

(12) 특허협력조약에 의하여 공개된 국제출원

(19) 세계지식재산권기구
국제사무국

(43) 국제공개일
2015년 7월 2일 (02.07.2015)



(10) 국제공개번호
WO 2015/099453 A1

- (51) 국제특허분류:
C07D 403/10 (2006.01) *C09K 11/06* (2006.01)
C07D 403/14 (2006.01) *H01L 51/50* (2006.01)
- (21) 국제출원번호: PCT/KR2014/012818
- (22) 국제출원일: 2014년 12월 24일 (24.12.2014)
- (25) 출원언어: 한국어
- (26) 공개언어: 한국어
- (30) 우선권정보:
10-2013-0166183 2013년 12월 27일 (27.12.2013) KR
- (71) 출원인: 주식회사 두산 (DOOSAN CORPORATION)
[KR/KR]; 100-730 서울시 중구 장충단로 275, Seoul (KR).
- (72) 발명자: 김동연 (KIM, Dong Yoon); 445-893 경기도 화성시 봉담읍 동화북길 43 번길 11, Gyeonggi-do (KR).
연규만 (YOUN, Kyuman); 443-472 경기도 수원시 영통구 영통로 200 번길 239, 102 동 1404 호 (영통동, 영통 e 편한세상아파트), Gyeonggi-do (KR).
- (74) 대리인: 특허법인 한벗 (HANBEOT PATENT & LAW FIRM); 120-013 서울시 서대문구 충정로 7 구세군빌딩 15층, Seoul (KR).
- (81) 지정국 (별도의 표시가 없는 한, 가능한 모든 종류의 국내 권리의 보호를 위하여): AE, AG, AL, AM, AO,

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

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

공개:

- 국제조사보고서와 함께 (조약 제 21 조(3))
- 청구범위 보정 기한 만료 전의 공개이며, 보정서를 접수하는 경우 그에 관하여 별도 공개함 (규칙 48.2(h))

(54) Title: ORGANIC LIGHT-EMITTING COMPOUND AND ORGANIC LIGHT-EMITTING DIODE DEVICE USING SAME

(54) 발명의 명칭: 유기발광 화합물 및 이를 이용한 유기 전계 발광 소자

(57) Abstract: The present invention relates to an organic light-emitting diode device, wherein a new benzocarbazole compound having excellent light-emission, and excellent hole and electron transport properties is included in one or more organic layers, to thereby provide an improved light-emission efficiency, driving voltage and life expectancy.

(57) 요약서: 본 발명은 발광능, 정공 수송능, 전자 수송능 등이 우수한 신규의 벤조 카바졸 화합물 및 이를 하나 이상의 유기물층에 포함함으로써 발광효율, 구동 전압, 수명 등의 특성이 향상된 유기 전계 발광 소자에 관한 것이다.



WO 2015/099453 A1

명세서

발명의 명칭: 유기발광 화합물 및 이를 이용한 유기 전계 발광 소자 기술분야

- [1] 본 발명은 신규의 유기발광 화합물 및 이를 이용한 유기 전계 발광 소자에 관한 것으로, 보다 상세하게는 발광능, 정공 수송능, 전자 수송능이 우수한 신규의 유기발광 화합물, 및 상기 화합물을 하나 이상의 유기물층에 포함함으로써 발광효율, 구동 전압, 수명 등의 특성이 향상된 유기 전계 발광 소자에 관한 것이다.

[2]

배경기술

- [3] 1950년대 Bernanose의 유기 박막 발광 관측을 시점으로 하여, 1965년 안트라센 단결정을 이용한 청색 전기발광으로 이어진 유기 전계 발광 (electroluminescent, EL) 소자(이하, 간단히 '유기 EL 소자'로 칭함)에 대한 연구가 이어져 오다가, 1987년 탕(Tang)에 의하여 정공층과 발광층의 기능층으로 나눈 적층구조의 유기 EL 소자가 제시되었다. 이후, 고효율, 고수명의 유기 EL 소자를 만들기 위하여, 소자 내 각각의 특징적인 유기물 층을 도입하는 형태로 발전하여 왔으며, 이에 사용되는 특화된 물질의 개발로 이어졌다.
- [4] 유기 전계 발광 소자는 두 전극 사이에 전압을 걸어 주면 양극에서는 정공이 유기물층으로 주입되고, 음극에서는 전자가 유기물층으로 주입된다. 주입된 정공과 전자가 만났을 때 엑시톤(exciton)이 형성되며, 이 엑시톤이 바닥상태로 떨어질 때 빛이 나게 된다. 이때, 유기물층으로 사용되는 물질은 그 기능에 따라, 발광 물질, 정공 주입 물질, 정공 수송 물질, 전자 수송 물질, 전자 주입 물질 등으로 분류될 수 있다. 발광 물질은 발광색에 따라 청색, 녹색, 적색 발광 물질과, 보다 나은 천연색을 구현하기 위해 필요한 노란색 및 주황색 발광 물질로 구분될 수 있다. 또한, 색순도의 증가와 에너지 전이를 통한 발광 효율을 증가시키기 위하여, 발광 물질로서 호스트/도판트 계를 사용할 수 있다. 도판트 물질은 유기 물질을 사용하는 형광 도판트와 Ir, Pt 등의 중원자(heavy atoms)가 포함된 금속 착체 화합물을 사용하는 인광 도판트로 나눌 수 있다. 이때, 인광재료의 개발은 이론적으로 형광에 비해 4배까지의 발광 효율을 향상시킬 수 있기 때문에, 인광 도판트 뿐만 아니라 인광 호스트 재료들에 대한 연구가 많이 진행되고 있다.
- [5] 현재까지 정공 주입층, 정공 수송층, 정공 차단층, 전자 수송층으로는 NPB, BCP, Alq 등이 널리 알려져 있으며, 발광 재료로는 안트라센 유도체들이 형광 도판트/호스트 재료로서 보고되고 있다. 특히, 발광 재료 중 효율 향상 측면에서 큰 장점을 가지고 있는 인광 재료들은 Firpic, Ir(ppy), (acac)Ir(btp) 등과 같은 Ir 을 포함하는 금속 착체 화합물이 청색(blue), 녹색(green), 적색(red) 도판트 재료로

사용되고 있으며, 현재까지는 CBP가 인광 호스트 재료로 높은 특성을 나타내고 있다.

- [6] 그러나, 기존의 재료들은 발광 특성 측면에서는 유리한 면이 있으나, 유리전이온도가 낮아 열적 안정성이 매우 좋지 않기 때문에, OLED 소자에서의 수명 측면에서 만족할 만한 수준이 되지 못하는 실정이다.

[7]

발명의 상세한 설명

기술적 과제

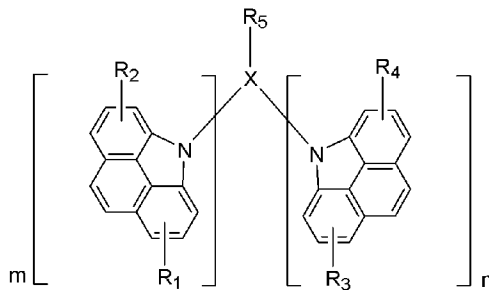
- [8] 본 발명은 전술한 문제점을 해결하기 위해 안출된 것으로서, 발광효율, 구동전압, 열적/전기화학적 안정성, 수명 등의 특성을 향상시킬 수 있는 신규 벤조카바졸 화합물 및 이를 이용한 OLED 소자를 제공하는 것을 목적으로 한다.

[9]

과제 해결 수단

- [10] 상기 목적을 달성하기 위하여 본 발명은 하기 화학식 1로 표시되는 화합물을 제공한다.

- [11] 화학식 1



- [12] 상기 화학식 1에서,

- [13] m은 0~2이고; n은 0~2이고; m+n은 1 이상이며,

- [14] m 또는 n이 0인 경우, X는 치환 또는 비치환된 C₁~C₄₀의 알킬기, 치환 또는 비치환된 C₂~C₄₀의 알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₂~C₄₀의 알키닐기, 치환 또는 비치환된 C₆~C₄₀의 아릴기, 치환 또는 비치환된 핵원자수 5 내지 40의 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 C₆~C₄₀의 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C₁~C₄₀의 알킬옥시기, 치환 또는 비치환된 C₆~C₄₀의 아릴아민기, 치환 또는 비치환된 C₃~C₄₀의 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C₁~C₄₀의 알킬실릴기, 치환 또는 비치환된 C₁~C₄₀의 알킬보론기, 치환 또는 비치환된 C₆~C₄₀의 아릴보론기, 치환 또는 비치환된 C₆~C₄₀의 아릴포스핀기, 치환 또는 비치환된 C₆~C₄₀의 아릴포스핀옥사이드기 및 치환 또는 비치환된 C₆~C₄₀의 아릴실릴기로 이루어진 군으로부터 선택되며,

- [15] m과 n이 0이 아닌 경우, X는 단일결합이거나 또는 치환 또는 비치환된 C₆~C₆₀의

아릴렌기, 및 치환 또는 비치환된 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴렌기로 이루어진 군에서 선택되고,

- [16] R_1 내지 R_5 은 서로 동일하거나 또는 상이하며, 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 시아노, 치환 또는 비치환된 $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬기, 치환 또는 비치환된 $C_2\sim C_{40}$ 의 알케닐기, 치환 또는 비치환된 $C_2\sim C_{40}$ 의 알키닐기, 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴기, 치환 또는 비치환된 핵원자수 5 내지 40의 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬옥시기, 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴아민기, 치환 또는 비치환된 $C_3\sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬실릴기, 치환 또는 비치환된 $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬보론기, 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴보론기, 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴포스핀기, 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴포스핀옥사이드기, 및 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택되며,
- [17] 상기 X 및 R_1 내지 R_5 에서, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_2\sim C_{40}$ 의 알케닐기, $C_2\sim C_{40}$ 의 알키닐기, $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 40의 헤테로아릴기, $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴옥시기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬옥시기, $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴아민기, $C_3\sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬실릴기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬보론기, $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴보론기, $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴포스핀기, $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴포스핀옥사이드기, $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴실릴기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴렌기 및 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴렌기는 각각 독립적으로 중수소, 할로젠, 시아노기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_2\sim C_{40}$ 의 알케닐기, $C_2\sim C_{40}$ 의 알키닐기, $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 40의 헤테로아릴기, $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴옥시기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬옥시기, $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴아민기, $C_3\sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬실릴기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬보론기, $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴보론기, $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴포스핀기, $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴포스핀옥사이드기 및 $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴실릴기로 이루어진 군으로부터 선택되는 하나 이상의 치환기로 치환될 수 있다.
- [18] 본 발명은 또한 양극, 음극, 및 상기 양극과 음극 사이에 개재(介在)된 1층 이상의 유기물층을 포함하며, 상기 1층 이상의 유기물층 중 적어도 하나는 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하는 것을 특징으로 하는 유기 EL 소자를 제공한다.
- [19] 여기서, 상기 1층 이상의 유기물층 중 적어도 하나는 발광층, 전자수송층 및 정공 수송층으로 이루어진 군으로부터 선택되는 것이 바람직하다.

[20]

발명의 효과

- [21] 본 발명의 화학식 1로 표시되는 화합물은 우수한 발광능, 전자 수송능, 정공 수송능 등을 가지고 있어, 이를 발광층의 호스트 재료, 전자 수송 재료, 정공 수송 재료 등으로 포함하는 유기 EL 소자는 발광성능, 구동전압, 수명, 색순도 등의

특성이 크게 향상될 수 있어 풀 칼라 디스플레이 패널 등에 효과적으로 적용될 수 있다.

[22]

발명의 실시를 위한 형태

[23] 이하, 본 발명을 상세히 설명한다.

[24] 본 발명은 유기 EL 소자 용도로 사용되지 않은 벤조카바졸 화합물 구조를 유기 EL 소자에 새롭게 적용하는 것을 특징으로 한다.

[25]

[26] <신규 벤조카바졸 화합물>

[27] 본 발명의 신규 화합물은 벤조카바졸(benzocarbazole)계 모핵에 다양한 치환체, 특히 N-함유 헤테로환, 방향족 고리 등이 연결된 상기 화학식 1로 표시되는 구조를 가진다.

[28] 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 전술한 구조를 통해 충분히 높은 삼중항 에너지 레벨을 달성하여 인광특성을 개선함과 동시에 전자(electron) 및/또는 정공(hole) 수송 능력, 발광효율, 구동전압, 수명 특성 등에서 개선된 효능을 달성할 수 있다. 또한 도입되는 치환체의 종류에 따라 전자 수송 능력 등도 향상시킬 수 있다. 따라서, 상기 화학식 1의 화합물은 유기 전계 발광 소자의 유기물층 재료, 바람직하게는 발광층 재료(인광 호스트 재료), 정공 수송층 재료, 전자 저지층 재료 및 발광층 재료, 보다 바람직하게는 정공 수송층 재료 및 발광층 재료로 사용될 수 있다.

[29] 아울러, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 다양한 치환체, 특히 아릴기 및/또는 헤테로아릴기가 도입되어 화합물의 분자량이 유의적으로 증대됨으로써, 유리 전이온도가 향상되고, 이로 인해 종래의 발광 재료보다 높은 열적 안정성을 가질 수 있다. 따라서, 본 발명의 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하는 유기 전계 발광 소자는 내구성 및 수명 특성이 크게 향상될 수 있다.

[30] 나아가, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 유기 전계 발광 소자의 정공 수송층 또는 청색 형광, 녹색 및/또는 적색의 인광 발광층 재료로 채택할 경우, 종래 NPB 대비 효율 및 수명 측면에서 월등히 우수한 효과를 발휘할 수 있다. 따라서, 본 발명에 따른 화합물은 유기 전계 발광 소자의 성능 개선 및 수명 향상에 크게 기여할 수 있으며, 나아가 유기 전계 발광 소자의 수명 향상은 풀 칼라 유기 발광 패널의 성능을 극대화시킬 수 있다.

[31]

[32] 본 발명의 화학식 1로 표시되는 화합물에서, m은 0~2이고; n은 0~2이고; m+n은 1 이상이다. 바람직하게는 m과 n이 각각 0 또는 1이며, m+n은 1 또는 2일 수 있다.

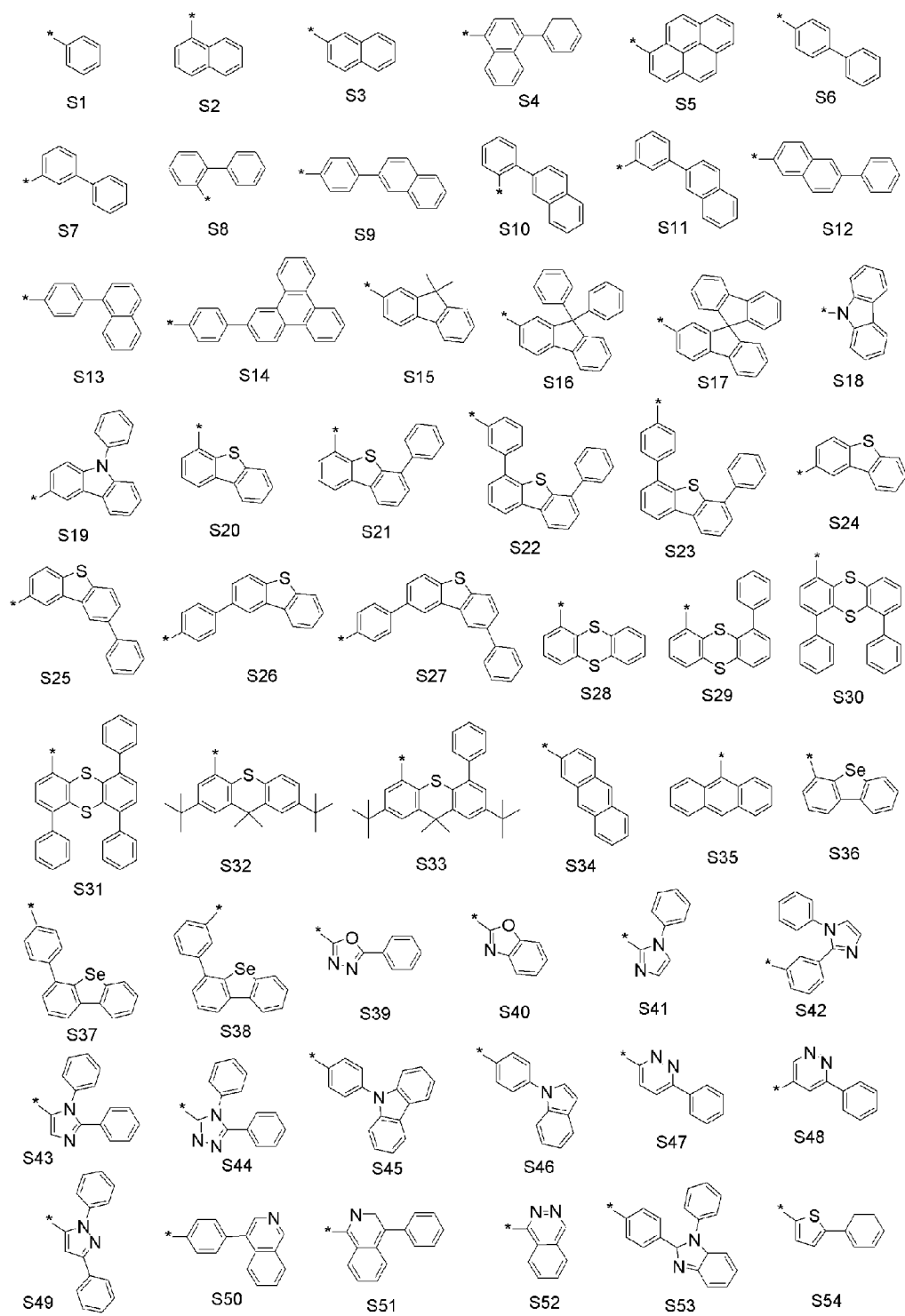
[33] X는 상기 m과 n의 수치에 따라 치환기의 종류가 일부 상이할 수 있다.

[34] 일례로, m 또는 n이 0인 경우 (예컨대, m+n은 1), X는 치환 또는 비치환된 C₁~C₄₀의 알킬기, 치환 또는 비치환된 C₂~C₄₀의 알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₂~C₄₀의

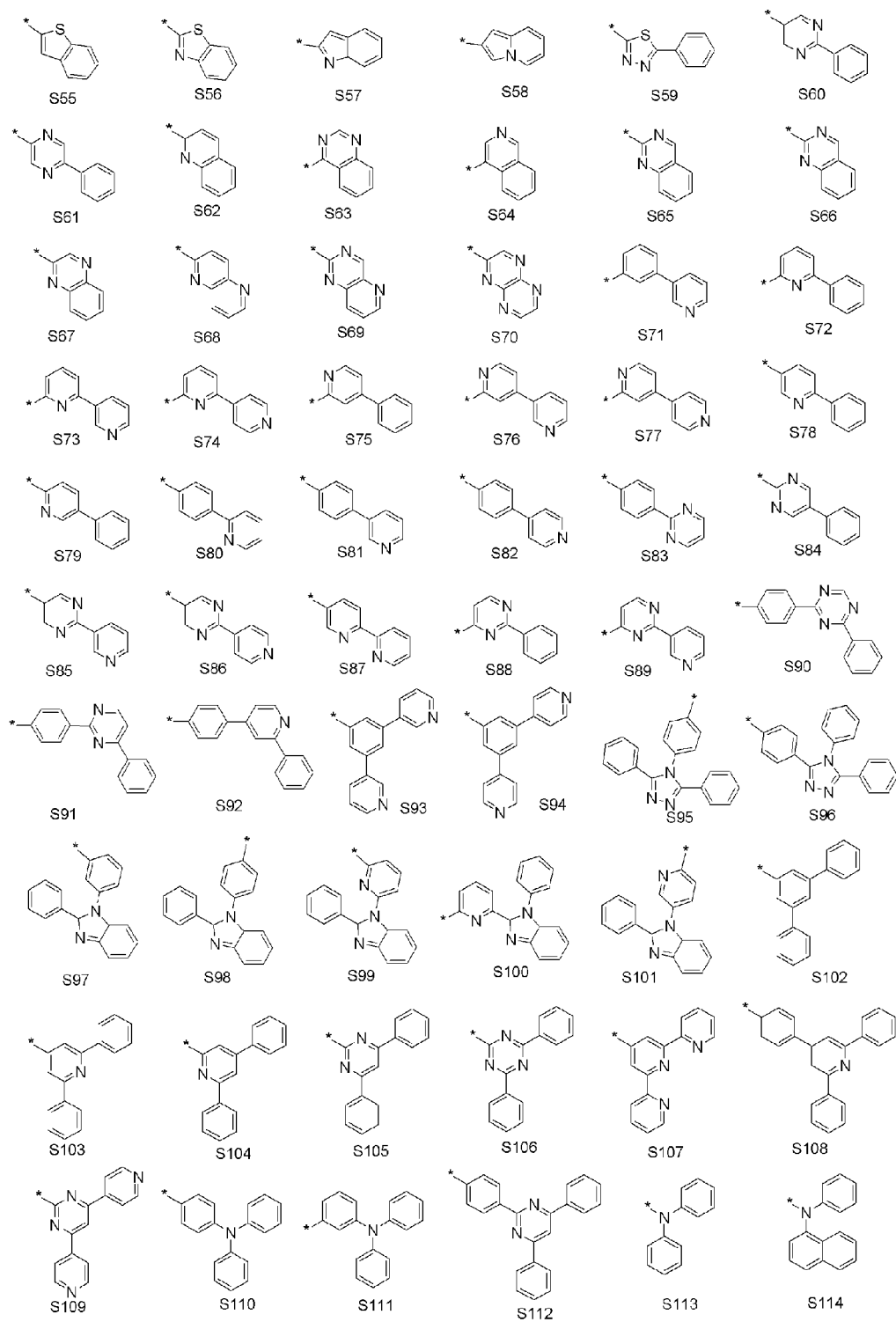
알킬닐기, 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴기, 치환 또는 비치환된 핵원자수 5 내지 40의 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬옥시기, 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴아민기, 치환 또는 비치환된 $C_3\sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬실릴기, 치환 또는 비치환된 $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬보론기, 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴보론기, 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴포스핀기, 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴포스핀옥사이드기 및 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴실릴기로 이루어진 군으로부터 선택된다.

- [35] 또한 m 과 n 이 모두 0이 아닌 경우 (예컨대, $m+n > 1$), X 는 단일결합이거나 또는 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴렌기, 및 치환 또는 비치환된 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴렌기로 이루어진 군에서 선택된다
- [36] 본 발명에 따른 화학식 1에서, 상기 R_1 내지 R_5 은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 시아노, 치환 또는 비치환된 $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬기, 치환 또는 비치환된 $C_2\sim C_{40}$ 의 알케닐기, 치환 또는 비치환된 $C_2\sim C_{40}$ 의 알키닐기, 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴기, 치환 또는 비치환된 핵원자수 5 내지 40의 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬옥시기, 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴아민기, 치환 또는 비치환된 $C_3\sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬실릴기, 치환 또는 비치환된 $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬보론기, 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴보론기, 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴포스핀기, 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴포스핀옥사이드기, 및 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택되어진다.
- [37] 이때, 상기 R_1 내지 R_5 는 서로 동일하거나 또는 상이하며, 각각 독립적으로 수소, 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴기, 치환 또는 비치환된 핵원자수 5 내지 40의 헤테로아릴기인 것이 바람직하다.
- [38] 본 발명에 따른 화합물에서, 상기 R_1 내지 R_5 는 각각 독립적으로 수소, 및 하기 S1 내지 S166로 이루어진 치환체 군에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

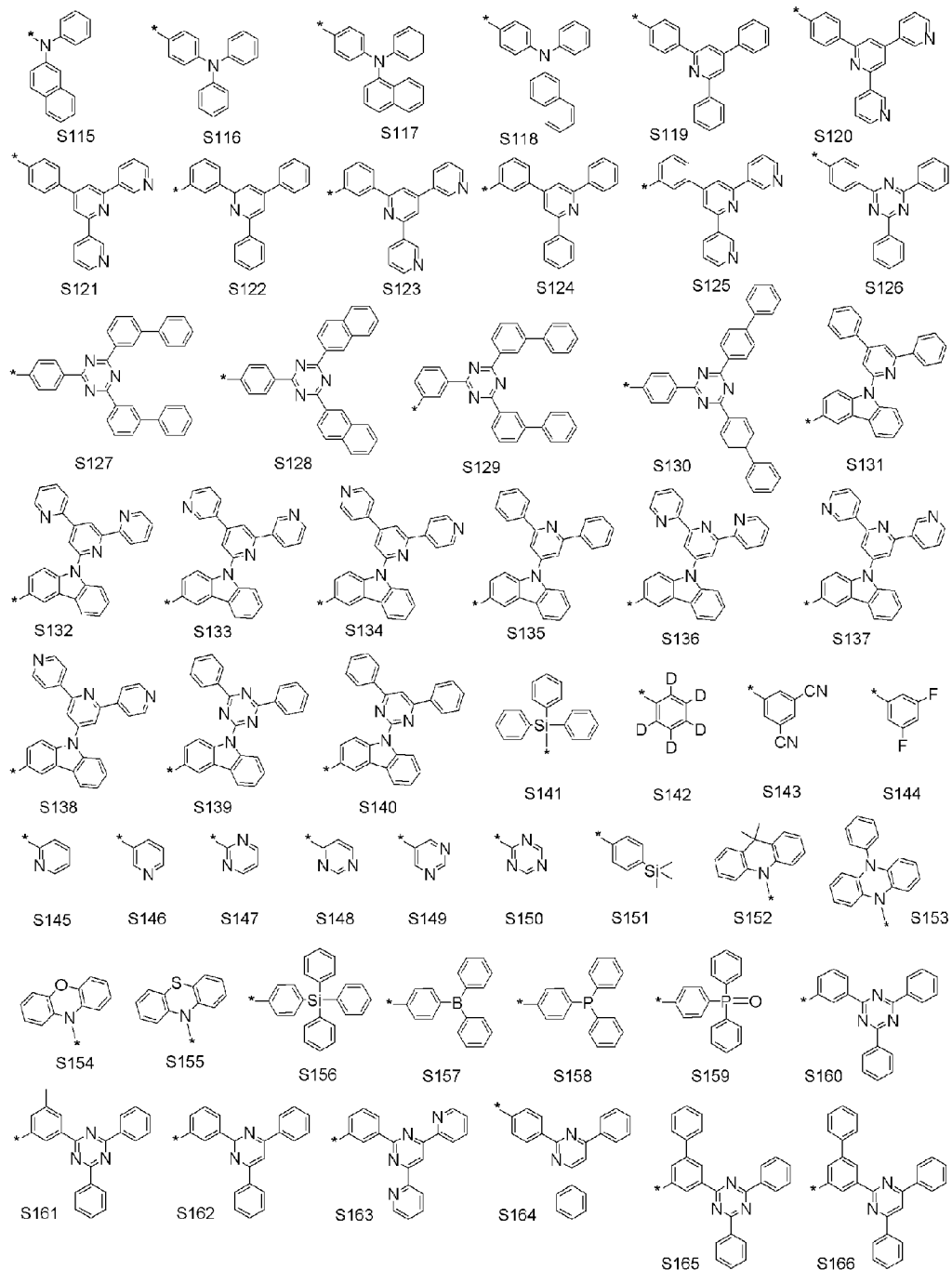
[39]



[40]



[41]



[42]

[43]

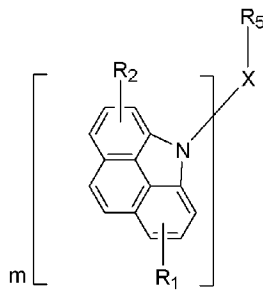
전술한 X 및 R₁ 내지 R₅에서, '치환 또는 비치환된'이라는 용어가 기재된 모이어티, 일례로 C₁~C₄₀의 알킬기, C₂~C₄₀의 알케닐기, C₂~C₄₀의 알킬닐기, C₆~C₄₀의 아릴기, 핵원자수 5 내지 40의 헤테로아릴기, C₆~C₄₀의 아릴옥시기, C₁~C₄₀의 알킬옥시기, C₆~C₄₀의 아릴아민기, C₃~C₄₀의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, C₁~C₄₀의 알킬실릴기, C₁~C₄₀의 알킬보론기, C₆~C₄₀의 아릴보론기, C₆~C₄₀의 아릴포스핀기, C₆~C₄₀의 아릴포스핀옥사이드기, C₆~C₄₀의 아릴실릴기, C₆~C₆₀의 아릴렌기 및 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴렌기는 각각 독립적으로 중수소, 할로젠, 시아노기, C₁~C₄₀의 알킬기, C₂~C₄₀의 알케닐기, C₂~C

$_{40}$ 의 알킬닐기, $C_6 \sim C_{40}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 40의 헤테로아릴기, $C_6 \sim C_{40}$ 의 아릴옥시기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬옥시기, $C_6 \sim C_{40}$ 의 아릴아민기, $C_3 \sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬실릴기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬보론기, $C_6 \sim C_{40}$ 의 아릴보론기, $C_6 \sim C_{40}$ 의 아릴포스핀기, $C_6 \sim C_{40}$ 의 아릴포스핀옥사이드기 및 $C_6 \sim C_{40}$ 의 아릴실릴기로 이루어진 군으로부터 선택되는 하나 이상의 치환기로 치환될 수 있다. 이때 복수 개의 치환기가 도입되는 경우 복수 개의 치환기는 서로 동일하거나 또는 상이할 수 있다.

[44]

[45] 본 발명에 따른 화학식 1로 표시되는 화합물은 하기 화학식 2 또는 화학식 3으로 표시되는 화합물로 보다 구체화될 수 있다.

[46] 화학식 2



[47] 상기 화학식 2에서,

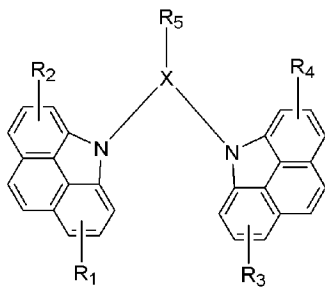
[48] X, R_1 , R_2 , R_5 및 m은 화학식 1에서 정의된 바와 같다.

[49] 본 발명의 바람직한 일례를 들면, X는 치환 또는 비치환된 $C_6 \sim C_{40}$ 의 아릴기, 및 치환 또는 비치환된 핵원자수 5 내지 40의 헤테로아릴기로 이루어진 군으로부터 선택된다. 이러한 X의 일례를 들면, 페닐기, 바이페닐기, 플루오레닐기(fluorenyl group), 나프틸기(naphthyl group), 피리딜기(pyridyl group), 피리미딘일기(pyrimidinyl group), 퀴놀릴기(quinolyl group), 및 카바졸릴기(carbazolyl group)로 이루어진 군에서 선택되며,

[50] R_1 , R_2 및 R_5 는 서로 동일하거나 또는 상이하며, 각각 독립적으로 수소, 치환 또는 비치환된 $C_6 \sim C_{40}$ 의 아릴기, 치환 또는 비치환된 핵원자수 5 내지 40의 헤테로아릴기일 수 있으며,

[51] m은 1 또는 2이다.

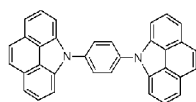
[52] 화학식 3



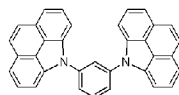
[53] 상기 화학식 3에서,

- [54] X, R₁~R₅는 각각 화학식 1에서 정의된 바와 같다.
- [55] 본 발명의 바람직한 일례를 들면, X는 치환 또는 비치환된 C₆~C₆₀의 아릴렌기, 및 치환 또는 비치환된 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴렌기로 이루어진 군에서 선택된다. 이러한 X의 일례를 들면, 페닐렌기, 바이페닐렌기, 플루오렌일렌기(fluorenylene group), 나프틸렌기, 피리디닐렌기(pyridinylene group), 피리미디닐렌기(pyrimidinylene group), 퀴놀리닐렌기(quinolinylene group), 및 카바졸일렌기(carbazolylene group)로 구성된 군으로부터 선택되며,
- [56] R₁~R₅은 각각 독립적으로 수소, 치환 또는 비치환된 C₆~C₄₀의 아릴기, 치환 또는 비치환된 핵원자수 5 내지 40의 헤테로아릴기일 수 있다.
- [57]
- [58] 이상에서 설명한 본 발명의 화학식 1로 표시되는 화합물은 하기 예시된 화학식들로 보다 구체화될 수 있다. 그러나 본 발명의 화학식 1로 표시되는 화합물이 하기 예시된 것들에 의해 한정되는 것은 아니다.

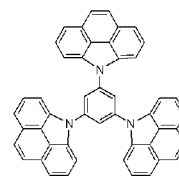
[59]



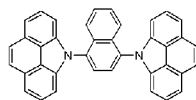
Compd 1



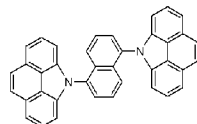
Compd 2



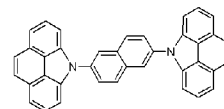
Compd 3



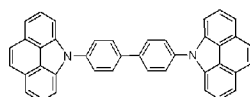
Compd 4



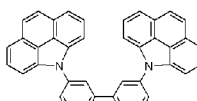
Compd 5



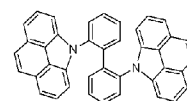
Compd 6



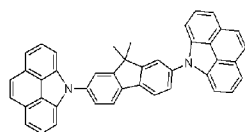
Compd 7



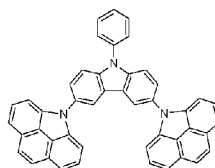
Compd 8



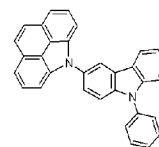
Compd 9



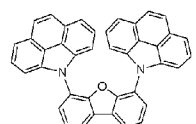
Compd 10



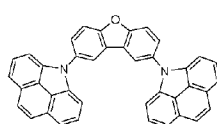
Compd 11



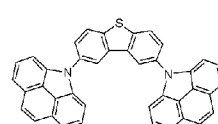
Compd 12



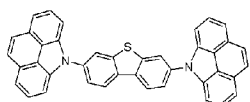
Compd 13



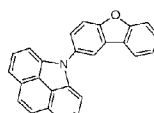
Compd 14



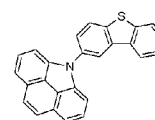
Compd 15



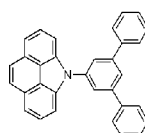
Compd 16



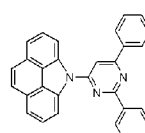
Compd 17



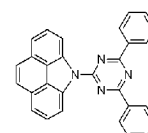
Compd 18



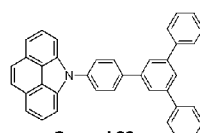
Compd 19



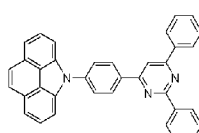
Compd 20



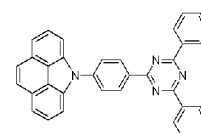
Compd 21



Compd 22

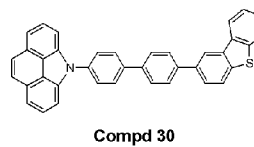
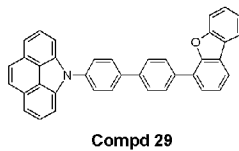
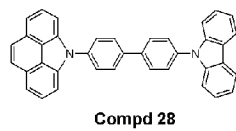
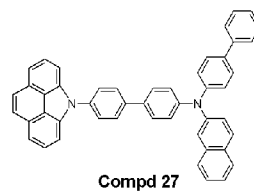
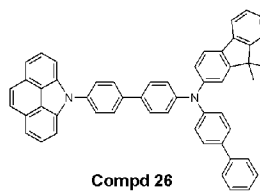
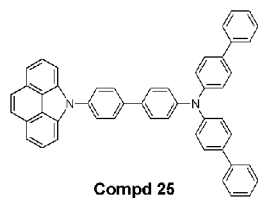


Compd 23

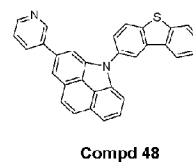
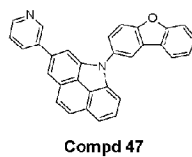
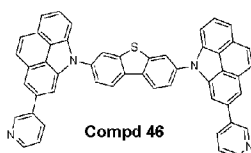
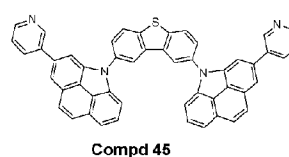
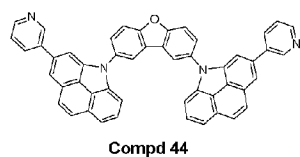
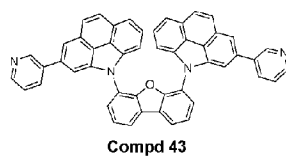
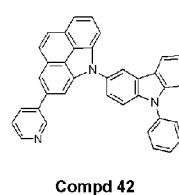
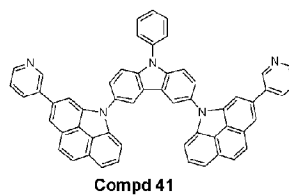
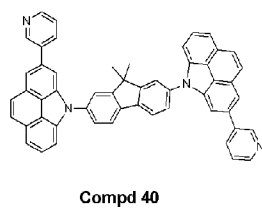
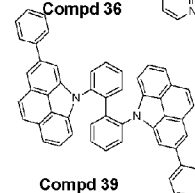
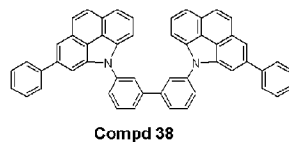
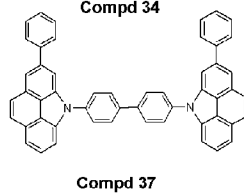
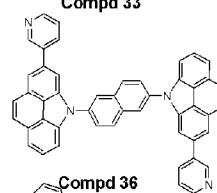
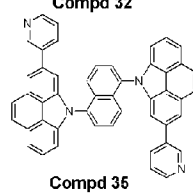
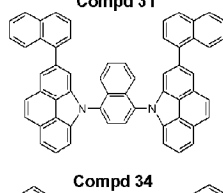
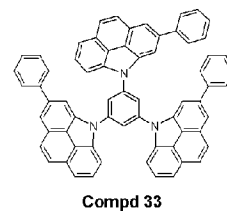
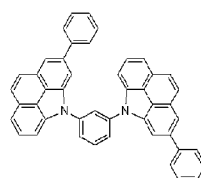
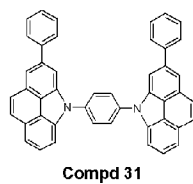


Compd 24

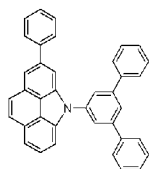
[60]



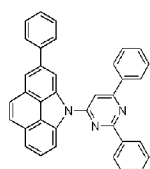
[61]



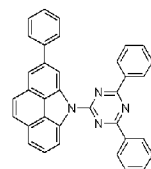
[62]



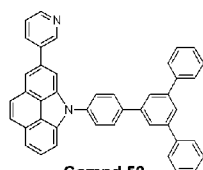
Compd 49



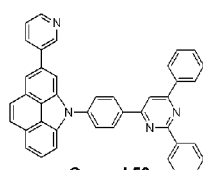
Compd 50



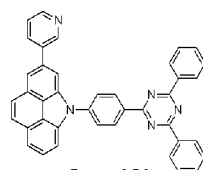
Compd 51



Compd 52

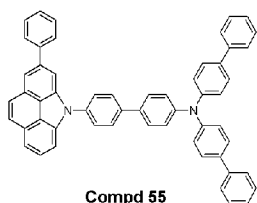


Compd 53

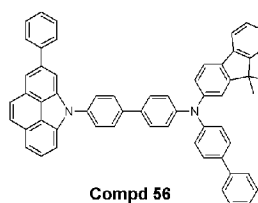


Compd 54

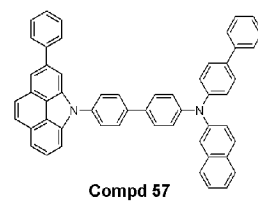
[63]



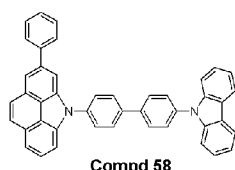
Compd 55



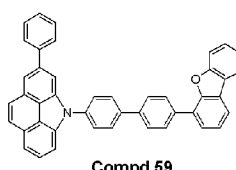
Compd 56



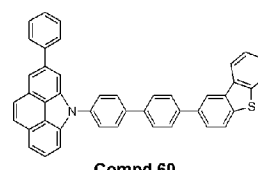
Compd 57



Compd 58

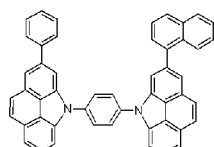


Compd 59

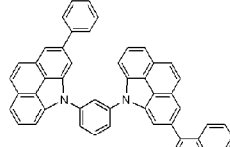


Compd 60

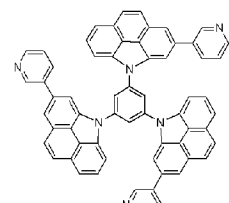
[64]



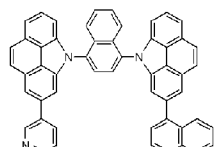
Compd 61



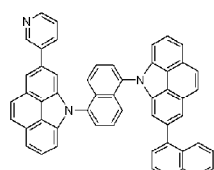
Compd 62



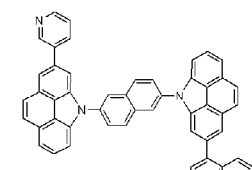
Compd 63



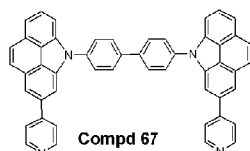
Compd 64



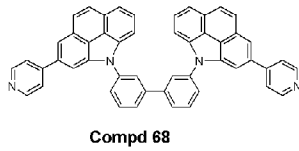
Compd 65



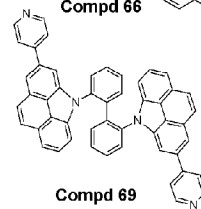
Compd 66



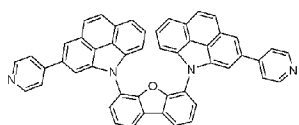
Compd 67



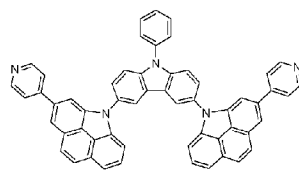
Compd 68



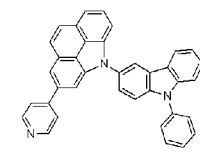
Compd 69



Compd 70



Compd 71



Compd 72

[65]

[66]

본 발명에서의 "알킬"은 탄소수 1 내지 40의 직쇄 또는 측쇄의 포화

- 탄화수소에서 유래되는 1가의 치환기이며, 이의 예로는 메틸, 에틸, 프로필, 이소부틸, sec-부틸, 펜틸, iso-아밀, 헥실 등이 있는데, 이에 한정되지 않는다.
- [67] 본 발명에서의 "알케닐(alkenyl)"은 탄소-탄소 이중 결합을 1개 이상 가진, 탄소수 2 내지 40의 직쇄 또는 측쇄의 불포화 탄화수소에서 유래되는 1가의 치환기이며, 이의 예로는 비닐(vinyl), 알릴(allyl), 이소프로펜일(isopropenyl), 2-부텐일(2-butenyl) 등이 있는데, 이에 한정되지 않는다.
- [68] 본 발명에서의 "알키닐(alkynyl)"은 탄소-탄소 삼중 결합을 1개 이상 가진, 탄소수 2 내지 40의 직쇄 또는 측쇄의 불포화 탄화수소에서 유래되는 1가의 치환기이며, 이의 예로는 에티닐(ethynyl), 2-프로파닐(2-propynyl) 등이 있는데, 이에 한정되지 않는다.
- [69] 본 발명에서의 "아릴"은 단독 고리 또는 2 이상의 고리가 조합된, 탄소수 6 내지 60의 방향족 탄화수소로부터 유래된 1가의 치환기를 의미한다. 또한, 2 이상의 고리가 서로 단순 부착(pendant)되거나 축합된 형태도 포함될 수 있다. 이러한 아릴의 예로는 페닐, 나프틸, 페난트릴, 안트릴 등이 있는데, 이에 한정되지 않는다.
- [70] 본 발명에서의 "헤테로아릴"은 핵원자수 5 내지 40의 모노헤테로사이클릭 또는 폴리헤테로사이클릭 방향족 탄화수소로부터 유래된 1가의 치환기를 의미한다. 이때, 고리 중 하나 이상의 탄소, 바람직하게는 1 내지 3개의 탄소가 N, O, S 또는 Se와 같은 헤테로원자로 치환된다. 또한, 2 이상의 고리가 서로 단순 부착(pendant)되거나 축합된 형태도 포함될 수 있고, 나아가 아릴기와의 축합된 형태도 포함하는 것으로 해석한다. 이러한 헤테로아릴의 예로는 피리딜, 피라지닐, 피리미디닐, 피리다지닐, 트리아지닐과 같은 6-원 모노사이클릭 고리; 페녹사티에닐(phenoxathienyl), 인돌리지닐(indoliziny), 인돌릴(indolyl), 퓨리닐(puriny), 퀴놀릴(quinolyl), 벤조티아졸(benzothiazole), 카바졸릴(carbazolyl)과 같은 폴리사이클릭 고리; 2-퓨라닐, N-이미다졸릴, 2-이속사졸릴, 2-피리디닐, 2-피리미디닐 등이 있는데, 이에 한정되지 않는다.
- [71] 본 발명에서의 "아릴옥시"는 RO-로 표시되는 1가의 치환기로, 상기 R은 탄소수 5 내지 60의 아릴을 의미한다. 이러한 아릴옥시의 예로는 페닐옥시, 나프틸옥시, 디페닐옥시 등이 있는데, 이에 한정되지 않는다.
- [72] 본 발명에서의 "알킬옥시"는 R'O-로 표시되는 1가의 치환기로, 상기 R'는 1 내지 40개의 알킬을 의미하며, 직쇄(linear), 측쇄(branched) 또는 사이클릭(cyclic) 구조를 포함하는 것으로 해석한다. 이러한 알킬옥시의 예로는 메톡시, 에톡시, n-프로폭시, 1-프로폭시, t-부톡시, n-부톡시, 펜톡시 등이 있는데, 이에 한정되지 않는다.
- [73] 본 발명에서의 "아릴아민"은 탄소수 6 내지 60의 아릴로 치환된 아민을 의미한다.
- [74] 본 발명에서의 "시클로알킬"은 탄소수 3 내지 40의 모노사이클릭 또는 폴리사이클릭 비-방향족 탄화수소로부터 유래된 1가의 치환기를 의미한다.

이러한 사이클로알킬의 예로는 사이클로프로필, 사이클로펜틸, 사이클로헥실, 놀보닐(norbornyl), 아다만틴(adamantine) 등이 있는데, 이에 한정되지 않는다.

[75] 본 발명에서의 "헤테로시클로알킬"은 핵원자수 3 내지 40의 비-방향족 탄화수소로부터 유래된 1가의 치환기를 의미하며, 고리 중 하나 이상의 탄소, 바람직하게는 1 내지 3개의 탄소가 N, O, S 또는 Se와 같은 헤테로 원자로 치환된다. 이러한 헤테로시클로알킬의 예로는 모르폴린, 피페라진 등이 있는데, 이에 한정되지 않는다.

[76] 본 발명에서의 "알킬실릴"은 탄소수 1 내지 40의 알킬로 치환된 실릴이고, "아릴실릴"은 탄소수 5 내지 40의 아릴로 치환된 실릴을 의미한다.

[77] 본 발명에서의 "축합 고리"는 축합 지방족 고리, 축합 방향족 고리, 축합 헤테로지방족 고리, 축합 헤테로방향족 고리 또는 이들의 조합된 형태를 의미한다.

[78] 본 발명의 화학식 1의 화합물은 하기 합성예를 참조하여 다양하게 합성할 수 있다. 본 발명의 화합물에 대한 상세한 합성 과정은 후술하는 합성예에서 구체적으로 기술하도록 한다.

[79]

[80] <유기 전계 발광 소자>

[81] 한편, 본 발명의 다른 측면은 상기한 본 발명에 따른 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하는 유기 전계 발광 소자에 관한 것이다.

[82] 보다 구체적으로, 본 발명에 따른 유기 전계 발광 소자는 양극(anode); 음극(cathode); 및 상기 양극과 음극 사이에 개재(介在)된 1층 이상의 유기물층을 포함하며, 상기 1층 이상의 유기물층 중 적어도 하나는 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함한다. 이때, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 1층 또는 2층 이상이 포함될 수 있다.

[83] 상기 화학식 1의 화합물을 포함하는 1층 이상의 유기물층은 정공주입층, 정공수송층, 발광층, 전자수송층 및 전자주입층 중 어느 하나 이상일 수 있고, 바람직하게는 발광층, 정공수송층 또는 전자수송층일 수 있다.

[84] 본 발명의 일례에 따르면, 유기 전계 발광 소자의 발광층은 호스트 재료를 포함할 수 있는데, 이때 호스트 재료로서 상기 화학식 1의 화합물을 포함할 수 있다. 이와 같이, 상기 화학식 1의 화합물을 유기 전계 발광 소자의 발광층 재료, 바람직하게는 청색, 녹색, 적색의 인광 호스트 재료로 포함할 경우, 발광층에서 정공과 전자의 결합력이 높아지기 때문에, 유기 전계 발광 소자의 효율(발광효율 및 전력효율), 수명, 휘도 및 구동전압 등이 향상될 수 있다. 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 녹색 및/또는 적색의 인광 호스트, 형광 호스트, 또는 도펀트 재료로서 유기 발광 소자에 포함될 수 있다.

[85] 본 발명에 따른 유기 전계 발광 소자의 구조는 특별히 한정되지 않으며, 예컨대 전극 간에 유기물층을 1층 또는 2층 이상 적층한 구조일 수 있다. 일례로, (i) 양극, 발광층, 음극, (ii) 양극, 정공주입층, 정공수송층, 발광층, 전자수송층,

- 전자주입층, 음극, (iii) 양극, 정공주입층, 정공수송층, 발광층, 음극 등의 구조를 들 수 있다. 구체적으로, 상기 화학식 1의 화합물은 발광층의 인광 호스트 재료로 이용될 수 있다. 상기 전자수송층 위에는 전자주입층이 추가로 적층될 수 있다.
- [86] 또한, 본 발명에 따른 유기 EL 소자는 전술한 바와 같이 양극, 1층 이상의 유기물층 및 음극이 순차적으로 적층된 구조 뿐만 아니라, 전극과 유기물층 계면에 절연층 또는 접착층이 삽입될 수 있다.
- [87] 본 발명에 따른 유기 전계 발광 소자는 상기 유기물층 중 1층 이상 (예컨대, 발광층)이 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하도록 형성하는 것을 제외하고는, 당 기술 분야에 알려져 있는 재료 및 방법을 이용하여 다른 유기물층 및 전극을 형성하여 제조될 수 있다.
- [88] 상기 유기물층은 진공 증착법이나 용액 도포법에 의하여 형성될 수 있다. 상기 용액 도포법의 예로는 스핀 코팅, 딥코팅, 닥터 블레이딩, 잉크젯 프린팅 또는 열 전사법 등이 있으나, 이들에 한정되지 않는다.
- [89] 예컨대, 기판으로는 실리콘 웨이퍼, 석영 또는 유리판, 금속판, 플라스틱 필름이나 시트 등이 사용될 수 있다.
- [90] 양극 물질로는 바나듐, 크롬, 구리, 아연, 금과 같은 금속 또는 이들의 합금; 아연산화물, 인듐산화물, 인듐 주석 산화물(ITO), 인듐 아연 산화물(IZO)과 같은 금속 산화물; ZnO:Al 또는 SnO₂:Sb와 같은 금속과 산화물의 조합; 폴리티오펜, 폴리(3-메틸티오펜), 폴리[3,4-(에틸렌-1,2-디옥시)티오펜](PEDT), 폴리피롤 및 폴리아닐린과 같은 전도성 고분자; 또는 카본블랙 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.
- [91] 음극 물질로는 마그네슘, 칼슘, 나트륨, 칼륨, 타이타늄, 인듐, 이트륨, 리튬, 가돌리늄, 알루미늄, 은, 주석, 또는 납과 같은 금속 또는 이들의 합금; LiF/Al 또는 LiO₂/Al과 같은 다층 구조 물질 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.
- [92] 또한, 정공 주입층, 정공 수송층 및 전자 수송층은 특별히 한정되는 것은 아니며, 당 업계에 알려진 통상의 물질이 사용될 수 있다.
- [93]
- [94] 이하 본 발명을 실시예를 통하여 상세히 설명하면 다음과 같다. 단, 하기 실시예는 본 발명을 예시하는 것일 뿐 본 발명이 하기 실시예에 의해 한정되는 것은 아니다.
- [95]
- [96] **[합성예 1] compound 1의 합성**
- [97] 4H-benzo[def]carbazole (3.82g, 20mmol), 1,4-dibromobenzene (2.36g, 10mmol), Pd(OAc)₂ (0.1g, 5 w%), K₃PO₄ (12.74g, 60mmol)을 Toluene 100 ml에 녹였다. Tri-t-butyl phosphine 50% toluene solution 0.4ml을 추가한 후 12시간 동안 가열 교반하였다.
- [98] TLC로 반응이 종결된 것을 확인한 후 반응액을 여과하고 dichloromethane 100

ml로 2회 추출하였다. 회전 증발기(rotary evaporator)로 용매를 제거한 다음 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 compound 1 (3.42g, 수율 75%)를 얻었다.

[99] Elemental Analysis: C, 89.45; H, 4.42; N, 6.14

[100] HRMS [M]⁺:456.5

[101]

[102] **[합성예 2] compound 2의 합성**

[103] 1,4-dibromobenzene 대신 1,3-dibromobenzene 를 사용하는 것을 제외하고는, 상기 합성예 1와 동일한 과정을 수행하여 compound 2 (수율 53%)을 얻었다.

[104]

[105] **[합성예 3] compound 3의 합성**

[106] 1,4-dibromobenzene 대신 1,3,5-tribromobenzene 를 사용하는 것을 제외하고는, 상기 합성예 1와 동일한 과정을 수행하여 compound 3 (수율 50%)을 얻었다.

[107]

[108] **[합성예 4] compound 5의 합성**

[109] 1,4-dibromobenzene 대신 1,5-dibromonaphthalene 를 사용하는 것을 제외하고는, 상기 합성예 1와 동일한 과정을 수행하여 compound 5 (수율 65%)을 얻었다.

[110]

[111] **[합성예 5] compound 6의 합성**

[112] 1,4-dibromobenzene 대신 2,6-dibromonaphthalene 를 사용하는 것을 제외하고는, 상기 합성예 1와 동일한 과정을 수행하여 compound 6 (수율 68%)을 얻었다.

[113] **[합성예 6] compound 7의 합성**

[114] 1,4-dibromobenzene 대신 4,4'-dibromo-1,1'-biphenyl를 사용하는 것을 제외하고는, 상기 합성예 1와 동일한 과정을 수행하여 compound 7 (수율 62%)을 얻었다

[115]

[116] **[합성예 7] compound 8의 합성**

[117] 1,4-dibromobenzene 대신 3,3'-dibromo-1,1'-biphenyl를 사용하는 것을 제외하고는, 상기 합성예 1와 동일한 과정을 수행하여 compound 8 (수율 65%)을 얻었다

[118]

[119] **[합성예 8] compound 9의 합성**

[120] 1,4-dibromobenzene 대신 2,2'-dibromo-1,1'-biphenyl를 사용하는 것을 제외하고는, 상기 합성예 1와 동일한 과정을 수행하여 compound 9 (수율 56%)을 얻었다

[121]

[122] **[합성예 9] compound 10의 합성**

[123] 1,4-dibromobenzene 대신 2,2'-dibromo-1,1'-biphenyl를 사용하는 것을 제외하고는, 상기 합성예 1와 동일한 과정을 수행하여 compound 10 (수율

56%)을 얻었다

[124]

[125] **[합성 예 10] compound 11의 합성**

[126] 1,4-dibromobenzene 대신 3,6-dibromo-9-phenyl-9H-carbazole 를 사용하는 것을 제외하고는, 상기 합성 예 1와 동일한 과정을 수행하여 compound 11 (수율 66%)을 얻었다

[127]

[128] **[합성 예 11] compound 13의 합성**

[129] 1,4-dibromobenzene 대신 4,6-dibromodibenzo[b,d]furan를 사용하는 것을 제외하고는, 상기 합성 예 1와 동일한 과정을 수행하여 compound 13 (수율 71%)을 얻었다

[130]

[131] **[합성 예 12] compound 14의 합성**

[132] 1,4-dibromobenzene 대신 2,8-dibromodibenzo[b,d]furan를 사용하는 것을 제외하고는, 상기 합성 예 1와 동일한 과정을 수행하여 compound 14 (수율 75%)을 얻었다

[133]

[134] **[합성 예 13] compound 16의 합성**

[135] 1,4-dibromobenzene 대신 3,7-dibromodibenzo[b,d]thiophene를 사용하는 것을 제외하고는, 상기 합성 예 1와 동일한 과정을 수행하여 compound 16 (수율 55%)을 얻었다

[136]

[137] **[합성 예 14] compound 17의 합성**

[138] 4H-benzo[def]carbazole (3.82g, 20mmol), 2-bromodibenzo[b,d]furan (4.94 g, 20 mmol)을 톨루엔 500 ml에 녹인 다음 $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (0.5g, 0.5mmol)을 질소하에 투입하였다. 이후, NaOtBu (6g, 60 mmol) 을 넣고, (t-Bu)₃P (0.3 ml, 0.3mmol)을 상기 반응액에 투입한 다음 혼합물을 15시간 동안 환류 교반하였다.

[139] TLC로 반응이 종결되는 것을 확인한 후 상온으로 식혔다. 반응 종료 후 증류수를 넣고 다이클로로메탄으로 추출하였다. 얻어진 유기층을 MgSO_4 로 건조시키고 감압 증류한 다음 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 compound 17 (5.7g, 수율 80%)을 얻었다.

[140]

[141] **[합성 예 15] compound 18의 합성**

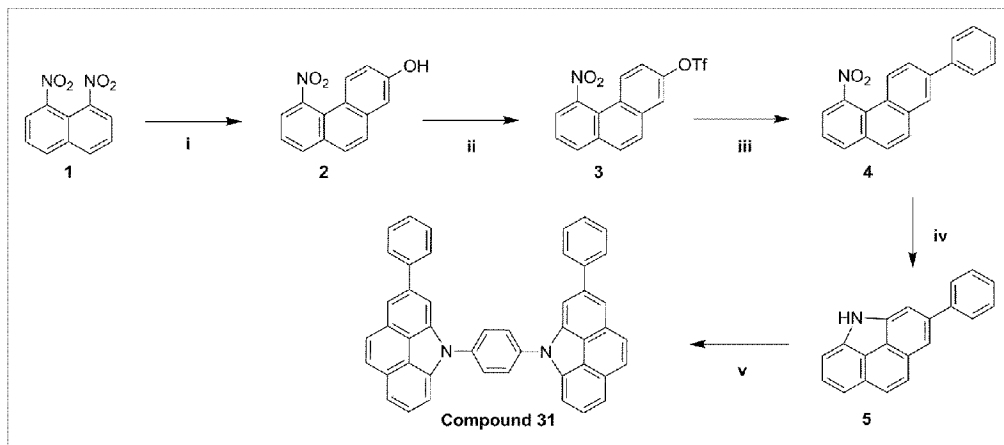
[142] 2-bromodibenzo[b,d]furan 대신 2-bromodibenzo[b,d]thiophene 를 사용하는 것을 제외하고는, 상기 합성 예 17와 동일한 과정을 수행하여 compound 18 (수율 70%)을 얻었다

[143]

[144] **[합성 예 16] compound 20의 합성**

- [145] 2-bromodibenzo[b,d]furan 대신 4-bromo-2,6-diphenylpyrimidine 를 사용하는 것을 제외하고는, 상기 합성예 17와 동일한 과정을 수행하여 compound 20 (수율 73%)을 얻었다
- [146]
- [147] **[합성예 17] compound 21의 합성**
- [148] 2-bromodibenzo[b,d]furan 대신 2-bromo-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine 를 사용하는 것을 제외하고는, 상기 합성예 17와 동일한 과정을 수행하여 compound 21 (수율 76%)을 얻었다
- [149]
- [150] **[합성예 18] compound 22의 합성**
- [151] 2-bromodibenzo[b,d]furan 대신 4-bromo-5'-phenyl-1,1':3,1''-terphenyl를 사용하는 것을 제외하고는, 상기 합성예 17와 동일한 과정을 수행하여 compound 22 (수율 76%)을 얻었다
- [152]
- [153] **[합성예 19] compound 23의 합성**
- [154] 2-bromodibenzo[b,d]furan 대신 4-(4-bromophenyl)-2,6-diphenylpyrimidine 를 사용하는 것을 제외하고는, 상기 합성예 17와 동일한 과정을 수행하여 compound 23 (수율 73%)을 얻었다
- [155]
- [156] **[합성예 20] compound 24의 합성**
- [157] 2-bromodibenzo[b,d]furan 대신 2-(4-bromophenyl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine를 사용하는 것을 제외하고는, 상기 합성예 17와 동일한 과정을 수행하여 compound 24 (수율 55%)을 얻었다
- [158]
- [159] **[합성예 21] compound 26의 합성**
- [160] 2-bromodibenzo[b,d]furan 대신 N-([1,1'-biphenyl]-4-yl)-N-(4'-bromo-[1,1'-biphenyl]-4-yl)-9,9-dimethyl-9H-fluoren-2-amine를 사용하는 것을 제외하고는, 상기 합성예 17와 동일한 과정을 수행하여 compound 26 (수율 63%)을 얻었다
- [161]
- [162] **[합성예 22] compound 29의 합성**
- [163] 2-bromodibenzo[b,d]furan 대신 4-(4'-bromo-[1,1'-biphenyl]-4-yl)dibenzo[b,d]furan를 사용하는 것을 제외하고는, 상기 합성예 17와 동일한 과정을 수행하여 compound 29 (수율 60%)을 얻었다
- [164]
- [165] **[합성예 23] compound 31의 합성**

[166]



[167] [step 1] 중간체 2의 합성

[168] danishefsky diene (5.00g, 29mmol), 1,8-dinitronaphthalene(12.64g, 58mmol), Benzene 30ml를 N₂ 대기하에서 Sealed tube에 투입하고 튜브 마개를 잘 막은 후 150°C에서 80시간동안 가열 교반하였다. 반응을 실온으로 식힌 후 benzene을 감압증류하여 제거하였다. 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 중간체 2(2.77g, 수율40%)를 얻었다.

[169]

[170] [step 2] 중간체 3의 합성

[171] 중간체 2 (2.77g, 11.6mmol), dry pyridine(2.8g, 35mmol)을 Dry MC 100mL 에 녹였다. 5-10°C를 유지하면서 triflic anhydride (7.43g, 26 mmol)을 N₂ 대기하, 실온에서 천천히 적가한 후 17시간동안 교반하였다. TLC로 반응이 종결된 것을 확인한 후 반응액을 여과하고 다이클로로메탄 100 ml로 2회 추출하였다. 회전 증발기(rotary evaporator)로 용매를 제거한 다음 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 중간체 3(3.87g, 수율90%)를 얻었다.

[172]

[173] [step 3] 중간체 4의 합성

[174] phenyl boronic acid (2.74g, 12.52mmol), 5-nitrophenanthren-2-yl trifluoromethanesulfonate (3.87g, 10.43mmol), Pd(PPh₃)₄ (0.19g, 5 w%)을 플라스크에 넣었다. Toluene 100 ml와 THF 50 ml를 넣고 K₂CO₃ (4.32g, 31.3mmol)을 증류수 30 ml에 녹인 수용액을 첨가한 후 12시간 동안 가열 교반하였다.

[175] TLC로 반응이 종결된 것을 확인한 후 반응액을 여과하고 에틸아세테이트 100 ml로 2회 추출하였다. 회전 증발기(rotary evaporator)로 용매를 제거한 다음 MeOH을 이용하여 결정화하여 중간체 4 (2.37g, 수율 76%)를 얻었다.

[176]

[177] [step 4] 중간체 5의 합성

[178] 중간체 4 (2.37g, 수율 76%)을 실온에서 1,2-dichlorobenzene 100 ml에 첨가하였다. 여기에 triphenyl phosphine (6.23g, 23.8mmol)을 서서히 첨가하고

8시간 동안 가열교반하였다. 이후, 용매를 감압하여 증발시키고 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 중간체 5 (1.27g, 수율60%)를 얻었다.

[179]

[180] [step 5] compound 31의 합성

[181] 중간체 5 (1.27g, 4.76mmol), 1,4-dibromobenzene (0.56g, 2.38mmol), Pd(OAc)₂ (0.06g, 5 w%), K₃PO₄ (3.03g, 14.3mmol)을 Toluene 30 ml에 녹였다. Tri-t-butyl phosphine 50% toluene solution 0.3ml을 추가한 후 12시간 동안 가열 교반하였다.

[182] TLC로 반응이 종결된 것을 확인한 후 반응액을 여과하고 dichloromethane 100 ml로 2회 추출하였다. 회전 증발기(rotary evaporator)로 용매를 제거한 다음 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 compound 31 (1.08g, 수율 75%)를 얻었다.

[183] Elemental Analysis: C, 90.76; H, 4.64; N, 4.60

[184] HRMS [M]⁺:608.7

[185]

[186] **[합성예 24] compound 32의 합성**

[187] 1,4-dibromobenzene 대신 1,3-dibromobenzene 를 사용하는 것을 제외하고는, 상기 합성예 23의 step 5와 동일한 과정을 수행하여 compound 32 (수율 58%)을 얻었다.

[188]

[189] **[합성예 25] compound 33의 합성**

[190] 1,4-dibromobenzene 대신 1,3,5-tribromobenzene 를 사용하는 것을 제외하고는, 상기 합성예 23의 step 5와 동일한 과정을 수행하여 compound 33 (수율 53%)을 얻었다.

[191]

[192] **[합성예 26] compound 34의 합성**

[193] 합성예 23의 [step 3]에서 phenyl boronic acid대신 4,4,5,5-tetramethyl-2-(naphthalen-1-yl)-1,3,2-dioxaborolane 를 사용하여 2-(naphthalen-1-yl)-4H-benzo[def]carbazole 을 합성하고 [step 5]에서 1,4-dibromobenzene 대신 1,4-dibromonaphthalene 를 사용하는 것을 제외하고는, 상기 합성예 23과 동일한 과정을 수행하여 compound 34 (수율 53%)을 얻었다.

[194]

[195] **[합성예 27] compound 35의 합성**

[196] 합성예 23의 [step 3]에서 phenyl boronic acid 대신 4,4,5,5-tetramethyl-2-(naphthalen-1-yl)-1,3,2-dioxaborolane 를 사용하여 2-(naphthalen-1-yl)-4H-benzo[def]carbazole 을 합성하고 [step 5]에서 1,4-dibromobenzene 대신 1,5-dibromonaphthalene 를 사용하는 것을 제외하고는, 상기 합성예 23과 동일한 과정을 수행하여 compound 35 (수율 50%)을 얻었다.

[197]

[198] **[합성예 28] compound 36의 합성**

- [199] 합성예 23의 [step 3]에서 phenyl boronic acid 대신 pyridin-3-ylboronic acid를 사용하여 2-(pyridin-3-yl)-4H-benzo[def]carbazole을 합성하고 [step 5]에서 1,4-dibromobenzene 대신 2,6-dibromonaphthalene를 사용하는 것을 제외하고는, 상기 합성예 23과 동일한 과정을 수행하여 compound 36 (수율 73%)을 얻었다.
- [200]
- [201] **[합성예 29] compound 38의 합성**
- [202] 1,4-dibromobenzene 대신 3,3'-dibromo-1,1'-biphenyl을 사용하는 것을 제외하고는, 상기 합성예 1과 동일한 과정을 수행하여 compound 38 (수율 58%)을 얻었다.
- [203]
- [204] **[합성예 30] compound 40의 합성**
- [205] 합성예 23의 [step 3]에서 phenyl boronic acid 대신 pyridin-3-ylboronic acid를 사용하여 2-(pyridin-3-yl)-4H-benzo[def]carbazole을 합성하고 [step 5]에서 1,4-dibromobenzene 대신 2,7-dibromo-9,9-dimethyl-9H-fluorene를 사용하는 것을 제외하고는, 상기 합성예 1과 동일한 과정을 수행하여 compound 40 (수율 80%)을 얻었다.
- [206]
- [207] **[합성예 31] compound 41의 합성**
- [208] 합성예 23의 [step 3]에서 phenyl boronic acid 대신 pyridin-3-ylboronic acid를 사용하여 2-(pyridin-3-yl)-4H-benzo[def]carbazole을 합성하고 [step 5]에서 1,4-dibromobenzene 대신 3,6-dibromo-9-phenyl-9H-carbazole를 사용하는 것을 제외하고는, 상기 합성예 1과 동일한 과정을 수행하여 compound 41 (수율 75%)을 얻었다.
- [209]
- [210] **[합성예 32] compound 44의 합성**
- [211] 합성예 23의 [step 3]에서 phenyl boronic acid 대신 pyridin-3-ylboronic acid를 사용하여 2-(pyridin-3-yl)-4H-benzo[def]carbazole을 합성하고 [step 5]에서 1,4-dibromobenzene 대신 2,8-dibromodibenzo[b,d]furan를 사용하는 것을 제외하고는, 상기 합성예 1과 동일한 과정을 수행하여 compound 44 (수율 80%)을 얻었다.
- [212]
- [213] **[합성예 33] compound 46의 합성**
- [214] 합성예 23의 [step 3]에서 phenyl boronic acid 대신 pyridin-3-ylboronic acid를 사용하여 2-(pyridin-3-yl)-4H-benzo[def]carbazole을 합성하고 [step 5]에서 1,4-dibromobenzene 대신 3,7-dibromodibenzo[b,d]thiophene를 사용하는 것을 제외하고는, 상기 합성예 1과 동일한 과정을 수행하여 compound 46 (수율 60%)을 얻었다.
- [215]

[216] **[합성 예 34] compound 49의 합성**

[217] 2-phenyl-4H-benzo[def]carbazole (2.67g, 10mmol), 5'-bromo-1,1':3',1''-terphenyl (3.09g, 10mmol), Pd(OAc)₂ (0.13g, 5w%), K₃PO₄ (6.36g, 30mmol)을 Toluene 50 ml에 녹였다. Tri-t-butyl phosphine 50% toluene solution 0.3ml 을 추가한 후 12시간 동안 가열 교반하였다.

[218] TLC로 반응이 종결된 것을 확인한 후 반응액을 여과하고 dichloromethane 100 ml로 2회 추출하였다. 회전 증발기(rotary evaporator)로 용매를 제거한 다음 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 compound 49 (3.96g, 수율 80%)를 얻었다.

[219] Elemental Analysis: C, 92.09; H, 5.08; N, 2.83

[220] HRMS [M]⁺:495.2

[221]

[222] **[합성 예 35] compound 51의 합성**

[223] 5'-bromo-1,1':3',1''-terphenyl 대신 2-bromo-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine을 사용하는 것을 제외하고는, 상기 합성 예 34과 동일한 과정을 수행하여 compound 51 (수율 69%)를 얻었다.

[224]

[225] **[합성 예 36] compound 52의 합성**

[226] 5'-bromo-1,1':3',1''-terphenyl 대신 4-bromo-5'-phenyl-1,1':3',1''-terphenyl을 사용하는 것을 제외하고는, 상기 합성 예 34과 동일한 과정을 수행하여 compound 52 (수율 63%)를 얻었다.

[227]

[228] **[합성 예 37] compound 53의 합성**

[229] 5'-bromo-1,1':3',1''-terphenyl 대신 4-(4-bromophenyl)-2,6-diphenylpyrimidine을 사용하는 것을 제외하고는, 상기 합성 예 34과 동일한 과정을 수행하여 compound 53 (수율 69%)를 얻었다.

[230]

[231] **[합성 예 38] compound 54의 합성**

[232] 5'-bromo-1,1':3',1''-terphenyl 대신 2-(4-bromophenyl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine을 사용하는 것을 제외하고는, 상기 합성 예 34과 동일한 과정을 수행하여 compound 54 (수율 73%)를 얻었다.

[233]

[234] **[합성 예 39] compound 56의 합성**

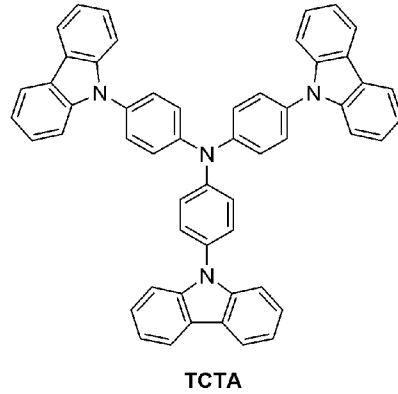
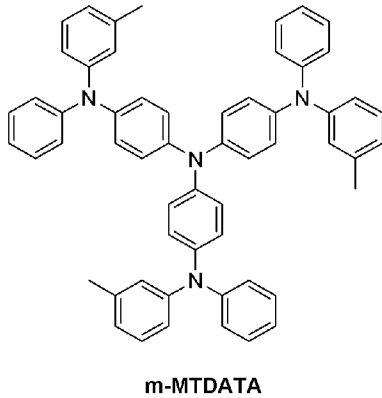
[235] 5'-bromo-1,1':3',1''-terphenyl 대신 N-([1,1'-biphenyl]-4-yl)-N-(4'-bromo-[1,1'-biphenyl]-4-yl)-9,9-dimethyl-9H-fluoren-2-amine을 사용하는 것을 제외하고는, 상기 합성 예 34과 동일한 과정을 수행하여 compound 56 (수율 81%)를 얻었다.

[236]

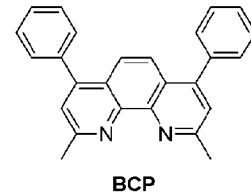
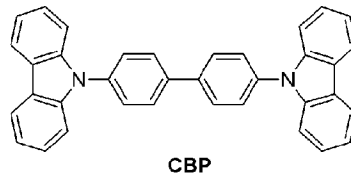
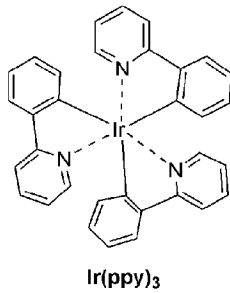
[237] **[합성 예 40] compound 57의 합성**

- [238] 5'-bromo-1,1':3',1''-terphenyl 대신
N-([1,1'-biphenyl]-4-yl)-N-(4'-bromo-[1,1'-biphenyl]-4-yl)naphthalen-2-amine을
사용하는 것을 제외하고는, 상기 합성예 34과 동일한 과정을 수행하여 compound
57 (수율 75%)를 얻었다.
- [239]
- [240] **[합성예 41] compound 59의 합성**
- [241] 5'-bromo-1,1':3',1''-terphenyl 대신
4-(4'-bromo-[1,1'-biphenyl]-4-yl)dibenzo[b,d]furan을 사용하는 것을 제외하고는,
상기 합성예 34과 동일한 과정을 수행하여 compound 59 (수율 69%)를 얻었다.
- [242]
- [243] **[합성예 42] compound 60의 합성**
- [244] 5'-bromo-1,1':3',1''-terphenyl 대신
2-(4'-bromo-[1,1'-biphenyl]-4-yl)dibenzo[b,d]thiophene을 사용하는 것을
제외하고는, 상기 합성예 34과 동일한 과정을 수행하여 compound 60 (수율
74%)를 얻었다
- [245]
- [246] **[합성예 43] compound 67의 합성**
- [247] 2-(pyridin-4-yl)-4H-benzo[def]carbazole와 4,4'-dibromo-1,1'-biphenyl를 사용하는
것을 제외하고는, 상기 합성예 1과 동일한 과정을 수행하여 compound 67 (수율
72%)을 얻었다.
- [248]
- [249] **[합성예 44] compound 71의 합성**
- [250] 합성예 43에서 4,4'-dibromo-1,1'-biphenyl 대신
3,6-dibromo-9-phenyl-9H-carbazole 를 사용하는 것을 제외하고는, 상기 합성예 1과
동일한 과정을 수행하여 compound 71 (수율 70%)을 얻었다.
- [251]
- [252] **[실시예 1 ~ 23] 녹색 유기 EL 소자의 제작**
- [253] 앞서 합성한 화합물을 통상적으로 알려진 방법으로 고순도 승화정제를 한 후
아래의 과정에 따라 녹색 유기 EL 소자를 제작하였다.
- [254] 먼저, ITO (Indium tin oxide)가 1500Å 두께로 박막 코팅된 유리 기판을 증류수
초음파로 세척하였다. 증류수 세척이 끝나면 이소프로필 알코올, 아세톤, 메탄올
등의 용제로 초음파 세척을 하고 건조시킨 후 UV OZONE 세정기 (Power sonic
405, 화신테크)로 이송시킨 다음 UV를 이용하여 상기 기판을 5분간 세정하고
진공 증착기로 기판을 이송하였다.
- [255] 이렇게 준비된 ITO 투명 전극 위에 m-MTDATA (60 nm)/TCTA (80 nm)/ 본
발명의 화합물 + 10 % Ir(ppy)₃ (300nm)/BCP (10 nm)/Alq₃ (30 nm)/LiF (1 nm)/Al
(200 nm) 순으로 적층하여 유기 EL 소자를 제작하였다.
- [256] m-MTDATA, TCTA, Ir(ppy)₃, CBP 및 BCP의 구조는 하기와 같다.

[257]



[258]



[259]

[260] **[비교예 1] 녹색 유기 EL 소자의 제작**

[261] 발광층 형성시 발광 호스트 물질로서 본 발명의 화합물 대신 CBP를 사용하는 것을 제외하고는 실시예 1과 동일한 과정으로 녹색 유기 EL 소자를 제작하였다.

[262]

[263] **[평가예 1]**

[264] 실시예 1~23 및 비교예 1에서 제작한 각각의 녹색 유기 EL 소자에 대하여 전류밀도 10 mA/cm²에서의 구동전압, 전류효율 및 발광 피크를 측정하고, 그 결과를 하기 표 1에 나타내었다.

[265] 표 1

[Table 1]

샘플	호스트	구동 전압(V)	EL 피크(nm)	전류 효율(cd/A)
실시예 1	Compd 1	6.61	520	40.3
실시예 2	Compd 3	6.25	510	40.4
실시예 3	Compd 6	6.21	514	40.6
실시예 4	Compd 7	6.40	514	41.1
실시예 5	Compd 8	6.27	511	42.2
실시예 6	Compd 13	6.20	520	43.1
실시예 7	Compd 14	6.56	532	42.1
실시예 8	Compd 16	6.67	528	40.7
실시예 9	Compd 18	6.71	566	41.8
실시예 10	Compd 22	6.83	521	41.2
실시예 11	Compd 24	6.99	514	40.3
실시예 12	Compd 26	6.63	513	41.1
실시예 13	Compd 31	6.52	516	40.2
실시예 14	Compd 33	6.71	517	41.8
실시예 15	Compd 34	6.33	515	42.9
실시예 16	Compd 35	6.32	520	43.0
실시예 17	Compd 40	6.32	530	42.3
실시예 18	Compd 41	6.41	533	41.1
실시예 19	Compd 46	6.42	543	41.9
실시예 20	Compd 51	6.11	521	42.1
실시예 21	Compd 53	6.21	511	41.6
실시예 22	Compd 57	6.22	510	41.9
실시예 23	Compd 60	6.32	513	41.3
비교예 1	CBP	6.77	516	38.2

[266] 상기 표1에 나타낸 바와 같이, 본 발명에 따른 화합물을 녹색 유기 EL 소자의 발광층으로 사용하는 실시예 1 내지 23의 녹색 유기 EL소자는 종래 CBP를 사용하는 비교예 1의 녹색 유기 EL 소자와 비교해 볼 때 효율 및 구동전압 면에서 보다 우수한 성능을 나타내는 것을 알 수 있다.

[267]

[268] **[실시예 24~37] 청색 유기 EL 소자의 제조**

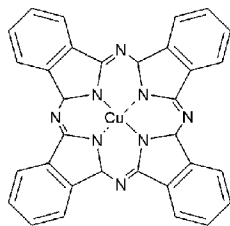
[269] 앞서 합성한 화합물을 통상적으로 알려진 방법으로 고순도 승화정제를 한 후 아래의 과정에 따라 청색 유기 EL 소자를 제작하였다.

[270] 먼저, ITO (Indium tin oxide)가 1500Å 두께로 박막 코팅된 유리 기판을 증류수 초음파로 세척하였다. 증류수 세척이 끝나면 이소프로필 알코올, 아세톤, 메탄올 등의 용제로 초음파 세척을 하고 건조시킨 후 UV OZONE 세정기 (Power sonic 405, 화신테크)로 이송시킨 다음 UV를 이용하여 상기 기판을 5분간 세정하고 진공 증착기로 기판을 이송하였다.

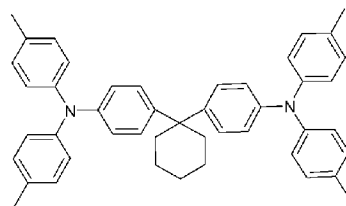
[271] 이렇게 준비된 ITO 투명 전극 위에 CuPc (10 nm)/ TPAC (30 nm)/ 본 발명의 화합물 + 7 % Flrpic (30nm)/ Alq₃ (30 nm)/ LiF (0.2 nm)/Al (150 nm) 순으로 적층하여 유기 EL 소자를 제작하였다.

[272] CuPc, TPAC, Flrpic의 구조는 하기와 같다.

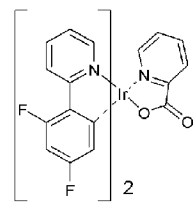
[273]



CuPc



TPAC



Flrpic

[274]

[275] **[비교예 2] 유기 EL 소자의 제작**

[276] 발광층 형성시 발광 호스트 물질로서 본 발명의 화합물 대신 CBP를 사용하는 것을 제외하고는, 상기 실시예 24와 동일한 과정으로 청색 유기 EL 소자를 제작하였다.

[277]

[278] **[평가예 2]**

[279] 실시예 24~37 및 비교예 2에서 제작한 각각의 청색 유기 EL 소자에 대하여 전류밀도 10 mA/cm²에서의 구동전압, 전류효율 및 발광 피크를 측정하고, 그 결과를 하기 표 2에 나타내었다.

[280] 표 2

[Table 2]

샘플	호스트	구동 전압(V)	EL 피크(nm)	전류 효율(cd/A)
실시예 24	Compd 2	7.33	473	5.77
실시예 25	Compd 5	7.23	469	5.96
실시예 26	Compd 11	7.23	480	6.61
실시예 27	Compd 17	7.23	477	5.89
실시예 28	Compd 20	7.22	471	6.91
실시예 29	Compd 21	7.31	473	6.44
실시예 30	Compd 29	7.36	468	5.99
실시예 31	Compd 32	7.23	466	5.95
실시예 32	Compd 36	7.38	469	6.01
실시예 33	Compd 44	7.66	464	6.32
실시예 34	Compd 52	7.75	473	6.32
실시예 35	Compd 59	7.32	476	6.12
실시예 36	Compd 63	7.11	488	6.77
실시예 37	Compd 69	7.66	471	5.97
비교예 2	CBP	7.80	474	5.80

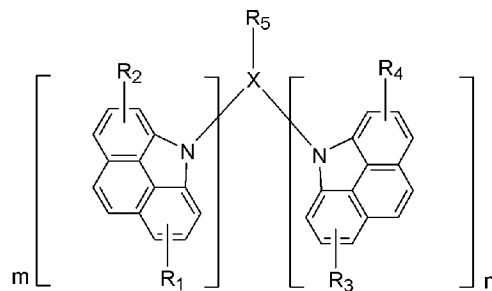
- [281] 상기 표2에 나타낸 바와 같이, 본 발명에 따른 화합물을 청색 유기 EL 소자의 발광층으로 사용하는 실시예 24~37의 청색 유기 EL소자는 종래 CBP를 사용한 비교예 2의 청색 유기 EL 소자와 비교해 볼 때 효율 및 구동전압 면에서 보다 우수한 성능을 나타내는 것을 알 수 있다.

청구범위

[청구항 1]

하기 화학식 1로 표시되는 화합물:

[화학식 1]



상기 화학식 1에서,

m 은 0~2이고; n 은 0~2이고; $m+n$ 은 1 이상이며,

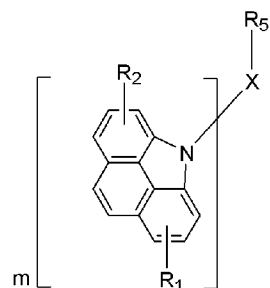
m 또는 n 이 0인 경우, X 는 치환 또는 비치환된 $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬기, 치환 또는 비치환된 $C_2\sim C_{40}$ 의 알케닐기, 치환 또는 비치환된 $C_2\sim C_{40}$ 의 알키닐기, 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴기, 치환 또는 비치환된 핵원자수 5 내지 40의 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬옥시기, 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴아민기, 치환 또는 비치환된 $C_3\sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬실릴기, 치환 또는 비치환된 $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬보론기, 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴보론기, 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴포스핀기, 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴포스핀옥사이드기 및 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴실릴기로 이루어진 군으로부터 선택되며, m 과 n 이 0이 아닌 경우, X 는 단일결합이거나 또는 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴렌기, 및 치환 또는 비치환된 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴렌기로 이루어진 군에서 선택되고,

R_1 내지 R_5 은 서로 동일하거나 또는 상이하며, 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 시아노, 치환 또는 비치환된 $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬기, 치환 또는 비치환된 $C_2\sim C_{40}$ 의 알케닐기, 치환 또는 비치환된 $C_2\sim C_{40}$ 의 알키닐기, 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴기, 치환 또는 비치환된 핵원자수 5 내지 40의 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬옥시기, 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴아민기, 치환 또는 비치환된 $C_3\sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬실릴기, 치환 또는 비치환된 $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬보론기, 치환 또는

비치환된 $C_6 \sim C_{40}$ 의 아릴보론기, 치환 또는 비치환된 $C_6 \sim C_{40}$ 의 아릴포스핀기, 치환 또는 비치환된 $C_6 \sim C_{40}$ 의 아릴포스핀옥사이드기, 및 치환 또는 비치환된 $C_6 \sim C_{40}$ 의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택되며,
 상기 X 및 R_1 내지 R_5 에서, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_2 \sim C_{40}$ 의 알케닐기, $C_2 \sim C_{40}$ 의 알키닐기, $C_6 \sim C_{40}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 40의 헤테로아릴기, $C_6 \sim C_{40}$ 의 아릴옥시기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬옥시기, $C_6 \sim C_{40}$ 의 아릴아민기, $C_3 \sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬실릴기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬보론기, $C_6 \sim C_{40}$ 의 아릴보론기, $C_6 \sim C_{40}$ 의 아릴포스핀기, $C_6 \sim C_{40}$ 의 아릴포스핀옥사이드기, $C_6 \sim C_{40}$ 의 아릴실릴기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴렌기 및 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴렌기는 각각 독립적으로 중수소, 할로젠, 시아노기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_2 \sim C_{40}$ 의 알케닐기, $C_2 \sim C_{40}$ 의 알키닐기, $C_6 \sim C_{40}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 40의 헤테로아릴기, $C_6 \sim C_{40}$ 의 아릴옥시기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬옥시기, $C_6 \sim C_{40}$ 의 아릴아민기, $C_3 \sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬실릴기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬보론기, $C_6 \sim C_{40}$ 의 아릴보론기, $C_6 \sim C_{40}$ 의 아릴포스핀기, $C_6 \sim C_{40}$ 의 아릴포스핀옥사이드기 및 $C_6 \sim C_{40}$ 의 아릴실릴기로 이루어진 군으로부터 선택되는 하나 이상의 치환기로 치환될 수 있다.
 제1항에 있어서, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 하기 화학식 2로 표시되는 것을 특징으로 하는 화합물:

[청구항 2]

[화학식 2]



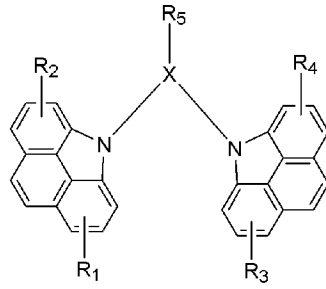
상기 식에서,
 X는 치환 또는 비치환된 $C_6 \sim C_{40}$ 의 아릴기, 및 치환 또는 비치환된 핵원자수 5 내지 40의 헤테로아릴기로 이루어진 군으로부터 선택되며,

$R_1 \sim R_5$ 은 각각 제1항에서 정의된 바와 같으며, m은 1 또는 2이다.

[청구항 3]

제1항에 있어서, 상기 화학식 1의 화합물은 하기 화학식 3으로 표시되는 것을 특징으로 하는 화합물:

[화학식 3]



상기 식에서,

X는 치환 또는 비치환된 C₆~C₆₀의 아릴렌기, 및 치환 또는 비치환된 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴렌기로 이루어진 군에서 선택되고,

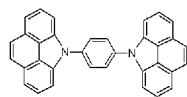
R₁~R₅은 각각 제1항에서 정의된 바와 같다.

[청구항 4]

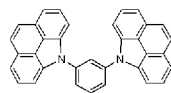
제1항에 있어서, 상기 R₁ 내지 R₅는 서로 동일하거나 또는 상이하며, 각각 독립적으로 수소, 치환 또는 비치환된 C₆~C₄₀의 아릴기, 및 치환 또는 비치환된 핵원자수 5 내지 40의 헤테로아릴기로 이루어진 군에서 선택되는 것을 특징으로 하는 화합물.

[청구항 5]

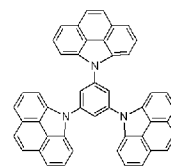
제1항에 있어서, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 하기 화합물 군으로부터 선택되는 것을 특징으로 하는 화합물.



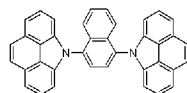
Compd 1



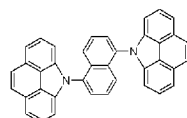
Compd 2



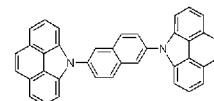
Compd 3



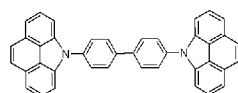
Compd 4



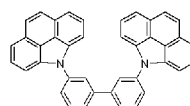
Compd 5



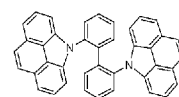
Compd 6



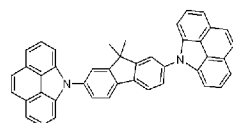
Compd 7



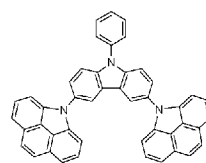
Compd 8



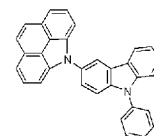
Compd 9



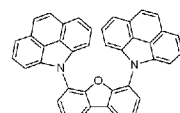
Compd 10



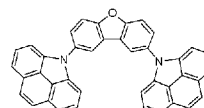
Compd 11



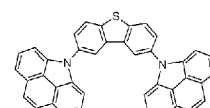
Compd 12



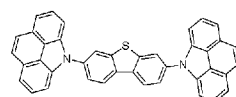
Compd 13



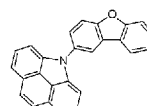
Compd 14



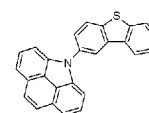
Compd 15



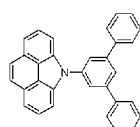
Compd 16



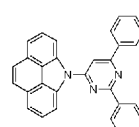
Compd 17



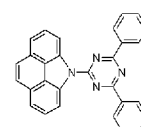
Compd 18



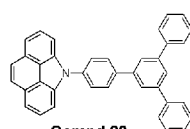
Compd 19



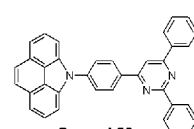
Compd 20



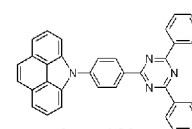
Compd 21



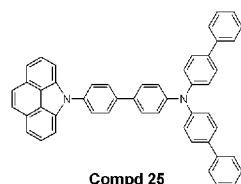
Compd 22



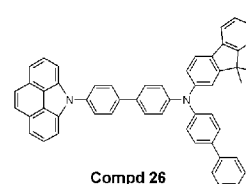
Compd 23



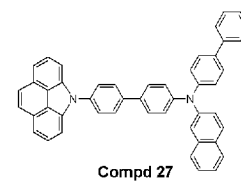
Compd 24



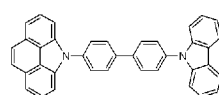
Compd 25



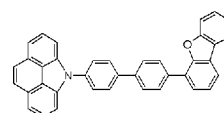
Compd 26



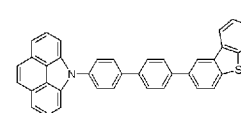
Compd 27



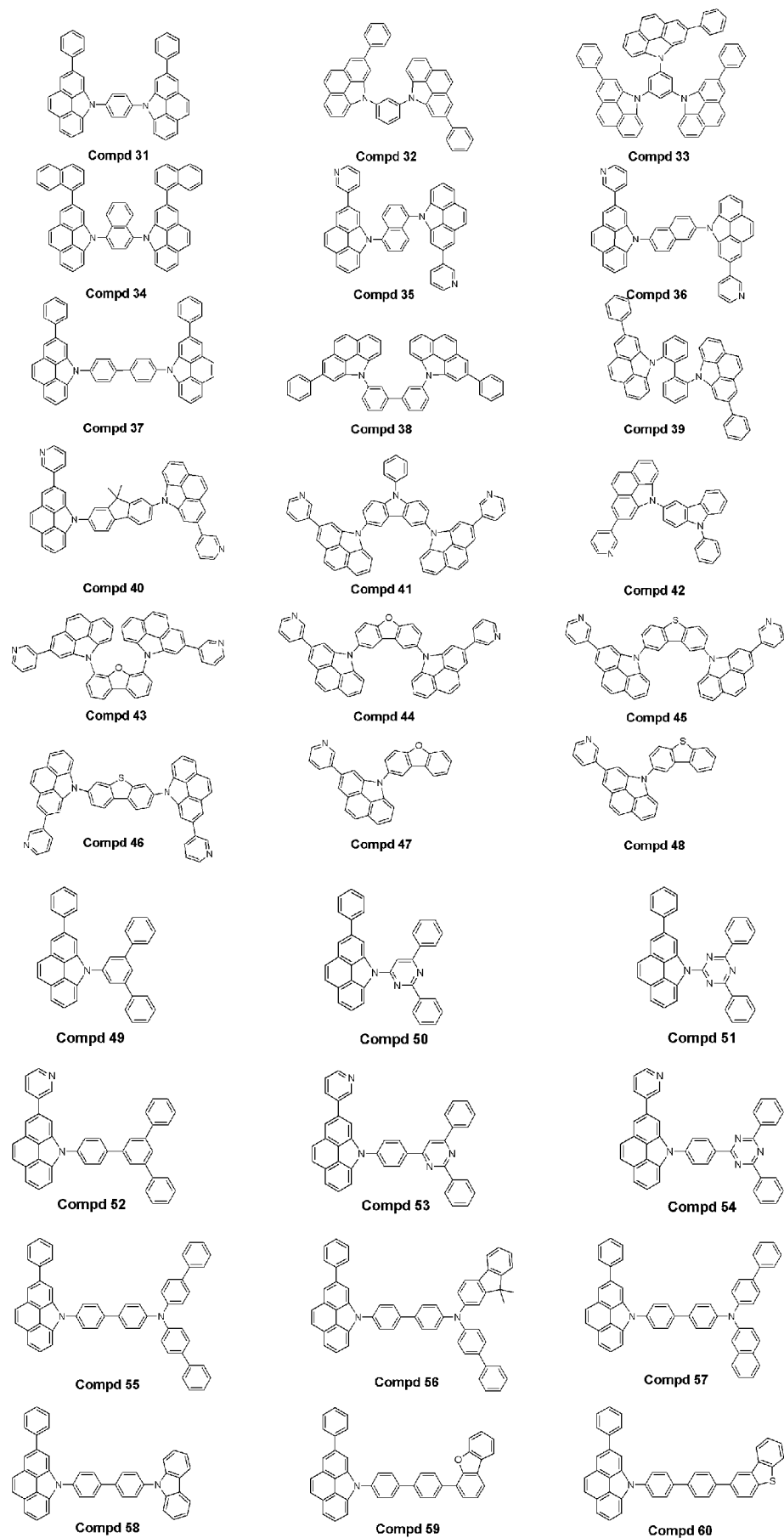
Compd 28

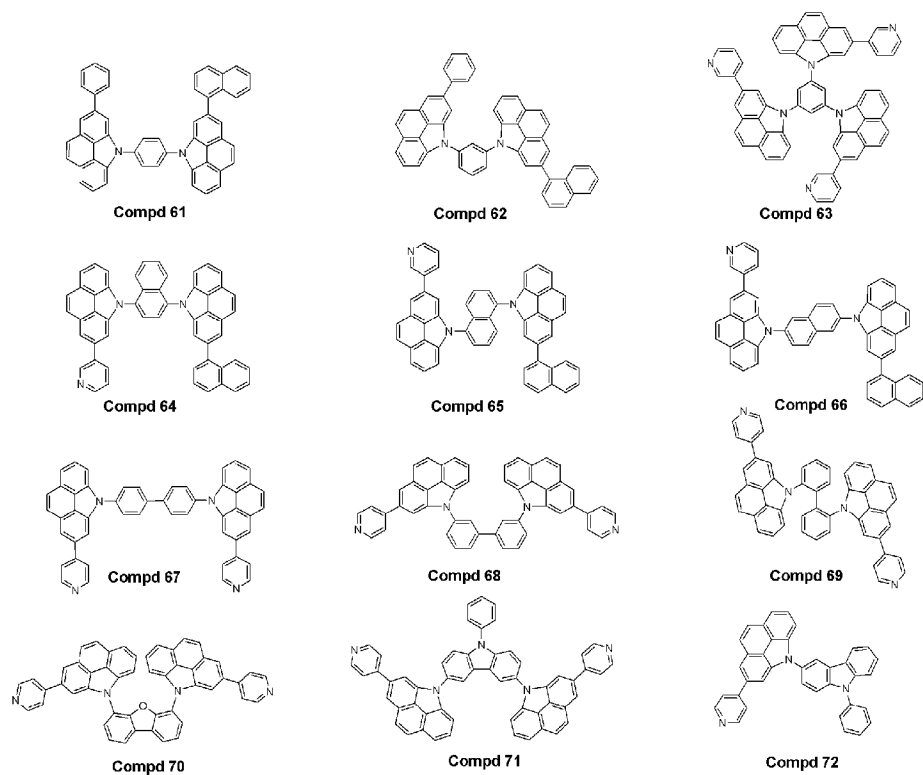


Compd 29



Compd 30





[청구항 6]

양극, 음극, 및 상기 양극과 음극 사이에 개재(介在)된 1층 이상의 유기물층을 포함하는 유기 전계 발광 소자로서,
상기 유기물층 중에서 적어도 하나는 제1항 내지 제5항 중 어느 한 항에 기재된 화합물을 포함하는 것을 특징으로 하는 유기 전계 발광 소자.

[청구항 7]

제6항에 있어서, 상기 화합물은 발광층, 전자 수송층 및 정공 수송층으로 이루어진 균으로부터 선택된 적어도 하나의 층에 포함되는 것을 특징으로 하는 유기 전계 발광 소자.

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/KR2014/012818**A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER*****C07D 403/10(2006.01)i, C07D 403/14(2006.01)i, C09K 11/06(2006.01)i, H01L 51/50(2006.01)i***

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

B. FIELDS SEARCHED

Minimum documentation searched (classification system followed by classification symbols)

C07D 403/10; C07D 409/14; C08G 61/12; C07D 209/82; C07D 495/04; C09K 11/06; H01L 51/50; C07D 209/86; C08G 73/00; C07D 401/14; C07D 403/14

Documentation searched other than minimum documentation to the extent that such documents are included in the fields searched

Korean Utility models and applications for Utility models: IPC as above

Japanese Utility models and applications for Utility models: IPC as above

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

eKOMPASS (KIPO internal) & Keywords: organic light emitting device, benzo[def]carbazole

C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
A	JP 2011-006340 A (CHISSO CORP) 13 January 2011 See the entire description	1-7
A	KR 10-2011-0044587 A (DUKSAN HIGH METAL CO., LTD.) 29 April 2011 See the entire description	1-7
A	KR 10-2012-0112424 A (JNC CORPORATION) 11 October 2012 See the entire description	1-7
A	KR 10-2013-0021185 A (SAMSUNG DISPLAY CO., LTD.) 05 March 2013 See the entire description	1-7
A	KR 10-2013-0020780 A (MERCK PATENT GMBH) 28 February 2013 See the entire description	1-7



Further documents are listed in the continuation of Box C.



See patent family annex.

* Special categories of cited documents:

"A" document defining the general state of the art which is not considered to be of particular relevance

"E" earlier application or patent but published on or after the international filing date

"L" document which may throw doubts on priority claim(s) or which is cited to establish the publication date of another citation or other special reason (as specified)

"O" document referring to an oral disclosure, use, exhibition or other means

"P" document published prior to the international filing date but later than the priority date claimed

"I" later document published after the international filing date or priority date and not in conflict with the application but cited to understand the principle or theory underlying the invention

"X" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered novel or cannot be considered to involve an inventive step when the document is taken alone

"Y" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered to involve an inventive step when the document is combined with one or more other such documents, such combination being obvious to a person skilled in the art

"&" document member of the same patent family

Date of the actual completion of the international search

21 APRIL 2015 (21.04.2015)

Date of mailing of the international search report

21 APRIL 2015 (21.04.2015)

Name and mailing address of the ISA/KR

Korean Intellectual Property Office
Government Complex-Daejeon, 189 Seonsa-ro, Daejeon 302-701,
Republic of Korea

Facsimile No. 82-42-472-7140

Authorized officer

Telephone No.

INTERNATIONAL SEARCH REPORT
Information on patent family members

International application No.

PCT/KR2014/012818

Patent document cited in search report	Publication date	Patent family member	Publication date
JP 2011-006340 A	13/01/2011	NONE	
KR 10-2011-0044587 A	29/04/2011	KR 10-1219481 B1	15/01/2013
		KR 10-1219485 B1	11/01/2013
		WO 2011-037429 A2	31/03/2011
		WO 2011-037429 A3	13/10/2011
KR 10-2012-0112424 A	11/10/2012	CN102639525 A	15/08/2012
		CN102639525 B	02/07/2014
		JP 2011-136989A	14/07/2011
		WO 2011-068204 A1	09/06/2011
KR 10-2013-0021185 A	05/03/2013	CN102952146 A	06/03/2013
		JP 2013-043889A	04/03/2013
		TW201309707 A	01/03/2013
		US 2013-0048955 A1	28/02/2013
KR 10-2013-0020780 A	28/02/2013	CN 103097429 A	08/05/2013
		EP 2563836 A1	06/03/2013
		EP 2563836 B1	26/03/2014
		GB 201217262 D0	07/11/2012
		GB 2491323 A	28/11/2012
		JP 2013-522423 A	13/06/2013
		RU 2012-145007 A	27/04/2014
		SG 183949 A1	30/10/2012
		TW 201139507 A	16/11/2011
		US 2013-0001476 A1	03/01/2013
		WO 2011-116866 A1	29/09/2011

A. 발명이 속하는 기술분류(국제특허분류(IPC))

C07D 403/10(2006.01)i, C07D 403/14(2006.01)i, C09K 11/06(2006.01)i, H01L 51/50(2006.01)i

B. 조사된 분야

조사된 최소문헌(국제특허분류를 기재)

C07D 403/10; C07D 409/14; C08G 61/12; C07D 209/82; C07D 495/04; C09K 11/06; H01L 51/50; C07D 209/86; C08G 73/00; C07D 401/14; C07D 403/14

조사된 기술분야에 속하는 최소문헌 이외의 문헌

한국등록실용신안공보 및 한국공개실용신안공보: 조사된 최소문헌란에 기재된 IPC
일본등록실용신안공보 및 일본공개실용신안공보: 조사된 최소문헌란에 기재된 IPC

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

eKOMPASS(특허청 내부 검색시스템) & 키워드: 유기발광소자, 벤조[def]카르바졸

C. 관련 문헌

카테고리*	인용문헌명 및 관련 구절(해당하는 경우)의 기재	관련 청구항
A	JP 2011-006340 A (CHISSO CORP) 2011.01.13 전체 명세서 참조	1-7
A	KR 10-2011-0044587 A (덕산하이메탈(주)) 2011.04.29 전체 명세서 참조	1-7
A	KR 10-2012-0112424 A (제이앤씨 주식회사) 2012.10.11 전체 명세서 참조	1-7
A	KR 10-2013-0021185 A (삼성디스플레이 주식회사) 2013.03.05 전체 명세서 참조	1-7
A	KR 10-2013-0020780 A (메르크 파텐트 게엠베하) 2013.02.28 전체 명세서 참조	1-7

☐ 추가 문헌이 C(계속)에 기재되어 있습니다.

☒ 대응특허에 관한 별지를 참조하십시오.

* 인용된 문헌의 특별 카테고리:

“A” 특별히 관련이 없는 것으로 보이는 일반적인 기술수준을 정의한 문헌

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

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

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

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

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

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

“&” 동일한 대응특허문헌에 속하는 문헌

“P” 우선일 이후에 공개되었으나 국제출원일 이전에 공개된 문헌

국제조사의 실제 완료일

2015년 04월 21일 (21.04.2015)

국제조사보고서 발송일

2015년 04월 21일 (21.04.2015)

ISA/KR의 명칭 및 우편주소

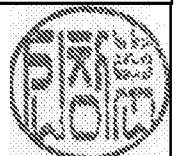
대한민국 특허청
(302-701) 대전광역시 서구 청사로 189,
4동 (둔산동, 정부대전청사)

팩스 번호 ++82 42 472 7140

심사관

신창훈

전화번호 +82-42-481-8406



국제조사보고서에서 인용된 특허문헌	공개일	대응특허문헌	공개일
JP 2011-006340 A	2011/01/13	없음	
KR 10-2011-0044587 A	2011/04/29	KR 10-1219481 B1 KR 10-1219485 B1 WO 2011-037429 A2 WO 2011-037429 A3	2013/01/15 2013/01/11 2011/03/31 2011/10/13
KR 10-2012-0112424 A	2012/10/11	CN102639525 A CN102639525 B JP 2011-136989A WO 2011-068204 A1	2012/08/15 2014/07/02 2011/07/14 2011/06/09
KR 10-2013-0021185 A	2013/03/05	CN102952146 A JP 2013-043889A TW201309707 A US 2013-0048955 A1	2013/03/06 2013/03/04 2013/03/01 2013/02/28
KR 10-2013-0020780 A	2013/02/28	CN 103097429 A EP 2563836 A1 EP 2563836 B1 GB 201217262 D0 GB 2491323 A JP 2013-522423 A RU 2012-145007 A SG 183949 A1 TW 201139507 A US 2013-0001476 A1 WO 2011-116866 A1	2013/05/08 2013/03/06 2014/03/26 2012/11/07 2012/11/28 2013/06/13 2014/04/27 2012/10/30 2011/11/16 2013/01/03 2011/09/29