

(12) 특허협력조약에 의하여 공개된 국제출원

(19) 세계지식재산권기구
국제사무국

(43) 국제공개일
2014 년 3 월 27 일 (27.03.2014)



(10) 국제공개번호
WO 2014/046352 A1

- (51) 국제특허분류:
C07D 403/14 (2006.01) C09K 11/06 (2006.01)
C07D 209/82 (2006.01) H01L 51/50 (2006.01)
- (21) 국제출원번호: PCT/KR2013/001027
- (22) 국제출원일: 2013 년 2 월 8 일 (08.02.2013)
- (25) 출원언어: 한국어
- (26) 공개언어: 한국어
- (30) 우선권정보:
10-2012-0103989 2012 년 9 월 19 일 (19.09.2012) KR
- (71) 출원인: 주식회사 두산 (DOOSAN CORPORATION)
[KR/KR]; 100-730 서울시 중구 을지로 6 가 18-12 번지,
Seoul (KR).
- (72) 발명자: 최태진 (CHOI, Tae Jin); 157-776 서울시 강서
구 방화 2 동 12 단지아파트 1206 동 1201 호, Seoul
(KR). 연규만 (YOUN, Kyu Man); 443-472 경기도 수원
시 영통구 영통 2 동 영통 e 편한세상아파트 102 동
1404 호, Gyeonggi-do (KR). 김동연 (KIM, Dong Yoon);
445-893 경기도 화성시 봉담읍 동화리 362 번지,
Gyeonggi-do (KR). 김충한 (KIM, Choong Hahn); 152-
784 서울시 구로구 고척 1 동 벅산블루밍아파트 203 동
503 호, Seoul (KR). 송보경 (SONG, Bo Kyung); 138-918
서울시 송파구 잠실 6 동 장미아파트 24 동 506 호,
Seoul (KR). 김지이 (KIM, Ji Yi); 429-762 경기도 시흥
시 정왕 4 동 대림아파트 1302 동 901 호, Gyeonggi-do
(KR).

(74) 대리인: 특허법인 한벳 (HANBEOT PATENT LAW
FIRM); 120-013 서울시 서대문구 충정로 7 구세군빌
딩 15 층, 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, IS, JP, KE, KG, KM, KN, KP, KZ,
LA, LC, LK, LR, LS, LT, LU, LY, MA, MD, ME, MG,
MK, MN, MW, MX, MY, MZ, NA, NG, NI, NO, NZ, OM,
PA, PE, PG, PH, PL, PT, QA, RO, RS, RU, RW, SC, SD,
SE, SG, SK, SL, SM, ST, SV, SY, TH, TJ, TM, TN, TR,
TT, TZ, UA, UG, US, UZ, VC, VN, ZA, ZM, ZW.

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

공개:

— 국제조사보고서와 함께 (조약 제 21 조(3))

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

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

(57) Abstract: The present invention relates to a novel organic light-emitting compound excellent in light-emitting ability, hole transport ability, electron transport ability, etc. The present invention also relates to an organic electroluminescent device comprising said compound in one or more organic material layers thereof, thus improving characteristics thereof such as luminous efficiency, driving voltage and life.

(57) 요약서: 본 발명은 발광능, 정공 수송능, 전자 수송능 등이 우수한 신규의 유기발광 화합물 및 상기 화합물을 하나 이
상의 유기물층에 포함함으로써 발광효율, 구동 전압, 수명 등의 특성이 향상된 유기 전계 발광 소자에 관한 것이다.



WO 2014/046352 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 수송능 등이 우수한 신규의 유기발광 화합물 및 이를 하나 이상의 유기물층에 포함함으로써 발광효율, 구동 전압, 수명 등의 특성이 향상된 유기 전계 발광 소자에 관한 것이다.

[2]

배경기술

- [3] 유기 전계 발광 소자(organic electroluminescent device) (이하, 유기 EL 소자라 함)는 통상 양극과 음극 및 이들 사이에 유기물층을 포함하는 구조를 가진다. 여기서 유기물층은 유기 EL 소자의 효율과 안정성을 높이기 위하여 각기 다른 물질로 구성된 다층의 구조로 이루어진 경우가 많으며, 예컨대 정공 주입층(HIL), 정공 수송층(HTL), 발광층(EML), 전자 수송층(ETL), 전자 주입층(EIL) 등을 포함할 수 있다.
- [4] 전술한 유기 EL 소자의 두 전극 사이에 전압을 걸어주게 되면 양극에서는 정공이, 음극에서는 전자가 유기물층으로 주입되고, 주입된 정공과 전자가 만났을 때 엑시톤(exciton)이 형성되며, 이 엑시톤이 바닥상태로 떨어질 때 빛이 나게 된다.
- [5] 유기 EL 소자의 발광층 형성재료는 발광색에 따라 청색, 녹색, 적색 발광 재료로 구분될 수 있다. 그밖에, 보다 나은 천연색을 구현하기 위한 발광재료로 노란색 및 주황색 발광재료도 사용된다. 또한, 색순도의 증가와 에너지 전이를 통해 발광 효율을 증가시키기 위하여, 발광 재료로서 호스트/도펀트 계를 사용할 수 있다. 그 원리는 발광층을 주로 구성하는 호스트보다 에너지 대역 간극이 작고 발광 효율이 우수한 도펀트를 발광층에 소량 혼합하면, 호스트에서 발생한 엑시톤이 도펀트로 수송되어 효율이 높은 빛을 내는 것이다. 이때 호스트의 파장이 도펀트의 파장대로 이동하므로, 이용하는 도펀트의 종류에 따라 원하는 파장의 빛을 얻을 수 있다.
- [6] 일반적으로 인광 호스트 재료로는 CBP (4,4-dicarbazolybiphenyl) 등의 카바졸계 화합물 등이 사용되며, 인광 도펀트 재료로는 Ir, Pt 등의 중원자(heavy atoms)가 포함된 금속 착체 화합물이 널리 사용되고 있다. 그러나 현재 사용되는 인광 호스트 재료인 CBP의 경우 유리전이온도(T_g)가 110°C 정도로 낮으며, 소자 내의 결정화가 쉽게 일어나 유기 EL 소자의 수명이 150 시간 정도로 매우 짧은 문제점이 있다.

[7]

발명의 상세한 설명

기술적 과제

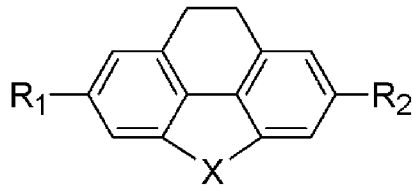
- [8] 본 발명은 전술한 문제점을 해결하기 위해서 안출된 것으로서, 발광효율, 구동전압, 열적 안정성, 수명 등의 특성을 향상시킬 수 있는 유기발광 화합물 및 이를 이용한 유기 EL 소자를 제공하는 것을 목적으로 한다.

[9]

과제 해결 수단

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

- [11] 화학식 1



- [12] 상기 식에서,

- [13] X는 NR₃, O, 또는 S이며,

- [14] R₁ 내지 R₃는 서로 같거나 또는 상이하며, 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 치환 또는 비치환된 C₁~C₄₀의 알킬기, 치환 또는 비치환된 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, -P(=O)R_aR_b, 치환 또는 비치환된 C₃~C₄₀의 시클로알킬기 및 치환 또는 비치환된 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기로 이루어진 군에서 선택되거나, 또는 이들이 인접하는 기와 결합하여 축합 지방족 고리, 축합 방향족 고리, 축합 헤테로지방족 고리 또는 축합 헤테로방향족 고리를 형성하는 기이며,

- [15] 여기서 R_a 및 R_b는 서로 같거나 또는 상이하며, 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 C₆~C₄₀의 아릴기, 치환 또는 비치환된 C₁~C₄₀의 알킬기, 치환 또는 비치환된 C₂~C₄₀의 알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₂~C₄₀의 알키닐기, 치환 또는 비치환된 핵원자수 5 내지 40의 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 C₆~C₄₀의 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C₁~C₄₀의 알킬옥시기 및 치환 또는 비치환된 C₃~C₄₀의 시클로알킬기로 이루어진 군에서 선택되거나, 또는 이들이 인접하는 기와 결합하여 축합 지방족 고리, 축합 방향족 고리, 축합 헤테로지방족 고리 또는 축합 헤테로방향족 고리를 형성하는 기이다.

- [16] 여기서, 상기 C₁~C₄₀의 알킬기, C₂~C₄₀의 알케닐기, C₂~C₄₀의 알키닐기, C₆~C₄₀의 아릴기, 핵원자수 5 내지 40의 헤테로아릴기, C₆~C₄₀의 아릴옥시기, C₁~C₄₀의 알킬옥시기, C₃~C₄₀의 시클로알킬기 및 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기는, 각각 독립적으로 중수소, 할로젠, 시아노기, C₁~C₄₀의

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, $C_6 \sim C_{40}$ 의 아릴알킬기, $C_3 \sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, $C_3 \sim C_{40}$ 의 헤테로시클로알킬기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬실릴기, 및 $C_6 \sim C_{40}$ 의 아릴실릴기로 이루어진 군으로부터 선택되는 하나 이상의 치환기로 치환될 수 있다. 바람직하게는 $C_1 \sim C_3$ 의 알킬기, $C_6 \sim C_8$ 아릴기, 핵원자수 5 내지 6의 헤테로아릴기로 이루어진 군에서 선택되는 하나 이상의 치환기로 치환될 수 있다.

[17] 또한, 본 발명은 양극, 음극, 및 상기 양극과 음극 사이에 개재(介在)된 1층 이상의 유기물층을 포함하는 유기 EL 소자로서, 상기 1층 이상의 유기물층 중 적어도 하나는 본 발명의 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하는 것을 특징으로 하는 유기 EL 소자를 제공한다.

[18] 여기서, 상기 화합물을 포함하는 1층 이상의 유기물층은 발광층, 전자 수송층 및 정공 수송층으로 구성된 군으로부터 선택되는 적어도 하나의 층일 수 있으며, 이때 상기 화합물을 포함하는 유기물층은 발광층이며, 상기 화합물은 상기 발광층의 인광 호스트로 사용되는 것이 바람직하다.

[19]

발명의 효과

[20] 본 발명의 화학식 1로 표시되는 화합물은 우수한 발광능, 전자 수송능 및 정공 수송능을 가지고 있다. 따라서 이를 포함하는 유기 EL 소자는 발광성능, 구동전압, 수명 등의 특성이 크게 향상될 수 있으므로, 풀 칼라 디스플레이 패널 등에 효과적으로 적용될 수 있다.

[21]

발명의 실시를 위한 형태

[22] 이하, 본 발명을 상세히 설명한다.

[23] <신규 화합물>

[24] 본 발명에 따른 신규 유기발광 화합물은 다이하이드로 벤조카바졸계의 모핵에 다양한 치환체, 특히 N-, O-, S- 함유 헤테로환, 방향족 고리 등이 연결된 상기 화학식 1로 표시되는 구조를 가진다. 이러한 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.

[25] 본 발명에 따른 화학식 1로 표시되는 화합물에서, 상기 X는 NR_3 , O, 또는 S일 수 있으며, 바람직하게는 NR_3 이다.

[26] 상기 R_1 내지 R_3 는 서로 같거나 또는 상이하며, 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, $C_1 \sim C_{40}$ 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, $-P(=O)R_aR_b$, $C_3 \sim C_{40}$ 의 시클로알킬기 및 핵원자수 3 내지 40의

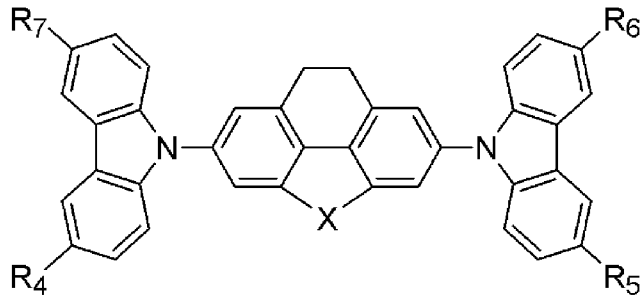
헤테로시클로알킬기로 이루어진 군에서 선택되거나, 또는 이들이 인접하는
기와 축합 지방족 고리, 축합 방향족 고리, 축합 헤테로지방족 고리 또는 축합
헤테로방향족 고리를 형성하는 기일 수 있다.

- [27] 여기서, 상기 R_a 및 R_b 는 서로 같거나 또는 상이하며, 각각 독립적으로 $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_2\sim C_{40}$ 의 알케닐기, $C_2\sim C_{40}$ 의 알키닐기, 핵원자수 5 내지 40의 헤테로아릴기, $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴옥시기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬옥시기 및 $C_3\sim C_{40}$ 의 시클로알킬기로 이루어진 군에서 선택되거나, 또는 이들이 인접하는 기와 축합 지방족 고리, 축합 방향족 고리, 축합 헤테로지방족 고리 또는 축합 헤테로방향족 고리를 형성하는 기이다.
- [28] 상기 화학식 1에서, 전술한 $C_1\sim C_{40}$ 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, $C_3\sim C_{40}$ 의 시클로알킬기 및 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기는, 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, $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴알킬기, $C_3\sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, $C_3\sim C_{40}$ 의 헤테로시클로알킬기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬실릴기, 및 $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴실릴기로 이루어진 군으로부터 선택되는 하나 이상의 치환기로 치환될 수 있다. 바람직하게는 $C_1\sim C_3$ 의 알킬기, $C_6\sim C_8$ 아릴기, 및 핵원자수 5 내지 6의 헤테로아릴기로 구성된 군으로부터 선택되는 하나 이상의 치환기로 치환될 수 있다.
- [29] 본 발명에 따른 화학식 1로 표시되는 화합물에서, 삼중항 에너지 레벨을 고려했을 때, R_1 및 R_2 는 서로 같거나 또는 상이하며, 각각 독립적으로 $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 40의 헤테로아릴기이거나 또는 이들이 인접하는 기와 형성하는 축합 지방족 고리, 축합 방향족 고리, 축합 헤테로지방족 고리 또는 축합 헤테로방향족 고리인 것이 바람직하다.
- [30] 또한 상기 화학식 1에서, X가 NR_3 인 경우, R_3 는 $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 40의 헤테로아릴기가 바람직하며, 더욱 바람직하게는 $C_6\sim C_8$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 6의 헤테로아릴기이다.
- [31] 여기서, 상기 $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 40의 헤테로아릴기, $C_6\sim C_8$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 6의 헤테로아릴기는 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, $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴알킬기, $C_3\sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, $C_3\sim C_{40}$ 의 헤테로시클로알킬기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬실릴기, 및 $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴실릴기로 이루어진 군으로부터 선택되는 하나 이상의 치환기로 치환될 수 있다.
- [32] 일례로, 상기 $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴기 또는 핵원자수 5 내지 40의 헤테로아릴기는 페닐, 나프틸, 인덴, 안트라센, 페난트렌, 파이렌, 트리페닐렌, 피리딘, 피리미딘, 피라진, 트리아진, 퀴놀린, 이소퀴놀린, 퀴녹살린, 플루오렌, 카바졸,

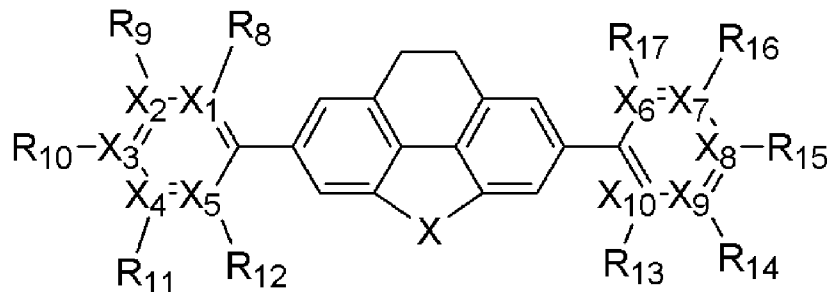
디벤조싸이오펜, 디벤조퓨란, 아크리딘, 인돌, 벤조퓨란, 벤조싸이오펜, 벤즈이미다졸, 벤조싸이아졸, 퓨린, 페난트롤린일 수 있다.

[33] 본 발명에 따라 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 하기 화학식 2 또는 화학식 3으로 표시되는 화합물 중 어느 하나로 보다 구체화될 수 있다.

[34] 화학식 2



[35] 화학식 3



[36] 상기 식에서,

[37] X는 NR₃, O, 또는 S이며,

[38] X₁ 내지 X₁₀는 서로 같거나 또는 상이하며, 각각 독립적으로 C 또는 N이며,

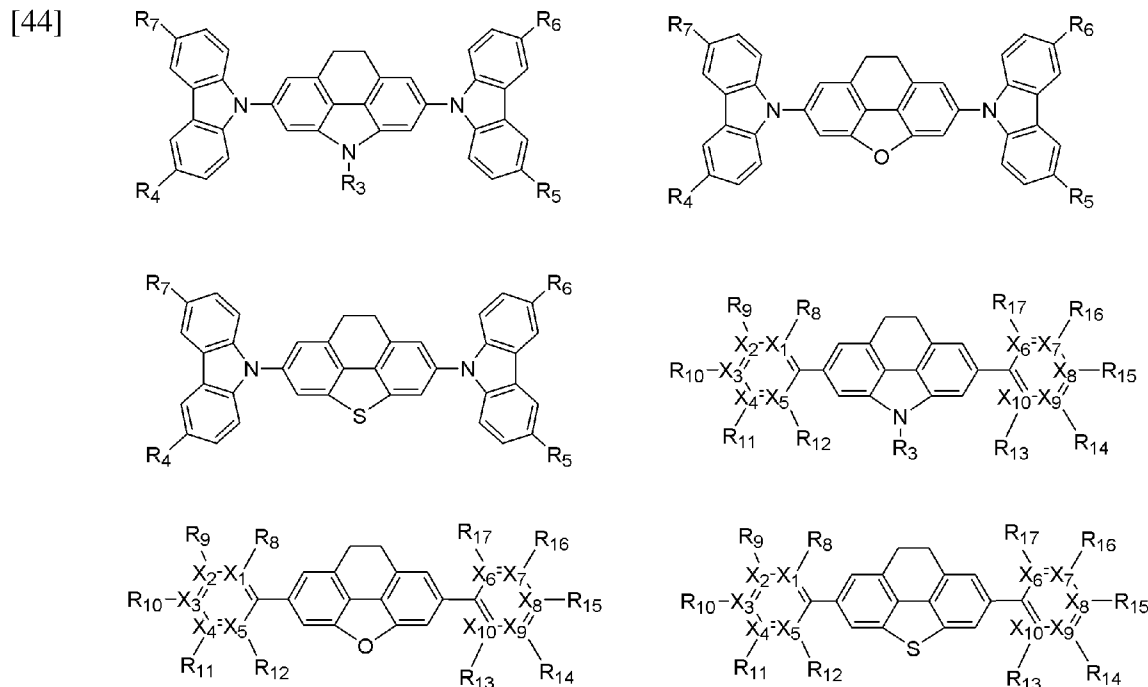
[39] R₃는 화학식 1에서 정의된 바와 같으며,

[40] R₄ 내지 R₁₇는 서로 같거나 또는 상이하며, 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, C₁~C₁₀의 알킬기, C₂~C₁₀의 알케닐기, C₂~C₁₀의 알키닐기, C₆~C₈의 아릴기, 핵원자수 5 내지 8의 헤테로아릴기, C₃~C₁₀의 시클로알킬기 및 핵원자수 3 내지 10의 헤테로시클로알킬기로 이루어진 군에서 선택된다.

[41] 여기서, 상기 C₁~C₁₀의 알킬기, C₂~C₁₀의 알케닐기, C₂~C₁₀의 알키닐기, C₆~C₈의 아릴기, 핵원자수 5 내지 8의 헤테로아릴기, C₃~C₁₀의 시클로알킬기 및 핵원자수 3 내지 10의 헤테로시클로알킬기는, 각각 독립적으로 중수소, 할로젠, 시아노기, C₁~C₄₀의 알킬기, C₂~C₄₀의 알케닐기, C₂~C₄₀의 알키닐기, C₆~C₄₀의 아릴기, 핵원자수 5 내지 40의 헤테로아릴기, C₆~C₄₀의 아릴옥시기, C₁~C₄₀의 알킬옥시기, C₆~C₄₀의 아릴아민기, C₆~C₄₀의 아릴알킬기, C₃~C₄₀의 시클로알킬기, C₃~C₄₀의 헤테로시클로알킬기, C₁~C₄₀의 알킬실릴기, 및 C₆~C₄₀의 아릴실릴기로 이루어진 군으로부터 선택되는 하나 이상의 치환기로 치환될 수 있다.

[42] 상기 화학식 2 또는 3에서, X는 NR₃이며, R₃는 C₆~C₈ 아릴기, 핵원자수 5 내지 6의 헤테로아릴기인 것이 바람직하다.

[43] 일례로, 본원 화학식 2 또는 화학식 3으로 표시되는 화합물은 하기 예시되는 화합물 군으로 보다 구체화될 수 있다.



[45] 상기 식에서, R₃~R₁₇, X₁~X₁₀은 전술한 정의와 같다.

[46] 본 발명에서 사용된 "비치환된 알킬"은 탄소수 1 내지 40(10)의 직쇄 또는 측쇄의 포화 탄화수소이며, 이의 예로는 메틸, 에틸, 프로필, 이소부틸, sec-부틸, 펜틸, iso-아밀, 헥실 등을 포함한다.

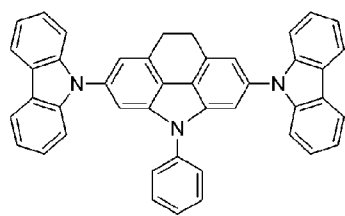
[47] "비치환된 아릴"은 단독 고리 혹은 2 이상의 고리가 조합된, 탄소수 6 내지 40(8)의 방향족 부위를 의미한다. 2 이상의 고리가 서로 단순 부착(pendant)되거나 축합된 형태로 부착될 수 있다.

[48] "비치환된 헤테로아릴"은 핵원자수 5 내지 40(8)의 모노헤테로사이클릭 또는 폴리헤테로사이클릭 방향족 부위를 의미하며, 고리 중 하나 이상의 탄소, 바람직하게는 1 내지 3개의 탄소가 N, O, S와 같은 헤테로원자로 치환된다. 2 이상의 고리가 서로 단순 부착(pendant)되거나 축합된 형태로 부착될 수 있고, 나아가 지방족 고리 또는 방향족 고리와의 축합된 형태도 포함하는 것으로 해석한다.

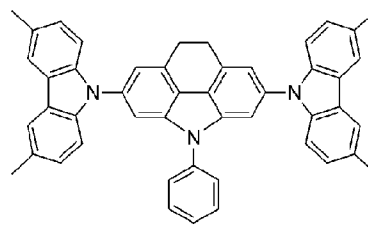
[49] "축합 고리"는 축합 지방족 고리, 축합 방향족 고리, 축합 헤테로지방족 고리, 축합 헤테로방향족 고리 또는 이들의 조합된 형태를 의미한다.

[50] 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.

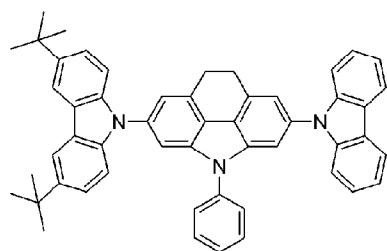
[51]



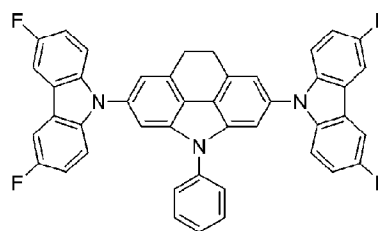
cpd1



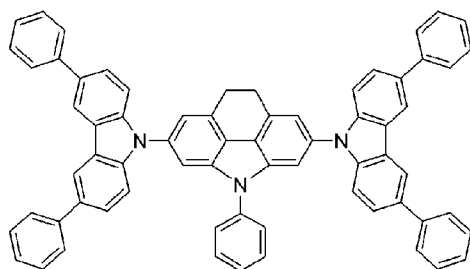
cpd2



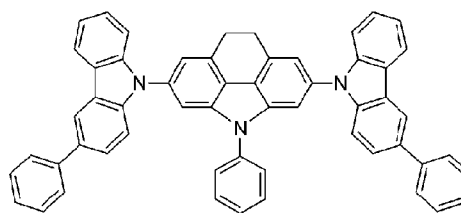
cpd3



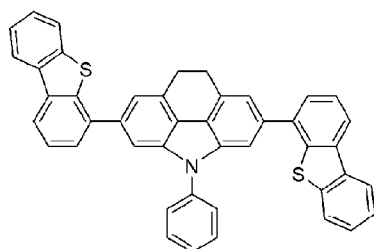
cpd4



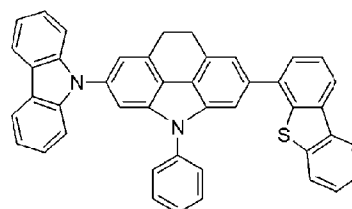
cpd5



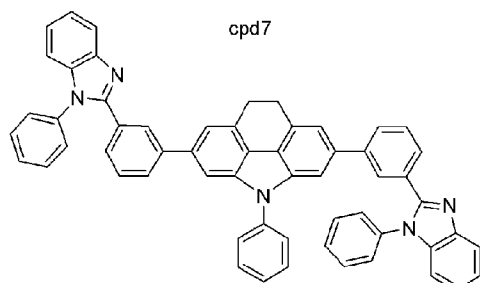
cpd6



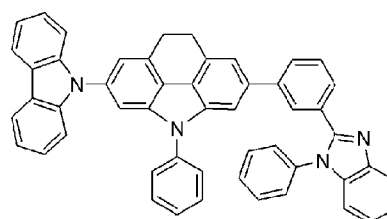
cpd7



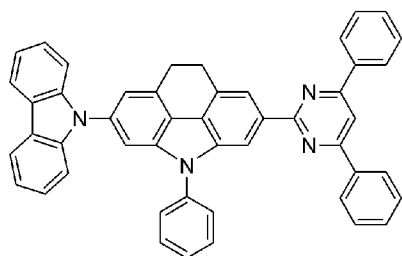
cpd8



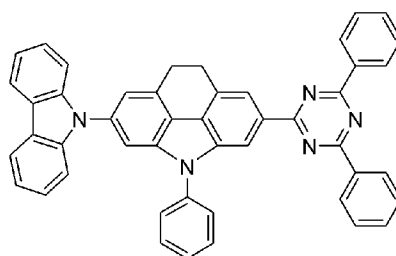
cpd9



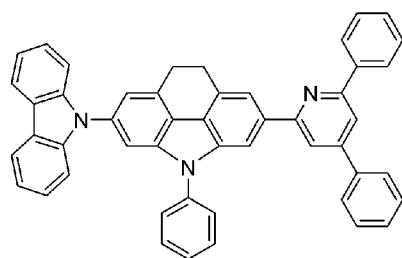
cpd10



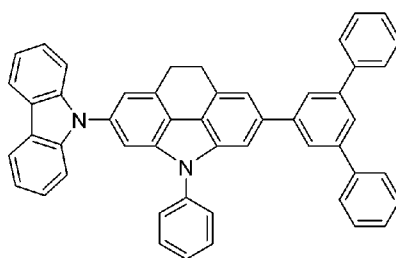
cpd11



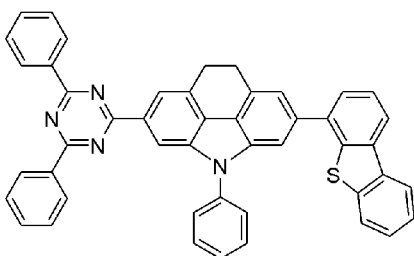
cpd12



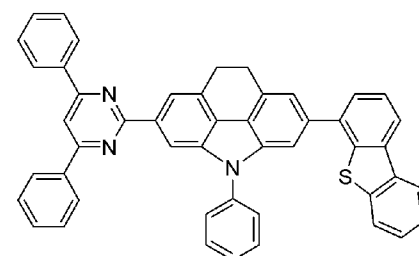
cpd13



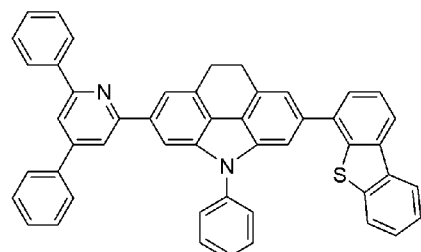
cpd14



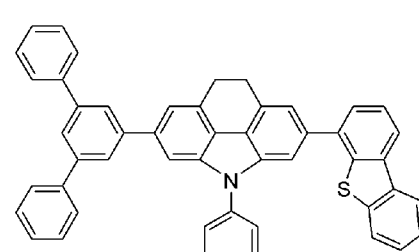
cpd15



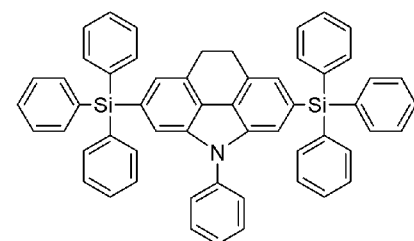
cpd16



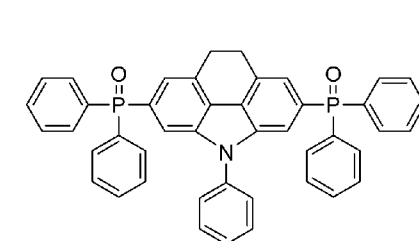
cpd17



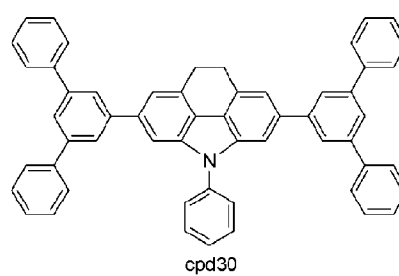
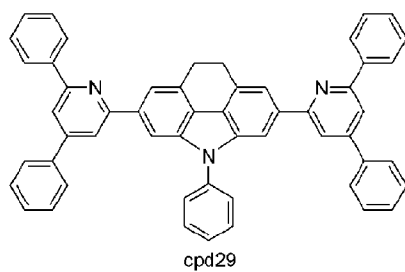
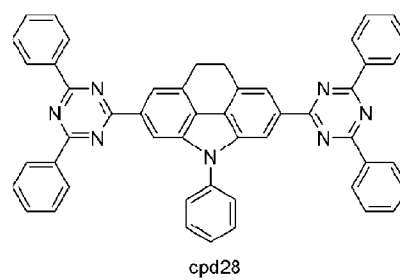
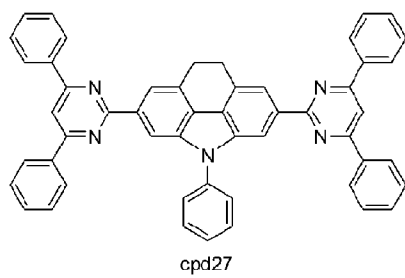
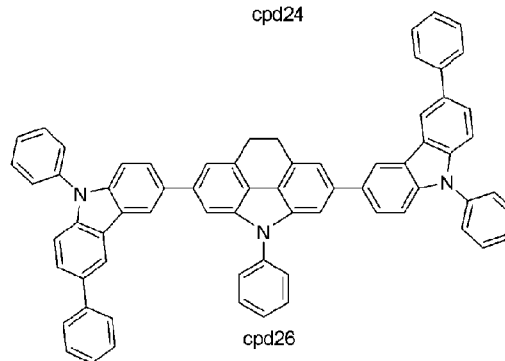
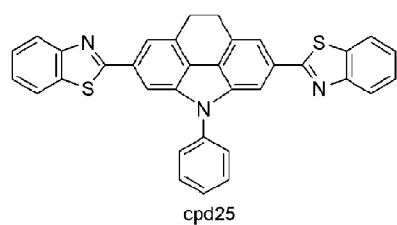
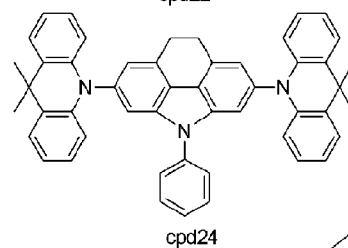
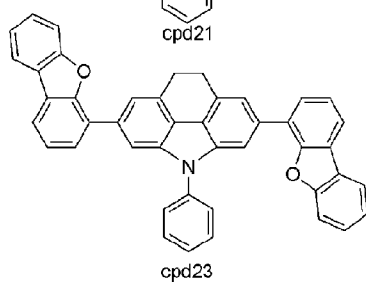
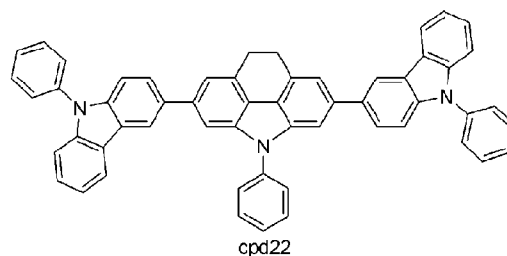
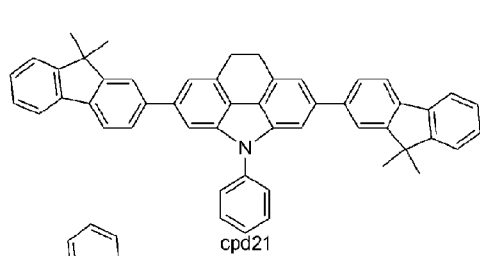
cpd18

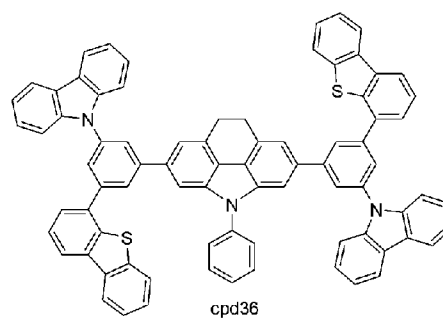
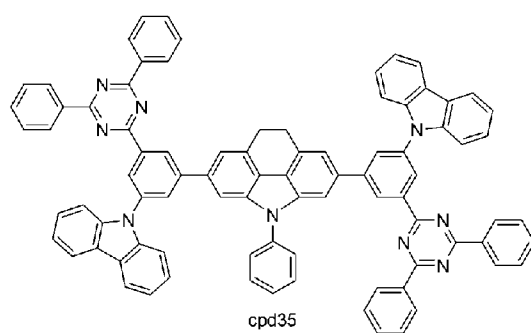
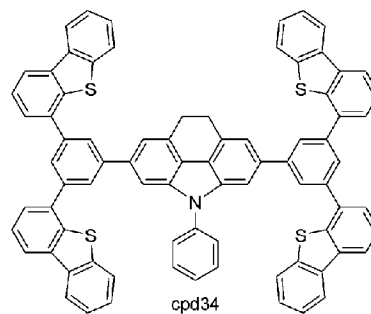
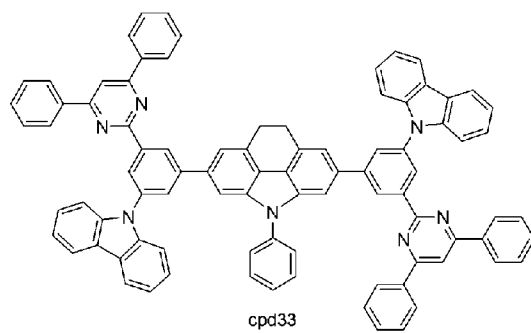
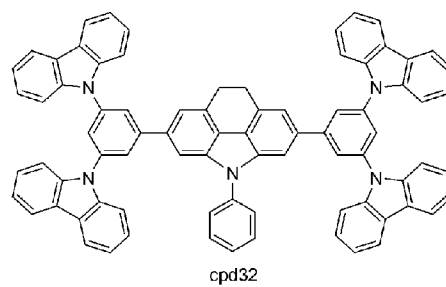
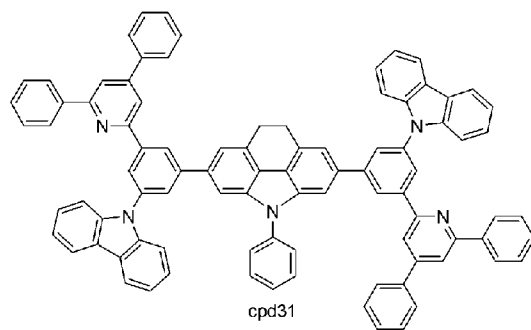


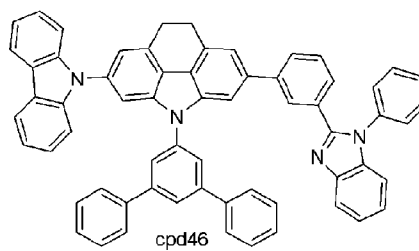
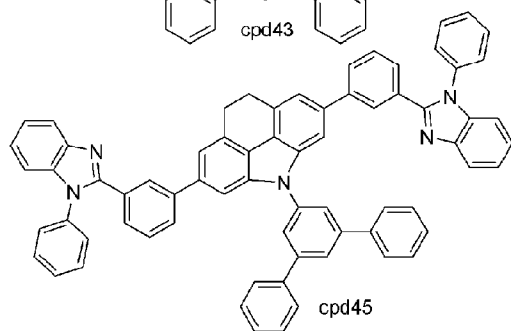
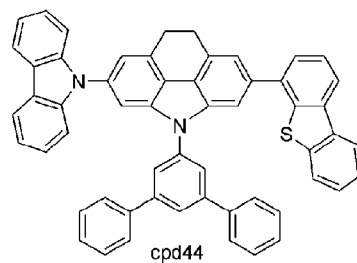
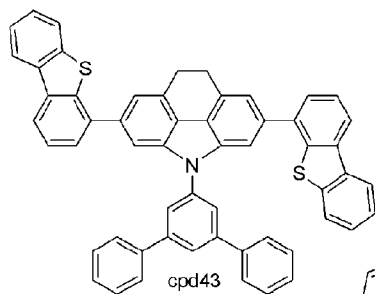
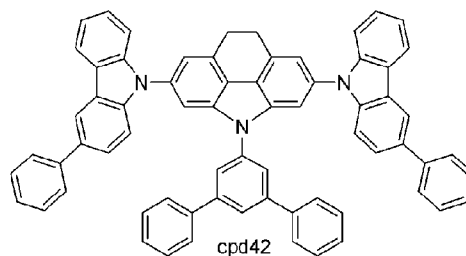
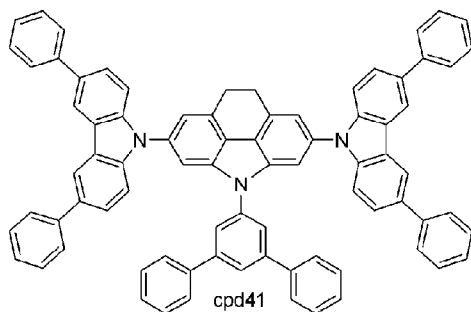
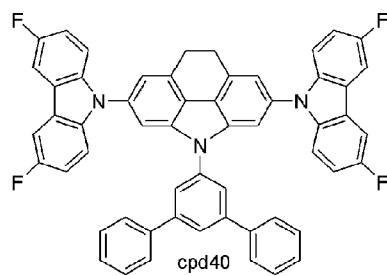
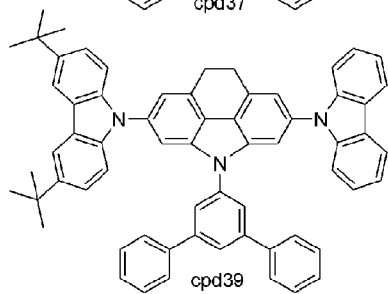
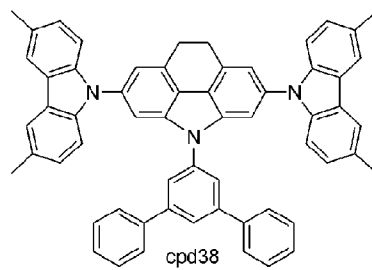
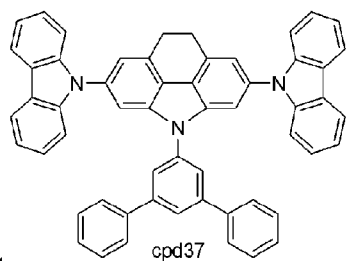
cpd19

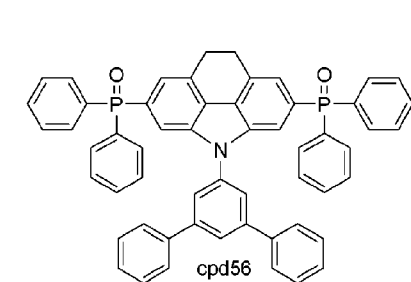
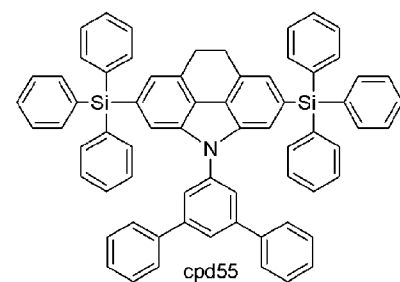
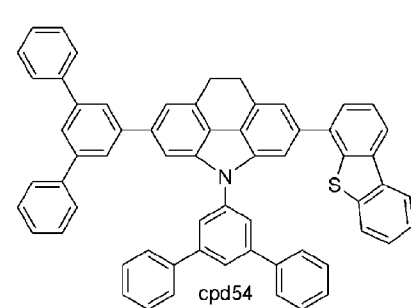
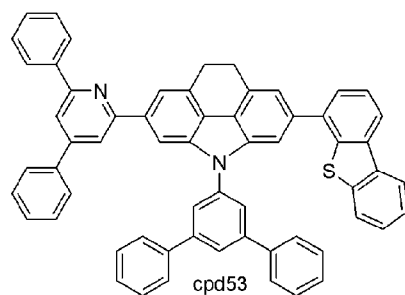
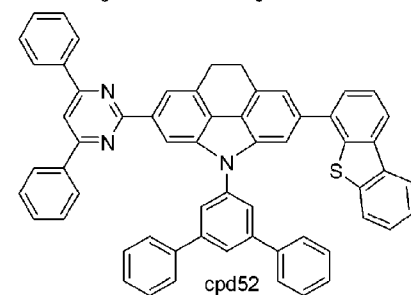
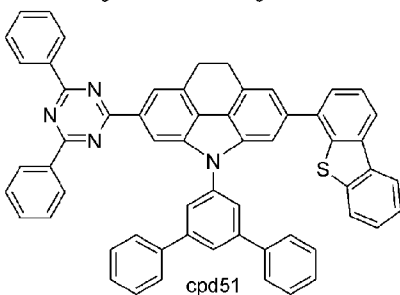
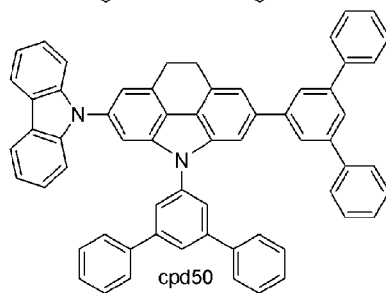
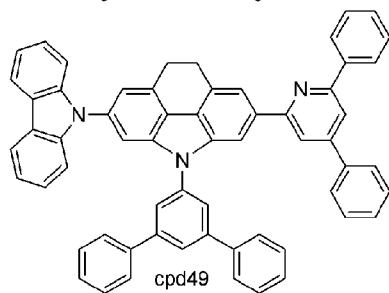
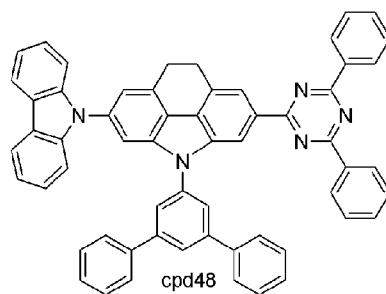
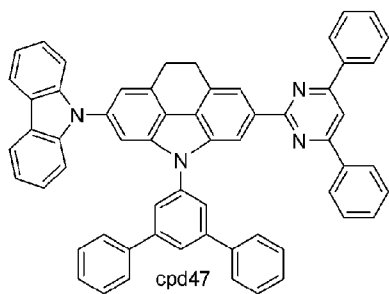


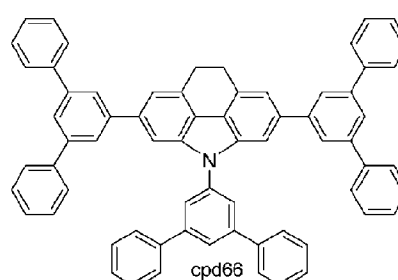
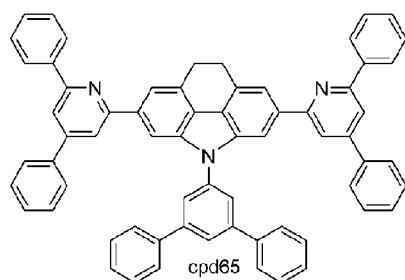
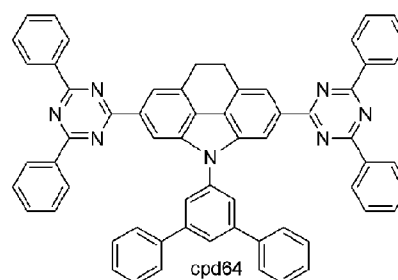
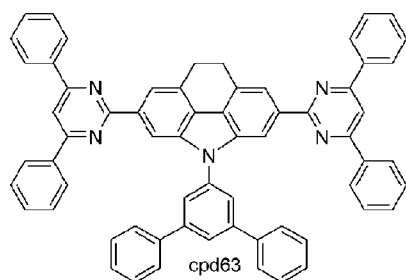
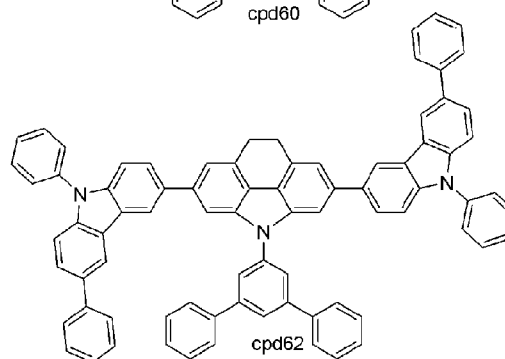
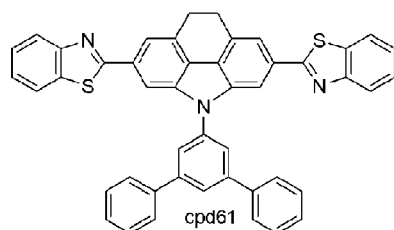
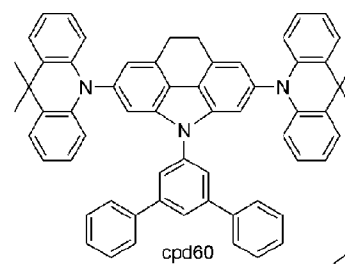
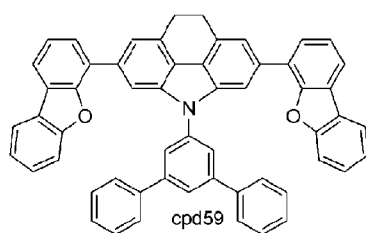
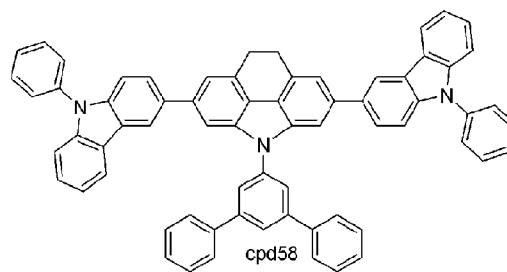
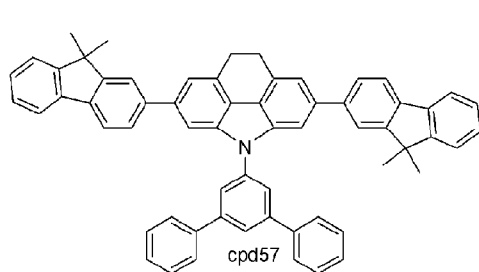
cpd20

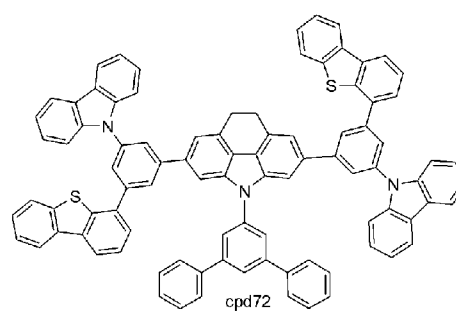
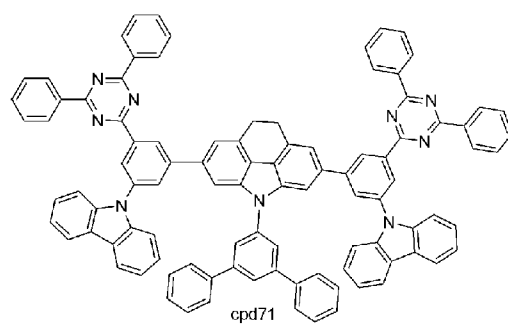
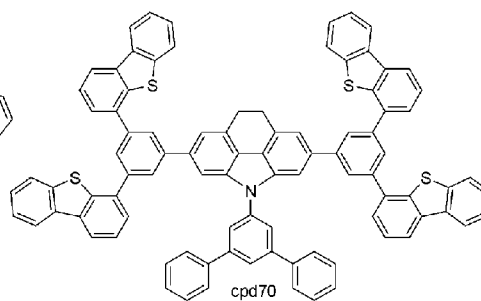
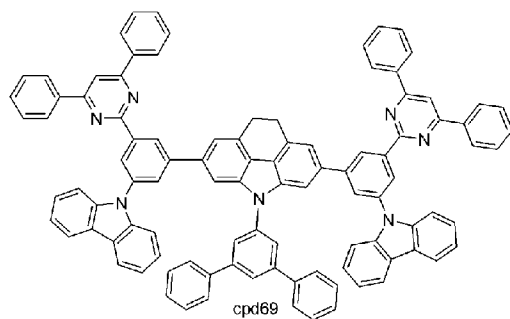
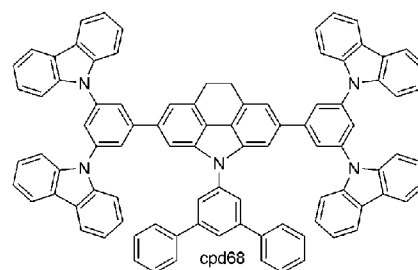
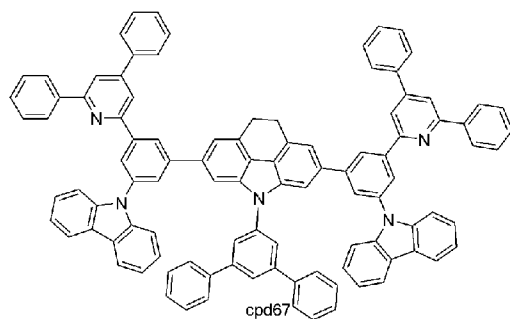




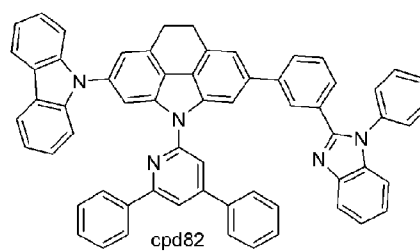
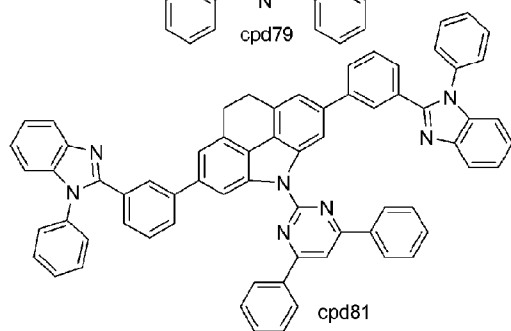
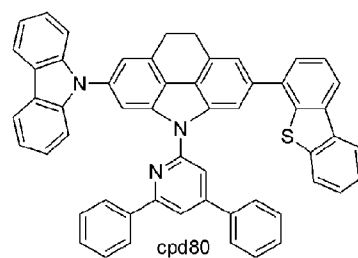
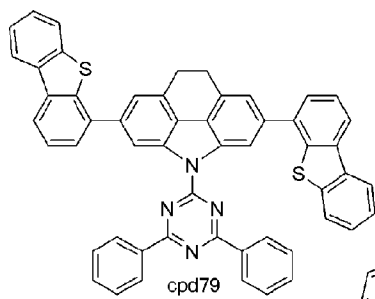
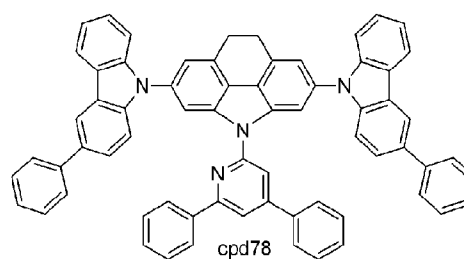
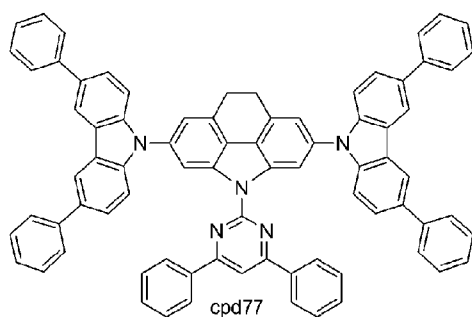
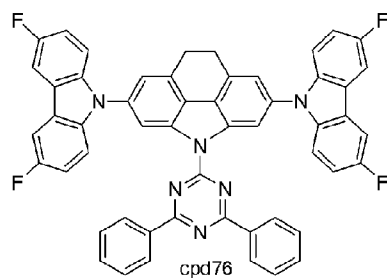
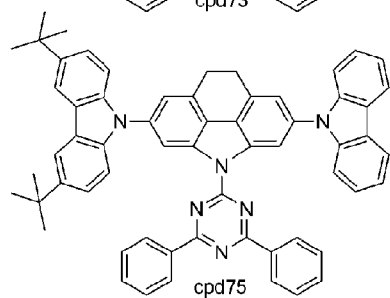
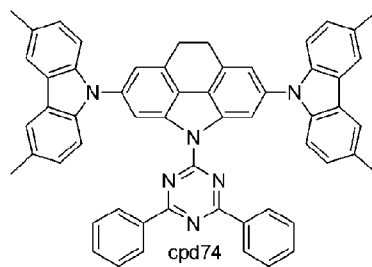
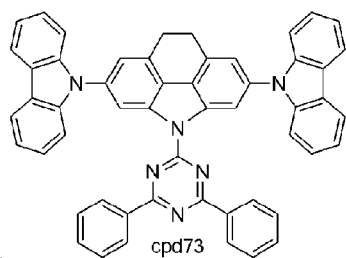


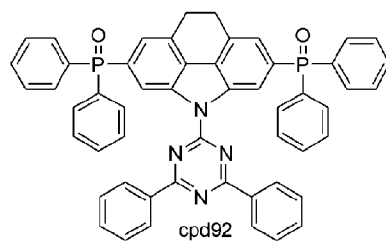
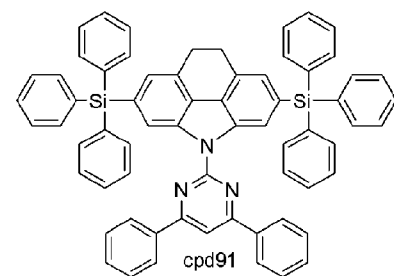
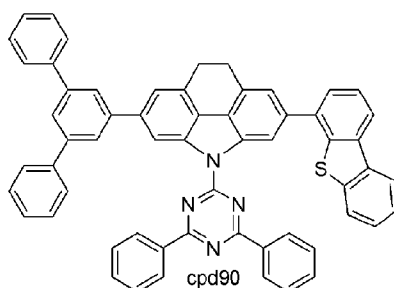
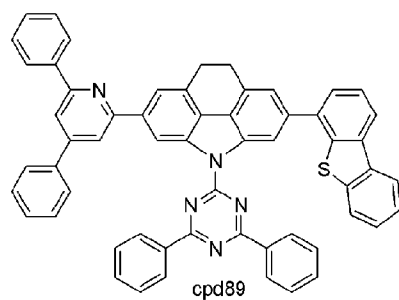
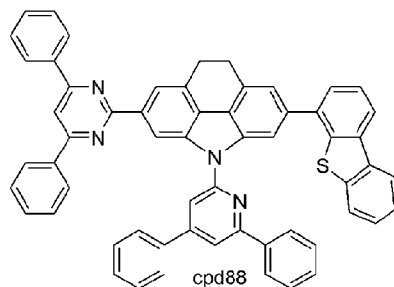
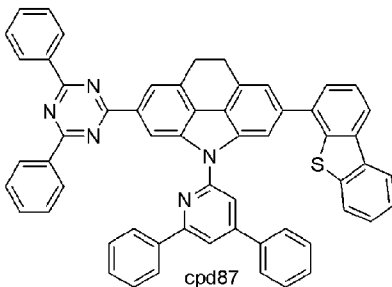
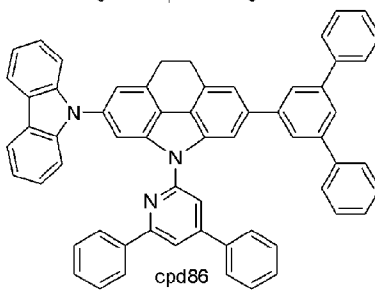
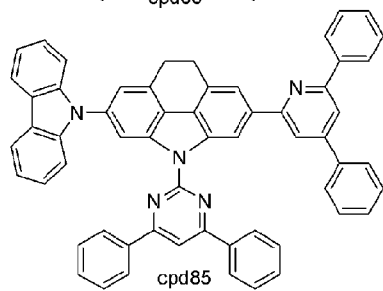
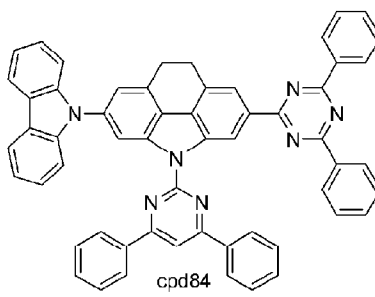
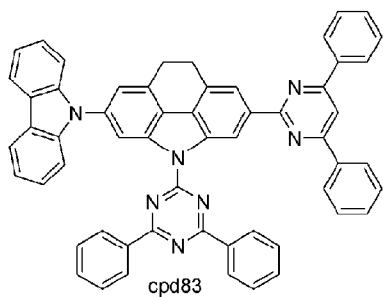


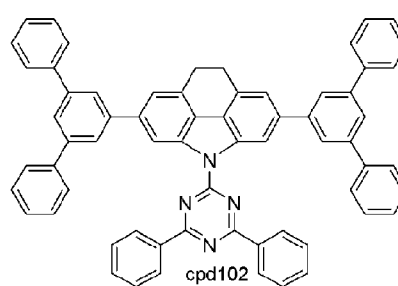
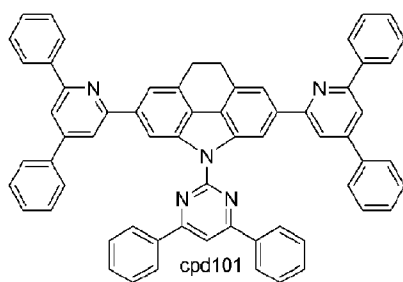
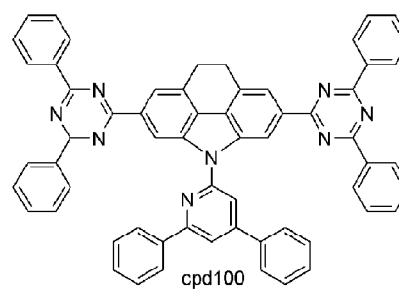
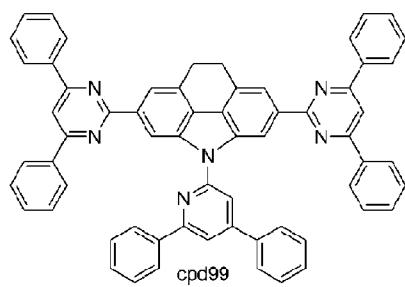
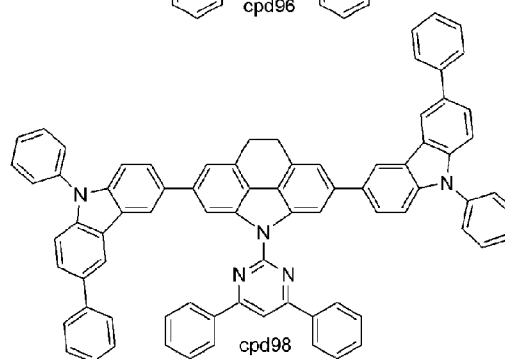
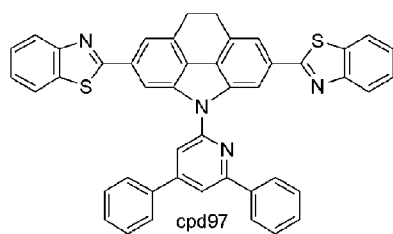
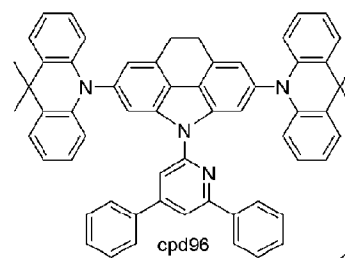
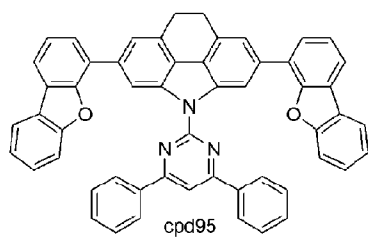
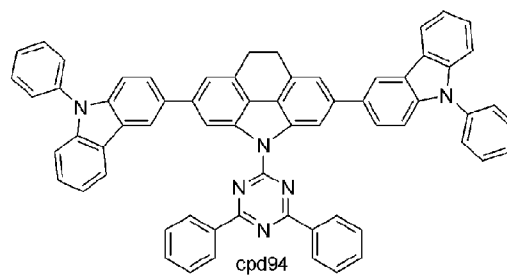
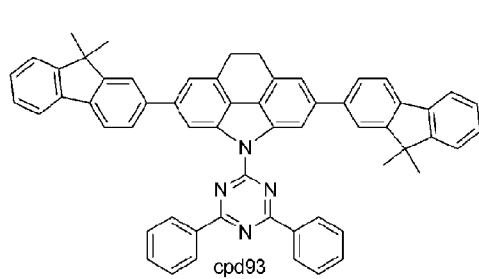


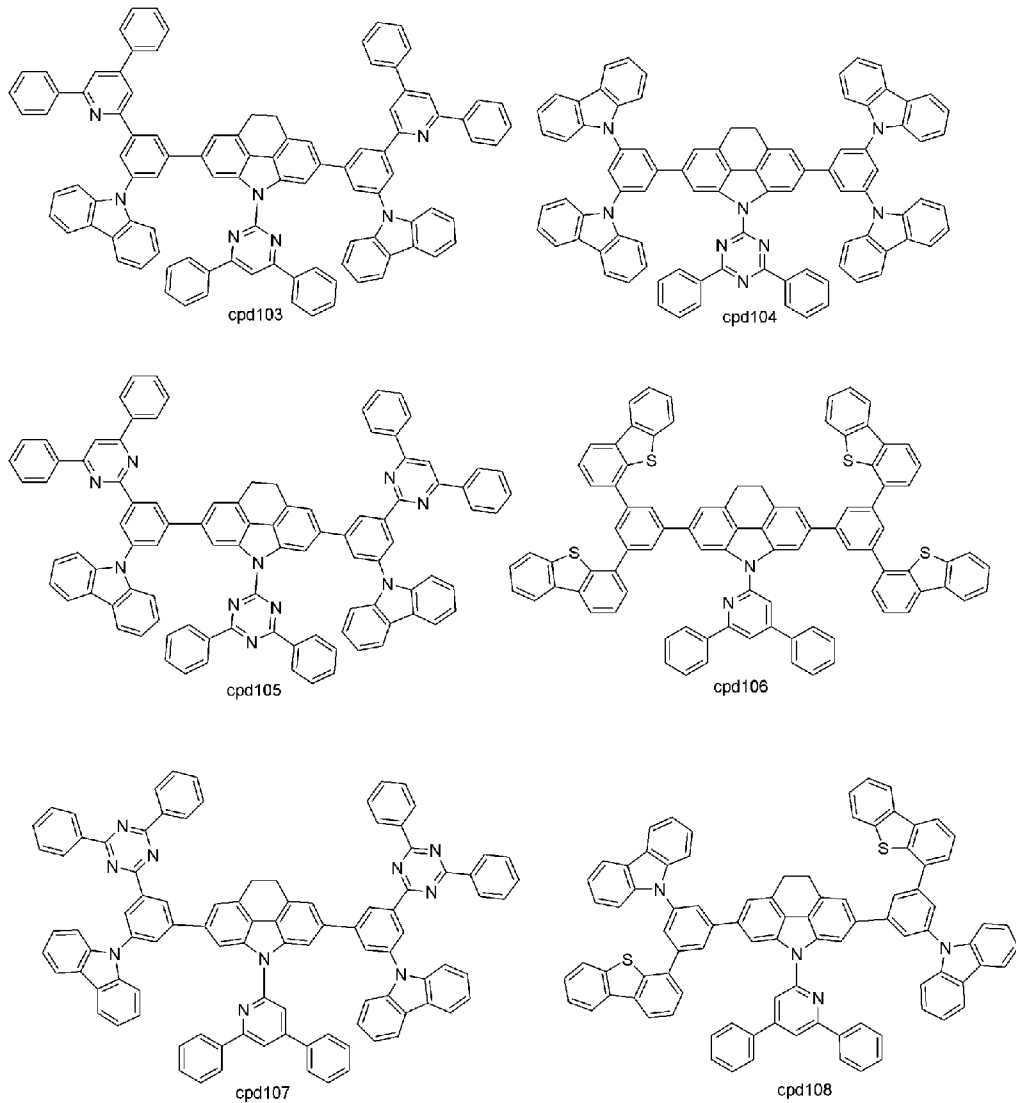


[59]









[63]

[64] 본 발명의 화학식 1의 화합물은 일반적인 합성방법에 따라 합성될 수 있다. 본 발명의 화합물에 대한 상세한 합성 과정은 후술하는 합성예에서 구체적으로 기술하도록 한다.

[65]

[66] <유기 전계 발광 소자>

[67] 한편, 본 발명의 다른 측면은 상기한 본 발명에 따른 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하는 유기 전계 발광 소자(유기 EL 소자)에 관한 것이다.

[68] 구체적으로, 본 발명에 따른 유기 전계 발광소자는 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 포함하는 것을 특징으로 한다. 이때, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 1종 또는 2종 이상이 포함될 수 있다.

[69] 여기서, 본 발명의 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하는 유기물층은 발광층,

- 정공주입층, 정공수송층, 전자수송층 및 전자주입층 중 어느 하나 이상일 수 있으며, 바람직하게는 발광층, 정공수송층 및/또는 전자수송층일 수 있다.
- [70] 본 발명에 따른 유기 전계 발광 소자의 발광층은 호스트 재료를 함유할 수 있는데, 이때 호스트 재료로 상기 화학식 1로 표시되는 화합물 중 어느 하나를 사용할 수 있다. 이와 같이 발광층이 상기 화학식 1로 표시되는 화합물 중 어느 하나를 함유할 경우, 발광층에서 정공과 전자의 결합력이 높아지기 때문에 효율(발광효율 및 전력효율), 수명, 휘도 및 구동전압 등이 우수한 유기 전계 발광 소자를 제공할 수 있다. 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 청색, 녹색 및/또는 적색의 인광 호스트, 형광 호스트, 또는 도펀트 재료로서 유기 발광 소자에 포함될 수 있다. 또한 도펀트 재료로 이용될 수 있다.
- [71] 본 발명에 따른 유기 EL 소자의 구조는 특별히 한정되지 않으나, 전극간에 유기물층을 1층 또는 2층 이상 적층한 구조일 수 있다. 이의 비제한적인 예를 들면, (i) 양극, 발광층, 음극; (ii) 양극, 정공주입층, 정공수송층, 발광층, 전자수송층, 전자주입층, 음극; 또는 (iii) 양극, 정공주입층, 정공수송층, 발광층, 음극 등의 구조를 들 수 있다.
- [72] 또한, 본 발명에 따른 유기 EL 소자는 전술한 바와 같이 양극, 1층 이상의 유기물층 및 음극이 순차적으로 적층된 구조뿐만 아니라, 전극과 유기물층 계면에 절연층 또는 접착층이 삽입될 수 있다.
- [73] 본 발명에 따른 유기 EL 소자에 있어서, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하는 유기물층은 진공증착법이나 용액 도포법에 의하여 형성될 수 있다. 상기 용액 도포법의 예로는 스핀 코팅, 딥코팅, 닥터 블레이딩, 잉크젯 프린팅 또는 열 전사법 등이 있으나, 이들에만 한정되지 않는다.
- [74] 본 발명에 따른 유기 EL 소자는 유기물층 중 1층 이상을 본 발명의 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하도록 형성하는 것을 제외하고는, 당 기술 분야에 알려져 있는 재료 및 방법을 이용하여 유기물층 및 전극을 형성함으로써 제조될 수 있다.
- [75] 예컨대, 기판으로는 실리콘 웨이퍼, 석영 또는 유리판, 금속판, 플라스틱 필름이나 시트 등이 사용될 수 있다.
- [76] 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.
- [77] 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.

[78] 또한, 정공 주입층, 정공 수송층 및 전자 수송층은 특별히 한정되는 것은 아니며, 당업계에 알려진 통상의 물질이 사용될 수 있다.

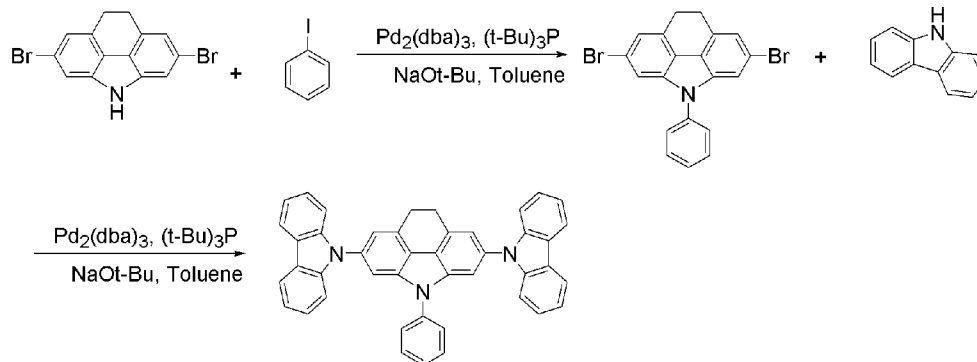
[79] 이하 본 발명을 실시예를 통하여 상세히 설명하면 다음과 같다. 단, 하기 실시예는 본 발명을 예시하는 것일 뿐 본 발명이 하기 실시예에 의해 한정되는 것은 아니다.

[80]

[81] **[합성 예 1] Cpd**

1(4,8-di(9H-carbazol-9-yl)-6-phenyl-2,6-dihydro-1H-benzo[def]carbazole)의 합성

[82]



[83] **<단계 1> 4,8-dibromo-6-phenyl-2,6-dihydro-1H-benzo[def]carbazole의 합성**

[84] 4,8-dibromo-2,6-dihydro-1H-benzo[def]carbazole (10g, 28.48mmol)과 iodobenzene (7.0g, 73.95mmol)을 톨루엔 300 ml에 녹인 다음 Pd₂(dba)₃ (1.3g, 1.37mmol)을 질소하에 투입하였다. 이후, NaOBu-t (8.21g, 85.44mmol)을 넣고, (t-Bu)₃P (1.42 ml, 1.42mmol)을 상기 반응액에 투입한 다음 혼합물을 5시간 동안 환류 교반하였다.

[85] TLC로 반응이 종결되는 것을 확인한 후 상온으로 식혔다. 반응 종료 후 증류수를 넣고 에틸아세테이트로 추출하였다. 얻어진 유기층을 Na₂SO₄로 건조시키고 감압 증류한 다음 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 화합물 (8.6g, 수율 70%)을 얻었다. HRMS [M]⁺:427.132

[86] **<단계 2> 4,8-di(9H-carbazol-9-yl)-6-phenyl-2,6-dihydro-1H-benzo[def]carbazole의 합성**

[87] 4,8-dibromo-6-phenyl-2,6-dihydro-1H-benzo[def]carbazole (8.0g, 18.7mmol)과 carbazole (7.8g, 46.64mmol)을 톨루엔 200 ml에 녹인 다음 Pd₂(dba)₃ (1.7g, 1.87mmol)을 질소하에 투입하였다. 이후, NaOBu-t (10.8g, 112.2mmol)을 넣고, (t-Bu)₃P (1.9 ml, 1.9mmol)을 상기 반응액에 투입한 다음 혼합물을 5시간 동안 환류 교반하였다.

[88] TLC로 반응이 종결되는 것을 확인한 후 상온으로 식혔다. 반응 종료 후 증류수를 넣고 에틸아세테이트로 추출하였다. 얻어진 유기층을 Na₂SO₄로 건조시키고 감압 증류한 다음 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 화합물 (7.8g, 수율 70%)을 얻었다. HRMS [M]⁺:599.721

[89]

[90] [합성예 2] Cpd 4(4,8-bis(3,6-difluoro-9H-carbazol-9-yl)-6-phenyl-2,6-dihydro-1H-benzo[def]carbazole)의 합성

[91] Carbazole 대신 3,6-difluoro-9H-carbazole를 사용하는 것을 제외하고는, 상기 합성에 1과 동일한 과정을 수행하여 표제 화합물(수율 75%)을 얻었다. HRMS [M]⁺:671.683

[92]

[93] [합성예 3] Cpd 7(4,8-bis(dibenzo[b,d]thiophen-4-yl)-6-phenyl-2,6-dihydro-1H-benzo[def]carbazole)의 합성

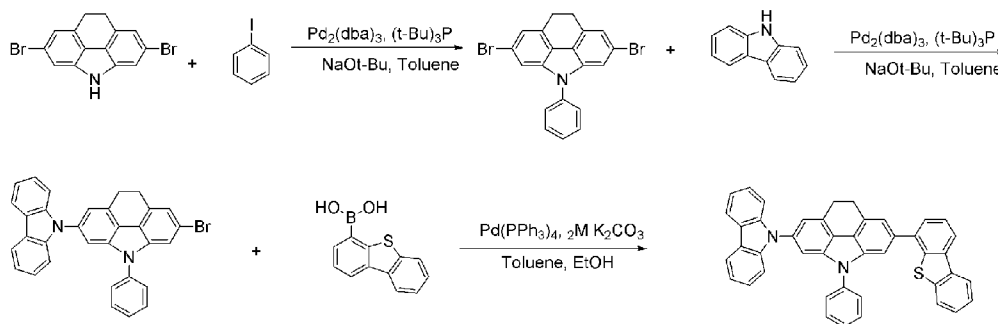
[94] 4,8-dibromo-6-phenyl-2,6-dihydro-1H-benzo[def]carbazole (5.0g, 11.70mmol)과 dibenzo[b,d]thiophen-4-ylboronic acid (6.7g, 29.37mmol) 및 Pd(PPh₃)₄ (1.4g, 1.21mmol)을 플라스크에 넣고 2N Na₂CO₃ 포화 수용액 70 ml와 1,4-dioxane 120 ml를 넣어 녹인 후 13시간 동안 가열교반하였다.

[95] 반응 종료 후 증류수를 투여하고 에틸아세테이트로 추출하였다. 얻어진 유기층을 Na₂SO₄로 건조시키고 감압 증류한 다음 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 표제 화합물(6.0g, 수율 85%)을 얻었다. HRMS [M]⁺:633.821

[96]

[97] [합성예 4] Cpd 8(4-(9H-carbazol-9-yl)-8-(dibenzo[b,d]thiophen-4-yl)-6-phenyl-2,6-dihydro-1H-benzo[def]carbazole)의 합성

[98]

[99] <단계 1> 4,8-dibromo-6-phenyl-2,6-dihydro-1H-benzo[def]carbazole의 합성

[100] 4,8-dibromo-2,6-dihydro-1H-benzo[def]carbazole (10g, 28.48mmol)과 iodobenzene (7.0g, 73.95mmol)을 톨루엔 300 ml에 녹인 다음 Pd₂(dba)₃ (1.3g, 1.37mmol)을 질소하에 투입하였다. 이후, NaOBu-t (8.21g, 85.44mmol)을 넣고, (t-Bu)₃P (1.42 ml, 1.42mmol)을 상기 반응액에 투입한 다음 혼합물을 5시간 동안 환류 교반하였다.

[101] TLC로 반응이 종결되는 것을 확인한 후 상온으로 식혔다. 반응 종료 후 증류수를 넣고 에틸아세테이트로 추출하였다. 얻어진 유기층을 Na₂SO₄로 건조시키고 감압 증류한 다음 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 화합물 (8.6g, 수율 70%)을 얻었다. HRMS [M]⁺:427.132

[102] <단계 2> 4,8-di(9H-carbazol-9-yl)-6-phenyl-2,6-dihydro-1H-benzo[def]carbazole의 합성

[103] 4,8-dibromo-6-phenyl-2,6-dihydro-1H-benzo[def]carbazole (8.0g, 18.7mmol)과 carbazole (3.1g, 18.7mmol)을 톨루엔 200 ml에 녹인 다음 $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (880mg, 0.93mmol)을 질소하에 투입하였다. 이후, NaOBu-t (5.4g, 56.18mmol)을 넣고, $(t\text{-Bu})_3\text{P}$ (1.0 ml, 1.0mmol)을 상기 반응액에 투입한 다음 혼합물을 5시간 동안 환류 교반하였다.

[104] TLC로 반응이 종결되는 것을 확인한 후 상온으로 식혔다. 반응 종료 후 증류수를 넣고 에틸아세테이트로 추출하였다. 얻어진 유기층을 Na_2SO_4 로 건조시키고 감압 증류한 다음 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 화합물 (6.2g, 수율 65%)을 얻었다. HRMS $[\text{M}]^+$:513.426

[105] <단계 3>

4-(9H-carbazol-9-yl)-8-(dibenzo[b,d]thiophen-4-yl)-6-phenyl-2,6-dihydro-1H-benzo[def]carbazole의 합성

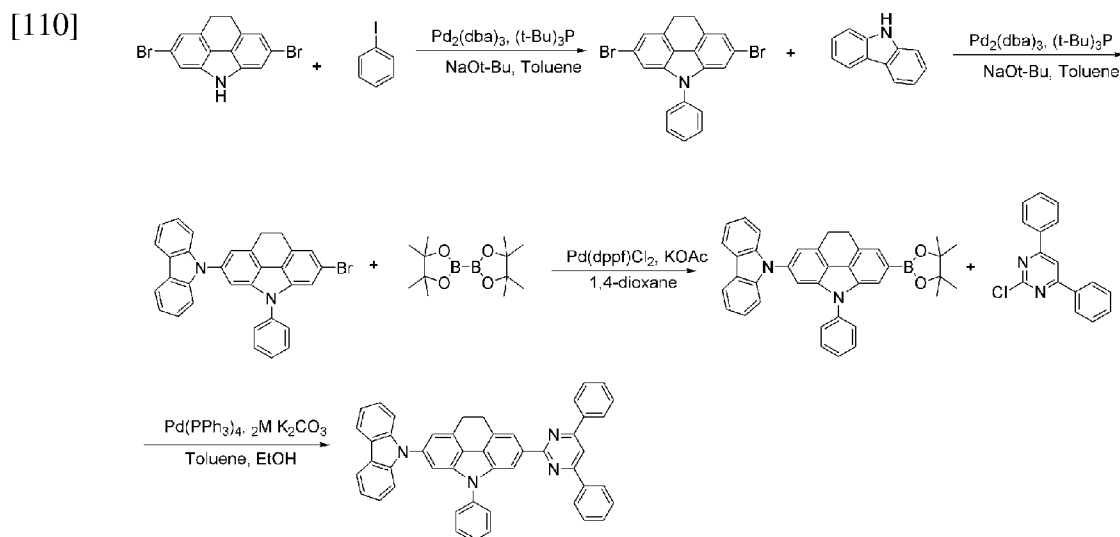
[106] 4,8-di(9H-carbazol-9-yl)-6-phenyl-2,6-dihydro-1H-benzo[def]carbazole (6.0g, 11.68mmol)과 dibenzo[b,d]thiophen-4-ylboronic acid (3.2g, 14.03mmol) 및 $\text{Pd}(\text{PPh}_3)_4$ (1.4g, 1.21mmol)을 플라스크에 넣고 2N Na_2CO_3 포화 수용액 35 ml와 1,4-dioxane 120 ml를 넣어 녹인 후 13시간 동안 가열 교반하였다.

[107] 반응 종료 후 증류수를 투여하고 에틸아세테이트로 추출하였다. 얻어진 유기층을 Na_2SO_4 로 건조시키고 감압 증류한 다음 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 표제 화합물(6.1g, 수율 85%)을 얻었다. HRMS $[\text{M}]^+$:616.771

[108]

[109] [합성예 5] Cpd 11

(4-(9H-carbazol-9-yl)-8-(4,6-diphenylpyrimidin-2-yl)-6-phenyl-2,6-dihydro-1H-benzo[def]carbazole)의 합성



[111] <단계 1> 4,8-dibromo-6-phenyl-2,6-dihydro-1H-benzo[def]carbazole의 합성

- [112] 4,8-dibromo-2,6-dihydro-1H-benzo[def]carbazole (10g, 28.48mmol)과 iodobenzene (7.0g, 73.95mmol)을 톨루엔 300 ml에 녹인 다음 $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (1.3g, 1.37mmol)을 질소하에 투입하였다. 이후, NaOBu-t (8.21g, 85.44mmol)을 넣고, $(t\text{-Bu})_3\text{P}$ (1.42 ml, 1.42mmol)을 상기 반응액에 투입한 다음 혼합물을 5시간 동안 환류 교반하였다.
- [113] TLC로 반응이 종결되는 것을 확인한 후 상온으로 식혔다. 반응 종료 후 증류수를 넣고 에틸아세테이트로 추출하였다. 얻어진 유기층을 Na_2SO_4 로 건조시키고 감압 증류한 다음 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 화합물 (8.6g, 수율 70%)을 얻었다. HRMS $[\text{M}]^+$:427.132
- [114] <단계 2> 4,8-di(9H-carbazol-9-yl)-6-phenyl-2,6-dihydro-1H-benzo[def]carbazole의 합성
- [115] 4,8-dibromo-6-phenyl-2,6-dihydro-1H-benzo[def]carbazole (8.0g, 18.7mmol)과 carbazole (3.1g, 18.7mmol)을 톨루엔 200 ml에 녹인 다음 $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (880mg, 0.93mmol)을 질소하에 투입하였다. 이후, NaOBu-t (5.4g, 56.18mmol)을 넣고, $(t\text{-Bu})_3\text{P}$ (1.0 ml, 1.0mmol)을 상기 반응액에 투입한 다음 혼합물을 5시간 동안 환류 교반하였다.
- [116] TLC로 반응이 종결되는 것을 확인한 후 상온으로 식혔다. 반응 종료 후 증류수를 넣고 에틸아세테이트로 추출하였다. 얻어진 유기층을 Na_2SO_4 로 건조시키고 감압 증류한 다음 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 화합물 (6.2g, 수율 65%)을 얻었다. HRMS $[\text{M}]^+$:513.426
- [117] <단계 3>
4-(9H-carbazol-9-yl)-6-phenyl-8-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-2,6-dihydro-1H-benzo[def]carbazole의 합성
- [118] 4,8-di(9H-carbazol-9-yl)-6-phenyl-2,6-dihydro-1H-benzo[def]carbazole (6.2g, 12.07mmol)과 Bis(pinacolate)diboron (3.7 g, 14.57mmol) 및 $\text{Pd}(\text{dppf})\text{Cl}_2$ (490 mg, 0.60 mmol), KOAc(2.4 g, 24.4 mmol)를 플라스크에 넣고 질소 분위기 하에 톨루엔 120 ml에 용해시킨 후 12시간 동안 환류 교반하였다. TLC로 반응이 종결되는 것을 확인한 후 상온으로 식혔다. 반응 종료 후 증류수를 넣고 에틸아세테이트로 추출하였다. 얻어진 유기층을 Na_2SO_4 로 건조시키고 감압 증류한 다음 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 화합물 (6.1g, 수율 90%)을 얻었다. HRMS $[\text{M}]^+$:560.491
- [119] <단계 4>
4-(9H-carbazol-9-yl)-6-phenyl-8-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-2,6-dihydro-1H-benzo[def]carbazole의 합성
- [120] 4-(9H-carbazol-9-yl)-6-phenyl-8-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-2,6-dihydro-1H-benzo[def]carbazole (6.0g, 10.70mmol)과 2-chloro-4,6-diphenylpyrimidine (3.4g, 12.74mmol) 및 $\text{Pd}(\text{PPh}_3)_4$ (620mg, 0.53mmol)을 플라스크에 넣고 2N Na_2CO_3 포화 수용액 32ml와 1,4-dioxane 110 ml를 넣어 녹인 후 13시간 동안

가열교반하였다.

- [121] 반응 종료 후 증류수를 투여하고 에틸아세테이트로 추출하였다. 얻어진 유기층을 Na_2SO_4 로 건조시키고 감압 증류한 다음 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 표제 화합물(5.7g, 수율 80%)을 얻었다. HRMS $[\text{M}]^+$:664.794

[122]

[123] **[합성 예 6] Cpd 12**

(4-(9H-carbazol-9-yl)-8-(4,6-diphenyl-1,3,5-triazin-2-yl)-6-phenyl-2,6-dihydro-1H-benzo[def]carbazole)의 합성

- [124] 2-chloro-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-chloro-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine 를 사용하는 것을 제외하고는, 상기 합성 예 5와 동일한 과정을 수행하여 표제 화합물(수율 80%)을 얻었다. HRMS $[\text{M}]^+$:665.782

[125]

[126] **[합성 예 7] Cpd 13**

(4-(9H-carbazol-9-yl)-8-(4,6-diphenylpyridin-2-yl)-6-phenyl-2,6-dihydro-1H-benz o[def]carbazole)의 합성

- [127] 2-chloro-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-bromo-4,6-diphenylpyridine를 사용하는 것을 제외하고는, 상기 합성 예 5와 동일한 과정을 수행하여 표제 화합물(수율 83%)을 얻었다. HRMS $[\text{M}]^+$:663.806

[128]

[129] **[합성 예 8] Cpd 14**

(2-([1,1':3',1''-terphenyl]-5'-yl)-6-(9H-carbazol-9-yl)-4-phenyl-8,9-dihydro-4H-ben zo[def]carbazole)의 합성

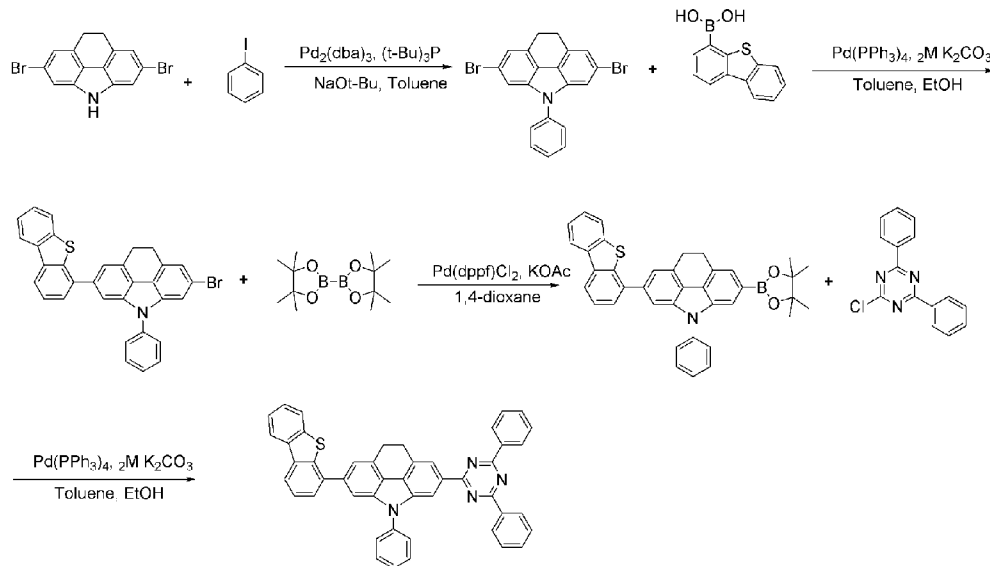
- [130] 2-chloro-4,6-diphenylpyrimidine 대신 1-Bromo-3,5-diphenylbenzene 를 사용하는 것을 제외하고는, 상기 합성 예 5와 동일한 과정을 수행하여 표제 화합물(수율 83%)을 얻었다. HRMS $[\text{M}]^+$:662.272

[131]

[132] **[합성 예 9] Cpd 15**

(4-(dibenzo[b,d]thiophen-4-yl)-8-(4,6-diphenyl-1,3,5-triazin-2-yl)-6-phenyl-2,6-dih ydro-1H-benzo[def]carbazole)의 합성

[133]



[134] <단계 1> 4,8-dibromo-6-phenyl-2,6-dihydro-1H-benzo[def]carbazole의 합성

[135] 4,8-dibromo-2,6-dihydro-1H-benzo[def]carbazole (10g, 28.48mmol)과 iodobenzene (7.0g, 73.95mmol)을 톨루엔 300 ml에 녹인 다음 $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (1.3g, 1.37mmol)을 질소하에 투입하였다. 이후, NaOBu-t (8.21g, 85.44mmol)을 넣고, $(t\text{-Bu})_3\text{P}$ (1.42 ml, 1.42mmol)을 상기 반응액에 투입한 다음 혼합물을 5시간 동안 환류 교반하였다.

[136] TLC로 반응이 종결되는 것을 확인한 후 상온으로 식혔다. 반응 종료 후 증류수를 넣고 에틸아세테이트로 추출하였다. 얻어진 유기층을 Na_2SO_4 로 건조시키고 감압 증류한 다음 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 화합물 (8.6g, 수율 70%)을 얻었다. HRMS $[\text{M}]^+$:427.132

[137] <단계 2>

4-bromo-8-(dibenzo[b,d]thiophen-4-yl)-6-phenyl-2,6-dihydro-1H-benzo[def]carbazole의 합성

[138] 4,8-dibromo-6-phenyl-2,6-dihydro-1H-benzo[def]carbazole (8.0g, 18.7mmol)과 dibenzo[b,d]thiophen-4-ylboronic acid (4.3g, 14.03mmol) 및 $\text{Pd}(\text{PPh}_3)_4$ (1.1g, 0.95mmol)을 플라스크에 넣고 2N Na_2CO_3 포화 수용액 56 ml와 1,4-dioxane 190 ml를 넣어 녹인 후 13시간 동안 가열 교반하였다.

[139] 반응 종료 후 증류수를 투여하고 에틸아세테이트로 추출하였다. 얻어진 유기층을 Na_2SO_4 로 건조시키고 감압 증류한 다음 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 표제 화합물(8.4g, 수율 85%)을 얻었다. HRMS $[\text{M}]^+$:530.476

[140] <단계 3>

4-(dibenzo[b,d]thiophen-4-yl)-6-phenyl-8-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-2,6-dihydro-1H-benzo[def]carbazole의 합성

[141] 4-bromo-8-(dibenzo[b,d]thiophen-4-yl)-6-phenyl-2,6-dihydro-1H-benzo[def]carbazole (6.4g, 12.07mmol)과 Bis(pinacolate)diboron (3.7 g, 14.57mmol) 및 $\text{Pd}(\text{dppf})\text{Cl}_2$

(490 mg, 0.60 mmol), KOAc(2.4 g, 24.4 mmol)를 플라스크에 넣고 질소 분위기 하에 톨루엔 120 ml에 용해시킨 후 12시간 동안 환류 교반하였다. TLC로 반응이 종결되는 것을 확인한 후 상온으로 식혔다. 반응 종료 후 증류수를 넣고 에틸아세테이트로 추출하였다. 얻어진 유기층을 Na_2SO_4 로 건조시키고 감압 증류한 다음 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 화합물 (6.3g, 수율 90%)을 얻었다. HRMS $[M]^+$:577.542

[142] <단계 4>

4-(dibenzo[b,d]thiophen-4-yl)-8-(4,6-diphenyl-1,3,5-triazin-2-yl)-6-phenyl-2,6-dihydro-1H-benzo[def]carbazole의 합성

[143] 4-(dibenzo[b,d]thiophen-4-yl)-6-phenyl-8-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-2,6-dihydro-1H-benzo[def]carbazole (5.8g, 10.70mmol)과 2-chloro-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine (3.4g, 12.74mmol) 및 $\text{Pd}(\text{PPh}_3)_4$ (620mg, 0.53mmol)을 플라스크에 넣고 2N Na_2CO_3 포화 수용액 32ml와 1,4-dioxane 110 ml를 넣어 녹인 후 13시간 동안 가열교반하였다.

[144] 반응 종료 후 증류수를 투여하고 에틸아세테이트로 추출하였다. 얻어진 유기층을 Na_2SO_4 로 건조시키고 감압 증류한 다음 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 표제 화합물(5.1g, 수율 80%)을 얻었다. HRMS $[M]^+$:682.832

[145]

[146] [합성 예 10] Cpd 16

4-(dibenzo[b,d]thiophen-4-yl)-8-(4,6-diphenylpyrimidin-2-yl)-6-phenyl-2,6-dihydro-1H-benzo[def]carbazole의 합성

[147] 2-chloro-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine 대신 2-chloro-4,6-diphenylpyrimidine 를 사용하는 것을 제외하고는, 상기 합성 예 9와 동일한 과정을 수행하여 표제 화합물(수율 80%)을 얻었다. HRMS $[M]^+$:681.844

[148]

[149] [합성 예 11] Cpd 17

4-(dibenzo[b,d]thiophen-4-yl)-8-(4,6-diphenylpyridin-2-yl)-6-phenyl-2,6-dihydro-1H-benzo[def]carbazole의 합성

[150] 2-chloro-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine 대신 2-bromo-4,6-diphenylpyridine 를 사용하는 것을 제외하고는, 상기 합성 예 9와 동일한 과정을 수행하여 표제 화합물(수율 80%)을 얻었다. HRMS $[M]^+$:681.844

[151]

[152] [합성 예 12] Cpd 18

2-([1,1':3',1''-terphenyl]-5'-yl)-6-(dibenzo[b,d]thiophen-4-yl)-4-phenyl-8,9-dihydro-4H-benzo[def]carbazole의 합성

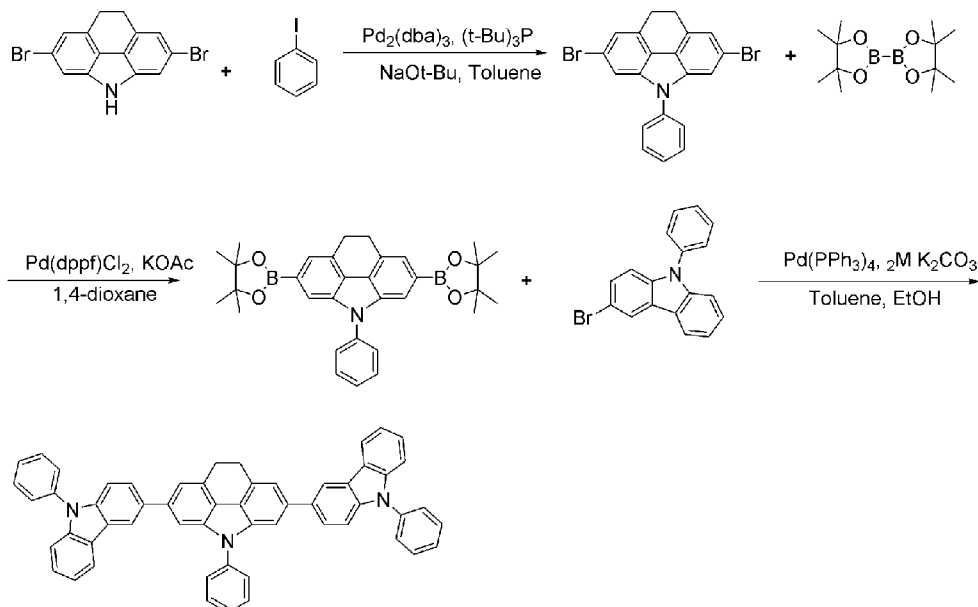
[153] 2-chloro-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine 대신 1-Bromo-3,5-diphenylbenzene를 사용하는 것을 제외하고는, 상기 합성 예 9와 동일한 과정을 수행하여 표제 화합물(수율 80%)을 얻었다. HRMS $[M]^+$:679.233

[154]

[155] [합성 예 13] Cpd 22

(6-phenyl-4,8-bis(9-phenyl-9H-carbazol-3-yl)-2,6-dihydro-1H-benzo[def]carbazole
)의 합성

[156]

[157] <단계 1> 4,8-dibromo-6-phenyl-2,6-dihydro-1H-benzo[def]carbazole의 합성

[158] 4,8-dibromo-2,6-dihydro-1H-benzo[def]carbazole (10g, 28.48mmol)과 iodobenzene (7.0g, 73.95mmol)을 톨루엔 300 ml에 녹인 다음 $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$ (1.3g, 1.37mmol)을 질소하에 투입하였다. 이후, NaOBu-t (8.21g, 85.44mmol)을 넣고, $(\text{t-Bu})_3\text{P}$ (1.42 ml, 1.42mmol)을 상기 반응액에 투입한 다음 혼합물을 5시간 동안 환류 교반하였다.

[159] TLC로 반응이 종결되는 것을 확인한 후 상온으로 식혔다. 반응 종료 후 증류수를 넣고 에틸아세테이트로 추출하였다. 얻어진 유기층을 Na_2SO_4 로 건조시키고 감압 증류한 다음 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 화합물 (8.6g, 수율 70%)을 얻었다. HRMS $[\text{M}]^+$:427.132

[160] <단계 2>

6-phenyl-4,8-bis(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-2,6-dihydro-1H-benzo[def]carbazole의 합성

[161] 4,8-dibromo-6-phenyl-2,6-dihydro-1H-benzo[def]carbazole (8.0g, 18.72mmol)과 Bis(pinacolate)diboron (11.9 g, 46.82mmol) 및 $\text{Pd}(\text{dppf})\text{Cl}_2$ (1.52 mg, 1.87 mmol), KOAc(7.3 g, 74.37mmol)를 플라스크에 넣고 질소 분위기 하에 톨루엔 120 ml에 용해시킨 후 12시간 동안 환류 교반하였다. TLC로 반응이 종결되는 것을 확인한 후 상온으로 식혔다. 반응 종료 후 증류수를 넣고 에틸아세테이트로 추출하였다. 얻어진 유기층을 Na_2SO_4 로 건조시키고 감압 증류한 다음 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 화합물 (8.7g, 수율 89%)을 얻었다. HRMS $[\text{M}]^+$:521.262

[162] <단계 3>

6-phenyl-4,8-bis(9-phenyl-9H-carbazol-3-yl)-2,6-dihydro-1H-benzo[def]carbazole 의
합성

[163] 6-phenyl-4,8-bis(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-2,6-dihydro-1H-benzo[def]carbazole (8.0g, 15.34mmol)과 3-bromo-9-phenyl-9H-carbazole (12.3g, 38.17mmol) 및 Pd(PPh₃)₄ (1.8mg, 1.55mmol)을 플라스크에 넣고 2N Na₂CO₃ 포화 수용액 92ml와 1,4-dioxane 150 ml를 넣어 녹인 후 13시간 동안 가열교반하였다.

[164] 반응 종료 후 증류수를 투여하고 에틸아세테이트로 추출하였다. 얻어진 유기층을 Na₂SO₄로 건조시키고 감압 증류한 다음 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 표제 화합물(8.6g, 수율 75%)을 얻었다. HRMS [M]⁺:751.913

[165]

[166] [합성예 14] Cpd 27

(4,8-bis(4,6-diphenylpyrimidin-2-yl)-6-phenyl-2,6-dihydro-1H-benzo[def]carbazole)의 합성

[167] 3-bromo-9-phenyl-9H-carbazole 대신 2-chloro-4,6-diphenylpyrimidine 를 사용하는 것을 제외하고는, 상기 합성예 13과 동일한 과정을 수행하여 표제 화합물(수율 80%)을 얻었다. HRMS [M]⁺:729.867

[168]

[169] [합성예 15] Cpd 28

(4,8-bis(4,6-diphenyl-1,3,5-triazin-2-yl)-6-phenyl-2,6-dihydro-1H-benzo[def]carbazole)의 합성

[170] 3-bromo-9-phenyl-9H-carbazole 대신 2-chloro-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine 를 사용하는 것을 제외하고는, 상기 합성예 13과 동일한 과정을 수행하여 표제 화합물(수율 80%)을 얻었다. HRMS [M]⁺:731.843

[171]

[172] [합성예 16] Cpd 29

(4,8-bis(4,6-diphenylpyridin-2-yl)-6-phenyl-2,6-dihydro-1H-benzo[def]carbazole)의 합성

[173] 3-bromo-9-phenyl-9H-carbazole 대신 2-bromo-4,6-diphenylpyridine 를 사용하는 것을 제외하고는, 상기 합성예 13과 동일한 과정을 수행하여 표제 화합물(수율 80%)을 얻었다. HRMS [M]⁺:727.891

[174]

[175] [합성예 17] Cpd 30

(2,6-di([1,1':3',1''-terphenyl]-5'-yl)-4-phenyl-8,9-dihydro-4H-benzo[def]carbazole)의 합성

[176] 3-bromo-9-phenyl-9H-carbazole 대신 1-Bromo-3,5-diphenylbenzene를 사용하는 것을 제외하고는, 상기 합성예 13과 동일한 과정을 수행하여 표제 화합물(수율 80%)을 얻었다. HRMS [M]⁺:725.308

[177]

[178] **[합성예 18~34] Cpd 37, 40, 43, 44, 47, 48, 49, 50, 51, 52, 53, 54, 58, 63, 64, 65, 66**

[179] Iodobenzene 대신 1-Bromo-3,5-diphenylbenzene를 사용하는 것을 제외하고는, 상기 합성예 1~17과 동일한 과정을 수행하여 표제 화합물을 각각 얻었다.

[180]

[181] **[합성예 35~51] Cpd 73, 76, 79, 80, 83, 84, 85, 86, 87, 88, 89, 90, 94, 99, 100, 101, 102**

[182] Iodobenzene 대신 2-chloro-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine 를 사용하는 것을 제외하고는, 상기 합성예 1~17과 동일한 과정을 수행하여 표제 화합물을 각각 얻었다.

[183]

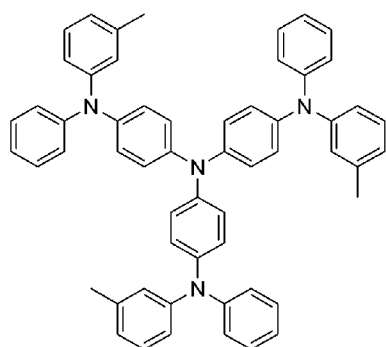
[184] **[실시예 1 ~ 51] 녹색 유기 EL 소자의 제작**

[185] 상기에서 합성된 화합물 cpd (1, 4, 7-8, 11-18, 22, 27-30, 37, 40, 43-44, 47-54, 58, 63-66, 73, 76, 79-80, 83-90, 94, 99-102)을 통상적으로 알려진 방법으로 고순도 승화정제를 수행한 후 아래의 과정에 따라 녹색 유기 EL 소자를 제작하였다.

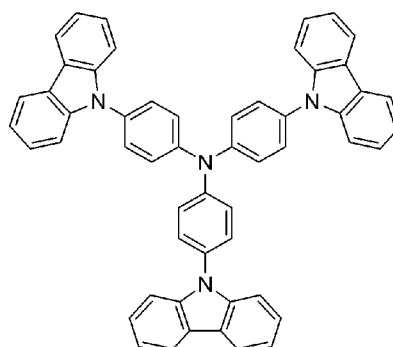
[186] 먼저, ITO (Indium tin oxide)가 1500Å 두께로 박막 코팅된 유리 기판을 증류수 초음파로 세척하였다. 증류수 세척이 끝나면 이소프로필 알코올, 아세톤, 메탄올 등의 용제로 초음파 세척을 하고 건조시킨 후 UV OZONE 세정기 (Power sonic 405, 화신테크)로 이송시킨 다음 UV를 이용하여 상기 기판을 5분간 세정하고 진공 증착기로 기판을 이송하였다.

[187] 이렇게 준비된 ITO 투명 전극 위에 m-MTDATA (60 nm)/TCTA (80 nm)/ 화합물 cpd (1, 4, 7-8, 11-18, 22, 27-30, 37, 40, 43-44, 47-54, 58, 63-66, 73, 76, 79-80, 83-90, 94, 99-102)(각각) + 10 % Ir(ppy)₃ (300nm)/BCP (10 nm)/Alq₃ (30 nm)/LiF (1 nm)/Al (200 nm) 순으로 적층하여 유기 EL 소자를 제작하였다.[188] m-MTDATA, TCTA, Ir(ppy)₃, CBP 및 BCP의 구조는 하기와 같다.

[189]

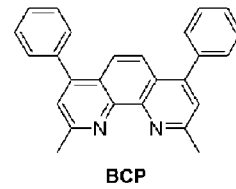
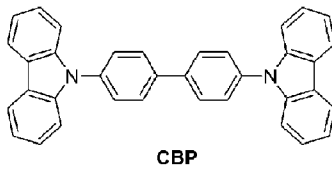
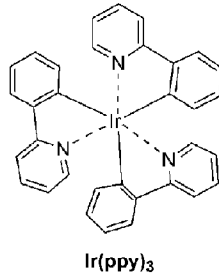


m-MTDATA



TCTA

[190]



[191]

[192] **[비교예 1] 녹색 유기 EL 소자의 제작**[193] 발광층 형성시 발광 호스트 물질로서 화합물 대신 **CBP**를 사용하는 것을 제외하고는, 상기 실시예 1과 동일한 과정으로 녹색 유기 EL 소자를 제작하였다.

[194]

[195] **[평가예 1]**[196] 실시예 1~51 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.

[197] 표 1

[Table 1]

샘플	호스트	구동 전압(V)	EL 피크(nm)	전류 효율(cd/A)
실시예 1	1	6.78	515	42.4
실시예 2	4	6.81	518	41.1
실시예 3	7	6.79	517	40.8
실시예 4	8	6.81	518	41.1
실시예 5	11	6.79	517	40.8
실시예 6	12	6.78	515	42.4
실시예 7	13	6.81	518	41.1
실시예 8	14	6.79	517	40.8
실시예 9	15	6.81	518	41.1
실시예 10	16	6.79	517	40.8
실시예 11	17	6.79	517	40.8
실시예 12	18	6.81	518	41.1
실시예 13	22	6.78	515	42.4
실시예 14	27	6.81	518	41.1
실시예 15	28	6.79	517	40.8
실시예 16	29	6.81	518	41.1
실시예 17	30	6.79	517	40.8
실시예 18	37	6.79	517	40.8
실시예 19	40	6.81	518	41.1
실시예 20	43	6.78	515	42.4
실시예 21	44	6.81	518	41.1
실시예 22	47	6.79	517	40.8
실시예 23	48	6.81	518	41.1
실시예 24	49	6.79	517	40.8
실시예 25	50	6.79	517	40.8
실시예 26	51	6.81	518	41.1
실시예 27	52	6.79	517	40.8
실시예 28	53	6.81	518	41.1
실시예 29	54	6.78	515	42.4

실시예 30	58	6.81	518	41.1
실시예 31	63	6.79	517	40.8
실시예 32	64	6.81	518	41.1
실시예 33	65	6.79	517	40.8
실시예 34	66	6.79	517	40.8
실시예 35	73	6.81	518	41.1
실시예 36	76	6.78	515	42.4
실시예 37	79	6.81	518	41.1
실시예 38	80	6.79	517	40.8
실시예 39	83	6.81	518	41.1
실시예 40	84	6.79	517	40.8
실시예 41	85	6.79	517	40.8
실시예 42	86	6.81	518	41.1
실시예 43	87	6.79	517	40.8
실시예 44	88	6.81	518	41.1
실시예 45	89	6.78	515	42.4
실시예 46	90	6.81	518	41.1
실시예 47	94	6.79	517	40.8
실시예 48	99	6.81	518	41.1
실시예 49	100	6.79	517	40.8
실시예 50	101	6.79	517	40.8
실시예 51	102	6.81	518	41.1
비교예 1	CBP	6.93	516	38.2

[198] 상기 표 1에 나타낸 바와 같이, 본 발명에 따른 화합물을 녹색 유기 EL 소자의 발광층으로 사용하는 실시예 1~51의 유기 EL 소자는 종래 CBP를 사용하는 비교예 1의 녹색 유기 EL 소자와 비교해 볼 때, 효율 및 구동전압 면에서 보다 우수한 성능을 나타내는 것을 알 수 있었다.

[199]

[200] **[실시예 52 ~ 102] 청색 유기 EL 소자의 제조**

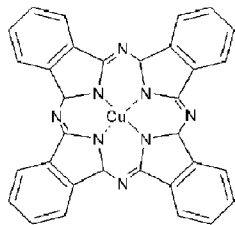
[201] 앞서 합성된 화합물 cpd (1, 4, 7-8, 11-18, 22, 27-30, 37, 40, 43-44, 47-54, 58, 63-66, 73, 76, 79-80, 83-90, 94, 99-102)을 통상적으로 알려진 방법으로 고순도 승화정제를 수행한 후 아래의 과정에 따라 청색 유기 EL 소자를 제작하였다.

[202] 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.

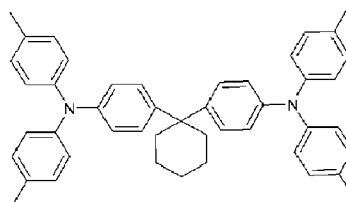
[203] 이렇게 준비된 ITO 투명 전극 위에 CuPc (10 nm)/ TPAC (30 nm)/ 화합물 cpd(1, 4, 7-8, 11-18, 22, 27-30, 37, 40, 43-44, 47-54, 58, 63-66, 73, 76, 79-80, 83-90, 94, 99-102)(각각) + 7 % Flrpic (30nm)/ Alq₃ (30 nm)/ LiF (0.2 nm)/Al (150 nm) 순으로 적층하여 유기 EL 소자를 제작하였다.

[204] CuPc, TPAC, Flrpic의 구조는 하기와 같다.

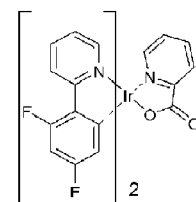
[205]



CuPc



TPAC



Flrpic

[206]

[207] **[비교예 2] 유기 EL 소자의 제작**

[208] 발광층 형성시 발광 호스트 물질로서 화합물 대신 CBP를 사용하는 것을 제외하고는, 실시예 52 내지 실시예 102와 동일한 과정으로 청색 유기 EL 소자를 제작하였다.

[209]

[210] **[평가예 2]**

[211] 실시예 52 ~ 102 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.

[212] 표 2

[Table 2]

샘플	호스트	구동 전압(V)	EL 피크(nm)	전류 효율(cd/A)
실시예 52	1	7.22	471	5.99
실시예 53	4	7.12	472	5.85
실시예 54	7	7.00	472	6.34
실시예 55	8	7.29	473	6.90
실시예 56	11	7.30	474	6.34
실시예 57	12	7.24	475	6.55
실시예 58	13	7.15	471	6.94
실시예 59	14	7.23	472	6.25
실시예 60	15	7.00	472	6.34
실시예 61	16	7.29	473	6.90
실시예 62	17	7.30	474	6.34
실시예 63	18	7.24	475	6.55
실시예 64	22	7.15	471	6.94
실시예 65	27	7.23	472	6.25
실시예 66	28	7.22	471	5.99
실시예 67	29	7.12	472	5.85
실시예 68	30	7.00	472	6.34
실시예 69	37	7.29	473	6.90
실시예 70	40	7.30	474	6.34
실시예 71	3	7.24	475	6.55
실시예 72	44	7.15	471	6.94
실시예 73	47	7.23	472	6.25
실시예 74	48	7.12	472	5.85
실시예 75	49	7.00	472	6.34
실시예 76	50	7.29	473	6.90
실시예 77	51	7.30	474	6.34
실시예 78	52	7.24	475	6.55
실시예 79	53	7.15	471	6.94

실시예 80	54	7.23	472	6.25
실시예 81	58	7.12	472	5.85
실시예 82	63	7.00	472	6.34
실시예 83	64	7.29	473	6.90
실시예 84	65	7.30	474	6.34
실시예 85	66	7.24	475	6.55
실시예 86	73	7.15	471	6.94
실시예 87	76	7.23	472	6.25
실시예 88	79	7.30	474	6.34
실시예 89	80	7.24	475	6.55
실시예 90	83	7.15	471	6.94
실시예 91	84	7.23	472	6.25
실시예 92	85	7.12	472	5.85
실시예 93	86	7.00	472	6.34
실시예 94	87	7.29	473	6.90
실시예 95	88	7.30	474	6.34
실시예 96	89	7.24	475	6.55
실시예 97	90	7.15	471	6.94
실시예 98	94	7.23	472	6.25
실시예 99	99	7.12	472	5.85
실시예 100	100	7.00	472	6.34
실시예 101	101	7.29	473	6.90
실시예 102	102	7.30	474	6.34
비교예 2	CBP	7.80	474	5.80

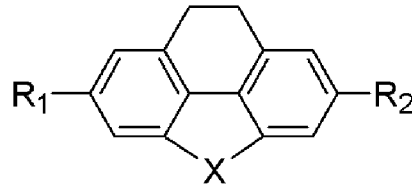
[213] 상기 표 2에 나타낸 바와 같이, 본 발명에 따른 화합물을 청색 유기 EL 소자의 발광층으로 사용하는 실시예 52~102의 유기 EL 소자는 종래 CBP를 사용하는 비교예 2의 청색 유기 EL 소자와 비교해 볼 때 효율 및 구동전압 면에서 보다 우수한 성능을 나타내는 것을 알 수 있다.

청구범위

[청구항 1]

하기 화학식 1로 표시되는 화합물:

[화학식 1]



상기 식에서,

X는 NR₃, O 또는 S이며,

R₁ 내지 R₃는 서로 같거나 또는 상이하며, 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 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, -P(=O)R_aR_b, 치환 또는 비치환된 C₃~C₄₀의 시클로알킬기 및 치환 또는 비치환된 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기로 이루어진 군에서 선택되거나, 또는 이들이 인접하는 기와 축합 지방족 고리, 축합 방향족 고리, 축합 헤테로지방족 고리 또는 축합 헤테로방향족 고리를 형성하는 기이며,

R_a 및 R_b는 서로 같거나 또는 상이하며, 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 C₆~C₄₀의 아릴기, 치환 또는 비치환된 C₁~C₄₀의 알킬기, 치환 또는 비치환된 C₂~C₄₀의 알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₂~C₄₀의 알키닐기, 치환 또는 비치환된 핵원자수 5 내지 40의 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 C₆~C₄₀의 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C₁~C₄₀의 알킬옥시기 및 치환 또는 비치환된 C₃~C₄₀의 시클로알킬기로 이루어진 군에서 선택되거나, 또는 이들이 인접하는 기와 축합 지방족 고리, 축합 방향족 고리, 축합 헤테로지방족 고리 또는 축합 헤테로방향족 고리를 형성하는 기이며,

여기서, 상기 C₁~C₄₀의 알킬기, C₂~C₄₀의 알케닐기, C₂~C₄₀의 알키닐기, C₆~C₄₀의 아릴기, 핵원자수 5 내지 40의 헤테로아릴기, C₆~C₄₀의 아릴옥시기, C₁~C₄₀의 알킬옥시기, C₃~C₄₀의 시클로알킬기 및 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기는, 각각 독립적으로 중수소, 할로젠, 시아노기, C₁~C₄₀의 알킬기, C₂~C₄₀의 알케닐기, C₂~C₄₀의 알키닐기, C₆~C₄₀의 아릴기, 핵원자수 5 내지 40의 헤테로아릴기, C₆~C₄₀의 아릴옥시기, C₁~C₄₀의 알킬옥시기, C₆~C₄₀

의 아릴아민기, $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴알킬기, $C_3\sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, $C_3\sim C_{40}$ 의 헤테로시클로알킬기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬실릴기, 및 $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴실릴기로 이루어진 군으로부터 선택되는 하나 이상의 치환기로 치환될 수 있다.

[청구항 2]

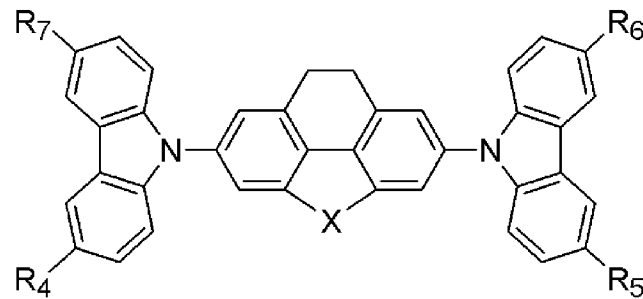
제1항에 있어서,

상기 R_1 내지 R_2 는 서로 같거나 또는 상이하며, 각각 독립적으로 $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 40의 헤테로아릴기이거나, 또는 이들이 인접하는 기와 형성하는 축합 지방족 고리, 축합 방향족 고리, 축합 헤테로지방족 고리 또는 축합 헤테로방향족 고리이며, 상기 R_3 는 $C_6\sim C_8$ 아릴기, 핵원자수 5 내지 6의 헤테로아릴기이며, 상기 $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 40의 헤테로아릴기는 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, $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴알킬기, $C_3\sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, $C_3\sim C_{40}$ 의 헤테로시클로알킬기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬실릴기, 및 $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴실릴기로 이루어진 군으로부터 선택되는 하나 이상의 치환기로 치환되는 것을 특징으로 하는 화합물.

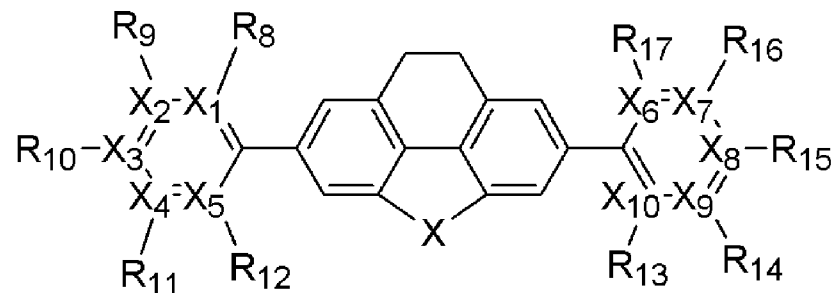
[청구항 3]

제1항에 있어서, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 하기 화학식 2 또는 화학식 3으로 표시되는 화합물인 것을 특징으로 하는 화합물:

[화학식 2]



[화학식 3]



상기 식에서,

X는 NR_3 , O 또는 S이며,
 X_1 내지 X_{10} 는 서로 같거나 또는 상이하며, 각각 독립적으로 C 또는 N이며,
 R_3 는 제1항에서 정의된 바와 동일하며,
 R_4 내지 R_{17} 는 서로 같거나 또는 상이하며, 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 치환 또는 비치환된 $\text{C}_1\sim\text{C}_{10}$ 의 알킬기, 치환 또는 비치환된 $\text{C}_2\sim\text{C}_{10}$ 의 알케닐기, 치환 또는 비치환된 $\text{C}_2\sim\text{C}_{10}$ 의 알키닐기, 치환 또는 비치환된 $\text{C}_6\sim\text{C}_8$ 의 아릴기, 치환 또는 비치환된 핵원자수 5 내지 8의 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 $\text{C}_3\sim\text{C}_{10}$ 의 시클로알킬기 및 치환 또는 비치환된 핵원자수 3 내지 10의 헤테로시클로알킬기로 이루어진 군에서 선택되며,
 여기서, 상기 $\text{C}_1\sim\text{C}_{10}$ 의 알킬기, $\text{C}_2\sim\text{C}_{10}$ 의 알케닐기, $\text{C}_2\sim\text{C}_{10}$ 의 알키닐기, $\text{C}_6\sim\text{C}_8$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 8의 헤테로아릴기, $\text{C}_3\sim\text{C}_{10}$ 의 시클로알킬기 및 핵원자수 3 내지 10의 헤테로시클로알킬기는, 각각 독립적으로 중수소, 할로젠, 시아노기, $\text{C}_1\sim\text{C}_{40}$ 의 알킬기, $\text{C}_2\sim\text{C}_{40}$ 의 알케닐기, $\text{C}_2\sim\text{C}_{40}$ 의 알키닐기, $\text{C}_6\sim\text{C}_{40}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 40의 헤테로아릴기, $\text{C}_6\sim\text{C}_{40}$ 의 아릴옥시기, $\text{C}_1\sim\text{C}_{40}$ 의 알킬옥시기, $\text{C}_6\sim\text{C}_{40}$ 의 아릴아민기, $\text{C}_6\sim\text{C}_{40}$ 의 아릴알킬기, $\text{C}_3\sim\text{C}_{40}$ 의 시클로알킬기, $\text{C}_3\sim\text{C}_{40}$ 의 헤테로시클로알킬기, $\text{C}_1\sim\text{C}_{40}$ 의 알킬실릴기, 및 $\text{C}_6\sim\text{C}_{40}$ 의 아릴실릴기로 이루어진 군으로부터 선택되는 하나 이상의 치환기로 치환될 수 있다.

[청구항 4] 제1항에 있어서, 상기 X는 NR_3 이며, R_3 는 $\text{C}_6\sim\text{C}_8$ 아릴기, 핵원자수 5 내지 6의 헤테로아릴기인 것을 특징으로 하는 화합물.

[청구항 5] 양극, 음극, 및 상기 양극과 음극 사이에 개재(介在)된 1층 이상의 유기물층을 포함하는 유기 전계 발광 소자로서, 상기 1층 이상의 유기물층 중에서 적어도 하나는 제1항 내지 제4항 중 어느 한 항에 따른 화합물을 포함하는 것을 특징으로 하는 유기 전계 발광 소자.

[청구항 6] 제 5 항에 있어서, 상기 화합물을 포함하는 유기물층은 발광층, 전자 수송층 및 정공 수송층으로 구성된 군으로부터 선택되는 적어도 하나의 층인 것을 특징으로 하는 유기 전계 발광 소자.

[청구항 7] 제 5항에 있어서, 상기 화합물을 포함하는 유기물층은 발광층이며, 상기 화합물은 상기 발광층의 인광 호스트로 사용되는 것을 특징으로 하는 유기 전계 발광 소자.

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/KR2013/001027**A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER*****C07D 403/14(2006.01)i, C07D 209/82(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 403/14; C08G 61/12; H05B 33/14; C07D 209/56; C09K 11/06; C08G 73/00; C07F 7/22; C07D 209/82; H01L 51/50

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: carbazole, organic light emitting device

C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
X	CN101891670 A (SOUTH CHINA UNIVERSITY OF TECHNOLOGY) 24 November 2010 See claims 1 to 5, [0021]-[0089]	1-7
X	WO 2011-116866 A1 (MERCK PATENT GMBH et al.) 29 September 2011 See examples 1, 2, claim 14	1-7
X	CN101885834 A (SOUTH CHINA UNIVERSITY OF TECHNOLOGY) 17 November 2010 See claim 1, [0016]-[0112]	1-7
A	JP 2004-018665 A (TOYO INK MFG CO., LTD.) 22 January 2004 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

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

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

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

"&" document member of the same patent family

Date of the actual completion of the international search

28 JUNE 2013 (28.06.2013)

Date of mailing of the international search report

28 JUNE 2013 (28.06.2013)

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/KR2013/001027

Patent document cited in search report	Publication date	Patent family member	Publication date
CN101891670 A	24.11.2010	CN 101891670 B	09.05.2012
WO 2011-116866 A1	29.09.2011	CN 103097429 A	08.05.2013
		EP 2563836 A1	06.03.2013
		GB 201217262 D0	07.11.2012
		GB 2491323 A	28.11.2012
		SG 183949 A1	30.10.2012
		US 2013-0001476 A1	03.01.2013
CN101885834 A	17.11.2010	CN 101885834 B	27.06.2012
JP 2004-018665 A	22.01.2004	NONE	

A. 발명이 속하는 기술분류(국제특허분류(IPC))

C07D 403/14(2006.01)i, C07D 209/82(2006.01)i, C09K 11/06(2006.01)i, H01L 51/50(2006.01)i

B. 조사된 분야

조사된 최소문헌(국제특허분류를 기재)

C07D 403/14; C08G 61/12; H05B 33/14; C07D 209/56; C09K 11/06; C08G 73/00; C07F 7/22; C07D 209/82; H01L 51/50

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:카바줄, 유기발광소자

C. 관련 문헌

카테고리*	인용문헌명 및 관련 구절(해당하는 경우)의 기재	관련 청구항
X	CN101891670 A (SOUTH CHINA UNIVERSITY OF TECHNOLOGY) 2010.11.24 청구항 제1항 내지 제5항, [0021]-[0089] 참조	1-7
X	WO 2011-116866 A1 (MERCK PATENT GMBH 외 5명) 2011.09.29 실시예1, 2, 청구항 제14항 참조	1-7
X	CN101885834 A (SOUTH CHINA UNIVERSITY OF TECHNOLOGY) 2010.11.17 청구항 제1항, [0016]-[0112] 참조	1-7
A	JP 2004-018665 A (TOYO INK MFG CO., LTD.) 2004.01.22 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

2013년 06월 28일 (28.06.2013)

국제조사보고서 발송일

2013년 06월 28일 (28.06.2013)

ISA/KR의 명칭 및 우편주소

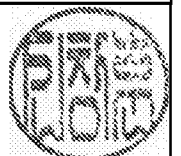
대한민국 특허청
(302-701) 대전광역시 서구 청사로 189,
4동 (둔산동, 정부대전청사)

팩스 번호 82-42-472-7140

심사관

신창훈

전화번호 82-42-481-8406



국제조사보고서에서 인용된 특허문헌	공개일	대응특허문헌	공개일
CN101891670 A	2010.11.24	CN 101891670 B	2012.05.09
WO 2011-116866 A1	2011.09.29	CN 103097429 A	2013.05.08
		EP 2563836 A1	2013.03.06
		GB 201217262 D0	2012.11.07
		GB 2491323 A	2012.11.28
		SG 183949 A1	2012.10.30
		US 2013-0001476 A1	2013.01.03
CN101885834 A	2010.11.17	CN 101885834 B	2012.06.27
JP 2004-018665 A	2004.01.22	없음	