



(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 공개특허공보(A)

(11) 공개번호 10-2017-0135145
(43) 공개일자 2017년12월08일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)

C09K 11/06 (2006.01) C07C 211/54 (2006.01)

H01L 51/00 (2006.01) H01L 51/50 (2006.01)

(52) CPC특허분류

C09K 11/06 (2013.01)

C07C 211/54 (2013.01)

(21) 출원번호 10-2016-0066600

(22) 출원일자 2016년05월30일

심사청구일자 없음

(71) 출원인

경희대학교 산학협력단

경기도 용인시 기흥구 덕영대로 1732 (서천동, 경희대학교 국제캠퍼스내)

(72) 발명자

박중욱

서울특별시 양천구 목동동로 100, 1332동 1001호 (신정동, 목동신시가시아파트13단지)

정효철

서울특별시 광진구 영화사로9길 32, A동 202호 (중곡동, 현대하이츠빌라)

(뒷면에 계속)

(74) 대리인

유미특허법인

전체 청구항 수 : 총 8 항

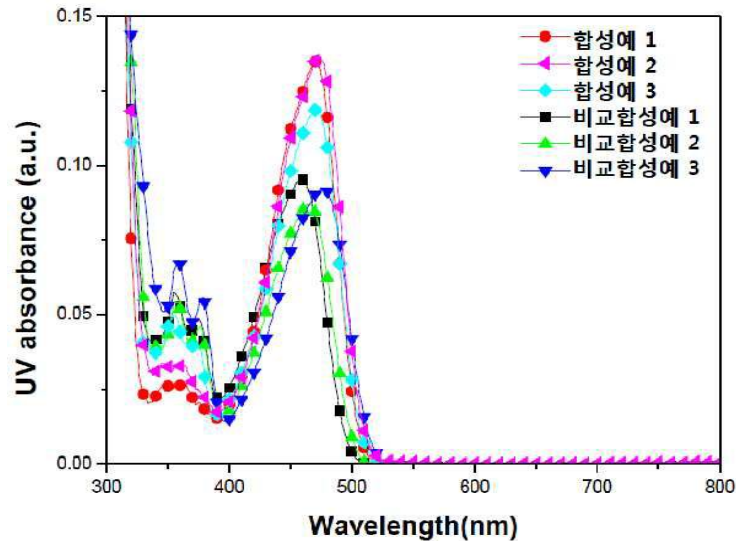
(54) 발명의 명칭 유기 광전자 소자용 화합물 및 이를 포함하는 유기 광전자 소자

(57) 요약

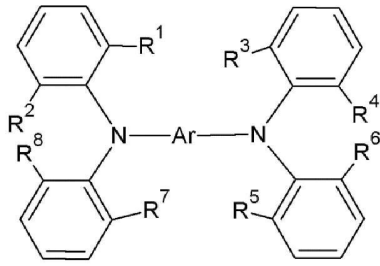
하기 화학식 1로 표시되는 유기 광전자 소자용 화합물 및 이를 포함하는 유기 광전자 소자를 제공한다.

(뒷면에 계속)

대 표 도 - 도2



[화학식 1]



상기 화학식 1에서,

Ar은 치환 또는 비치환된 안트라센, 치환 또는 비치환된 파이렌 및 치환 또는 비치환된 크라이센에서 선택되고,

R¹ 내지 R⁸는 각각 독립적으로 수소 또는 C1 내지 C4의 알킬기이고, R¹ 내지 R⁸ 중 2 개 내지 8개, 예를 들어 2개 내지 6개는 C1 내지 C4의 알킬기이다.

(52) CPC특허분류

H01L 51/0059 (2013.01)

H01L 51/5012 (2013.01)

C09K 2211/1011 (2013.01)

C09K 2211/1014 (2013.01)

(72) 발명자

강석우

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

조민진

전라북도 정읍시 광교3길 17 (장명동)

류재민

경기도 부천시 소사구 경인로117번길 27, 205동
802호 (송내동, 부천 중동역 2차 푸르지오 A단지)

김태민

서울특별시 강서구 화곡로21길 29 (화곡동)

이 발명을 지원한 국가연구개발사업

과제고유번호 10042590

부처명 산업통상자원부

연구관리전문기관 한국산업기술평가관리원

연구사업명 산업융합원천기술개발사업

연구과제명 Super Hybrid 복합공정을 사용한 50인치 UD급 차세대 OLED TV용 재료개발

기 여 율 1/3

주관기관 LG디스플레이

연구기간 2012.06.01 ~ 2016.05.31

이 발명을 지원한 국가연구개발사업

과제고유번호 N0000903

부처명 산업통상자원부

연구관리전문기관 한국산업기술진흥원

연구사업명 국제공동기술개발사업

연구과제명 Stainless steel 기반 roll-to-roll OLED 조명 생산기술 개발

기 여 율 1/3

주관기관 성균관대학교

연구기간 2013.11.01 ~ 2018.10.31

이 발명을 지원한 국가연구개발사업

과제고유번호 G01201511010103

부처명 산업통상자원부

연구관리전문기관 한국산업기술평가관리원

연구사업명 전략적핵심소재기술개발사업

연구과제명 고효율 에너지 부품을 위한 용액공정용 전하 전달 소재 기술

기 여 율 1/3

주관기관 (주)알파켄

연구기간 2013.11.01 ~ 2020.08.31

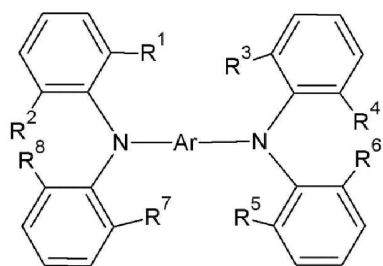
명세서

청구범위

청구항 1

하기 화학식 1로 표시되는 유기 광전자 소자용 화합물:

[화학식 1]



상기 화학식 1에서,

Ar은 치환 또는 비치환된 안트라센, 치환 또는 비치환된 파이렌 및 치환 또는 비치환된 크라이센에서 선택되고,

R^1 내지 R^8 는 각각 독립적으로 수소 또는 C1 내지 C4의 알킬기이고, R^1 내지 R^8 중 2 개 내지 8개는 C1 내지 C4의 알킬기이다.

청구항 2

제1항에 있어서,

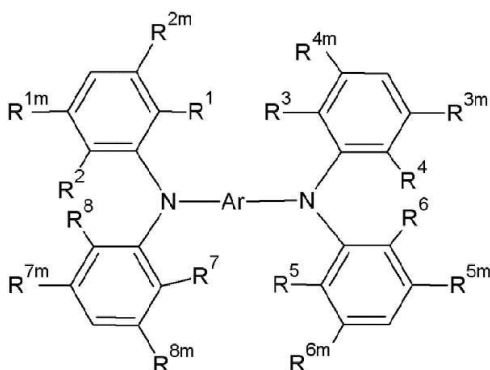
상기 화학식 1에서, R^1 내지 R^8 중 2개 내지 8개가 C1 내지 C4의 알킬기이고 상기 C1 내지 C4의 알킬기가 존재하는 페닐기의 메타 위치에 존재하는 C1 내지 C4의 알킬기를 더 포함하는 유기 광전자 소자용 화합물.

청구항 3

제2항에 있어서,

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

[화학식 2]



상기 화학식 2에서,

Ar은 치환 또는 비치환된 안트라센, 치환 또는 비치환된 파이렌 및 치환 또는 비치환된 크라이센에서 선택되고,

R^1 내지 R^8 는 각각 독립적으로 수소 또는 C1 내지 C4의 알킬기이고, R^1 내지 R^8 중 2 개 내지 8개는 C1 내지 C4

의 알킬기이고,

R^{1m} 내지 R^{8m} 은 각각 독립적으로 수소 또는 C1 내지 C4의 알킬기이고, R^{1m} 내지 R^{8m} 중 2 개 내지 8개는 C1 내지 C4의 알킬기이다.

청구항 4

제1항에 있어서,

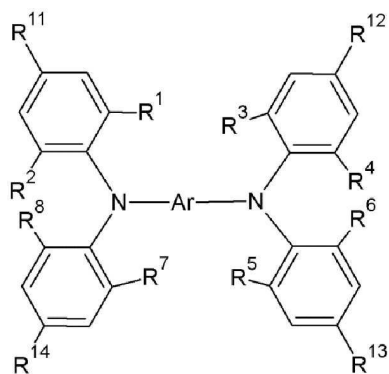
상기 화학식 1에서, R^1 내지 R^8 중 2개 내지 8개가 C1 내지 C4의 알킬기이고 상기 C1 내지 C4의 알킬기가 존재하는 페닐기의 파라 위치에 존재하는 C3 내지 C4의 2차 알킬기 또는 C3 내지 C4의 3차 알킬기를 더 포함하는 유기 광전자 소자용 화합물.

청구항 5

제1항에 있어서,

상기 화합물은 하기 화학식 3으로 표현되는 유기 광전자 소자용 화합물:

[화학식 3]



상기 화학식 3에서,

Ar은 치환 또는 비치환된 안트라센, 치환 또는 비치환된 파이렌 및 치환 또는 비치환된 크라이센에서 선택되고,

R^1 내지 R^8 은 각각 독립적으로 수소 또는 C1 내지 C4의 알킬기이고, R^1 내지 R^8 중 2 개 내지 8개는 C1 내지 C4의 알킬기이고,

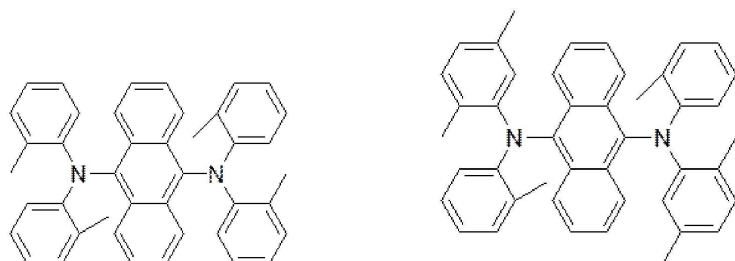
R^{11} 내지 R^{14} 은 각각 독립적으로 수소, C3 내지 C4의 2차 알킬기 또는 C3 내지 C4의 3차 알킬기이고, R^{11} 내지 R^{14} 중 적어도 하나는 C3 내지 C4의 2차 알킬기 또는 C3 내지 C4의 3차 알킬기이다.

청구항 6

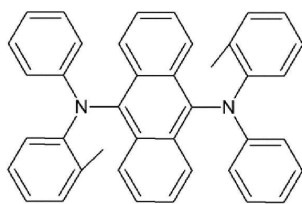
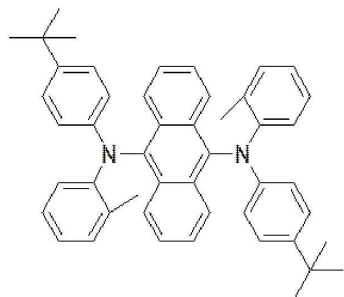
제1항에 있어서,

상기 화학식 1 로 표시되는 화합물은 하기 화학식 A-1 내지 C-6의 화합물중 어느 하나의 화합물인 유기 광전자 소자용 화합물:

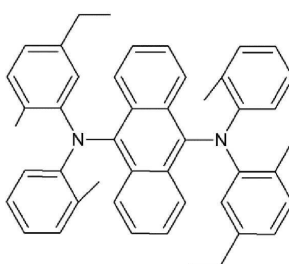
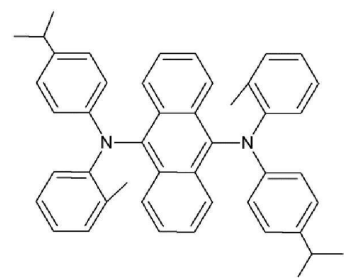
[화학식 A-1] [화학식 A-2]



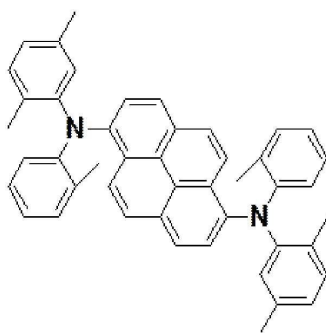
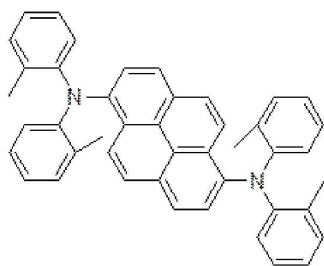
[화학식 A-3] [화학식 A-4]



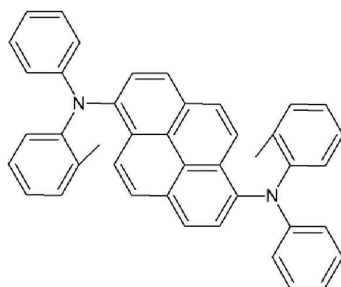
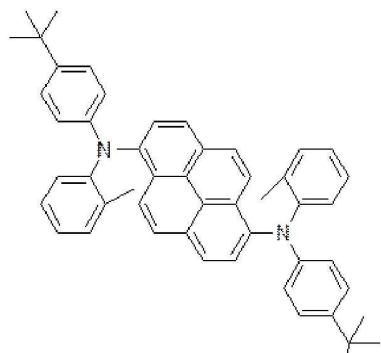
[화학식 A-5] [화학식 A-6]



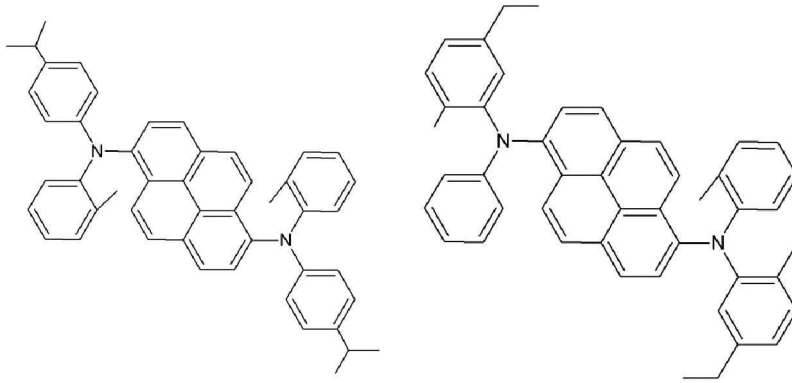
[화학식 B-1] [화학식 B-2]



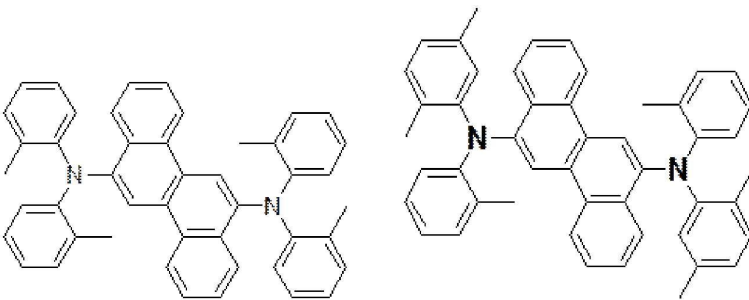
[화학식 B-3] [화학식 B-4]



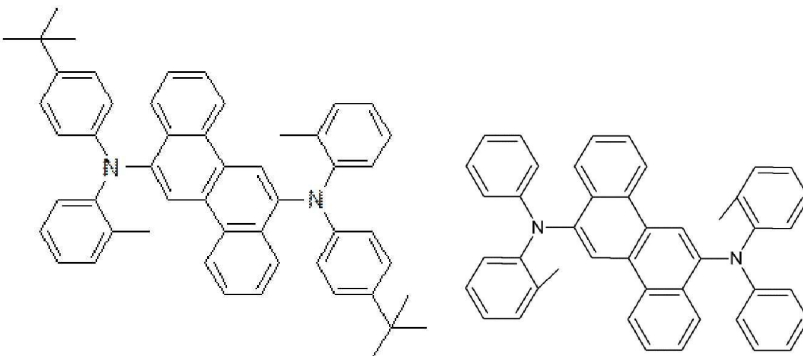
[화학식 B-5] [화학식 B-6]



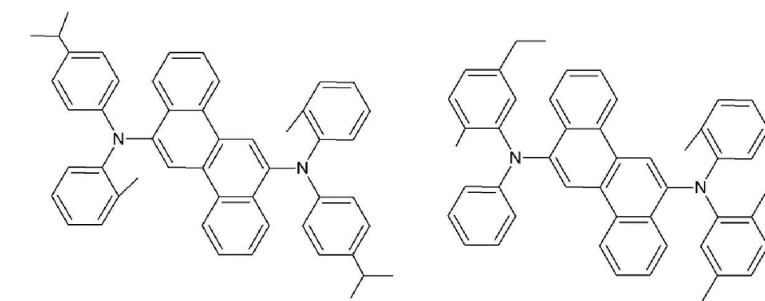
[화학식 C-1] [화학식 C-2]



[화학식 C-3] [화학식 C-4]



[화학식 C-5] [화학식 C-6]



청구항 7

서로 마주하는 양극과 음극, 그리고
상기 양극과 상기 음극 사이에 위치하는 적어도 1층의 유기층
을 포함하고,

상기 유기층은 제1항 내지 제6항 중 어느 한 항에 따른 화합물을 포함하는 유기 광전자 소자.

청구항 8

제7항에 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 발생시키는 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 유기 재료에 의해 영향을 많이 받는다.

발명의 내용

해결하려는 과제

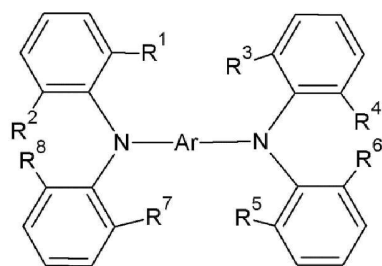
[0006] 일 구현예는 유기 광전자 소자에 적용 가능한 화합물을 제공한다.

[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]

상기 화학식 1에서,

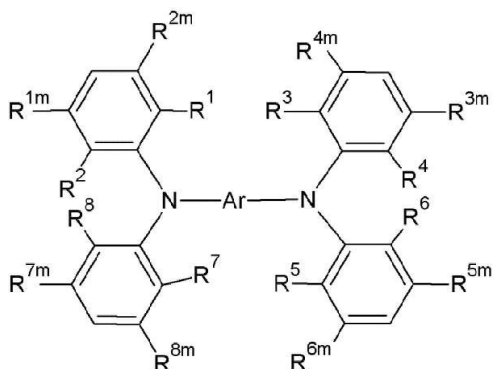
[0012] Ar은 치환 또는 비치환된 안트라센, 치환 또는 비치환된 파이렌 및 치환 또는 비치환된 크라이센에서 선택되고,

[0013] R^1 내지 R^8 는 각각 독립적으로 수소 또는 C1 내지 C4의 알킬기이고, R^1 내지 R^8 중 2 개 내지 8개는 C1 내지 C4의 알킬기이다.

[0014] 상기 화학식 1에서, R^1 내지 R^8 중 2개 내지 8개가 C1 내지 C4의 알킬기이고 상기 C1 내지 C4의 알킬기가 존재하는 페닐기의 메타 위치에 존재하는 C1 내지 C4의 알킬기를 더 포함할 수 있다.

[0015] 상기 화합물은 하기 화학식 2로 표현될 수 있다.

[0016] [화학식 2]



[0017]

[0018] 상기 화학식 2에서,

[0019] Ar은 치환 또는 비치환된 안트라센, 치환 또는 비치환된 파이렌 및 치환 또는 비치환된 크라이센에서 선택되고,

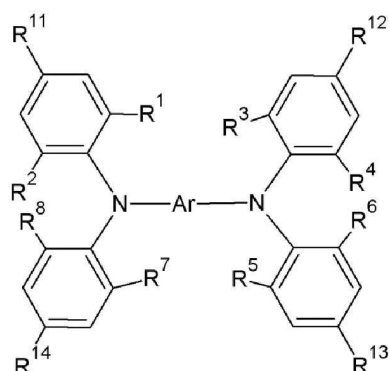
[0020] R^1 내지 R^8 는 각각 독립적으로 수소 또는 C1 내지 C4의 알킬기이고, R^1 내지 R^8 중 2 개 내지 8개는 C1 내지 C4의 알킬기이고,

[0021] R^{1m} 내지 R^{8m} 은 각각 독립적으로 수소 또는 C1 내지 C4의 알킬기이고, R^{1m} 내지 R^{8m} 중 2 개 내지 8개는 C1 내지 C4의 알킬기이다.

[0022] 상기 화학식 1에서, R^1 내지 R^8 중 2개 내지 8개가 C1 내지 C4의 알킬기이고 상기 C1 내지 C4의 알킬기가 존재하는 페닐기의 파라 위치에 존재하는 C3 내지 C4의 2차 알킬기 또는 C3 내지 C4의 3차 알킬기를 더 포함할 수 있다.

[0023] 상기 화합물은 하기 화학식 3으로 표현될 수 있다.

[0024] [화학식 3]



[0025]

[0026] 상기 화학식 3에서,

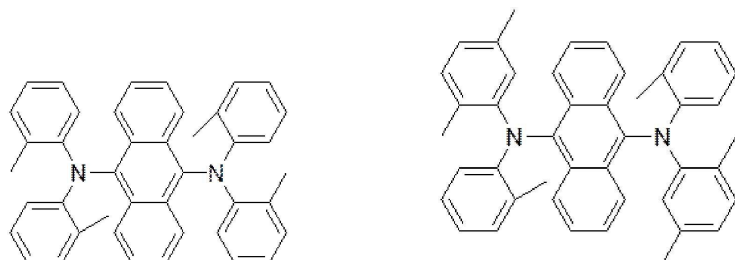
[0027] Ar은 치환 또는 비치환된 안트라센, 치환 또는 비치환된 파이렌 및 치환 또는 비치환된 크라이센에서 선택되고,

[0028] R^1 내지 R^8 는 각각 독립적으로 수소 또는 C1 내지 C4의 알킬기이고, R^1 내지 R^8 중 2 개 내지 8개는 C1 내지 C4의 알킬기이고,

[0029] R^{11} 내지 R^{14} 는 각각 독립적으로 수소, C3 내지 C4의 2차 알킬기 또는 C3 내지 C4의 3차 알킬기이고, R^{11} 내지 R^{14} 중 적어도 하나는 C3 내지 C4의 2차 알킬기 또는 C3 내지 C4의 3차 알킬기이다.

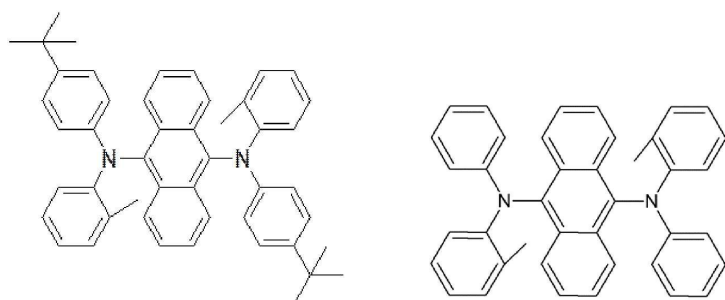
[0030] 상기 화학식 1 로 표시되는 화합물의 구체적인 예로는 하기 화학식 A-1 내지 C-6의 화합물을 들 수 있다.

[0031] [화학식 A-1] [화학식 A-2]



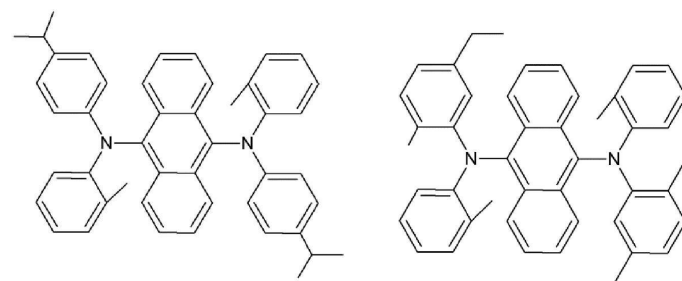
[0032]

[0033] [화학식 A-3] [화학식 A-4]



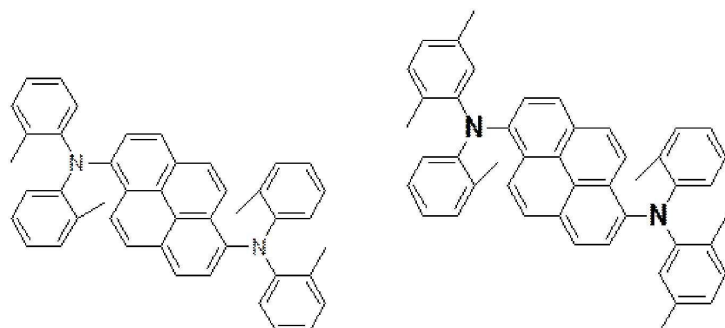
[0034]

[0035] [화학식 A-5] [화학식 A-6]



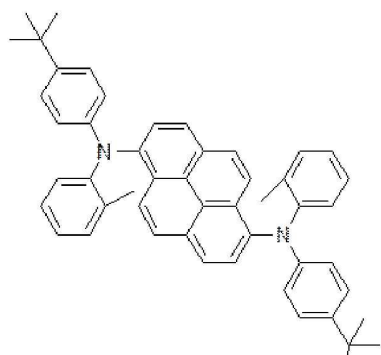
[0036]

[0037] [화학식 B-1] [화학식 B-2]

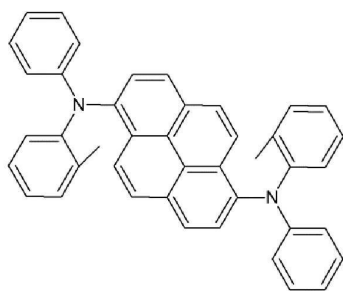


[0038]

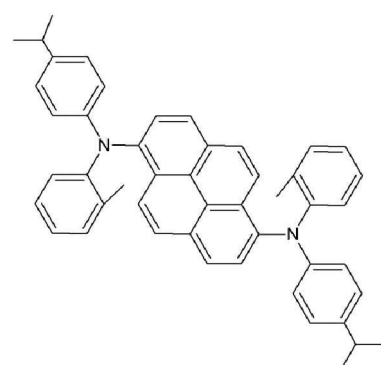
[0039] [화학식 B-3] [화학식 B-4]



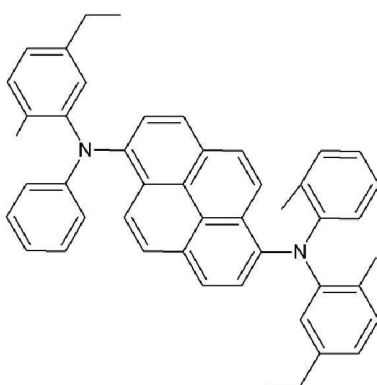
[0040]



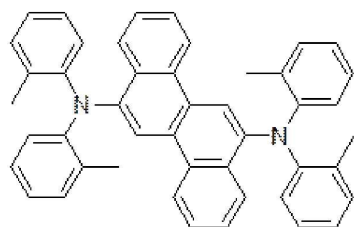
[0041] [화학식 B-5] [화학식 B-6]



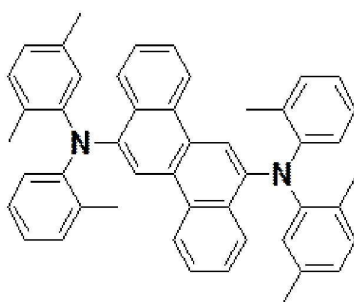
[0042]



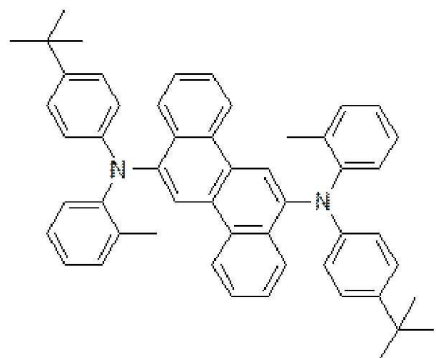
[0043] [화학식 C-1] [화학식 C-2]



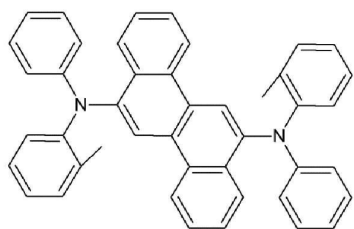
[0044]



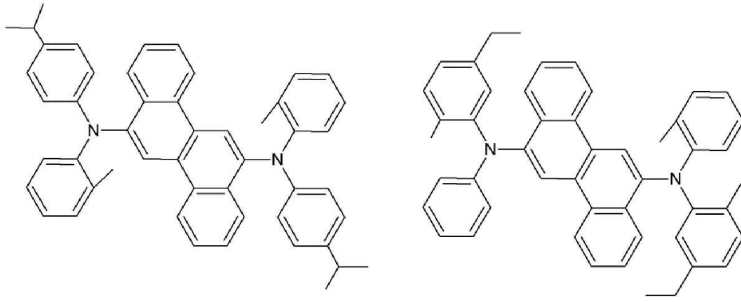
[0045] [화학식 C-3] [화학식 C-4]



[0046]



[0047] [화학식 C-5] [화학식 C-6]



[0048]

[0049]

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.

[0050]

상기 유기층은 발광층을 포함할 수 있고, 상기 발광층은 상기 화합물을 도펀트로 포함할 수 있다.

발명의 효과

[0051]

상기 화합물은 청색 발광 영역에서 우수한 발광 특성을 가지며, 유기 광전자 소자에 적용시 효율과 수명을 향상시킬 수 있다.

도면의 간단한 설명

[0052]

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

도 2는 비교합성에 1 내지 3과 합성에 1 내지 3의 화합물의 용액에서의 흡광 특성을 보여주는 그래프이다.

도 3은 비교합성에 4 내지 6과 합성에 4 내지 6의 화합물의 용액에서의 흡광 특성을 보여주는 그래프이다.

도 4는 비교합성에 7 내지 9과 합성에 7 내지 9의 화합물의 용액에서의 흡광 특성을 보여주는 그래프이다.

도 5는 비교합성에 1 내지 3과 합성에 1 내지 3의 화합물의 용액에서의 PL 특성을 보여주는 그래프이다.

도 6은 비교합성에 4 내지 6과 합성에 4 내지 6의 화합물의 용액에서의 PL 특성을 보여주는 그래프이다.

도 6은 비교합성에 7 내지 9과 합성에 7 내지 9의 화합물의 용액에서의 PL 특성을 보여주는 그래프이다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

[0053]

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.

[0054]

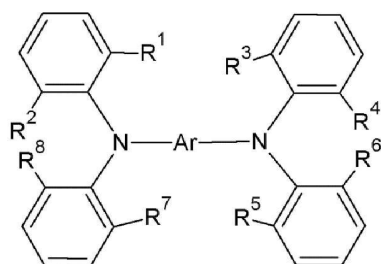
본 명세서에서 "치환"이란 별도의 정의가 없는 한, 치환기 또는 화합물 중의 적어도 하나의 수소가 중수소, NH₂, C1 내지 C4 아민기, 니트로기, C1 내지 C4 실릴기, C1 내지 C4 알킬기, C1 내지 C4 알킬실릴기, C1 내지 C4 알콕시기, 플루오로기, C1 내지 C4 트리플루오로알킬기 또는 시아노기로 치환된 것을 의미한다.

[0055]

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

[0056]

[화학식 1]



[0057]

상기 화학식 1에서,

[0058]

Ar은 치환 또는 비치환된 안트라센, 치환 또는 비치환된 파이렌 및 치환 또는 비치환된 크라이센에서 선택되고,

[0059]

[0060] R^1 내지 R^8 는 각각 독립적으로 수소 또는 C1 내지 C4의 알킬기이고, R^1 내지 R^8 중 2 개 내지 8개, 예를 들어 2 개 내지 6개는 C1 내지 C4의 알킬기이다.

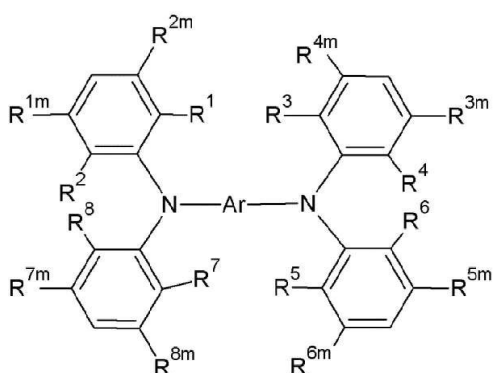
[0061] 상기 C1 내지 C4의 알킬기는 직쇄 또는 분지쇄 알킬기일 수 있으며, 직쇄 알킬기가 바람직하다. C1 내지 C4의 알킬기의 구체적인 예로는 메틸기, 에틸기, 프로필기, 이소프로필기, 이소부틸기, sec-부틸기, tert-부틸기 등이 있다.

[0062] 상기 화학식 1의 구조를 가지는 화합물은 청색 발광 영역에서 우수한 발광 특성을 나타내며 R^1 내지 R^8 가 모두 수소인 경우에 비하여 단파장 영역에서 발광 피크를 나타낸다.

[0063] 상기 화학식 1에서, R^1 내지 R^8 중 2개 내지 8개가 C1 내지 C4의 알킬기이고, 상기 C1 내지 C4의 알킬기가 존재하는 페닐기의 메타 위치에 존재하는 C1 내지 C4의 알킬기를 더 포함할 수 있다.

[0064] 상기 화합물은 하기 화학식 2로 표현될 수 있다.

[0065] [화학식 2]



[0066]

[0067] 상기 화학식 2에서,

[0068] Ar은 치환 또는 비치환된 안트라센, 치환 또는 비치환된 파이렌 및 치환 또는 비치환된 크라이센에서 선택되고,

[0069] R^1 내지 R^8 는 각각 독립적으로 수소 또는 C1 내지 C4의 알킬기이고, R^1 내지 R^8 중 2 개 내지 8개, 예를 들어 2 개 내지 6개는 C1 내지 C4의 알킬기이고,

[0070] R^{1m} 내지 R^{8m} 은 각각 독립적으로 수소 또는 C1 내지 C4의 알킬기이고, R^{1m} 내지 R^{8m} 중 2 개 내지 8개, 예를 들어 2 개 내지 6개는 C1 내지 C4의 알킬기이다.

[0071] 상기 C1 내지 C4의 알킬기는 직쇄 또는 분지쇄 알킬기일 수 있으며, 직쇄 알킬기가 바람직하다. C1 내지 C4의 알킬기의 구체적인 예로는 메틸기, 에틸기, 프로필기, 이소프로필기, 이소부틸기, sec-부틸기, tert-부틸기 등이 있다.

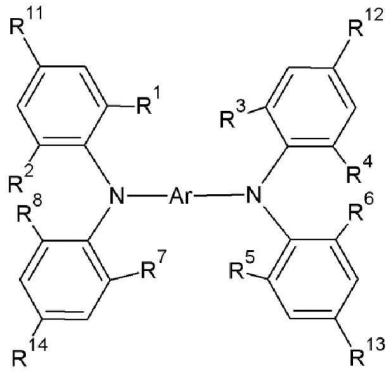
[0072] R^{1m} 내지 R^{8m} 은 R^1 내지 R^8 에 대하여 파라 위치에 존재하는 것으로 R^1 내지 R^8 중 2개 내지 8개가 C1 내지 C4의 알킬기인 경우 파라 위치(마주보는 위치)에 존재하는 R^{1m} 내지 R^{8m} 중 2 개 내지 8개가 C1 내지 C4의 알킬기인 것이 바람직하다.

[0073] 상기 화학식 2의 구조를 가지는 화합물은 청색 발광 영역에서 우수한 발광 특성을 나타내며 소자의 수명을 개선시킬 수 있다.

[0074] 상기 화학식 1에서, R^1 내지 R^8 중 2개 내지 8개가 C1 내지 C4의 알킬기이고 상기 C1 내지 C4의 알킬기가 존재하는 페닐기의 파라 위치에 존재하는 C3 내지 C4의 2차 알킬기 또는 C3 내지 C4의 3차 알킬기를 더 포함할 수 있다.

[0075] 상기 화합물은 하기 화학식 3으로 표현될 수 있다.

[0076] [화학식 3]



[0077]

[0078] 상기 화학식 3에서,

[0079] Ar은 치환 또는 비치환된 안트라센, 치환 또는 비치환된 파이렌 및 치환 또는 비치환된 크라이센에서 선택되고,

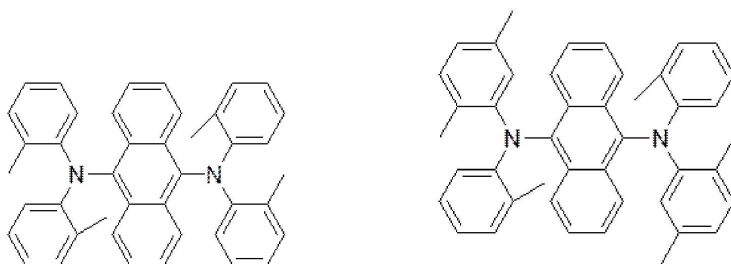
[0080] R¹ 내지 R⁸는 각각 독립적으로 수소 또는 C1 내지 C4의 알킬기이고, R¹ 내지 R⁸ 중 2 개 내지 8개는 C1 내지 C4의 알킬기이고,

[0081] R¹¹ 내지 R¹⁴는 각각 독립적으로 수소, C3 내지 C4의 2차 알킬기 또는 C3 내지 C4의 3차 알킬기이고, R¹¹ 내지 R¹⁴ 중 적어도 하나는 C3 내지 C4의 2차 알킬기 또는 C3 내지 C4의 3차 알킬기이다.

[0082] 상기 C3 내지 C4의 2차 알킬기의 구체적인 예로는 이소프로필기, t-부틸기 등이 있다. R¹¹ 내지 R¹⁴의 적어도 하나에 C3 내지 C4의 2차 알킬기 또는 C3 내지 C4의 3차 알킬기가 존재하는 경우 소자 제작시 화합물의 분자간 패킹(packing)을 방지하여 분자간 상호작용을 방지하여 소자의 효율을 향상시킬 수 있다.

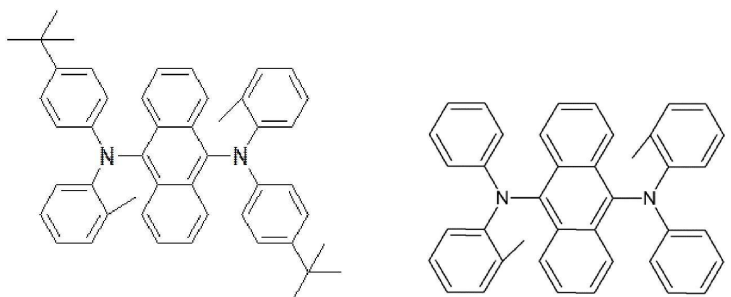
[0083] 상기 화학식 1 로 표시되는 화합물의 구체적인 예로는 하기 화학식 A-1 내지 C-6의 화합물을 들 수 있다.

[0084] [화학식 A-1] [화학식 A-2]



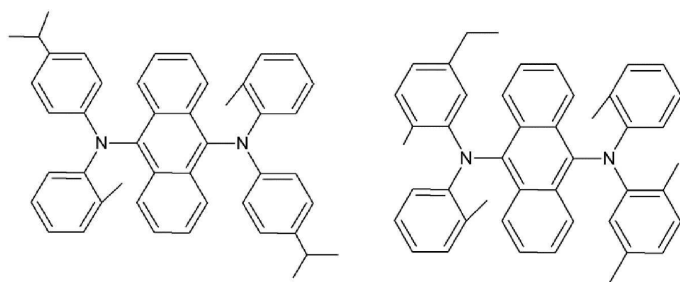
[0085]

[0086] [화학식 A-3] [화학식 A-4]



[0087]

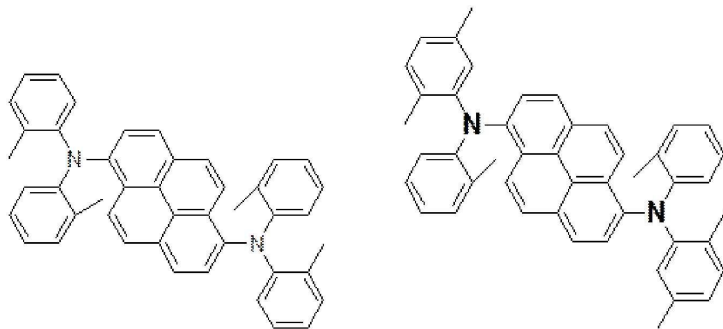
[0088] [화학식 A-5] [화학식 A-6]



[0089]

[0090]

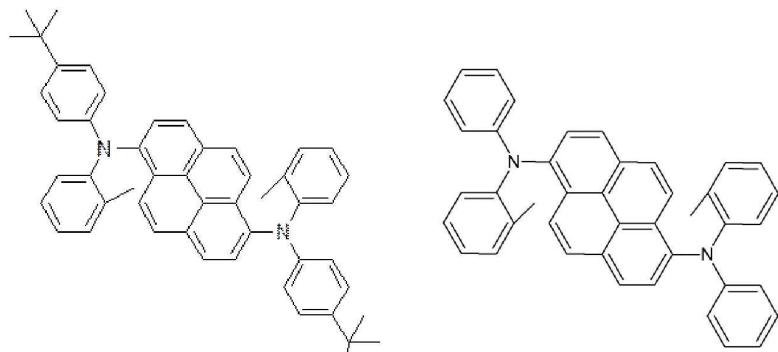
[화학식 B-1] [화학식 B-2]



[0091]

[0092]

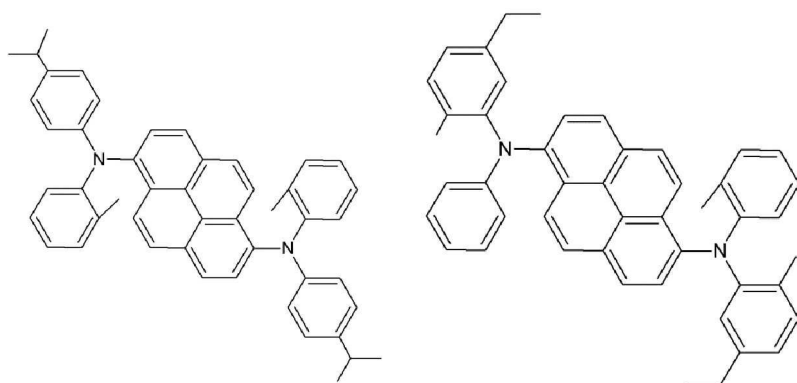
[화학식 B-3] [화학식 B-4]



[0093]

[0094]

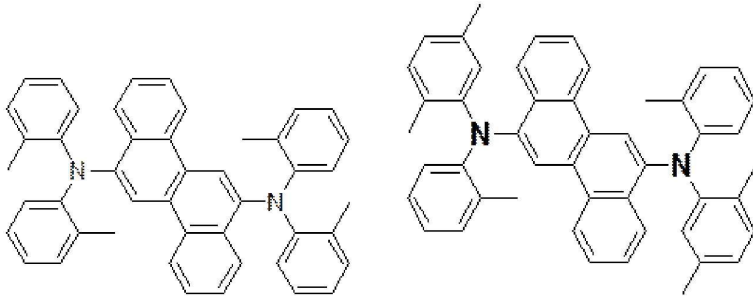
[화학식 B-5] [화학식 B-6]



[0095]

[0096]

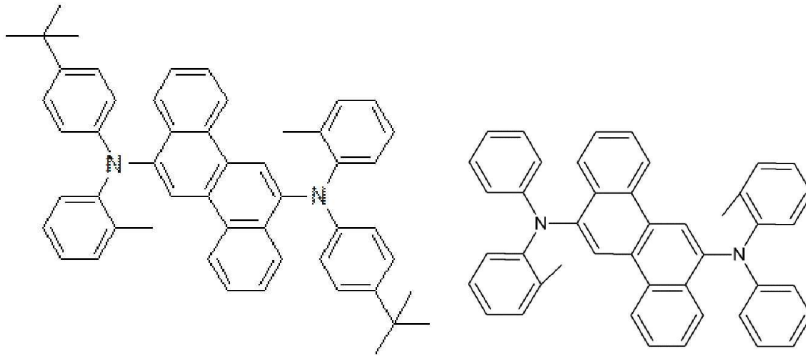
[화학식 C-1] [화학식 C-2]



[0097]

[0098]

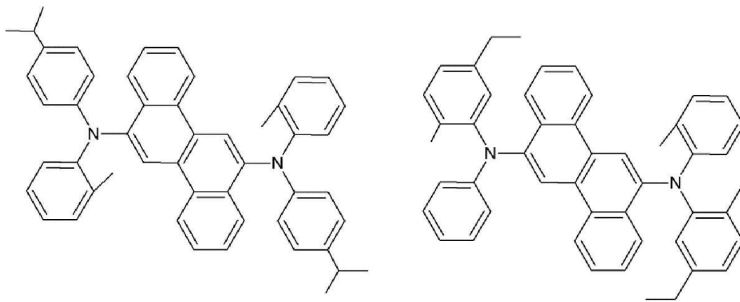
[화학식 C-3] [화학식 C-4]



[0099]

[0100]

[화학식 C-5] [화학식 C-6]



[0101]

[0102]

상기 화합물은 용액 상태에서 약 350 nm 내지 약 500 nm 에서 최대 흡수 파장(UV_{max})을 가질 수 있다.

[0103]

상기 화합물은 약 2.2 eV 내지 약 3.0 eV, 바람직하게는 약 2.3 eV 내지 약 2.9 eV의 밴드갭을 가질 수 있다.

[0104]

상술한 화합물은 다양한 유기 광전자 소자에 적용될 수 있으며, 예컨대 도펀트 (dopant)로서 사용될 수 있다. 상술한 화합물은 화학 기상 증착과 같은 건식 성막법 또는 용액 공정을 이용하여 박막으로 형성될 수 있다.

[0105]

이하 상술한 화합물을 적용한 유기 광전자 소자를 설명한다.

[0106]

상기 유기 광전자 소자는 전기 에너지와 광 에너지를 상호 전환할 수 있는 소자이면 특별히 한정되지 않으며, 예컨대 유기 광전 소자, 유기 발광 소자 및 유기 태양 전지 등을 들 수 있다.

[0107]

상기 유기 광전자 소자는 서로 마주하는 양극과 음극, 상기 양극과 상기 음극 사이에 위치하는 적어도 1층의 유기층을 포함할 수 있고, 상기 유기층은 전술한 화합물을 포함할 수 있다.

[0108]

여기서는 유기 광전자 소자의 일 예인 유기 발광 소자를 도면을 참고하여 설명한다.

[0109]

도 1은 일 구현예에 따른 유기 발광 소자를 보여주는 단면도이다.

[0110]

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.

[0111]

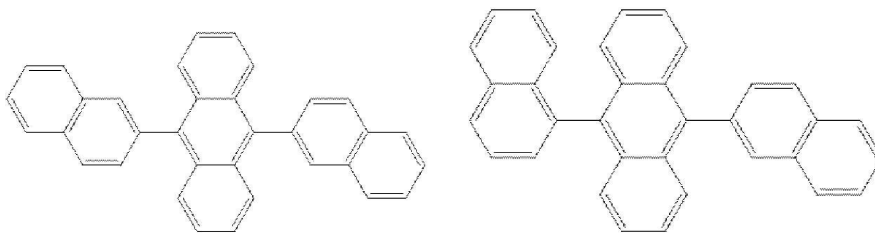
제1 전극(110)과 제2 전극(120) 중 하나는 캐소드(cathode)이고 다른 하나는 애노드(anode)일 수 있다.

[0112] 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.

[0113] 유기층(105)은 전술한 화합물을 포함할 수 있다. 유기층(105)은 적어도 1층 이상을 포함할 수 있으며, 발광층을 포함할 수 있다.

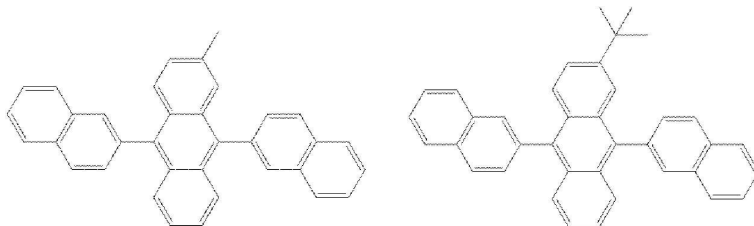
[0114] 발광층은 전술한 화합물을 도펀트로 포함할 수 있다. 상기 발광층은 호스트 화합물을 포함할 수 있으며, 이러한 호스트 화합물은 도펀트로 도핑되어 소정의 스펙트럼 특성을 갖는 광을 방사시킬 수 있는 화합물이면 제한없이 사용될 수 있다. 구체적인 예로는 하기 화학식 D-1 내지 화학식 D-4로 표현되는 화합물등이 있다. 발광층 내에서 도펀트의 함량은 약 0.01 내지 10.0 중량%의 범위에 있을 수 있다. 화학식 D-1 및 화학식 D-2의 각각의 방향족 링은 C1 내지 C10의 직쇄 또는 분지쇄의 알킬기로 치환될 수 있으며 치환된 구조의 화합물은 화학식 D-3 및 화학식 D-4로 표현되는 화합물이 있으나 이에 한정되는 것은 아니다.

[0115] [화학식 D-1] [화학식 D-2]



[0116]

[0117] [화학식 D-3] [화학식 D-4]



[0118]

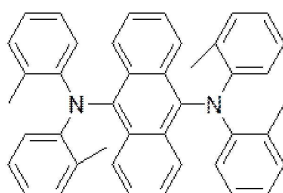
[0119] 유기층(105)은 발광층 이외에 보조층을 더 포함할 수 있다. 보조층은 발광 효율을 개선하기 위한 것으로, 제1 전극(110)과 발광층 사이 및 제2 전극(120)과 발광층 사이 중 적어도 하나에 위치할 수 있다. 보조층은 전자와 정공의 균형을 맞추기 위한 전자 수송층(electron transport layer) 및 정공 수송층(hole transport layer)과 전자와 정공의 주입을 강화하기 위한 전자 주입층(electron injection layer) 및 정공 주입층(hole injection layer) 등이 있으며, 이 중에서 선택된 하나 또는 둘 이상의 층을 포함할 수 있다.

[0120] 상술한 유기 발광 소자는 유기 발광 표시 장치에 적용될 수 있다.

[0121] 이하에서는 본 발명의 구체적인 실시예들을 제시한다. 다만, 하기에 기재된 실시예들은 본 발명을 구체적으로 예시하거나 설명하기 위한 것에 불과하며, 이로서 본 발명이 제한되어서는 아니된다.

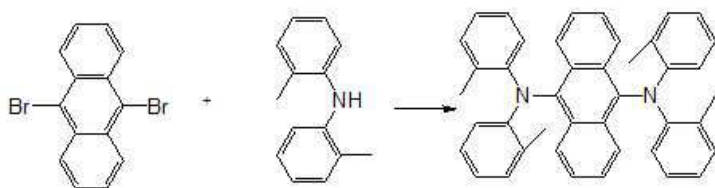
[0123] **합성예 1: 화학식 A-1로 표현되는 화합물의 합성**

[0124] [화학식 A-1]



[0125]

[0126] [반응식 A-1]



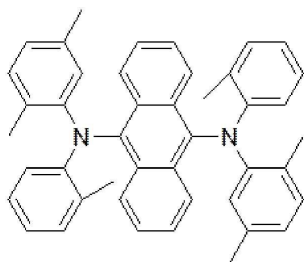
[0127]

[0128] 디오르소톨릴아민(2.6 mL, 14.23 mmol), $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (0.21 g, 0.34 mmol) 및 소듐터서리부톡사이드(Sodium tert butoxide, 2.81 g, 56.93 mmol)을 질소조건에서 150 mL의 건조 톨루엔 용액에 녹여서 혼합물을 제조한다. 9,10-디브로모안트라센(1.97 g, 5.86 mmol)과 트리터서리부틸포스핀(tri-tert-butylphosphine) 용액(0.2 mL)을 상기 혼합물에 첨가한다. 그런 다음 70°C 조건에서 12시간 교반한다. 반응 완료 후 클로로포름과 물로 추출하고 무수 황산 마그네슘으로 처리한다. 얻어진 결과물을 클로로포름 : 헥산 (1 : 3의 부피비) 조건으로 실리카 겔 컬럼으로 정제한다. 테트라하이드로퓨란과 메탄올을 이용하여 재침전한다. (수율: 15%)

[0129] ^1H NMR (300MHz, CDCl_3 , δ): 8.13 (q, 4H), 7.26 (q, 4H), 7.09 (q, 8H), 6.95 (t, 8H), 1.85 (s, 12H)

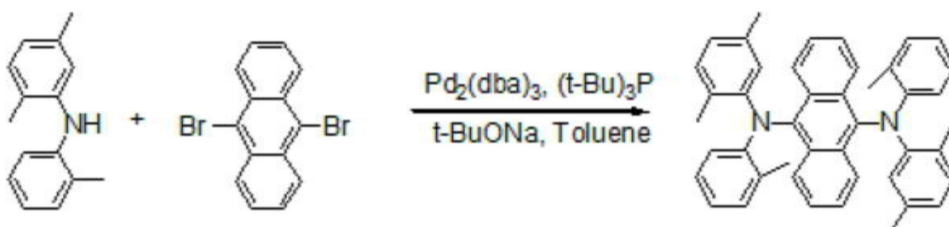
[0130] **합성예 2: 화학식 A-2로 표현되는 화합물의 합성**

[0131] [화학식 A-2]



[0132]

[0133] [반응식 A-2]



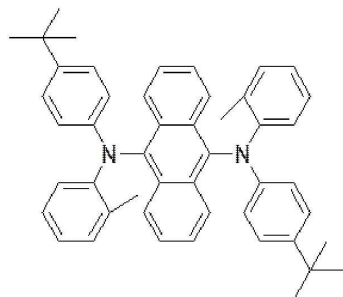
[0134]

[0135] 9,10-디브로모안트라센 (1.0 g, 2.98 mmol), (2,5-디메틸-페닐)-오르소-톨릴 아민 (1.51 g, 7.16 mmol), $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (0.11 g, 0.119 mmol) 및 소듐 터서리부톡사이드(Sodium t-butoxide, 1.14 g, 5.96 mmol) 을 질소조건에서 60 mL의 건조 톨루엔 용액에 녹여서 혼합물을 제조한다. 트리터서리부틸포스핀 (tri-tert-butylphosphine, 0.58 mL, 0.238mmol)을 첨가하고, 이 혼합물을 환류(reflux)하면서 12시간 교반한다. 반응 완료 후 에틸아세테이트와 증류수로 추출하고 무수 황산 마그네슘 처리하여 수분을 제거한다. 얻어진 결과물을 톨루엔 : 헥세인 = 1 : 4 부피비로 실리카겔 컬럼 정제한다. 테트라하이드로퓨란과 에탄올을 이용하여 재침전한다. (수율: 23%)

[0136] ^1H NMR (300MHz, $\text{THF}-d_8$, δ): 8.16 (s, 2H), 7.19 (m, 3H), 6.99 (d, 4H), 6.73 (s, 2H), 2.48 (s, 3H), 2.07 (d, 6H)

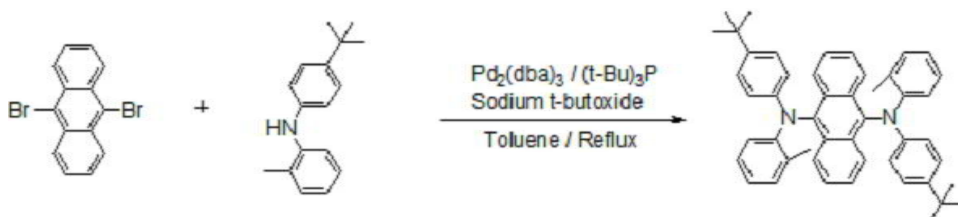
[0137] **합성예 3: 화학식 A-3으로 표현되는 화합물의 합성**

[0138] [화학식 A-3]



[0139]

[0140] [반응식 A-3]



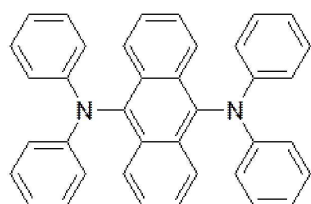
[0141]

[0142] 9,10-디브로모안트라센(1.0 g, 2.97 mmol), (4-터셔리-부틸페닐)-오르소-톨릴 아민(1.56 g, 6.54 mmol), $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (0.21 g, 0.238 mmol) 및 소듐 터셔리부톡사이드(sodium t-butoxide, 1.71 g, 17.8 mmol)을 질소조건에서 90 mL의 건조 톨루엔 용액에 녹여서 혼합물을 제조한다. 이 혼합물에 트리터셔리부틸포스핀(tri-tert-butylphosphine, 0.4 mL)을 첨가한다. 이 혼합물을 환류(reflux)하면서 3시간 교반한다. 반응 완료 후 에틸아세테이트와 증류수로 추출하고 무수 황산 마그네슘 처리하여 수분을 제거한다. 얻어진 결과물을 톨루엔 : 헥산 = 1 : 10 부피비로 실리카겔 컬럼 정제한다. 테트라하이드로퓨란과 에탄올을 이용하여 재침전한다. (수율: 63%)

[0143] ^1H NMR (300MHz, THF-d_8 , δ): 8.18 (q, 4H), 7.30 (q, 4H), 7.22 (q, 6H), 6.95 (m, 6H), 6.67 (t, 4H), 2.48 (s, 6H), 1.22 (d, 18H)

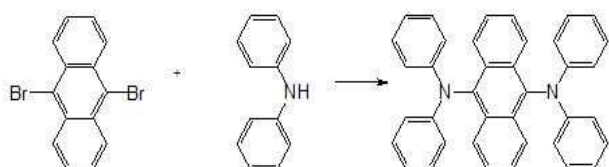
[0145] 비교합성예 1: 화학식 A로 표현되는 화합물의 합성

[0146] [화학식 A]



[0147]

[0148] [반응식 A]



[0149]

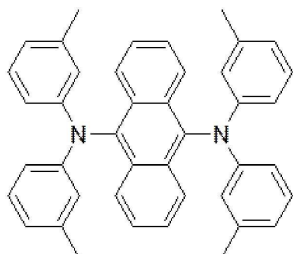
[0150] 디페닐아민(1.68 g, 9.77 mmol), $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (0.12 g, 0.12 mmol) 및 소듐터셔리부톡사이드(sodium tert-butoxide, 2.71 g, 19.55 mmol)을 질소조건에서 100 mL의 건조 톨루엔 용액에 녹여서 혼합물을 제조한다. 9,10-디브로모안트라센(1.31 g, 3.91 mmol)과 트리터셔리부틸포스핀(tri-tert-butylphosphine) 용액(0.15 mL)을 상기 혼합물에 첨가한다. 그런 다음 70°C 조건에서 10시간 교반한다. 반응 완료 후 클로로포름과 물로 추출

하고 무수 황산 마그네슘으로 처리한다. 얻어진 결과물을 클로로포름 : 헥산 (1 : 3의 부피비) 조건으로 실리카 겔 컬럼으로 정제한다. 테트라하이드로퓨란과 헥산을 이용하여 재침전한다. (수율: 21%)

[0151] ^1H NMR (300MHz, CDCl_3 , δ): 8.20 (q, 4H), 7.37 (q, 4H), 7.23 (t, 8H), 7.13 (d, 8H), 6.93 (t, 4H)

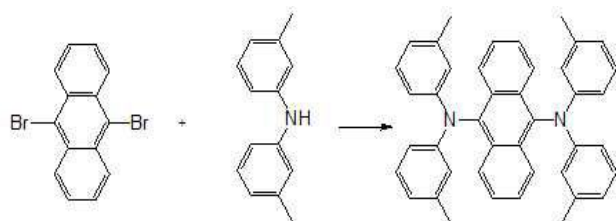
[0153] **비교합성예 2: 화학식 A-7로 표현되는 화합물의 합성**

[0154] [화학식 A-7]



[0155]

[0156] [반응식 A-7]



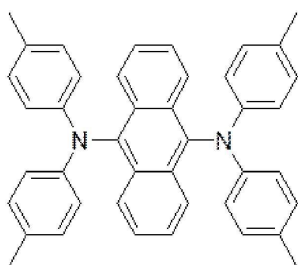
[0157]

[0158] 디메타톨릴아민(1.99 mL, 10.27 mmol), $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (0.23 g, 0.25 mmol) 및 소듐터셔리부톡사이드(3.94 g, 41.08 mmol)을 질소조건에서 100 mL의 건조 톨루엔 용액에 녹여서 혼합물을 제조한다. 9,10-디브로모안트라센(1.38 g, 4.11 mmol)과 트리터셔리부틸포스핀(tri-tert-butylphosphine) 용액(0.15 mL)을 상기 혼합물에 첨가한다. 그런 다음 70°C 조건에서 10시간 교반한다. 반응 완료 후 클로로포름과 물로 추출하고 무수 황산 마그네슘으로 처리한다. 얻어진 결과물을 클로로포름 : 헥산 (1 : 3의 부피비) 조건으로 실리카 겔 컬럼으로 정제한다. 테트라하이드로퓨란과 헥산을 이용하여 재침전한다. (수율: 28%)

[0159] ^1H NMR (300MHz, CDCl_3 , δ): 8.20 (q, 4H), 7.37 (q, 4H), 7.09 (t, 4H), 6.94 (s, 4H), 6.88 (d, 4H), 6.73 (d, 4H), 2.20 (s, 12H)

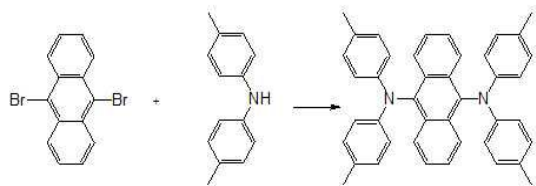
[0161] **비교합성예 3: 화학식 A-8로 표현되는 화합물의 합성**

[0162] [화학식 A-8]



[0163]

[0164] [반응식 A-8]



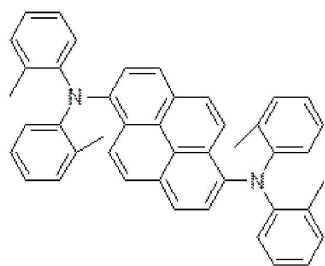
[0165]

[0166] 디파라톨릴아민(2.80 mL, 14.23 mmol), $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (0.31 g, 0.34 mmol) 및 소듐터셔리부톡사이드(5.47 g, 56.92 mmol)을 질소조건에서 150 mL의 건조 톨루엔 용액에 녹여서 혼합물을 제조한다. 9,10-디브로모안트라센(1.91 g, 5.69 mmol)과 트리터셔리부틸포스핀(tri-tert-butylphosphine) 용액(0.2 mL)을 상기 혼합물에 첨가한다. 그런 다음 70°C 조건에서 6시간 교반한다. 반응 완료 후 클로로포름과 물로 추출하고 무수 황산 마그네슘으로 처리한다. 얻어진 결과물을 클로로포름 : 헥산 (1 : 3의 부피비) 조건으로 실리카 겔 컬럼으로 정제한다. 테트라하이드로퓨란과 헥산을 이용하여 재침전한다. (수율: 45%)

[0167] ^1H NMR (300MHz, CDCl_3 , δ): 8.18 (q, 4H), 7.34 (q, 4H), 6.97 (s, 16H), 2.25 (s, 12H)

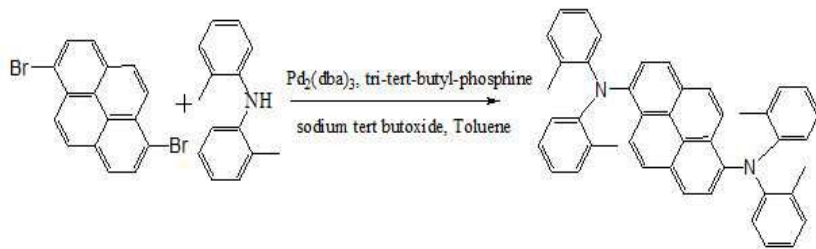
[0168] **합성예 4: 화학식 B-1로 표현되는 화합물의 합성**

[0169] [화학식 B-1]



[0170]

[0171] [반응식 B-1]



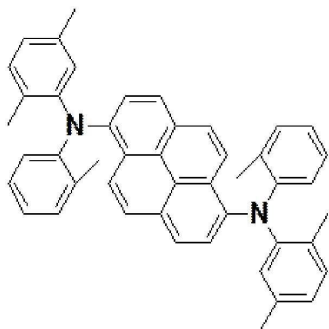
[0172]

[0173] 디오르소다이페닐아민 (2.5ml, 6.62mmol), $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (0.4g, 0.22mmol) 및 소듐터셔리부톡사이드(sodium tert-butoxide) (5.30g, 27.6mmol)를 질소조건에서 200ml 건조 톨루엔 용액에 녹여서 혼합물을 제조한다. 1,6-디브로모파이렌(2g, 5.52mmol)과 트리터셔리부틸포스핀(tri-tert-butylphosphine, 1.60ml, 0.33mmol)용액을 상기 혼합물에 첨가한다. 질소조건에서 70 °C 조건에서 12시간 가열한다. 반응 완료 후 클로로포름과 물로 추출하고 무수 황산마그네슘으로 처리한다. 얻어진 결과물을 클로로포름 : 헥산(1:10 부피비) 조건으로 실리카 겔 컬럼(silica gel column)으로 정제하고 테트라하이드로퓨란과 헥산을 이용하여 재침전한다.(수율: 20.8%)

[0174] ^1H NMR (300MHz, THF, δ): 7.95(d, 1H), 7.90(d, 1H), 7.81(d, 1H), 7.44(d, 1H), 7.22(d, 1H), 7.17(d, 1H), 7.12(d, 1H), 7.08(t, 1H), 6.99(q, 1H), 6.91(m, 2H), 6.59(d, 1H), 2.49(s, 3H), 2.11(s, 3H)

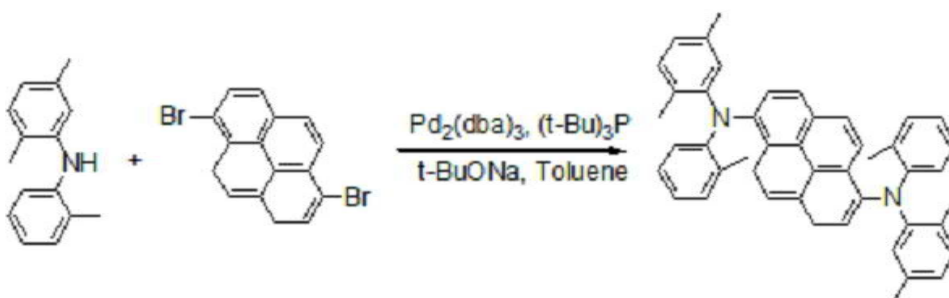
[0176] **합성예 5: 화학식 B-2로 표현되는 화합물의 합성**

[0177] [화학식 B-2]



[0178]

[0179] [반응식 B-2]



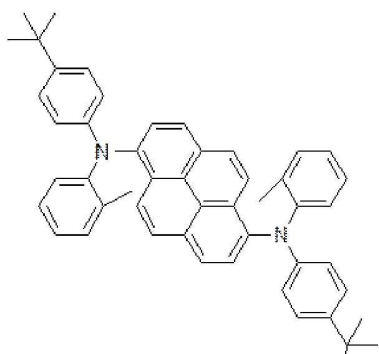
[0180]

[0181] 1,6-디브로모나프이렌 (2.0 g, 5.55 mmol), (2,5-디메틸-페닐)-오르소-톨릴 아민 (2.58 g, 6.11 mmol), $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (0.20 g, 0.111 mmol) 및 소듐 터셔리부톡사이드(sodium t-butoxide, 2.14 g, 11.1 mmol)을 질소조건에서 110 mL의 건조 톨루엔 용액에 녹여서 혼합물을 제조한다. 이 혼합물에 트리터셔리부틸포스핀(tri-tert-butylphosphine, 1.10 mL, 0.222mmol)을 첨가한다. 이 혼합물을 환류(reflux)하면서 12시간 교반한다. 반응 완료 후 에틸아세테이트와 증류수로 추출하고 무수 황산 마그네슘 처리하여 수분을 제거한다. 얻어진 결과물을 톨루엔 : 헥세인 = 1 : 10 부피비로 실리카겔 컬럼 정제한다. 테트라하이드로퓨란과 에탄올을 이용하여 재침전한다. (수율: 26%)

[0182] ^1H NMR (300MHz, THF-d_8 , δ): 7.95 (q, 3H), 7.88 (d, 1H), 7.83 (d, 1H), 7.89 (d, 1H), 7.45 (d, 2H), 7.24 (d, 1H), 7.16 (t, 3), 7.07 (t, 2H), 6.98 (t, 1H), 6.90 (t, 3H), 6.82 (d, 1H), 6.74 (s, 1H), 6.58 (d, 1H), 6.54 (s, 1H), 2.22 (s, 1H), 2.11 (s, 1H), 2.07 (s, 1H)

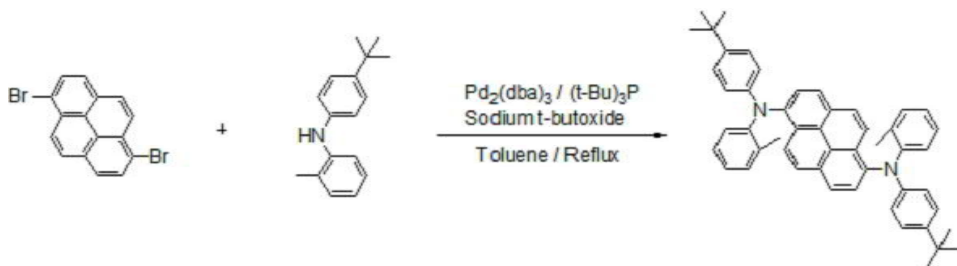
[0184] **합성예 6: 화학식 B-3으로 표현되는 화합물의 합성**

[0185] [화학식 B-3]



[0186]

[0187] [반응식 B-3]



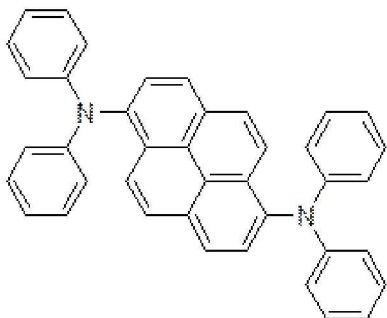
[0188]

[0189] 1,6-디브로모파이렌 (1.0 g, 2.77 mmol), (4-터셔리-부틸페닐)-오르소-톨릴 아민 (1.46 g, 6.11 mmol), $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (0.20 g, 0.222 mmol) 및 소듐 터셔리부톡사이드(sodium t-butoxide, 1.6 g, 16.6 mmol)을 질소조건에서 90 mL의 건조 톨루엔 용액에 녹여서 혼합물을 제조한다. 이 혼합물에 트리터셔리부틸포스핀(tri-tert-butylphosphine, 0.4 mL)을 첨가한다. 이 혼합물을 환류(reflux)하면서 3시간 교반한다. 반응 완료 후 에틸아세테이트와 증류수로 추출하고 무수 황산 마그네슘 처리하여 수분을 제거한다. 얻어진 결과물을 톨루엔 : 헥산 = 1 : 10 부피비로 실리카겔 컬럼 정제한다. 테트라하이드로퓨란과 에탄올을 이용하여 재침전한다. (수율: 37%)

[0190] ^1H NMR (300MHz, THF-d_8 , δ): 8.04 (t, 4H), 7.86 (d, 2H), 7.60 (d, 2H), 7.24 (q, 6H), 7.10 (m, 6H), 6.68(d, 4H), 2.05 (s, 6H), 1.27 (s, 18H)

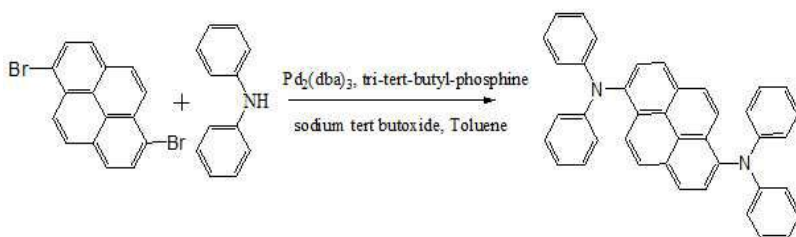
[0192] **비교합성예 4: 화학식 B로 표현되는 화합물의 합성**

[0193] [화학식 B]



[0194]

[0195] [반응식 B]



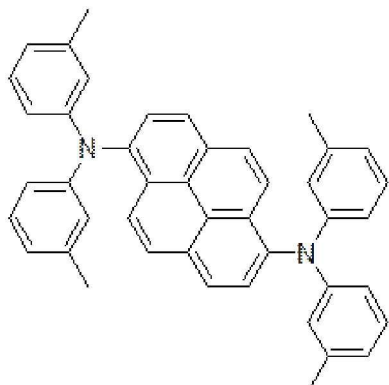
[0196]

[0197] 다이페닐아민(1.2g, 3.59mmol), $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (0.2g, 0.11mmol) 및 소듐터셔리부톡사이드(sodium tert-butoxide) (2.65g, 13.8mmol)를 질소조건에서 100ml 건조 톨루엔 용액에 녹여서 혼합물을 제조한다. 1,6-디브로모파이렌 (1g, 2.76mmol)과 트리터셔리부틸포스핀(tri-tert-butylphosphine, 0.80ml, 0.16mmol)용액을 상기 혼합물에 첨가한다. 질소조건에서 70 °C 조건에서 12시간 가열한다. 반응 완료 후 클로로포름과 물로 추출하고 무수 황산마그네슘으로 처리한다. 얻어진 결과물을 클로로포름: 헥산 (1:10 부피비) 조건으로 실리카 겔 컬럼(silica gel column)으로 정제하고 테트라하이드로퓨란과 헥산을 이용하여 재침전한다.(수율: 28.5%)

[0198] ^1H NMR (300MHz, CDCl_3 , δ): 8.14(t, 2H), 8.27(d, 1H), 7.82(d, 1H), 7.24(t, 4H), 7.09(d, 4H), 6.98(t, 2H)

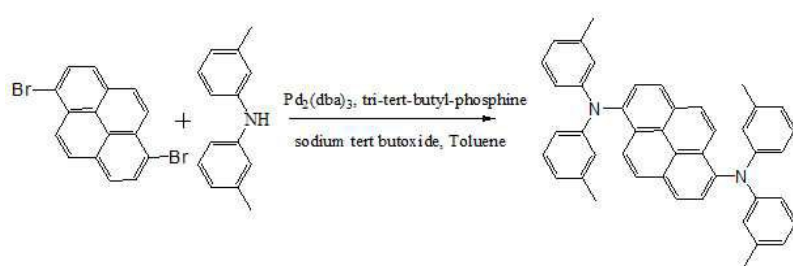
[0200] 비교합성예 5: 화학식 B-7로 표현되는 화합물의 합성

[0201] [화학식 B-7]



[0202]

[0203] [반응식 B-7]



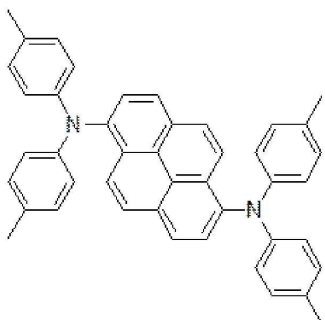
[0204]

[0205] 디메타다이페닐아민 (2.7ml 7.18mmol), $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (0.4g, 0.22mmol) 및 소듐터셔리부톡사이드(sodium tert-butoxide) (5.30g 27.6mmol)를 질소조건에서 200ml 건조 톨루엔 용액에 녹여서 혼합물을 제조한다. 1,6-디브로모파이렌(2g, 5.52mmol)과 트리터셔리부틸포스핀(tri-tert-butylphosphine 1.60ml, 0.33mmol)용액을 상기 혼합물에 첨가한다. 질소조건에서 70 °C 조건에서 12시간 가열한다. 반응 완료 후 클로로포름과 물로 추출하고 무수 황산마그네슘으로 처리한다. 얻어진 결과물을 클로로포름:헥산 (1:10 부피비) 조건으로 실리카 겔 컬럼(silica gel column)으로 정제하고 테트라하이드로푸란과 헥산을 이용하여 재침전한다.(수율: 29.7%)

[0206] ^1H NMR (300MHz, CDCl_3 , δ): 8.15(d, 1H), 8.10(q, 1H), 7.93(d, 1H), 7.81(d, 1H) 7.12(t, 2H), 6.88(d, 4H), 6.78(t, 2H), 2.20(s, 6H)

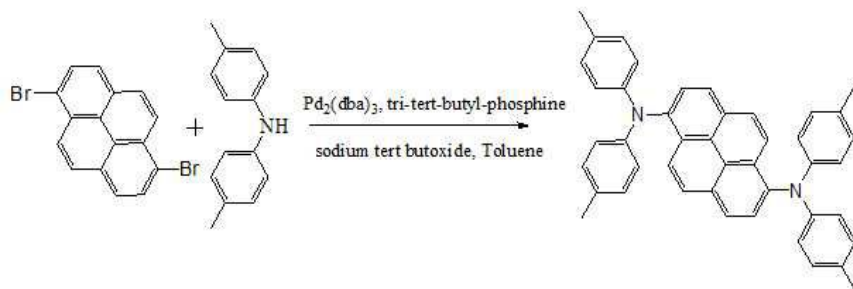
[0208] 비교합성예 6: 화학식 B-8로 표현되는 화합물의 합성

[0209] [화학식 B-8]



[0210]

[0211] [반응식 B-8]



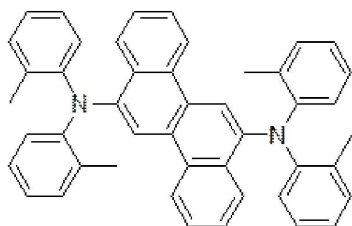
[0212]

[0213] 디파라다이페닐아민 (2.83g, 7.18mmol), $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (0.4g, 0.22mmol) 및 소듐터셔리부톡사이드(sodium tert-butoxide) (5.30g, 27.6mmol)를 질소조건에서 200ml 건조 톨루엔 용액에 녹여서 혼합물을 제조한다. 1,6-디브로모파이렌(2g, 5.52mmol)과 트리터셔리부틸포스핀(tri-tert-butylphosphine, 1.60ml, 0.33mmol)용액을 상기 혼합물에 첨가한다. 질소조건에서 70 °C 조건에서 12시간 가열한다. 반응 완료 후 클로로포름과 물로 추출하고 무수 황산마그네슘으로 처리한다. 얻어진 결과물을 클로로포름:헥산 (1:10 부피비) 조건으로 실리카 겔 컬럼(silica gel column)으로 정제하고 테트라하이드로퓨란과 헥산을 이용하여 재침전한다.(수율: 14.5%)

[0214] ^1H NMR (300MHz, CDCl_3 , δ): 8.12(d, 1H), 8.09(d, 1H), 7.89(d, 1H), 7.77(d, 1H), 7.01(d, 4H), 6.95(t, 4H), 2.30(s, 6H)

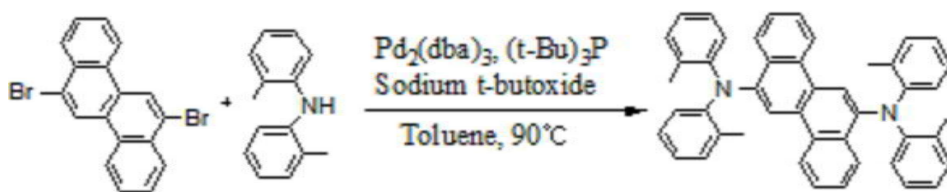
[0215] **합성예 7: 화학식 C-1으로 표현되는 화합물의 합성**

[0216] [화학식 C-1]



[0217]

[0218] [반응식 C-1]



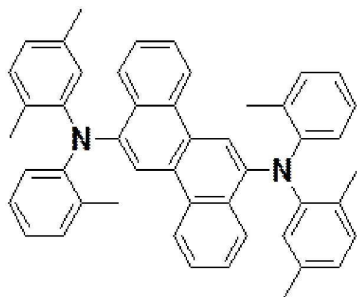
[0219]

[0220] 6,12-디브로모크라이센(0.84g, 2.21mmol), $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (0.16g, 0.18mmol) 및 소듐 터셔리부톡사이드(sodium tert-butoxide, 1.26g, 13.1mmol)을 질소조건에서 100ml의 건조 톨루엔 용액에 녹여서 혼합물을 제조한다. 디-오르소-톨릴-아민(1g, 5.07mmol)과 트리터셔리부틸포스핀(tri-tert-butylphosphine) 용액(0.31ml, 0.26mmol)을 상기 혼합물에 첨가한다. 그런 다음 90 °C 조건에서 4시간 교반한다. 반응 완료 후 에틸아세테이트와 물로 추출하고 무수 황산 마그네슘으로 처리한다. 얻어진 결과물을 톨루엔:헥산(1:10의 부피비) 조건으로 실리카겔 컬럼으로 정제한다. 테트라하이드로퓨란과 메탄올을 이용하여 재침전한다. (수율: 20%)

[0221] ^1H NMR (300MHz, THF-d_8 , δ) : 8.12(d, 2H), 8.08(s, 2H), 7.92(d, 2H), 7.47(t, 2H), 7.37(t, 2H), 7.23(t, 6H), 7.13(t, 2H), 6.99(m, 6H), 6.76(d, 2H), 2.10(s, 6H), 1.94(s, 6H)

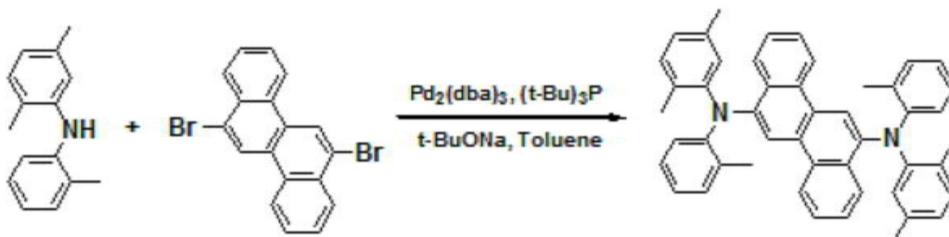
[0223] **합성예 8: 화학식 C-2로 표현되는 화합물의 합성**

[0224] [화학식 C-2]



[0225]

[0226] [반응식 C-2]



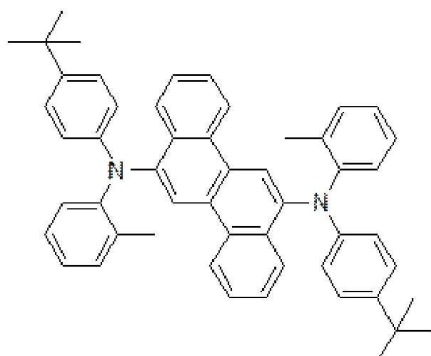
[0227]

[0228] 6,12-디브로모크라이센 (2.0 g, 5.18 mmol), (2,5-디메틸-페닐)-오르소-톨릴 아민 (2.40 g, 5.70 mmol), $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (0.24 g, 0.134 mmol) 및 소듐 터셔리부톡사이드(Sodium t-butoxide, 1.98 g, 10.4 mmol)을 질소조건에서 110 mL의 건조 톨루엔 용액에 녹여서 혼합물을 제조한다. 이 혼합물에 트리터셔리부틸포스핀(tri-tert-butylphosphine, 1.00 mL, 0.207mmol)을 첨가한다. 이 혼합물을 환류(reflux)하면서 12시간 교반한다. 반응 완료 후 에틸아세테이트와 증류수로 추출하고 무수 황산 마그네슘 처리하여 수분을 제거한다. 얻어진 결과물을 톨루엔 : 헥세인 = 1 : 4 부피비로 실리카겔 컬럼 정제한다. 테트라하이드로퓨란과 에탄올을 이용하여 재침전한다. (수율: 15%)

[0229] ^1H NMR (300MHz, THF-d_8 , δ): 8.21 (d, 2H), 8.09 (d, 2H), 7.93 (t, 2H), 7.45 (m, 2H), 7.38 (q, 2H), 7.23 (t, 3H), 7.12 (d, 3H), 7.08 (m, 4H), 6.90 (m, 3H), 6.65 (s, 1H), 2.27 (s, 3H), 2.10 (s, 3H), 2.01 (s, 3H)

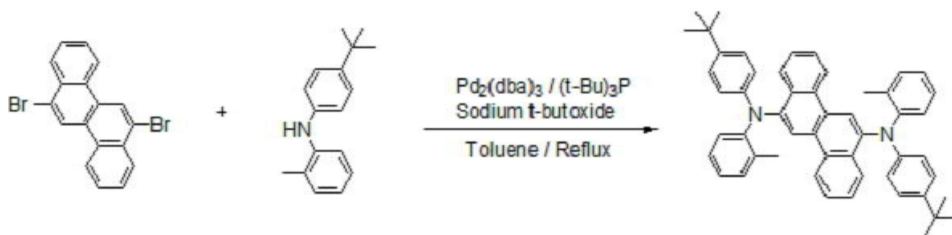
[0231] 합성예 9: 화학식 C-3으로 표현되는 화합물의 합성

[0232] [화학식 C-3]



[0233]

[0234] [반응식 C-3]



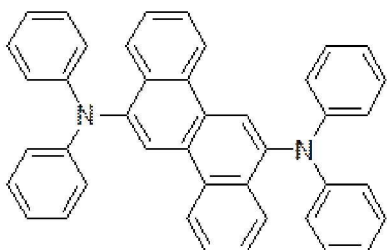
[0235]

[0236] 6,12-디브로모크라이센 (1.0 g, 2.60 mmol), (4-터셔리-부틸페닐)-오르소-톨릴 아민(1.37 g, 5.73 mmol), $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (0.19 g, 0.208 mmol) 및 소듐 터셔리부톡사이드(sodium t-butoxide, 1.5 g, 15.6 mmol)을 질소조건에서 90 mL의 건조 톨루엔 용액에 녹여서 혼합물을 제조한다. 이 혼합물에 트리터셔리부틸포스핀(tri-tert-butylphosphine, 0.37 mL)을 첨가한다. 이 혼합물을 환류(reflux)하면서 3시간 교반한다. 반응 완료 후 에틸아세테이트와 증류수로 추출하고 무수 황산 마그네슘 처리하여 수분을 제거한다. 얻어진 결과물을 톨루엔 : 헥세인 = 1 : 10 부피비로 실리카겔 컬럼 정제한다. 테트라하이드로퓨란과 에탄올을 이용하여 재침전한다. (수율: 39%)

[0237] ^1H NMR (300MHz, THF-d_8 , δ): 8.36 (t, 4H), 8.08 (d, 2H), 7.52 (t, 2H), 7.49 (t, 2H), 7.25 (m, 12H), 6.73(d, 4H), 2.09 (s, 6H), 1.27 (s, 18H)

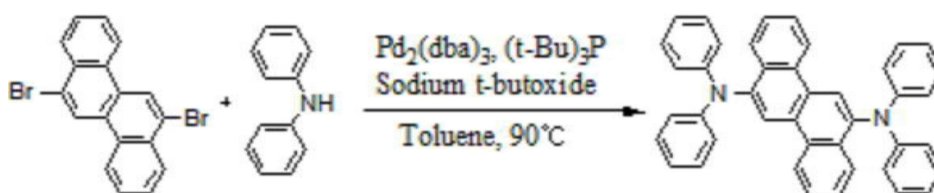
[0239] 비교합성예 7: 화학식 C로 표현되는 화합물의 합성

[0240] [화학식 C]



[0241]

[0242] [반응식 C]



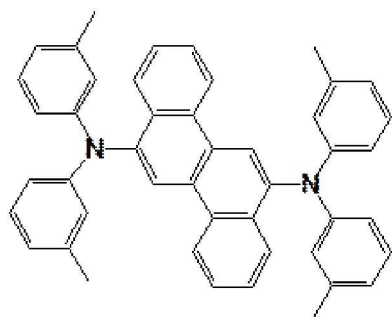
[0243]

[0244] 6,12-디브로모크라이센(0.5g, 1.3mmol), $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (0.18g, 0.19mmol) 및 소듐 터셔리부톡사이드(sodium tert-butoxide, 0.63g, 6.5mmol)을 질소조건에서 200ml의 건조 톨루엔 용액에 녹여서 혼합물을 제조한다. 디페닐아민(0.66g, 3.91mmol)과 트리터셔리부틸포스핀(tri-tert-butylphosphine) 용액(0.2ml)을 상기 혼합물에 첨가한다. 그런 다음 90 °C 조건에서 10시간 교반한다. 반응 완료 후 클로로포름과 물로 추출하고 무수 황산 마그네슘으로 처리한다. 얻어진 결과물을 클로로포름:헥산(1:3의 부피비) 조건으로 실리카겔 컬럼으로 정제한다. 클로로포름과 메탄올을 이용하여 재침전한다. (수율: 48%)

[0245] ^1H NMR (300MHz, THF-d_8 , δ): 8.76(s, 2H), 8.62(d, 2H), 8.12(d, 2H), 7.57(t, 2H), 7.45(t, 2H), 7.19(t, 8H), 7.14(d, 8H), 6.92(t, 4H)

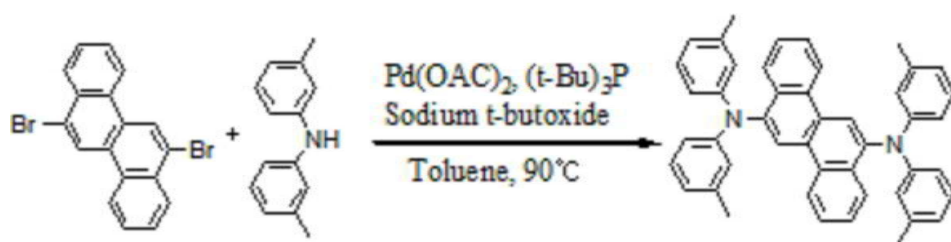
[0247] 비교합성예 8: 화학식 C-7로 표현되는 화합물의 합성

[0248] [화학식 C-7]



[0249]

[0250] [반응식 C-7]



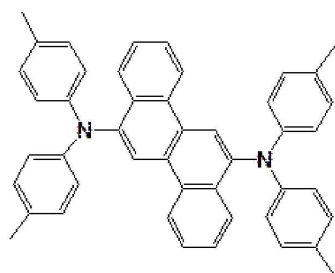
[0251]

[0252] 6,12-디브로모크라이센(5g, 1.30mmol), $\text{Pd}(\text{OAc})_2$ (0.035g, 0.16mmol) 및 소듐 터셔리부톡사이드(0.75g, 7.81mmol)을 질소조건에서 100ml의 건조 톨루엔 용액에 녹여서 혼합물을 제조한다. 디-메타-톨릴-아민(0.67g, 3.39mmol)과 트리터셔리부틸포스핀(tri-tert-butylphosphine) 용액(0.19ml, 0.16mmol)을 상기 혼합물에 첨가한다. 그런 다음 90 °C 조건에서 4시간 교반한다. 반응 완료 후 에틸아세테이트와 물로 추출하고 무수 황산 마그네슘으로 처리한다. 얻어진 결과물을 톨루엔:헥산(1:4의 부피비) 조건으로 실리카겔 컬럼으로 정제한다. 테트라하이드로퓨란과 메탄올을 이용하여 재침전한다. (수율: 60%)

[0253] ^1H NMR (300MHz, THF-d_8 , δ): 8.63(d, 4H), 8.14(d, 2H), 7.58(t, 2H), 7.47(t, 2H), 7.09(t, 4H), 6.97(s, 4H), 6.92(d, 4H), 6.76(d, 4H), 2.18(s, 12H)

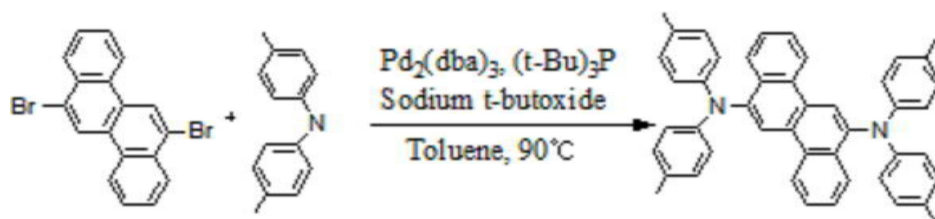
[0255] 비교합성예 9: 화학식 C-8로 표현되는 화합물의 합성

[0256] [화학식 C-8]



[0257]

[0258] [반응식 C-8]



[0259]

[0260] 6,12-디브로모크라이센(1.1g, 2.87mmol), $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (0.2g, 0.23mmol) 및 소듐터셔리부톡사이드(1.65g, 17mmol)

을 질소조건에서 100ml의 건조 톨루엔 용액에 녹여서 혼합물을 제조한다. 디-파라-톨릴-아민(1.3g, 6.59mmol)과 트리테르부틸포스핀(tri-tert-butylphosphine) 용액(0.4ml, 0.34mmol)을 상기 혼합물에 첨가한다. 그런 다음 90 °C 조건에서 4시간 교반한다. 반응 완료 후 에틸아세테이트와 물로 추출하고 무수 황산 마그네슘으로 처리한다. 얻어진 결과물을 톨루엔:헥산(1:10의 부피비) 조건으로 실리카겔 컬럼으로 정제한다. 테트라하이드로퓨란과 메탄올을 이용하여 재침전한다. (수율: 30%)

[0261] ^1H NMR (300MHz, THF-d₈, δ): 8.58(d, 4H), 8.11(d, 2H), 7.56(t, 2H), 7.44(t, 2H), 6.99(s, 16H), 2.25(s, 12H)

[0263] 평가 1: 흡광 특성 평가

[0264] 비교합성예 1 내지 9와 합성예 1 내지 9의 화합물을 테트라하이드로퓨란 용매를 사용하여 10^{-5} M 농도로 용해시킨 용액을 UV-Vis. 분광기(Lamda 1050 UV-Vis.-NIR spectrometer, PerkinElmer)를 사용하여 평가하였다. 그 결과를 도 2 내지 도 4에 도시한다.

[0265] 도 2는 비교합성예 1 내지 3과 합성예 1 내지 3의 화합물의 용액에서의 흡광 특성을 보여주는 그래프이고, 도 3은 비교합성예 4 내지 6과 합성예 4 내지 6의 화합물의 용액에서의 흡광 특성을 보여주는 그래프이고, 도 4는 비교합성예 7 내지 9과 합성예 7 내지 9의 화합물의 용액에서의 흡광 특성을 보여주는 그래프이다. 도 2 내지 도 4의 결과를 하기 표 1에 기재한다.

[0266] 도 2 내지 도 4 및 표 1을 참고하면, 비교합성예 1 내지 9과 합성예 1 내지 9의 화합물 모두 청색 영역에서 흡광 특성을 나타내는 것을 확인할 수 있다. 비교합성예 1 내지 9에 비하여 합성예 1 내지 9의 화합물의 흡수강도가 우수함을 알 수 있다.

[0267] 평가 2: 발광 특성 평가

[0268] 비교합성예 1 내지 9와 합성예 1 내지 9의 화합물을 테트라하이드로퓨란에 10^{-5} M의 농도로 용해시킨 용액의 발광 특성을 PL 분광기(PerkinElmer luminescence spectrometer LS50(Xenon flash tube))를 사용하여 평가하였다. 그 결과를 도 5 내지 도 7에 도시한다.

[0269] 도 5는 비교합성예 1 내지 3과 합성예 1 내지 3의 화합물의 용액에서의 PL 특성을 보여주는 그래프이고, 도 6은 비교합성예 4 내지 6과 합성예 4 내지 6의 화합물의 용액에서의 PL 특성을 보여주는 그래프이고, 도 7은 비교합성예 7 내지 9과 합성예 7 내지 9의 화합물의 용액에서의 PL 특성을 보여주는 그래프이다. 도 5 내지 도 7의 결과를 하기 표 1에 기재한다.

[0270] 도 5 내지 도 7 및 표 1을 참고하면, 비교합성예 1 내지 9와 합성예 1 내지 9의 화합물은 청색 영역의 빛을 내는 것을 확인할 수 있다. 비교합성예 1 내지 3은 비교합성예 1에 비하여 흡수강도가 개선되었고, 비교합성예 1 내지 3은 비교합성예 1에 비하여 흡수강도가 개선되었고 9에 비하여 합성예 1 내지 9의 화합물의 발광강도가 우수함을 알 수 있다.

표 1

	용액 UV _{max} (nm)	용액 PL _{max} (nm)	UV absorbance
합성예 1	470nm	518.5nm	0.1347
합성예 2	469nm	520nm	0.1365
합성예 3	470nm	523.5nm	0.1186
비교합성예 1	458nm	508nm	0.0954
비교합성예 2	465nm	518nm	0.0870
비교합성예 3	476nm	531nm	0.0924
합성예 4	426nm	452nm	0.4265
합성예 5	427nm	454nm	0.5009
합성예 6	432nm	464nm	0.3925
비교합성예 4	426nm	458nm	0.3278
비교합성예 5	430nm	462nm	0.3069
비교합성예 6	437nm	471nm	0.3579

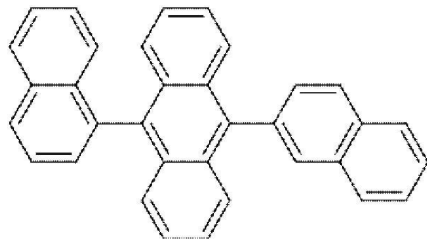
합성예 7	390nm	440nm	0.3101
합성예 8	392nm	443nm	0.2675
합성예 9	398nm	453nm	0.2682
비교합성예 7	397nm	447nm	0.2175
비교합성예 8	401nm	451nm	0.2153
비교합성예 9	408nm	459nm	0.2107

[0273] 유기 발광 소자의 제작

[0274] 비교예 1

[0275] 유리 기판 위에 ITO를 500nm 두께로 스퍼터링하고 그 위에 2-TNATA 60nm 및 NPB 15nm을 차례로 증착하여 정공보조층을 형성하였다. 이어서 상기 정공보조층 위에 하기 구조를 가지는 호스트 96 중량%와 비교합성예 1에서 얻은 화합물 4 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.

[0276] [호스트 구조]



[0279] 비교예 2 내지 9 및 실시예 1 내지 9

[0280] 비교합성예 1에 따른 화합물 대신 비교합성예 2 내지 9 및 합성예 1 내지 9에서 얻은 화합물을 각각 사용하여 발광층을 형성한 것을 제외하고 비교예 1과 동일한 방법으로 비교예 2 내지 9 및 실시예 1 내지 9에 따른 유기 발광소자를 제작하였다.

[0281] 평가 3: 소자 평가

[0282] 비교예 1 내지 9 및 실시예 1 내지 9에 따른 유기 발광 소자의 발광효율, 외부양자효율, 색좌표 및 발광 파장을 평가하였다. 이중 비교예 1, 4, 7 및 실시예 1 내지 9의 측정 결과를 표 2에 기재한다.

[0283] 표 2는 비교예 1, 4, 7 및 실시예 1 내지 9에 따른 유기 발광 소자의 (전류밀도: 10mA/cm²)의 발광효율, 외부양자효율, 색좌표 및 발광 파장을 보여준다.

표 2

	발광효율 (cd/A)	외부양자효율 (%)	색좌표 (x,y)	박막 EL _{max} (nm)
실시예 1	19.78	6.23	(0.290, 0.629)	522
실시예2	22.37	7.02	(0.278, 0.610)	523
실시예3	24.24	7.27	(0.304, 0.629)	524
비교예 1	17.71	6.11	(0.226, 0.605)	508
실시예 4	8.12	6.99	(0.137, 0.131)	458
실시예5	8.60	8.54	(0.135, 0.146)	461
실시예6	10.18	8.08	(0.127, 0.197)	468
비교예 4	8.04	6.91	(0.139, 0.198)	466
실시예 7	3.80	4.29	(0.148, 0.112)	456
실시예8	3.86	4.36	(0.146, 0.113)	457

실시예9	4.92	5.30	(0.142, 0.121)	459
비교예 7	3.31	3.72	(0.145, 0.116)	456

[0286] 상기 표 2를 참고하면, 실시예 1 내지 3에 따른 유기 발광 소자는 비교예 1에 따른 유기 발광 소자에 비하여 발광효율과 외부양자효율이 개선되었고, 실시예 4 내지 6에 따른 유기 발광 소자는 비교예 4에 따른 유기 발광 소자에 비하여 발광효율과 외부양자효율이 개선되었으며, 실시예 7 내지 9에 따른 유기 발광 소자는 비교예 7에 따른 유기 발광 소자에 비하여 발광효율과 외부양자효율이 개선되었다. 또한 색좌표 및 발광 파장으로부터 청색 영역에서 발광특성을 나타냄을 알 수 있다.

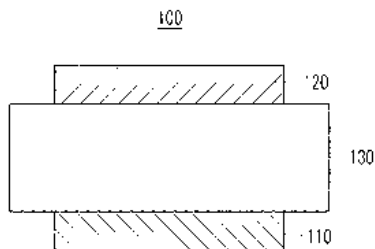
[0287] 본 발명은 상기 실시예들에 한정되는 것이 아니라 서로 다른 다양한 형태로 제조될 수 있으며, 본 발명이 속하는 기술분야에서 통상의 지식을 가진 자는 본 발명의 기술적 사상이나 필수적인 특징을 변경하지 않고서 다른 구체적인 형태로 실시될 수 있다는 것을 이해할 수 있을 것이다. 그러므로 이상에서 기술한 실시예들은 모든 면에서 예시적인 것이며 한정적이 아닌 것으로 이해해야만 한다.

부호의 설명

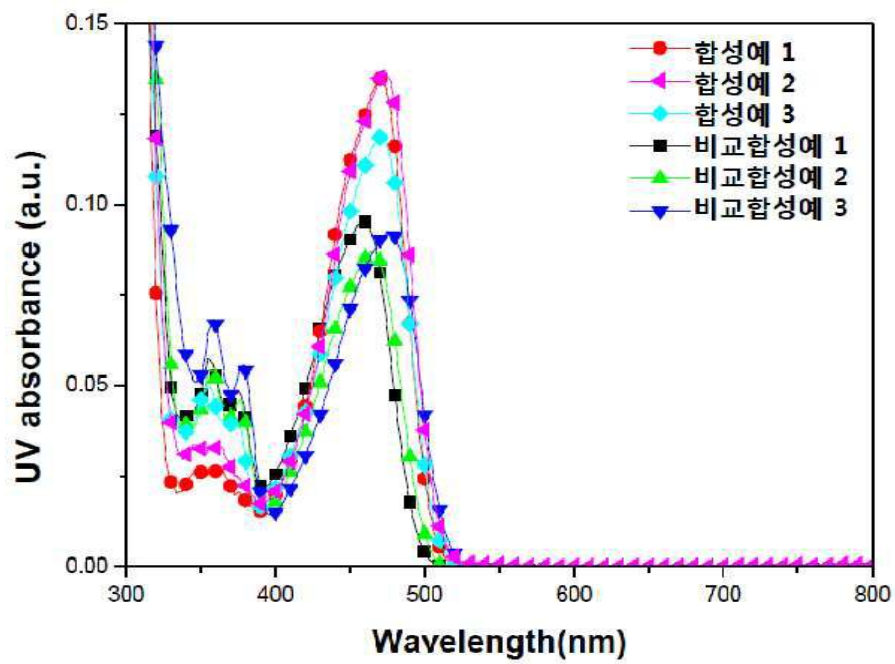
- [0288] 110: 제1 전극
120: 제2 전극
130: 유기층
100: 유기 발광 소자

도면

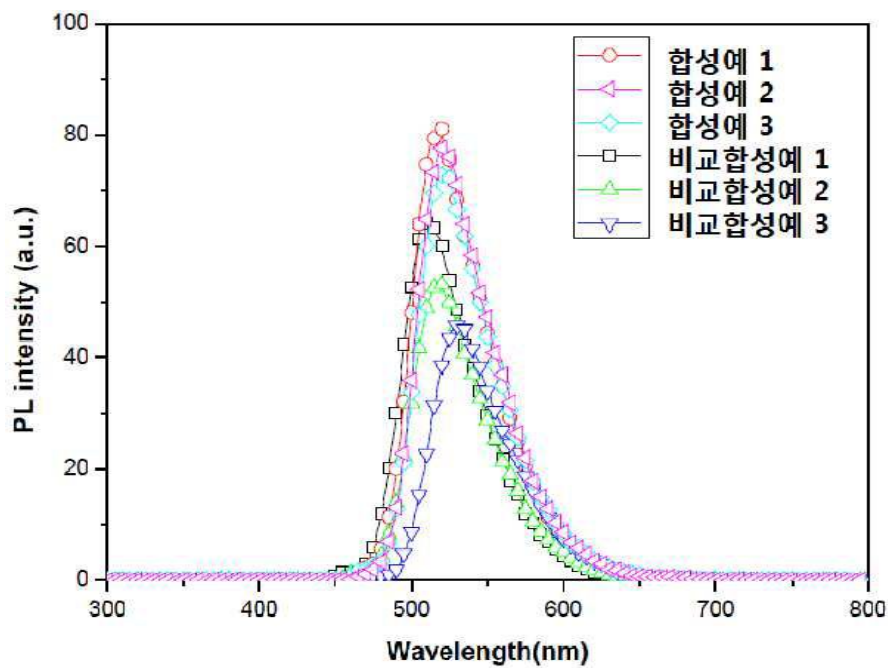
도면1



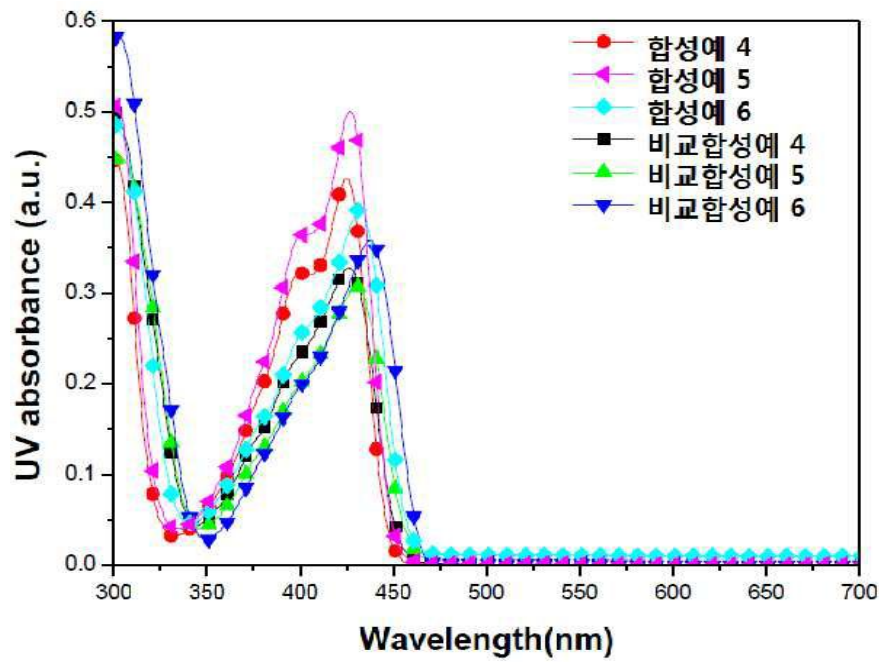
도면2



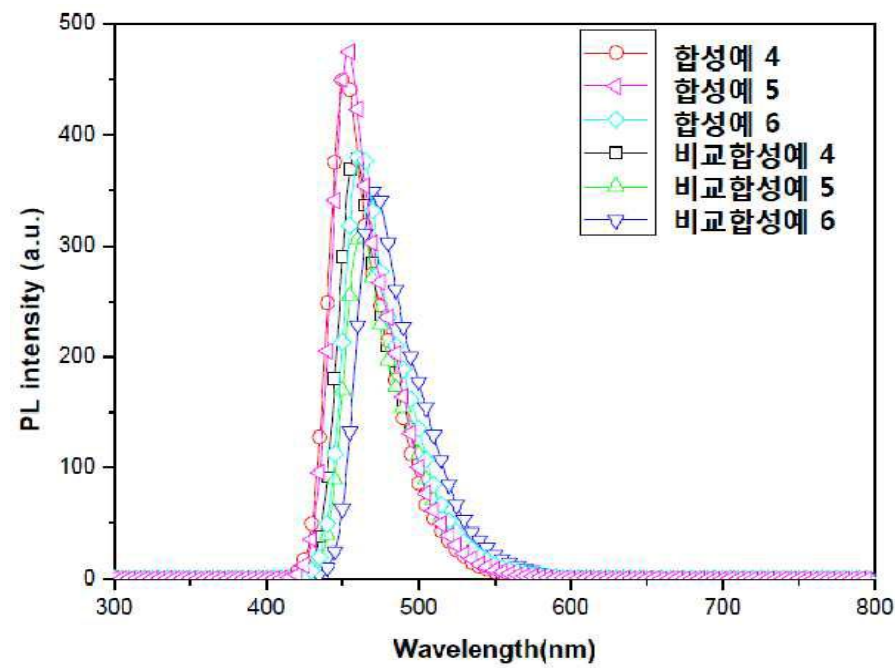
도면3



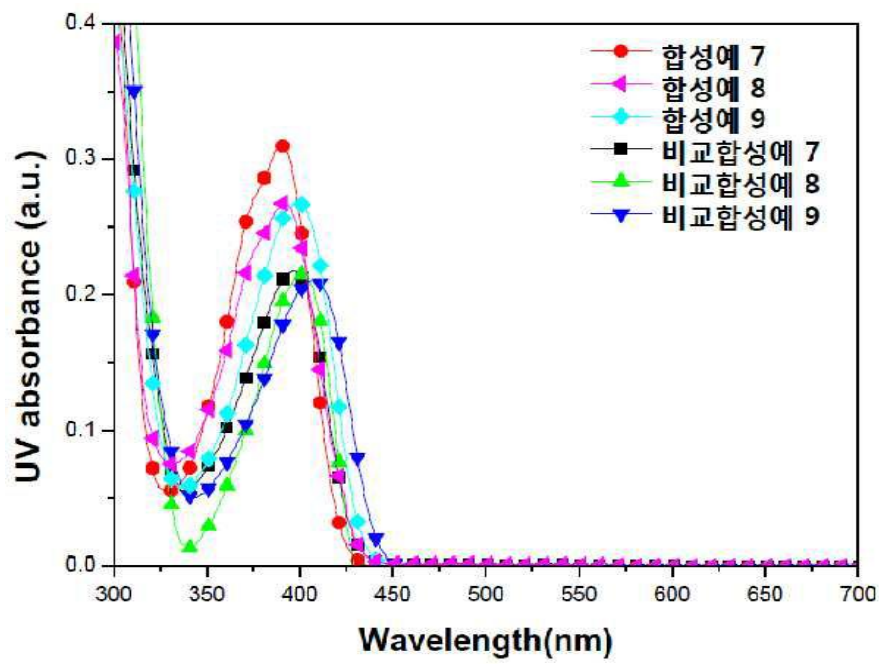
도면4



도면5



도면6



도면7

