

(12) 특허협력조약에 의하여 공개된 국제출원

(19) 세계지식재산권기구
국제사무국

(43) 국제공개일
2016 년 8 월 11 일 (11.08.2016)



(10) 국제공개번호
WO 2016/126031 A2

- (51) 국제특허분류:
C07D 487/04 (2006.01) C07D 401/14 (2006.01)
C07D 401/04 (2006.01) C09K 11/06 (2006.01)
- (21) 국제출원번호: PCT/KR2016/000692
- (22) 국제출원일: 2016 년 1 월 22 일 (22.01.2016)
- (25) 출원언어: 한국어
- (26) 공개언어: 한국어
- (30) 우선권정보:
10-2015-0016776 2015 년 2 월 3 일 (03.02.2015) KR
- (71) 출원인: 주식회사 두산 (DOOSAN CORPORATION)
[KR/KR]; 04563 서울시 중구 장충단로 275, Seoul (KR).
- (72) 발명자: 김지이 (KIM, Ji Yi); 15017 경기도 시흥시 합송로 29 번길 51 1302 동 901 호, Gyeonggi-do (KR). 심재의 (SIM, Jae Yi); 04720 서울시 성동구 독서당로 431 102-205 호, Seoul (KR).
- (74) 대리인: 특허법인 한빛 (HANBEOT PATENT & LAW FIRM); 03737 서울시 서대문구 충정로 7 구세군빌딩 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, 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:

- 국제조사보고서 없이 공개하며 보고서 접수 후 이를 별도 공개함 (규칙 48.2(g))

(54) Title: ORGANIC COMPOUND AND ORGANIC ELECTROLUMINESCENT ELEMENT COMPRISING SAME

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

(57) Abstract: The present invention relates to: a novel compound having an excellent light-emitting ability; and an organic electroluminescent element having improved characteristics such as light-emitting efficiency, driving voltage, and lifespan since at least one organic layer thereof contains the compound.

(57) 요약서: 본 발명은 발광능이 우수한 신규의 화합물 및 이를 하나 이상의 유기물층에 포함함으로써 발광효율, 구동 전압, 수명 등의 특성이 향상된 유기 전계 발광 소자에 관한 것이다.



WO 2016/126031 A2

명세서

발명의 명칭: 유기 화합물 및 이를 포함하는 유기 전계 발광 소자 기술분야

- [1] 본 발명은 신규한 유기 발광 화합물 및 이를 이용한 유기 전계 발광 소자에 관한 것이다.

배경기술

- [2] 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, 정공주입 물질, 정공수송 물질, 전자수송 물질, 전자주입 물질 등으로 분류될 수 있다.
- [3] 유기 전계 발광 소자의 발광 효율을 높이기 위해서는 색순도 증가와 에너지 전이가 필요한데, 이를 위해 호스트 물질과 도펀트 물질이 혼합된 발광 물질을 사용할 수 있다. 상기 도펀트 물질은 유기 물질을 사용하는 형광 도펀트와 Ir, Pt 등의 중원자(heavy atoms)가 포함된 금속 착체 화합물을 사용하는 인광 도펀트로 나눌 수 있다. 이때, 인광 물질은 이론적으로 형광 물질에 비해 4배까지 발광 효율을 향상시킬 수 있기 때문에, 인광 도펀트 뿐만 아니라 인광 호스트에 대한 연구가 많이 진행되고 있다. 현재 발광층의 인광 도펀트 물질로는 Firpic, Ir(ppy)₃, (acac)Ir(btp)₂ 등과 같은 Ir을 포함하는 금속 착체 화합물이 알려져 있으며, 인광 호스트 물질로는 CBP가 알려져 있다.
- [4] 그러나, 종래의 물질들은 유리전이온도가 낮아 열적 안정성이 좋지 않기 때문에, 유기 전계 발광 소자에서의 수명 측면에서 만족할 만한 수준이 되지 못하고 있다. 따라서, 우수한 성능을 가지는 발광 물질을 포함하는 유기 전계 발광 소자의 개발이 요구되고 있다.

발명의 상세한 설명

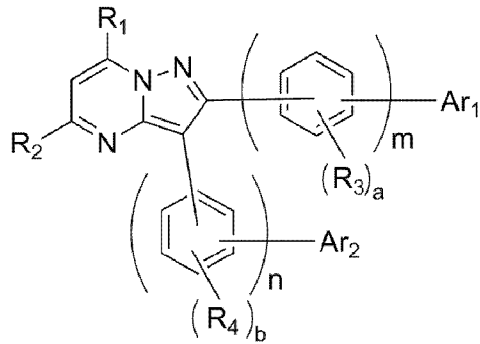
기술적 과제

- [5] 본 발명은 유기 전계 발광 소자에 적용할 수 있으며, 엑시톤의 확산을 방지할 수 있는 신규 유기 화합물을 제공하는 것을 목적으로 한다.
- [6] 본 발명은 상기 신규 유기 화합물을 포함하여 구동전압, 발광효율 및 수명 등의 특성이 향상된 유기 전계 발광 소자를 제공하는 것을 목적으로 한다.

과제 해결 수단

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

[8] [화학식1]



[9] 상기 화학식 1에서,

[10] R₁ 및 R₂는 서로 동일하거나 상이하며, 각각 독립적으로 수소, C₁~C₄₀의 알킬기, 및 C₆~C₆₀의 아릴기로 이루어진 군에서 선택되고;

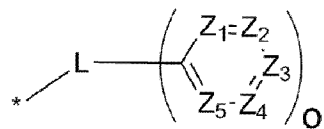
[11] m 및 n은 각각 0 내지 3의 정수이며;

[12] a 및 b는 각각 독립적으로 0 내지 4의 정수이고,

[13] R₃ 및 R₄는 각각 독립적으로 중수소, 할로젠기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, C₁~C₄₀의 알킬기, C₂~C₄₀의 알케닐기, C₂~C₄₀의 알키닐기, C₃~C₄₀의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, C₆~C₆₀의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴기, C₁~C₄₀의 알킬옥시기, C₆~C₆₀의 아릴옥시기, C₁~C₄₀의 알킬실릴기, C₆~C₆₀의 아릴실릴기, C₁~C₄₀의 알킬보론기, C₆~C₆₀의 아릴보론기, 포스핀기, C₁~C₄₀의 알킬포스핀기, C₆~C₄₀의 아릴포스핀기, C₁~C₄₀의 알킬포스핀옥사이드기, C₆~C₄₀의 아릴포스핀옥사이드기 및 C₆~C₆₀의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택되고;

[14] Ar₁ 및 Ar₂는 서로 동일하거나 상이하며, 각각 독립적으로 하기 화학식 2로 표시되는 치환체이고,

[15] [화학식2]



[16] *는 화학식 1에 결합하는 부분이고,

[17] L은 단일결합이거나, 또는 C₆~C₁₈의 아릴렌기 및 핵원자수 5 내지 18의 헤테로아릴렌기로 이루어진 군에서 선택되고,

[18] o는 0 또는 1이고,

[19] Z₁ 내지 Z₅는 서로 동일하거나 상이하며, 각각 독립적으로 N 또는 C(R₅)이고, 다만 Z₁ 내지 Z₅ 중 적어도 하나는 N이며,

[20] 이때 C(R₅)이 복수인 경우, 복수의 R₅은 서로 동일하거나 상이하고, 하나 이상의 R₅는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, C₁~C₄₀의 알킬기, C₂~C₄₀의 알케닐기, C₂~C₄₀의 알키닐기, C₃~C₄₀의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, C₆~C₆₀의 아릴기, 핵원자수 5 내지

- 60의 헤테로아릴기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬옥시기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴옥시기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬실릴기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴실릴기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬보론기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴보론기, 포스핀기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬포스핀기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴포스핀기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬포스핀옥사이드기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴포스핀옥사이드기 및 $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택되거나, 또는 인접하는 다른 R_5 또는 L과 결합하여 축합 방향족환 또는 축합 헤테로방향족환을 형성할 수 있으며;
- [21] 상기 R_1 및 R_2 의 알킬기, 아릴기, R_3 내지 R_5 의 알킬기, 알케닐기, 알키닐기, 시클로알킬기, 헤테로시클로알킬기, 아릴기, 헤테로아릴기, 알킬옥시기, 아릴옥시기, 알킬실릴기, 아릴실릴기, 알킬보론기, 아릴보론기, 포스핀기, 알킬포스핀기, 아릴포스핀기, 알킬포스핀옥사이드기, 아릴포스핀옥사이드기 및 아릴아민기와 L의 아릴렌기, 헤테로아릴렌기는, 각각 독립적으로 중수소, 할로젠기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_2\sim C_{40}$ 의 알케닐기, $C_2\sim C_{40}$ 의 알키닐기, $C_3\sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 40의 헤테로아릴기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬옥시기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴옥시기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬실릴기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴실릴기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬보론기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴보론기, 포스핀기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬포스핀기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴포스핀기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬포스핀옥사이드기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴포스핀옥사이드기 및 $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상의 치환기로 치환되거나 비치환되고, 이때 상기 치환기가 복수인 경우 이들은 서로 동일하거나 상이하다.
- [22] 또, 본 발명은 (i) 양극, (ii) 음극, 및 (iii) 상기 양극과 음극 사이에 개재(介在)된 1층 이상의 유기물층을 포함하며, 상기 1층 이상의 유기물층 중에서 적어도 하나는 전술한 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하는 것을 특징으로 하는 유기 전계 발광 소자를 제공한다.
- [23] 여기서, 상기 화합물 포함하는 유기물층은 발광층인 것이 바람직하다. 이때, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 발광층의 호스트이다.
- [24] 또한, 상기 발광층은 금속 착체 화합물계 도펀트를 포함하는 것이 바람직하다.
- 발명의 효과**
- [25] 본 발명에 따른 화합물은 열적 안정성, 캐리어 수송성 및 발광 특성이 우수하기 때문에, 유기 전계 발광 소자의 유기물층 재료로 사용될 수 있다. 특히, 본 발명에 따른 화합물을 발광층 재료로 포함하는 유기 전계 발광 소자의 경우, 종래의 호스트 재료를 포함하는 유기 전계 발광 소자에 비해 우수한 발광 성능, 낮은 구동전압, 높은 효율 및 장수명을 가질 수 있으며, 나아가 풀 칼라 디스플레이 패널의 성능 및 수명도 향상시킬 수 있다.
- 발명의 실시를 위한 형태**
- [26] 이하, 본 발명에 대하여 설명한다.
- [27] 본 발명에 따른 신규 화합물은 피라졸로[1,5-a]피리미딘

모이어티(pyrazolo[1,5-a]pyrimidine moiety)의 피리미딘 부분에 알킬기 또는 아릴기가 도입되면서, 피라졸 부분에 페닐렌기 또는 아릴렌기나 헤테로아릴렌기가 도입된 기본 골격을 가진 구조로서, 상기 화학식 1로 표시되는 것을 특징으로 한다. 이러한 화학식 1로 표시되는 화합물은 유리전이온도가 높아 열적 안정성이 우수할 뿐만 아니라, 캐리어 수송성 및 발광 성능이 우수하다. 따라서, 상기 화학식 1의 화합물을 유기 전계 발광 소자가 포함할 경우, 소자의 구동전압, 효율, 수명 등이 향상될 수 있다.

[28] 구체적으로, 상기 화학식 1의 화합물에서, 피라졸로[1,5-a]피리미딘 모이어티는 전자 흡수성이 큰 부분으로, 상기 모이어티에 전자 공여성이 큰 전자 주게기(electron donating group, EDG)가 결합될 경우, 분자 전체가 바이폴라(bipolar) 특성을 갖기 때문에, 정공과 전자의 결합력을 높일 수 있다. 이와 같이, 상기 모이어티에 EDG가 도입된 본 발명의 화합물은 우수한 캐리어 수송성 및 발광 특성이 우수하다.

[29] 이와 같이, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 유기 전계 발광 소자의 발광 특성을 향상시킴과 동시에, 캐리어 수송성, 발광 효율, 구동 전압, 수명 특성, 열적 안정성 등을 향상시킬 수 있다. 따라서, 본 발명에 따른 화학식 1의 화합물은 유기 전계 발광 소자의 유기물층 재료, 바람직하게는 발광보조층 재료로 사용될 수 있다. 이러한 본 발명의 화합물을 포함하는 유기 전계 발광 소자는 성능 및 수명 특성이 크게 향상될 수 있고, 이러한 유기 전계 발광 소자가 적용된 풀 칼라 유기 발광 패널도 성능이 극대화될 수 있다.

[30] 본 발명에 따른 화학식 1로 표시되는 화합물에서, R_1 및 R_2 는 서로 동일하거나 상이하며, 각각 독립적으로 수소, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬기, 및 $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴기로 이루어진 군에서 선택된다. 바람직하게, R_1 및 R_2 는 서로 동일하거나 상이하며, 각각 독립적으로 수소, $C_1\sim C_{20}$ 의 알킬기, 및 $C_6\sim C_{30}$ 의 아릴기로 이루어진 군에서 선택될 수 있다.

[31] 이때, 상기 R_1 및 R_2 의 알킬기, 아릴기는 각각 독립적으로 중수소, 할로젠기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬기(바람직하게 $C_1\sim C_{20}$ 의 알킬기), $C_2\sim C_{40}$ 의 알케닐기(바람직하게 $C_2\sim C_{20}$ 의 알케닐기), $C_2\sim C_{40}$ 의 알키닐기(바람직하게 $C_2\sim C_{20}$ 의 알키닐기), $C_3\sim C_{40}$ 의 시클로알킬기(바람직하게 $C_3\sim C_{20}$ 의 시클로알킬기), 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기(바람직하게 핵원자수 3 내지 20의 헤테로시클로알킬기), $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴기(바람직하게 $C_6\sim C_{20}$ 의 아릴기), 핵원자수 5 내지 40의 헤테로아릴기(바람직하게 핵원자수 5 내지 20의 헤테로아릴기), $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬옥시기(바람직하게 $C_1\sim C_{20}$ 의 알킬옥시기), $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴옥시기(바람직하게 $C_6\sim C_{30}$ 의 아릴옥시기), $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬실릴기(바람직하게 $C_1\sim C_{20}$ 의 알킬실릴기), $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴실릴기(바람직하게 $C_6\sim C_{30}$ 의 아릴실릴기), $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬보론기(바람직하게 $C_1\sim C_{20}$ 의 알킬보론기), $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴보론기(바람직하게 $C_6\sim C_{30}$ 의 아릴보론기), $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬포스핀기(바람직하게 $C_1\sim C_{20}$ 의 알킬포스핀기), $C_6\sim C_{60}$ 의

아릴포스핀기(바람직하게 $C_6 \sim C_{30}$ 의 아릴포스핀기), $C_1 \sim C_{40}$ 의 아릴포스핀옥사이드기(바람직하게 $C_1 \sim C_{20}$ 의 알킬포스핀옥사이드기), $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴포스핀옥사이드기(바람직하게 $C_6 \sim C_{30}$ 의 아릴포스핀옥사이드기) 및 $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴아민기(바람직하게 $C_6 \sim C_{30}$ 의 아릴아민기)로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상의 치환기로 치환되거나 비치환되고, 이때 상기 치환기가 복수인 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이하다.

- [32] 또, a 및 b는 각각 0 내지 4의 정수로서, 상기 a 및 b가 각각 0인 경우, 수소가 각각 치환기 R_3 및 R_4 로 치환되지 않는 것을 의미하고, 상기 a 및 b가 각각 1 내지 4의 정수인 경우, R_3 및 R_4 는 서로 동일하거나 상이하며, 각각 독립적으로 중수소, 할로젠기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_2 \sim C_{40}$ 의 알케닐기, $C_2 \sim C_{40}$ 의 알키닐기, $C_3 \sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬옥시기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴옥시기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬실릴기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴실릴기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬보론기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴보론기, 포스핀기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬포스핀기, $C_6 \sim C_{40}$ 의 아릴포스핀기 $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬포스핀옥사이드기, $C_6 \sim C_{40}$ 의 아릴포스핀옥사이드기 및 $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택된다.
- [33] 바람직하게, 상기 a 및 b가 각각 1 내지 4의 정수인 경우, R_3 및 R_4 는 서로 동일하거나 상이하며, 각각 독립적으로 중수소, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴기 및 $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택될 수 있다.
- [34] 이때, 상기 R_3 및 R_4 의 알킬기, 알케닐기, 알키닐기, 시클로알킬기, 헤테로시클로알킬기, 아릴기, 헤테로아릴기, 알킬옥시기, 아릴옥시기, 알킬실릴기, 아릴실릴기, 알킬보론기, 아릴보론기, 포스핀기, 알킬포스핀기, 아릴포스핀기, 알킬포스핀옥사이드기, 아릴포스핀옥사이드기 및 아릴아민기는 각각 독립적으로 중수소, 할로젠기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬기(바람직하게 $C_1 \sim C_{20}$ 의 알킬기), $C_2 \sim C_{40}$ 의 알케닐기(바람직하게 $C_2 \sim C_{20}$ 의 알케닐기), $C_2 \sim C_{40}$ 의 알키닐기(바람직하게 $C_2 \sim C_{20}$ 의 알키닐기), $C_3 \sim C_{40}$ 의 시클로알킬기(바람직하게 $C_3 \sim C_{20}$ 의 시클로알킬기), 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기(바람직하게 핵원자수 3 내지 20의 헤테로시클로알킬기), $C_6 \sim C_{40}$ 의 아릴기(바람직하게 $C_6 \sim C_{20}$ 의 아릴기), 핵원자수 5 내지 40의 헤테로아릴기(바람직하게 핵원자수 5 내지 20의 헤테로아릴기), $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬옥시기(바람직하게 $C_1 \sim C_{20}$ 의 알킬옥시기), $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴옥시기(바람직하게 $C_6 \sim C_{30}$ 의 아릴옥시기), $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬실릴기(바람직하게 $C_1 \sim C_{20}$ 의 알킬실릴기), $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴실릴기(바람직하게 $C_6 \sim C_{30}$ 의 아릴실릴기), $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬보론기(바람직하게 $C_1 \sim C_{20}$ 의 알킬보론기), $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴보론기(바람직하게 $C_6 \sim C_{30}$ 의 아릴보론기), $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬포스핀기(바람직하게 $C_1 \sim C_{20}$ 의 알킬포스핀기), $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴포스핀기(바람직하게 $C_6 \sim C_{30}$ 의 아릴포스핀기), $C_1 \sim C_{40}$ 의 아릴포스핀옥사이드기(바람직하게 $C_1 \sim C_{20}$ 의 알킬포스핀옥사이드기), C_6

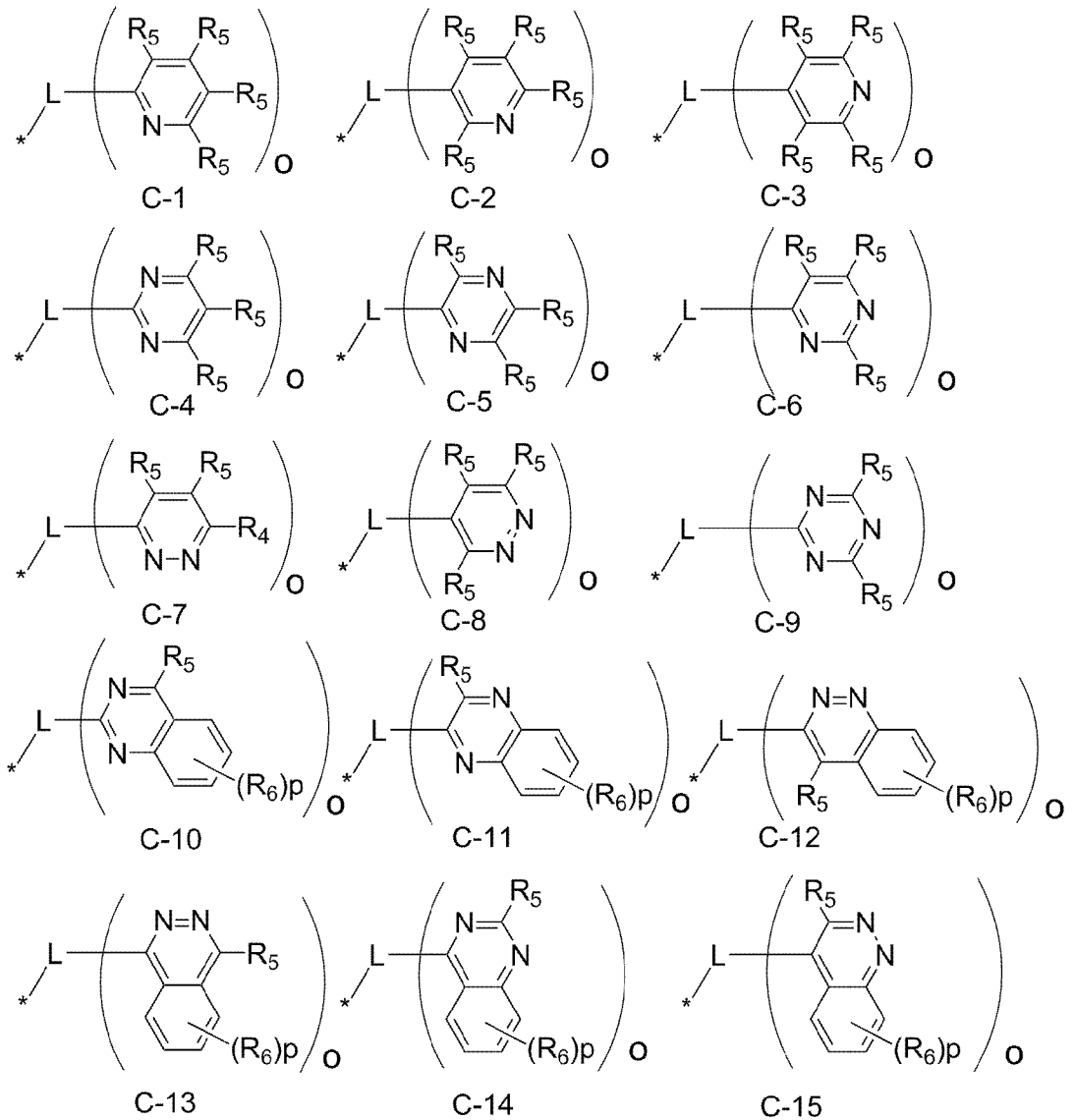
- $\sim C_{60}$ 의 아릴포스핀옥사이드기(바람직하게 $C_6\sim C_{30}$ 의 아릴포스핀옥사이드기) 및 $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴아민기(바람직하게 $C_6\sim C_{30}$ 의 아릴아민기)로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상의 치환기로 치환되거나 비치환되고, 이때 상기 치환기가 복수인 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이하다.
- [35] 또, m 및 n 은 각각 0 내지 3의 정수이고, 바람직하게 m 은 1일 수 있다. 이때, R_3 및 R_4 의 결합 위치는 ortho-, meta-, para- 모두 가능하다.
- [36] 또, Ar_1 및 Ar_2 는 서로 동일하거나 상이하며, 각각 독립적으로 하기 화학식 2로 표시되는 치환체이다. 이때, Ar_1 및 Ar_2 의 결합 위치는 ortho-, meta-, para- 모두 가능하다.
- [37] 상기 화학식 2에서, *는 화학식 1에 결합하는 부분이다.
- [38] L 은 단일결합이거나, 또는 $C_6\sim C_{18}$ 의 아릴렌기 및 핵원자수 5 내지 18의 헤테로아릴렌기로 이루어진 군에서 선택되고, 바람직하게 단일결합이거나, 페닐렌기 또는 비페닐렌기일 수 있다.
- [39] 이때, 상기 L 의 아릴렌기 및 헤테로아릴렌기는 각각 독립적으로 중수소, 할로젠기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬기(바람직하게 $C_1\sim C_{20}$ 의 알킬기), $C_2\sim C_{40}$ 의 알케닐기(바람직하게 $C_2\sim C_{20}$ 의 알케닐기), $C_2\sim C_{40}$ 의 알키닐기(바람직하게 $C_2\sim C_{20}$ 의 알키닐기), $C_3\sim C_{40}$ 의 시클로알킬기(바람직하게 $C_3\sim C_{20}$ 의 시클로알킬기), 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기(바람직하게 핵원자수 3 내지 20의 헤테로시클로알킬기), $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴기(바람직하게 $C_6\sim C_{20}$ 의 아릴기), 핵원자수 5 내지 40의 헤테로아릴기(바람직하게 핵원자수 5 내지 20의 헤테로아릴기), $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬옥시기(바람직하게 $C_1\sim C_{20}$ 의 알킬옥시기), $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴옥시기(바람직하게 $C_6\sim C_{30}$ 의 아릴옥시기), $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬실릴기(바람직하게 $C_1\sim C_{20}$ 의 알킬실릴기), $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴실릴기(바람직하게 $C_6\sim C_{30}$ 의 아릴실릴기), $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬보론기(바람직하게 $C_1\sim C_{20}$ 의 알킬보론기), $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴보론기(바람직하게 $C_6\sim C_{30}$ 의 아릴보론기), $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬포스핀기(바람직하게 $C_1\sim C_{20}$ 의 알킬포스핀기), $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴포스핀기(바람직하게 $C_6\sim C_{30}$ 의 아릴포스핀기), $C_1\sim C_{40}$ 의 아릴포스핀옥사이드기(바람직하게 $C_1\sim C_{20}$ 의 알킬포스핀옥사이드기), $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴포스핀옥사이드기(바람직하게 $C_6\sim C_{30}$ 의 아릴포스핀옥사이드기) 및 $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴아민기(바람직하게 $C_6\sim C_{30}$ 의 아릴아민기)로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상의 치환기로 치환되거나 비치환되고, 이때 상기 치환기가 복수인 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이하다.
- [40] Z_1 내지 Z_5 는 서로 동일하거나 상이하며, 각각 독립적으로 N 또는 $C(R_5)$ 이고, 다만 Z_1 내지 Z_5 중 적어도 하나는 N 이다.
- [41] 이때, $C(R_5)$ 이 복수인 경우, 복수의 R_5 는 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_2\sim C_{40}$ 의 알케닐기, $C_2\sim C_{40}$ 의 알키닐기, $C_3\sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지

60의 헤테로아릴기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬옥시기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴옥시기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬실릴기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴실릴기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬보론기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴보론기, 포스핀기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬포스핀기, $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴포스핀기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬포스핀옥사이드기, $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴포스핀옥사이드기 및 $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택되거나, 또는 인접하는 다른 R_5 또는 L과 결합하여 축합 방향족환 또는 축합 헤테로방향족환을 형성할 수 있으며, 바람직하게 수소, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴기 및 $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택되거나, 또는 인접하는 다른 R_5 또는 L과 결합하여 $C_6\sim C_{60}$ 의 축합 방향족환(바람직하게 $C_6\sim C_{30}$ 의 축합방향족환) 또는 핵원자수 5~60의 N, O, S 또는 Se 함유-축합 헤테로방향족환(핵원자수 5~30의 N, O, S 또는 Se 함유-축합 헤테로방향족환)일 수 있다.

- [42] 이때, 상기 R_5 의 알킬기, 알케닐기, 알키닐기, 시클로알킬기, 헤테로시클로알킬기, 아릴기, 헤테로아릴기, 알킬옥시기, 아릴옥시기, 알킬실릴기, 아릴실릴기, 알킬보론기, 아릴보론기, 포스핀기, 알킬포스핀기, 아릴포스핀기, 알킬포스핀옥사이드기, 아릴포스핀옥사이드기 및 아릴아민기는 각각 독립적으로 중수소, 할로젠기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬기(바람직하게 $C_1\sim C_{20}$ 의 알킬기), $C_2\sim C_{40}$ 의 알케닐기(바람직하게 $C_2\sim C_{20}$ 의 알케닐기), $C_2\sim C_{40}$ 의 알키닐기(바람직하게 $C_2\sim C_{20}$ 의 알키닐기), $C_3\sim C_{40}$ 의 시클로알킬기(바람직하게 $C_3\sim C_{20}$ 의 시클로알킬기), 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기(바람직하게 핵원자수 3 내지 20의 헤테로시클로알킬기), $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴기(바람직하게 $C_6\sim C_{20}$ 의 아릴기), 핵원자수 5 내지 40의 헤테로아릴기(바람직하게 핵원자수 5 내지 20의 헤테로아릴기), $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬옥시기(바람직하게 $C_1\sim C_{20}$ 의 알킬옥시기), $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴옥시기(바람직하게 $C_6\sim C_{30}$ 의 아릴옥시기), $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬실릴기(바람직하게 $C_1\sim C_{20}$ 의 알킬실릴기), $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴실릴기(바람직하게 $C_6\sim C_{30}$ 의 아릴실릴기), $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬보론기(바람직하게 $C_1\sim C_{20}$ 의 알킬보론기), $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴보론기(바람직하게 $C_6\sim C_{30}$ 의 아릴보론기), $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬포스핀기(바람직하게 $C_1\sim C_{20}$ 의 알킬포스핀기), $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴포스핀기(바람직하게 $C_6\sim C_{30}$ 의 아릴포스핀기), $C_1\sim C_{40}$ 의 아릴포스핀옥사이드기(바람직하게 $C_1\sim C_{20}$ 의 알킬포스핀옥사이드기), $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴포스핀옥사이드기(바람직하게 $C_6\sim C_{30}$ 의 아릴포스핀옥사이드기) 및 $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴아민기(바람직하게 $C_6\sim C_{30}$ 의 아릴아민기)로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상의 치환기로 치환되거나 비치환되고, 이때 상기 치환기가 복수인 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이하다.

- [43] 상기 화학식 2로 표시되는 치환체는 하기 화학식 C-1 내지 화학식 C-15로 표시되는 치환체로 구체화될 수 있는데, 이에 한정되지 않는다.

[44]



[45] 상기 화학식 C-1 내지 C-15에서,

[46] L , o 및 R_5 는 각각 상기 화학식 2에서 정의한 바와 같고,

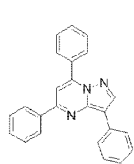
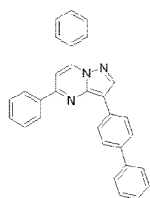
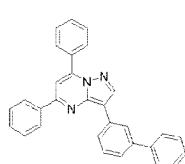
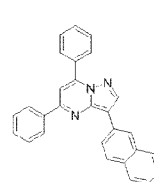
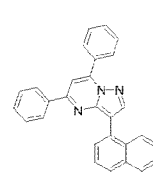
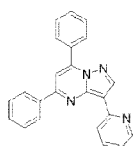
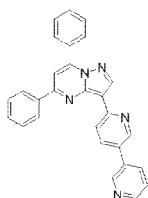
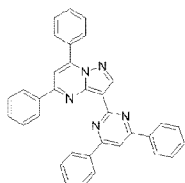
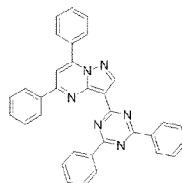
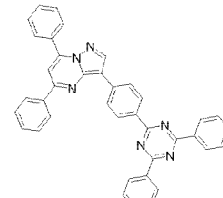
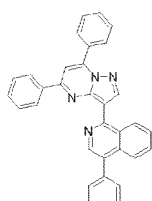
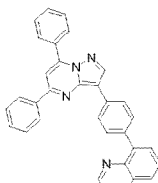
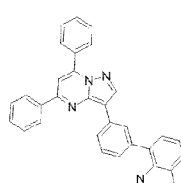
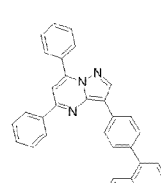
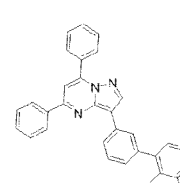
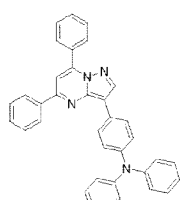
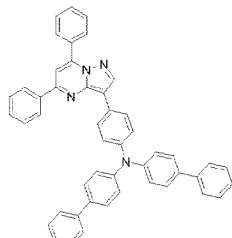
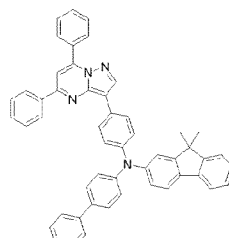
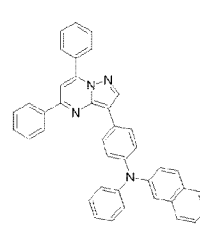
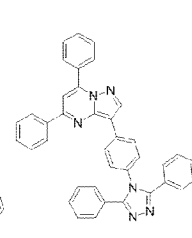
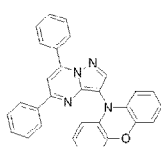
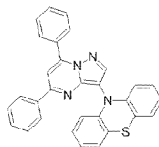
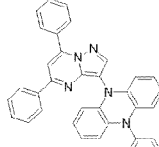
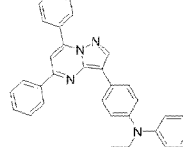
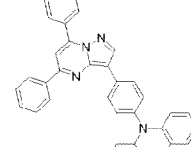
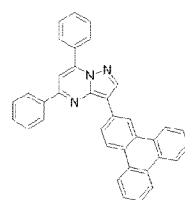
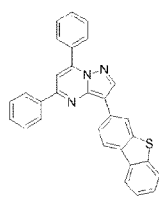
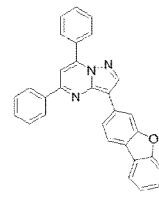
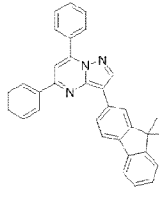
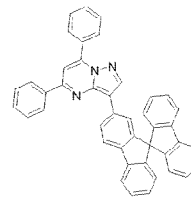
[47] p 는 0 내지 4의 정수로서, 상기 p 가 0인 경우, 수소가 치환기 R_6 로 치환되지 않는 것을 의미하고, 상기 p 가 1 내지 4의 정수인 경우, 하나 이상의 R_6 는 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 중수소, 할로젠, 시아노기, 니트로기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬기(바람직하게 $C_1 \sim C_{20}$ 의 알킬기), $C_2 \sim C_{40}$ 의 알케닐기(바람직하게 $C_2 \sim C_{20}$ 의 알케닐기), $C_2 \sim C_{40}$ 의 알키닐기(바람직하게 $C_2 \sim C_{20}$ 의 알키닐기), $C_3 \sim C_{40}$ 의 시클로알킬기(바람직하게 $C_3 \sim C_{20}$ 의 시클로알킬기), 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기(바람직하게 핵원자수 3 내지 20의 헤테로시클로알킬기), $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴기(바람직하게 $C_6 \sim C_{30}$ 의 아릴기), 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴기(바람직하게 핵원자수 5 내지 30의 헤테로아릴기), $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴옥시기(바람직하게 $C_6 \sim C_{30}$ 의 아릴옥시기), $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬옥시기(바람직하게

$C_1\sim C_{20}$ 의 알킬옥시기), $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴아민기(바람직하게 $C_6\sim C_{30}$ 의 아릴아민기), $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬실릴기(바람직하게 $C_1\sim C_{20}$ 의 알킬실릴기), $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬보론기(바람직하게 $C_1\sim C_{20}$ 의 알킬보론기), $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴보론기(바람직하게 $C_6\sim C_{30}$ 의 아릴보론기), $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴포스핀기(바람직하게 $C_6\sim C_{30}$ 의 아릴포스핀기), $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴포스핀옥사이드기(바람직하게 $C_6\sim C_{30}$ 의 아릴포스핀옥사이드기), 및 $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴실릴기(바람직하게 $C_6\sim C_{30}$ 의 아릴실릴기)로 이루어진 군에서 선택되거나, 또는 이들이 인접하는 R_3 나 인접하는 다른 R_6 와 결합하여 축합 고리를 형성할 수 있으며,

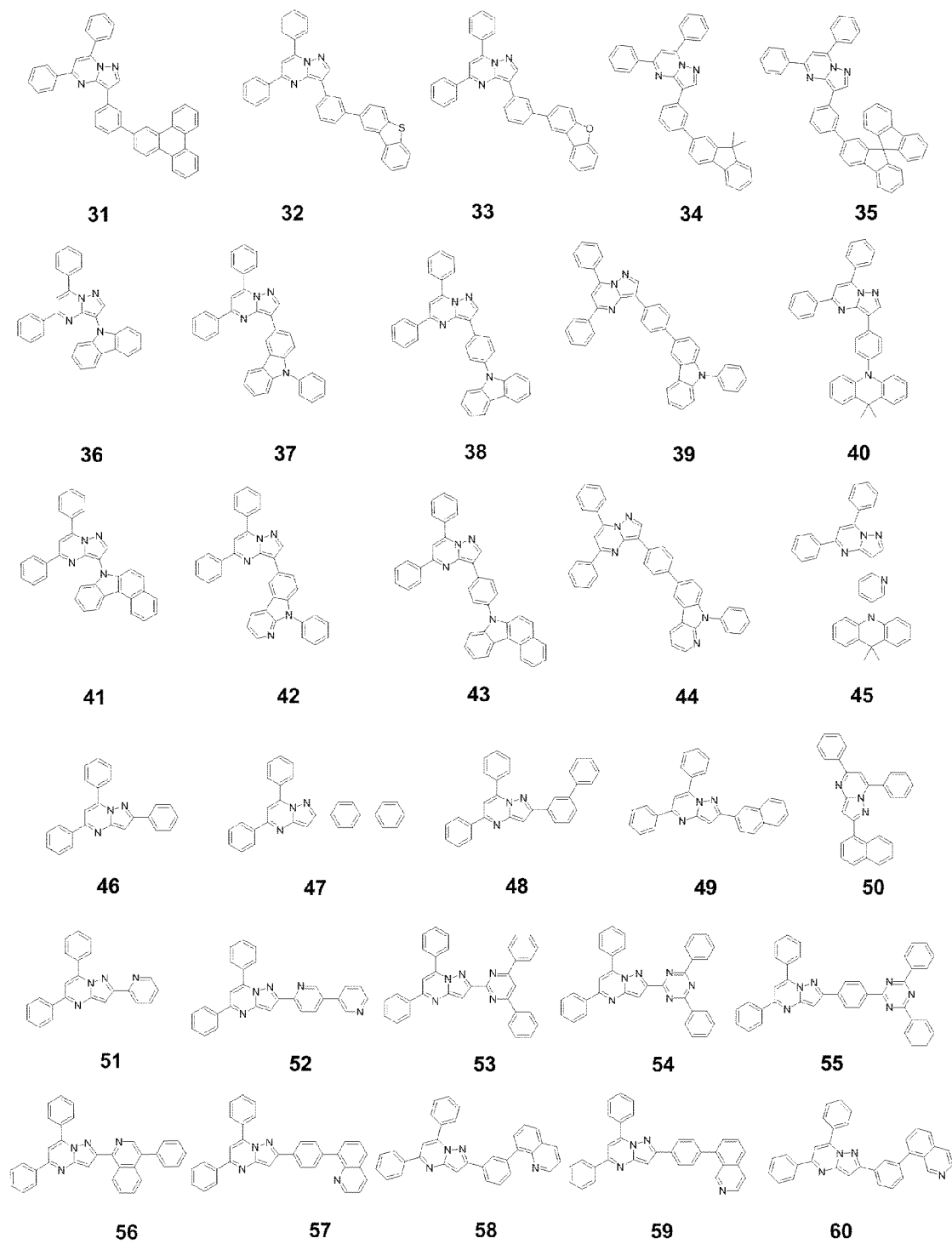
- [48] 상기 R_6 의 알킬기, 알케닐기, 알키닐기, 시클로알킬기, 헤테로시클로알킬기, 아릴기, 헤테로아릴기, 아릴옥시기, 알킬옥시기, 아릴아민기, 알킬실릴기, 알킬보론기, 아릴보론기, 아릴포스핀기, 아릴포스핀옥사이드기 및 아릴실릴기는 각각 독립적으로 중수소, 할로젠, 시아노기, 니트로기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬기(바람직하게 $C_1\sim C_{20}$ 의 알킬기), $C_2\sim C_{40}$ 의 알케닐기(바람직하게 $C_2\sim C_{20}$ 의 알케닐기), $C_2\sim C_{40}$ 의 알키닐기(바람직하게 $C_2\sim C_{20}$ 의 알키닐기), $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴기(바람직하게 $C_6\sim C_{30}$ 의 아릴기), 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴기(바람직하게 핵원자수 5 내지 30의 헤테로아릴기), $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴옥시기(바람직하게 $C_6\sim C_{30}$ 의 아릴옥시기), $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬옥시기(바람직하게 $C_1\sim C_{20}$ 의 알킬옥시기), $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴아민기(바람직하게 $C_6\sim C_{30}$ 의 아릴아민기), $C_3\sim C_{40}$ 의 시클로알킬기(바람직하게 $C_3\sim C_{20}$ 의 시클로알킬기), 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기(바람직하게 핵원자수 3 내지 20의 헤테로시클로알킬기), $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬실릴기(바람직하게 $C_1\sim C_{20}$ 의 알킬실릴기), $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬보론기(바람직하게 $C_1\sim C_{20}$ 의 알킬보론기), $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴보론기(바람직하게 $C_6\sim C_{30}$ 의 아릴보론기), $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴포스핀기(바람직하게 $C_6\sim C_{30}$ 의 아릴포스핀기), $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴포스핀옥사이드기(바람직하게 $C_6\sim C_{30}$ 의 아릴포스핀옥사이드기) 및 $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴실릴기(바람직하게 $C_6\sim C_{30}$ 의 아릴실릴기)로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상의 치환기로 치환 또는 비치환되고, 이때 치환기가 복수인 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이하다.

- [49] 본 발명에 따른 화학식 1로 표시되는 화합물은 하기 화합물들로 구체화될 수 있는데, 이에 한정되는 것은 아니다.

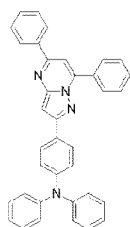
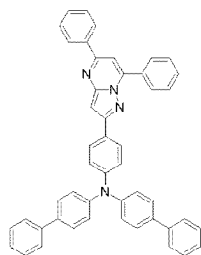
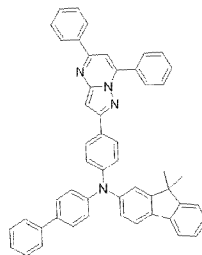
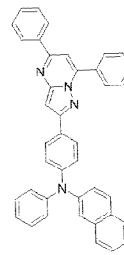
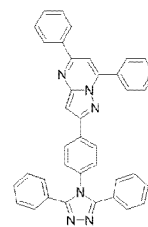
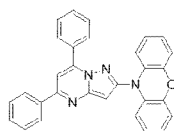
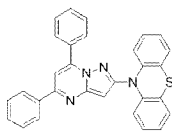
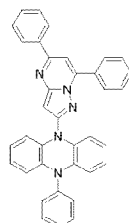
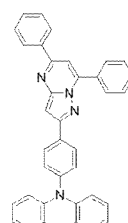
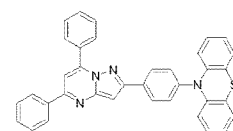
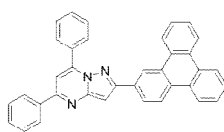
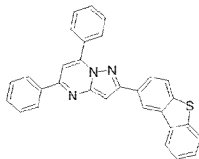
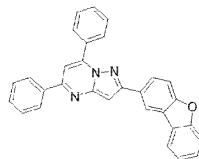
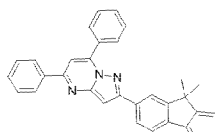
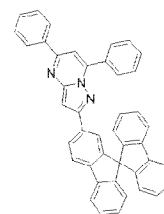
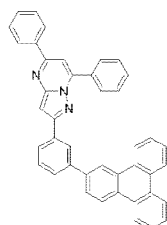
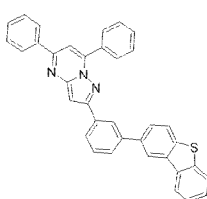
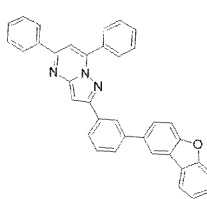
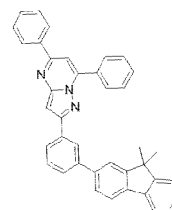
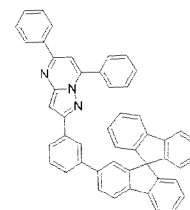
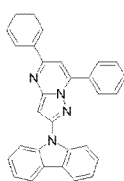
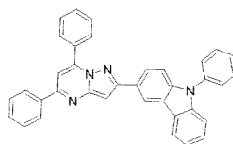
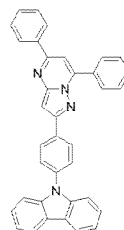
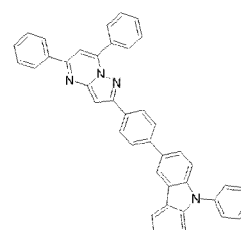
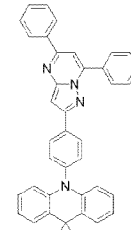
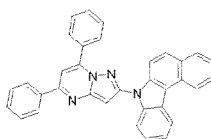
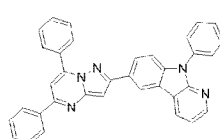
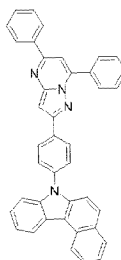
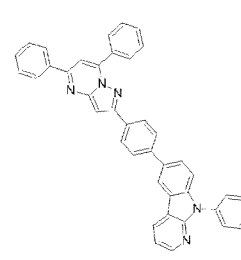
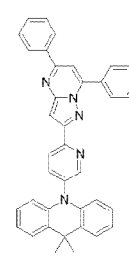
[50]

**1****2****3****4****5****6****7****8****9****10****11****12****13****14****15****16****17****18****19****20****21****22****23****24****25****26****27****28****29****30**

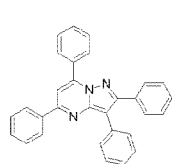
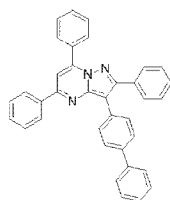
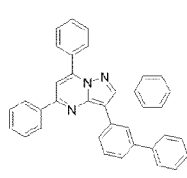
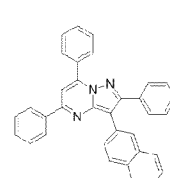
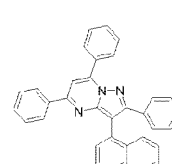
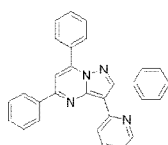
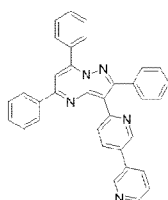
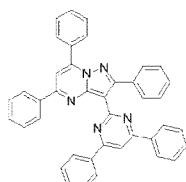
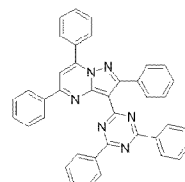
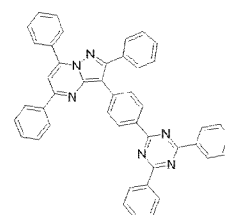
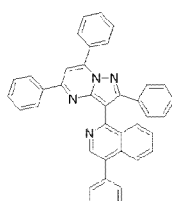
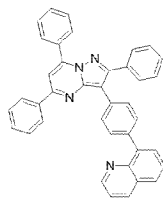
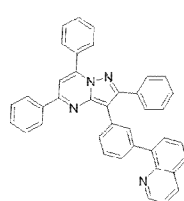
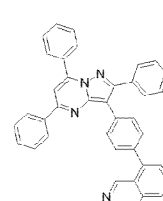
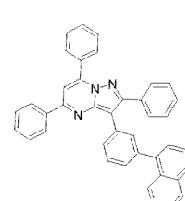
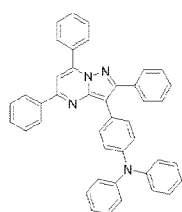
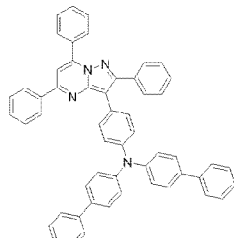
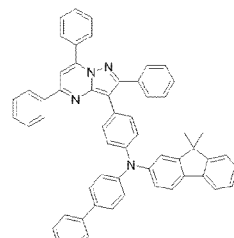
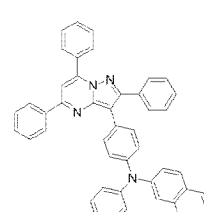
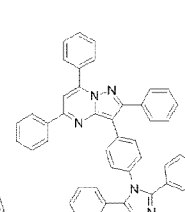
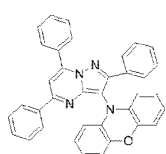
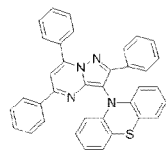
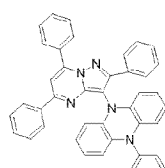
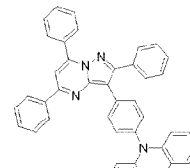
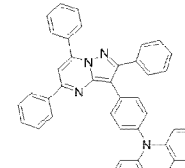
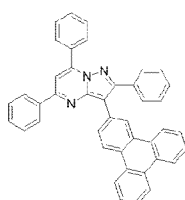
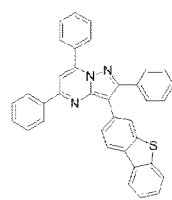
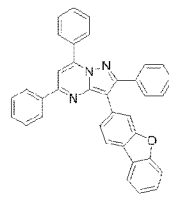
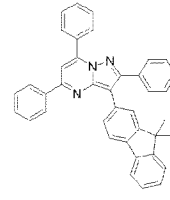
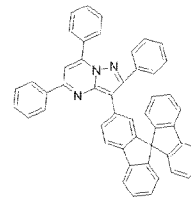
[51]



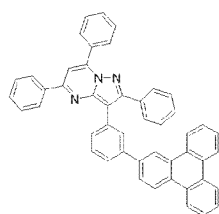
[52]

**61****62****63****64****65****66****67****68****69****70****71****72****73****74****75****76****77****78****79****80****81****82****83****84****85****86****87****88****89****90**

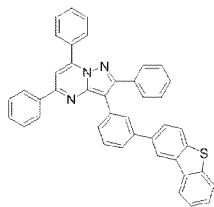
[53]

**91****92****93****94****95****96****97****98****99****100****101****102****103****104****105****106****107****108****109****110****111****112****113****114****115****116****117****118****119****120**

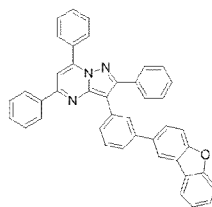
[54]



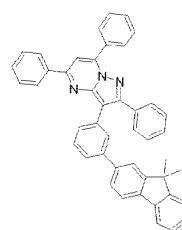
121



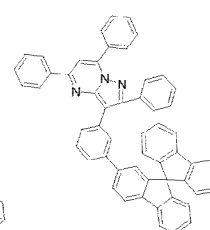
122



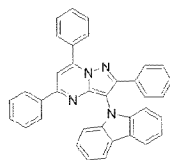
123



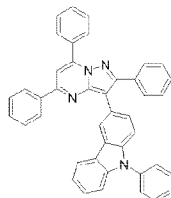
124



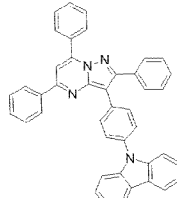
125



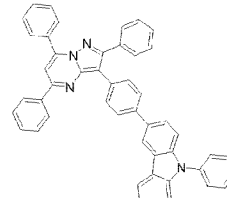
126



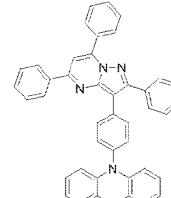
127



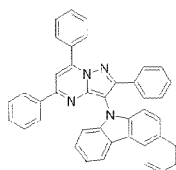
128



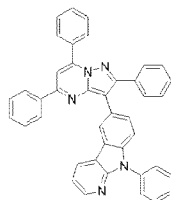
129



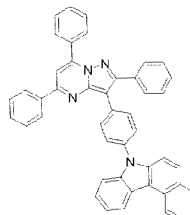
130



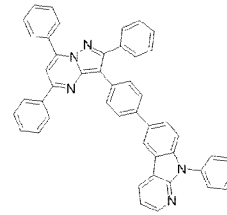
131



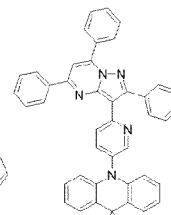
132



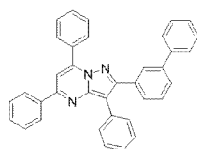
133



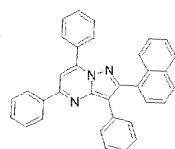
134



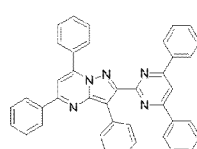
135



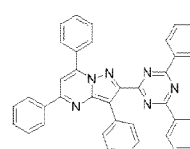
136



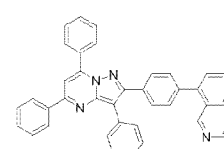
137



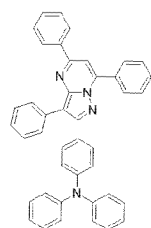
138



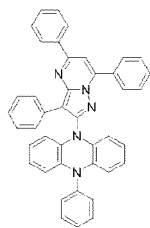
139



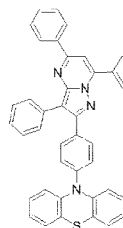
140



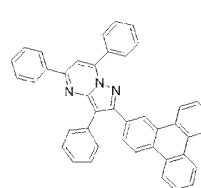
141



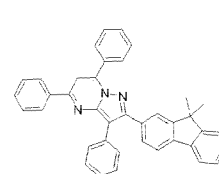
142



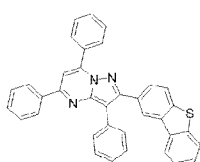
143



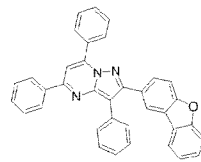
144



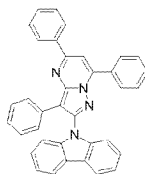
145



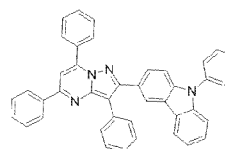
146



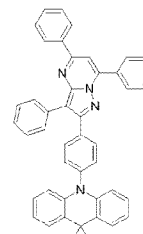
147



148

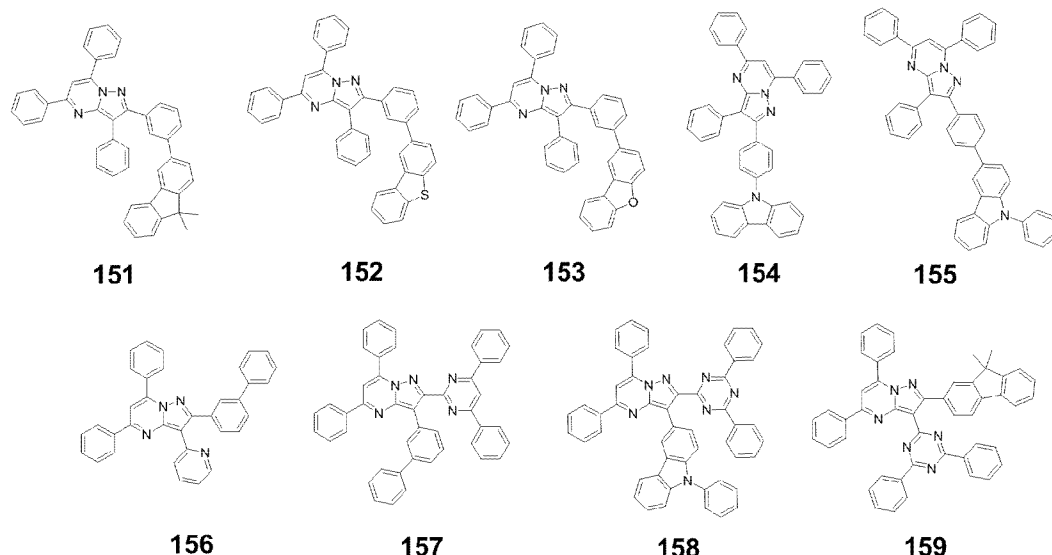


149



150

[55]



[56] 본 발명에서, 알킬은 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 한정되는 것은 아니다.

[57] 본 발명에서 알케닐(alkenyl)은 탄소-탄소 이중 결합을 1개 이상 가진 탄소수 2 내지 40의 직쇄 또는 측쇄의 불포화 탄화수소에서 유래되는 1가의 치환기이며, 이의 비제한적인 예로는 비닐(vinyl), 알릴(allyl), 이소프로펜일(isopropenyl), 2-부텐일(2-butenyl) 등이 있다.

[58] 본 발명에서 알키닐(alkynyl)은 탄소-탄소 삼중 결합을 1개 이상 가진 탄소수 2 내지 40의 직쇄 또는 측쇄의 불포화 탄화수소에서 유래되는 1가의 치환기이며, 이의 비제한적인 예로는 에티닐(ethynyl), 2-프로파닐(2-propynyl) 등이 있다.

[59] 본 발명에서 시클로알킬은 탄소수 3 내지 40의 모노사이클릭 또는 폴리사이클릭 비-방향족 탄화수소로부터 유래된 1가의 치환기를 의미한다. 이러한 사이클로알킬의 예로는 사이클로프로필, 사이클로펜틸, 사이클로헥실, 노르보닐(norbornyl), 아다만틴(adamantine) 등이 있는데, 이에 한정되지 않는다.

[60] 본 발명에서 헤테로시클로알킬은 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 있다.

[61] 본 발명에서 아릴은 단독 고리 또는 2이상의 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 비제한적인 예로는 페닐, 나프틸, 페난트릴, 안트릴 등이 있다.

[62] 본 발명에서 헤테로아릴은 핵원자수 5 내지 60의 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, 아릴기와 축합된 형태도 포함할 수 있다. 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.
- [63] 본 발명에서 알킬옥시는 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.
- [64] 본 발명에서 아릴옥시는 RO-로 표시되는 1가의 치환기로, 상기 R은 탄소수 5 내지 60의 아릴을 의미한다. 이러한 아릴옥시의 비제한적인 예로는 페닐옥시, 나프틸옥시, 디페닐옥시 등이 있다.
- [65] 본 발명에서 알킬실릴은 탄소수 1 내지 40의 알킬로 치환된 실릴이고, 아릴실릴은 탄소수 6 내지 60의 아릴로 치환된 실릴을 의미한다.
- [66] 본 발명에서 알킬보론기는 탄소수 1 내지 40의 알킬로 치환된 보론기를 의미하며, 아릴보론기는 탄소수 6 내지 60의 아릴로 치환된 보론기를 의미하고, 알킬포스핀기는 탄소수 1 내지 40의 알킬로 치환된 포스핀기를 의미하고, 아릴포스핀기는 탄소수 6 내지 60의 아릴로 치환된 포스핀기를 의미하고, 알킬포스핀옥사이드기는 탄소수 1 내지 40의 알킬로 치환된 포스핀옥사이드기를 의미하며, 아릴포스핀옥사이드기는 탄소수 6 내지 60의 아릴로 치환된 포스핀옥사이드기를 의미한다.
- [67] 본 발명에서 아릴아민은 탄소수 6 내지 60의 아릴로 치환된 아민을 의미한다.
- [68] 본 발명에서의 축합 고리는 축합 지방족 고리, 축합 방향족 고리, 축합 헤테로지방족 고리, 축합 헤테로방향족 고리 또는 이들의 조합된 형태를 의미한다.
- [69] 본 발명의 화학식 1의 화합물은 일반적인 합성방법에 따라 합성될 수 있다(*Chem. Rev.*, 60:313 (1960); *J. Chem. SOC.* 4482 (1955); *Chem. Rev.* 95: 2457 (1995) 등 참조). 본 발명의 화합물에 대한 상세한 합성 과정은 후술하는 합성예에서 구체적으로 기술하도록 한다.
- [70]
- [71] 한편, 본 발명은 전술한 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하는 유기 전계 발광 소자를 제공한다.
- [72] 구체적으로, 본 발명은 양극, 음극 및 상기 양극과 음극 사이에 개재(介在)된 1층 이상의 유기물층을 포함하며, 상기 유기물층 중 적어도 하나는 상기 화학식

1로 표시되는 화합물을 1종 이상 포함하는 유기 전계 발광 소자를 제공한다. 이때, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 단독 또는 2 이상 혼합되어 사용될 수 있다.

- [73] 일례에 따르면, 상기 1층 이상의 유기물층은 정공주입층, 정공수송층, 발광보조층, 발광층, 전자수송층 및 전자주입층을 포함하며, 이 중에서 상기 발광층(바람직하게, 인광 발광층)은 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함한다. 이때, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 발광층 물질로 사용된다. 만약, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물이 발광층 물질, 바람직하게 인광 호스트로 유기 전계 발광 소자에 포함될 경우, 유기 전계 발광 소자의 발광효율, 휘도, 전력효율, 열적 안정성 및 소자 수명이 향상될 수 있다.
- [74] 상기 발광층은 금속 착체 화합물계 도펀트를 포함할 수 있다. 본 발명에서 사용 가능한 금속 착체 화합물계 도펀트는 당 업계에 알려진 것이라면 특별한 제한없이 사용될 수 있다. 이때, 상기 호스트와 도펀트의 혼합 비율은 특별히 한정되지 않으나, 99:1 ~ 70:30 중량 비율일 경우, 빛의 색순도 및 효율을 증가시킬 수 있어, 소자의 발광효율 및 수명 특성이 보다 더 향상될 수 있다.
- [75] 이러한 본 발명의 유기 전계 발광 소자의 구조는 특별히 한정되지 않으나, 예컨대 기판 위에, 양극, 1층 이상의 유기물층 및 음극이 순차적으로 적층될 뿐만 아니라, 전극과 유기물층 계면에 절연층 또는 접착층이 삽입된 구조일 수 있다.
- [76] 일례에 따르면, 상기 유기 전계 발광 소자는 기판 위에, 양극, 정공주입층, 정공수송층, 발광 보조층, 발광층, 전자수송층 및 음극이 순차적으로 적층된 구조를 가질 수 있다. 선택적으로, 상기 전자 수송층과 음극 사이에 전자 주입층이 위치할 수 있다.
- [77] 본 발명의 유기 전계 발광 소자는 유기물층 중 적어도 하나(예컨대, 발광보조층)가 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하도록 형성하는 것을 제외하고는, 당 기술 분야에 알려져 있는 재료 및 방법을 이용하여 유기물층 및 전극을 형성함으로써 제조될 수 있다.
- [78] 상기 유기물층은 진공증착법이나 용액 도포법에 의하여 형성될 수 있다. 상기 용액 도포법의 예로는 스핀 코팅, 딥코팅, 닥터 블레이딩, 잉크젯 프린팅 또는 열 전사법 등이 있으나, 이들에 한정되지는 않는다.
- [79] 본 발명에서 사용 가능한 기판으로는 특별히 한정되지 않으며, 비제한적인 예로는 실리콘 웨이퍼, 석영 또는 유리판, 금속판, 플라스틱 필름이나 시트 등이 있다.
- [80] 또, 양극 물질의 예로는 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, 이들에 한정되는 것은 아니다.

[81] 또, 음극 물질의 예로는 마그네슘, 칼슘, 나트륨, 칼륨, 타이타늄, 인듐, 이트륨, 리튬, 가돌리늄, 알루미늄, 은, 주석, 또는 납과 같은 금속 또는 이들의 합금; LiF/Al 또는 LiO_2/Al 과 같은 다층 구조 물질 등이 있으나, 이들에 한정되는 것은 아니다.

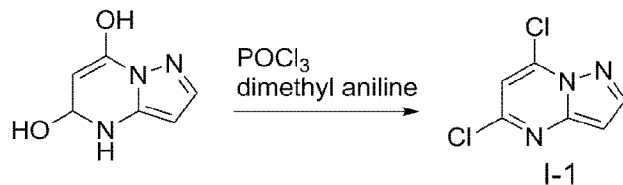
[82] 또한, 발광층, 정공주입층, 정공수송층, 전자주입층 및 전자수송층으로 사용되는 물질은 당 업계에 알려진 통상의 물질이라면, 특별히 한정되지 않는다.

[83]

[84] 이하 본 발명을 실시예를 통하여 상세히 설명하나, 하기 실시예는 본 발명을 예시하는 것일 뿐, 본 발명이 하기 실시예에 의해 한정되는 것은 아니다.

[85] [준비예 1] 화합물 I-1 (5,7-Dichloropyrazolo[1,5-a]pyrimidine)의 합성

[86]



[87] 질소 기류 하 5 °C에서 4,5-dihydropyrazolo[1,5-a]pyrimidine-5,7-diol (40.8 g, 0.31 mol) 및 POCl_3 (100ml, 10.9 mmol)을 dimethylaniline (120 mL, 0.94 mol)에 넣고, 60 °C에서 12 시간 동안 환류 교반하였다. 반응이 종결된 후, 상온으로 냉각시킨 후 여과하여 고체 생성물을 얻었다. 상기 고체 생성물을 디클로로메탄에 녹인 후, 얼음물을 적가한 다음, 15분간 교반한 뒤, 고체 NaHCO_3 로 pH 8~9 정도가 되도록 중화시켰다. 이후, 디클로로메탄으로 유기층을 추출한 다음 MgSO_4 를 넣고 여과하였다. 얻어진 유기층에서 용매를 제거한 후 컬럼 크로마토그래피 (Hexane: MC = 3:1 (v/v))로 정제하여 화합물 I-1 (46.1 g, 수율 77 %)을 획득하였다.

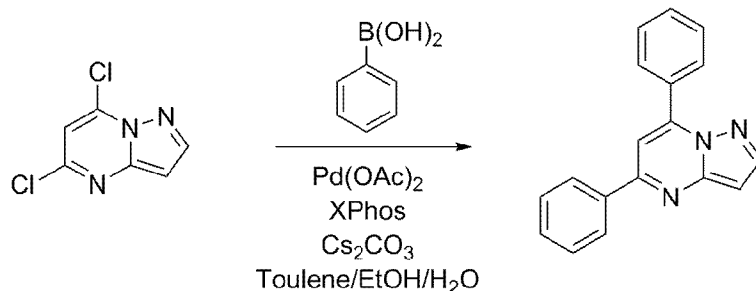
[88] 화합물 I-1의 $^1\text{H-NMR}$ (400 MHz, CDCl_3): δ 8.22 (d, $J = 2.2$ Hz, 1H), 6.99 (s, 1H), 6.40 (dt, $J = 0.7, 2.2$ Hz, 1H).

[89]

[90] [준비예 2] 화합물 I-2의 합성

[91] <단계 1> 5,7-diphenylpyrazolo[1,5-a]pyrimidine의 합성

[92]

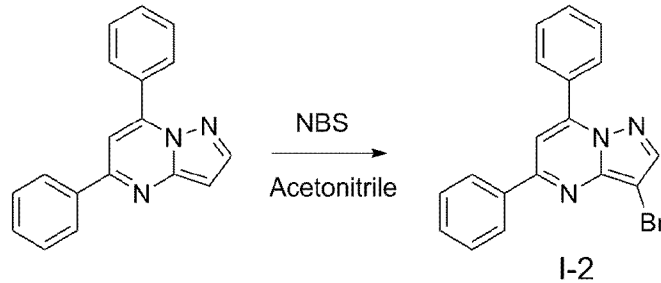


[93] 질소 기류 하에서 준비예 1에서 합성된 화합물 I-1 (50.0 g, 0.26 mol), Phenyl boronic acid (65 g, 0.53 mol), Pd(OAc)_2 (0.59 g, 0.003 mol), Xphos (2.53 g, 0.005 mol) 및 Cesium carbonate (260 g, 0.79 mol)을 혼합한 다음, Toluene (400 mL) 및 EtOH (100 mL), H_2O (100 mL)에서 환류 교반하였다.

- [94] 반응 종료 후, 메틸렌클로라이드로 유기층을 분리하고, MgSO_4 를 사용하여 상기 유기층에서 물을 제거하였다. 물이 제거된 유기층에서 용매를 제거한 후, 컬럼 크로마토그래피 [Hexane: MC = 5:1 (v/v)]로 정제하여 화합물 5,7-diphenylpyrazolo[1,5-a]pyrimidine (31 g, 수율 43%)를 얻었다.

[95] <단계 2> 화합물 I-2 의 합성

[96]

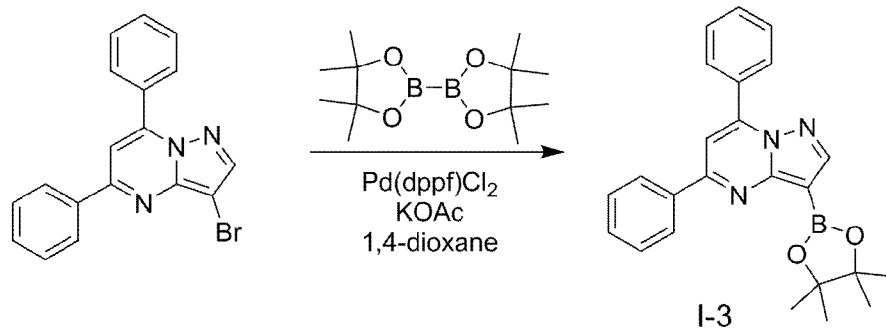


- [97] 질소 기류 하에서 acetonitrile (150 ml)에 녹인 NBS (196 g, 0.11 mol)를, acetonitrile (150 ml)에 녹인 5,7-diphenylpyrazolo[1,5-a]pyrimidine (31.0 g, 0.11 mol)에 적가한 후, 20 시간 동안 교반하였다. 반응 종료 후, 디클로로메탄으로 유기층을 추출하고 MgSO_4 를 넣고 여과하였다. 얻어진 유기층에서 용매를 제거한 후 컬럼 크로마토그래피 (Hexane:MC = 3:1 (v/v))로 정제하여 화합물 I-2 (31.2 g, 78%) 을 획득하였다.

[98]

[99] [준비예 3] 화합물 I-3의 합성

[100]



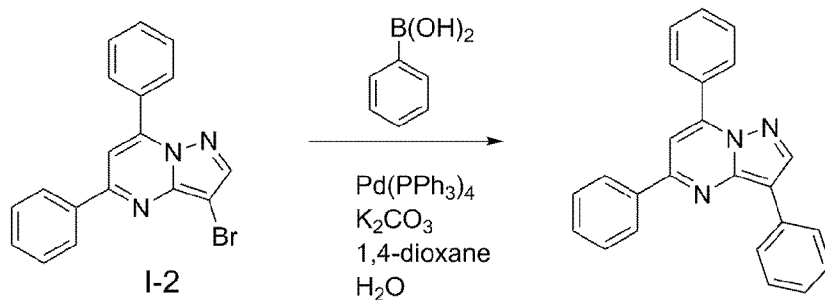
- [101] 질소 기류 하에서 준비예 2에서 합성된 화합물 I-2 (30g, 0.086mol), 4,4,4',4',5,5,5',5'-octamethyl-2,2'-bi(1,3,2-dioxaborolane) (28.3g, 0.11 mol), Pd(dppf)Cl_2 (3.2g, 0.004 mol), KOAc (25.2g, 0.256 mol), 및 1,4-dioxane (450ml)을 혼합한 다음, 130 °C에서 12시간 동안 교반하였다.
- [102] 반응이 종결된 후, 에틸아세테이트로 유기층을 추출한 다음, MgSO_4 로 상기 유기층에서 수분을 제거하고, 컬럼크로마토그래피 [Hexane: Dichloromethane(MC) = 5:1(v/v)]로 정제하여 화합물 I-3 (37 g, 수율 84%)을 얻었다.

[103]

[104] [준비예 4] 화합물 I-4의 합성

[105] <단계 1> 3,5,7-triphenylpyrazolo[1,5-a]pyrimidine 의 합성

[106]

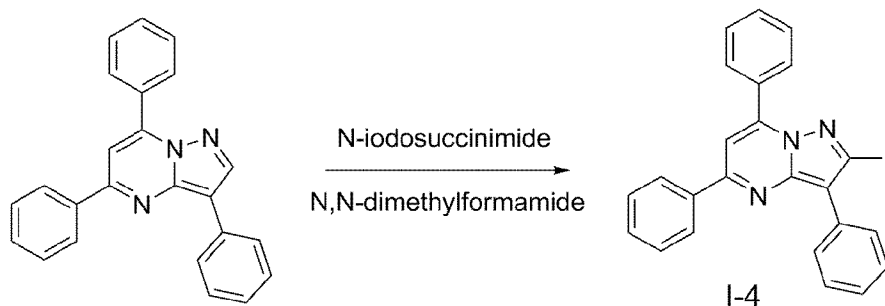


[107] 질소 기류 하에서 준비예 2에서 합성된 화합물 I-2 (30.0 g, 0.086 mol), Phenyl boronic acid (32 g, 0.10 mol), Pd(PPh₃)₄ (2.96 g, 0.003 mol), 및 potassium carbonate (K₂CO₃) (35.5 g, 0.26 mol)을 혼합한 다음, 1,4-dioxane (240 ml), 및 H₂O (60 ml)에서 환류 교반하였다.

[108] 반응 종료 후, 메틸렌클로라이드로 유기층을 분리하고, MgSO₄를 사용하여 상기 유기층에서 물을 제거하였다. 물이 제거된 유기층에서 용매를 제거한 후, 컬럼 크로마토그래피 [Hexane: MC = 5:1 (v/v)]로 정제하여 화합물 3,5,7-triphenylpyrazolo[1,5-a]pyrimidine (23.5 g, 수율 79%)를 얻었다.

[109] <단계 2> 화합물 I-4 의 합성

[110]



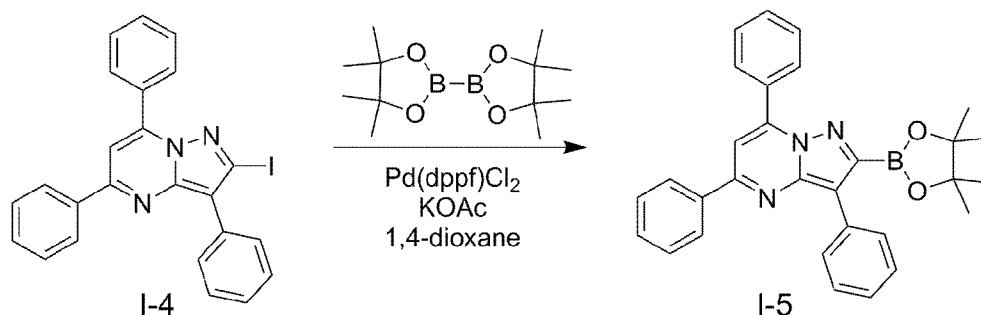
[111] 질소기류 하에서 상기 단계 1에서 합성된 3,5,7-triphenylpyrazolo[1,5-a]pyrimidine (30g, 0.086 mol)와 N-iodosuccinimide (19.4 g, 86 mmol)을 혼합한 다음, N,N-dimethylformamide (300 mL)을 넣고 상온에서 20 시간 동안 교반하였다.

[112] 반응 종료 후, 메틸렌클로라이드로 유기층을 분리하고, MgSO₄를 사용하여 상기 유기층에서 물을 제거하였다. 물이 제거된 유기층에서 용매를 제거한 후, 컬럼 크로마토그래피 [Hexane: MC = 5:1 (v/v)]로 정제하여 화합물 I-4 (23 g, 수율 56%)를 얻었다.

[113]

[114] [준비예 5] 화합물 I-5의 합성

[115]

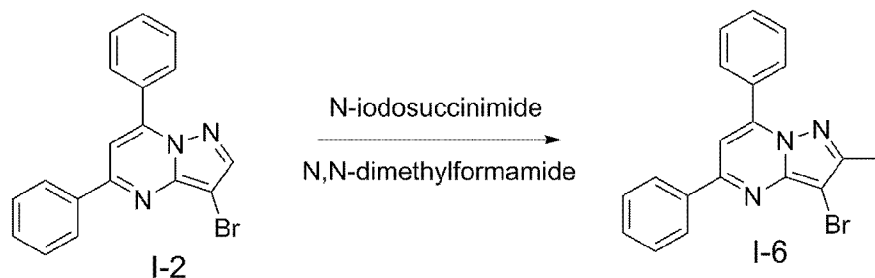


[116] 준비예 3에서 사용된 화합물 I-2 대신 준비예 4에서 합성된 화합물 I-4 (30.0 g 0.063 mol)를 사용하는 것을 제외하고는, 상기 준비예 3과 동일한 과정을 수행하여 화합물 I-5 (32.7g 86%)을 얻었다.

[117]

[118] [준비예 6] 화합물 I-6의 합성

[119]

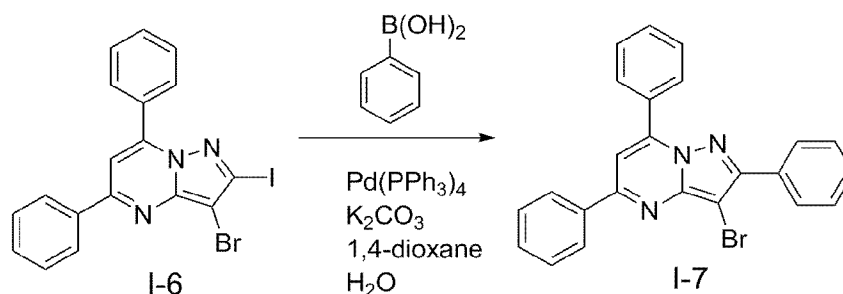


[120] 준비예 4의 단계 2에서 사용된 3,5,7-triphenylpyrazolo[1,5-a]pyrimidine 대신 준비예 2에서 합성된 화합물 I-2 (30 g, 0.086 mol)를 사용하는 것을 제외하고는, 상기 준비예 4의 단계 2와 동일한 과정을 수행하여 화합물 I-6 (16.3g, 43%)을 얻었다.

[121]

[122] [준비예 7] 화합물 I-7의 합성

[123]

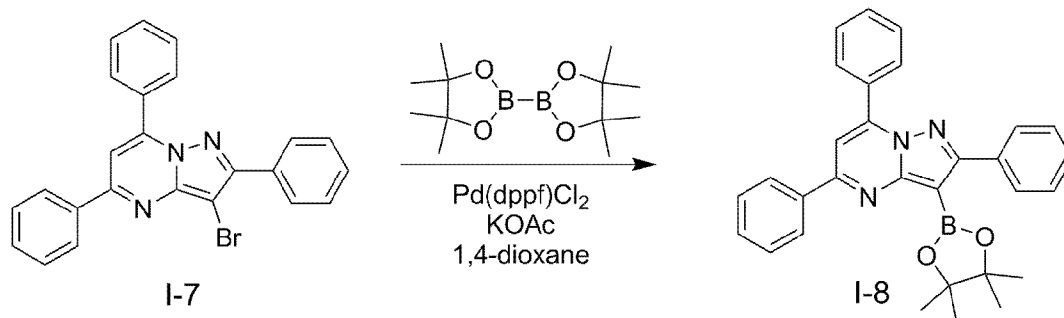


[124] 준비예 4의 단계 1에서 사용된 화합물 I-2 대신 준비예 6에서 합성된 화합물 I-6 (30.0 g, 0.05 mol)를 사용하는 것을 제외하고는, 상기 준비예 4의 단계 1과 동일한 과정을 수행하여 화합물 I-7 (15.7g, 57%)을 얻었다.

[125]

[126] [준비예 8] 화합물 I-8의 합성

[127]

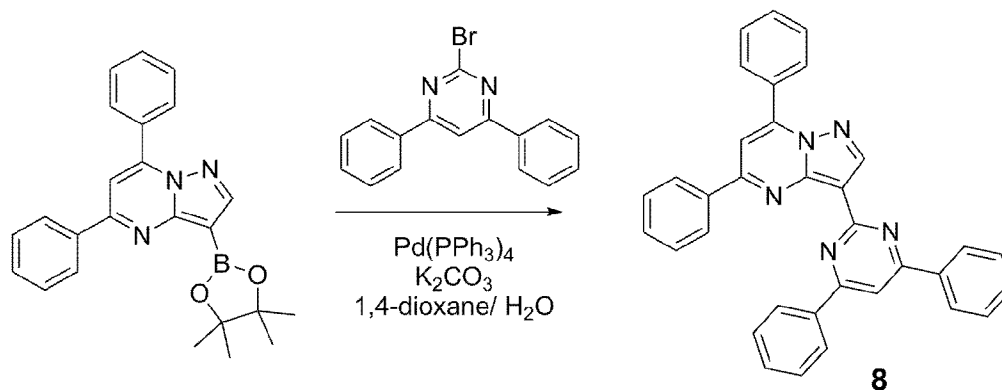


[128] 준비예 3에서 사용된 I-2 대신 I-7 (30.0 g 0.054 mol)를 사용하는 것을 제외하고는, 상기 준비예 3과 동일한 과정을 수행하여 화합물 I-8 (28.3g 87%)를 얻었다.

[129]

[130] [합성예 1] 화합물 8의 합성

[131]



[132] 질소 기류 하에서 준비예 3에서 합성된 화합물 I-3 (10.0 g, 0.025 mol), 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine (9.4 g, 0.030 mol), Pd(PPh₃)₄ (0.87 g, 0.001 mol), 및 potassium carbonate (10.44 g, 0.076 mol)을 혼합한 다음, 1,4-dioxane (80 ml) 및 H₂O (20 ml)에서 환류 교반하였다.

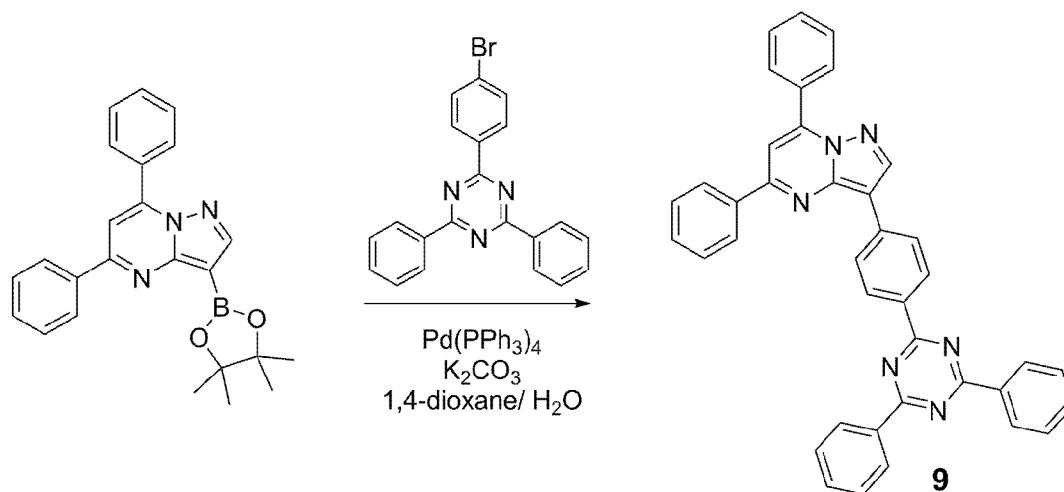
[133] 반응 종료 후, 메틸렌클로라이드로 유기층을 분리하고, MgSO₄를 사용하여 상기 유기층에서 물을 제거하였다. 물이 제거된 유기층에서 용매를 제거한 후, 컬럼 크로마토그래피 [Hexane: MC= 10:1 (v/v)]로 정제하여 화합물 8 (8.2 g, 수율 63%)를 얻었다.

[134] HRMS [M]⁺: 501.62

[135]

[136] [합성예 2] 화합물 9의 합성

[137]



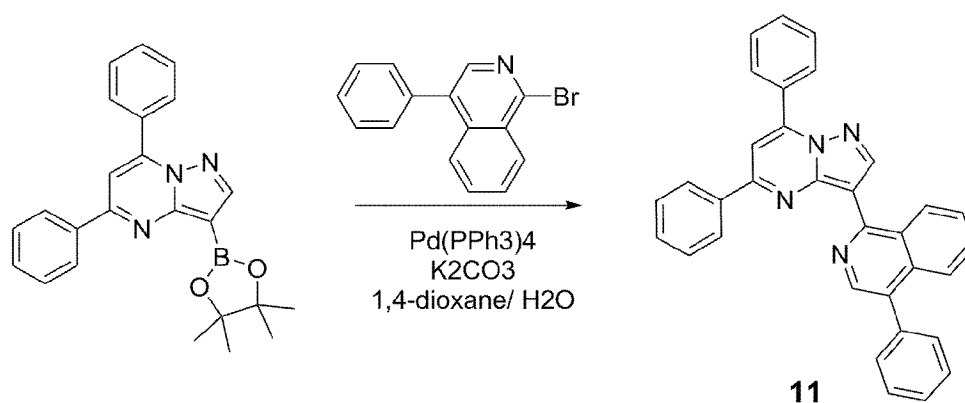
[138] 합성에 1에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-bromo-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine (9.43 g, 0.030 mol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성에 1과 동일한 과정을 수행하여 화합물 9 (8.5 g, 수율: 63%)을 얻었다.

[139] HRMS [M]⁺: 501.62

[140]

[141] [합성예 3] 화합물 11의 합성

[142]



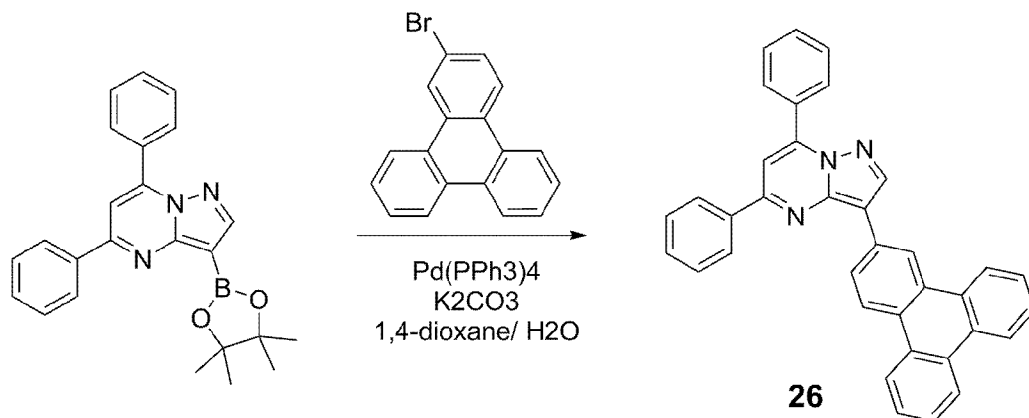
[143] 합성에 1에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 1-bromo-4-phenylisoquinoline (8.52g, 0.030 mol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성에 1과 동일한 과정을 수행하여 화합물 11 (9.8 g, 수율: 84%)을 얻었다.

[144] HRMS [M]⁺: 474.57

[145]

[146] [합성예 4] 화합물 26의 합성

[147]



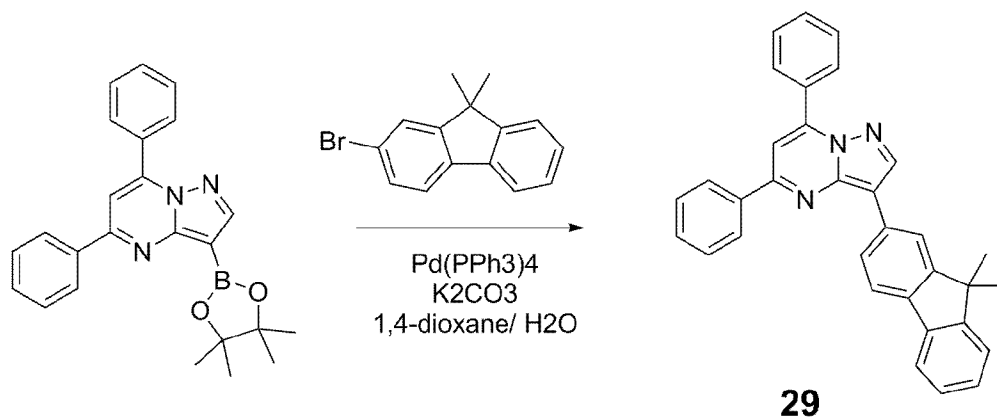
[148] 합성예 1에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-bromotriphenylene (9.2 g, 0.030 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 1과 동일한 과정을 수행하여 화합물 26 (9.7 g, 수율: 78%)을 얻었다.

[149] HRMS [M]⁺: 497.60

[150]

[151] [합성예 5] 화합물 29의 합성

[152]



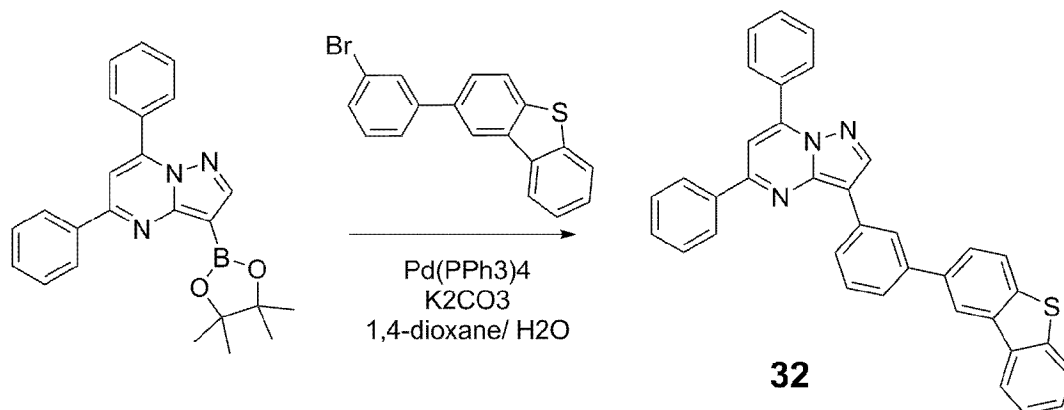
[153] 합성예 1에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-bromo-9,9-dimethyl-9H-fluorene (8.2 g, 0.030 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 1과 동일한 과정을 수행하여 화합물 29 (9.4 g, 수율: 81%)을 얻었다.

[154] HRMS [M]⁺: 463.58

[155]

[156] [합성예 6] 화합물 32의 합성

[157]



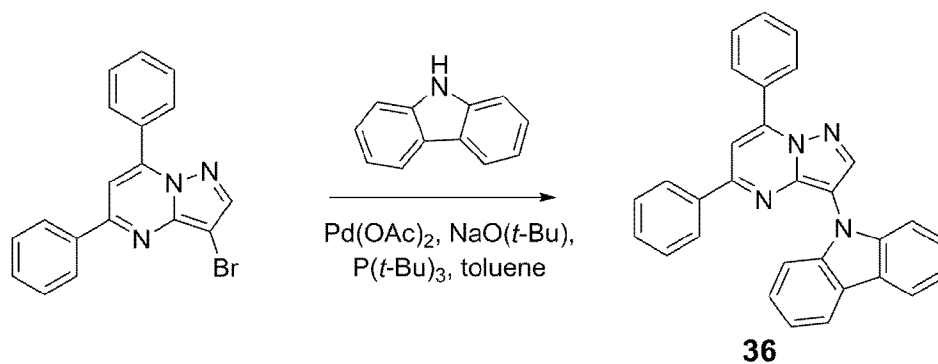
[158] 합성에 1에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-(3-bromophenyl)dibenzo[b,d]thiophene (10.1 g, 0.030 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성에 1과 동일한 과정을 수행하여 화합물 32 (11.65 g, 수율: 88%)을 얻었다.

[159] HRMS [M]⁺: 529.66

[160]

[161] [합성예 7] 화합물 36의 합성

[162]



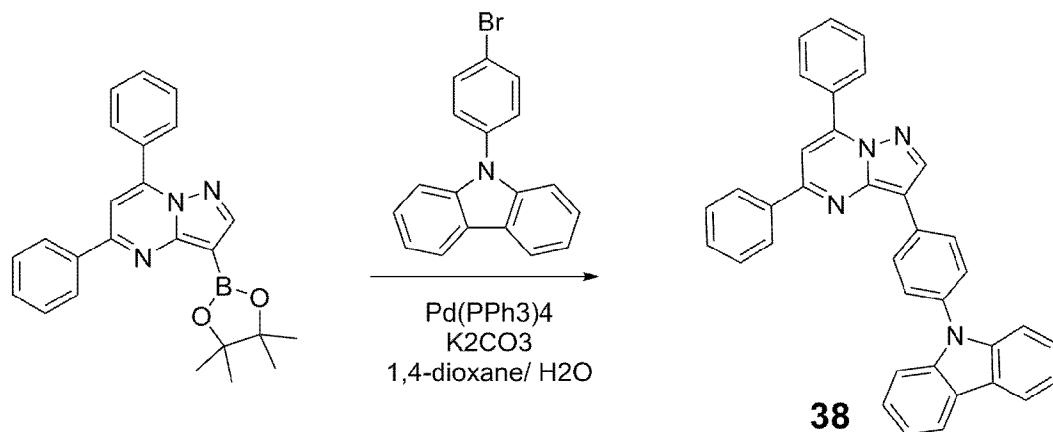
[163] 질소 기류 하에서 준비예 2에서 합성된 화합물 I-2 (10.0 g, 28.5 mmol), Carbazole (6.2 g, 37.1 mmol), Pd(OAc)₂ (0.06 g, 0.3 mmol), P(*t*-Bu)₃ (0.12 ml, 0.6 mmol), NaO(*t*-Bu) (8.23g, 85.6 mmol) 및 toluene (100 ml)를 혼합하고, 110 °C에서 5시간 동안 교반하였다. 반응이 종결된 후, toluene을 농축하고, 고체염을 필터링한 뒤, 재결정으로 정제하여 화합물 36 (8.1 g, 수율 65%)을 얻었다.

[164] HRMS [M]⁺: 436.52

[165]

[166] [합성예 8] 화합물 38의 합성

[167]



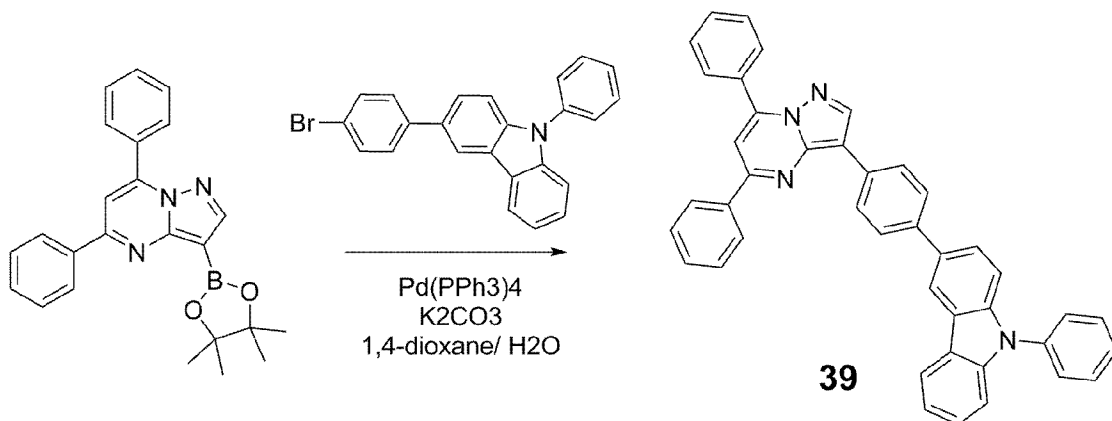
[168] 합성예 1에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 9-(4-bromophenyl)-9H-carbazole (9.6 g, 0.030 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 1과 동일한 과정을 수행하여 화합물 38 (10.89 g, 수율: 85%)을 얻었다.

[169] HRMS [M]⁺: 512.62

[170]

[171] [합성예 9] 화합물 39의 합성

[172]



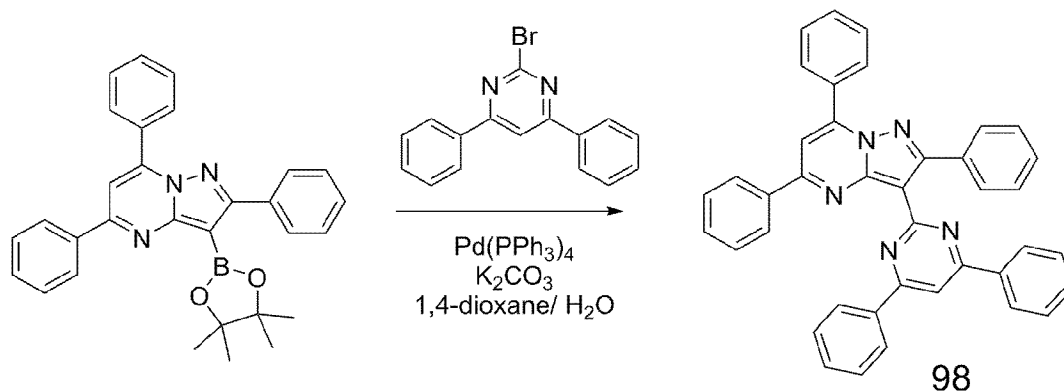
[173] 합성예 1에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 3-(4-bromophenyl)-9-phenyl-9H-carbazole (11.9 g, 0.03 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 1과 동일한 과정을 수행하여 화합물 39 (11.6 g, 수율: 79%)을 얻었다.

[174] HRMS [M]⁺: 588.71

[175]

[176] [합성예 10] 화합물 98의 합성

[177]



[178] 질소 기류 하에서 준비예 8에서 합성된 화합물 I-8 (10.0 g, 0.025 mol), 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine (7.8g, 0.025 mol), Pd(PPh₃)₄ (0.73 g, 0.001 mol), 및 potassium carbonate (8.75 g, 0.063 mol)을 혼합한 다음, 1,4-dioxane (80 ml) 및 H₂O (20 ml)에서 환류 교반하였다.

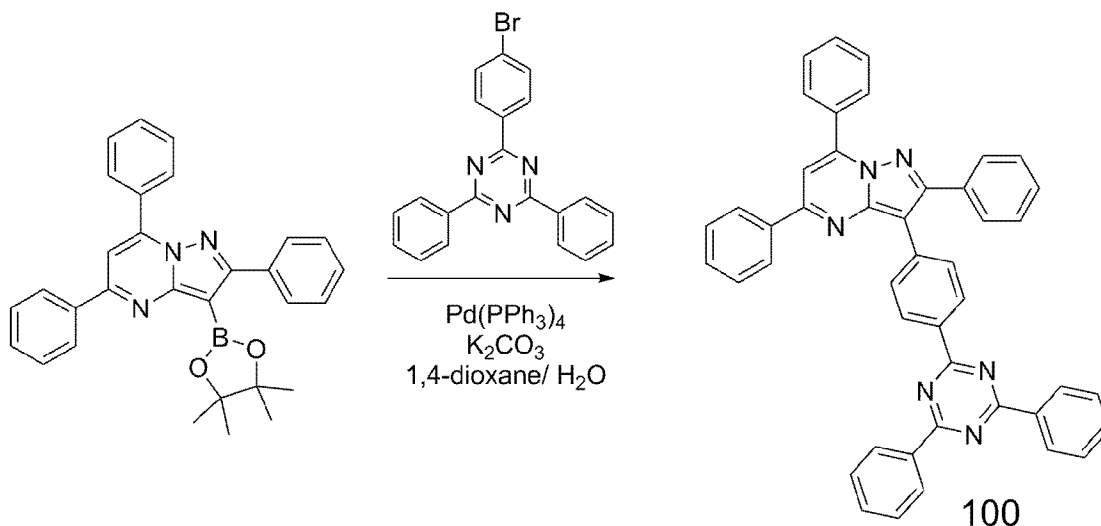
[179] 반응 종료 후, 메틸렌클로라이드로 유기층을 분리하고, MgSO₄를 사용하여 상기 유기층에서 물을 제거하였다. 물이 제거된 유기층에서 용매를 제거한 후, 컬럼 크로마토그래피 [Hexane: MC= 10:1 (v/v)]로 정제하여 화합물 98 (10.74 g, 수율 88%)를 얻었다.

[180] HRMS [M]⁺: 577.69

[181]

[182] [합성예 11] 화합물 100의 합성

[183]



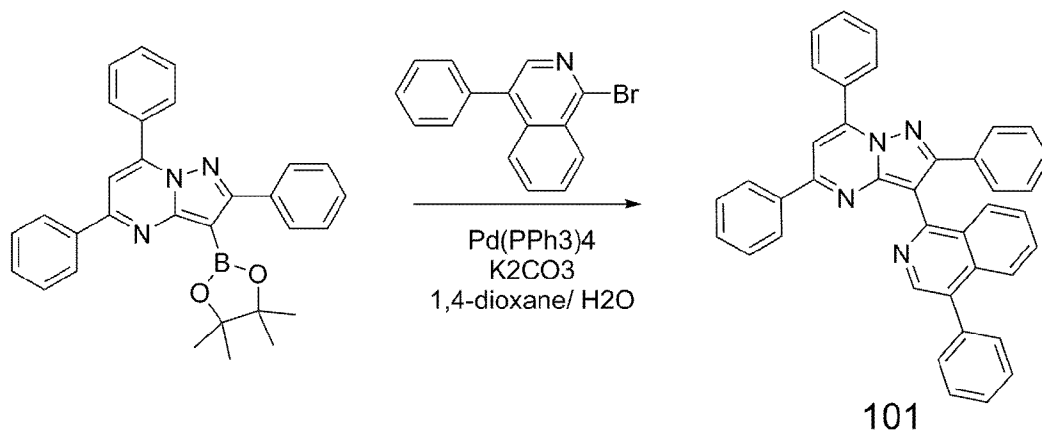
[184] 합성예 10에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-bromo-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine (9.43 g, 0.025 mol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 10과 동일한 과정을 수행하여 화합물 100 (8.5 g, 수율: 63%)을 얻었다.

[185] HRMS [M]⁺: 578.68

[186]

[187] [합성예 12] 화합물 101의 합성

[188]



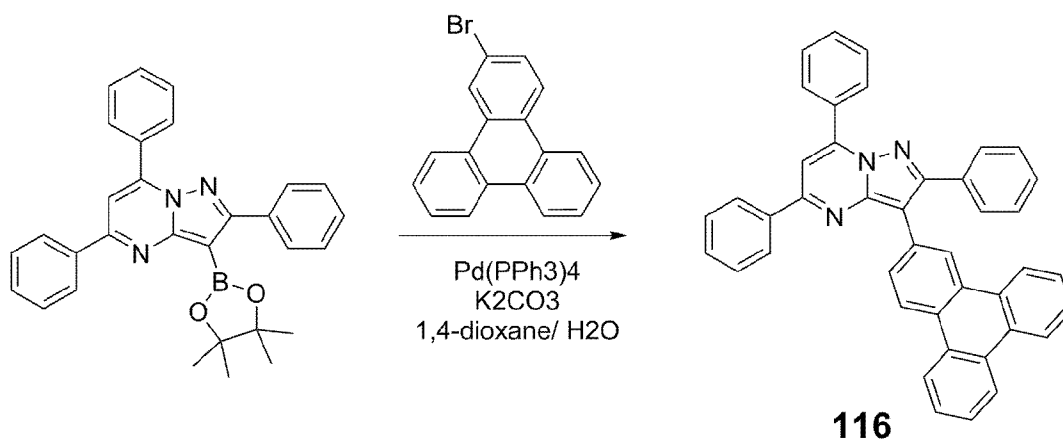
[189] 합성예 10에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 1-bromo-4-phenylisoquinoline (8.0 g, 0.025 mol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 10과 동일한 과정을 수행하여 화합물 101 (9.77 g, 수율: 71%)을 얻었다.

[190] HRMS [M]⁺: 550.66

[191]

[192] [합성예 13] 화합물 116의 합성

[193]



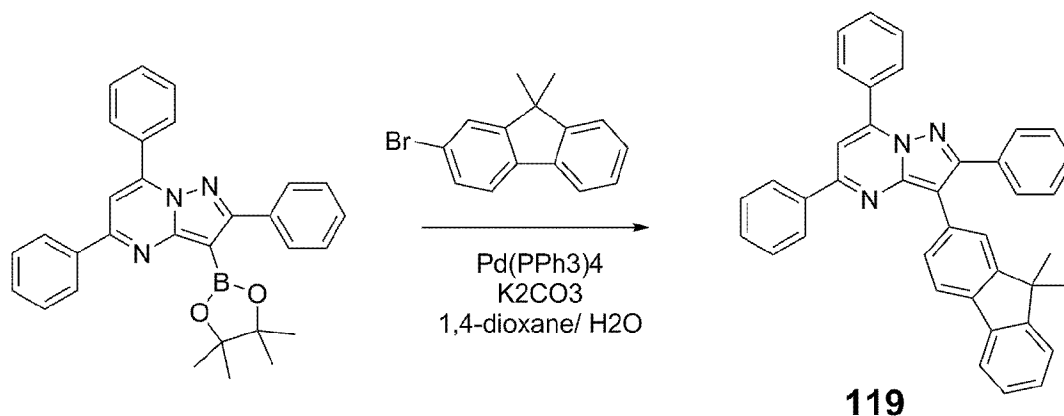
[194] 합성예 10에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-bromotriphenylene (8.8 g, 0.025 mol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 10과 동일한 과정을 수행하여 화합물 116 (11.18 g, 수율: 78%)을 얻었다.

[195] HRMS [M]⁺: 573.70

[196]

[197] [합성예 14] 화합물 119의 합성

[198]



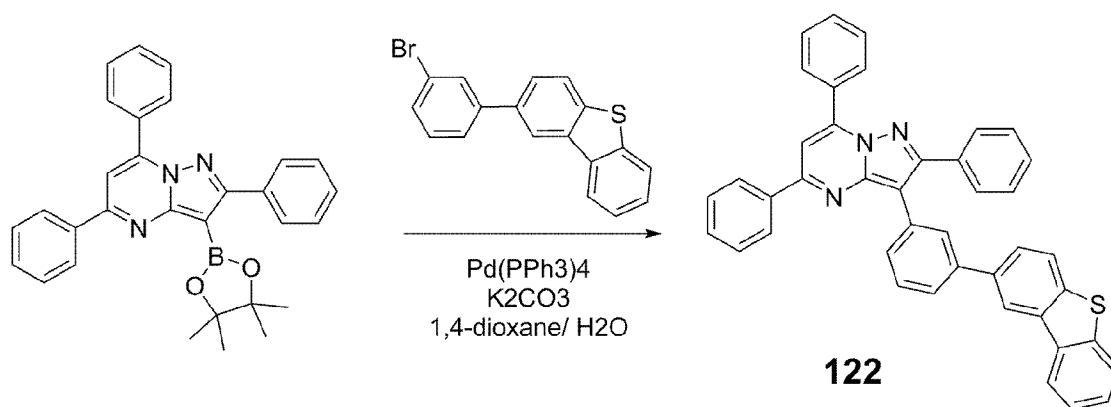
[199] 합성예 10에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-bromo-9,9-dimethyl-9H-fluorene (8.0 g, 0.025 mol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 10과 동일한 과정을 수행하여 화합물 119 (8.77 g, 수율: 65%)을 얻었다.

[200] HRMS [M]⁺: 539.68

[201]

[202] [합성예 15] 화합물 122의 합성

[203]



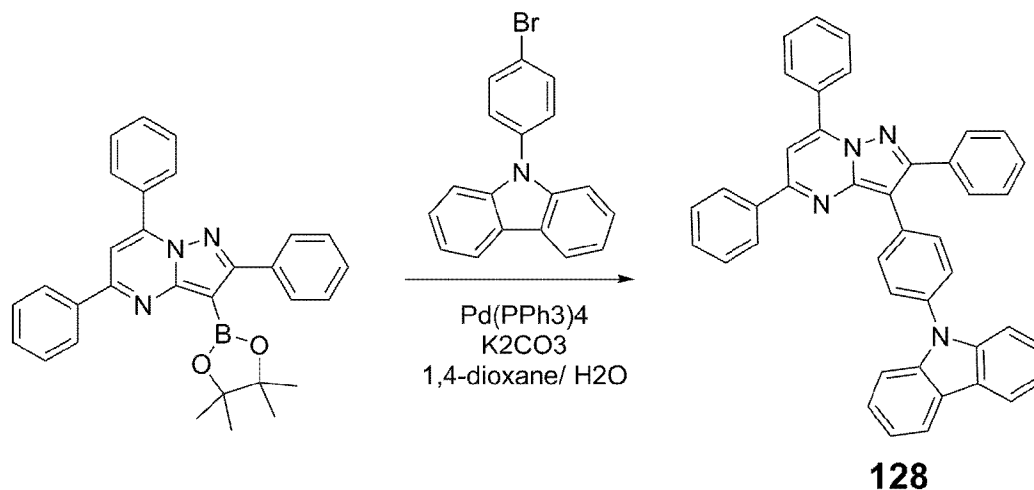
[204] 합성예 10에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-(3-bromophenyl)dibenzo[b,d]thiophene (10.1 g, 0.030 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 10과 동일한 과정을 수행하여 화합물 122 (13.3g, 수율: 88%)을 얻었다.

[205] HRMS [M]⁺: 605.76

[206]

[207] [합성예 16] 화합물 128의 합성

[208]



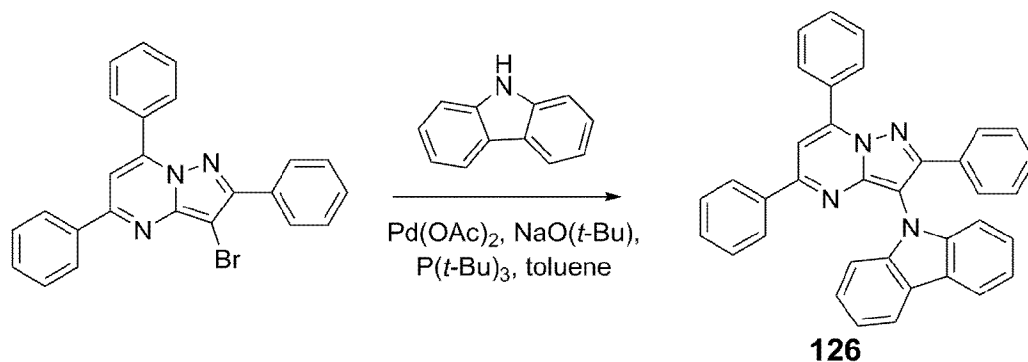
[209] 합성에 10에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 9-(4-bromophenyl)-9H-carbazole (9.6 g, 0.030 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성에 10과 동일한 과정을 수행하여 화합물 128 (20.00 g, 수율: 69%)을 얻었다.

[210] HRMS [M]⁺: 588.71

[211]

[212] [합성예 17] 화합물 126의 합성

[213]



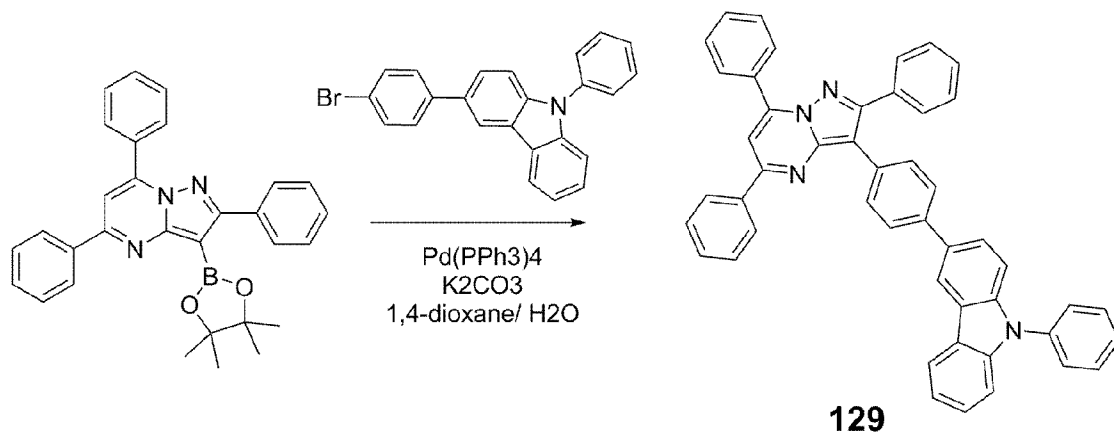
[214] 질소 기류 하에서 준비예 7에서 합성된 화합물 I-7 (10.0 g, 28.5 mmol), Carbazole (5.1 g, 30.4 mmol), Pd(OAc)₂ (0.05 g, 0.2 mmol), P(*t*-Bu)₃ (0.10 ml, 0.46 mmol), NaO(*t*-Bu) (6.76g, 70.3 mmol) 및 toluene (100 ml)를 혼합하고, 110 °C 에서 5시간 동안 교반하였다. 반응이 종결된 후, toluene을 농축하고, 고체염을 필터링한 뒤, 재결정으로 정제하여 화합물 126 (7.8 g, 수율 65%)을 얻었다.

[215] HRMS [M]⁺: 512.62

[216]

[217] [합성예 18] 화합물 129의 합성

[218]



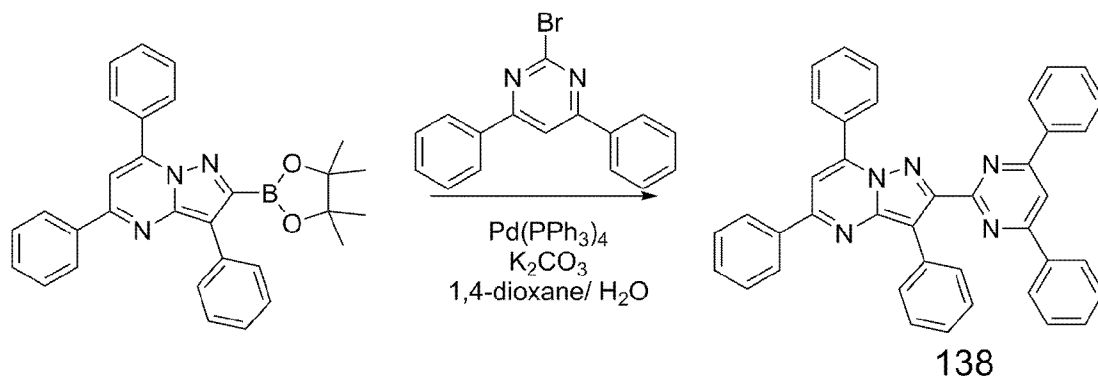
[219] 합성에 10에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 3-(4-bromophenyl)-9-phenyl-9H-carbazole (11.9 g, 0.030 mol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성에 10과 동일한 과정을 수행하여 화합물 129 (10.8 g, 수율: 65%)을 얻었다.

[220] HRMS [M]⁺: 664.81

[221]

[222] [합성예 19] 화합물 138의 합성

[223]



[224] 질소 기류 하에서 준비예 5에서 합성된 화합물 I-5 (10.0 g, 0.025 mol), 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine (7.8g, 0.025 mol), Pd(PPh₃)₄ (0.73 g, 0.001 mol), 및 potassium carbonate (8.75 g, 0.063 mol)을 혼합한 다음, 1,4-dioxane (80 ml) 및 H₂O (20 ml)에서 환류 교반하였다.

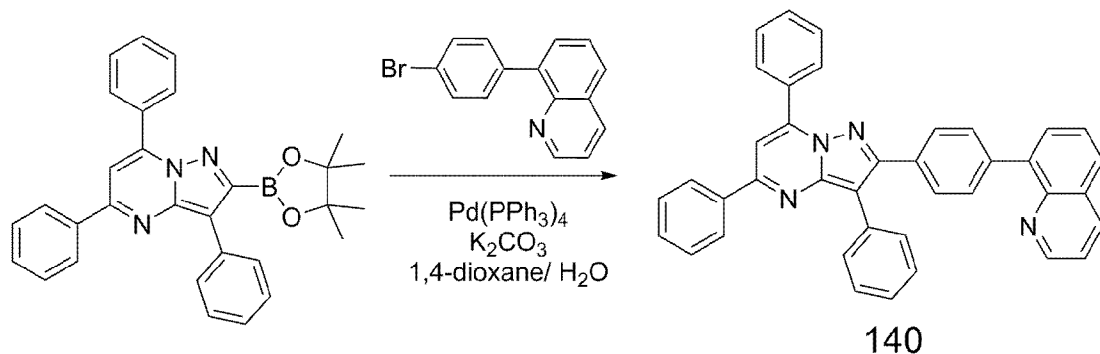
[225] 반응 종료 후, 메틸렌클로라이드로 유기층을 분리하고, MgSO₄를 사용하여 상기 유기층에서 물을 제거하였다. 물이 제거된 유기층에서 용매를 제거한 후, 컬럼 크로마토그래피 [Hexane: MC= 10:1 (v/v)]로 정제하여 화합물 138 (10.74 g, 수율 88%)를 얻었다.

[226] HRMS [M]⁺: 577.69

[227]

[228] [합성예 20] 화합물 140의 합성

[229]



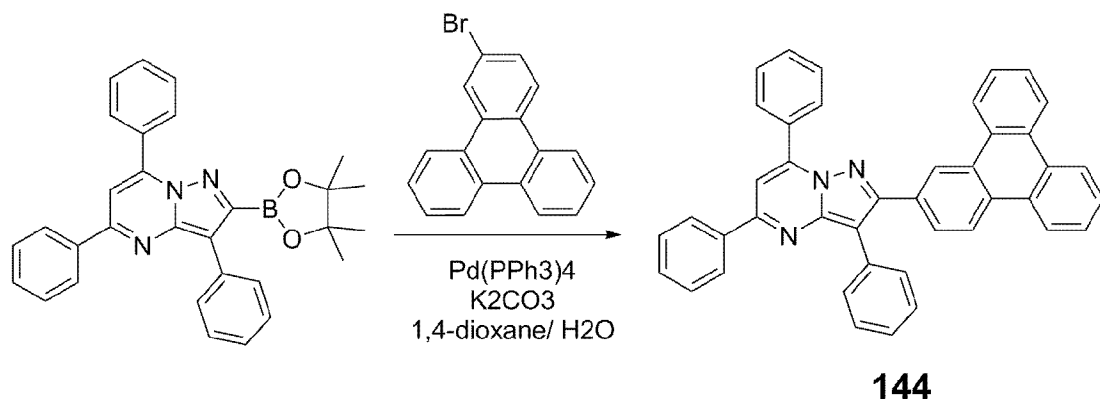
[230] 합성예 19에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 1-bromo-4-phenylisoquinoline (1.89 g, 25.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 19과 동일한 과정을 수행하여 화합물 140 (9.77 g, 수율: 71%)을 얻었다.

[231] HRMS [M]⁺: 550.66

[232]

[233] [합성예 21] 화합물 144의 합성

[234]



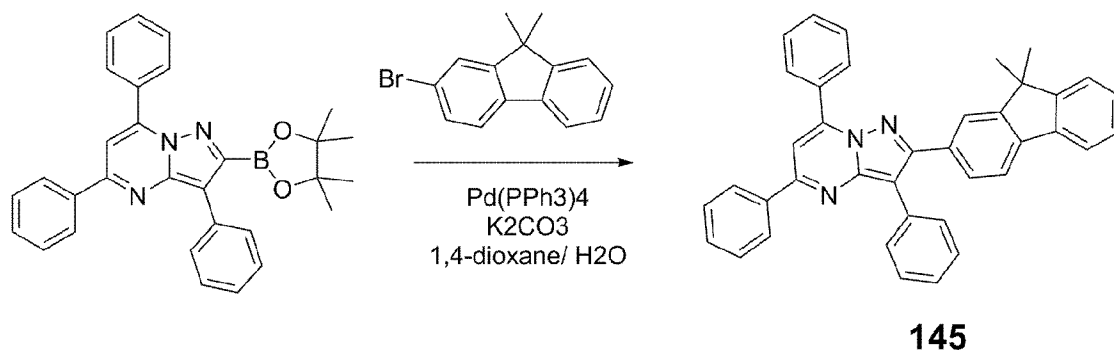
[235] 합성예 19에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 2-bromotriphenylene (8.8 g, 0.025 mol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 19과 동일한 과정을 수행하여 화합물 144 (11.18 g, 수율: 78%)을 얻었다.

[236] HRMS [M]⁺: 573.70

[237]

[238] [합성예 22] 화합물 145의 합성

[239]



[240] 합성예 19에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신

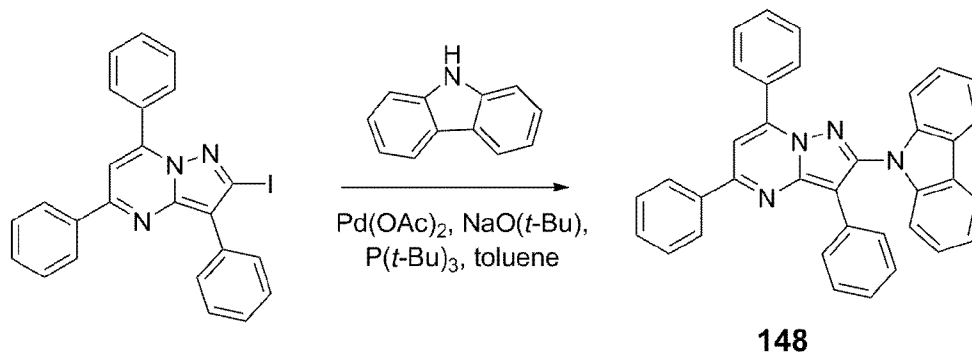
2-bromo-9,9-dimethyl-9H-fluorene (8.0 g, 0.025 mol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성에 19과 동일한 과정을 수행하여 화합물 145 (8.77 g, 수율: 65%)을 얻었다.

[241] HRMS [M]⁺: 539.68

[242]

[243] [합성예 23] 화합물 148의 합성

[244]



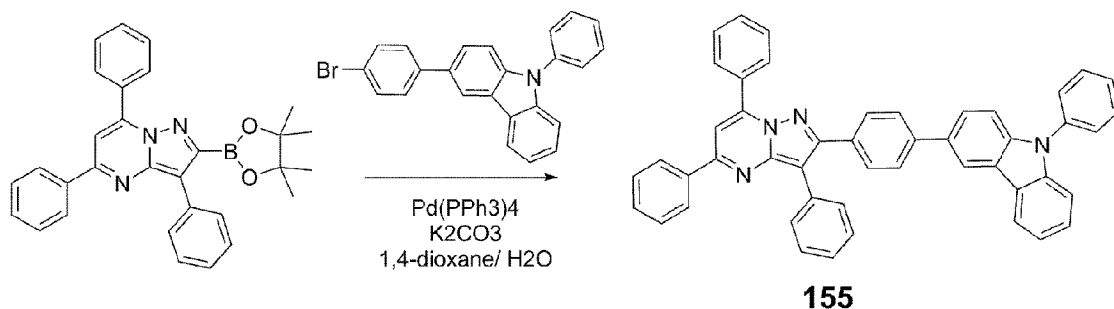
[245] 질소 기류 하에서 준비예 4에서 합성된 화합물 I-4 (10.0 g, 28.5 mmol), Carbazole (5.1 g, 30.4 mmol), Pd(OAc)₂ (0.05 g, 0.2 mmol), P(*t*-Bu)₃ (0.10 ml, 0.46 mmol), NaO(*t*-Bu) (6.76g, 70.3 mmol) 및 toluene (100 ml)를 혼합하고, 110 °C 에서 5시간 동안 교반하였다. 반응이 종결된 후, toluene을 농축하고, 고체염을 필터링한 뒤, 재결정으로 정제하여 화합물 148 (7.8 g, 수율 65%)을 얻었다.

[246] HRMS [M]⁺: 512.62

[247]

[248] [합성예 24] 화합물 155의 합성

[249]



[250] 합성예 19에서 사용된 2-bromo-4,6-diphenylpyrimidine 대신 3-(4-bromophenyl)-9-phenyl-9H-carbazole (11.9 g, 0.030 mol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 19과 동일한 과정을 수행하여 화합물 155 (10.8 g, 수율: 65%)을 얻었다.

[251] HRMS [M]⁺: 664.81

[252]

[253] [실시예 1] - 녹색 유기 전계 발광 소자의 제조

[254] 합성예 1에서 합성된 화합물 8을 통상적으로 알려진 방법으로 고순도 승화 정제를 한 후, 하기와 같이 녹색 유기 전계 발광 소자를 제조하였다.

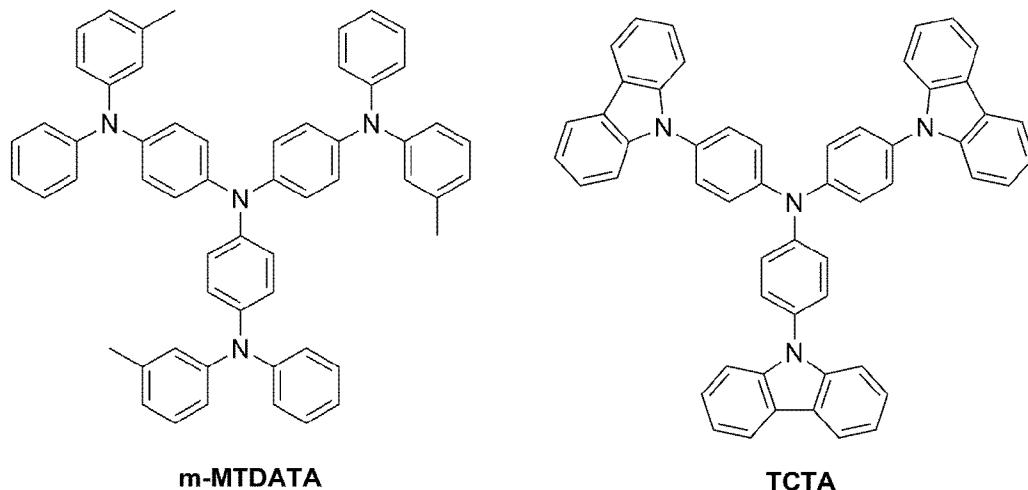
[255] ITO (Indium tin oxide)가 1500 Å 두께로 박막 코팅된 유리 기판을 증류수

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 5 분간 세정한 후 진공 증착기로 기판을 이송하였다.

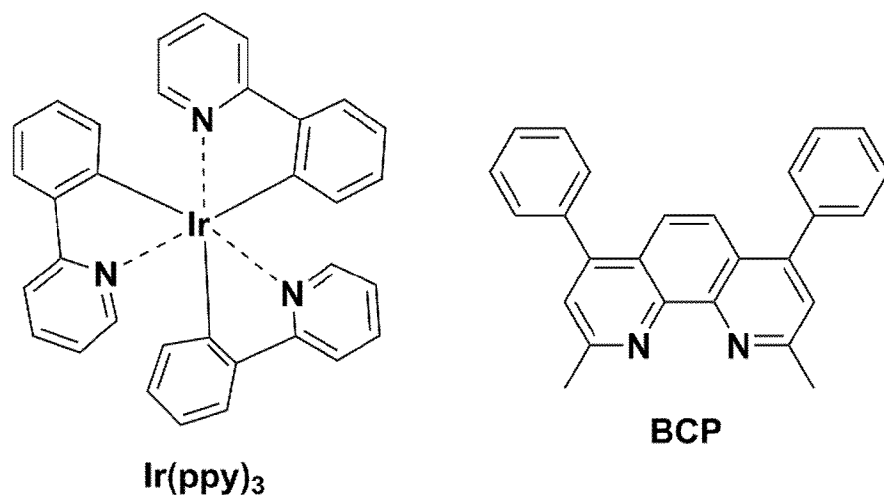
[256] 상기와 같이 준비된 ITO 투명 전극 위에 m-MTDATA(60nm) / TCTA (80nm) / 90중량%의 화합물 8 + 10 중량%의 Ir(ppy)₃(300nm) / BCP(10nm) / Alq₃(30nm) / LiF(1nm) / Al(200nm) 순으로 적층하여 유기 전계 발광 소자를 제조하였다.

[257] 상기 m-MTDATA, TCTA, Ir(ppy)₃ 및 BCP의 구조는 하기와 같다.

[258]



[259]



[260]

[261] [실시예 2 ~ 24] - 녹색 유기 전계 발광 소자의 제조

[262] 실시예 1에서 화합물 8 대신 합성에 2 내지 24 에서 각각 합성된 화합물을 사용하는 것을 제외하고는, 실시예 1과 동일하게 수행하여 녹색 유기 EL 소자를 제조하였다.

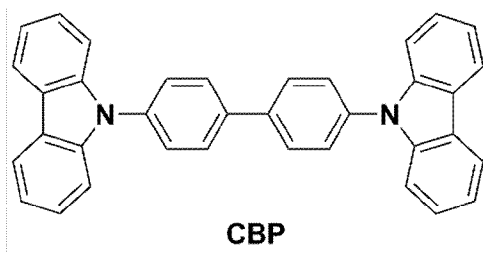
[263]

[264] [비교예 1] - 녹색 유기 전계 발광 소자의 제조

[265] 합성에 1에서 합성된 화합물 대신 하기 CBP를 사용하는 것을 제외하고는,

실시예 1과 동일하게 수행하여 녹색 유기 전계 발광 소자를 제조하였다.

[266]



[267]

[평가예 1]

[268]

실시예 1 내지 24, 및 비교예 1에서 각각 제조된 유기 전계 발광 소자에 대하여, 전류밀도 10 mA/cm²에서의 구동전압, 전류효율 및 발광 피크를 측정하였고, 그 결과를 하기 표 1에 나타내었다.

[269] [표1]

	발광 재료	구동 전압 (V)	발광 피크(nm)	전류효율 (cd/A)
실시예 1	화합물 8	5.80	519	47.5
실시예 2	화합물 9	5.50	520	46.3
실시예 3	화합물 11	5.20	521	49.5
실시예 4	화합물 26	5.70	520	50.2
실시예 5	화합물 29	5.50	521	46.0
실시예 6	화합물 32	5.20	518	48.0
실시예 7	화합물 36	6.50	520	43.3
실시예 8	화합물 38	6.00	519	45.9
실시예 9	화합물 39	5.80	519	47.5
실시예 10	화합물 98	5.00	521	46.3
실시예 11	화합물 100	4.80	520	49.5
실시예 12	화합물 101	6.50	519	50.2
실시예 13	화합물 116	6.00	520	46.0
실시예 14	화합물 119	5.80	519	48.0
실시예 15	화합물 122	5.00	520	43.3
실시예 16	화합물 128	6.50	519	45.9
실시예 17	화합물 126	6.00	520	47.5
실시예 18	화합물 129	5.80	520	46.3
실시예 19	화합물 138	5.00	519	49.5
실시예 20	화합물 140	4.80	520	46.0
실시예 21	화합물 144	5.20	520	48.0
실시예 22	화합물 145	5.70	519	43.3
실시예 23	화합물 148	5.50	519	45.9
실시예 24	화합물 155	5.20	520	47.5
비교예 1	CBP	6.93	516	38.2

[270] 상기 표 1에 나타낸 바와 같이, 본 발명에 따른 화합물(화합물 8 ~ 화합물 155)을 발광층 재료로 사용한 실시예 1 내지 24의 녹색 유기 전계 발광 소자는, 종래 CBP를 발광층 재료로 사용한 비교예 1의 녹색 유기 전계 발광 소자에 비해 구동전압이 낮고, 전류효율이 더 향상될 수 있다는 것을 알 수 있었다.

[271]

[272] **[실시예 25] - 적색 유기 전계 발광 소자의 제조**

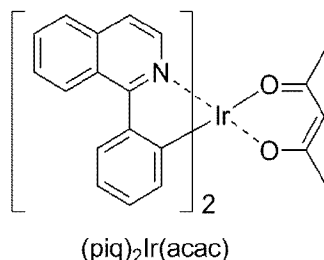
[273] 합성에 1에서 합성된 화합물 화합물 8을 통상적으로 알려진 방법으로 고순도 승화 정제를 한 후, 하기와 같이 적색 유기 전계 발광 소자를 제조하였다.

[274]

[275] 먼저, ITO (Indium tin oxide)가 1500 Å 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 (Powersonic 405, 화신테크)로 이송시킨 다음, UV를 이용하여 상기 기판을 5분간 세정하고 진공 증착기로 기판을 이송하였다.

[276] 이와 같이 준비된 ITO 투명 전극 위에, m-MTDATA (60 nm) / TCTA (80 nm) / 90 중량%의 화합물 8 + 10 중량%의 (piq)₂Ir(acac) (30nm)/BCP (10 nm)/Alq3 (30 nm)/LiF (1 nm)/Al (200 nm) 순으로 적층하여 유기 전계 발광 소자를 제조하였다.[277] 사용된 m-MTDATA, TCTA, CBP 및 BCP의 구조는 실시예 1에 기재된 바와 같고, (piq)₂Ir(acac)는 하기와 같다.

[278]



[279]

[280] **[실시예 26 ~ 48] - 적색 유기 전계 발광 소자의 제조**

[281] 실시예 25 에서 발광층 형성시 발광 호스트 물질로서 사용된 화합물 8 대신 합성에 2 내지 24 에서 각각 합성된 화합물을 사용하는 것을 제외하고는, 실시예 25와 동일하게 수행하여 적색 유기 EL 소자를 제조하였다.

[282]

[283] **[비교예 2] 적색 유기 전계 발광 소자의 제작**

[284] 실시예 25 에서 발광층 형성시 발광 호스트 물질로서 사용된 화합물 1 대신 CBP를 사용하는 것을 제외하고는, 상기 실시예 25와 동일한 과정으로 적색 유기 전계 발광 소자를 제작하였다. 사용된 CBP의 구조는 비교예 1에 기재된 바와 같다.

[285]

[286] **[평가예 2]**[287] 실시예 25 ~ 48 및 비교예 2에서 각각 제조된 적색 유기 전계 발광 소자에 대하여, 전류밀도 10 mA/cm²에서의 구동전압 및 전류효율을 측정하였고, 그 결과를 하기 표 2에 나타내었다.

[288] [표2]

	발광 재료	구동 전압 (V)	전류효율 (cd/A)
실시예 25	화합물 8	4.40	12.5
실시예 26	화합물 9	4.60	13.8
실시예 27	화합물 11	4.40	11.5
실시예 28	화합물 26	4.40	11.5
실시예 29	화합물 29	4.30	12.8
실시예 30	화합물 32	4.50	11.9
실시예 31	화합물 36	4.40	11.5
실시예 32	화합물 38	4.60	11.9
실시예 33	화합물 39	4.60	12.8
실시예 34	화합물 98	4.40	11.9
실시예 35	화합물 100	4.30	12.8
실시예 36	화합물 101	4.80	11.9
실시예 37	화합물 116	4.30	11.5
실시예 38	화합물 119	4.50	11.5
실시예 39	화합물 122	4.40	12.8
실시예 40	화합물 128	4.40	10.8
실시예 41	화합물 126	4.30	12.8
실시예 42	화합물 129	4.50	11.9
실시예 43	화합물 138	4.40	12.8
실시예 44	화합물 140	4.60	10.9
실시예 45	화합물 144	4.60	11.1
실시예 46	화합물 145	4.40	10.9
실시예 47	화합물 148	4.30	11.2
실시예 48	화합물 155	4.50	11.1
비교예 2	CBP	4.80	10.5

[289] 상기 표 2에 나타낸 바와 같이, 본 발명에 따른 화합물(화합물 8 ~ 화합물 155)을 발광층 재료로 사용한 실시예 25 내지 48의 적색 유기 EL 소자의 경우, 종래 CBP를 사용한 비교예 2의 적색 유기 전계 발광 소자에 비해, 효율 및 구동전압이 우수한 것을 확인할 수 있었다.

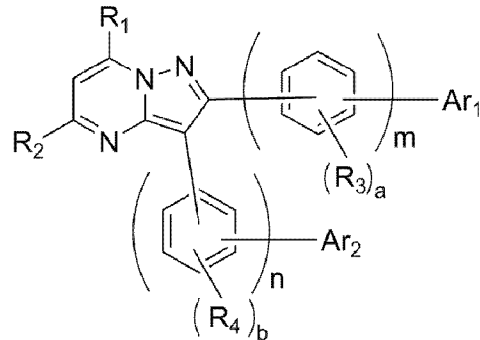
[290]

[291] 이상을 통해 본 발명의 바람직한 실시예에 대하여 설명하였지만, 본 발명은 이에 한정되는 것이 아니고 특허청구범위와 발명의 상세한 설명의 범위 안에서 여러 가지로 변형하여 실시하는 것이 가능하고 이 또한 발명의 범주에 속하는 것은 당연하다.

청구범위

[청구항 1] 하기 화학식 1로 표시되는 화합물:

[화학식 1]



(상기 화학식 1에서,

R_1 및 R_2 는 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬기, 및 $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴기로 이루어진 군에서 선택되고;

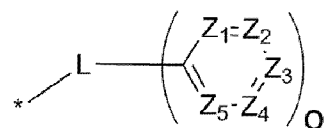
m 및 n 은 각각 0 내지 3의 정수이며;

a 및 b 는 각각 독립적으로 0 내지 4의 정수이고,

R_3 및 R_4 는 서로 동일하거나 상이하며, 각각 독립적으로 중수소, 할로젠기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_2 \sim C_{40}$ 의 알케닐기, $C_2 \sim C_{40}$ 의 알키닐기, $C_3 \sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬옥시기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴옥시기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬실릴기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴실릴기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬보론기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴보론기, 포스핀기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬포스핀기, $C_6 \sim C_{40}$ 의 아릴포스핀기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬포스핀옥사이드기, $C_6 \sim C_{40}$ 의 아릴포스핀옥사이드기 및 $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택되고;

Ar_1 및 Ar_2 는 서로 동일하거나 상이하며, 각각 독립적으로 하기 화학식 2로 표시되는 치환체이고,

[화학식 2]



*는 화학식 1에 결합하는 부분이고,

L 은 단일결합이거나, $C_6 \sim C_{18}$ 의 아릴렌기 및 핵원자수 5 내지 18의 헤테로아릴렌기로 이루어진 군에서 선택되고,

o 는 0 또는 1이고,

Z_1 내지 Z_5 는 서로 동일하거나 상이하며, 각각 독립적으로 N 또는 $C(R_5)$ 이고, 다만 Z_1 내지 Z_5 중 적어도 하나는 N이며,

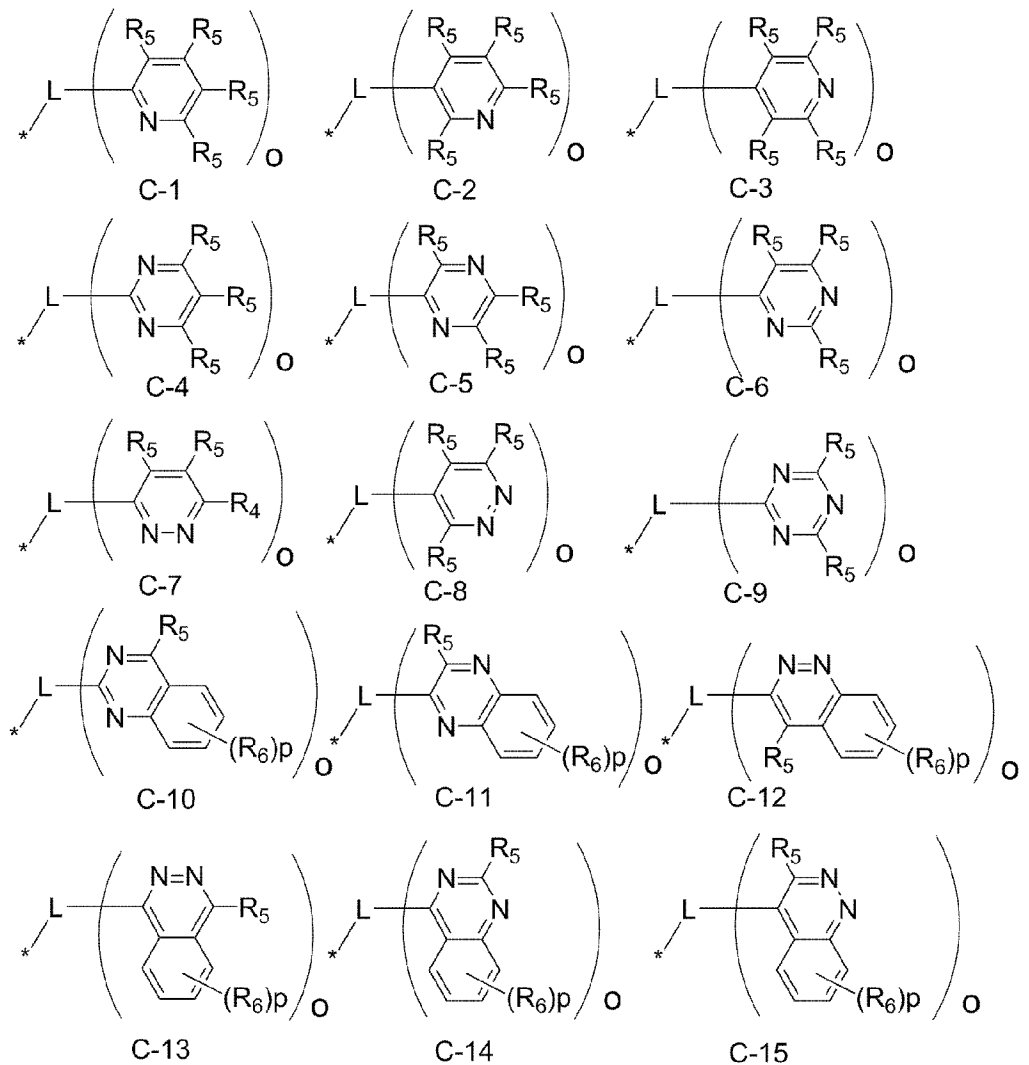
이때 $C(R_5)$ 이 복수인 경우, 복수의 R_5 는 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_2\sim C_{40}$ 의 알케닐기, $C_2\sim C_{40}$ 의 알키닐기, $C_3\sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬옥시기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴옥시기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬실릴기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴실릴기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬보론기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴보론기, 포스핀기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬포스핀기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴포스핀기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬포스핀옥사이드기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴포스핀옥사이드기 및 $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택되거나, 또는 인접하는 다른 R_5 또는 L과 결합하여 축합 방향족환 또는 축합 헤테로방향족환을 형성할 수 있으며;

상기 R_1 및 R_2 의 알킬기, 아릴기, R_3 내지 R_5 의 알킬기, 알케닐기, 알키닐기, 시클로알킬기, 헤테로시클로알킬기, 아릴기, 헤테로아릴기, 알킬옥시기, 아릴옥시기, 알킬실릴기, 아릴실릴기, 알킬보론기, 아릴보론기, 포스핀기, 알킬포스핀기, 아릴포스핀기, 알킬포스핀옥사이드기, 아릴포스핀옥사이드기 및 아릴아민기와 L의 아릴렌기, 헤테로아릴렌기는 각각 독립적으로 중수소, 할로젠기, 시아노기, 니트로기, 아미노기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_2\sim C_{40}$ 의 알케닐기, $C_2\sim C_{40}$ 의 알키닐기, $C_3\sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 40의 헤테로아릴기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬옥시기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴옥시기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬실릴기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴실릴기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬보론기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴보론기, 포스핀기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬포스핀기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴포스핀기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬포스핀옥사이드기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴포스핀옥사이드기 및 $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상의 치환기로 치환되거나 비치환되고, 이때 상기 치환기가 복수인 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이함).

[청구항 2]

제1항에 있어서,

상기 화학식 2로 표시되는 치환체는 하기 화학식 C-1 내지 C-15로 표시되는 치환체로 이루어진 군에서 선택되는 것을 특징으로 하는 화합물:



(상기 화학식 C-1 내지 C-15에서,

L, o 및 R₅는 각각 제1항에서 정의한 바와 같고,

p는 0 내지 4의 정수이며,

복수의 R₆는 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 중수소, 할로젠, 시아노기, 니트로기, C₁~C₄₀의 알킬기, C₂~C₄₀의 알케닐기, C₂~C₄₀의 알키닐기, C₃~C₄₀의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, C₆~C₆₀의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴기, C₆~C₆₀의 아릴옥시기, C₁~C₄₀의 알킬옥시기, C₆~C₆₀의 아릴아민기, C₁~C₄₀의 알킬실릴기, C₁~C₄₀의 알킬보론기, C₆~C₆₀의 아릴보론기, C₆~C₆₀의 아릴포스핀기, C₆~C₆₀의 아릴포스핀옥사이드기, 및 C₆~C₆₀의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택되거나, 또는 인접하는 기와 서로 결합하여 축합 고리를 형성할 수 있으며,

상기 R₆의 알킬기, 알케닐기, 알키닐기, 시클로알킬기,

헤테로시클로알킬기, 아릴기, 헤테로아릴기, 아릴옥시기, 알킬옥시기,

아릴아민기, 알킬실릴기, 알킬보론기, 아릴보론기, 아릴포스핀기,

아릴포스핀옥사이드기 및 아릴실릴기는 각각 독립적으로 중수소, 할로젠, 시아노기, 니트로기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_2\sim C_{40}$ 의 알케닐기, $C_2\sim C_{40}$ 의 알키닐기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴옥시기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬옥시기, $C_6\sim C_{60}$ 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, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴보론기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴포스핀기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴포스핀옥사이드기 및 $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상의 치환기로 치환 또는 비치환이며, 이때 치환기가 복수인 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이함).

- [청구항 3] (i) 양극, (ii) 음극, 및 (iii) 상기 양극과 음극 사이에 개재(介在)된 1층 이상의 유기물층을 포함하는 유기 전계 발광 소자로서, 상기 1층 이상의 유기물층 중에서 적어도 하나는 제1항 또는 제2항에 기재된 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하는 것을 특징으로 하는 유기 전계 발광 소자.
- [청구항 4] 제3항에 있어서, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하는 유기물층은 발광층이고, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 호스트 물질인 것을 특징으로 하는 유기 전계 발광 소자.