



(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 등록특허공보(B1)

(45) 공고일자 2023년03월08일
(11) 등록번호 10-2508112
(24) 등록일자 2023년03월06일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)
C09K 11/06 (2006.01) H10K 50/00 (2023.01)
H10K 99/00 (2023.01)
(52) CPC특허분류
C09K 11/06 (2022.01)
H10K 50/11 (2023.02)
(21) 출원번호 10-2020-0142996
(22) 출원일자 2020년10월30일
심사청구일자 2020년10월30일
(65) 공개번호 10-2022-0057891
(43) 공개일자 2022년05월09일
(56) 선행기술조사문헌
비특허문헌1*
(뒷면에 계속)

(73) 특허권자
한남대학교 산학협력단
대전광역시 유성구 유성대로 1646 (전민동)
(72) 발명자
임춘우
대전광역시 유성구 엑스포로 448 엑스포아파트
308-1702
김서라
경기도 부천시 오정구 신흥로393번길 27 하이트뷰
아파트 602호
(74) 대리인
박노춘

전체 청구항 수 : 총 3 항

심사관 : 김수미

(54) 발명의 명칭 포스핀을 포함하는 녹색 인광 호스트 화합물 및 이를 이용한 유기전계발광소자

(57) 요약

본 발명은 녹색 인광 호스트 화합물, 녹색 인광 호스트용 조성물 및 이를 발광층에 포함하는 유기전계발광소자에 관한 것으로, 보다 상세하게는 단일 화합물 또는 복수 화합물을 발광층에 포함함으로써, 소자의 발광효율, 수명 및 색순도를 향상시키고 낮은 증착온도를 가져 열변성 특성이 우수하며 구동전압을 낮출 수 있는 녹색 인광 호스트 화합물 및 이를 발광층에 포함하는 유기전계발광소자에 관한 것이다.

대표도 - 도1

Compound	m/z	Compound	m/z
화합물 1	318.23	화합물 73	660.18
화합물 2	660.18	화합물 79	660.18
화합물 3	744.21	화합물 80	634.16
화합물 4	744.21	화합물 81	634.22
화합물 5	718.20	화합물 82	684.18
화합물 6	518.14	화합물 83	760.21
화합물 7	584.17	화합물 84	760.21
화합물 8	584.17	화합물 85	734.19
화합물 9	560.15	화합물 86	684.18
화합물 10	670.20	화합물 87	634.16
화합물 11	670.20	화합물 88	610.16
화합물 12	644.16	화합물 89	610.16
화합물 13	670.20	화합물 90	584.15
화합물 14	644.16	화합물 91	760.21
화합물 15	618.17	화합물 92	610.16
화합물 16	518.14	화합물 93	686.19
화합물 17	584.17	화합물 94	636.19
화합물 18	584.17	화합물 95	660.18
화합물 19	660.18	화합물 96	760.21
화합물 20	718.20	화합물 97	610.16
화합물 21	560.15	화합물 98	660.18
화합물 22	670.20	화합물 99	686.19
화합물 23	670.20	화합물 100	660.18
화합물 24	744.21	화합물 101	734.19
화합물 25	318.23	화합물 102	584.15
화합물 26	618.17	화합물 103	660.18
화합물 27	644.16	화합물 104	660.18
화합물 28	670.20	화합물 105	634.16
화합물 29	744.21	화합물 106	634.22
화합물 30	644.16	화합물 107	684.18
화합물 31	518.14	화합물 108	760.21
화합물 32	560.15	화합물 109	760.21
화합물 33	584.17	화합물 110	734.19
화합물 34	584.17	화합물 111	684.18
화합물 35	660.18	화합물 112	634.16
화합물 36	670.20	화합물 113	610.16
화합물 37	644.16	화합물 114	610.16
화합물 38	644.16	화합물 115	634.15
화합물 39	718.20	화합물 116	760.21

(52) CPC특허분류

H10K 85/649 (2023.02)

C09K 2211/1018 (2013.01)

(56) 선행기술조사문헌

비특허문헌2*

KR1020170049764 A*

Michael Widhalm 외, 'Rigid P-chiral mono and diphosphines. Configurative stability and P-inversion barrier', *Tetrahedron: Asymmetry*, 17, pp.1355-1369 (2006)*

RUN-FENG CHEN 외, 'Structural, Electronic, and Optical Properties of 9-Heterofluorenes: A Quantum Chemical Study', *Journal of Computational Chemistry*, Vol.28, pp.2091-2101 (2007)*

*는 심사관에 의하여 인용된 문헌

명세서

청구범위

청구항 1

삭제

청구항 2

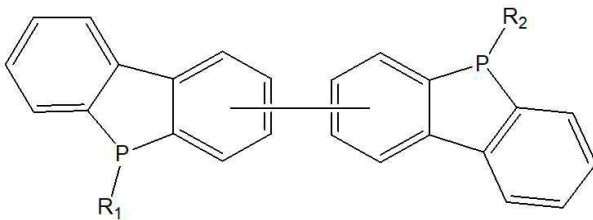
삭제

청구항 3

하기 화학식 1의 화합물; 및

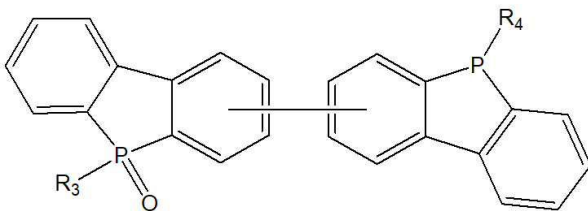
하기 화학식 2의 화합물을 포함하는 녹색 인광 호스트용 조성물.

[화학식 1]



(R₁ 및 R₂ 는 독립적으로 치환 또는 비치환된 C6~C50의 아릴, 또는 치환 또는 비치환된 핵원자수 3~50개의 헤테로아릴이다.)

[화학식 2]



(R₃ 및 R₄ 는 독립적으로 치환 또는 비치환된 C6~C50의 아릴, 또는 치환 또는 비치환된 핵원자수 3~50개의 헤테로아릴이다.)

청구항 4

제3항에 있어서,

상기 화학식 1의 화합물 및 화학식 2의 화합물의 중량비는 10~30:70~90 인 것을 특징으로 하는 녹색 인광 호스트용 조성물.

청구항 5

제3항의 녹색 인광 호스트용 조성물을 발광층에 포함하는 유기전계발광소자.

발명의 설명

기술 분야

[0001] 본 발명은 녹색 인광 호스트 화합물, 녹색 인광 호스트용 조성물 및 이를 발광층에 포함하는 유기전계발광소자에 관한 것으로, 보다 상세하게는 단일 화합물 또는 복수 화합물을 발광층에 포함함으로써, 소자의 발광효율, 수명 및 색순도를 향상시키고 낮은 증착온도를 가져 열변성 특성이 우수하며 구동전압을 낮출 수 있는 녹색 인광 호스트 화합물 및 이를 발광층에 포함하는 유기전계발광소자에 관한 것이다.

배경 기술

[0003] 평판 표시소자는 최근 들어 급성장세를 보이고 있는 인터넷을 중심으로 고도의 영상 정보화 사회를 지탱하는 매우 중요한 역할을 수행하고 있다. 특히, 자체 발광형으로 저전압 구동이 가능한 유기발광다이오드(OLED)는 평판 표시소자의 주류인 액정디스플레이(liquid crystal display, LCD)에 비해 시야각, 대조비 등이 우수하고, 백라이트가 불필요하여 경량 및 박형이 가능하며, 소비전력 측면에서도 유리한 장점을 가진다. 또한 응답속도가 빠르며, 색 재현 범위가 넓어 차세대 표시소자로서 주목을 받고 있다.

[0004] 일반적으로, 유기발광다이오드는 투명전극으로 이루어진 양극(anode), 발광영역을 포함하는 유기박막 및 금속전극(cathode)의 순으로 유리기판 위에 형성된다. 이때, 유기박막은 발광층(emitting layer, EML), 정공 주입층(hole injection layer, HIL), 정공 수송층(hole transport layer, HTL), 전자 수송층(electron transport layer, ETL) 및 전자 주입층(electron injection layer, EIL)을 포함할 수 있으며, 발광층의 발광특성상 전자 차단층(electron blocking layer, EBL) 또는 정공차단층(hole blocking layer, HBL)을 추가로 포함할 수 있다.

[0005] 이러한 구조의 유기발광다이오드에 전기장이 가해지면 양극으로부터 정공이 주입되고 음극으로부터 전자가 주입되며, 주입된 정공과 전자는 각각 정공 수송층과 전자 수송층을 거쳐 발광층에서 재조합하여 발광여기자(를 형성한다. 형성된 발광여기자는 바닥상태로 전이하면서 빛을 방출하는데, 이때 발광 상태의 효율과 안정성을 증가시키기 위해 발광 색소(게스트)를 발광층(호스트)에 도핑하기도 한다.

[0006] 유기발광다이오드의 주요 이슈는 발광효율, 수명 및 안정성인데, 이러한 특성을 개선하기 위하여 다양한 유도체가 개발되어 발광물질로 사용되고 있다.

[0007] 그러나 기존의 화합물은 발광효율, 수명, 색순도 및 안정성이 낮아 유기발광다이오드, 유기전계발광소자 등에 장기간 안정적으로 사용될 수 없다.

[0008] 따라서 소자의 발광효율, 수명, 색순도 및 안정성을 향상시키고 구동전압을 낮출 수 있는 녹색 인광 호스트 화합물 및 조성물에 대한 기술개발이 필요하다.

선행기술문헌

특허문헌

[0010] (특허문헌 0001) 한국공개특허 제10-2011-0046839호(2011년 05월 06일)

발명의 내용

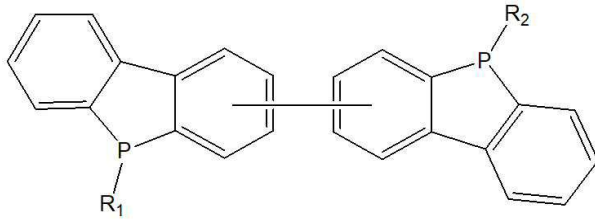
해결하려는 과제

[0011] 본 발명은 상기 문제점을 해결하기 위하여 안출된 것으로서, 단일 화합물 또는 복수 화합물을 발광층에 포함함으로써, 소자의 발광효율, 수명 및 색순도를 향상시키고 낮은 증착온도를 가져 열변성 특성이 우수하며 구동전압을 낮출 수 있는 녹색 인광 호스트 화합물 및 이를 발광층에 포함하는 유기전계발광소자를 제공하는 것을 목적으로 한다.

과제의 해결 수단

[0013] 본 발명은 하기 화학식 1, 화학식 2 또는 화학식 3의 구조를 갖는 녹색 인광 호스트 화합물을 제공한다.

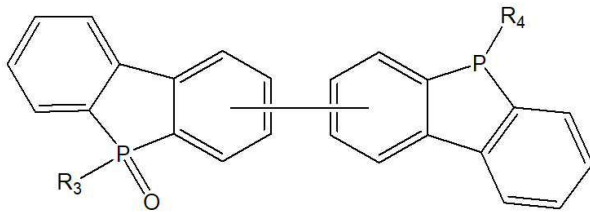
[0014] [화학식 1]



[0015]

[0016] (R_1 및 R_2 는 독립적으로 치환 또는 비치환된 C6~C50의 아릴, 또는 치환 또는 비치환된 핵원자수 3~50개의 헤테로아릴이다.)

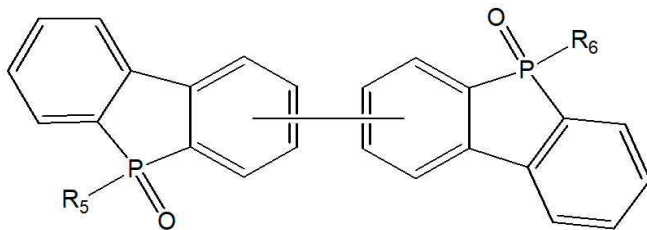
[0017] [화학식 2]



[0018]

[0019] (R_3 및 R_4 는 독립적으로 치환 또는 비치환된 C6~C50의 아릴, 또는 치환 또는 비치환된 핵원자수 3~50개의 헤테로아릴이다.)

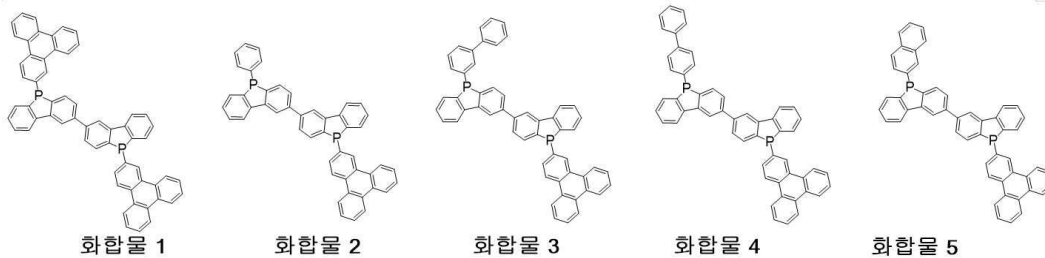
[0020] [화학식 3]



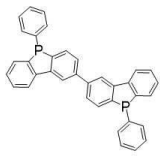
[0021]

[0022] (R_5 및 R_6 는 독립적으로 치환 또는 비치환된 C6~C50의 아릴, 또는 치환 또는 비치환된 핵원자수 3~50개의 헤테로아릴이다.)

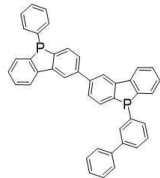
[0023] 본 발명의 일실시예에 있어서, 상기 화학식 1의 화합물은 하기 화합물 1 내지 55 중 어느 하나로 표시되는 것을 특징으로 한다.



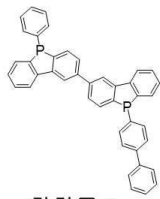
[0025]



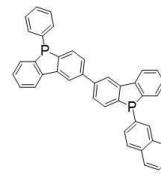
화합물 6



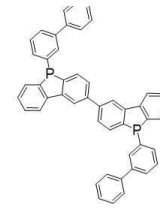
화합물 7



화합물 8

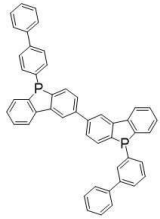


화합물 9

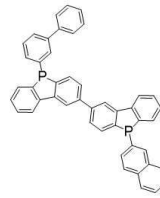


화합물 10

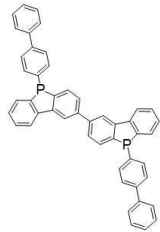
[0026]



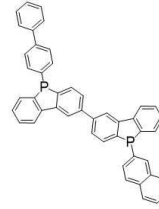
화합물 11



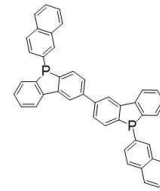
화합물 12



화합물 13

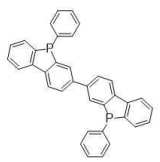


화합물 14

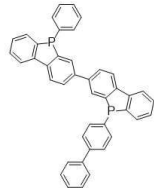


화합물 15

[0027]



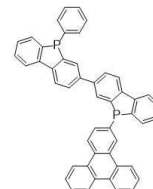
화합물 16



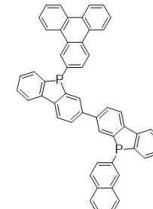
화합물 17



화합물 18

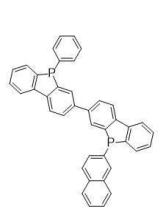


화합물 19

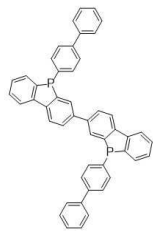


화합물 20

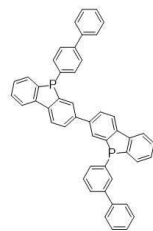
[0028]



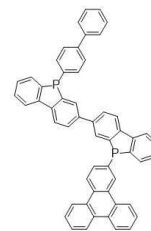
화합물 21



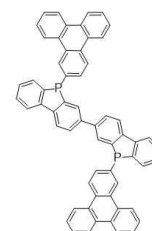
화합물 22



화합물 23

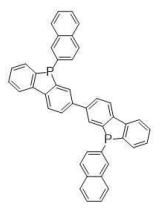


화합물 24

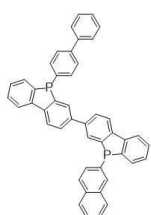


화합물 25

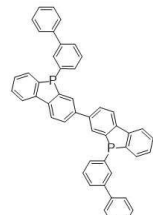
[0029]



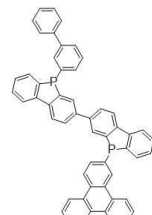
화합물 26



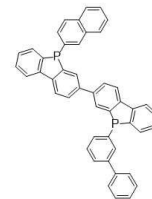
화합물 27



화합물 28

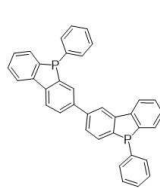


화합물 29

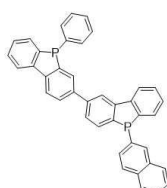


화합물 30

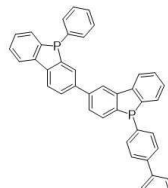
[0030]



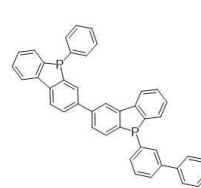
화합물 31



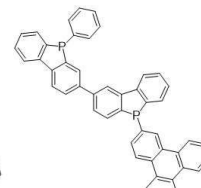
화합물 32



화합물 33

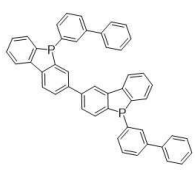


화합물 34

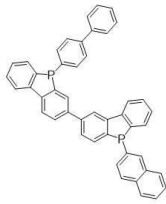


화합물 35

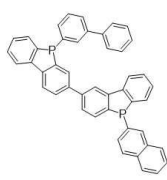
[0031]



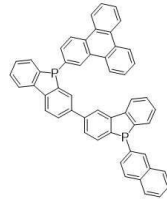
화합물 36



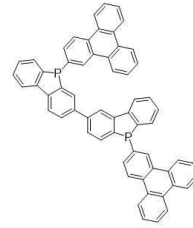
화합물 37



화합물 38

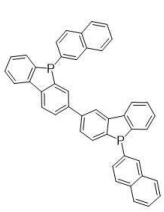


화합물 39

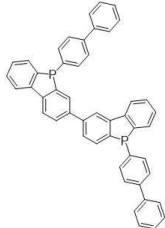


화합물 40

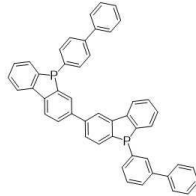
[0032]



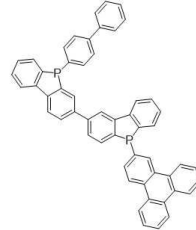
화합물 41



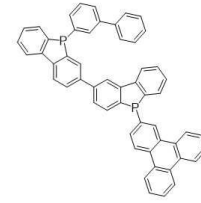
화합물 42



화합물 43

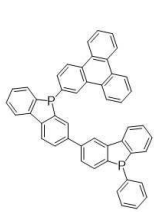


화합물 44

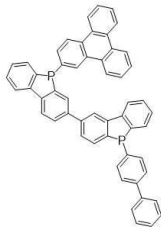


화합물 45

[0033]



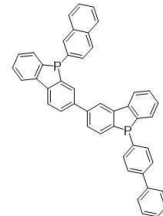
화합물 46



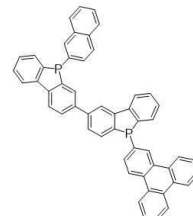
화합물 47



화합물 48

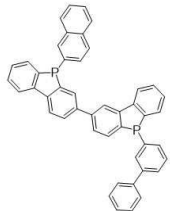


화합물 49

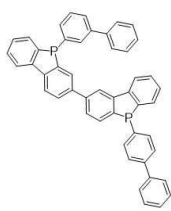


화합물 50

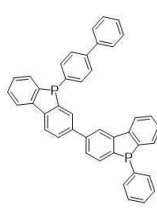
[0034]



화합물 51



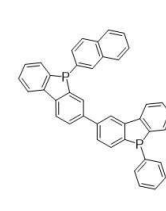
화합물 52



화합물 53



화합물 54

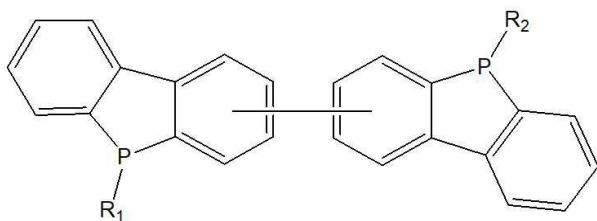


화합물 55

[0035]

[0037] 또한 본 발명은 하기 화학식 1의 화합물; 및 하기 화학식 2의 화합물을 포함하는 녹색 인광 호스트용 조성물을 제공한다.

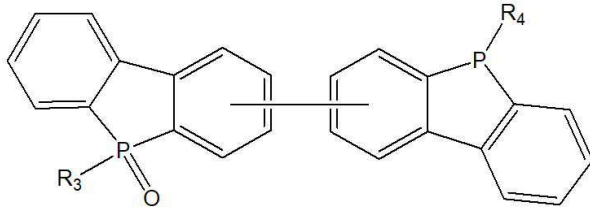
[0038] [화학식 1]



[0039]

[0040] (R_1 및 R_2 는 독립적으로 치환 또는 비치환된 C6~C50의 아릴, 또는 치환 또는 비치환된 핵원자수 3~50개의 헤테로아릴이다.)

[0041] [화학식 2]



[0042]

[0043] (R_3 및 R_4 는 독립적으로 치환 또는 비치환된 C6~C50의 아릴, 또는 치환 또는 비치환된 핵원자수 3~50개의 헤테로아릴이다.)

[0044] 본 발명의 일실시예에 있어서, 상기 화학식 1의 화합물 및 화학식 2의 화합물의 중량비는 10~30:70~90인 것을 특징으로 한다.

[0045] 또한 본 발명은 상기 녹색 인광 호스트 화합물 또는 녹색 인광 호스트용 조성물을 발광층에 포함하는 유기전계 발광소자를 제공한다.

[0046]

발명의 효과

[0047] 본 발명은 소자의 발광효율, 수명 및 색순도를 향상시키고 낮은 증착온도를 가져 열변성 특성이 우수하며 구동 전압을 낮출 수 있는 녹색 인광 호스트 화합물을 제공하는 것을 목적으로 한다.

[0048] 본 발명의 녹색 인광 호스트 화합물은 유기발광다이오드, 유기전계발광소자 등의 발광층에 적용되어 소자의 발광효율, 수명, 색순도, 안정성 등을 향상시킬 수 있다.

도면의 간단한 설명

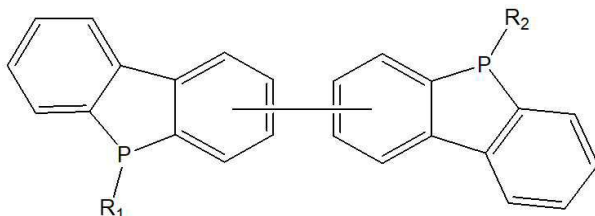
[0050] 도 1 및 2는 녹색 인광 호스트 화합물 1 내지 155의 Mass 스펙트럼의 피크 위치를 나타낸다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

[0051] 본 발명은 다양한 변경을 가할 수 있고 여러 가지 실시예를 가질 수 있는바, 특정 실시예들을 예시하고 상세한 설명에 이를 설명하고자 한다. 그러나 이는 본 발명을 특정한 실시 형태에 대해 한정하려는 것이 아니며, 본 발명의 사상 및 기술범위에 포함되는 모든 변경, 균등물 내지 대체물을 포함하는 것으로 이해되어야 한다. 본 발명을 설명함에 있어서 관련된 공지 기술에 대한 구체적인 설명은 본 발명의 요지를 흐릴 수 있다고 판단되는 경우 그 상세한 설명을 생략한다.

[0053] 본 발명은 하기 화학식 1, 화학식 2 또는 화학식 3의 구조를 갖는 녹색 인광 호스트 화합물에 관한 것이다.

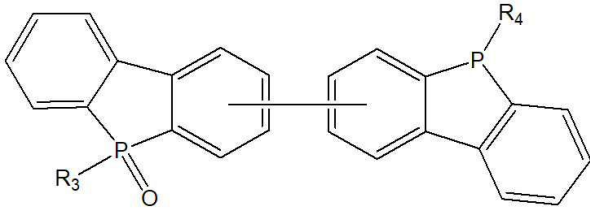
[0054] [화학식 1]



[0055]

[0056] (R_1 및 R_2 는 독립적으로 치환 또는 비치환된 C6~C50의 아릴, 또는 치환 또는 비치환된 핵원자수 3~50개의 헤테로아릴이다.)

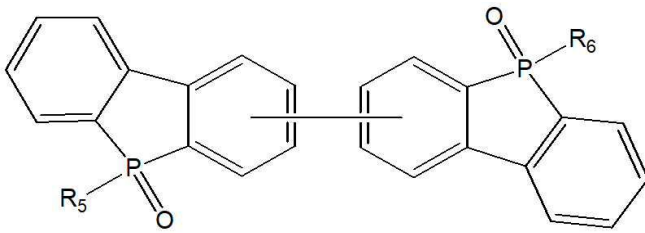
[0057] [화학식 2]



[0058]

[0059] (R_3 및 R_4 는 독립적으로 치환 또는 비치환된 C6~C50의 아릴, 또는 치환 또는 비치환된 핵원자수 3~50개의 헤테로아릴이다.)

[0060] [화학식 3]



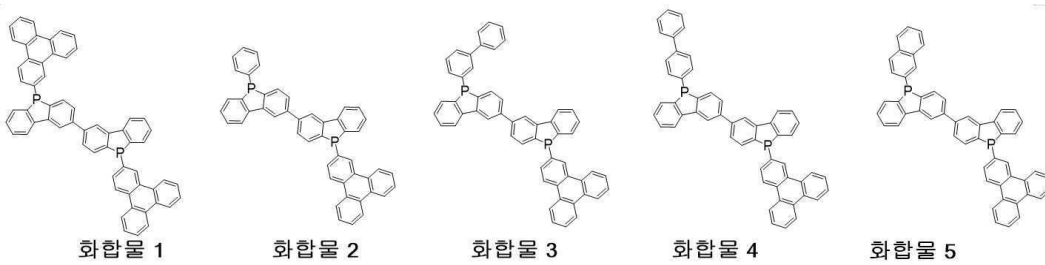
[0061]

[0062] (R_5 및 R_6 는 독립적으로 치환 또는 비치환된 C6~C50의 아릴, 또는 치환 또는 비치환된 핵원자수 3~50개의 헤테로아릴이다.)

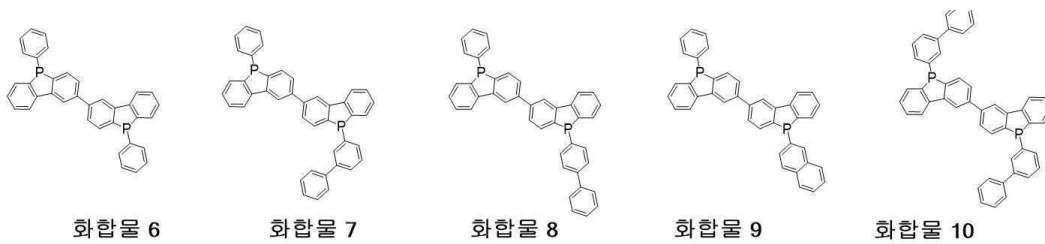
[0063] 상기 아릴 및 헤테로아릴은 중수소, 할로젠, 시아노기, 니트로기, 수산화기, 아미노기, C1~C50의 알킬기, C2~C50의 알케닐기, C2~C50의 알킬닐기, C6~C50의 아릴기, 핵원자수 3~50개의 헤테로아릴기 및 C1~C50의 알킬옥시기로 이루어진 군에서 선택되는 하나 이상의 치환기로 치환될 수 있으며, 복수개의 치환기로 치환되는 경우 이들은 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

[0064] 상기 녹색 인광 호스트 화합물은 유기발광다이오드, 유기전계발광소자 등의 발광층에 적용되어 소자의 발광효율, 수명, 색순도, 안정성 등을 향상시키고, 구동전압을 낮출 수 있다.

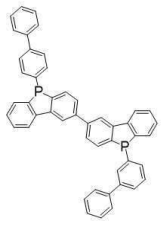
[0065] 상기 화학식 1의 화합물은 하기 화합물 1 내지 55 중 어느 하나로 표시될 수 있다.



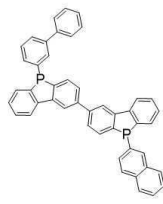
[0067]



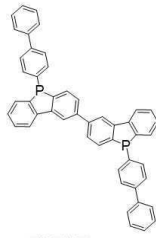
[0068]



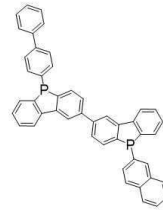
화합물 11



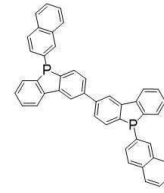
화합물 12



화합물 13

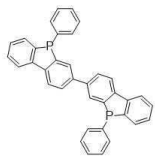


화합물 14

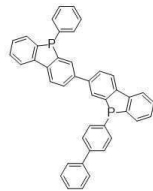


화합물 15

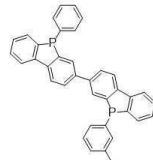
[0069]



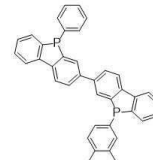
화합물 16



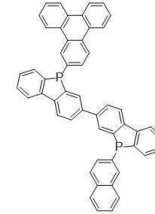
화합물 17



화합물 18

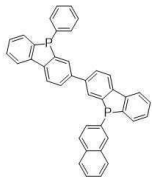


화합물 19

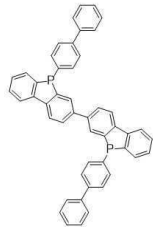


화합물 20

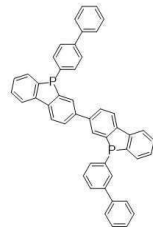
[0070]



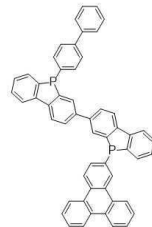
화합물 21



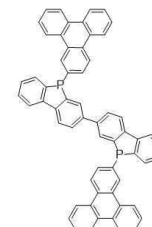
화합물 22



화합물 23

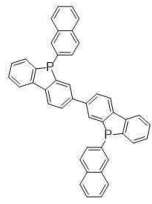


화합물 24

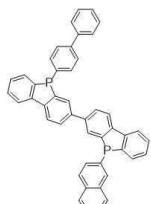


화합물 25

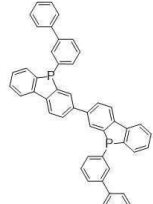
[0071]



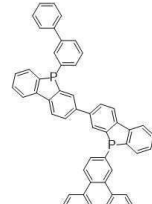
화합물 26



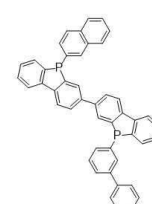
화합물 27



화합물 28

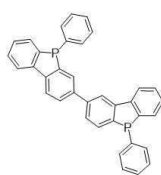


화합물 29

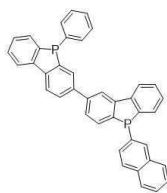


화합물 30

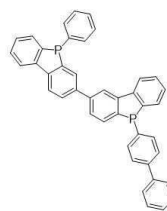
[0072]



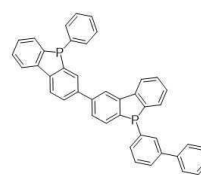
화합물 31



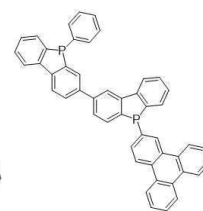
화합물 32



화합물 33

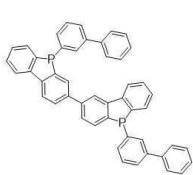


화합물 34

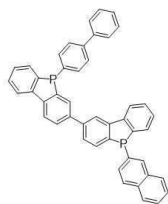


화합물 35

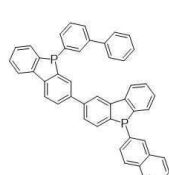
[0073]



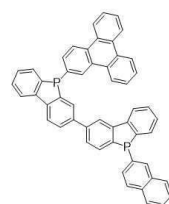
화합물 36



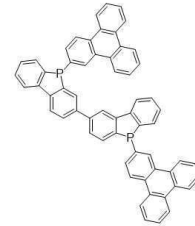
화합물 37



화합물 38

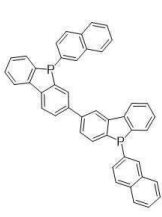


화합물 39

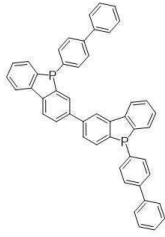


화합물 40

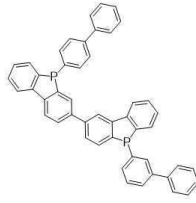
[0074]



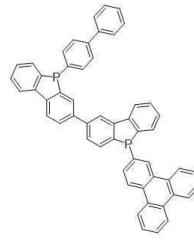
화합물 41



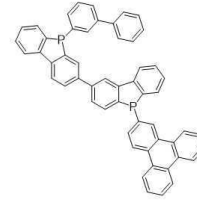
화합물 42



화합물 43

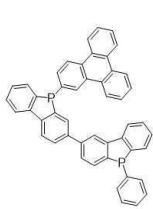


화합물 44

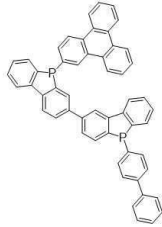


화합물 45

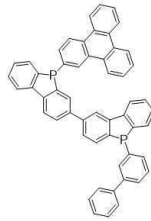
[0075]



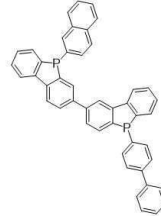
화합물 46



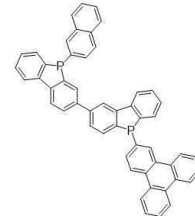
화합물 47



화합물 48

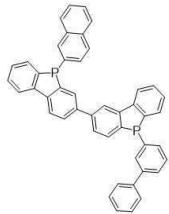


화합물 49

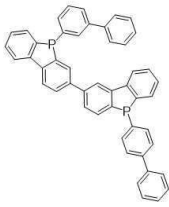


화합물 50

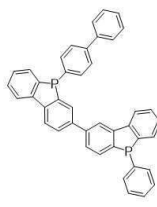
[0076]



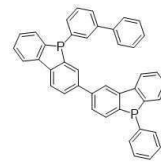
화합물 51



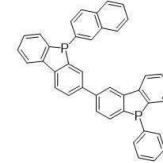
화합물 52



화합물 53



화합물 54

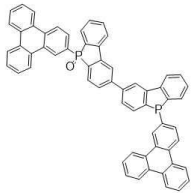


화합물 55

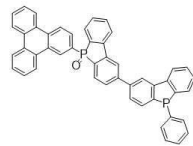
[0077]

[0079]

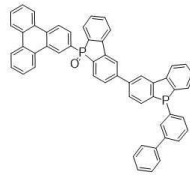
또한 상기 화학식 2의 화합물은 하기 화합물 56 내지 155 중 어느 하나로 표시될 수 있다.



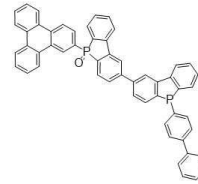
화합물 56



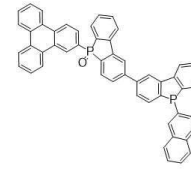
화합물 57



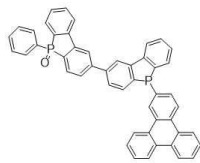
화합물 58



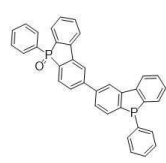
화합물 59



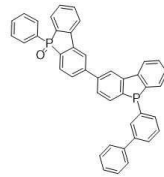
화합물 60



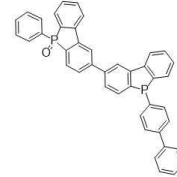
화합물 61



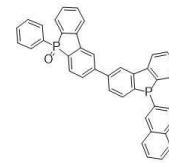
화합물 62



화합물 63

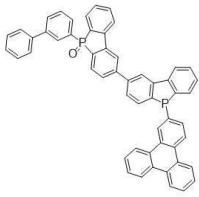


화합물 64

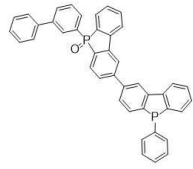


화합물 65

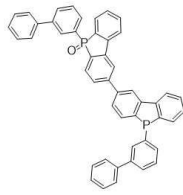
[0081]



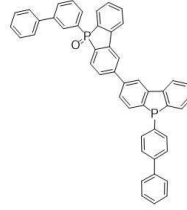
화합물 66



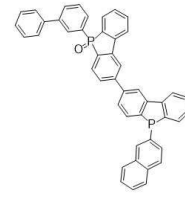
화합물 67



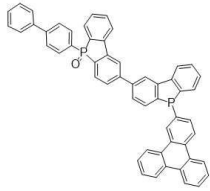
화합물 68



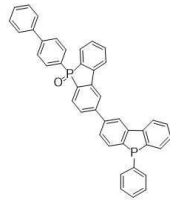
화합물 69



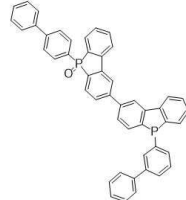
화합물 70



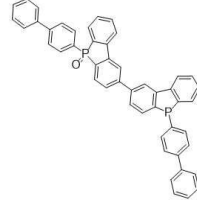
화합물 71



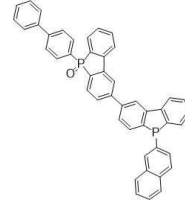
화합물 72



화합물 73

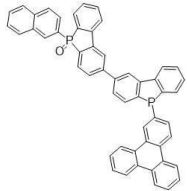


화합물 74

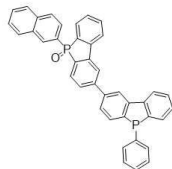


화합물 75

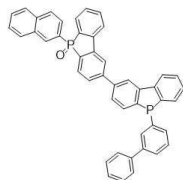
[0082]



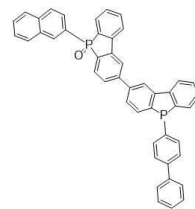
화합물 76



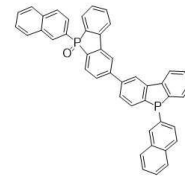
화합물 77



화합물 78

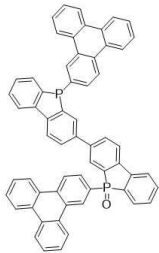


화합물 79

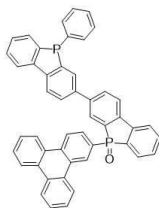


화합물 80

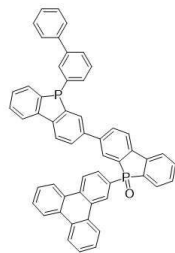
[0083]



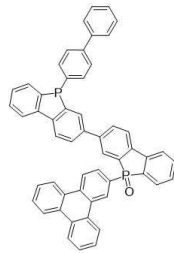
화합물 81



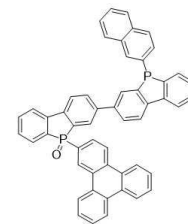
화합물 82



화합물 83

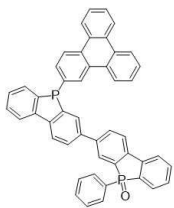


화합물 84

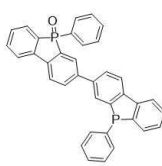


화합물 85

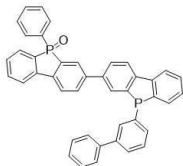
[0084]



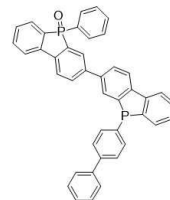
화합물 86



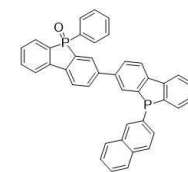
화합물 87



화합물 88

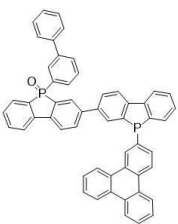


화합물 89

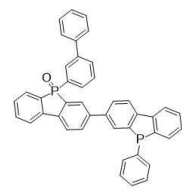


화합물 90

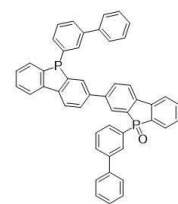
[0085]



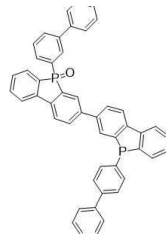
화합물 91



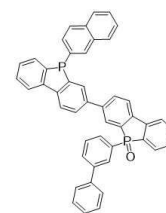
화합물 92



화합물 93

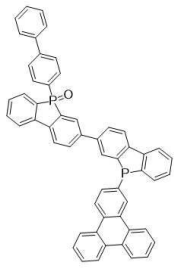


화합물 94

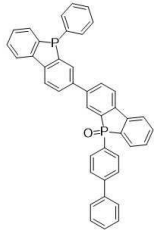


화합물 95

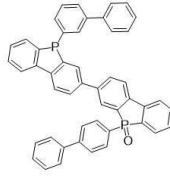
[0086]



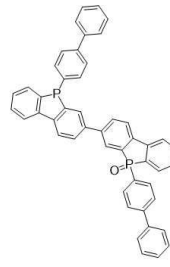
화합물 96



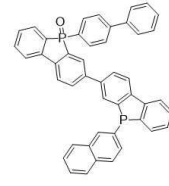
화합물 97



화합물 98

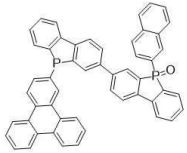


화합물 99

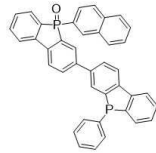


화합물 100

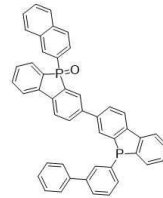
[0087]



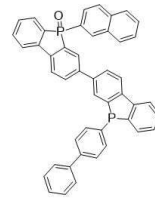
화합물 101



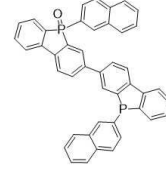
화합물 102



화합물 103

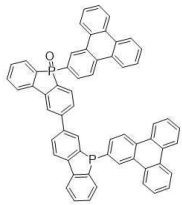


화합물 104

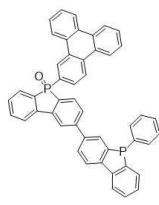


화합물 105

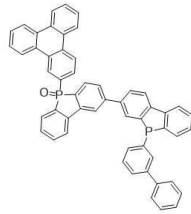
[0088]



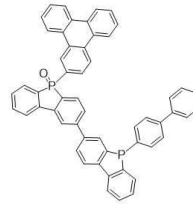
화합물 106



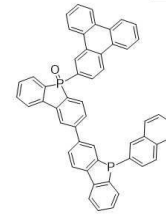
화합물 107



화합물 108

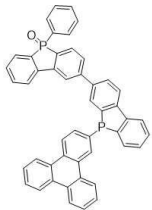


화합물 109

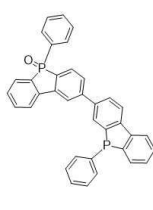


화합물 110

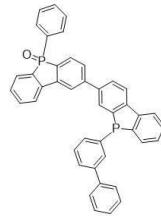
[0089]



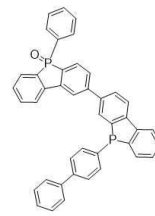
화합물 111



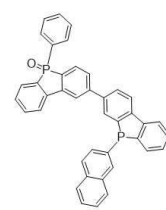
화합물 112



화합물 113

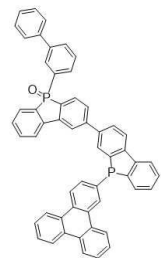


화합물 114

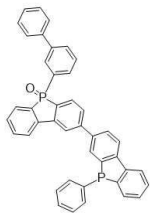


화합물 115

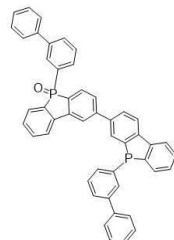
[0090]



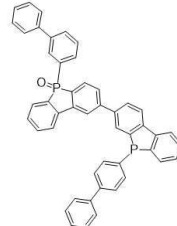
화합물 116



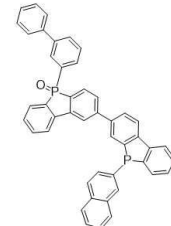
화합물 117



화합물 118

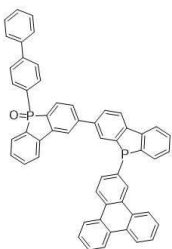


화합물 119

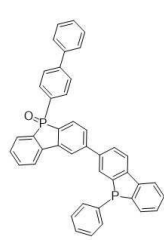


화합물 120

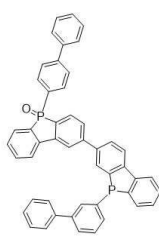
[0091]



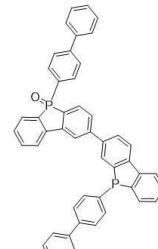
화합물 121



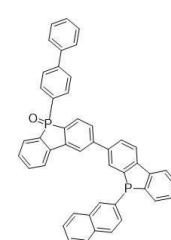
화합물 122



화합물 123

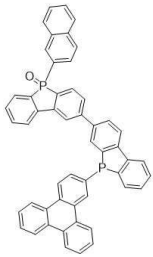


화합물 124

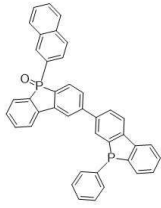


화합물 125

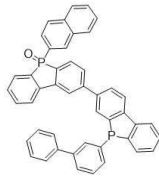
[0092]



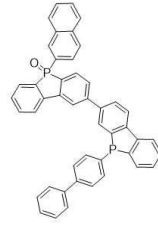
화합물 126



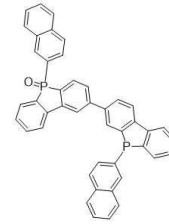
화합물 127



화합물 128

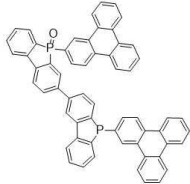


화합물 129

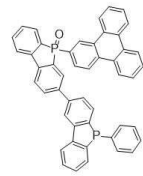


화합물 130

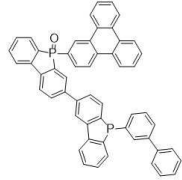
[0093]



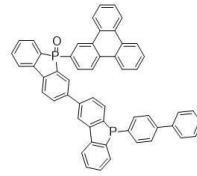
화합물 131



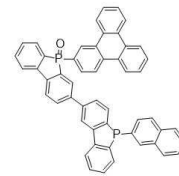
화합물 132



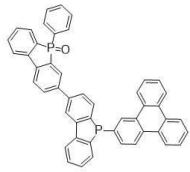
화합물 133



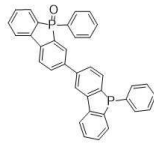
화합물 134



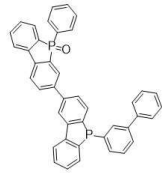
화합물 135



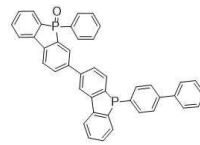
화합물 136



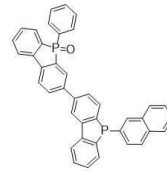
화합물 137



화합물 138

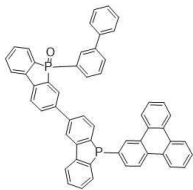


화합물 139

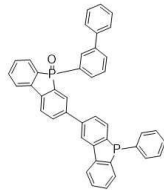


화합물 140

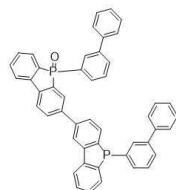
[0094]



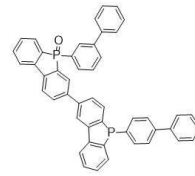
화합물 141



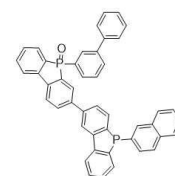
화합물 142



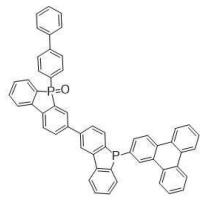
화합물 143



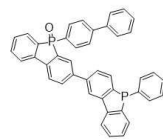
화합물 144



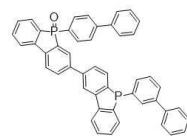
화합물 145



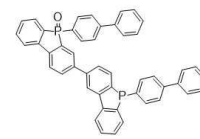
화합물 146



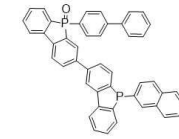
화합물 147



화합물 148

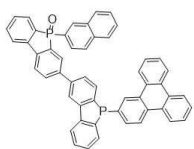


화합물 149

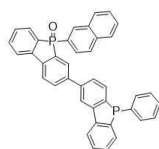


화합물 150

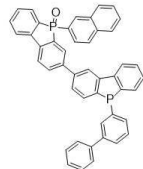
[0095]



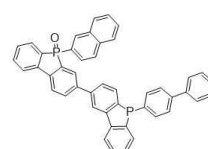
화합물 151



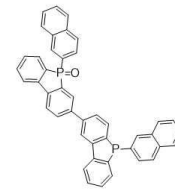
화합물 152



화합물 153



화합물 154



화합물 155

[0096]

[0097]

[0098]

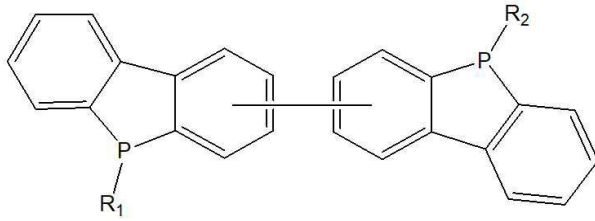
상기 녹색 인광 호스트 화합물 1 내지 155의 Mass 스펙트럼의 피크 위치는 도 1 및 2에 제시된다.

[0100]

또한 본 발명은 하기 화학식 1의 화합물; 및 하기 화학식 2의 화합물을 포함하는 녹색 인광 호스트용 조성물에

관한 것이다.

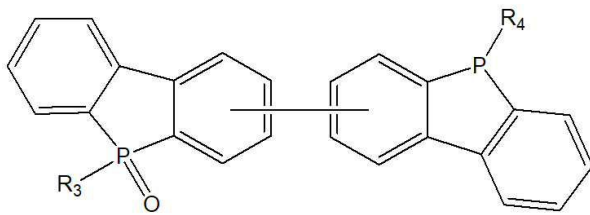
[0101] [화학식 1]



[0102]

[0103] (R_1 및 R_2 는 독립적으로 치환 또는 비치환된 C6~C50의 아릴, 또는 치환 또는 비치환된 핵원자수 3~50개의 헤테로아릴이다.)

[0104] [화학식 2]



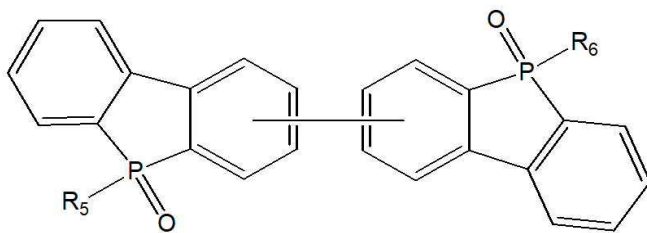
[0105]

[0106] (R_3 및 R_4 는 독립적으로 치환 또는 비치환된 C6~C50의 아릴, 또는 치환 또는 비치환된 핵원자수 3~50개의 헤테로아릴이다.)

[0107] 상기 화학식 1의 화합물 및 화학식 2의 화합물의 중량비는 10~30:70~90 인 것이 바람직하며, 상기 수치 범위를 만족하는 경우 소자의 발광효율, 수명, 색순도 및 안정성을 극대화할 수 있다.

[0109] 또한 본 발명의 조성물은 하기 화학식 3의 화합물을 추가로 포함할 수 있다.

[0110] [화학식 3]



[0111]

[0112] (R_5 및 R_6 는 독립적으로 치환 또는 비치환된 C6~C50의 아릴, 또는 치환 또는 비치환된 핵원자수 3~50개의 헤테로아릴이다.)

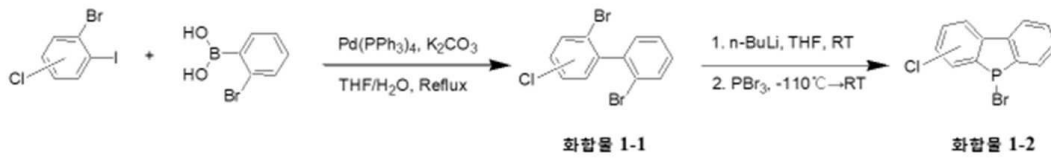
[0113] 상기 화학식 1의 화합물, 화학식 2의 화합물 및 화학식 3의 화합물의 중량비는 20~40:100:5~15 인 것이 바람직하며, 상기 수치범위를 만족하는 경우 소자의 발광효율, 수명 및 안정성을 극대화할 수 있다.

[0115] 또한 본 발명은 상기 녹색 인광 호스트 화합물 또는 녹색 인광 호스트용 조성물을 발광층에 포함하는 유기전계 발광소자에 관한 것이다.

[0116] 본 발명의 녹색 인광 호스트 화합물 및 조성물은 유기발광다이오드, 유기전계발광소자 등의 발광층에 적용되어 소자의 발광효율, 수명, 색순도, 안정성 등을 향상시킬 수 있다.

[0118] 이하 실시예 및 비교예를 통해 본 발명을 상세히 설명한다. 하기 실시예는 본 발명의 실시를 위하여 예시된 것일 뿐, 본 발명의 내용이 하기 실시예에 의하여 한정되는 것은 아니다.

[0120] (화합물 1-1의 합성)



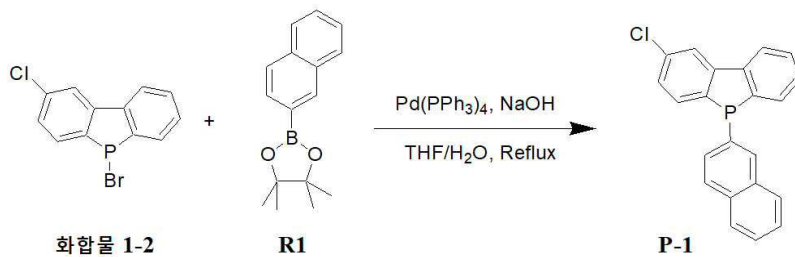
[0121]

[0122] 플라스크에 1-Bromo-4-chloro-2-iodobenzene(10g, 31.5mmol, 1eq), 2-Bromophenylboronic acid (6.3g, 31.5mmol, 1eq), Pd(PPh₃)₄(1.09g, 0.95mmol, 0.03eq), K₂CO₃(13g, 94.5mmol, 3eq) 및 THF/H₂O(3:1)를 넣고 4시간 환류 교반하였다. 반응이 종료된 후 유기층을 추출하여 magnesium sulfate로 수분을 제거한 뒤, 용액을 감압 농축하였다. 재결정을 통해 화합물 1-1을 수득하였다(9.04g, 83%).

[0124] (화합물 1-2의 합성)

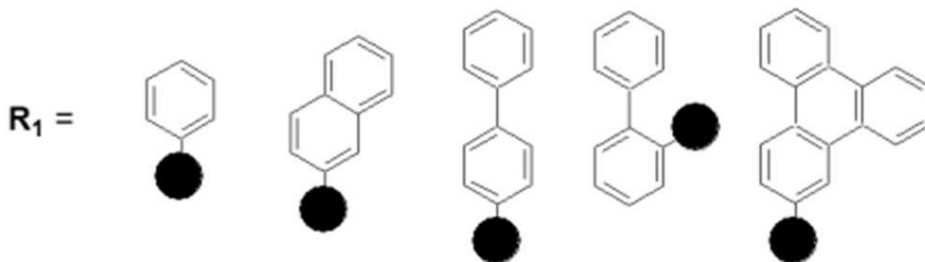
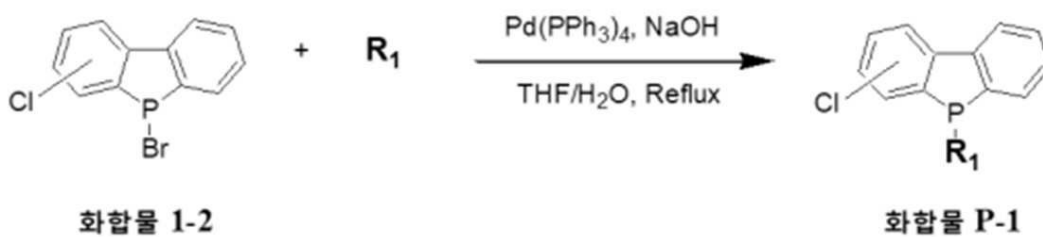
[0125] 플라스크에 2,2'-Dibromo-5-chlorobiphenyl(5g, 14.4mmol, 1eq) 및 THF(40ml)를 넣은 뒤, 0°C에서 n-butyl lithium(1.6M in hexane, 18ml, 28.8mmol, 2eq)을 적가하고 1시간 동안 상온에서 교반하였다. 액체 질소하에 PBr₃(3.9g, 14.4mmol, 1eq)을 용액에 첨가하고 반응 혼합물을 -110°C에서 교반하였다. 침전물을 필터하고 반응물을 감압 농축하였다. 재결정을 통해 화합물 1-2를 수득하였다(2.57g, 60%).

[0127] (화합물 P-1의 합성)



[0128]

[0129] 플라스크에 화합물 1-2(3g, 10.1mmol, 1eq), naphthalene-2-boronic acid pinacol ester (2.6g, 10.1mmol, 1eq), Pd(PPh₃)₄(0.35g, 0.3mmol, 0.03eq), NaOH (0.8g, 20.2mmol, 2eq) 및 THF/H₂O(3:1)를 넣고 4시간 환류 교반하였다. 반응이 종료된 후 유기층을 추출하여 magnesium sulfate로 수분을 제거한 뒤, 용액을 감압 농축하였다. Column chromatography를 통해 화합물 P-1을 수득하였다(82%).



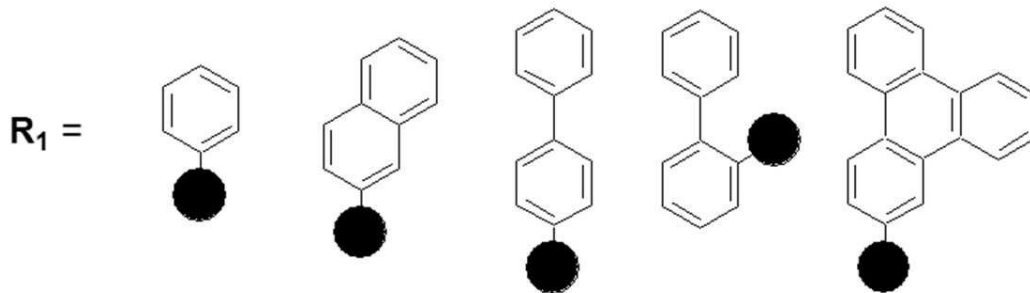
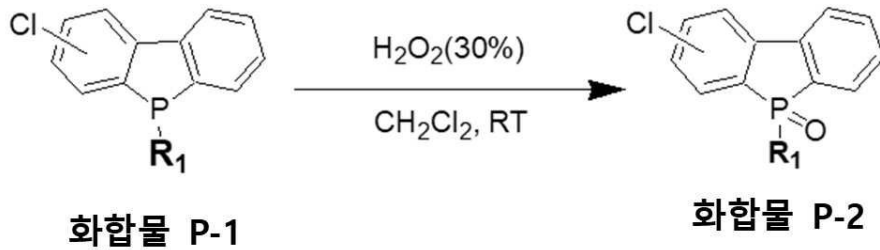
[0130]

[0131]

[0132] R1의 치환기를 다양하게 변화시켜 다양한 화합물 P-1을 획득하였다.

[0133]

[0134] (화합물 P-2의 합성)

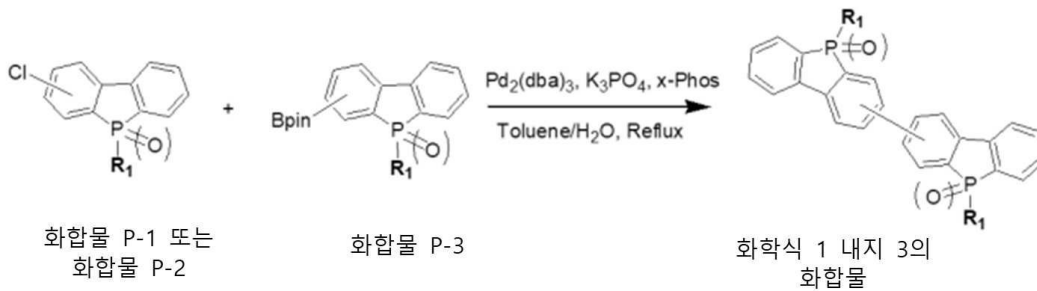


[0135]

[0136] DCM 15ml에 녹인 화합물 P-1을 플라스크에 넣고 30% hydrogen peroxide(1.3eq)을 적가하였다. 반응물을 1시간 동안 교반한 후 반응이 종료되면, brine으로 세척한 유기층을 추출하여 magnesium sulfate로 수분을 제거한 뒤, 용액을 감압 농축하였다. 재결정을 통해 화합물 P-2를 획득하였다(83%).

[0137] R1의 치환기를 다양하게 변화시켜 다양한 화합물 P-2를 획득하였다.

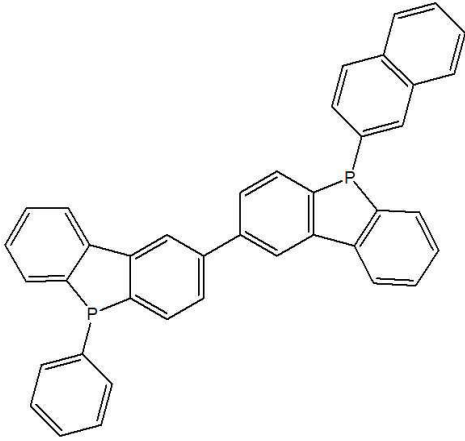
[0139] (화학식 1 내지 3의 화합물의 합성)



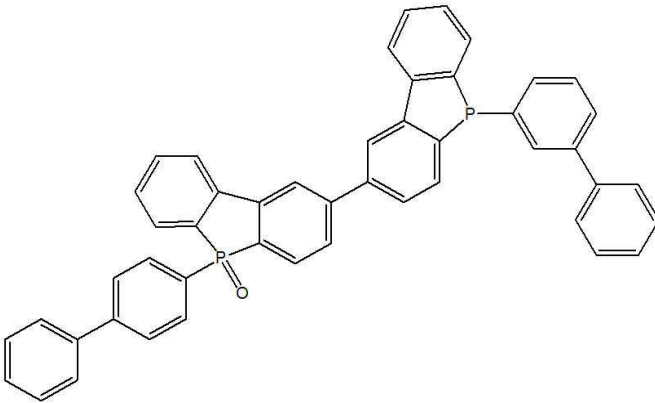
[0140]

[0142] 플라스크에 화합물 P-1 또는 화합물 P-2(5g, 1eq), 화합물 P-3(1eq), Pd₂(dba)₃(2mol%), K₃PO₄(3eq), x-phos(4mol%) 및 Toluene/H₂O를 넣고 밤새 환류 교반하였다. 반응이 종료된 후 유기층을 추출하여 magnesium sulfate로 수분을 제거한 뒤, 용액을 감압 농축하였다. 재결정을 통해 화학식 1의 화합물, 화학식 2의 화합물 또는 화학식 3의 화합물을 획득하였다(83%).

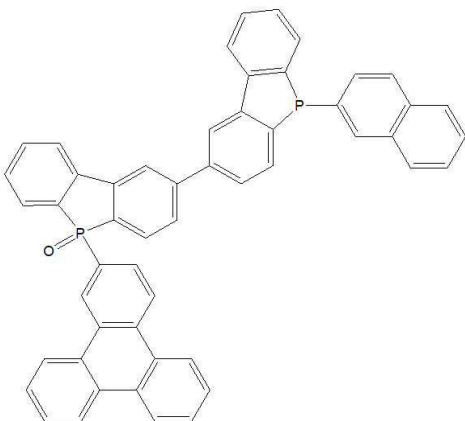
[0144] [실시예 1]



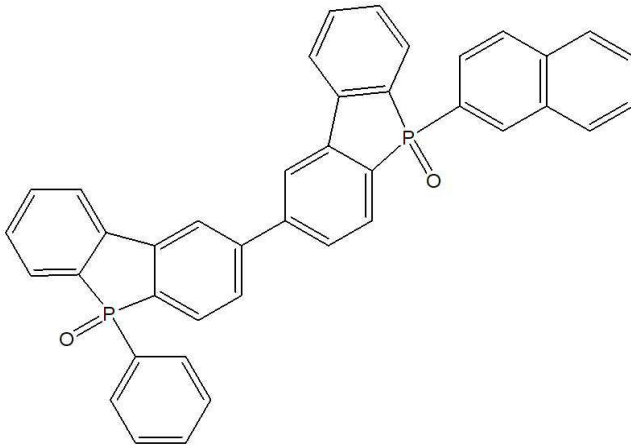
[0145]
[0146] 상기 합성 방법에 따라 화학식 1의 화합물(화합물 9)을 제조하였다.
[0148] [실시예 2]



[0149]
[0150] 상기 합성 방법에 따라 화학식 2의 화합물(화합물 73)을 제조하였다.
[0152] [실시예 3]



[0153]
[0154] 상기 합성 방법에 따라 화학식 2의 화합물(화합물 135)을 제조하였다.
[0155]
[0156] [실시예 4]

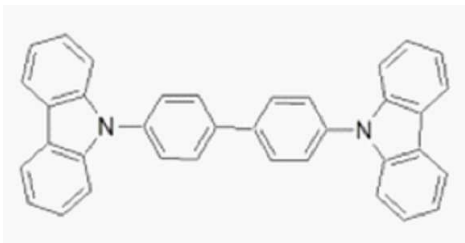


[0157]
 [0158] 상기 합성 방법에 따라 화학식 3의 화합물을 제조하였다.

[0159]
 [0160] [실시예 5]
 [0161] 실시예 1의 화합물 20중량부 및 실시예 2의 화합물 80중량부를 혼합하여 조성물을 제조하였다.

[0163] [실시예 6]
 [0164] 실시예 1의 화합물 30중량부, 실시예 2의 화합물 100중량부 및 실시예 4의 화합물 10중량부를 혼합하여 조성물을 제조하였다.

[0166] [비교예 1]
 [0167] 하기 화학식의 화합물을 사용하였다.



[0168]
 [0170] 상기 실시예 및 비교예에서 제조한 화합물 및 조성물을 이용하여 발광효율 및 색좌표를 측정하고, 그 결과를 하기 표 1에 나타내었다.

[0172] 표 1

	발광효율(cd/A)	발광효율(lm/W)	색좌표(x, y)
실시예 1	49.0	32.1	0.3031, 0.6201
실시예 2	50.3	35.4	0.3038, 0.6211
실시예 3	49.6	33.8	0.3032, 0.6211
실시예 4	48.5	30.9	0.3029, 0.6198
실시예 5	51.8	37.2	0.3052, 0.6238
실시예 6	52.0	37.8	0.3048, 0.6224
비교예 1	37.2	18.3	0.3010, 0.6182

[0174] 상기 표에서 알 수 있듯이, 실시예는 비교예에 비하여 발광효율 및 색좌표가 우수하고, 특히 실시예 2, 5 및 6은 상기 특성이 가장 우수함을 확인할 수 있다.

도면

도면1

Compound	m/z	Compound	m/z
화합물 1	818.23	화합물 78	660.18
화합물 2	668.18	화합물 79	660.18
화합물 3	744.21	화합물 80	634.16
화합물 4	744.21	화합물 81	834.22
화합물 5	718.20	화합물 82	684.18
화합물 6	518.14	화합물 83	760.21
화합물 7	594.17	화합물 84	760.21
화합물 8	594.17	화합물 85	734.19
화합물 9	568.15	화합물 86	684.18
화합물 10	670.20	화합물 87	534.13
화합물 11	670.20	화합물 88	610.16
화합물 12	644.18	화합물 89	610.16
화합물 13	670.20	화합물 90	584.15
화합물 14	644.18	화합물 91	760.21
화합물 15	618.17	화합물 92	610.16
화합물 16	518.14	화합물 93	686.19
화합물 17	594.17	화합물 94	686.19
화합물 18	594.17	화합물 95	660.18
화합물 19	668.18	화합물 96	760.21
화합물 20	718.20	화합물 97	610.16
화합물 21	568.15	화합물 98	686.19
화합물 22	670.20	화합물 99	686.19
화합물 23	670.20	화합물 100	660.18
화합물 24	744.21	화합물 101	734.19
화합물 25	818.23	화합물 102	584.15
화합물 26	618.17	화합물 103	660.18
화합물 27	644.18	화합물 104	660.18
화합물 28	670.20	화합물 105	634.16
화합물 29	744.21	화합물 106	834.22
화합물 30	644.18	화합물 107	684.18
화합물 31	518.14	화합물 108	760.21
화합물 32	568.15	화합물 109	760.21
화합물 33	594.17	화합물 110	734.19
화합물 34	594.17	화합물 111	684.18
화합물 35	668.18	화합물 112	534.13
화합물 36	670.20	화합물 113	610.16
화합물 37	644.18	화합물 114	610.16
화합물 38	644.18	화합물 115	584.15
화합물 39	718.20	화합물 116	760.21

도면2

화합물 40	818.23	화합물 117	610.16
화합물 41	618.17	화합물 118	686.19
화합물 42	670.20	화합물 119	686.19
화합물 43	670.20	화합물 120	660.18
화합물 44	744.21	화합물 121	760.21
화합물 45	744.21	화합물 122	610.16
화합물 46	668.18	화합물 123	686.19
화합물 47	744.21	화합물 124	686.19
화합물 48	744.21	화합물 125	660.18
화합물 49	644.18	화합물 126	734.19
화합물 50	718.20	화합물 127	584.15
화합물 51	644.18	화합물 128	660.18
화합물 52	670.20	화합물 129	660.18
화합물 53	594.17	화합물 130	634.16
화합물 54	594.17	화합물 131	834.22
화합물 55	568.15	화합물 132	684.18
화합물 56	834.22	화합물 133	760.21
화합물 57	684.18	화합물 134	760.21
화합물 58	760.21	화합물 135	734.19
화합물 59	760.21	화합물 136	684.18
화합물 60	734.19	화합물 137	534.13
화합물 61	684.18	화합물 138	610.16
화합물 62	534.13	화합물 139	610.16
화합물 63	610.16	화합물 140	584.15
화합물 64	610.16	화합물 141	760.21
화합물 65	584.15	화합물 142	610.16
화합물 66	760.21	화합물 143	686.19
화합물 67	610.16	화합물 144	686.19
화합물 68	686.19	화합물 145	660.18
화합물 69	686.19	화합물 146	760.21
화합물 70	660.18	화합물 147	610.16
화합물 71	760.21	화합물 148	686.19
화합물 72	610.16	화합물 149	686.19
화합물 73	686.19	화합물 150	660.18
화합물 74	686.19	화합물 151	734.19
화합물 75	660.18	화합물 152	584.15
화합물 76	734.19	화합물 153	660.18
화합물 77	584.15	화합물 154	660.18
		화합물 155	634.16