

(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 공개특허공보(A)

(11) 공개번호 10-2021-0041376

(43) 공개일자 2021년04월15일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)

C07D 413/10 (2006.01) C07D 263/57 (2006.01)

C07D 413/12 (2006.01) H01L 51/00 (2006.01)

H01L 51/50 (2006.01)

(52) CPC특허분류

C07D 413/10 (2013.01)

C07D 263/57 (2013.01)

(21) 출원번호 10-2019-0124009

(22) 출원일자 2019년10월07일

심사청구일자 2019년10월07일

(71) 출원인

경희대학교 산학협력단

경기도 용인시 기흥구 덕영대로 1732 (서천동, 경희대학교 국제캠퍼스내)

(72) 발명자

박중욱

서울특별시 강남구 남부순환로363길 30, 103동 1004호(도곡동, 도곡쌍용에가아파트)

강석우

인천광역시 남동구 앵고개로815번길 22, 324동 1108호 (논현동, 소래휴먼시아3단지아파트)

(74) 대리인

유미특허법인

전체 청구항 수 : 총 13 항

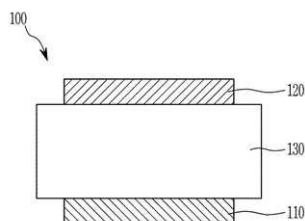
(54) 발명의 명칭 유기 광전자 소자용 화합물 및 이를 포함하는 유기 광전자 소자

(57) 요약

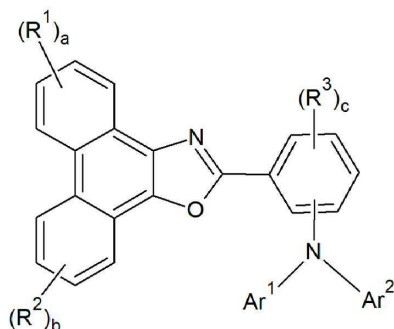
하기 화학식 1로 표시되는 유기 광전자 소자용 화합물 및 이를 포함하는 유기 광전자 소자를 제공한다.

(뒷면에 계속)

대표도 - 도1



[화학식 1]



상기 화학식 1에서,

Ar^1 및 Ar^2 은 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 C5 내지 C20 아릴기 또는 치환 또는 비치환된 C3 내지 C20 헤테로아릴기에서 선택되거나, 서로 연결되어 융합링을 형성하고,

R^1 내지 R^3 는 각각 독립적으로 수소, 중수소, C1 내지 C6의 알킬기 또는 C1 내지 C6의 플루오로알킬기이고,

a, b 및 c는 각각 독립적으로 0 내지 4의 정수이고,

$-N(Ar^1)(Ar^2)$ 는 페난트로록사졸릴기(phenanthroxazolyl group)와 페닐렌 링커의 결합에 대하여 오르쏘 또는 메타 위치에 결합된다.

(52) CPC특허분류

C07D 413/12 (2013.01)

H01L 51/0069 (2013.01)

H01L 51/0071 (2013.01)

H01L 51/50 (2013.01)

이 발명을 지원한 국가연구개발사업

과제고유번호 20180683

부처명 한국연구재단

과제관리(전문)기관명 한국연구재단(학술진흥)

연구사업명 원천기술개발사업/나노·소재기술개발사업

연구과제명 페로브스카이트용 전하 수송재료 및 박막공정 개발(2/5)

기 여 율 1/1

과제수행기관명 경희대학교 산학협력단

연구기간 2017.07.01~2022.06.30

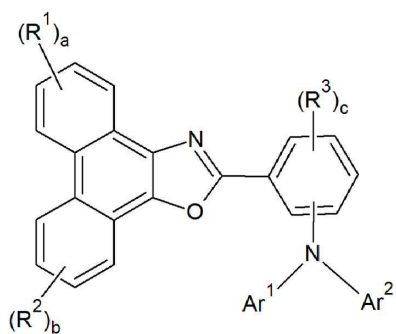
명세서

청구범위

청구항 1

하기 화학식 1로 표시되는 유기 광전자 소자용 화합물:

[화학식 1]



상기 화학식 1에서,

Ar¹ 및 Ar²은 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 C5 내지 C20 아릴기 또는 치환 또는 비치환된 C3 내지 C20 헤테로아릴기에서 선택되거나, 서로 연결되어 융합링을 형성하고,

R¹ 내지 R³는 각각 독립적으로 수소, 중수소, C1 내지 C6의 알킬기 또는 C1 내지 C6의 플루오로알킬기이고,

a, b 및 c는 각각 독립적으로 0 내지 4의 정수이고,

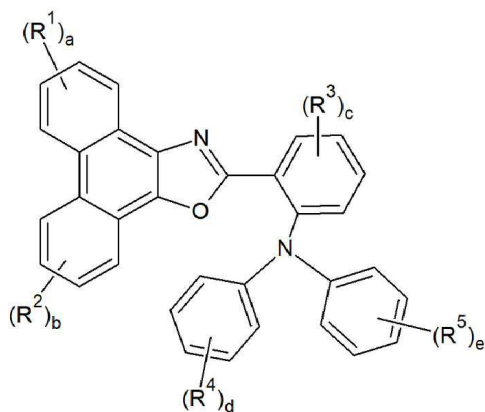
-N(Ar¹)(Ar²)는 페난트로록사졸릴기(phenanthroxazolyl group)와 페닐렌 링커의 결합에 대하여 오르쏘 또는 메타 위치에 결합된다.

청구항 2

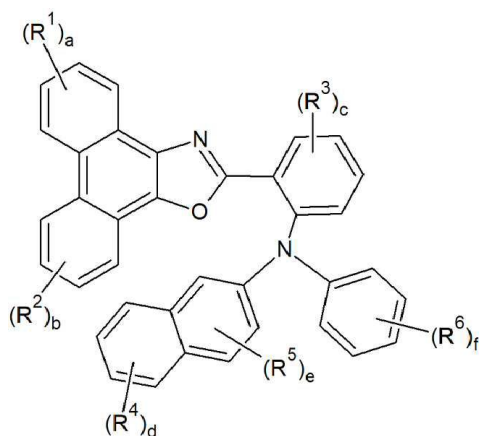
제1항에 있어서,

상기 화합물은 하기 화학식 1A 또는 화학식 1B로 표현되는 것인, 유기 광전자 소자용 화합물:

[화학식 1A]



[화학식 1B]



상기 화학식 1A 및 화학식 1B에서,

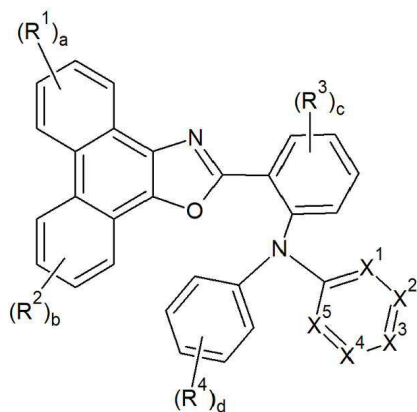
R^1 내지 R^6 은 각각 독립적으로 수소, 중수소, C1 내지 C6의 알킬기 또는 C1 내지 C6의 플루오로알킬기이고,
a, b, c, d 및 f는 각각 독립적으로 0 내지 4의 정수이고,
e는 0 내지 3의 정수이다.

청구항 3

제1항에 있어서,

상기 화합물은 하기 화학식 1C로 표현되는 유기 광전자 소자용 화합물:

[화학식 1C]



상기 화학식 1C에서,

R^1 내지 R^4 은 각각 독립적으로 수소, 중수소, C1 내지 C6의 알킬기 또는 C1 내지 C6의 플루오로알킬기이고,
a, b, c 및 d는 각각 독립적으로 0 내지 4의 정수이고,

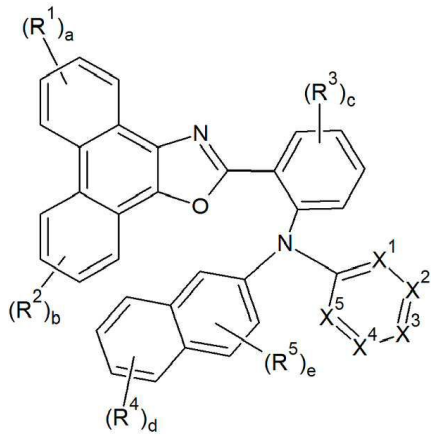
X^1 내지 X^5 는 각각 독립적으로 N 또는 CR^a 이고(여기에서 R^a 는 각각 독립적으로 수소, 중수소, C1 내지 C6의 알킬기 또는 C1 내지 C6의 플루오로알킬기이거나 인접한 R^a 는 서로 연결되어 융합링을 형성할 수 있음), X^1 내지 X^5 중 적어도 하나는 N이다.

청구항 4

제1항에 있어서,

상기 화합물은 하기 화학식 1D로 표현되는 유기 광전자 소자용 화합물:

[화학식 1D]



상기 화학식 1D에서,

R^1 내지 R^5 는 각각 독립적으로 수소, 중수소, C1 내지 C6의 알킬기 또는 C1 내지 C6의 플루오로알킬기이고,

a, b, c 및 d는 각각 독립적으로 0 내지 4의 정수이고,

e는 0 내지 3의 정수이고,

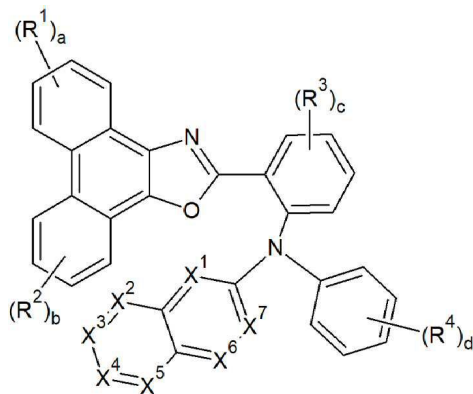
X^1 내지 X^5 는 각각 독립적으로 N 또는 CR^a 이고(여기에서 R^a 는 각각 독립적으로 수소, 중수소, C1 내지 C6의 알킬기 또는 C1 내지 C6의 플루오로알킬기이거나 인접한 R^a 는 서로 연결되어 융합링을 형성할 수 있음), X^1 내지 X^5 중 적어도 하나는 N이다.

청구항 5

제1항에 있어서,

상기 화합물은 하기 화학식 1E로 표현되는 유기 광전자 소자용 화합물:

[화학식 1E]



상기 화학식 1E에서,

R^1 내지 R^4 는 각각 독립적으로 수소, 중수소, C1 내지 C6의 알킬기 또는 C1 내지 C6의 플루오로알킬기이고,

a, b, c, d 및 e는 각각 독립적으로 0 내지 4의 정수이고,

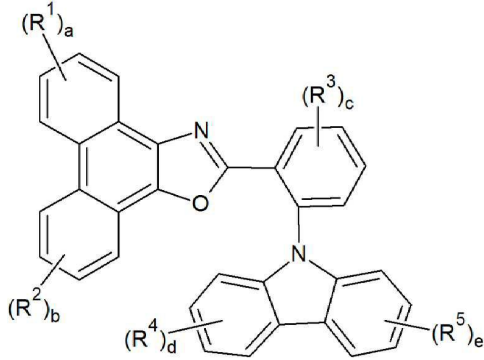
X^1 내지 X^7 는 각각 독립적으로 N 또는 CR^a 이고(여기에서 R^a 는 각각 독립적으로 수소, 중수소, C1 내지 C6의 알킬기 또는 C1 내지 C6의 플루오로알킬기이거나 인접한 R^a 는 서로 연결되어 융합링을 형성할 수 있음), X^1 내지 X^7 중 적어도 하나는 N이다.

청구항 6

제1항에 있어서,

상기 화합물은 하기 화학식 1F로 표현되는 유기 광전자 소자용 화합물:

[화학식 1F]



상기 화학식 1F에서,

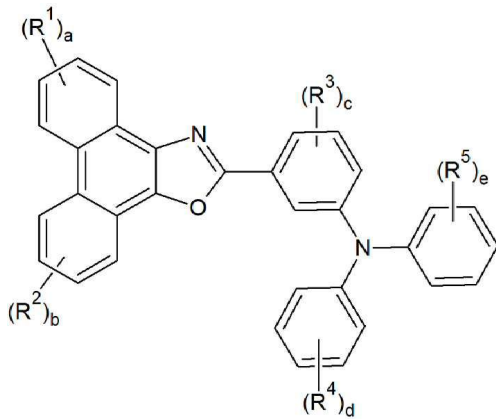
R^1 내지 R^5 은 각각 독립적으로 수소, 중수소, C1 내지 C6의 알킬기 또는 C1 내지 C6의 플루오로알킬기이고, a, b, c, d 및 e는 각각 독립적으로 0 내지 4의 정수이다.

청구항 7

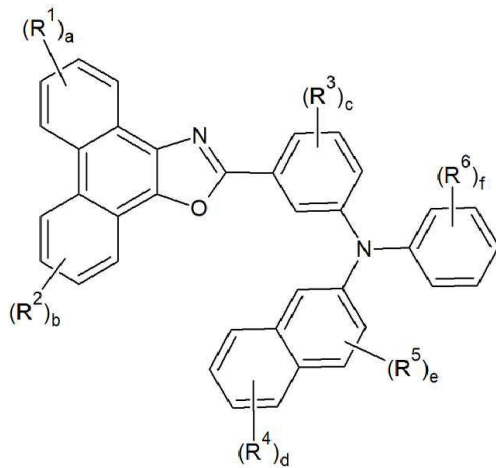
제1항에 있어서,

상기 화합물은 하기 화학식 2A 또는 화학식 2B로 표현되는 유기 광전자 소자용 화합물:

[화학식 2A]



[화학식 2B]



상기 화학식 2A 및 화학식 2B에서,

R^1 내지 R^7 은 각각 독립적으로 수소, 중수소, C1 내지 C6의 알킬기 또는 C1 내지 C6의 플루오로알킬기이고,

a, b, c, d 및 f는 각각 독립적으로 0 내지 4의 정수이고,

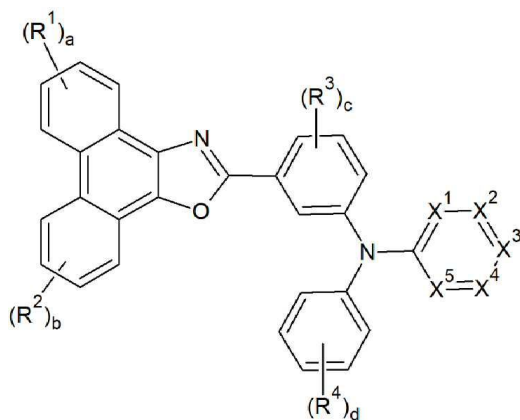
e는 0 내지 3의 정수이다.

청구항 8

제1항에 있어서,

상기 화합물은 하기 화학식 2C로 표현되는 유기 광전자 소자용 화합물:

[화학식 2C]



상기 화학식 2C에서,

R^1 내지 R^4 는 각각 독립적으로 수소, 중수소, C1 내지 C6의 알킬기 또는 C1 내지 C6의 플루오로알킬기이고,

a, b, c 및 d는 각각 독립적으로 0 내지 4의 정수이고,

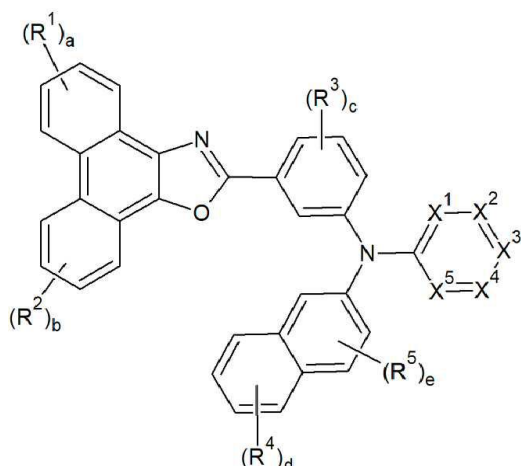
X^1 내지 X^5 는 각각 독립적으로 N 또는 CR^a 이고(여기에서 R^a 는 각각 독립적으로 수소, 중수소, C1 내지 C6의 알킬기 또는 C1 내지 C6의 플루오로알킬기이거나 인접한 R^a 는 서로 연결되어 융합링을 형성할 수 있음), X^1 내지 X^5 중 적어도 하나는 N이다.

청구항 9

제1항에 있어서,

상기 화합물은 하기 화학식 2D로 표현되는 유기 광전자 소자용 화합물:

[화학식 2D]



상기 화학식 2D에서,

R^1 내지 R^5 은 각각 독립적으로 수소, 중수소, C1 내지 C6의 알킬기 또는 C1 내지 C6의 플루오로알킬기이고,

a, b, c 및 d는 각각 독립적으로 0 내지 4의 정수이고,

e는 0 내지 3의 정수이고,

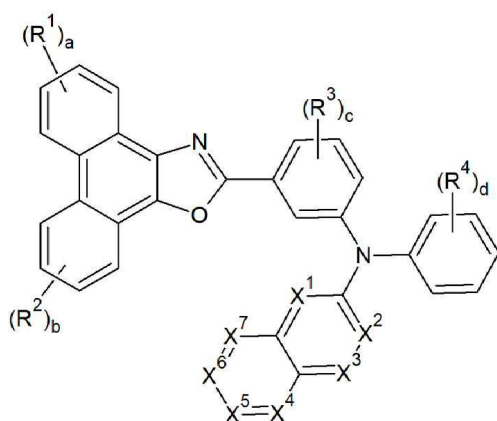
X^1 내지 X^5 는 각각 독립적으로 N 또는 CR^a 이고(여기에서 R^a 는 각각 독립적으로 수소, 중수소, C1 내지 C6의 알킬기 또는 C1 내지 C6의 플루오로알킬기이거나 인접한 R^a 는 서로 연결되어 융합링을 형성할 수 있음), X^1 내지 X^5 중 적어도 하나는 N이다.

청구항 10

제1항에 있어서,

상기 화합물은 하기 화학식 2E로 표현되는 유기 광전자 소자용 화합물:

[화학식 2E]



상기 화학식 2E에서,

R^1 내지 R^4 는 각각 독립적으로 수소, 중수소, C1 내지 C6의 알킬기 또는 C1 내지 C6의 플루오로알킬기이고,

a, b, c 및 d는 각각 독립적으로 0 내지 4의 정수이고,

X^1 내지 X^7 는 각각 독립적으로 N 또는 CR^a 이고(여기에서 R^a 는 각각 독립적으로 수소, 중수소, C1 내지 C6의 알킬

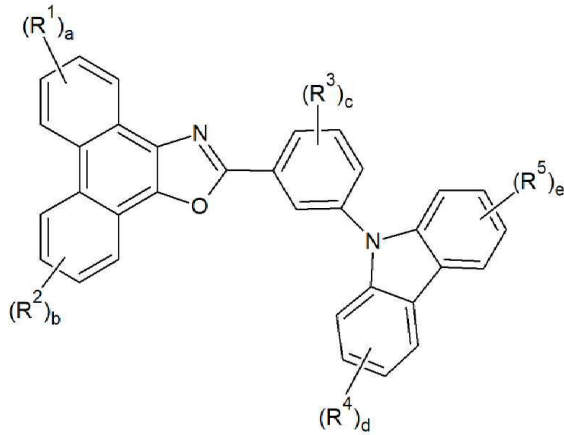
기 또는 C1 내지 C6의 플루오로알킬기이거나 인접한 R^a는 서로 연결되어 융합링을 형성할 수 있음), X¹ 내지 X⁷ 중 적어도 하나는 N이다.

청구항 11

제1항에 있어서,

상기 화합물은 하기 화학식 2F로 표현되는 유기 광전자 소자용 화합물:

[화학식 2F]



상기 화학식 2F에서,

R¹ 내지 R⁷은 각각 독립적으로 수소, 중수소, C1 내지 C6의 알킬기 또는 C1 내지 C6의 플루오로알킬기이고, a, b, c, d 및 e는 각각 독립적으로 0 내지 4의 정수이다.

청구항 12

서로 마주하는 양극과 음극, 그리고

상기 양극과 상기 음극 사이에 위치하는 적어도 1층의 유기층을 포함하고,

상기 유기층은 제1항 내지 제11항 중 어느 한 항에 따른 화합물을 포함하는 유기 광전자 소자.

청구항 13

제12항에 있어서,

상기 유기층은 발광층을 포함하고,

상기 발광층은 상기 화합물을 포함하는 유기 광전자 소자.

발명의 설명

기술 분야

[0001] 유기 광전자 소자용 화합물 및 이를 포함하는 유기 광전자 소자에 관한 것이다.

배경 기술

[0002] 유기 광전자 소자(organic optoelectronic device)는 전기 에너지와 광 에너지를 상호 전환할 수 있는 소자이다.

[0003] 유기 광전자 소자는 동작 원리에 따라 크게 두 가지로 나눌 수 있다. 하나는 광 에너지에 의해 형성된 엑시톤(exciton)이 전자와 정공으로 분리되고 상기 전자와 정공이 각각 다른 전극으로 전달되면서 전기 에너지를 발생

하는 광전 소자이고, 다른 하나는 전극에 전압 또는 전류를 공급하여 전기 에너지로부터 광 에너지를 발생하는 발광 소자이다.

[0004] 유기 광전자 소자의 예로는 유기 광전 소자, 유기 발광 소자 및 유기 태양 전지 등을 들 수 있다.

[0005] 이 중, 유기 발광 소자(organic light emitting diode, OLED)는 근래 평판 표시 장치의 수요 증가에 따라 크게 주목받고 있다. 상기 유기 발광 소자는 유기 발광 재료에 전류를 가하여 전기 에너지를 빛으로 전환시키는 소자로서, 통상 양극(anode)과 음극(cathode) 사이에 유기층이 삽입된 구조로 이루어져 있다. 유기 발광 소자의 발광 파장 및 성능은 상기 유기층의 특성에 의해 영향을 많이 받으며, 그 중에서도 상기 유기층에 포함된 호스트 재료에 의해 영향을 많이 받는다.

발명의 내용

해결하려는 과제

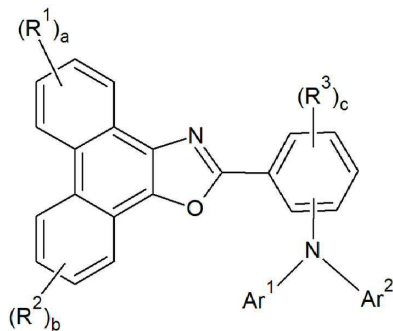
[0006] 일 구현예는 유기 광전자 소자에 적용 가능한 화합물을 제공한다.

[0007] 다른 구현예는 상기 화합물을 포함하는 유기 광전자 소자를 제공한다.

과제의 해결 수단

[0008] 일 구현예에 따르면, 하기 화학식 1로 표시되는 유기 광전자 소자용 화합물을 제공한다.

[0009] [화학식 1]



[0010]

[0011] 상기 화학식 1에서,

[0012] Ar¹ 및 Ar²은 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 C5 내지 C20 아릴기 또는 치환 또는 비치환된 C3 내지 C20 헤테로아릴기에서 선택되거나, 서로 연결되어 융합링을 형성하고,

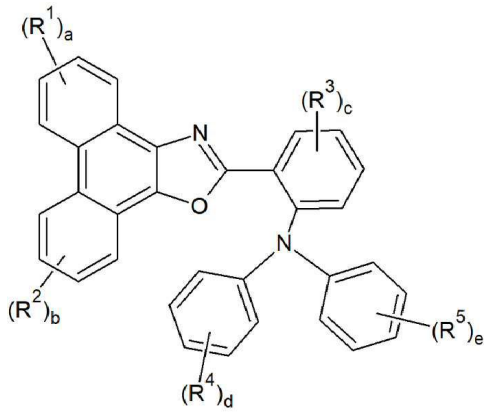
[0013] R¹ 내지 R³는 각각 독립적으로 수소, 중수소, C1 내지 C6의 알킬기 또는 C1 내지 C6의 플루오로알킬기이고,

[0014] a, b 및 c는 각각 독립적으로 0 내지 4의 정수이고,

[0015] -N(Ar¹)(Ar²)는 페난트로록사졸릴기(phenanthroxazolyl group)와 페닐렌 링커의 결합에 대하여 오르쏘 또는 메타 위치에 결합된다.

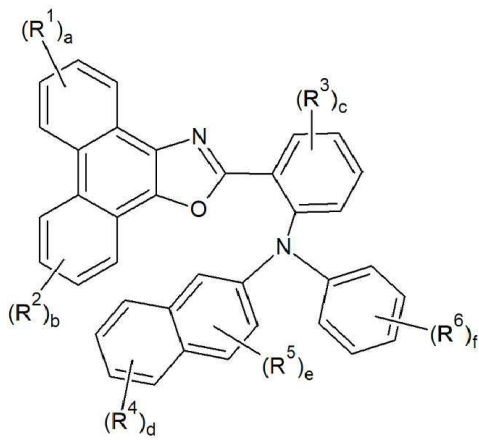
[0016] 상기 화합물은 하기 화학식 1A 또는 화학식 1B로 표현될 수 있다.

[0017] [화학식 1A]



[0018]

[0019] [화학식 1B]



[0020]

[0021] 상기 화학식 1A 및 화학식 1B에서,

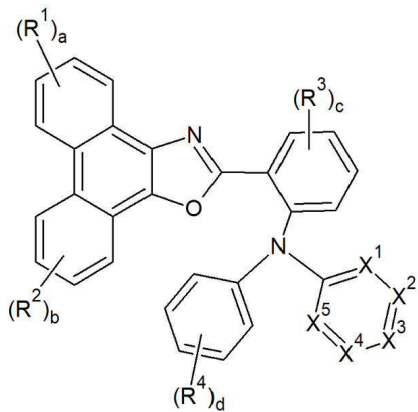
[0022] R^1 내지 R^6 은 각각 독립적으로 수소, 중수소, C1 내지 C6의 알킬기 또는 C1 내지 C6의 플루오로알킬기이고,

[0023] a, b, c, d 및 f는 각각 독립적으로 0 내지 4의 정수이고,

[0024] e는 0 내지 3의 정수이다.

[0025] 상기 화합물은 하기 화학식 1C로 표현될 수 있다.

[0026] [화학식 1C]



[0027]

[0028] 상기 화학식 1C에서,

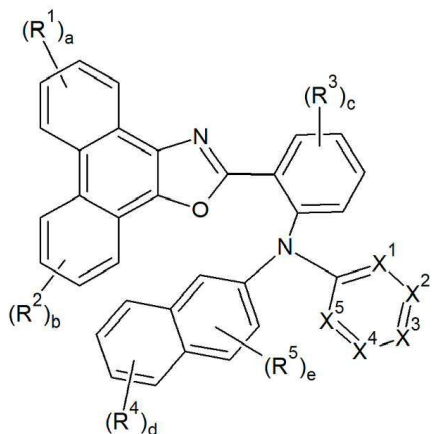
[0029] R^1 내지 R^4 은 각각 독립적으로 수소, 중수소, C1 내지 C6의 알킬기 또는 C1 내지 C6의 플루오로알킬기이고,

[0030] a, b, c 및 d는 각각 독립적으로 0 내지 4의 정수이고,

[0031] X^1 내지 X^5 는 각각 독립적으로 N 또는 CR^a 이고(여기에서 R^a 는 각각 독립적으로 수소, 중수소, C1 내지 C6의 알킬기 또는 C1 내지 C6의 플루오로알킬기이거나 인접한 R^a 는 서로 연결되어 융합링을 형성할 수 있음), X^1 내지 X^5 중 적어도 하나는 N이다.

[0032] 상기 화합물은 하기 화학식 1D로 표현될 수 있다.

[0033] [화학식 1D]



[0034]

[0035] 상기 화학식 1D에서,

[0036] R^1 내지 R^5 는 각각 독립적으로 수소, 중수소, C1 내지 C6의 알킬기 또는 C1 내지 C6의 플루오로알킬기이고,

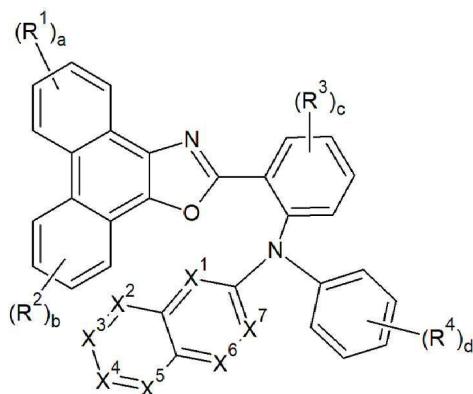
[0037] a, b, c 및 d는 각각 독립적으로 0 내지 4의 정수이고,

[0038] e는 0 내지 3의 정수이고,

[0039] X^1 내지 X^5 는 각각 독립적으로 N 또는 CR^a 이고(여기에서 R^a 는 각각 독립적으로 수소, 중수소, C1 내지 C6의 알킬기 또는 C1 내지 C6의 플루오로알킬기이거나 인접한 R^a 는 서로 연결되어 융합링을 형성할 수 있음), X^1 내지 X^5 중 적어도 하나는 N이다.

[0040] 상기 화합물은 하기 화학식 1E로 표현될 수 있다.

[0041] [화학식 1E]



[0042]

[0043] 상기 화학식 1E에서,

[0044] R^1 내지 R^4 는 각각 독립적으로 수소, 중수소, C1 내지 C6의 알킬기 또는 C1 내지 C6의 플루오로알킬기이고,

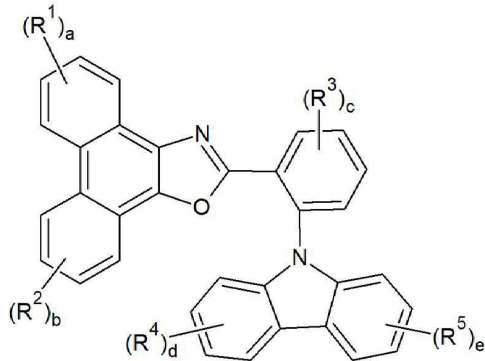
[0045] a, b, c, d 및 e는 각각 독립적으로 0 내지 4의 정수이고,

[0046] X^1 내지 X^7 는 각각 독립적으로 N 또는 CR^a 이고(여기에서 R^a 는 각각 독립적으로 수소, 중수소, C1 내지 C6의 알킬

기 또는 C1 내지 C6의 플루오로알킬기이거나 인접한 R^a는 서로 연결되어 융합링을 형성할 수 있음), X¹ 내지 X⁷ 중 적어도 하나는 N이다.

[0047] 상기 화합물은 하기 화학식 1F로 표현될 수 있다.

[0048] [화학식 1F]



[0049]

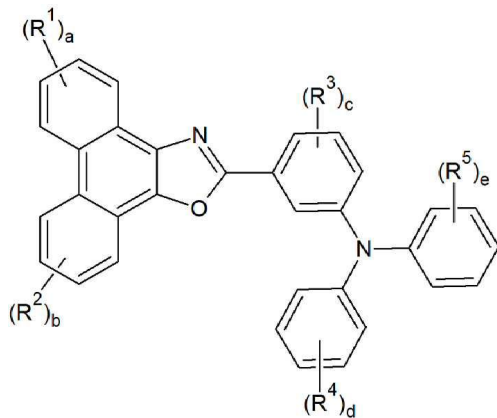
[0050] 상기 화학식 1F에서,

[0051] R¹ 내지 R⁵은 각각 독립적으로 수소, 중수소, C1 내지 C6의 알킬기 또는 C1 내지 C6의 플루오로알킬기이고,

[0052] a, b, c, d 및 e는 각각 독립적으로 0 내지 4의 정수이다.

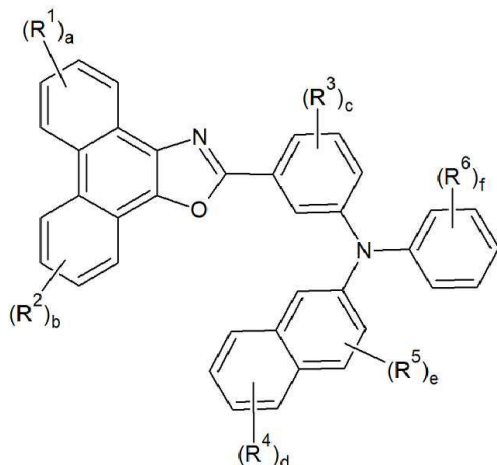
[0053] 상기 화합물은 하기 화학식 2A 또는 화학식 2B로 표현될 수 있다.

[0054] [화학식 2A]



[0055]

[0056] [화학식 2B]



[0057]

[0058] 상기 화학식 2A 및 화학식 2B에서,

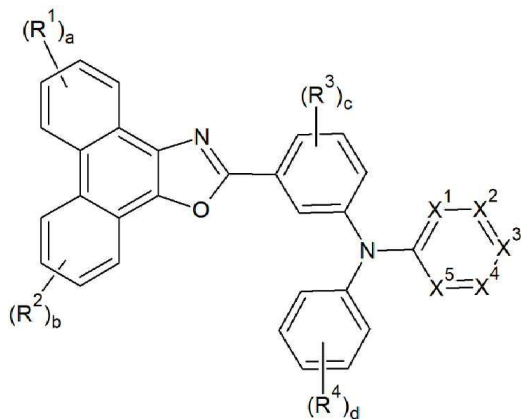
[0059] R^1 내지 R^7 은 각각 독립적으로 수소, 중수소, C1 내지 C6의 알킬기 또는 C1 내지 C6의 플루오로알킬기이고,

[0060] a, b, c, d 및 f는 각각 독립적으로 0 내지 4의 정수이고,

[0061] e는 0 내지 3의 정수이다.

[0062] 상기 화합물은 하기 화학식 2C로 표현될 수 있다.

[0063] [화학식 2C]



[0064]

[0065] 상기 화학식 2C에서,

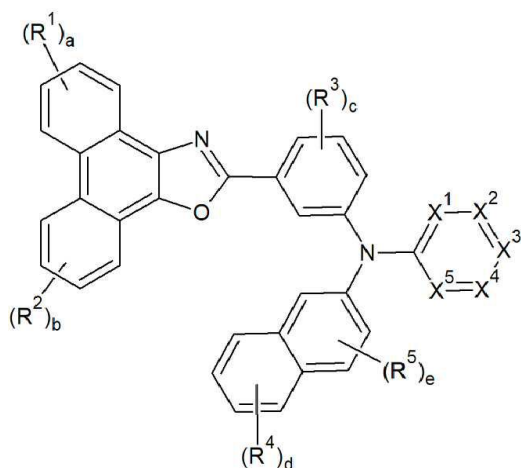
[0066] R^1 내지 R^4 는 각각 독립적으로 수소, 중수소, C1 내지 C6의 알킬기 또는 C1 내지 C6의 플루오로알킬기이고,

[0067] a, b, c 및 d는 각각 독립적으로 0 내지 4의 정수이고,

[0068] X^1 내지 X^5 는 각각 독립적으로 N 또는 CR^a 이고(여기에서 R^a 는 각각 독립적으로 수소, 중수소, C1 내지 C6의 알킬기 또는 C1 내지 C6의 플루오로알킬기이거나 인접한 R^a 는 서로 연결되어 융합링을 형성할 수 있음), X^1 내지 X^5 중 적어도 하나는 N이다.

[0069] 상기 화합물은 하기 화학식 2D로 표현될 수 있다.

[0070] [화학식 2D]



[0071]

[0072] 상기 화학식 2D에서,

[0073] R^1 내지 R^5 는 각각 독립적으로 수소, 중수소, C1 내지 C6의 알킬기 또는 C1 내지 C6의 플루오로알킬기이고,

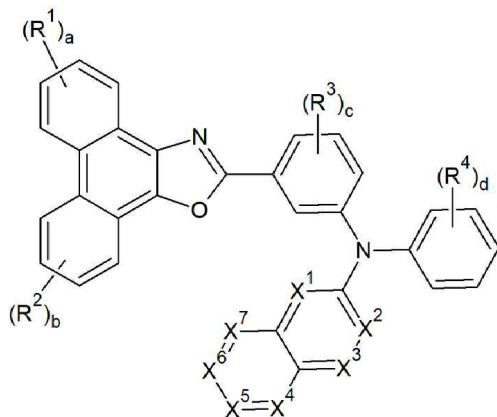
[0074] a, b, c 및 d는 각각 독립적으로 0 내지 4의 정수이고,

[0075] e는 0 내지 3의 정수이고,

[0076] X^1 내지 X^5 는 각각 독립적으로 N 또는 CR^a 이고(여기에서 R^a 는 각각 독립적으로 수소, 중수소, C1 내지 C6의 알킬기 또는 C1 내지 C6의 플루오로알킬기이거나 인접한 R^a 는 서로 연결되어 융합링을 형성할 수 있음), X^1 내지 X^5 중 적어도 하나는 N이다.

[0077] 상기 화합물은 하기 화학식 2E로 표현될 수 있다.

[0078] [화학식 2E]



[0079]

[0080] 상기 화학식 2E에서,

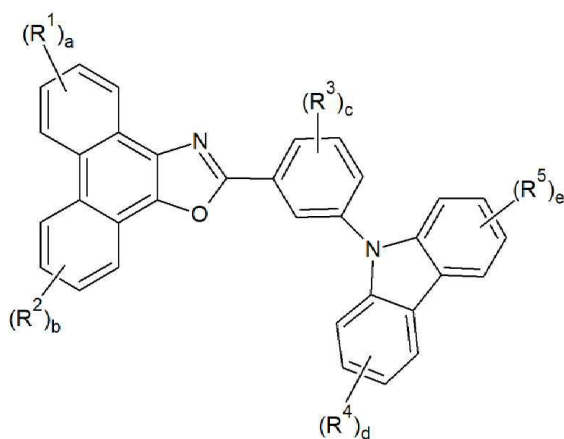
[0081] R^1 내지 R^4 는 각각 독립적으로 수소, 중수소, C1 내지 C6의 알킬기 또는 C1 내지 C6의 플루오로알킬기이고,

[0082] a, b, c 및 d는 각각 독립적으로 0 내지 4의 정수이고,

[0083] X^1 내지 X^7 는 각각 독립적으로 N 또는 CR^a 이고(여기에서 R^a 는 각각 독립적으로 수소, 중수소, C1 내지 C6의 알킬기 또는 C1 내지 C6의 플루오로알킬기이거나 인접한 R^a 는 서로 연결되어 융합링을 형성할 수 있음), X^1 내지 X^7 중 적어도 하나는 N이다.

[0084] 상기 화합물은 하기 화학식 2F로 표현될 수 있다.

[0085] [화학식 2F]



[0086]

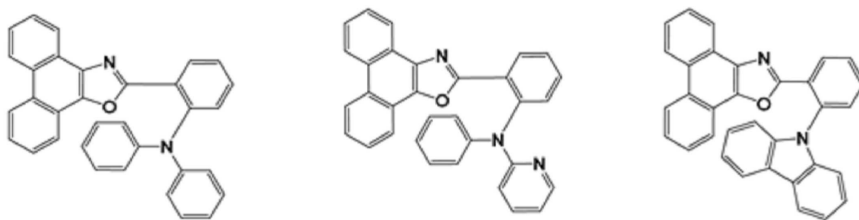
[0087] 상기 화학식 2F에서,

[0088] R^1 내지 R^7 는 각각 독립적으로 수소, 중수소, C1 내지 C6의 알킬기 또는 C1 내지 C6의 플루오로알킬기이고,

[0089] a, b, c, d 및 e는 각각 독립적으로 0 내지 4의 정수이다.

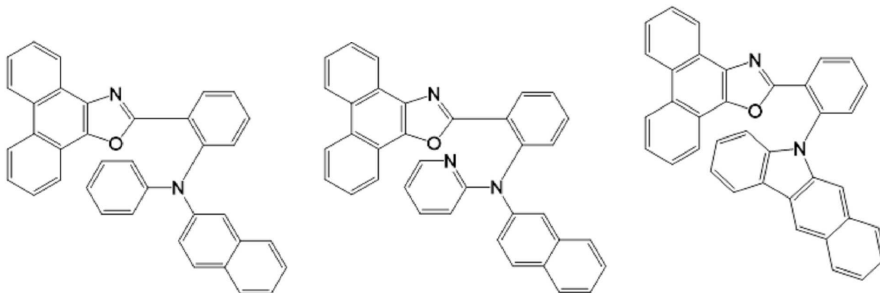
[0090] 상기 화학식 1로 표시되는 화합물의 보다 구체적인 예로는 하기 화학식 A-1 내지 B-6의 화합물을 들 수 있다.

[0091] [화학식 A-1] [화학식 A-2] [화학식 A-3]



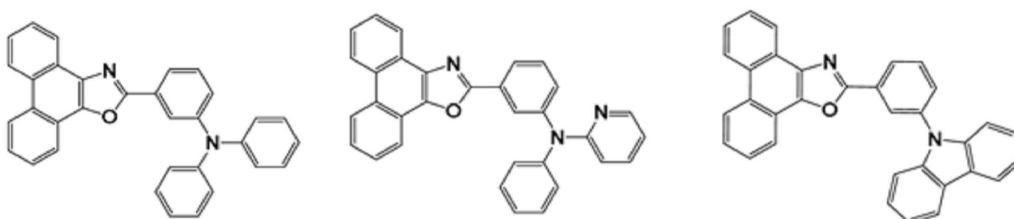
[0092]

[0093] [화학식 A-4] [화학식 A-5] [화학식 A-6]



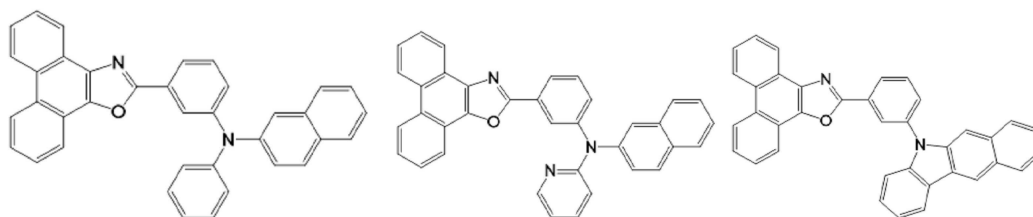
[0094]

[0095] [화학식 B-1] [화학식 B-2] [화학식 B-3]



[0096]

[0097] [화학식 B-4] [화학식 B-5] [화학식 B-6]



[0098]

[0099] 상기 화학식 A-1 내지 B-6의 화합물에서,

[0100] 방향족 링의 수소는 중수소, C1 내지 C6의 알킬기 또는 C1 내지 C6의 플루오로알킬기로 치환될 수 있다.

[0101] 다른 구현예에 따르면, 서로 마주하는 양극과 음극, 그리고 상기 양극과 상기 음극 사이에 위치하는 적어도 1층의 유기층을 포함하고, 상기 유기층은 상기 화합물을 포함하는 유기 광전자 소자를 제공한다.

[0102] 상기 유기층은 발광층을 포함할 수 있고, 상기 발광층은 상기 화합물을 인광호스트로 포함할 수 있다.

발명의 효과

[0103] 상기 화합물은 적색 발광 영역에서 우수한 발광 특성을 가지며, 유기 광전자 소자에 적용시 효율과 수명을 향상시킬 수 있다.

도면의 간단한 설명

[0104] 도 1은 일 구현예에 따른 유기 발광 소자의 구성을 개략적으로 나타내는 단면도이다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

[0105] 이하, 본 발명의 구현예를 상세히 설명하기로 한다. 다만, 이는 예시로서 제시되는 것으로, 이에 의해 본 발명이 제한되지는 않으며 본 발명은 후술할 청구범위의 범주에 의해 정의될 뿐이다.

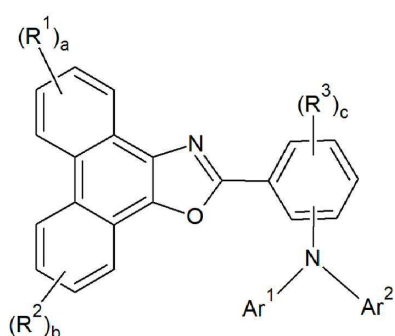
[0106] 본 명세서에서 "치환"이란 별도의 정의가 없는 한, 치환기 또는 화합물 중의 적어도 하나의 수소가 중수소, NH₂, C1 내지 C4 아민기, 니트로기, C1 내지 C4 실릴기, C1 내지 C4 알킬기, C1 내지 C4 알킬실릴기, C1 내지 C4 알콕시기, 플루오로기, C1 내지 C4 트리플루오로알킬기 또는 시아노기로 치환된 것을 의미한다.

[0107] 본 명세서에서 "융합링"이란 C6 내지 C30의 아릴기 또는 C3 내지 C30의 헤테로아릴기일 수 있다.

[0108] 또한, 본 명세서에서 별도의 정의가 없는 한, "헤테로"란, N, O, S, P 및 Si에서 선택된 헤테로 원자를 1 내지 3개 함유한 것을 의미한다.

[0109] 일 구현예에 따르면, 하기 화학식 1로 표시되는 유기 광전자 소자용 화합물을 제공한다.

[0110] [화학식 1]



[0111]

[0112] 상기 화학식 1에서,

[0113] Ar¹ 및 Ar²은 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 C5 내지 C20 아릴기 또는 치환 또는 비치환된 C3 내지 C20 헤테로아릴기에서 선택되거나, 서로 연결되어 융합링을 형성하고,

[0114] R¹ 내지 R³는 각각 독립적으로 수소, 중수소, C1 내지 C6의 알킬기 또는 C1 내지 C6의 플루오로알킬기이고,

[0115] a, b 및 c는 각각 독립적으로 0 내지 4의 정수이고,

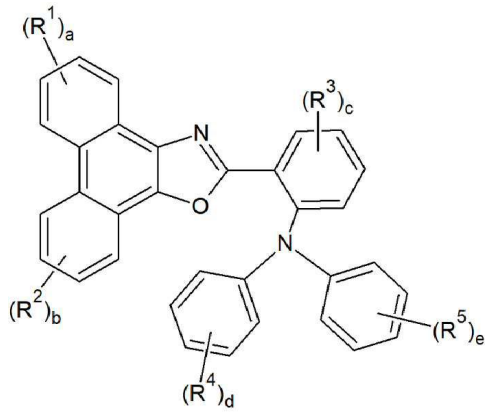
[0116] 아릴아민기(-N(Ar¹)(Ar²))는 페난트로록사졸릴기(phenanthroxazolyl group)와 페닐렌 링커의 결합에 대하여 오르쏘 또는 메타 위치에 결합된다.

[0117] 상기 페난트로록사졸릴기와 아릴아민기(-N(Ar¹)(Ar²))가 직접 결합되는 경우 전자밀도의 중첩영역이 존재하지 않아 에너지 전달(energy transfer)이 용이하지 않을 수 있다.

[0118] 상기 화학식 1의 구조를 가지는 화합물은 아릴아민기(-N(Ar¹)(Ar²))는 페난트로록사졸릴기(phenanthroxazolyl group)와 페닐렌 링커의 결합에 대하여 파라 위치에 결합하는 경우에 비하여 발광 특성이 우수할 뿐만 아니라 열적 특성이 우수하다.

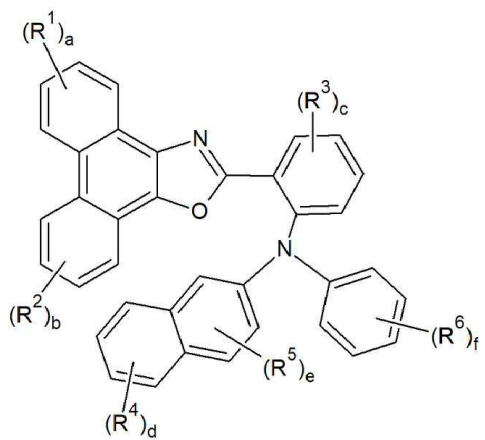
[0119] 상기 화합물은 하기 화학식 1A 또는 화학식 1B로 표현될 수 있다.

[0120] [화학식 1A]



[0121]

[0122] [화학식 1B]



[0123]

[0124] 상기 화학식 1A 및 화학식 1B에서,

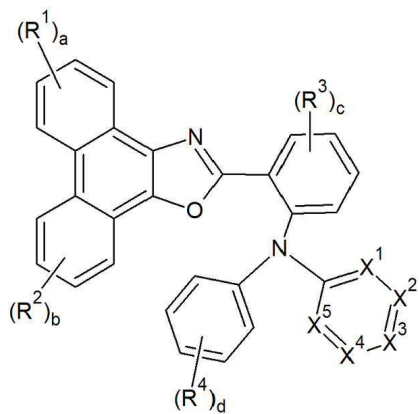
[0125] R^1 내지 R^6 은 각각 독립적으로 수소, 중수소, C1 내지 C6의 알킬기 또는 C1 내지 C6의 플루오로알킬기이고,

[0126] a, b, c, d 및 f는 각각 독립적으로 0 내지 4의 정수이고,

[0127] e는 0 내지 3의 정수이다.

[0128] 상기 화합물은 하기 화학식 1C로 표현될 수 있다.

[0129] [화학식 1C]



[0130]

[0131] 상기 화학식 1C에서,

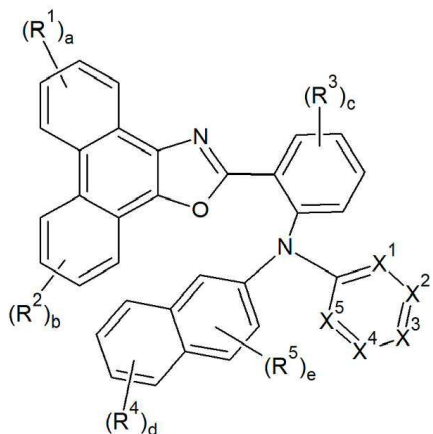
[0132] R^1 내지 R^4 은 각각 독립적으로 수소, 중수소, C1 내지 C6의 알킬기 또는 C1 내지 C6의 플루오로알킬기이고,

[0133] a, b, c 및 d는 각각 독립적으로 0 내지 4의 정수이고,

[0134] X^1 내지 X^5 는 각각 독립적으로 N 또는 CR^a 이고(여기에서 R^a 는 각각 독립적으로 수소, 중수소, C1 내지 C6의 알킬기 또는 C1 내지 C6의 플루오로알킬기이거나 인접한 R^a 는 서로 연결되어 융합링을 형성할 수 있음), X^1 내지 X^5 중 적어도 하나는 N이다.

[0135] 상기 화합물은 하기 화학식 1D로 표현될 수 있다.

[0136] [화학식 1D]



[0137]

[0138] 상기 화학식 1D에서,

[0139] R^1 내지 R^5 는 각각 독립적으로 수소, 중수소, C1 내지 C6의 알킬기 또는 C1 내지 C6의 플루오로알킬기이고,

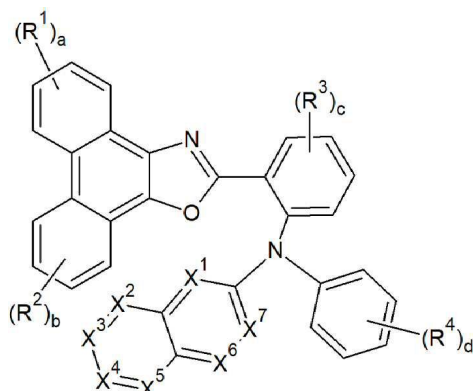
[0140] a, b, c 및 d는 각각 독립적으로 0 내지 4의 정수이고,

[0141] e는 0 내지 3의 정수이고,

[0142] X^1 내지 X^5 는 각각 독립적으로 N 또는 CR^a 이고(여기에서 R^a 는 각각 독립적으로 수소, 중수소, C1 내지 C6의 알킬기 또는 C1 내지 C6의 플루오로알킬기이거나 인접한 R^a 는 서로 연결되어 융합링을 형성할 수 있음), X^1 내지 X^5 중 적어도 하나는 N이다.

[0143] 상기 화합물은 하기 화학식 1E로 표현될 수 있다.

[0144] [화학식 1E]



[0145]

[0146] 상기 화학식 1E에서,

[0147] R^1 내지 R^4 는 각각 독립적으로 수소, 중수소, C1 내지 C6의 알킬기 또는 C1 내지 C6의 플루오로알킬기이고,

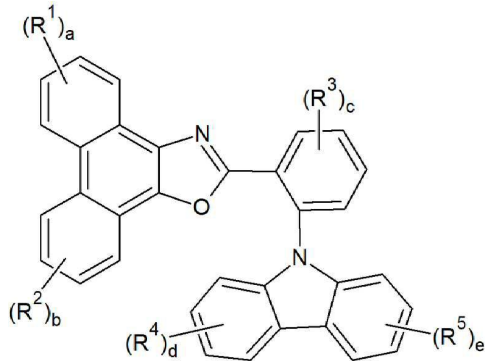
[0148] a, b, c, d 및 e는 각각 독립적으로 0 내지 4의 정수이고,

[0149] X^1 내지 X^7 는 각각 독립적으로 N 또는 CR^a 이고(여기에서 R^a 는 각각 독립적으로 수소, 중수소, C1 내지 C6의 알킬

기 또는 C1 내지 C6의 플루오로알킬기이거나 인접한 R^a는 서로 연결되어 융합링을 형성할 수 있음), X¹ 내지 X⁷ 중 적어도 하나는 N이다.

[0150] 상기 화합물은 하기 화학식 1F로 표현될 수 있다.

[0151] [화학식 1F]



[0152]

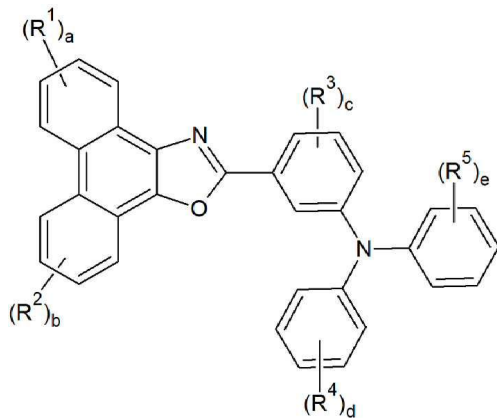
[0153] 상기 화학식 1F에서,

[0154] R¹ 내지 R⁵은 각각 독립적으로 수소, 중수소, C1 내지 C6의 알킬기 또는 C1 내지 C6의 플루오로알킬기이고,

[0155] a, b, c, d 및 e는 각각 독립적으로 0 내지 4의 정수이다.

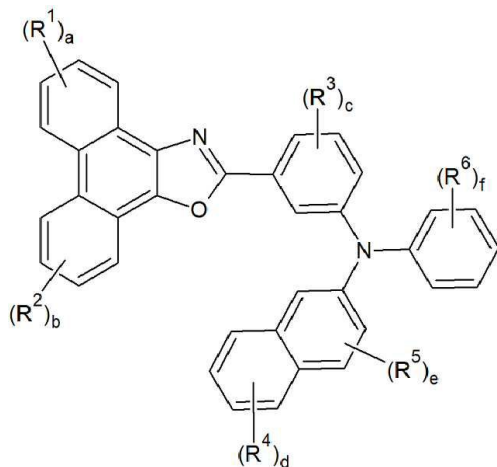
[0156] 상기 화합물은 하기 화학식 2A 또는 화학식 2B로 표현될 수 있다.

[0157] [화학식 2A]



[0158]

[0159] [화학식 2B]



[0160]

[0161] 상기 화학식 2A 및 화학식 2B에서,

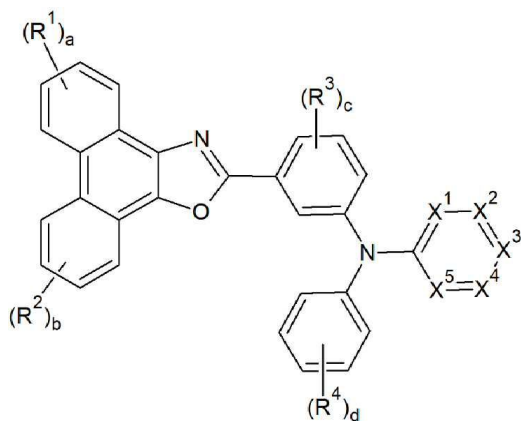
[0162] R^1 내지 R^7 은 각각 독립적으로 수소, 중수소, C1 내지 C6의 알킬기 또는 C1 내지 C6의 플루오로알킬기이고,

[0163] a, b, c, d 및 f는 각각 독립적으로 0 내지 4의 정수이고,

[0164] e는 0 내지 3의 정수이다.

[0165] 상기 화합물은 하기 화학식 2C로 표현될 수 있다.

[0166] [화학식 2C]



[0167]

[0168] 상기 화학식 2C에서,

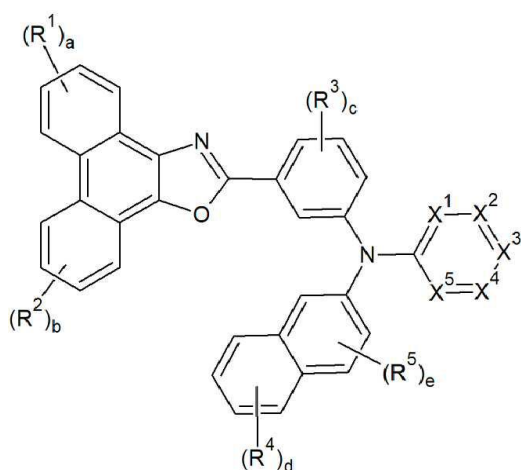
[0169] R^1 내지 R^4 는 각각 독립적으로 수소, 중수소, C1 내지 C6의 알킬기 또는 C1 내지 C6의 플루오로알킬기이고,

[0170] a, b, c 및 d는 각각 독립적으로 0 내지 4의 정수이고,

[0171] X^1 내지 X^5 는 각각 독립적으로 N 또는 CR^a 이고(여기에서 R^a 는 각각 독립적으로 수소, 중수소, C1 내지 C6의 알킬기 또는 C1 내지 C6의 플루오로알킬기이거나 인접한 R^a 는 서로 연결되어 융합링을 형성할 수 있음), X^1 내지 X^5 중 적어도 하나는 N이다.

[0172] 상기 화합물은 하기 화학식 2D로 표현될 수 있다.

[0173] [화학식 2D]



[0174]

[0175] 상기 화학식 2D에서,

[0176] R^1 내지 R^5 는 각각 독립적으로 수소, 중수소, C1 내지 C6의 알킬기 또는 C1 내지 C6의 플루오로알킬기이고,

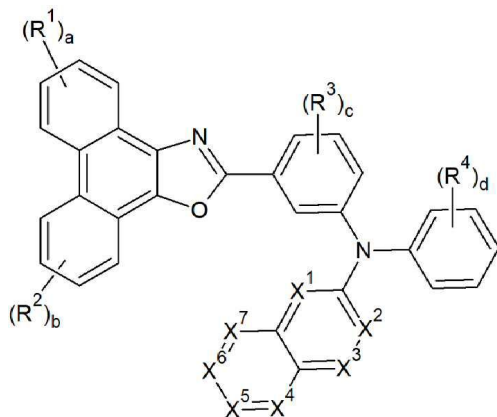
[0177] a, b, c 및 d는 각각 독립적으로 0 내지 4의 정수이고,

[0178] e는 0 내지 3의 정수이고,

[0179] X^1 내지 X^5 는 각각 독립적으로 N 또는 CR^a 이고(여기에서 R^a 는 각각 독립적으로 수소, 중수소, C1 내지 C6의 알킬기 또는 C1 내지 C6의 플루오로알킬기이거나 인접한 R^a 는 서로 연결되어 융합링을 형성할 수 있음), X^1 내지 X^5 중 적어도 하나는 N이다.

[0180] 상기 화합물은 하기 화학식 2E로 표현될 수 있다.

[0181] [화학식 2E]



[0182]

[0183] 상기 화학식 2E에서,

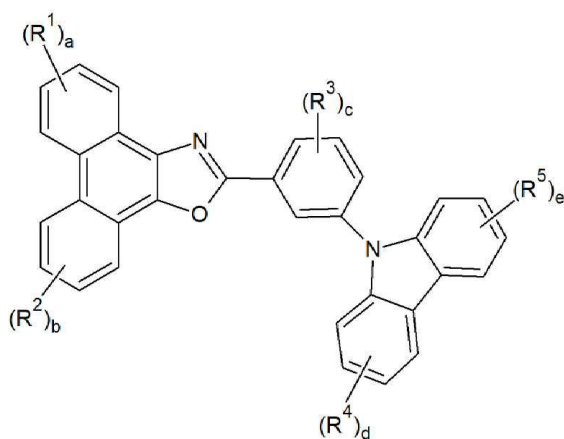
[0184] R^1 내지 R^4 는 각각 독립적으로 수소, 중수소, C1 내지 C6의 알킬기 또는 C1 내지 C6의 플루오로알킬기이고,

[0185] a, b, c 및 d는 각각 독립적으로 0 내지 4의 정수이고,

[0186] X^1 내지 X^7 는 각각 독립적으로 N 또는 CR^a 이고(여기에서 R^a 는 각각 독립적으로 수소, 중수소, C1 내지 C6의 알킬기 또는 C1 내지 C6의 플루오로알킬기이거나 인접한 R^a 는 서로 연결되어 융합링을 형성할 수 있음), X^1 내지 X^7 중 적어도 하나는 N이다.

[0187] 상기 화합물은 하기 화학식 2F로 표현될 수 있다.

[0188] [화학식 2F]



[0189]

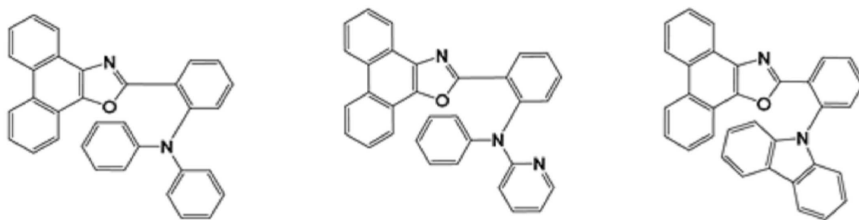
[0190] 상기 화학식 2F에서,

[0191] R^1 내지 R^7 는 각각 독립적으로 수소, 중수소, C1 내지 C6의 알킬기 또는 C1 내지 C6의 플루오로알킬기이고,

[0192] a, b, c, d 및 e는 각각 독립적으로 0 내지 4의 정수이다.

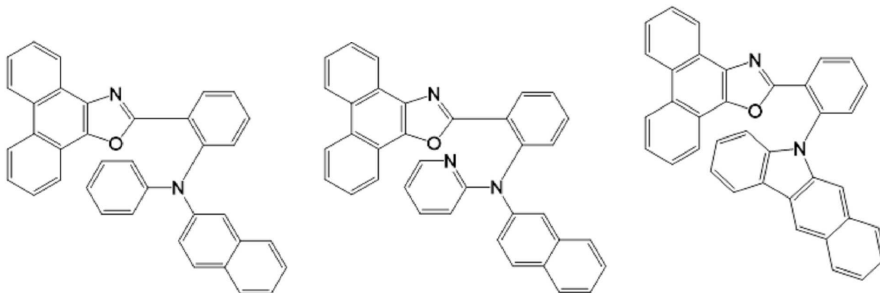
[0193] 상기 화학식 1로 표시되는 화합물의 보다 구체적인 예로는 하기 화학식 A-1 내지 B-6의 화합물을 들 수 있다.

[0194] [화학식 A-1] [화학식 A-2] [화학식 A-3]



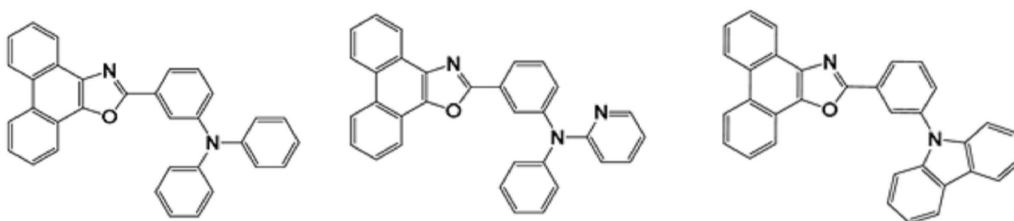
[0195]

[0196] [화학식 A-4] [화학식 A-5] [화학식 A-6]



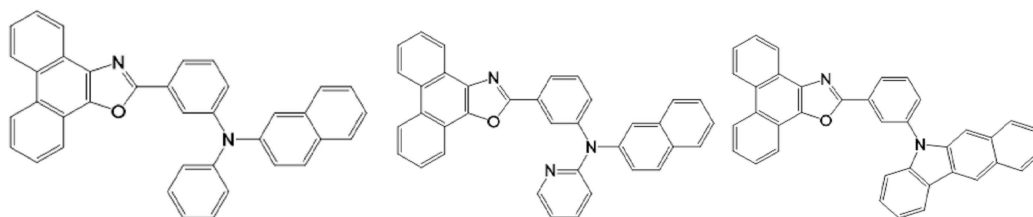
[0197]

[0198] [화학식 B-1] [화학식 B-2] [화학식 B-3]



[0199]

[0200] [화학식 B-4] [화학식 B-5] [화학식 B-6]



[0201]

[0202] 상기 화학식 A-1 내지 B-6의 화합물에서,

[0203] 방향족 링의 수소는 중수소, C1 내지 C6의 알킬기 또는 C1 내지 C6의 플루오로알킬기로 치환될 수 있다.

[0204] 상기 화합물은 용액 상태에서 약 300 nm 내지 약 400 nm, 예를 들어 약 310 nm 내지 약 380 nm 에서 최대 흡수 파장(UV_{max})을 나타낼 수 있고 청색 영역, 예를 들어 380 nm 내지 460 nm 에서 최대 광발광 파장(PL_{max})을 나타낼 수 있다..

[0205] 상기 화합물은 약 2.2 eV 내지 약 3.2 eV, 바람직하게는 약 2.3 eV 내지 약 3.1 eV의 밴드갭을 가질 수 있으며, 약 2.3 eV 이상의 트리플렛 에너지를 나타낼 수 있다.

[0206] 상술한 화합물은 다양한 유기 광전자 소자에 적용될 수 있으며, 예컨대 인광호스트로서 사용될 수 있다. 상기 화합물은 화학 기상 증착과 같은 건식 성막법 또는 용액 공정을 이용하여 박막으로 형성될 수 있다.

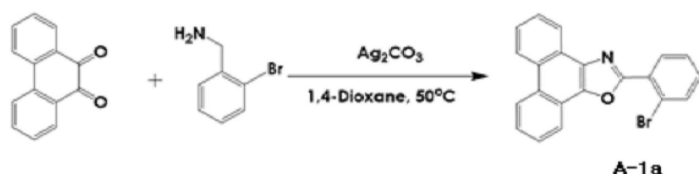
[0207] 이하 상술한 화합물을 적용한 유기 광전자 소자를 설명한다.

[0208] 상기 유기 광전자 소자는 전기 에너지와 광 에너지를 상호 전환할 수 있는 소자이면 특별히 한정되지 않으며,

예컨대 유기 광전 소자, 유기 발광 소자, 유기 태양 전지 등을 들 수 있다.

- [0209] 상기 유기 광전자 소자는 서로 마주하는 양극과 음극, 상기 양극과 상기 음극 사이에 위치하는 적어도 1층의 유기층을 포함할 수 있고, 상기 유기층은 상기 화합물을 포함할 수 있다.
- [0210] 여기서는 유기 광전자 소자의 일 예인 유기 발광 소자를 도면을 참고하여 설명한다.
- [0211] 도 1은 일 구현예에 따른 유기 발광 소자를 보여주는 단면도이다.
- [0212] 도 1을 참고하면, 일 구현예에 따른 유기 발광 소자(100)는 서로 마주하는 제1 전극(110)과 제2 전극(120), 그리고 제1 전극(110)과 제2 전극(120) 사이에 위치하는 유기층(105)을 포함한다.
- [0213] 제1 전극(110)과 제2 전극(120) 중 하나는 캐소드(cathode)이고 다른 하나는 애노드(anode)일 수 있다.
- [0214] 제1 전극(110)과 제2 전극(120) 중 적어도 하나는 투명 전극일 수 있으며, 예컨대 제1 전극(110)이 투명 전극인 경우 제1 전극(110) 측으로 빛을 내는 배면 발광(bottom emission)일 수 있으며 제2 전극(120)이 투명 전극인 경우 제2 전극(120) 측으로 빛을 내는 전면 발광(top emission)일 수 있다. 또한 제1 전극(110)과 제2 전극(120)이 모두 투명 전극인 경우 양면 발광할 수 있다.
- [0215] 유기층(105)은 전술한 화합물을 포함할 수 있다. 유기층(105)은 적어도 1층 이상을 포함할 수 있으며, 발광층을 포함할 수 있다.
- [0216] 상기 발광층은 전술한 화합물을 인광 호스트로 포함할 수 있다. 상기 발광층은 도펀트를 더 포함할 수 있다. 이러한 도펀트는 도펀트는 적색, 녹색 또는 청색 도펀트일 수 있다. 상기 도펀트는 호스트에 미량 혼합되어 발광을 일으키는 물질로, 일반적으로 삼중항 상태 이상으로 여기시키는 다중항 여기(multiple excitation)에 의해 발광하는 금속 착체(metal complex)와 같은 물질이 사용될 수 있다. 상기 도펀트는 예컨대 무기, 유기, 유무기 화합물일 수 있으며, 1종 또는 2종 이상 포함될 수 있다. 도펀트는 발광층 총량에 대하여 약 0.1 내지 20중량 %로 포함될 수 있다. 도펀트의 일 예로 인광 도펀트를 들 수 있으며, 인광 도펀트의 예로는 Ir, Pt, Os, Ti, Zr, Hf, Eu, Tb, Tm, Fe, Co, Ni, Ru, Rh, Pd 또는 이들의 조합을 포함하는 유기 금속화합물을 들 수 있다. 인광 도펀트는 예컨대 하기 화학식 3으로 표현되는 화합물을 사용할 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [0217] [화학식 3]
- [0218] L_2MX
- [0219] 상기 화학식 3에서, M은 금속이고, L 및 X는 서로 같거나 다르며 M과 착화합물을 형성하는 리간드이다.
- [0220] 상기 M은 예컨대 Ir, Pt, Os, Ti, Zr, Hf, Eu, Tb, Tm, Fe, Co, Ni, Ru, Rh, Pd 또는 이들의 조합일 수 있고, 상기 L 및 X는 예컨대 바이덴테이트 리간드일 수 있다.
- [0221] 상기 유기층(105)은 발광층 이외에 보조층을 더 포함할 수 있다. 보조층은 발광 효율을 개선하기 위한 것으로, 제1 전극(110)과 발광층 사이 및 제2 전극(120)과 발광층 사이 중 적어도 하나에 위치할 수 있다. 보조층은 전자와 정공의 균형을 맞추기 위한 전자 수송층(electron transport layer) 및 정공 수송층(hole transport layer)과 전자와 정공의 주입을 강화하기 위한 전자 주입층(electron injection layer) 및 정공 주입층(hole injection layer) 등이 있으며, 이 중에서 선택된 하나 또는 둘 이상의 층을 포함할 수 있다.
- [0222] 상술한 유기 발광 소자는 유기 발광 표시 장치에 적용될 수 있다.
- [0223] 이하에서는 본 발명의 구체적인 실시예들을 제시한다. 다만, 하기에 기재된 실시예들은 본 발명을 구체적으로 예시하거나 설명하기 위한 것에 불과하며, 이로서 본 발명이 제한되어서는 아니된다.
- [0224] **합성예 A-1: 화합물 A-1로 표현되는 화합물의 합성**
- [0225] (1) 화합물 A-1a의 합성

[0226] [반응식 A-1a]



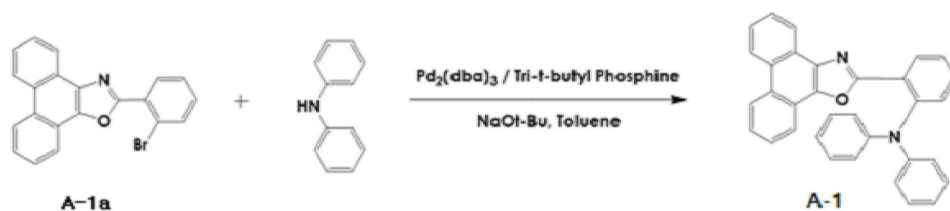
[0227]

[0228] 9,10-페난트렌퀴논(9,10-Phenanthrenequinone) 1.23g (5.91mmol), 2-브로모벤질아민(2-bromobenzylamine) 1.0g (5.37mmol), 실버 카보네이트(silver carbonate) 2.96g (10.7mmol)을 100mL 3구 둥근 플라스크에 넣고 질소 치환한다. 1,4-dioxane (무수) 20mL 첨가 후 50℃에서 12시간 교반한다. 반응이 완료된 후, 반응 용액을 필터 후 메틸렌 클로라이드(MC)로 여러 차례 씻어준다. MC와 증류수를 이용하여 추출 후 용매를 제거한다. 에틸 아세테이트와 헥산을 이용하여 컬럼 정제를 한다. (수득물: 41%)

[0229] ^1H NMR (300 MHz, CDCl_3) δ (ppm) 8.79-8.74(t, 2H), 8.67-8.64(d, 1H), 8.38-8.35(t, 1H), 8.28-8.25(d, 1H), 7.84-7.69(m, 5H), 7.55-7.50(t, 1H), 7.42-7.36(t, 1H)

[0230] (2) 화합물 A-1의 합성

[0231] [반응식 A-1]



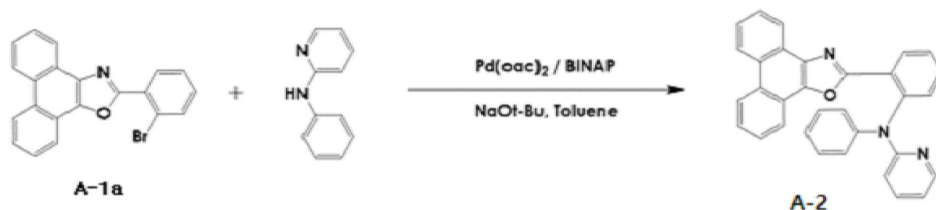
[0232]

[0233] 2-(2-브로모페닐)페난트로[9,10]옥사졸(2-(2-bromophenyl)phenanthro[9,10]oxazole, 화합물 A-1a) 0.6g (1.6mmol), 디페닐아민(diphenylamine) 0.28g (1.68mmol), $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ 0.058g (0.06mmol), 소듐 tert-부톡사이드(sodium tert-butoxide) 0.46g을 100mL 3구 둥근 플라스크에 넣고 질소 치환한다. Toluene (무수) 30mL을 넣고 트리-tert-부틸포스핀(tri-tert-butylphosphine) 0.08mL을 첨가한다. 110℃에서 3시간 교반한다. 반응이 완결된 후, MC와 증류수를 이용하여 추출 후 용매를 제거한다. 에틸 아세테이트와 헥산을 이용하여 컬럼 정제를 한다. (수득물: 60%)

[0234] ^1H NMR (300 MHz, DMSO) δ (ppm) 8.90-8.86(t, 2H), 8.36-8.32(d, 1H), 8.29-8.26(d, 1H), 7.94-7.91(d, 1H), 7.76-7.65(m, 5H), 7.53-7.48(t, 1H), 7.36-7.34(d, 1H), 7.16-7.11(t, 4H), 7.04-7.01(d, 4H), 6.83-6.78(t, 2H)

[0235] 합성에 A-2: 화합물 A-2로 표현되는 화합물의 합성

[0236] [반응식 A-2]



[0237]

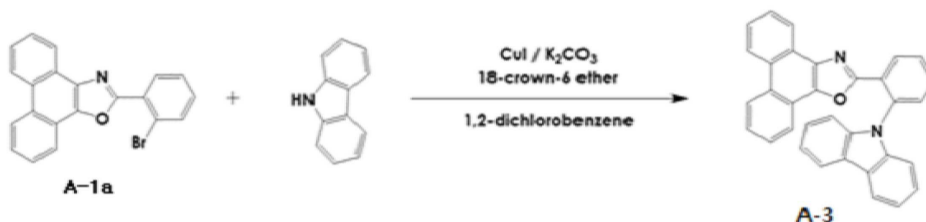
[0238] 2-(2-브로모페닐)페난트로[9,10]옥사졸(2-(2-bromophenyl)phenanthro[9,10]oxazole, 화합물 1-1) 0.29g (0.74mmol), N-phenylpyridin-2-amine 0.14g (0.85mmol), $\text{Pd}(\text{oac})_2$ 0.007g (0.03mmol), BINAP 0.04g (0.062mmol), sodium tert-butoxide 0.23g (2.22mmol)을 100mL 3구 둥근 플라스크에 넣고 질소 치환한다.

Toluene (무수) 24mL을 넣고 110℃에서 4시간 교반한다. 반응이 완결된 후, MC와 증류수를 이용하여 추출 후 용매를 제거한다. 에틸 아세테이트와 헥산을 이용하여 컬럼 정제를 한다. (수득물: 27%)

[0239] ^1H NMR (300 MHz, DMSO) δ (ppm) 8.88-8.86(d, 2H), 8.38-8.32(t, 2H), 7.88-7.87(d, 2H), 7.78-7.64(m, 5H), 7.56-7.51(t, 1H), 7.43-7.32(m, 6H), 7.15-7.14(d, 1H)

[0240] **합성예 A-3: 화합물 A-3로 표현되는 화합물의 합성**

[0241] [반응식 A-3]



[0242]

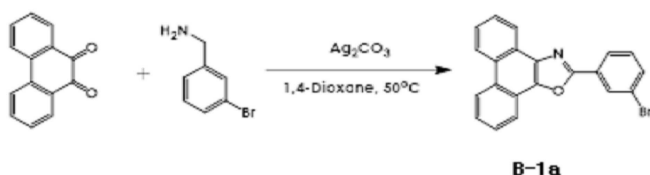
[0243] 2-(2-브로모페닐)페난트로[9,10]옥사졸(2-(2-bromophenyl)phenanthro[9,10]oxazole, 화합물 A-1a) 0.51g (1.36mmol), carbazole 0.24g (1.43mmol), CuI 0.28g (1.63mmol), potassium carbonate 0.56g (4.08mmol), 18-crown-6 ether 0.036g (0.136mmol)을 100mL 3구 둥근 플라스크에 넣고 질소 치환한다. 1,2-Dichlorobenzene (무수) 40mL을 넣고 180℃에서 48시간 교반한다. 반응이 완결된 후, MC와 증류수를 이용하여 추출 후 용매를 제거한다. 에틸 아세테이트와 헥산을 이용하여 컬럼 정제를 한다. (수득물: 51%)

[0244] ^1H NMR (300 MHz, DMSO) δ (ppm) 8.78-8.74(q, 2H), 8.67-8.64(d, 1H), 8.33-8.31(d, 2H), 8.18-8.15(d, 1H), 8.01-7.92(q, 2H), 7.90-7.88(d, 1H), 7.73-7.65(q, 2H), 7.62-7.57(d, 1H), 7.52-7.47(t, 1H), 7.33-7.28(t, 2H), 7.25-7.20(t, 2H), 7.10-7.08(d, 2H), 6.83-6.80(d, 1H)

[0245] **합성예 B-1: 화합물 B-1로 표현되는 화합물의 합성**

[0246] (1) 화합물 B-1a의 합성

[0247] [반응식 B-1a]



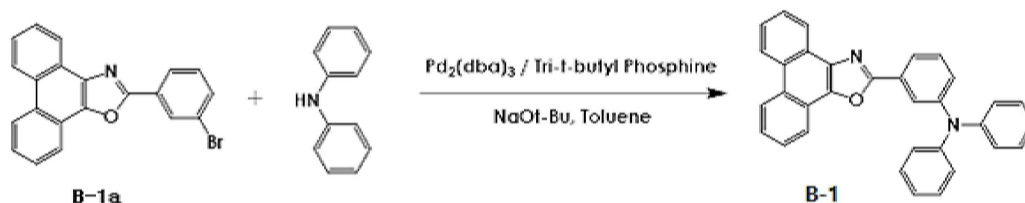
[0248]

[0249] 9,10-Phenanthrenequinone 0.84g (4.03mmol), 3-bromobenzylamine 0.5g (2.68mmol), silver carbonate 1.48g (5.37mmol)을 100mL 3구 둥근 플라스크에 넣고 질소 치환한다. 1,4-dioxane (무수) 15mL 첨가 후 50℃에서 12시간 교반한다. 반응이 완료된 후, 반응 용액을 필터 후 Methylene chloride(MC)로 여러 차례 씻어준다. MC와 증류수를 이용하여 추출 후 용매를 제거한다. 에틸 아세테이트와 헥산을 이용하여 컬럼 정제를 한다. (수득물: 49%)

[0250] ^1H NMR (300 MHz, CDCl_3) δ (ppm) 8.83-8.74(t, 2H), 8.64-8.61(d, 1H), 8.54(s, 1H), 8.39-8.35(d, 1H), 8.34-8.31(d, 1H), 7.80-7.66(m, 5H), 7.48-7.43(t, 1H)

[0251] (2) 화합물 B-1의 합성

[0252] [반응식 B-1]



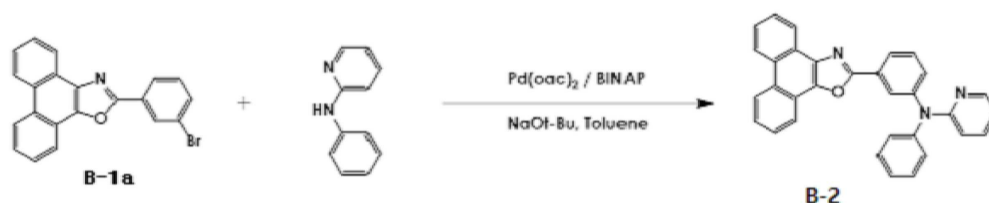
[0253]

[0254] 2-(3-브로모페닐)페난트로[9,10]옥사졸 (2-(3-bromophenyl)phenanthro[9,10]oxazole, 화합물 B-1a) 0.3g (0.8mmol), diphenylamine 0.15g (0.88mmol), $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ 0.03g (0.03mmol), sodium tert-butoxide 0.23g (2.4mmol)을 100mL 3구 둥근 플라스크에 넣고 질소 치환한다. Toluene (무수) 20mL을 넣고 tri-t-butylphosphine 0.08mL을 첨가한다. 110℃에서 4시간 교반한다. 반응이 완결된 후, MC와 증류수를 이용하여 추출 후 용매를 제거한다. 에틸 아세테이트와 헥산을 이용하여 컬럼 정제를 한다. (수득률: 62%)

[0255] ^1H NMR (300 MHz, THF) δ (ppm) 8.87-8.82(t, 2H), 8.54-8.51(d, 1H), 8.29-8.26(d, 1H), 8.12(s, 1H), 8.06-8.02(d, 1H), 7.72-7.65(m, 4H), 7.48-7.43(t, 1H), 7.35-7.26(t, 4H), 7.24-7.21(d, 1H), 7.19-7.15(d, 4H), 7.08-7.03(t, 2H)

[0256] 합성예 B-2: 화합물 B-2로 표현되는 화합물의 합성

[0257] [반응식 B-2]



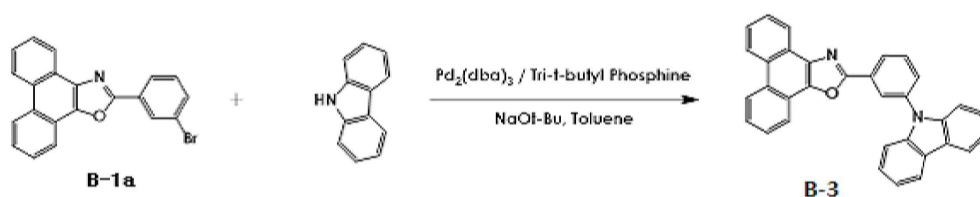
[0258]

[0259] 2-(3-브로모페닐)페난트로[9,10]옥사졸 (2-(3-bromophenyl)phenanthro[9,10]oxazole, 화합물 B-1a) 0.42g (1.12mmol), N-phenylpyridin-2-amine 0.21g (1.23mmol), $\text{Pd}(\text{oac})_2$ 0.01g (0.045mmol), BINAP 0.06g (0.089mmol), sodium tert-butoxide 0.32g (3.36mmol)을 100mL 3구 둥근 플라스크에 넣고 질소 치환한다. Toluene (무수) 30mL을 넣고 110℃에서 4시간 교반한다. 반응이 완결된 후, MC와 증류수를 이용하여 추출 후 용매를 제거한다. 에틸 아세테이트와 헥산을 이용하여 컬럼 정제를 한다. (수득률: 65%)

[0260] ^1H NMR (300 MHz, THF) δ (ppm) 8.84-8.81(t, 2H), 8.55-8.52(d, 1H), 8.28-8.24(d, 1H), 8.23(s, 1H), 8.18-8.16(d, 1H), 8.15-8.12(d, 1H), 7.71-7.66(m, 4H), 7.54-7.49(t, 2H), 7.40-7.29(m, 5H), 7.26-7.17(t, 1H), 6.85-6.79(t, 2H)

[0261] 합성예 B-3: 화합물 B-3로 표현되는 화합물의 합성

[0262] [반응식 B-3]



[0263]

[0264] 2-(3-브로모페닐)페난트로[9,10]옥사졸 (2-(3-bromophenyl)phenanthro[9,10]oxazole, 화합물 B-1a) 0.2g (0.53mmol), carbazole 0.1g (0.57mmol), $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ 0.02g (0.02mmol), sodium tert-butoxide 0.15g (1.6mmol)

1)을 100mL 3구 둥근 플라스크에 넣고 질소 치환한다. Toluene (무수) 20mL을 넣고 tri-t-butylphosphine 0.05mL을 첨가한다. 110℃에서 4시간 교반한다. 반응이 완결된 후, MC와 증류수를 이용하여 추출 후 용매를 제거한다. 에틸 아세테이트와 헥산을 이용하여 컬럼 정제를 한다. (수득률: 69%)

[0265] ^1H NMR (300 MHz, THF) δ (ppm) 8.90-8.84(t, 2H), 8.63-8.52(m, 3H), 8.38-8.35(t, 1H), 8.21-8.18(d, 2H), 7.91-7.88(t, 1H), 7.86-7.85(d, 1H), 7.74-7.69(m, 4H), 7.52-7.49(d, 2H), 7.45-7.39(t, 2H), 7.31-7.26(t, 2H)

[0266] **평가 1: 화합물의 광학 특성 평가**

[0267] 합성예 A-1 내지 B-3의 화합물을 테트라하이드로퓨란 용매를 사용하여 10^{-5} M 농도로 용해시킨 용액을 UV-Vis. 분광기(Lamda 1050 UV-Vis.-NIR spectrometer, PerkinElmer)를 사용하여 평가하였다.

[0268] 합성예 A-1 내지 B-3의 화합물을 테트라하이드로퓨란에 10^{-5} M의 농도로 용해시킨 용액의 발광 특성($UV_{\max}$ 및 $PL_{\max}$)을 PL 분광기(PerkinEler luminescence spectrometer LS50(Xenon flash tube))를 사용하여 평가하였다. 저온 $PL_{\max}$ 은 77K에서 측정하였다. 그 결과를 하기 표 1에 기재한다.

표 1

	$UV_{\max}$ (nm)	$PL_{\max}$ (nm)	저온 $PL_{\max}$ (nm)
합성예 A-1	360	455	545
합성예 A-2	359	439	543
합성예 A-3	363	416	508
합성예 B-1	316	437	546
합성예 B-2	319	414	542
합성예 B-3	335	397	540

[0270] 표 1을 참고하면, 합성예 A-1 내지 B-3의 화합물 모두 316nm 내지 363 nm의 영역에서 흡광 특성을 나타내며 청색 영역의 빛을 내는 것을 확인할 수 있다. 합성예 A-1 내지 B-3의 화합물의 HOMO level, LUMO level, 밴드갭 에너지 및 트리플렛 에너지를 하기 표 2에 기재한다.

[0271] HOMO level은 AC-II 장비를 통해서 측정하였으며, LUMO level은 HOMO level에 밴드갭 에너지를 합하여 계산하였다. 트리플렛 에너지(Triplet energy)는 저온 PL 스펙트럼으로부터 얻었다. 그 결과를 표 2에 기재한다.

표 2

	HOMO (eV)	LUMO (eV)	Band gap 에너지 (eV)	Triplet Energy (eV)
합성예 A-1	-5.69	-2.76	2.93	2.34
합성예 A-2	-5.78	-2.77	3.01	2.35
합성예 A-3	-5.85	-2.83	3.02	2.37
합성예 B-1	-5.53	-2.58	2.95	2.44
합성예 B-2	-5.41	-2.47	2.94	2.45
합성예 B-3	-5.89	-2.91	2.98	2.46

[0273] 표 3을 참고하면, 합성예 A-1 내지 B-3의 화합물은 2.34 eV 이상의 트리플렛에너지를 가지므로 인광 호스트로 사용되기에 적합하고 도펀트로의 에너지 전달이 용이하게 일어날 수 있음을 알 수 있다.

[0274] **평가 2: 열 특성 평가**

[0275] 합성예 A-1 내지 B-3의 화합물을 열중량 분석법(thermogravimetric analysis, TGA) 및 시차주사열량법(differential scanning calorimetry, DSC)으로 유리전이온도(Tg), 녹는점(Tm) 및 분해온도(Td)를 측정하였다. 그 결과를 하기 표 3에 기재한다.

표 3

	T _g (°C)	T _m (°C)	T _d (°C)
합성예 A-1	ND	212	332
합성예 A-2	ND	224	318
합성예 A-3	ND	273	346
합성예 B-1	ND	235	356
합성예 B-2	ND	244	376
합성예 B-3	ND	255	389

ND: Not detected

표 3을 참고하면, 합성예 A-1 내지 B-3의 화합물의 유리전이온도(T_g)가 관측되지 않은 것으로부터 화합물이 열적 변형 없이 안정하다는 것을 의미하며 녹는점(T_m) 및 분해온도(T_d)가 높은 것으로부터 열적 안정성이 우수함을 알 수 있다.

실시예 A-1: 유기 발광 소자의 제작

유리 기판 위에 ITO를 150nm 두께로 스퍼터링하고 그 위에 DNTPD 40nm 및 NPB 20nm를 차례로 증착하여 정공보조층을 형성하였다. 이어서 상기 정공보조층 위에 합성예 A-1에서 얻은 화합물 A-1 96 중량%와 도펀트로 Ir(mphmq)₂(tmd) (CAS:1228537-80-1) 3 중량%를 공증착하여 35nm 두께의 발광층을 형성하였다. 이어서 상기 발광층 위에 Alq₃ 20 nm 및 LiF 1nm를 차례로 증착하여 전자보조층을 형성한다. 이어서 상기 전자보조층 위에 Al을 200nm 두께로 증착하여 유기발광소자를 제작하였다.

실시예 A-2 내지 B-3: 유기 발광 소자의 제작

합성예 A-1에서 얻은 화합물 A-1 대신 합성예 A-2 내지 B-3에서 얻은 화합물을 각각 사용한 것을 제외하고 실시예 A-1과 동일한 방법으로 유기발광소자를 제작하였다.

평가 3: 소자 성능 평가

실시예 A-1 내지 B-3에 따른 유기 발광 소자의 발광효율, 외부양자효율, 색좌표 및 발광 파장(EL_{max})을 평가하였다. 그 결과를 표 4에 기재한다.

표 4

	발광효율 (cd/A)	외부양자효율(%)	색좌표 (x,y)	박막 EL _{max} (nm)
실시예 A-1	13.1	8.9	(0.64, 0.35)	610
실시예 A-2	12.2	8.8	(0.64, 0.35)	610
실시예 A-3	10.9	7.2	(0.64, 0.35)	610
실시예 B-1	25.5	17.5	(0.64, 0.35)	610
실시예 B-2	26.2	19.0	(0.64, 0.35)	610
실시예 B-3	24.3	17.4	(0.64, 0.35)	610

표 4를 참고하면 실시예 A-1 내지 B-3의 유기 발광 소자는 색좌표와 박막 EL_{max}로부터 적색을 발광하며, 발광 효율과 외부양자효율이 우수함을 확인할 수 있다.

본 발명은 상기 실시예들에 한정되는 것이 아니라 서로 다른 다양한 형태로 제조될 수 있으며, 본 발명이 속하는 기술분야에서 통상의 지식을 가진 자는 본 발명의 기술적 사상이나 필수적인 특징을 변경하지 않고서 다른 구체적인 형태로 실시될 수 있다는 것을 이해할 수 있을 것이다. 그러므로 이상에서 기술한 실시예들은 모든 면에서 예시적인 것이며 한정적이 아닌 것으로 이해해야만 한다.

부호의 설명

110: 제1 전극

120: 제2 전극

130: 유기층

100: 유기 발광 소자

도면

도면1

