻어진 화합물 G의 구조는 ^{1}H-NMR로 확인하였다.

[141] ^{1}H NMR (300 MHz, $CDCl_3$): δ 8.03-8.12 (m, 3H), 7.93-7.98 (m, 2H) 7.74-7.76 (m, 2H), 7.68 (s, 1H), 7.58-7.64 (m, 5H), 7.30-7.40 (m, 4H), 7.22(d, 1H), 2.48 (s, 1H), 1.58 (s, 1H);

[142] **화합물 3의 제조**

[143] 250 mL 3구 플라스크에 화합물 G (3.2 g, 6.57 mmol), 3-피리딘보로닉에시드 (1.6 g, 13.13 mmol), $Pd(PPh_3)_4$ (0.08 g, 0.06 mmol), 수산화나트륨 용액(2 M, 25 ml)을 첨가한 후 테트라하이드로퓨란(100 mL)를 첨가하여 용해시킨 후 온도를 90 ℃에서 36시간 반응시켰다. 반응 종결 후 클로로포름(300mL × 2)로 추출한 후 유기층의 수분을 제거하고, 용매를 제거하였다. 그리고 컬럼크로마토그래피로 분리하여 화합물 2를 얻었으며, 얻어진 화합물 1의 구조는 ^{1}H-NMR로 확인하였다.

[144] ^{1}H NMR (300 MHz, $CDCl_3$): δ 8.86 (d, 2H), 7.98-8.11 (m, 4H), 7.75-7.78 (d, 2H), 7.63-7.69 (m, 51H), 7.49-7.51 (d, 2H), 7.34-7.44 (m, 5H), 7.29 (s, 1H), 2.40 (s, 3H), 1.98 (s, 3H); HRMS (EI) m/z calcd for $C_{37}H_{27}N$ (M^+): 485.2143; found 465.2144

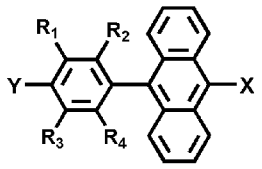
[145] 도 6에 실시예 2에서 제조된 화합물 2의 DFT를 나타내었으며, 도 7에 실시예 3에서 제조된 화합물 3의 DFT를 나타냈다.

[146] 도 6과 도 7에서 보이는 바와 같이 본 발명의 화합물 1과 마찬가지로 실시예 2 내지 3의 화합물 또한 안트라센골격의 한쪽에 피리디닐페닐기가 치환되어 있고 한쪽은 나프탈레닐기가 치환되어 있어 고도의 비틀린 구조를 가지면서도 전자밀도가 안트라센 골격에 집중되어 색순도와 발광효율이 매우 높다.

청구범위

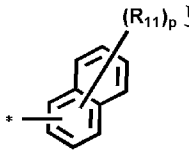
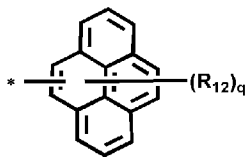
[청구항 1] 하기 화학식 1로 표시되는 페닐안트라센 유도체.

[화학식 1]



[상기 화학식 1에서,

R_1 내지 R_4는 서로 독립적으로 수소, C_1-C_{30}알킬, C_1-C_{30}알콕시 또는 C_6-C_{30}아릴이며;

X는  또는  이며, R_{11} 및 R_{12}는 서로 독립적으로 수소, C_1-C_{30}알킬 또는 C_1-C_{30}알콕시이며;

Y는 C_6-C_{30}아릴 또는 C_3-C_{30}헤테로아릴이며;

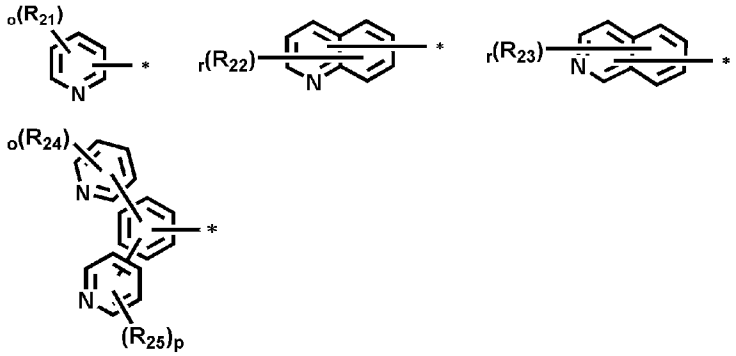
p는 1 내지 7의 정수이며;

q는 1 내지 9의 정수이며, 상기 p 및 q가 2이상인 경우 R_{11} 및 R_{12}는 상이하거나 동일할 수 있으며;

Y의 아릴 또는 헤테로아릴은 C_1-C_{30}알킬, C_1-C_{30}알콕시, C_3-C_{30} 헤테로아릴 또는 C_6-C_{30}아릴로 더 치환될 수 있다.]

[청구항 2] 제 1항에 있어서,

상기 Y는 하기구조에서 선택되는 것인 페닐안트라센 유도체.



[상기 식에서 R_{21} 내지 R_{25}는 서로 독립적으로 수소, C_1-C_{30}알킬, C_1-C_{30}알콕시 또는 C_6-C_{30}아릴이며;

o 및 p는 1 내지 4의 정수이며;

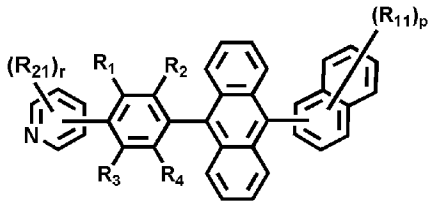
r은 1 내지 6의 정수이며, o, p 및 q가 둘이상인 경우 R_{21} 내지 R_{25}는 서로 동일하거나 상이할 수 있다.]

[청구항 3] 제 1항에 있어서,

상기 화학식 1은 하기 화학식 2로 표시되는 것인 페닐안트라센

유도체.

[화학식 2]



[상기 화학식 2에서,

R_1 내지 R_4는 서로 독립적으로 수소, C_1-C_{30}알킬, C_1-C_{30}알콕시 또는 C_6-C_{30}아릴이며;

R_{11} 또는 R_{21}은 서로 독립적으로 수소, C_1-C_{30}알킬 또는 C_1-C_{30} 알콕시이며;

r은 1 내지 4의 정수이며,

p는 1 내지 7의 정수이며, 상기 p 및 r이 2이상인 경우 각 R_{11} 및 R_{21}는 상이하거나 동일할 수 있다.]

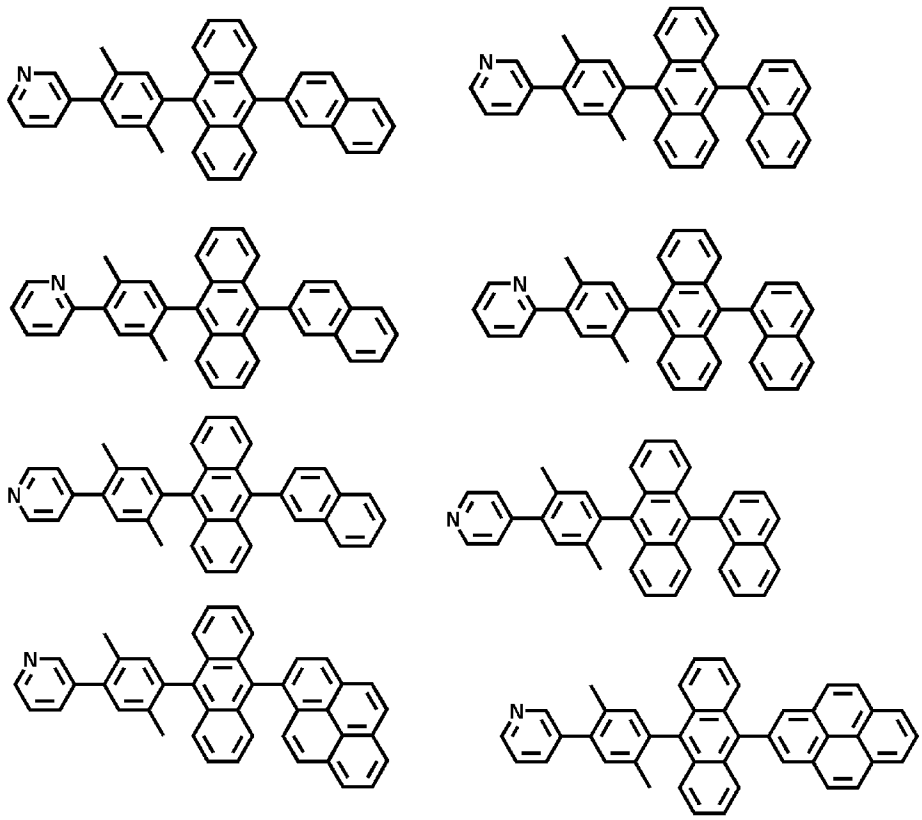
[청구항 4] 제 1항에 있어서,

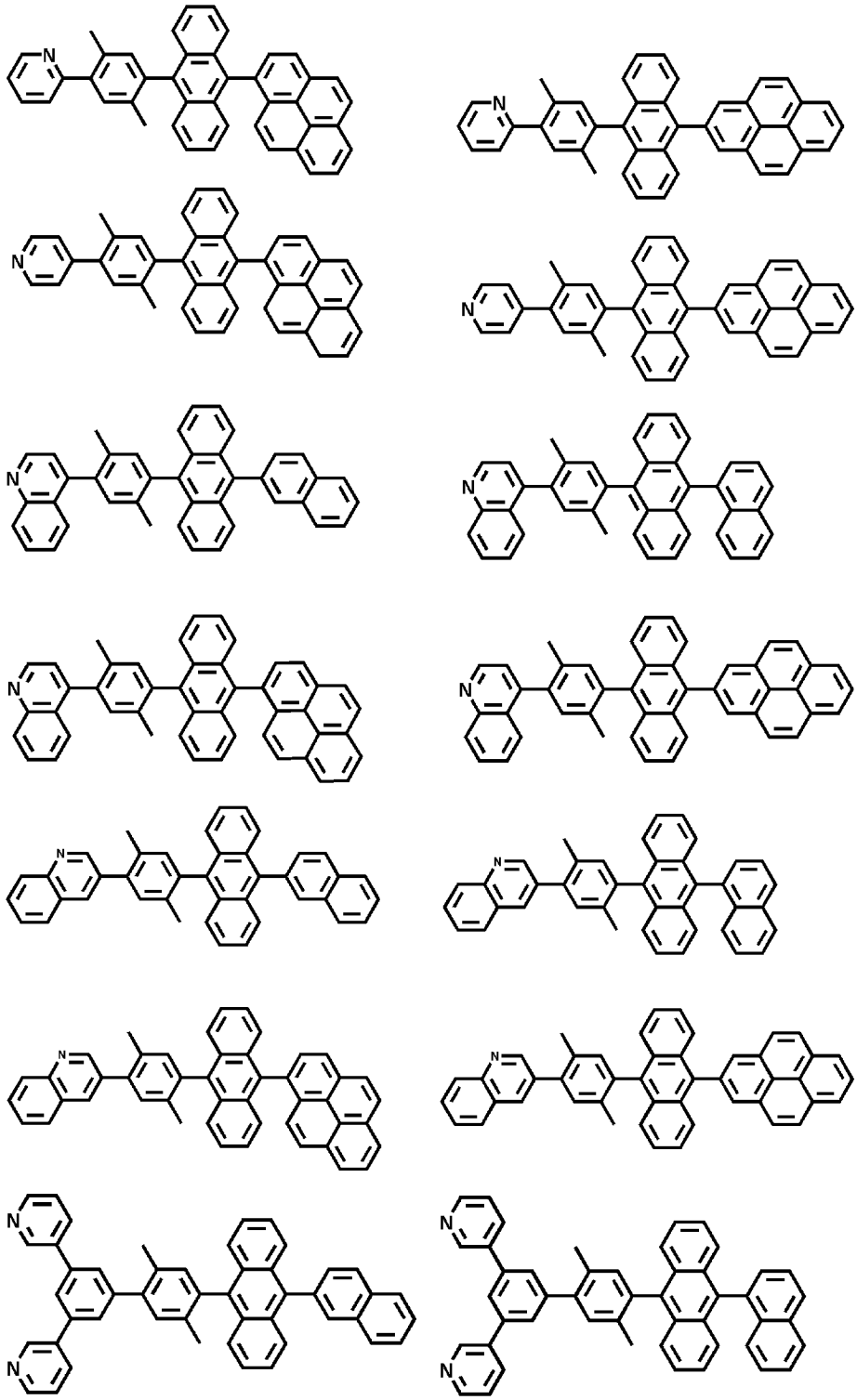
상기 R_1 또는 R_4는 수소이며;

R_2 내지 R_3은 수소 또는 C_1-C_{30}알킬인 페닐안트라센 유도체.

[청구항 5] 제 1항에 있어서,

상기 화학식 1은 하기 화합물로부터 선택되는 페닐안트라센 유도체.

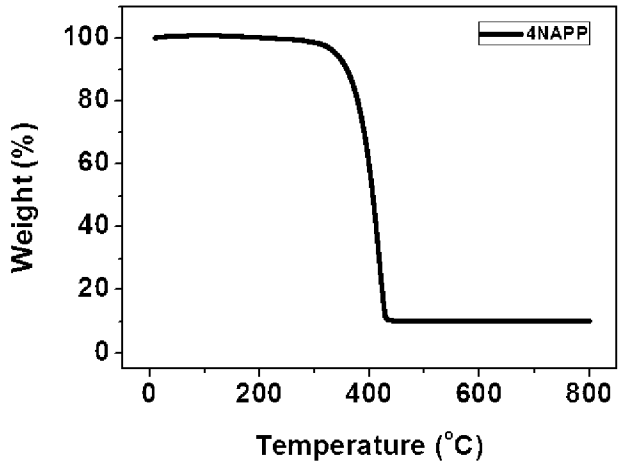




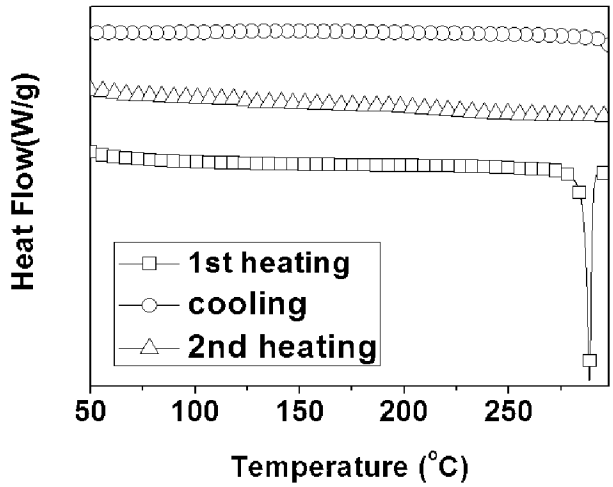
[청구항 6] 양극, 음극 및 양 전극 사이의 발광층을 포함하는 유기 발광 소자에 있어서, 청구항 제1항 내지 제5항에서 선택되는 어느 한 항에 따른 페닐안트라센 유도체를 발광층에 포함하는 유기 발광 소자.

[청구항 7] 제 6항에 있어서,
상기 페닐안트라센 유도체를 호스트 물질로 사용 하는 것인 유기 발광 소자.

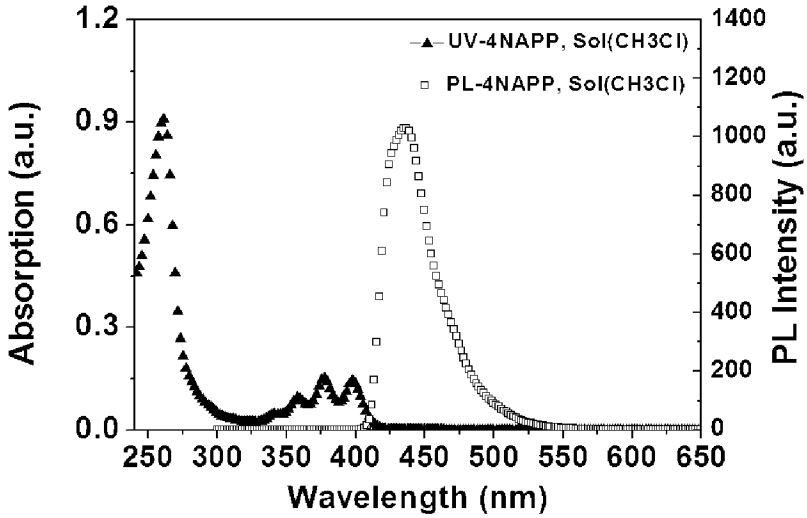
[Fig. 1]



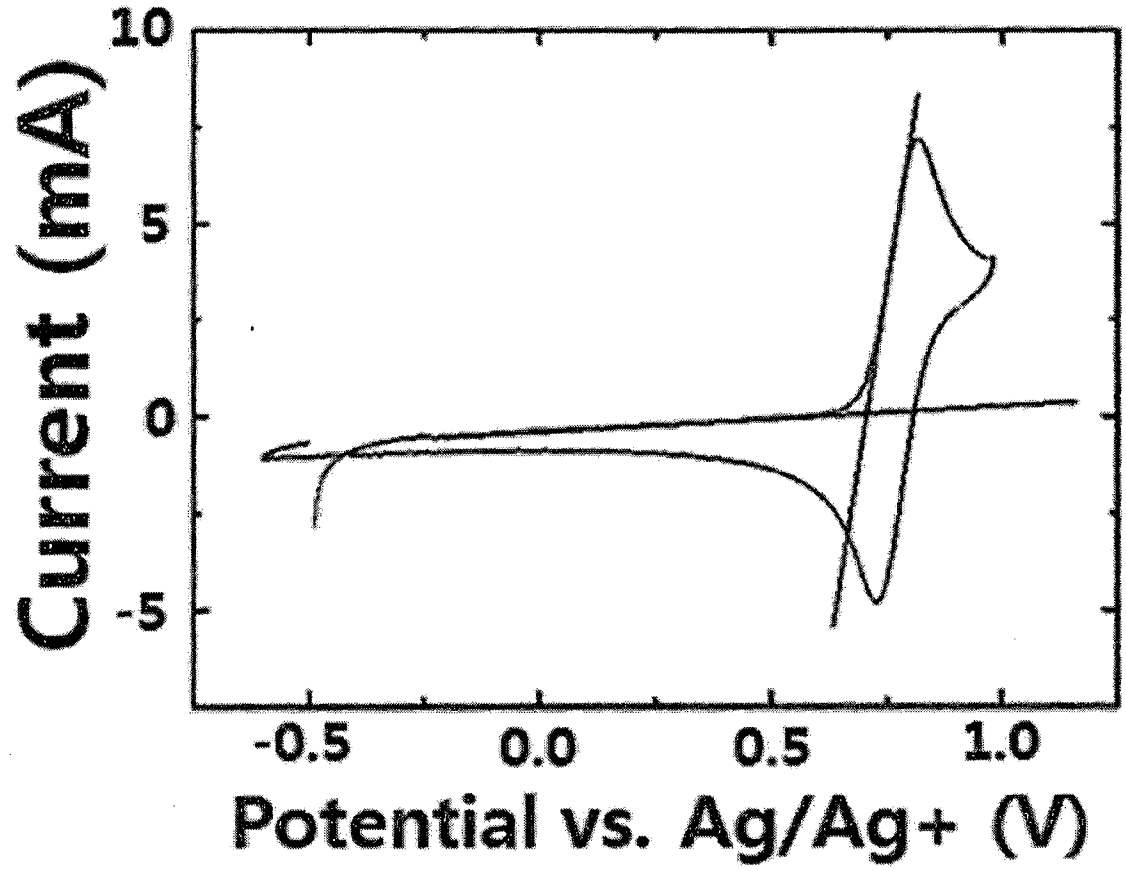
[Fig. 2]



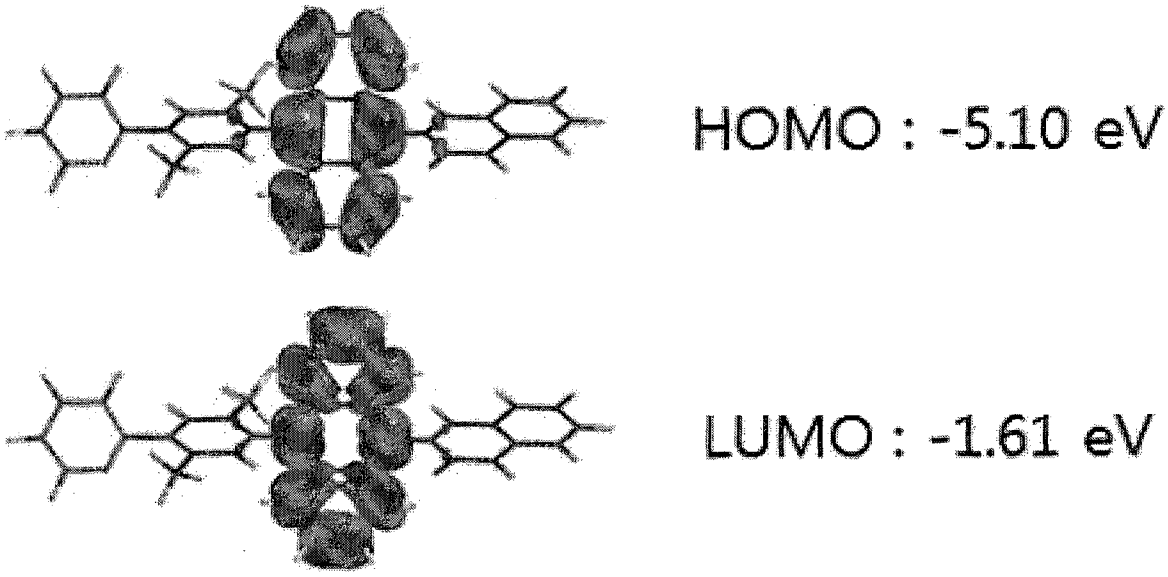
[Fig. 3]



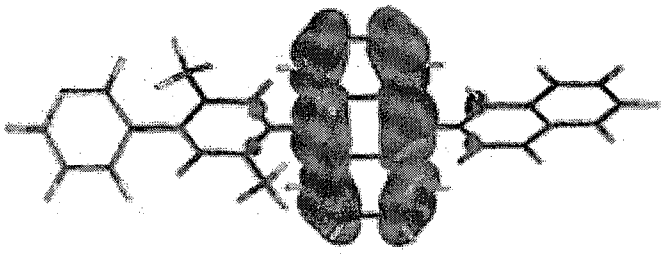
[Fig. 4]


10
5
0
-5
Current (mA)
-0.5
0.0
0.5
1.0
Potential vs. Ag/Ag+ (V)

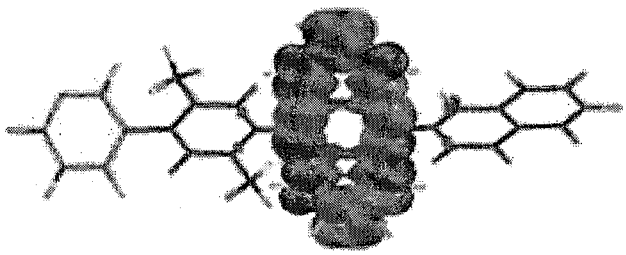
[Fig. 5]


HOMO : -5.10 eV
LUMO : -1.61 eV

[Fig. 6]

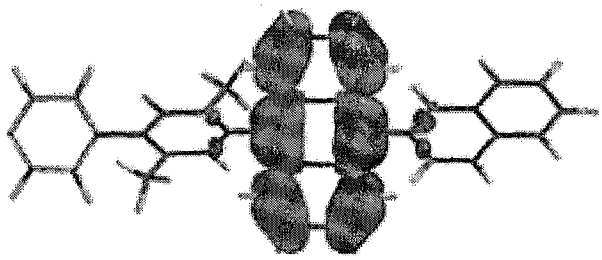


HOMO : -5.18 eV

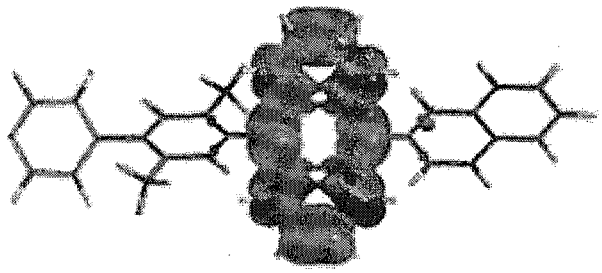


LUMO : -1.70 eV

[Fig. 7]



HOMO : -5.20 eV



LUMO : -1.73 eV

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.
PCT/KR2014/005421

A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER

C07D 213/04(2006.01)i, C07C 15/28(2006.01)i, C09K 11/06(2006.01)i, H01L 51/50(2006.01)i

According to International Patent Classification (IPC) or to both national classification and IPC

B. FIELDS SEARCHED

Minimum documentation searched (classification system followed by classification symbols)

C07D 213/04; C07D 213/16; C07D 213/22; C09K 11/06; H01L 51/50; C07C 15/28; C07C 15/20

Documentation searched other than minimum documentation to the extent that such documents are included in the fields searched
Korean Utility models and applications for Utility models: IPC as above
Japanese Utility models and applications for Utility models: IPC as above

Electronic data base consulted during the international search (name of data base and, where practicable, search terms used)

eKOMPASS (KIPO internal) & Keywords: phenyl antracene, naphthalene, organic electronic device, fluoranthene group

C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
X	WO 2012-060374 A1 (JNC CORPORATION et al.) 10 May 2012 See compound [127] of paragraphs [8], [16] etc.	1-4,6-7
A		5
X	KR 10-2012-0135501 A (SFC CO., LTD.) 14 December 2012 See compound [198] of claim 3 etc., paragraph [208]	1,6,7
A		2-5
X	KR 10-2010-0007552 A (DUKSAN HIGH METAL CO., LTD.) 22 January 2010 See claims 1, 5 and 6	1,6,7
A		2-5

☐ Further documents are listed in the continuation of Box C. ☒ See patent family annex.

* Special categories of cited documents:
"A" document defining the general state of the art which is not considered to be of particular relevance
"E" earlier application or patent but published on or after the international filing date
"L" document which may throw doubts on priority claim(s) or which is cited to establish the publication date of another citation or other special reason (as specified)
"O" document referring to an oral disclosure, use, exhibition or other means
"P" document published prior to the international filing date but later than the priority date claimed
"T" later document published after the international filing date or priority date and not in conflict with the application but cited to understand the principle or theory underlying the invention
"X" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered novel or cannot be considered to involve an inventive step when the document is taken alone
"Y" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered to involve an inventive step when the document is combined with one or more other such documents, such combination being obvious to a person skilled in the art
"&" document member of the same patent family

Date of the actual completion of the international search	Date of mailing of the international search report
19 AUGUST 2014 (19.08.2014)	**19 AUGUST 2014 (19.08.2014)**
Name and mailing address of the ISA/KR Korean Intellectual Property Office Government Complex-Daejeon, 189 Seonsa-ro, Daejeon 302-701, Republic of Korea Facsimile No. 82-42-472-7140	Authorized officer Telephone No.

Form PCT/ISA/210 (second sheet) (July 2009)

INTERNATIONAL SEARCH REPORT
Information on patent family members

International application No.
PCT/KR2014/005421

Patent document cited in search report	Publication date	Patent family member	Publication date
WO 2012-060374 A1	10/05/2012	CN103189355 A	03/07/2013
		JP WO 2012-060374A1	10/05/2012
		KR 10-2013-0140709 A	24/12/2013
		TW201226394 A	01/07/2012
KR 10-2012-0135501 A	14/12/2012	NONE	
KR 10-2010-0007552 A	22/01/2010	KR 1010179450000 B1	02/03/2011

국 제 조 사 보 고 서

국제출원번호
PCT/KR2014/005421

A. 발명이 속하는 기술분류(국제특허분류(IPC))

C07D 213/04(2006.01)i, C07C 15/28(2006.01)i, C09K 11/06(2006.01)i, H01L 51/50(2006.01)i

B. 조사된 분야

조사된 최소문헌(국제특허분류를 기재)

C07D 213/04; C07D 213/16; C07D 213/22; C09K 11/06; H01L 51/50; C07C 15/28; C07C 15/20

조사된 기술분야에 속하는 최소문헌 이외의 문헌

한국등록실용신안공보 및 한국공개실용신안공보: 조사된 최소문헌란에 기재된 IPC

일본등록실용신안공보 및 일본공개실용신안공보: 조사된 최소문헌란에 기재된 IPC

국제조사에 이용된 전산 데이터베이스(데이터베이스의 명칭 및 검색어(해당하는 경우))

eKOMPASS(특허청 내부 검색시스템) & 키워드: 페닐안트라센,나프탈렌기,유기전자소자,플루오란텐기

C. 관련 문헌

카테고리*	인용문헌명 및 관련 구절(해당하는 경우)의 기재	관련 청구항
X	WO 2012-060374 A1 (JNC CORPORATION 외 5명) 2012.05.10 단락 [8], [16]의 화합물 [127] 등 참조	1-4,6-7
A		5
X	KR 10-2012-0135501 A (에스에프씨 주식회사) 2012.12.14 청구항 3의 화합물 [198] 등, 단락 [208] 참조	1,6,7
A		2-5
X	KR 10-2010-0007552 A (덕산하이메탈(주)) 2010.01.22 청구항 1, 5 및 6 참조	1,6,7
A		2-5

☐ 추가 문헌이 C(계속)에 기재되어 있습니다.

☒ 대응특허에 관한 별지를 참조하십시오.

* 인용된 문헌의 특별 카테고리:

"A" 특별히 관련이 없는 것으로 보이는 일반적인 기술수준을 정의한 문헌

"E" 국제출원일보다 빠른 출원일 또는 우선일을 가지나 국제출원일 이후에 공개된 선출원 또는 특허 문헌

"L" 우선권 주장에 의문을 제기하는 문헌 또는 다른 인용문헌의 공개일 또는 다른 특별한 이유(이유를 명시)를 밝히기 위하여 인용된 문헌

"O" 구두 개시, 사용, 전시 또는 기타 수단을 언급하고 있는 문헌

"P" 우선일 이후에 공개되었으나 국제출원일 이전에 공개된 문헌

"T" 국제출원일 또는 우선일 후에 공개된 문헌으로, 출원과 상충하지 않으며 발명의 기초가 되는 원리나 이론을 이해하기 위해 인용된 문헌

"X" 특별한 관련이 있는 문헌. 해당 문헌 하나만으로 청구된 발명의 신규성 또는 진보성이 없는 것으로 본다.

"Y" 특별한 관련이 있는 문헌. 해당 문헌이 하나 이상의 다른 문헌과 조합하는 경우로 그 조합이 당업자에게 자명한 경우 청구된 발명은 진보성이 없는 것으로 본다.

"&" 동일한 대응특허문헌에 속하는 문헌

국제조사의 실제 완료일	국제조사보고서 발송일
2014년 08월 19일 (19.08.2014)	2014년 08월 19일 (19.08.2014)

ISA/KR의 명칭 및 우편주소
대한민국 특허청
(302-701) 대전광역시 서구 청사로 189,
4동 (둔산동, 정부대전청사)
팩스 번호 +82-42-472-7140

심사관
김현숙
전화번호 +82-42-481-5436

국제조사보고서
대응특허에 관한 정보

국제출원번호
PCT/KR2014/005421

국제조사보고서에서 인용된 특허문헌	공개일	대응특허문헌	공개일
WO 2012-060374 A1	2012/05/10	CN103189355 A	2013/07/03
		JP WO 2012-060374A1	2012/05/10
		KR 10-2013-0140709 A	2013/12/24
		TW201226394 A	2012/07/01
KR 10-2012-0135501 A	2012/12/14	없음	
KR 10-2010-0007552 A	2010/01/22	KR 1010179450000 B1	2011/03/02