



(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 공개특허공보(A)

(11) 공개번호 10-2017-0074652
 (43) 공개일자 2017년06월30일

- | | |
|--|---|
| <p>(51) 국제특허분류(Int. Cl.)
 <i>C07D 231/54</i> (2006.01) <i>C07D 249/16</i> (2006.01)
 <i>C07D 403/10</i> (2006.01) <i>C07D 413/10</i> (2006.01)
 <i>C07D 471/04</i> (2006.01) <i>C09K 11/06</i> (2006.01)
 <i>H01L 51/00</i> (2006.01) <i>H01L 51/50</i> (2006.01)</p> <p>(52) CPC특허분류
 <i>C07D 231/54</i> (2013.01)
 <i>C07D 249/16</i> (2013.01)</p> <p>(21) 출원번호 10-2015-0184189
 (22) 출원일자 2015년12월22일
 심사청구일자 없음</p> | <p>(71) 출원인
 주식회사 두산
 서울특별시 중구 장충단로 275 (을지로6가, 두산타워)</p> <p>(72) 발명자
 이용환
 경기도 성남시 분당구 장미로 139, 202동 1503호 (야탑동, 매화마을주공2단지아파트)</p> <p>김영배
 경기도 수원시 장안구 정자천로188번길 64, 101동 106호 (정자동, 두견마을 현대벽산아파트)</p> <p>김희문
 경기도 수원시 팔달구 화양로50번길 30, 119동 1402호 (화서동, 블루밍 푸른숲 아파트)</p> <p>(74) 대리인
 특허법인 정안</p> |
|--|---|

전체 청구항 수 : 총 18 항

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

(57) 요약

본 발명은 신규 화합물 및 이를 포함하는 유기 전계 발광 소자에 관한 것으로서, 본 발명에 따른 화합물은 유기 전계 발광 소자의 유기물층, 바람직하게는 발광층에 사용됨에 따라 유기 전계 발광 소자의 발광 효율, 구동 전압, 수명 등을 향상시킬 수 있다.

(52) CPC특허분류

C07D 403/10 (2013.01)

C07D 413/10 (2013.01)

C07D 471/04 (2013.01)

C09K 11/06 (2013.01)

H01L 51/0072 (2013.01)

H01L 51/5012 (2013.01)

H01L 51/5048 (2013.01)

C09K 2211/1029 (2013.01)

C09K 2211/1059 (2013.01)

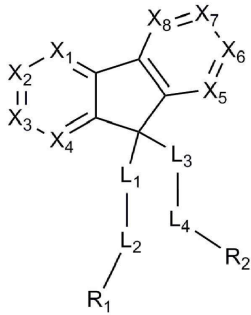
명세서

청구범위

청구항 1

하기 화학식 1로 표시되는 화합물:

[화학식 1]

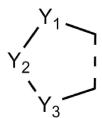


상기 화학식 1에서,

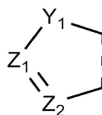
X₁과 X₂, X₂와 X₃, X₃와 X₄, X₅와 X₆, X₆과 X₇, 및 X₇과 X₈ 중 적어도 하나는 하기 화학식 2 또는 3으로 표시되는 고리와 축합되어 축합고리를 형성하고;

하기 화학식 2 또는 3으로 표시되는 고리와 축합고리를 형성하지 않는 X₁ 내지 X₈은 각각 독립적으로 N 또는 C(R₃)이며;

[화학식 2]



[화학식 3]



상기 화학식 1 내지 3에서,

점선은 축합이 이루어지는 부분을 의미하고;

Y₁ 내지 Y₃는 각각 독립적으로 O, S, N(R₄) 및 C(R₅)(R₆)로 이루어진 군에서 선택되며;

Z₁ 및 Z₂는 각각 독립적으로 N 또는 C(R₇)이며;

L₁ 내지 L₄는 각각 독립적으로 단일결합, C₆~C₁₈의 아릴렌기 및 핵원자수 5 내지 18개의 헤테로아릴렌기로 이루어진 군에서 선택되며;

R₁ 내지 R₇은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 시아노기, 니트로기, C₁~C₄₀의 알킬기, C₂~C₄₀의 알케닐기, C₂~C₄₀의 알키닐기, C₃~C₄₀의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, C₆~C₆₀의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기, C₁~C₄₀의 알킬옥시기, C₆~C₆₀의 아릴옥시기, C₃~C₄₀의 알킬실릴기, C₆~C₆₀의 아릴실릴기, C₁~C₄₀의 알킬보론기, C₆~C₆₀의 아릴보론기, C₆~C₆₀의 아릴포스핀기, C₆~C₆₀의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 C₆~C₆₀의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택되거나 인접하는 기와 결합하여 축합 고리를 형성할 수 있고,

상기 R₃ 내지 R₇ 각각이 복수 개인 경우 이들은 서로 동일하거나 상이하며;

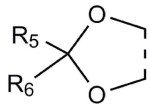
상기 L₁ 내지 L₄의 아릴렌기 및 헤테로아릴렌기와, R₁ 내지 R₇의 알킬기, 알케닐기, 알키닐기, 아릴기, 헤테로아릴기, 아릴옥시기, 알킬옥시기, 시클로알킬기, 헤테로시클로알킬기, 아릴아민기, 알킬실릴기, 알킬보론기, 아릴보론기, 아릴포스핀기, 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 아릴실릴기는 각각 독립적으로 중수소, 할로겐, 시아노기, 니트로기, C₁~C₄₀의 알킬기, C₂~C₄₀의 알케닐기, C₂~C₄₀의 알키닐기, C₆~C₆₀의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기, C₆~C₆₀의 아릴옥시기, C₁~C₄₀의 알킬옥시기, C₆~C₆₀의 아릴아민기, C₃~C₄₀의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, C₁~C₄₀의 알킬실릴기, C₁~C₄₀의 알킬보론기, C₆~C₆₀의 아릴보론기, C₆~C₆₀의 아릴포스핀기, C₆~C₆₀의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 C₆~C₆₀의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상의 치환기로 치환되거나 비치환되고, 복수 개의 치환기로 치환되는 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

청구항 2

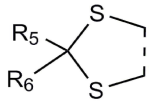
제1항에 있어서,

상기 화학식 2로 표시되는 고리는 하기 화학식 4 내지 6 중 어느 하나로 표시되는 고리인 화합물:

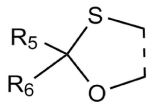
[화학식 4]



[화학식 5]



[화학식 6]



상기 화학식 4 내지 6에서,

점선은 축합이 이루어지는 부분을 의미하고;

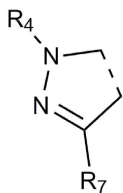
R₅ 및 R₆은 제1항에서 정의된 바와 같다.

청구항 3

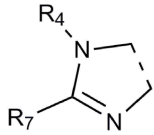
제1항에 있어서,

상기 화학식 3으로 표시되는 고리는 하기 화학식 7 내지 12 중 어느 하나로 표시되는 고리인 화합물:

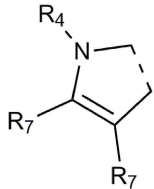
[화학식 7]



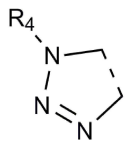
[화학식 8]



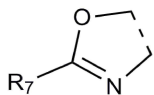
[화학식 9]



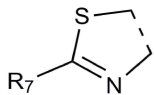
[화학식 10]



[화학식 11]



[화학식 12]



상기 화학식 7 내지 12에서,

점선은 축합이 이루어지는 부분을 의미하고;

R₄ 및 R₇은 제1항에서 정의된 바와 같다.

청구항 4

제1항에 있어서,

상기 L₁ 내지 L₄는 각각 독립적으로 단일결합, 페닐렌기, 비페닐렌기, 피리디닐기, 피리미디닐기, 나프탈레닐기, 플루오레닐기 및 카바졸릴기로 이루어진 군에서 선택되는 화합물.

청구항 5

제1항에 있어서,

상기 R₁ 및 R₂는 각각 독립적으로 C₁~C₄₀의 알킬기, C₆~C₆₀의 아릴기 및 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기로 이루어진 군에서 선택되는 화합물.

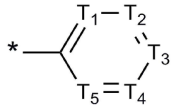
청구항 6

제1항에 있어서,

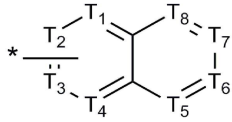
상기 R₁ 및 R₂는 각각 독립적으로 메틸기, 에틸기, 프로필기 및 하기 화학식 13 내지 17로 표시되는 치환기로 이

루어진 군에서 선택되는 화합물:

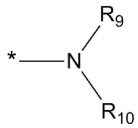
[화학식 13]



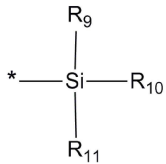
[화학식 14]



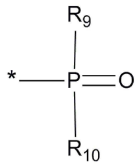
[화학식 15]



[화학식 16]



[화학식 17]



상기 화학식 13 내지 17에서,

*는 결합이 이루어지는 부분을 의미하고;

T₁ 내지 T₈은 각각 독립적으로 N 또는 C(R₈)이며;

상기 화학식 14에서 L₂ 또는 L₄에 결합되는 T₁ 내지 T₄ 중 어느 하나는 C(R₈)이고, 이때 상기 R₈은 부재이며;

R₈ 내지 R₁₁은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 시아노기, 니트로기, C₁~C₄₀의 알킬기, C₂~C₄₀의 알케닐기, C₂~C₄₀의 알키닐기, C₃~C₄₀의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, C₆~C₆₀의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기, C₁~C₄₀의 알킬옥시기, C₆~C₆₀의 아릴옥시기, C₃~C₄₀의 알킬실릴기, C₆~C₆₀의 아릴실릴기, C₁~C₄₀의 알킬보론기, C₆~C₆₀의 아릴보론기, C₆~C₆₀의 아릴포스핀기, C₆~C₆₀의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 C₆~C₆₀의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택되거나 인접하는 기와 결합하여 축합 고리를 형성할 수 있고, 상기 R₈이 복수 개인 경우 이들은 서로 동일하거나 상이하며;

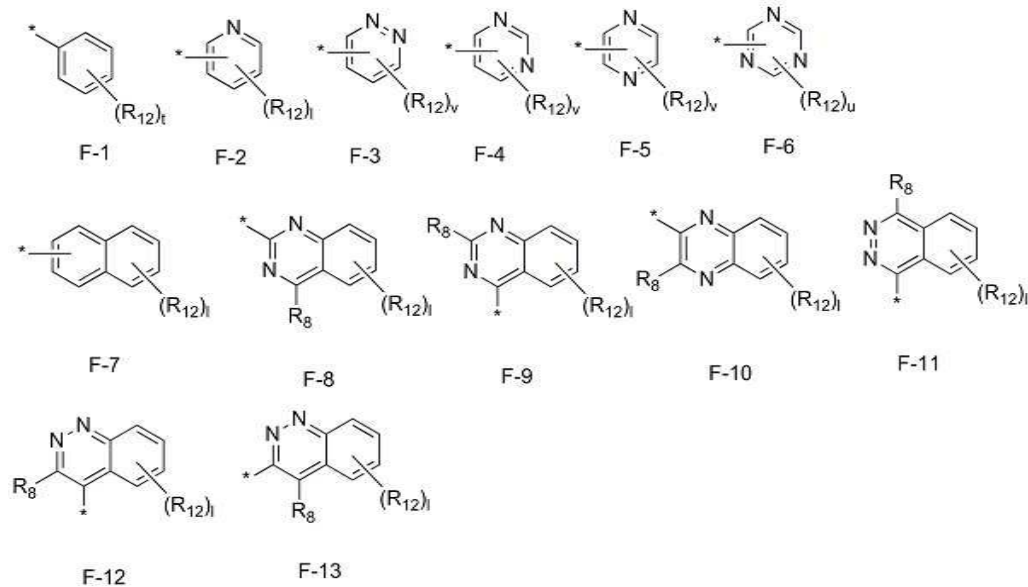
상기 R₈ 내지 R₁₁의 알킬기, 알케닐기, 알키닐기, 아릴기, 헤테로아릴기, 아릴옥시기, 알킬옥시기, 시클로알킬기, 헤테로시클로알킬기, 아릴아민기, 알킬실릴기, 알킬보론기, 아릴보론기, 아릴포스핀기, 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 아릴실릴기는 각각 독립적으로 중수소, 할로젠, 시아노기, 니트로기, C₁~C₄₀의 알킬기, C₂~C₄₀의 알케닐기, C₂~C₄₀의 알키닐기, C₆~C₆₀의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기, C₆~C₆₀의 아릴옥

시기, C₁~C₄₀의 알킬옥시기, C₆~C₆₀의 아릴아민기, C₃~C₄₀의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, C₁~C₄₀의 알킬실릴기, C₁~C₄₀의 알킬보론기, C₆~C₆₀의 아릴보론기, C₆~C₆₀의 아릴포스핀기, C₆~C₆₀의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 C₆~C₆₀의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상의 치환기로 치환되거나 비치환되고, 복수 개의 치환기로 치환되는 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

청구항 7

제1항에 있어서,

상기 R₁ 및 R₂ 중 적어도 하나는 하기 화학식 F-1 내지 F-13으로 이루어진 군에서 선택되는 치환기인 화합물:



상기 화학식 F-1 내지 F-13에서,

*는 결합이 이루어지는 부분을 의미하고;

t는 0 내지 5의 정수이며;

l은 0 내지 4의 정수이며;

v는 0 내지 3의 정수이며;

u는 0 내지 2의 정수이며;

R₈은 수소, 중수소, 할로젠, 시아노기, 니트로기, C₁~C₄₀의 알킬기, C₂~C₄₀의 알케닐기, C₂~C₄₀의 알키닐기, C₃~C₄₀의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, C₆~C₆₀의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기, C₁~C₄₀의 알킬옥시기, C₆~C₆₀의 아릴옥시기, C₃~C₄₀의 알킬실릴기, C₆~C₆₀의 아릴실릴기, C₁~C₄₀의 알킬보론기, C₆~C₆₀의 아릴보론기, C₆~C₆₀의 아릴포스핀기, C₆~C₆₀의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 C₆~C₆₀의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택되거나 인접하는 기와 결합하여 축합 고리를 형성할 수 있으며;

R₁₂는 중수소, 할로젠, 시아노기, 니트로기, C₁~C₄₀의 알킬기, C₂~C₄₀의 알케닐기, C₂~C₄₀의 알키닐기, C₆~C₆₀의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기, C₆~C₆₀의 아릴옥시기, C₁~C₄₀의 알킬옥시기, C₃~C₄₀의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, C₆~C₆₀의 아릴아민기, C₁~C₄₀의 알킬실릴기, C₁~C₄₀의 알킬보론기, C₆~C₆₀의 아릴보론기, C₆~C₆₀의 아릴포스핀기, C₆~C₆₀의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 C₆~C₆₀의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택되거나, 또는 인접하는 기와 결합하여 축합 고리를 형성할 수 있고, 상기 R₁₂가 복수 개인 경우 이들은 서로 동일하거나 상이하며;

상기 R₈ 및 R₁₂의 알킬기, 알케닐기, 알키닐기, 아릴기, 헤테로아릴기, 아릴옥시기, 알킬옥시기, 시클로알킬기,

헤테로시클로알킬기, 아릴아민기, 알킬실릴기, 알킬보론기, 아릴보론기, 아릴포스핀기, 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 아릴실릴기는 각각 독립적으로 중수소, 할로젠, 시아노기, 니트로기, C₁~C₄₀의 알킬기, C₂~C₄₀의 알케닐기, C₂~C₄₀의 알키닐기, C₆~C₆₀의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기, C₆~C₆₀의 아릴옥시기, C₁~C₄₀의 알킬옥시기, C₆~C₆₀의 아릴아민기, C₃~C₄₀의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, C₁~C₄₀의 알킬실릴기, C₁~C₄₀의 알킬보론기, C₆~C₆₀의 아릴보론기, C₆~C₆₀의 아릴포스핀기, C₆~C₆₀의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 C₆~C₆₀의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상의 치환기로 치환되거나 비치환되고, 복수 개의 치환기로 치환되는 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

청구항 8

제6항에 있어서,

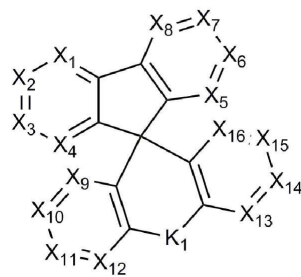
상기 R₉ 내지 R₁₁은 각각 독립적으로 수소, C₁~C₄₀의 알킬기, C₆~C₆₀의 아릴기 및 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기로 이루어진 군에서 선택되는 화합물.

청구항 9

제1항에 있어서,

상기 화합물은 하기 화학식 18로 표시되는 화합물:

[화학식 18]



상기 화학식 18에서,

K₁은 단일결합, C(R₁₃)(R₁₄), N(R₁₅), O 및 S로 이루어진 군에서 선택되며;

R₁₃ 내지 R₁₅는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 시아노기, 니트로기, C₁~C₄₀의 알킬기, C₂~C₄₀의 알케닐기, C₂~C₄₀의 알키닐기, C₃~C₄₀의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, C₆~C₆₀의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기, C₁~C₄₀의 알킬옥시기, C₆~C₆₀의 아릴옥시기, C₃~C₄₀의 알킬실릴기, C₆~C₆₀의 아릴실릴기, C₁~C₄₀의 알킬보론기, C₆~C₆₀의 아릴보론기, C₆~C₆₀의 아릴포스핀기, C₆~C₆₀의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 C₆~C₆₀의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택되거나 인접하는 기와 결합하여 축합 고리를 형성할 수 있고;

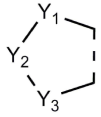
상기 R₁₃ 내지 R₁₅의 알킬기, 알케닐기, 알키닐기, 아릴기, 헤테로아릴기, 아릴옥시기, 알킬옥시기, 시클로알킬기, 헤테로시클로알킬기, 아릴아민기, 알킬실릴기, 알킬보론기, 아릴보론기, 아릴포스핀기, 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 아릴실릴기는 각각 독립적으로 중수소, 할로젠, 시아노기, 니트로기, C₁~C₄₀의 알킬기, C₂~C₄₀의 알케닐기, C₂~C₄₀의 알키닐기, C₆~C₆₀의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기, C₆~C₆₀의 아릴옥시기, C₁~C₄₀의 알킬옥시기, C₆~C₆₀의 아릴아민기, C₃~C₄₀의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, C₁~C₄₀의 알킬실릴기, C₁~C₄₀의 알킬보론기, C₆~C₆₀의 아릴보론기, C₆~C₆₀의 아릴포스핀기, C₆~C₆₀의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 C₆~C₆₀의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상의 치환기로 치환되거나 비치환되고, 복수 개의 치환기로 치환되는 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이할 수 있으며;

X₁과 X₂, X₂와 X₃, X₃와 X₄, X₅와 X₆, X₆과 X₇, 및 X₇과 X₈ 중 적어도 하나는 하기 화학식 2 또는 3으로 표시되는

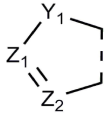
고리와 축합되어 축합고리를 형성하며;

하기 화학식 2 또는 3으로 표시되는 고리와 축합고리를 형성하지 않는 X_1 내지 X_8 , 및 X_9 내지 X_{16} 은 각각 독립적으로 N 또는 C(R_3)이며;

[화학식 2]



[화학식 3]



상기 화학식 2, 3 및 18에서,

점선은 축합이 이루어지는 부분을 의미하고;

Y_1 내지 Y_3 는 각각 독립적으로 O, S, N(R_4) 및 C(R_5)(R_6)로 이루어진 군에서 선택되며;

Z_1 및 Z_2 는 각각 독립적으로 N 또는 C(R_7)이며;

R_3 내지 R_7 은 각각 독립적으로 수소, 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, $C_3\sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬옥시기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴옥시기, $C_3\sim C_{40}$ 의 알킬실릴기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴실릴기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬보론기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴보론기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴포스핀기, $C_6\sim C_{60}$ 의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택되거나 인접하는 기와 결합하여 축합 고리를 형성할 수 있고, 상기 R_3 내지 R_7 각각이 복수 개인 경우 이들은 서로 동일하거나 상이하하며;

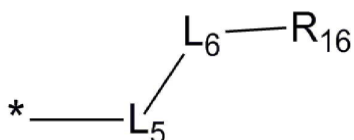
상기 R_3 내지 R_7 의 알킬기, 알케닐기, 알키닐기, 아릴기, 헤테로아릴기, 아릴옥시기, 알킬옥시기, 시클로알킬기, 헤테로시클로알킬기, 아릴아민기, 알킬실릴기, 알킬보론기, 아릴보론기, 아릴포스핀기, 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 아릴실릴기는 각각 독립적으로 중수소, 할로젠, 시아노기, 니트로기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_2\sim C_{40}$ 의 알케닐기, $C_2\sim C_{40}$ 의 알키닐기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기, $C_6\sim C_{60}$ 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 40개의 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 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상의 치환기로 치환되거나 비치환되고, 복수 개의 치환기로 치환되는 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

청구항 10

제1항에 있어서,

상기 R_3 내지 R_7 중 적어도 하나는 하기 화학식 19로 표시되는 치환기인 화합물:

[화학식 19]



상기 화학식 19에서,

*은 결합이 이루어지는 부분을 의미하고;

L₅ 및 L₆은 단일결합, C₆~C₁₈의 아틸렌기 및 핵원자수 5 내지 18개의 헤테로아틸렌기로 이루어진 군에서 선택되며;

R₁₆은 수소, 중수소, 할로젠, 시아노기, 니트로기, C₁~C₄₀의 알킬기, C₂~C₄₀의 알케닐기, C₂~C₄₀의 알키닐기, C₃~C₄₀의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, C₆~C₆₀의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기, C₁~C₄₀의 알킬옥시기, C₆~C₆₀의 아릴옥시기, C₃~C₄₀의 알킬실릴기, C₆~C₆₀의 아릴실릴기, C₁~C₄₀의 알킬보론기, C₆~C₆₀의 아릴보론기, C₆~C₆₀의 아릴포스핀기, C₆~C₆₀의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 C₆~C₆₀의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택되거나 인접하는 기와 결합하여 축합 고리를 형성할 수 있으며;

상기 L₅ 및 L₆의 아틸렌기 및 헤테로아틸렌기와, R₁₆의 알킬기, 알케닐기, 알키닐기, 아릴기, 헤테로아릴기, 아릴옥시기, 알킬옥시기, 시클로알킬기, 헤테로시클로알킬기, 아릴아민기, 알킬실릴기, 알킬보론기, 아릴보론기, 아릴포스핀기, 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 아릴실릴기는 각각 독립적으로 중수소, 할로젠, 시아노기, 니트로기, C₁~C₄₀의 알킬기, C₂~C₄₀의 알케닐기, C₂~C₄₀의 알키닐기, C₆~C₆₀의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기, C₆~C₆₀의 아릴옥시기, C₁~C₄₀의 알킬옥시기, C₆~C₆₀의 아릴아민기, C₃~C₄₀의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, C₁~C₄₀의 알킬실릴기, C₁~C₄₀의 알킬보론기, C₆~C₆₀의 아릴보론기, C₆~C₆₀의 아릴포스핀기, C₆~C₆₀의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 C₆~C₆₀의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상의 치환기로 치환되거나 비치환되고, 복수 개의 치환기로 치환되는 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

청구항 11

제10항에 있어서,

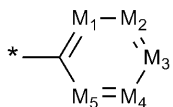
상기 L₅ 및 L₆은 각각 독립적으로 단일결합, 페닐렌기, 비페닐렌기, 피리디닐기, 피리미디닐기, 나프탈레닐기, 플루오레닐기, 카바졸릴기, 퀴놀리닐기 및 퀴나졸리닐기로 이루어진 군에서 선택되는 화합물.

청구항 12

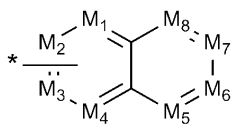
제10항에 있어서,

상기 R₁₆은 하기 화학식 20 내지 25로 이루어진 군에서 선택되는 치환기인 화합물:

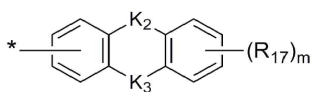
[화학식 20]



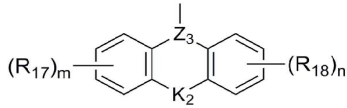
[화학식 21]



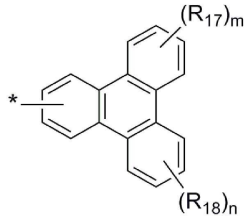
[화학식 22]



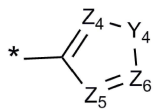
[화학식 23]



[화학식 24]



[화학식 25]



상기 화학식 20 내지 25에서,

*은 결합이 이루어지는 부분을 의미하고;

M₁ 내지 M₈은 각각 독립적으로 N 또는 C(R₁₉)이며;

상기 화학식 21에서 L₆에 결합되는 M₁ 내지 M₄ 중 어느 하나는 C(R₁₉)이고, 이때 상기 R₁₉는 부재이며;

K₂ 및 K₃는 각각 독립적으로 단일결합, C(R₂₀)(R₂₁), N(R₂₂), O, S 및 SO₂로 이루어진 군에서 선택되나, K₂ 및 K₃ 모두가 단일결합은 아니며;

Y₄는 O, S, C(R₂₀)(R₂₁) 및 N(R₂₂)로 이루어진 군에서 선택되며;

Z₃ 내지 Z₆은 각각 독립적으로 N 또는 C(R₁₉)이며;

m 및 n은 각각 독립적으로 0 내지 4의 정수이며;

R₁₇ 및 R₁₈은 각각 독립적으로 중수소, 할로젠, 시아노기, 니트로기, C₁~C₄₀의 알킬기, C₂~C₄₀의 알케닐기, C₂~C₄₀의 알키닐기, C₃~C₄₀의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, C₆~C₆₀의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기, C₁~C₄₀의 알킬옥시기, C₆~C₆₀의 아릴옥시기, C₃~C₄₀의 알킬실릴기, C₆~C₆₀의 아릴실릴기, C₁~C₄₀의 알킬보론기, C₆~C₆₀의 아릴보론기, C₆~C₆₀의 아릴포스핀기, C₆~C₆₀의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 C₆~C₆₀의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택되거나 인접하는 기와 결합하여 축합 고리를 형성할 수 있고, 상기 R₁₇ 및 R₁₈ 각각이 복수 개인 경우 이들은 서로 동일하거나 상이하며;

R₁₉ 내지 R₂₂는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 시아노기, 니트로기, C₁~C₄₀의 알킬기, C₂~C₄₀의 알케닐기, C₂~C₄₀의 알키닐기, C₃~C₄₀의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, C₆~C₆₀의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기, C₁~C₄₀의 알킬옥시기, C₆~C₆₀의 아릴옥시기, C₃~C₄₀의 알킬실릴기, C₆~C₆₀의 아릴실릴기, C₁~C₄₀의 알킬보론기, C₆~C₆₀의 아릴보론기, C₆~C₆₀의 아릴포스핀기, C₆~C₆₀의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 C₆~C₆₀의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택되거나 인접하는 기와 결합하여 축합 고리를 형성할 수 있고, 상기 R₁₉ 내지 R₂₂ 각각이 복수 개인 경우 이들은 서로 동일하거나 상이하며;

상기 R₁₇ 내지 R₂₂의 알킬기, 알케닐기, 알키닐기, 아릴기, 헤테로아릴기, 아릴옥시기, 알킬옥시기, 시클로알킬기, 헤테로시클로알킬기, 아릴아민기, 알킬실릴기, 알킬보론기, 아릴보론기, 아릴포스핀기, 모노 또는

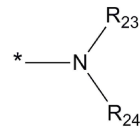
는 디아릴포스피닐기 및 아릴실릴기는 각각 독립적으로 중수소, 할로젠, 시아노기, 니트로기, C₁~C₄₀의 알킬기, C₂~C₄₀의 알케닐기, C₂~C₄₀의 알키닐기, C₆~C₆₀의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기, C₆~C₆₀의 아릴옥시기, C₁~C₄₀의 알킬옥시기, C₆~C₆₀의 아릴아민기, C₃~C₄₀의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, C₁~C₄₀의 알킬실릴기, C₁~C₄₀의 알킬보론기, C₆~C₆₀의 아릴보론기, C₆~C₆₀의 아릴포스핀기, C₆~C₆₀의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 C₆~C₆₀의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상의 치환기로 치환되거나 비치환되고, 복수 개의 치환기로 치환되는 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

청구항 13

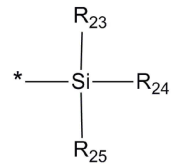
제10항에 있어서,

상기 R₁₆은 하기 화학식 26 내지 29로 이루어진 군에서 선택되는 치환기인 화합물:

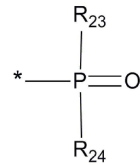
[화학식 26]



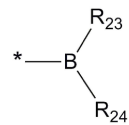
[화학식 27]



[화학식 28]



[화학식 29]



상기 화학식 26 내지 29에서,

R₂₃ 내지 R₂₅는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 시아노기, 니트로기, C₁~C₄₀의 알킬기, C₂~C₄₀의 알케닐기, C₂~C₄₀의 알키닐기, C₃~C₄₀의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, C₆~C₆₀의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기, C₁~C₄₀의 알킬옥시기, C₆~C₆₀의 아릴옥시기, C₃~C₄₀의 알킬실릴기, C₆~C₆₀의 아릴실릴기, C₁~C₄₀의 알킬보론기, C₆~C₆₀의 아릴보론기, C₆~C₆₀의 아릴포스핀기, C₆~C₆₀의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 C₆~C₆₀의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택되거나 인접하는 기와 결합하여 축합 고리를 형성할 수 있고;

상기 R₂₃ 내지 R₂₅의 알킬기, 알케닐기, 알키닐기, 아릴기, 헤테로아릴기, 아릴옥시기, 알킬옥시기, 시클로알킬기, 헤테로시클로알킬기, 아릴아민기, 알킬실릴기, 알킬보론기, 아릴보론기, 아릴포스핀기, 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 아릴실릴기는 각각 독립적으로 중수소, 할로젠, 시아노기, 니트로기, C₁~C₄₀의 알킬기,

C₂~C₄₀의 알케닐기, C₂~C₄₀의 알킬닐기, C₆~C₆₀의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기, C₆~C₆₀의 아릴옥시기, C₁~C₄₀의 알킬옥시기, C₆~C₆₀의 아릴아민기, C₃~C₄₀의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, C₁~C₄₀의 알킬실릴기, C₁~C₄₀의 알킬보론기, C₆~C₆₀의 아릴보론기, C₆~C₆₀의 아릴포스핀기, C₆~C₆₀의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 C₆~C₆₀의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상의 치환기로 치환되거나 비치환되고, 복수 개의 치환기로 치환되는 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

청구항 14

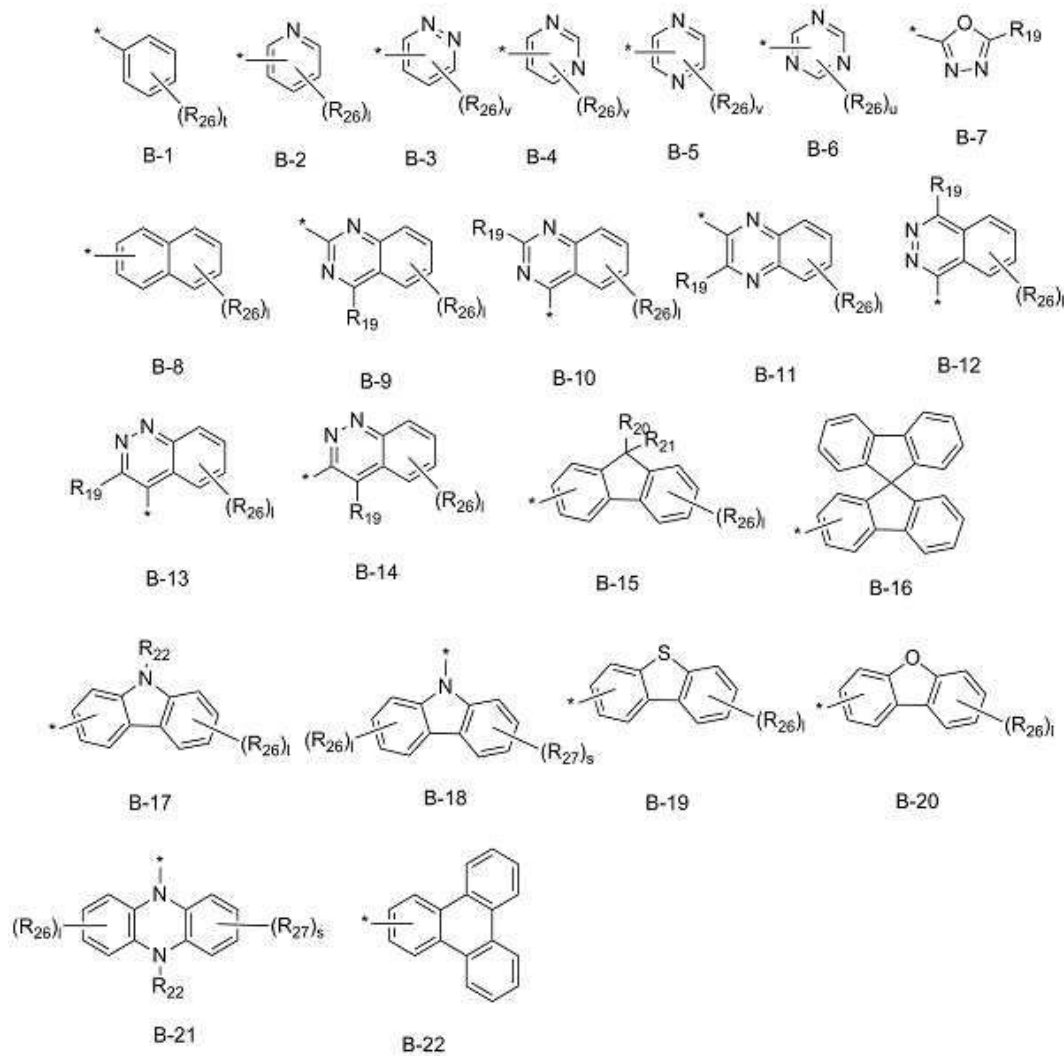
제13항에 있어서,

상기 R₂₃ 내지 R₂₅는 각각 독립적으로 수소, C₁~C₄₀의 알킬기, C₆~C₆₀의 아릴기 및 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기로 이루어진 군에서 선택되는 화합물.

청구항 15

제10항에 있어서,

상기 R₁₆은 하기 B-1 내지 B-22로 이루어진 군에서 선택되는 치환기인 화합물:



상기 화학식 B-1 내지 B-22에서,

*은 결합이 이루어지는 부분을 의미하고;

t는 0 내지 5의 정수이며;

l 및 s는 각각 독립적으로 0 내지 4의 정수이며;

v는 0 내지 3의 정수이며;

u는 0 내지 2의 정수이며;

R₁₉ 내지 R₂₂는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 시아노기, 니트로기, C₁~C₄₀의 알킬기, C₂~C₄₀의 알케닐기, C₂~C₄₀의 알키닐기, C₃~C₄₀의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, C₆~C₆₀의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기, C₁~C₄₀의 알킬옥시기, C₆~C₆₀의 아릴옥시기, C₃~C₄₀의 알킬실릴기, C₆~C₆₀의 아릴실릴기, C₁~C₄₀의 알킬보론기, C₆~C₆₀의 아릴보론기, C₆~C₆₀의 아릴포스핀기, C₆~C₆₀의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 C₆~C₆₀의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택되거나 인접하는 기와 결합하여 축합 고리를 형성할 수 있고;

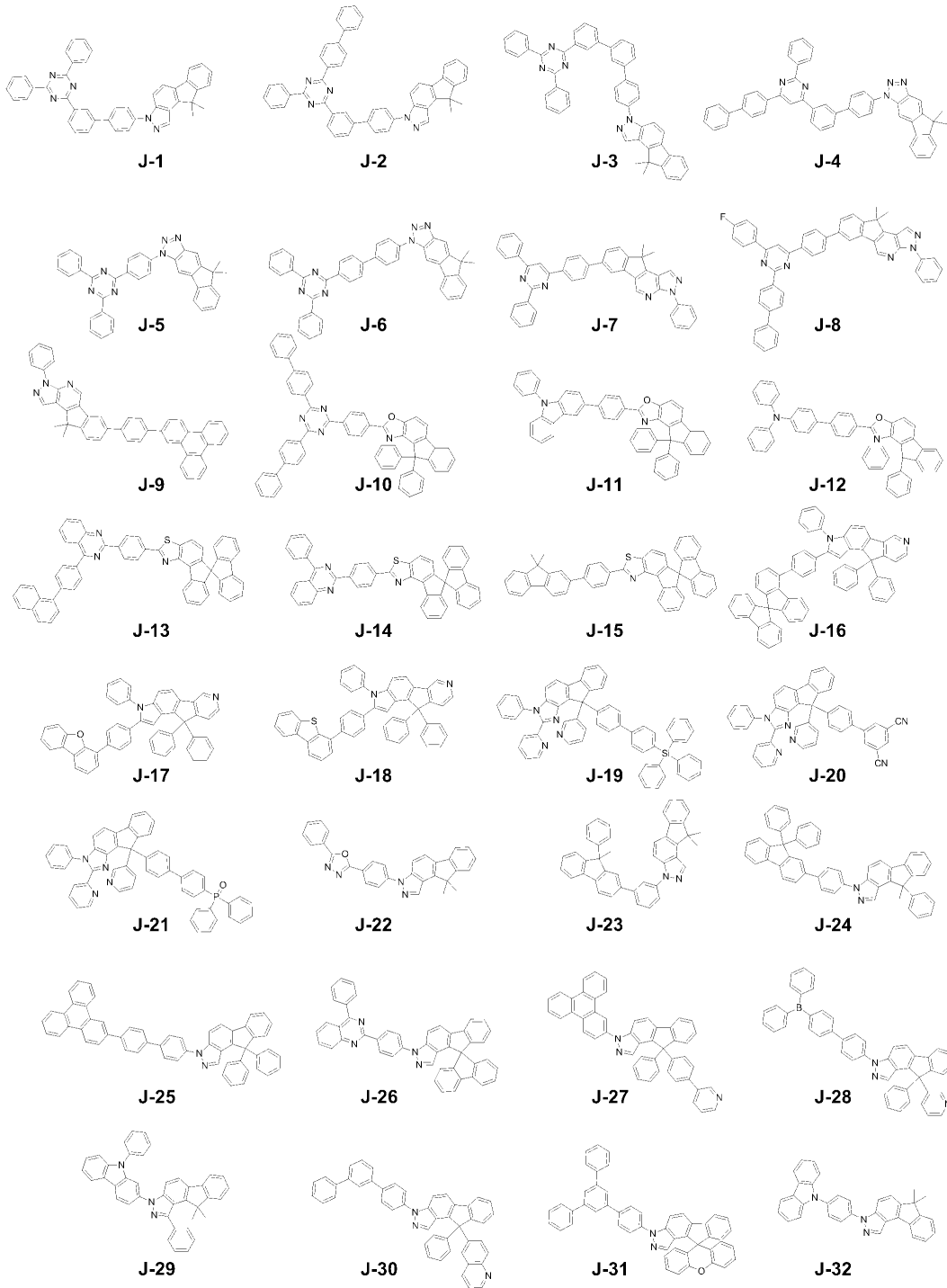
R₂₆ 및 R₂₇은 각각 독립적으로 중수소, 할로젠, 시아노기, 니트로기, C₁~C₄₀의 알킬기, C₂~C₄₀의 알케닐기, C₂~C₄₀의 알키닐기, C₆~C₆₀의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기, C₆~C₆₀의 아릴옥시기, C₁~C₄₀의 알킬옥시기, C₃~C₄₀의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, C₆~C₆₀의 아릴아민기, C₁~C₄₀의 알킬실릴기, C₁~C₄₀의 알킬보론기, C₆~C₆₀의 아릴보론기, C₆~C₆₀의 아릴포스핀기, C₆~C₆₀의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 C₆~C₆₀의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택되거나, 또는 인접하는 기와 결합하여 축합 고리를 형성할 수 있고, 상기 R₂₆ 및 R₂₇ 각각이 복수 개인 경우 이들은 서로 동일하거나 상이하며;

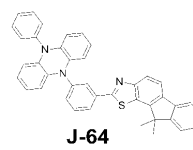
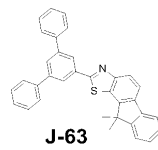
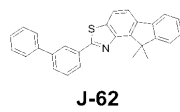
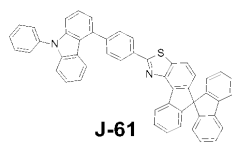
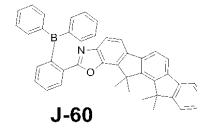
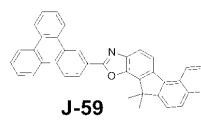
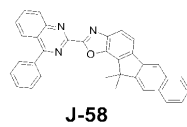
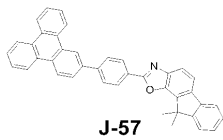
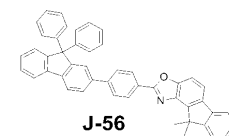
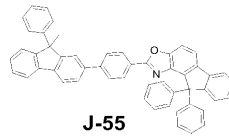
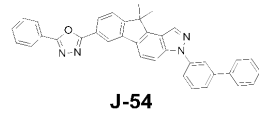
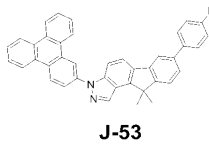
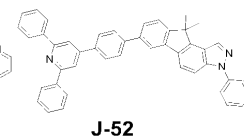
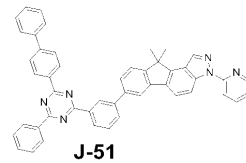
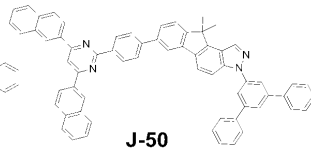
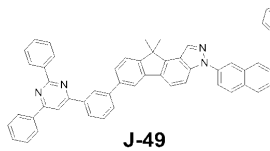
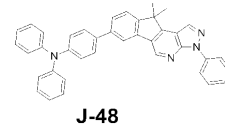
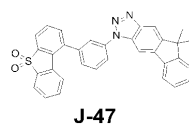
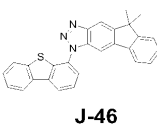
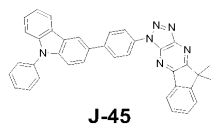
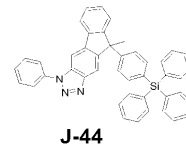
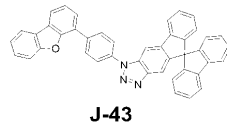
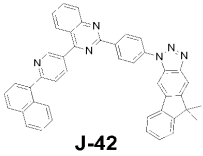
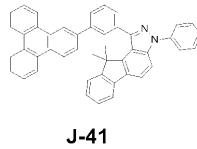
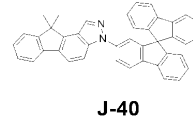
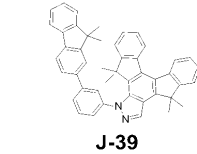
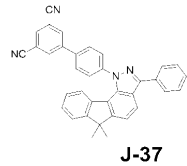
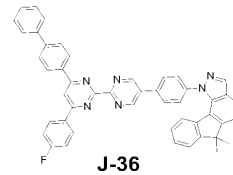
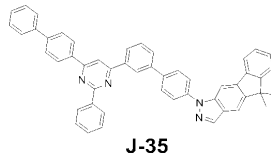
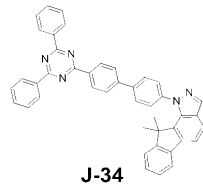
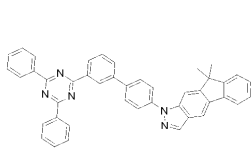
상기 R₁₉ 내지 R₂₂, R₂₆ 및 R₂₇의 알킬기, 알케닐기, 알키닐기, 아릴기, 헤테로아릴기, 아릴옥시기, 알킬옥시기, 시클로알킬기, 헤테로시클로알킬기, 아릴아민기, 알킬실릴기, 알킬보론기, 아릴보론기, 아릴포스핀기, 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 아릴실릴기는 각각 독립적으로 중수소, 할로젠, 시아노기, 니트로기, C₁~C₄₀의 알킬기, C₂~C₄₀의 알케닐기, C₂~C₄₀의 알키닐기, C₆~C₆₀의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기, C₆~C₆₀의 아릴옥시기, C₁~C₄₀의 알킬옥시기, C₆~C₆₀의 아릴아민기, C₃~C₄₀의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, C₁~C₄₀의 알킬실릴기, C₁~C₄₀의 알킬보론기, C₆~C₆₀의 아릴보론기, C₆~C₆₀의 아릴포스핀기, C₆~C₆₀의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 C₆~C₆₀의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상의 치환기로 치환되거나 비치환되고, 복수 개의 치환기로 치환되는 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

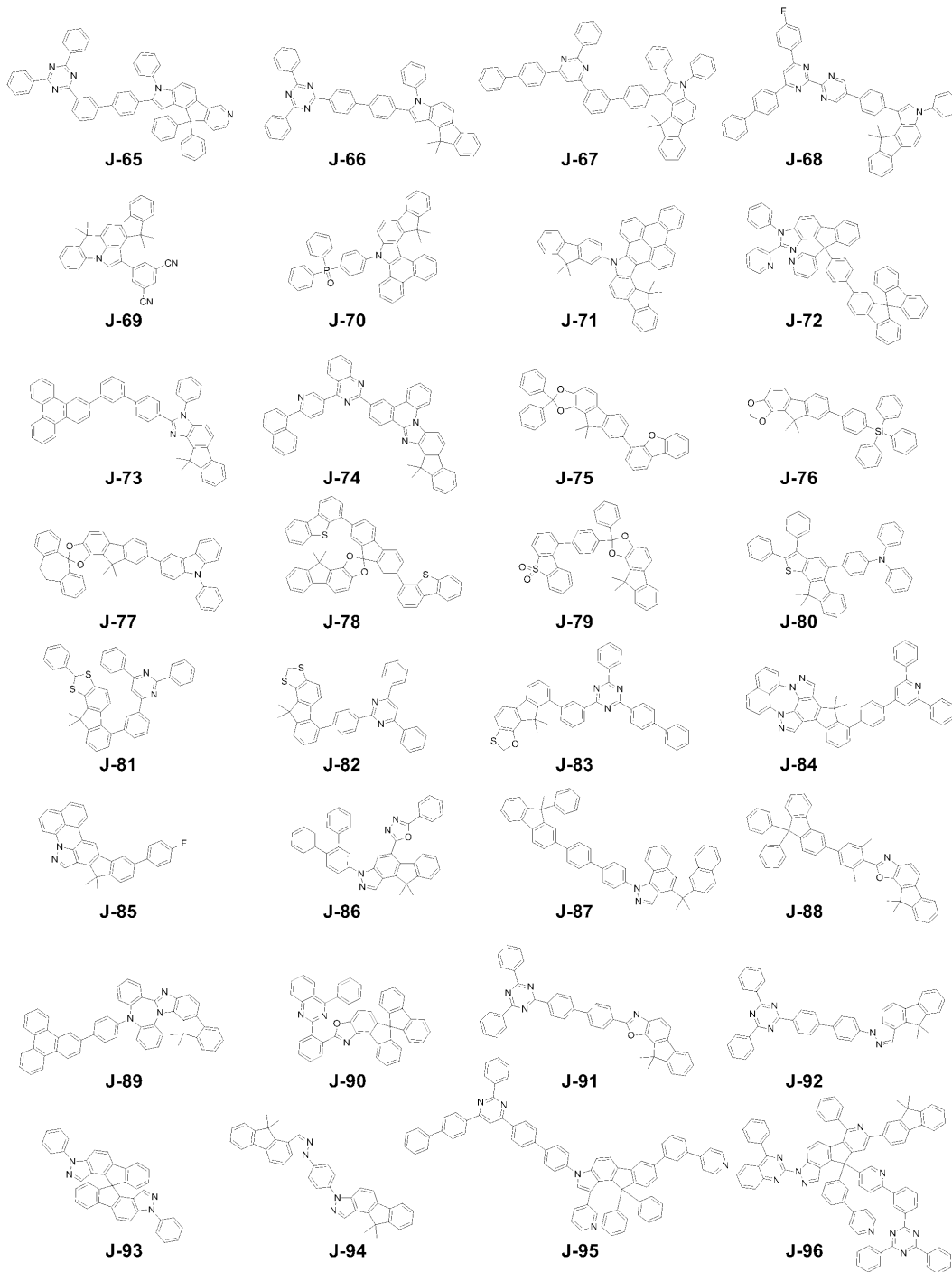
청구항 16

제1항에 있어서,

상기 화합물은 아래의 화합물로 이루어진 군에서 선택되는 것을 특징으로 하는 화합물:







청구항 17

(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 제1항의 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하는 것을 특징으로 하는 유기 전계 발광 소자.

청구항 18

제17항에 있어서,

상기 화합물을 포함하는 유기물층은 정공 주입층, 정공 수송층, 전자 수송층, 전자 수송 보조층, 전자 주입층, 수명 개선층, 발광층 및 발광 보조층으로 이루어진 군에서 선택되는 유기 전계 발광 소자.

발명의 설명

기술 분야

[0001] 본 발명은 유기 전계 발광 소자용 재료로서 사용될 수 있는 신규 유기 화합물 및 이를 포함하는 유기 전계 발광 소자에 관한 것이다.

배경 기술

[0002] 1950년대 베르나소스(Bernanose)의 유기 박막 발광 관측을 시점으로 하여, 1965년 안트라센 단결정을 이용한 청색 전기발광으로 이어진 유기 전계 발광(electroluminescent, EL) 소자에 대한 연구가 이어져 오다가, 1987년 탕(Tang)에 의하여 정공층과 발광층의 기능층으로 나눈 적층구조의 유기 전계 발광 소자가 제시되었다. 이후, 고효율, 고수명의 유기 전계 발광 소자를 만들기 위하여, 소자 내 각각의 특징적인 유기물층을 도입하는 형태로 발전하여 왔으며, 이에 사용되는 특화된 물질의 개발로 이어졌다.

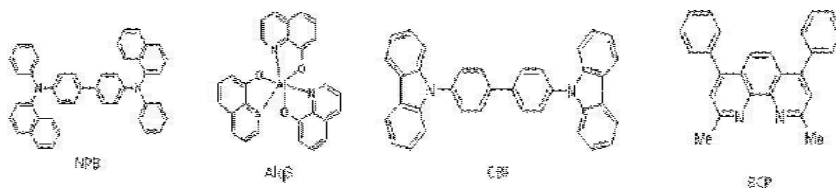
[0003] 유기 전계 발광 소자는 두 전극 사이에 전압을 걸어주면 양극에서는 정공이 유기물층으로 주입되고, 음극에서는 전자가 유기물층으로 주입된다. 주입된 정공과 전자가 만났을 때 엑시톤(exciton)이 형성되며, 이 엑시톤이 바닥상태로 떨어질 때 빛이 나게 된다. 이때, 유기물층으로 사용되는 물질은 그 기능에 따라, 발광물질, 정공주입 물질, 정공수송 물질, 전자수송 물질, 전자주입 물질 등으로 분류될 수 있다.

[0004] 발광 물질은 발광색에 따라 청색, 녹색, 적색 발광 물질과, 보다 나은 천연색을 구현하기 위한 노란색 및 주황색 발광 물질로 구분될 수 있다. 또한, 색순도의 증가와 에너지 전이를 통한 발광 효율을 증가시키기 위하여, 발광 물질로서 호스트/도펀트 계를 사용할 수 있다.

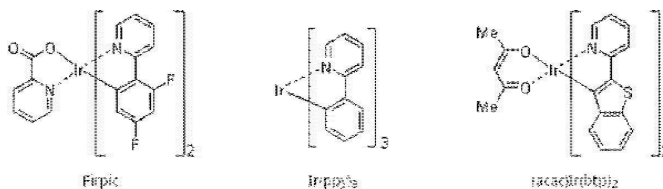
[0005] 도펀트 물질은 유기 물질을 사용하는 형광 도펀트와 Ir, Pt 등의 중원자(heavy atoms)가 포함된 금속 착체 화합물을 사용하는 인광 도펀트로 나눌 수 있다. 이때, 인광 재료의 개발은 이론적으로 형광에 비해 4배까지 발광 효율을 향상시킬 수 있기 때문에, 인광 도펀트 뿐만 아니라 인광 호스트 재료들에 대한 연구도 많이 진행되고 있다.

[0006] 현재까지 정공 주입층, 정공 수송층, 정공 차단층, 전자 수송층 재료로는 NPB, BCP, Alq₃ 등이 널리 알려져 있으며, 발광층 재료로는 안트라센 유도체들이 보고되고 있다. 특히, 발광층 재료 중 효율 향상 측면에서 장점을 가지고 있는 Firpic, Ir(ppy)₃, (acac)Ir(btp)₂ 등과 같은 Ir을 포함하는 금속 착체 화합물이 청색(blue), 녹색(green), 적색(red)의 인광 도펀트 재료로 사용되고 있으며, 4,4-디카바졸리비페닐(4,4-dicarbazolybiphenyl, CBP)은 인광 호스트 재료로 사용되고 있다.

[0007]



[0008]



[0009] 그러나 종래의 유기물층 재료들은 발광 특성 측면에서는 유리한 면이 있으나, 유리전이온도가 낮아 열적 안정성이 매우 좋지 않기 때문에, 유기 전계 발광 소자의 수명 측면에서 만족할 만한 수준이 되지 못하고 있다. 따라서, 성능이 뛰어난 유기물층 재료의 개발이 요구되고 있다.

발명의 내용

해결하려는 과제

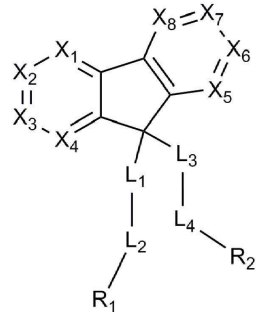
[0010] 본 발명은 상기한 문제점을 해결하기 위해, 유기 전계 발광 소자의 효율, 수명 및 안정성 등을 향상시킬 수 있

는 신규 화합물 및 상기 화합물을 이용한 유기 전계 발광 소자를 제공하는 것을 목적으로 한다.

과제의 해결 수단

[0011] 상기한 목적을 달성하기 위해, 본 발명은 하기 화학식 1로 표시되는 화합물을 제공한다:

[0012] [화학식 1]



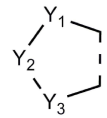
[0013]

[0014] 상기 화학식 1에서,

[0015] X₁과 X₂, X₂와 X₃, X₃와 X₄, X₅와 X₆, X₆과 X₇, 및 X₇과 X₈ 중 적어도 하나는 하기 화학식 2 또는 3으로 표시되는 고리와 축합되어 축합고리를 형성하고;

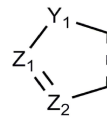
[0016] 하기 화학식 2 또는 3으로 표시되는 고리와 축합고리를 형성하지 않는 X₁ 내지 X₈은 각각 독립적으로 N 또는 C(R₃)이며;

[0017] [화학식 2]



[0018]

[0019] [화학식 3]



[0020]

[0021] 상기 화학식 1 내지 3에서,

[0022] 점선은 축합이 이루어지는 부분을 의미하고;

[0023] Y₁ 내지 Y₃는 각각 독립적으로 O, S, N(R₄) 및 C(R₅)(R₆)로 이루어진 군에서 선택되며;

[0024] Z₁ 및 Z₂는 각각 독립적으로 N 또는 C(R₇)이며;

[0025] L₁ 내지 L₄는 각각 독립적으로 단일결합, C₆~C₁₈의 아릴렌기 및 핵원자수 5 내지 18개의 헤테로아릴렌기로 이루어진 군에서 선택되며;

[0026] R₁ 내지 R₇은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 시아노기, 니트로기, C₁~C₄₀의 알킬기, C₂~C₄₀의 알케닐기, C₂~C₄₀의 알키닐기, C₃~C₄₀의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, C₆~C₆₀의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기, C₁~C₄₀의 알킬옥시기, C₆~C₆₀의 아릴옥시기, C₃~C₄₀의 알킬실릴기, C₆~C₆₀의 아릴실릴기, C₁~C₄₀의 알킬보론기, C₆~C₆₀의 아릴보론기, C₆~C₆₀의 아릴포스핀기, C₆~C₆₀의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 C₆~C₆₀의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택되거나 인접하는 기와 결합하여 축합 고리를 형성할 수 있고, 상기 R₃ 내지 R₇ 각각이 복수 개인 경우 이들은 서로 동일하거나 상이하하며;

- [0027] 상기 L₁ 내지 L₄의 아릴렌기 및 헤테로아릴렌기와, R₁ 내지 R₇의 알킬기, 알케닐기, 알키닐기, 아릴기, 헤테로아릴기, 아릴옥시기, 알킬옥시기, 시클로알킬기, 헤테로시클로알킬기, 아릴아민기, 알킬실릴기, 알킬보론기, 아릴보론기, 아릴포스핀기, 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 아릴실릴기는 각각 독립적으로 중수소, 할로젠, 시아노기, 니트로기, C₁-C₄₀의 알킬기, C₂-C₄₀의 알케닐기, C₂-C₄₀의 알키닐기, C₆-C₆₀의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기, C₆-C₆₀의 아릴옥시기, C₁-C₄₀의 알킬옥시기, C₆-C₆₀의 아릴아민기, C₃-C₄₀의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, C₁-C₄₀의 알킬실릴기, C₁-C₄₀의 알킬보론기, C₆-C₆₀의 아릴보론기, C₆-C₆₀의 아릴포스핀기, C₆-C₆₀의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 C₆-C₆₀의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상의 치환기로 치환되거나 비치환되고, 복수 개의 치환기로 치환되는 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이할 수 있다.
- [0028] 본 발명은 양극, 음극 및 상기 양극과 음극 사이에 개재(介在)된 1층 이상의 유기물층을 포함하며, 상기 1층 이상의 유기물층 중에서 적어도 하나는 상기 화학식 1의 화합물을 포함하는 유기 전계 발광 소자를 제공한다.
- [0029] 본 발명에서의 "알킬"은 탄소수 1 내지 40개의 직쇄 또는 측쇄의 포화 탄화수소에서 유래되는 1가의 치환기이며, 이의 예로는 메틸, 에틸, 프로필, 이소부틸, sec-부틸, 펜틸, iso-아밀, 핵실 등이 있는데, 이에 한정되지 않는다.
- [0030] 본 발명에서의 "알케닐(alkenyl)"은 탄소-탄소 이중 결합을 1개 이상 가진, 탄소수 2 내지 40개의 직쇄 또는 측쇄의 불포화 탄화수소에서 유래되는 1가의 치환기이며, 이의 예로는 비닐(vinyl), 알릴(allyl), 이소프로펜일(isopropenyl), 2-부텐일(2-butenyl) 등이 있는데, 이에 한정되지 않는다.
- [0031] 본 발명에서의 "알키닐(alkynyl)"은 탄소-탄소 삼중 결합을 1개 이상 가진, 탄소수 2 내지 40개의 직쇄 또는 측쇄의 불포화 탄화수소에서 유래되는 1가의 치환기이며, 이의 예로는 에티닐(ethynyl), 2-프로파닐(2-propynyl) 등이 있는데, 이에 한정되지 않는다.
- [0032] 본 발명에서의 "아릴"은 단독 고리 또는 2 이상의 고리가 조합된, 탄소수 6 내지 60개의 방향족 탄화수소로부터 유래된 1가의 치환기를 의미한다. 또한, 2 이상의 고리가 서로 단순 부착(pendant)되거나 축합된 형태도 포함될 수 있다. 이러한 아릴의 예로는 페닐, 나프틸, 페난트릴, 안트릴 등이 있는데, 이에 한정되지 않는다.
- [0033] 본 발명에서의 "헤테로아릴"은 핵원자수 5 내지 60개의 모노헤테로사이클릭 또는 폴리헤테로사이클릭 방향족 탄화수소로부터 유래된 1가의 치환기를 의미한다. 이때, 고리 중 하나 이상의 탄소, 바람직하게는 1 내지 3개의 탄소가 N, O, S 또는 Se와 같은 헤테로원자로 치환된다. 또한, 2 이상의 고리가 서로 단순 부착(pendant)되거나 축합된 형태도 포함될 수 있고, 나아가 아릴기와 축합된 형태도 포함하는 것으로 해석한다. 이러한 헤테로아릴의 예로는 피리딜, 피라지닐, 피리미디닐, 피리다지닐, 트리아지닐과 같은 6-원 모노사이클릭 고리; 페녹사티엔에닐(phenoxathieryl), 인돌리지닐(indoliziny), 인돌릴(indolyl), 퓨리닐(puriny), 퀴놀릴(quinolyl), 벤조티아졸(benzothiazole), 카바졸릴(carbazolyl)과 같은 폴리사이클릭 고리; 2-푸라닐, N-이미다졸릴, 2-이속사졸릴, 2-피리디닐, 2-피리미디닐 등이 있는데, 이에 한정되지 않는다.
- [0034] 본 발명에서의 "아릴옥시"는 RO-로 표시되는 1가의 치환기로, 상기 R은 탄소수 5 내지 60개의 아릴을 의미한다. 이러한 아릴옥시의 예로는 페닐옥시, 나프틸옥시, 디페닐옥시 등이 있는데, 이에 한정되지 않는다.
- [0035] 본 발명에서의 "알킬옥시"는 R'O-로 표시되는 1가의 치환기로, 상기 R'는 1 내지 40개의 알킬을 의미하며, 직쇄(linear), 측쇄(branched) 또는 사이클릭(cyclic) 구조를 포함하는 것으로 해석한다. 이러한 알킬옥시의 예로는 메톡시, 에톡시, n-프로폭시, 1-프로폭시, t-부톡시, n-부톡시, 펜톡시 등이 있는데, 이에 한정되지 않는다.
- [0036] 본 발명에서의 "아릴아민"은 탄소수 6 내지 60개의 아릴로 치환된 아민을 의미한다.
- [0037] 본 발명에서의 "시클로알킬"은 탄소수 3 내지 40개의 모노사이클릭 또는 폴리사이클릭 비-방향족 탄화수소로부터 유래된 1가의 치환기를 의미한다. 이러한 사이클로알킬의 예로는 사이클로프로필, 사이클로펜틸, 사이클로헥실, 노보닐(norbornyl), 아다만틴(adamantine) 등이 있는데, 이에 한정되지 않는다.
- [0038] 본 발명에서의 "헤테로시클로알킬"은 핵원자수 3 내지 40개의 비-방향족 탄화수소로부터 유래된 1가의 치환기를 의미하며, 고리 중 하나 이상의 탄소, 바람직하게는 1 내지 3개의 탄소가 N, O, S 또는 Se와 같은 헤테로 원자로 치환된다. 이러한 헤테로시클로알킬의 예로는 모르폴린, 피페라진 등이 있는데, 이에 한정되지 않는다.
- [0039] 본 발명에서의 "알킬실릴"은 탄소수 1 내지 40개의 알킬로 치환된 실릴이고, "아릴실릴"은 탄소수 5 내지 60개의 아릴로 치환된 실릴을 의미한다.

[0040] 본 발명에서의 "축합 고리"는 축합 지방족 고리, 축합 방향족 고리, 축합 헤테로지방족 고리, 축합 헤테로방향족 고리 또는 이들의 조합된 형태를 의미한다.

발명의 효과

[0041] 본 발명에 따른 화학식 1로 표시되는 화합물은 열적 안정성, 정공 수송, 정공 주입 성능, 전자 수송 및 전자 주입 성능이 우수하고, 발광층으로 인광 특성이 우수하기 때문에, 유기 전계 발광 소자의 유기물층 재료, 바람직하게는 발광층 재료로 이용될 수 있다.

[0042] 특히 본 발명의 화학식 1로 표시되는 신규 화합물을 발광층 재료로 사용할 경우, 종래 물질에 비해 우수한 발광 성능, 낮은 구동전압, 높은 효율 및 장수명을 갖는 유기 전계 발광 소자를 제조할 수 있고, 나아가 성능 및 수명이 크게 향상된 풀 칼라 디스플레이 패널도 제조할 수 있다.

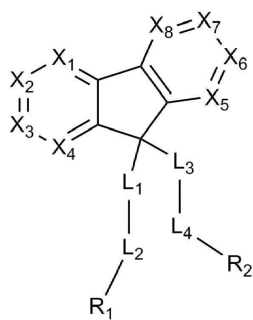
발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

[0043] 이하, 본 발명을 상세히 설명한다.

1. 신규 유기 화합물

[0045] 본 발명에 따른 신규 화합물은 플루오렌 모이어티의 말단에 5원환이 축합(fused)되어 기본 골격을 이루며, 이러한 기본 골격에 다양한 치환기가 연결된 구조로서, 구체적으로는 하기 화학식 1로 표시되는 것을 특징으로 한다:

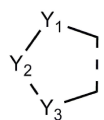
[0046] [화학식 1]



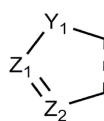
[0047] 상기 화학식 1에서,
 [0048] X₁과 X₂, X₂와 X₃, X₃와 X₄, X₅와 X₆, X₆과 X₇, 및 X₇과 X₈ 중 적어도 하나, 바람직하게는 X₁과 X₂, X₂와 X₃, 및 X₃와 X₄ 중 적어도 하나, 보다 바람직하게는 X₃와 X₄는 하기 화학식 2 또는 3으로 표시되는 고리와 축합되어 축합고리를 형성하고;

[0050] 하기 화학식 2 또는 3으로 표시되는 고리와 축합고리를 형성하지 않는 X₁ 내지 X₈은 각각 독립적으로 N 또는 C(R₃)이며;

[0051] [화학식 2]



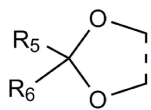
[0052] [화학식 3]



[0055] 상기 화학식 1 내지 3에서,

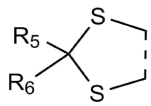
- [0056] 점선은 축합이 이루어지는 부분을 의미하고;
- [0057] Y_1 내지 Y_3 는 각각 독립적으로 O, S, $N(R_4)$ 및 $C(R_5)(R_6)$ 로 이루어진 군에서 선택되며;
- [0058] Z_1 및 Z_2 는 각각 독립적으로 N 또는 $C(R_7)$ 이며;
- [0059] L_1 내지 L_4 는 각각 독립적으로 단일결합, $C_6\sim C_{18}$ 의 아릴렌기 및 핵원자수 5 내지 18개의 헤테로아릴렌기로 이루어진 군에서 선택되며;
- [0060] R_1 내지 R_7 은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 시아노기, 니트로기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_2\sim C_{40}$ 의 알케닐기, $C_2\sim C_{40}$ 의 알키닐기, $C_3\sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬옥시기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴옥시기, $C_3\sim C_{40}$ 의 알킬실릴기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴실릴기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬보론기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴보론기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴포스핀기, $C_6\sim C_{60}$ 의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택되거나 인접하는 기와 결합하여 축합 고리를 형성할 수 있고, 상기 R_3 내지 R_7 각각이 복수 개인 경우 이들은 서로 동일하거나 상이하하며;
- [0061] 상기 L_1 내지 L_4 의 아릴렌기 및 헤테로아릴렌기와, R_1 내지 R_7 의 알킬기, 알케닐기, 알키닐기, 아릴기, 헤테로아릴기, 아릴옥시기, 알킬옥시기, 시클로알킬기, 헤테로시클로알킬기, 아릴아민기, 알킬실릴기, 알킬보론기, 아릴보론기, 아릴포스핀기, 모노 또는 디아릴포스피닐기 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 60개의 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 40개의 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 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상의 치환기로 치환되거나 비치환되고, 복수 개의 치환기로 치환되는 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이할 수 있다.
- [0062] 본 발명에서 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 종래 유기 전계 발광 소자용 재료 [예: 4,4-디카바졸리비페닐 (4,4-dicarbazolybiphenyl, CBP)]보다 분자량이 클 뿐만 아니라, 넓은 에너지 밴드갭을 가지면서, 정공과 전자의 결합력을 높일 수 있다. 따라서, 상기 화학식 1의 화합물을 유기 전계 발광 소자에 이용할 경우, 소자의 구동 전압, 효율(발광효율, 전력효율), 수명 및 휘도 측면이 향상될 수 있다.
- [0063] 본 발명의 바람직한 한 구현 예에 따르면, 상기 Y_1 내지 Y_3 중 적어도 하나는 헤테로 원자를 포함할 수 있다. 구체적으로, 본 발명의 바람직한 한 구현 예에 따르면, 상기 화학식 2로 표시되는 고리는 하기 화학식 4 내지 6 중 어느 하나로 표시되는 고리일 수 있다:

[0064] [화학식 4]



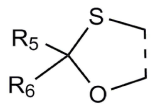
[0065]

[0066] [화학식 5]



[0067]

[0068] [화학식 6]



[0069]

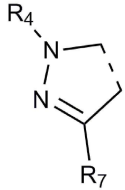
[0070] 상기 화학식 4 내지 6에서,

[0071] 점선은 축합이 이루어지는 부분을 의미하고;

[0072] R_5 및 R_6 은 상기 화학식 1에서 정의된 바와 같다.

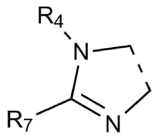
[0073] 본 발명의 바람직한 한 구현 예에 따르면, 상기 Y_1 , Z_1 및 Z_2 중 적어도 하나는 헤테로 원자를 포함할 수 있다. 구체적으로, 본 발명의 바람직한 한 구현 예에 따르면, 상기 화학식 3으로 표시되는 고리는 하기 화학식 7 내지 12 중 어느 하나로 표시되는 고리일 수 있다:

[0074] [화학식 7]



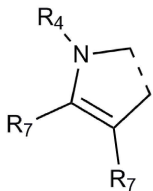
[0075]

[0076] [화학식 8]



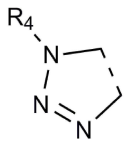
[0077]

[0078] [화학식 9]



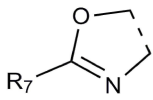
[0079]

[0080] [화학식 10]



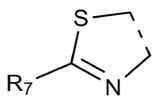
[0081]

[0082] [화학식 11]



[0083]

[0084] [화학식 12]



[0085]

[0086] 상기 화학식 7 내지 12에서,

[0087] 점선은 축합이 이루어지는 부분을 의미하고;

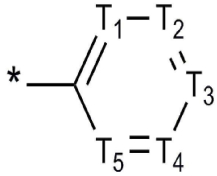
[0088] R_4 및 R_7 은 상기 화학식 1에서 정의된 바와 같다.

[0089] 본 발명의 바람직한 한 구현 예에 따르면, 상기 L_1 내지 L_4 는 각각 독립적으로 단일결합, 페닐렌기, 비페닐렌기, 피리디닐기, 피리미디닐기, 나프탈레닐기, 플루오레닐기 및 카바졸릴기로 이루어진 군에서 선택될 수 있다.

[0090] 본 발명의 바람직한 한 구현 예에 따르면, 상기 R₁ 및 R₂는 각각 독립적으로 C₁-C₄₀의 알킬기, C₆-C₆₀의 아릴기 및 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기로 이루어진 군에서 선택될 수 있다.

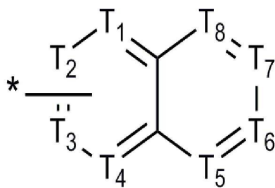
[0091] 본 발명의 보다 바람직한 한 구현 예에 따르면, 상기 R₁ 및 R₂는 각각 독립적으로 메틸기, 에틸기, 프로필기 및 하기 화학식 13 내지 17로 표시되는 치환기로 이루어진 군에서 선택될 수 있다:

[0092] [화학식 13]



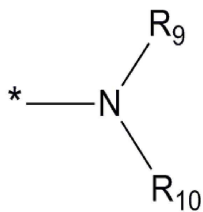
[0093]

[0094] [화학식 14]



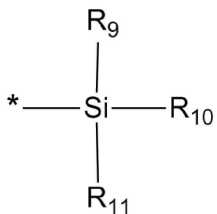
[0095]

[0096] [화학식 15]



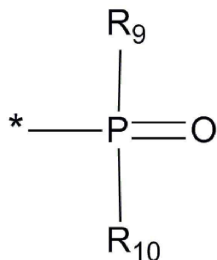
[0097]

[0098] [화학식 16]



[0099]

[0100] [화학식 17]



[0101]

[0102] 상기 화학식 13 내지 17에서,

[0103] *는 결합이 이루어지는 부분을 의미하고;

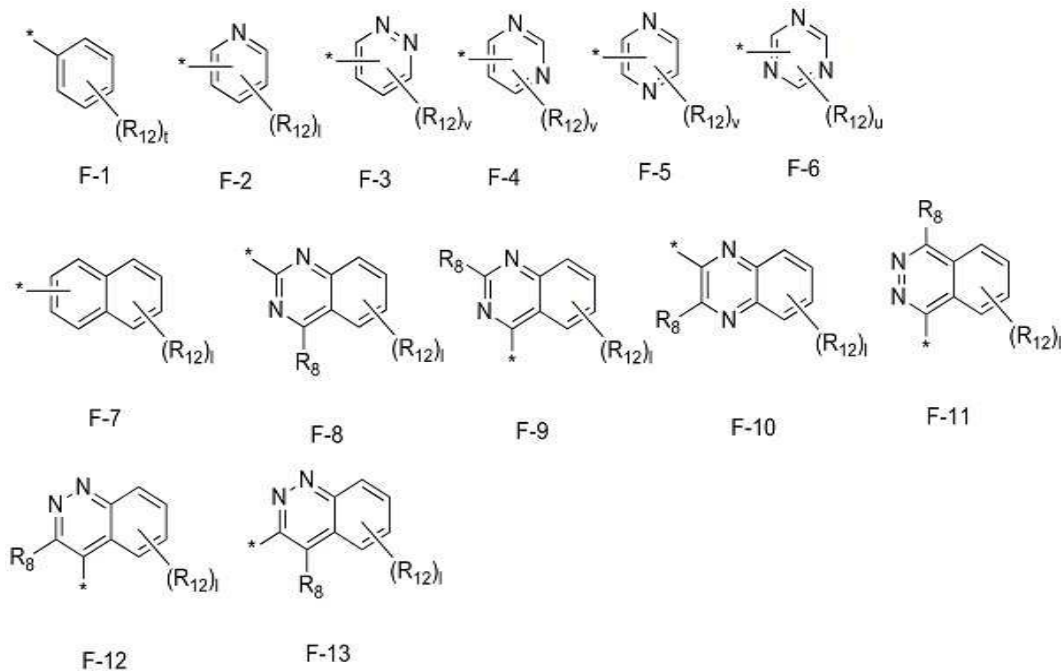
[0104] T₁ 내지 T₈은 각각 독립적으로 N 또는 C(R₈)이며;

[0105] 상기 화학식 14에서 L₂ 또는 L₄에 결합되는 T₁ 내지 T₄ 중 어느 하나는 C(R₈)이고, 이때 상기 R₈은 부재이며;

[0106] R₈ 내지 R₁₁은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 시아노기, 니트로기, C₁-C₄₀의 알킬기, C₂-C₄₀의 알케닐기, C₂-C₄₀의 알키닐기, C₃-C₄₀의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, C₆-C₆₀의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기, C₁-C₄₀의 알킬옥시기, C₆-C₆₀의 아릴옥시기, C₃-C₄₀의 알킬실릴기, C₆-C₆₀의 아릴실릴기, C₁-C₄₀의 알킬보론기, C₆-C₆₀의 아릴보론기, C₆-C₆₀의 아릴포스핀기, C₆-C₆₀의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 C₆-C₆₀의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택되거나 인접하는 기와 결합하여 축합 고리를 형성할 수 있고, 상기 R₈이 복수 개인 경우 이들은 서로 동일하거나 상이하하며;

[0107] 상기 R₈ 내지 R₁₁의 알킬기, 알케닐기, 알키닐기, 아릴기, 헤테로아릴기, 아릴옥시기, 알킬옥시기, 시클로알킬기, 헤테로시클로알킬기, 아릴아민기, 알킬실릴기, 알킬보론기, 아릴보론기, 아릴포스핀기, 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 아릴실릴기는 각각 독립적으로 중수소, 할로젠, 시아노기, 니트로기, C₁-C₄₀의 알킬기, C₂-C₄₀의 알케닐기, C₂-C₄₀의 알키닐기, C₆-C₆₀의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기, C₆-C₆₀의 아릴옥시기, C₁-C₄₀의 알킬옥시기, C₆-C₆₀의 아릴아민기, C₃-C₄₀의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, C₁-C₄₀의 알킬실릴기, C₁-C₄₀의 알킬보론기, C₆-C₆₀의 아릴보론기, C₆-C₆₀의 아릴포스핀기, C₆-C₆₀의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 C₆-C₆₀의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상의 치환기로 치환되거나 비치환되고, 복수 개의 치환기로 치환되는 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

[0108] 본 발명의 바람직한 한 구현 예에 따르면, 상기 화학식 13 또는 14로 표시되는 치환기는 하기 화학식 F-1 내지 F-13으로 이루어진 군에서 선택될 수 있다:



[0109] 상기 화학식 F-1 내지 F-13에서,
 [0110] *는 결합이 이루어지는 부분을 의미하고;
 [0111] t는 0 내지 5의 정수이며;

[0112] l은 0 내지 4의 정수이며;

[0113] v는 0 내지 3의 정수이며;

[0114] u는 0 내지 2의 정수이며;

[0116] R₁₂는 중수소, 할로젠, 시아노기, 니트로기, C₁-C₄₀의 알킬기, C₂-C₄₀의 알케닐기, C₂-C₄₀의 알키닐기, C₆-C₆₀의 아

릴기, 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기, C₆~C₆₀의 아릴옥시기, C₁~C₄₀의 알킬옥시기, C₃~C₄₀의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, C₆~C₆₀의 아릴아민기, C₁~C₄₀의 알킬실릴기, C₁~C₄₀의 알킬보론기, C₆~C₆₀의 아릴보론기, C₆~C₆₀의 아릴포스핀기, C₆~C₆₀의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 C₆~C₆₀의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택되거나, 인접하는 기와 결합하여 축합 고리를 형성할 수 있고, 상기 R₁₂가 복수 개인 경우 이들은 서로 동일하거나 상이하며;

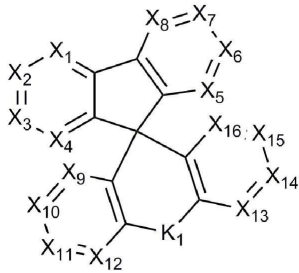
[0117] 상기 R₁₂의 알킬기, 알케닐기, 알키닐기, 아릴기, 헤테로아릴기, 아릴옥시기, 알킬옥시기, 시클로알킬기, 헤테로시클로알킬기, 아릴아민기, 알킬실릴기, 알킬보론기, 아릴보론기, 아릴포스핀기, 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 아릴실릴기는 각각 독립적으로 중수소, 할로젠, 시아노기, 니트로기, C₁~C₄₀의 알킬기, C₂~C₄₀의 알케닐기, C₂~C₄₀의 알키닐기, C₆~C₆₀의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기, C₆~C₆₀의 아릴옥시기, C₁~C₄₀의 알킬옥시기, C₆~C₆₀의 아릴아민기, C₃~C₄₀의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, C₁~C₄₀의 알킬실릴기, C₁~C₄₀의 알킬보론기, C₆~C₆₀의 아릴보론기, C₆~C₆₀의 아릴포스핀기, C₆~C₆₀의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 C₆~C₆₀의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상의 치환기로 치환되거나 비치환되고, 복수 개의 치환기로 치환되는 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이할 수 있으며;

[0118] R₈은 상기 화학식 13 및 14에서 정의된 바와 같다.

[0119] 본 발명의 바람직한 한 구현 예에 따르면, 상기 R₉ 내지 R₁₁은 각각 독립적으로 수소, C₁~C₄₀의 알킬기, C₆~C₆₀의 아릴기 및 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기로 이루어진 군에서 선택될 수 있고, 보다 바람직하게는 페닐기, 비페닐기, 나프탈레닐기, 피리디닐기, 피리미디닐기, 퀴놀리닐기 및 퀴나졸리닐기로 이루어진 군에서 선택될 수 있다.

[0120] 본 발명의 바람직한 한 구현 예에 따르면, 상기 L₁ 내지 L₄는 단일결합이며, R₁ 및 R₂는 결합하여 축합 고리를 형성할 수 있다. 구체적으로는 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 하기 화학식 18로 표시되는 화합물일 수 있다:

[0121] [화학식 18]



[0122] 상기 화학식 18에서,
 [0123] K₁은 단일결합, C(R₁₃)(R₁₄), N(R₁₅), O 및 S로 이루어진 군에서 선택되며;

[0124] R₁₃ 내지 R₁₅는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 시아노기, 니트로기, C₁~C₄₀의 알킬기, C₂~C₄₀의 알케닐기, C₂~C₄₀의 알키닐기, C₃~C₄₀의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, C₆~C₆₀의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기, C₁~C₄₀의 알킬옥시기, C₆~C₆₀의 아릴옥시기, C₃~C₄₀의 알킬실릴기, C₆~C₆₀의 아릴실릴기, C₁~C₄₀의 알킬보론기, C₆~C₆₀의 아릴보론기, C₆~C₆₀의 아릴포스핀기, C₆~C₆₀의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 C₆~C₆₀의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택되거나 인접하는 기와 결합하여 축합 고리를 형성할 수 있고;

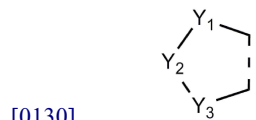
[0126] 상기 R₁₃ 내지 R₁₅의 알킬기, 알케닐기, 알키닐기, 아릴기, 헤테로아릴기, 아릴옥시기, 알킬옥시기, 시클로알킬기, 헤테로시클로알킬기, 아릴아민기, 알킬실릴기, 알킬보론기, 아릴보론기, 아릴포스핀기, 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 아릴실릴기는 각각 독립적으로 중수소, 할로젠, 시아노기, 니트로기, C₁~C₄₀의 알킬기,

C₂~C₄₀의 알케닐기, C₂~C₄₀의 알킬닐기, C₆~C₆₀의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기, C₆~C₆₀의 아릴옥시기, C₁~C₄₀의 알킬옥시기, C₆~C₆₀의 아릴아민기, C₃~C₄₀의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, C₁~C₄₀의 알킬실릴기, C₁~C₄₀의 알킬보론기, C₆~C₆₀의 아릴보론기, C₆~C₆₀의 아릴포스핀기, C₆~C₆₀의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 C₆~C₆₀의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상의 치환기로 치환되거나 비치환되고, 복수 개의 치환기로 치환되는 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이할 수 있으며;

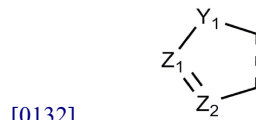
[0127] X₁과 X₂, X₂와 X₃, X₃와 X₄, X₅와 X₆, X₆과 X₇, 및 X₇과 X₈ 중 적어도 하나, 바람직하게는 X₁과 X₂, X₂와 X₃, 및 X₃와 X₄ 중 적어도 하나는 하기 화학식 2 또는 3으로 표시되는 고리와 축합되어 축합고리를 형성하며;

[0128] 하기 화학식 2 또는 3으로 표시되는 고리와 축합고리를 형성하지 않는 X₁ 내지 X₈, 및 X₉ 내지 X₁₆은 각각 독립적으로 N 또는 C(R₃)이며;

[0129] [화학식 2]



[0131] [화학식 3]



[0133] 상기 화학식 2, 3 및 18에서,

[0134] 점선은 축합이 이루어지는 부분을 의미하고;

[0135] R₃, Y₁ 내지 Y₃, Z₁ 및 Z₂는 상기 화학식 1 내지 3에서 정의된 바와 같다.

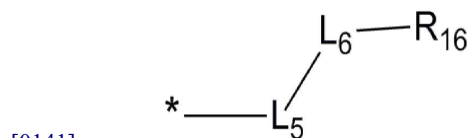
[0136] 본 발명의 바람직한 한 구현 예에 따르면, 상기 X₉와 X₁₀, X₁₀과 X₁₁, X₁₁과 X₁₂, X₁₃과 X₁₄, X₁₄와 X₁₅, 및 X₁₅와 X₁₆ 중 적어도 하나는 상기 화학식 2 또는 3으로 표시되는 고리와 축합되어 축합고리를 형성하고;

[0137] 상기 화학식 2 또는 3으로 표시되는 고리와 축합고리를 형성하지 않는 X₉ 내지 X₁₆은 각각 독립적으로 N 또는 C(R₃)이며;

[0138] R₃는 상기 화학식 1에서 정의된 바와 같다.

[0139] 본 발명의 바람직한 한 구현 예에 따르면, 상기 R₃ 내지 R₇ 중 적어도 하나는 하기 화학식 19로 표시되는 치환기일 수 있다:

[0140] [화학식 19]



[0142] 상기 화학식 19에서,

[0143] *은 결합이 이루어지는 부분을 의미하고;

[0144] L₅ 및 L₆은 단일결합, C₆~C₁₈의 아릴렌기 및 핵원자수 5 내지 18개의 헤테로아릴렌기로 이루어진 군에서 선택되며;

[0145] R₁₆은 수소, 중수소, 할로젠, 시아노기, 니트로기, C₁~C₄₀의 알킬기, C₂~C₄₀의 알케닐기, C₂~C₄₀의 알킬닐기, C₃~C₄₀

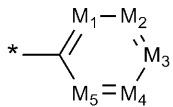
의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, C₆~C₆₀의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기, C₁~C₄₀의 알킬옥시기, C₆~C₆₀의 아릴옥시기, C₃~C₄₀의 알킬실릴기, C₆~C₆₀의 아릴실릴기, C₁~C₄₀의 알킬보론기, C₆~C₆₀의 아릴보론기, C₆~C₆₀의 아릴포스핀기, C₆~C₆₀의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 C₆~C₆₀의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택되거나 인접하는 기(예컨대, L₅ 또는 다른 R₃ 내지 R₇)와 결합하여 축합 고리를 형성할 수 있으며;

[0146] 상기 L₅ 및 L₆의 아릴렌기 및 헤테로아릴렌기와, R₁₆의 알킬기, 알케닐기, 알키닐기, 아릴기, 헤테로아릴기, 아릴옥시기, 알킬옥시기, 시클로알킬기, 헤테로시클로알킬기, 아릴아민기, 알킬실릴기, 알킬보론기, 아릴보론기, 아릴포스핀기, 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 아릴실릴기는 각각 독립적으로 중수소, 할로젠, 시아노기, 니트로기, C₁~C₄₀의 알킬기, C₂~C₄₀의 알케닐기, C₂~C₄₀의 알키닐기, C₆~C₆₀의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기, C₆~C₆₀의 아릴옥시기, C₁~C₄₀의 알킬옥시기, C₆~C₆₀의 아릴아민기, C₃~C₄₀의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, C₁~C₄₀의 알킬실릴기, C₁~C₄₀의 알킬보론기, C₆~C₆₀의 아릴보론기, C₆~C₆₀의 아릴포스핀기, C₆~C₆₀의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 C₆~C₆₀의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상의 치환기로 치환되거나 비치환되고, 복수 개의 치환기로 치환되는 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

[0147] 본 발명의 바람직한 한 구현 예에 따르면, 상기 L₅ 및 L₆은 각각 독립적으로 단일결합, 페닐렌기, 비페닐렌기, 피리디닐기, 피리미디닐기, 나프탈레닐기, 플루오레닐기, 카바졸릴기, 퀴놀리닐기 및 퀴나졸리닐기로 이루어진 군에서 선택될 수 있다.

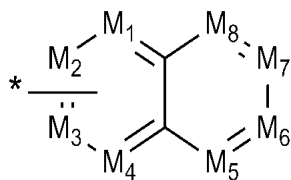
[0148] 본 발명의 바람직한 한 구현 예에 따르면, 상기 R₁₆은 하기 화학식 20 내지 25로 이루어진 군에서 선택되는 치환기일 수 있다:

[0149] [화학식 20]



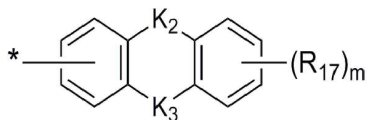
[0150]

[0151] [화학식 21]



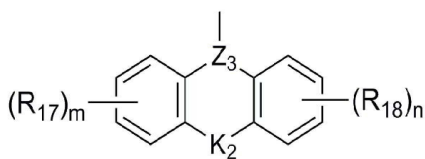
[0152]

[0153] [화학식 22]



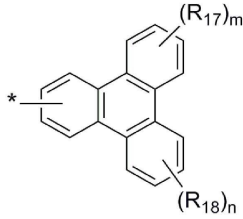
[0154]

[0155] [화학식 23]



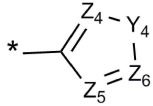
[0156]

[0157] [화학식 24]



[0158]

[0159] [화학식 25]



[0160]

[0161] 상기 화학식 20 내지 25에서,

[0162] *은 결합이 이루어지는 부분을 의미하고;

[0163] M₁ 내지 M₈은 각각 독립적으로 N 또는 C(R₁₉)이며;

[0164] 상기 화학식 21에서 L₆에 결합되는 M₁ 내지 M₄ 중 어느 하나는 C(R₁₉)이고, 이때 상기 R₁₉는 부재이며;

[0165] K₂ 및 K₃는 각각 독립적으로 단일결합, C(R₂₀)(R₂₁), N(R₂₂), O, S 및 SO₂로 이루어진 군에서 선택되나, K₂ 및 K₃ 모두가 단일결합은 아니며;

[0166] Y₄는 O, S, C(R₂₀)(R₂₁) 및 N(R₂₂)로 이루어진 군에서 선택되며;

[0167] Z₃ 내지 Z₆은 각각 독립적으로 N 또는 C(R₁₉)이며;

[0168] m 및 n은 각각 독립적으로 0 내지 4의 정수이며;

[0169] R₁₇ 및 R₁₈은 각각 독립적으로 중수소, 할로젠, 시아노기, 니트로기, C₁~C₄₀의 알킬기, C₂~C₄₀의 알케닐기, C₂~C₄₀의 알키닐기, C₃~C₄₀의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, C₆~C₆₀의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기, C₁~C₄₀의 알킬옥시기, C₆~C₆₀의 아릴옥시기, C₃~C₄₀의 알킬실릴기, C₆~C₆₀의 아릴실릴기, C₁~C₄₀의 알킬보론기, C₆~C₆₀의 아릴보론기, C₆~C₆₀의 아릴포스핀기, C₆~C₆₀의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 C₆~C₆₀의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택되거나 인접하는 기와 결합하여 축합 고리를 형성할 수 있고, 상기 R₁₇ 및 R₁₈ 각각이 복수 개인 경우 이들은 서로 동일하거나 상이하며;

[0170] R₁₉ 내지 R₂₂는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 시아노기, 니트로기, C₁~C₄₀의 알킬기, C₂~C₄₀의 알케닐기, C₂~C₄₀의 알키닐기, C₃~C₄₀의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, C₆~C₆₀의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기, C₁~C₄₀의 알킬옥시기, C₆~C₆₀의 아릴옥시기, C₃~C₄₀의 알킬실릴기, C₆~C₆₀의 아릴실릴기, C₁~C₄₀의 알킬보론기, C₆~C₆₀의 아릴보론기, C₆~C₆₀의 아릴포스핀기, C₆~C₆₀의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 C₆~C₆₀의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택되거나 인접하는 기와 결합하여 축합 고리를 형성할 수 있고, 상기 R₁₉ 내지 R₂₂ 각각이 복수 개인 경우 이들은 서로 동일하거나 상이하며;

[0171] 상기 R₁₇ 내지 R₂₂의 알킬기, 알케닐기, 알키닐기, 아릴기, 헤테로아릴기, 아릴옥시기, 알킬옥시기, 시클로알킬기, 헤테로시클로알킬기, 아릴아민기, 알킬실릴기, 알킬보론기, 아릴보론기, 아릴포스핀기, 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 아릴실릴기는 각각 독립적으로 중수소, 할로젠, 시아노기, 니트로기, C₁~C₄₀의 알킬기, C₂~C₄₀의 알케닐기, C₂~C₄₀의 알키닐기, C₆~C₆₀의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기, C₆~C₆₀의 아릴옥시기, C₁~C₄₀의 알킬옥시기, C₆~C₆₀의 아릴아민기, C₃~C₄₀의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, C₁~C₄₀의 알킬실릴기, C₁~C₄₀의 알킬보론기, C₆~C₆₀의 아릴보론기, C₆~C₆₀의 아릴포스핀기, C₆~C₆₀의 모노

또는 디아릴포스피닐기 및 C₆-C₆₀의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상의 치환기로 치환되거나 비치환되고, 복수 개의 치환기로 치환되는 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

[0172] 또한, 본 발명의 화학식 1로 표시되는 화합물은 상기 기본 골격에 연결되는 다양한 방향족 환 치환기로 인해 분자 전체가 양극성(bipolar)의 특성을 가지면서, 정공과 전자의 결합력을 높일 수 있다. 따라서, 유기 전계 발광 소자에 상기 화합물을 적용할 경우, 종래 CBP에 비해 발광층의 호스트 재료로서의 우수한 특성을 나타낼 수 있기 때문에, 소자의 인광 특성이 개선됨과 동시에 정공 주입 능력 및/또는 수송 능력, 발광 효율, 구동 전압, 수명 특성 등이 개선될 수 있다. 그리고 상기 치환기들에 따라 에너지 레벨이 조절될 수 있어 넓은 밴드갭(sky blue ~ red)을 갖게 되고, 따라서 발광층뿐만 아니라, 전자 수송 보조층, 전자 수송층, 정공 수송층, 정공 주입층 등으로도 응용될 수 있다.

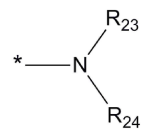
[0173] 또한, 화합물의 분자량이 유의적으로 증대됨으로써, 유리전이온도가 향상될 수 있고, 이로 인해 종래 CBP 보다 높은 열적 안정성을 가질 수 있다. 또한, 화합물의 열적 안정성이 향상될 수 있을 뿐만 아니라, 상기 화학식 1의 화합물을 포함하는 유기층의 결정화 억제에도 효과가 있다. 따라서, 본 발명에 따른 화학식 1의 화합물을 포함하는 소자는 내구성 및 수명 특성을 크게 향상시킬 수 있다.

[0174] 또한, 전자 수송 보조층의 역할로는 높은 삼중항 에너지를 갖고 있기 때문에 TTF(triplet-triplet fusion) 효과로 인한 우수한 효율 상승을 나타낼 수 있다. 또한, 발광층에서 생성된 엑시톤이 발광층에 인접하는 전자 수송층 또는 정공 수송층으로 확산되는 것을 방지할 수 있다. 발광층 내에서 발광에 기여하는 엑시톤의 수가 증가되어 소자의 발광 효율이 개선될 수 있고, 소자의 내구성 및 안정성이 향상되어 소자의 수명이 효율적으로 증가될 수 있다. 개발된 재료들이 대부분 저전압 구동이 가능하여 이로 인한 수명이 개선되는 물리적 특징들을 나타낸다.

[0175] 아울러, 본 발명에 따른 화학식 1의 화합물을 유기 전계 발광 소자의 정공 주입/수송층 재료, 전자 주입/수송층 재료, 청색, 녹색 및/또는 적색의 인광 호스트 재료로 채택할 경우, 종래 CBP 대비 효율 및 수명 면에서 월등히 우수한 효과를 발휘할 수 있다. 따라서, 본 발명에 따른 화합물은 유기 전계 발광 소자의 성능 개선 및 수명 향상에 크게 기여할 수 있으며, 특히 이러한 소자 수명 향상은 풀 칼라 유기 발광 패널에서의 성능 극대화에도 큰 효과가 있다.

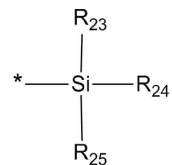
[0176] 본 발명의 바람직한 한 구현 예에 따르면, 상기 R₁₆은 하기 화학식 26 내지 29로 이루어진 군에서 선택되는 치환기일 수 있다:

[0177] [화학식 26]



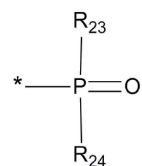
[0178]

[0179] [화학식 27]



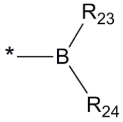
[0180]

[0181] [화학식 28]



[0182]

[0183] [화학식 29]



[0184]

[0185]

[0186]

상기 화학식 26 내지 29에서,

R₂₃ 내지 R₂₅는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 시아노기, 니트로기, C₁~C₄₀의 알킬기, C₂~C₄₀의 알케닐기, C₂~C₄₀의 알키닐기, C₃~C₄₀의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, C₆~C₆₀의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기, C₁~C₄₀의 알킬옥시기, C₆~C₆₀의 아릴옥시기, C₃~C₄₀의 알킬실릴기, C₆~C₆₀의 아릴실릴기, C₁~C₄₀의 알킬보론기, C₆~C₆₀의 아릴보론기, C₆~C₆₀의 아릴포스핀기, C₆~C₆₀의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 C₆~C₆₀의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택되거나 인접하는 기와 결합하여 축합 고리를 형성할 수 있고;

[0187]

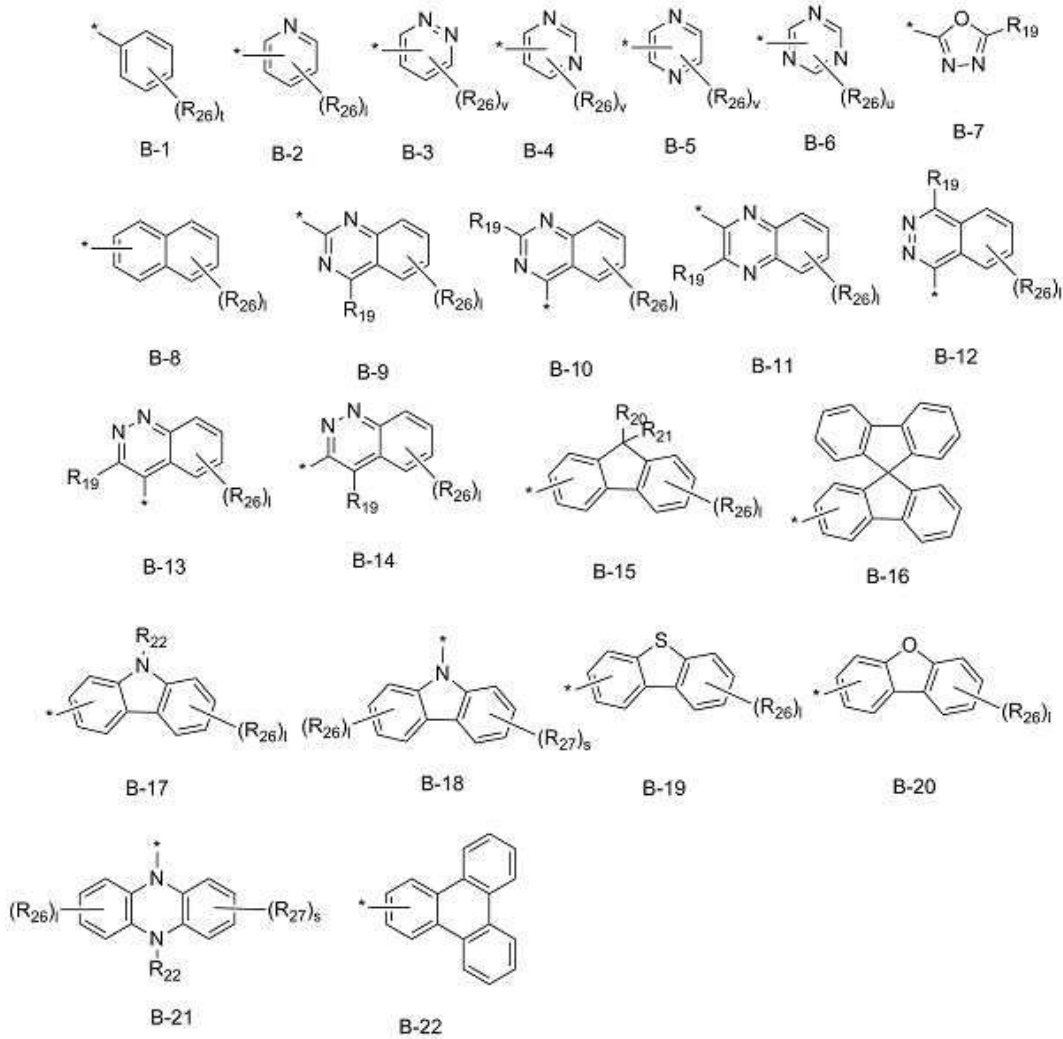
상기 R₂₃ 내지 R₂₅의 알킬기, 알케닐기, 알키닐기, 아릴기, 헤테로아릴기, 아릴옥시기, 알킬옥시기, 시클로알킬기, 헤테로시클로알킬기, 아릴아민기, 알킬실릴기, 알킬보론기, 아릴보론기, 아릴포스핀기, 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 아릴실릴기는 각각 독립적으로 중수소, 할로젠, 시아노기, 니트로기, C₁~C₄₀의 알킬기, C₂~C₄₀의 알케닐기, C₂~C₄₀의 알키닐기, C₆~C₆₀의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기, C₆~C₆₀의 아릴옥시기, C₁~C₄₀의 알킬옥시기, C₆~C₆₀의 아릴아민기, C₃~C₄₀의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, C₁~C₄₀의 알킬실릴기, C₁~C₄₀의 알킬보론기, C₆~C₆₀의 아릴보론기, C₆~C₆₀의 아릴포스핀기, C₆~C₆₀의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 C₆~C₆₀의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상의 치환기로 치환되거나 비치환되고, 복수 개의 치환기로 치환되는 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

[0188]

본 발명의 바람직한 한 구현 예에 따르면, 상기 R₂₃ 내지 R₂₅는 각각 독립적으로 수소, C₁~C₄₀의 알킬기, C₆~C₆₀의 아릴기 및 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기로 이루어진 군에서 선택될 수 있고, 보다 바람직하게는, 수소, 메틸기, 에틸기, 프로필기, 부틸기, 페닐기, 비페닐기, 피리디닐기, 피리미디닐기, 나프탈레닐기 및 퀴놀리닐기로 이루어진 군에서 선택될 수 있다.

[0189]

본 발명의 바람직한 한 구현 예에 따르면, 상기 화학식 20 내지 25로 이루어진 군에서 선택되는 치환기는 하기 B-1 내지 B-22로 이루어진 군에서 선택되는 치환기일 수 있다:



[0190]

[0191] 상기 화학식 B-1 내지 B-22에서,

[0192] *은 결합이 이루어지는 부분을 의미하고;

[0193] t는 0 내지 5의 정수이며;

[0194] l 및 s는 각각 독립적으로 0 내지 4의 정수이며;

[0195] v는 0 내지 3의 정수이며;

[0196] u는 0 내지 2의 정수이며;

[0197] R₂₆ 및 R₂₇은 각각 독립적으로 중수소, 할로젠, 시아노기, 니트로기, C₁~C₄₀의 알킬기, C₂~C₄₀의 알케닐기, C₂~C₄₀의 알키닐기, C₆~C₆₀의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기, C₆~C₆₀의 아릴옥시기, C₁~C₄₀의 알킬옥시기, C₃~C₄₀의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, C₆~C₆₀의 아릴아민기, C₁~C₄₀의 알킬실릴기, C₁~C₄₀의 알킬보론기, C₆~C₆₀의 아릴보론기, C₆~C₆₀의 아릴포스핀기, C₆~C₆₀의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 C₆~C₆₀의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택되거나, 또는 인접하는 기와 결합하여 축합 고리를 형성할 수 있고, 상기 R₂₆ 및 R₂₇ 각각이 복수 개인 경우 이들은 서로 동일하거나 상이하며;

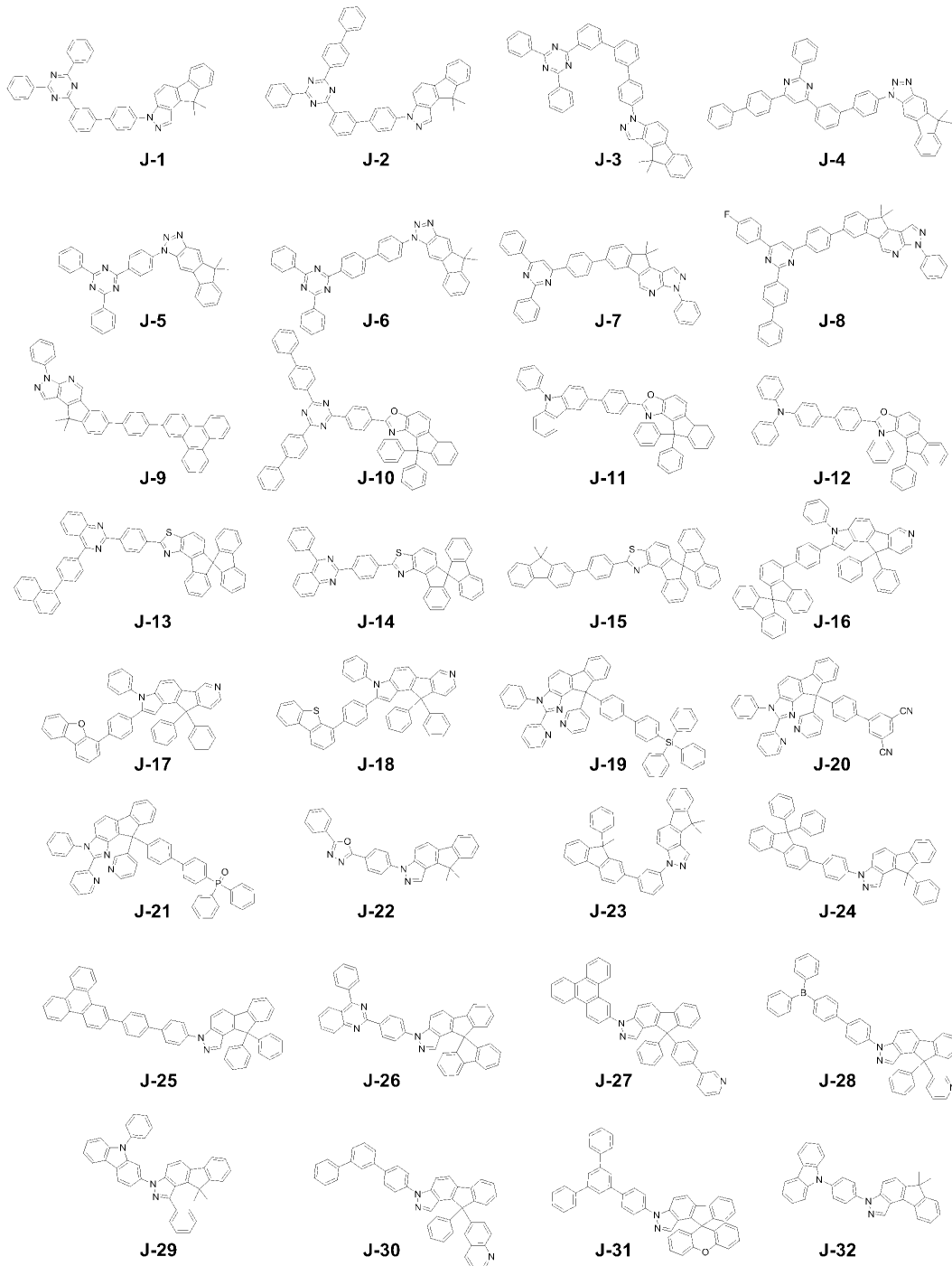
[0198] 상기 R₂₆ 및 R₂₇의 알킬기, 알케닐기, 알키닐기, 아릴기, 헤테로아릴기, 아릴옥시기, 알킬옥시기, 시클로알킬기, 헤테로시클로알킬기, 아릴아민기, 알킬실릴기, 알킬보론기, 아릴보론기, 아릴포스핀기, 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 아릴실릴기는 각각 독립적으로 중수소, 할로젠, 시아노기, 니트로기, C₁~C₄₀의 알킬기, C₂~C₄₀의 알케닐기, C₂~C₄₀의 알키닐기, C₆~C₆₀의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60개의 헤테로아릴기, C₆~C₆₀의 아릴옥시기, C₁~C₄₀의 알킬옥시기, C₆~C₆₀의 아릴아민기, C₃~C₄₀의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, C₁~C₄₀의

알킬실릴기, C₁~C₄₀의 알킬보론기, C₆~C₆₀의 아릴보론기, C₆~C₆₀의 아릴포스핀기, C₆~C₆₀의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 C₆~C₆₀의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상의 치환기로 치환되거나 비치환되고, 복수 개의 치환기로 치환되는 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이할 수 있으며,

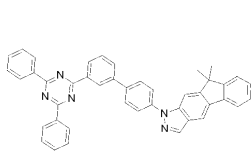
[0199] R₁₉ 내지 R₂₂ 각각은 상기 화학식 20 내지 25에서 정의된 바와 같다.

[0200] 본 발명의 바람직한 한 구현 예에 따르면, 상기 R₃ 내지 R₇ 중 인접하여 존재하는 2개의 치환기는 서로 결합하여 C₄~C₁₈의 축합 방향족 고리 또는 핵원자수 4 내지 14개의 축합 헤테로방향족 고리를 형성할 수 있다.

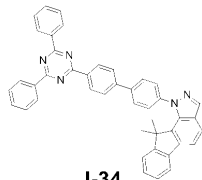
[0201] 본 발명의 화학식 1로 표시되는 화합물은 하기 화합물로 나타낼 수 있으나 이에 한정되는 것은 아니다:



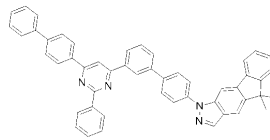
[0202]



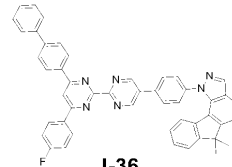
J-33



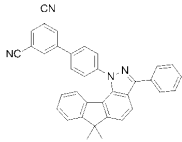
J-34



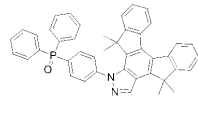
J-35



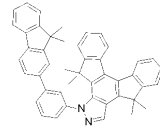
J-36



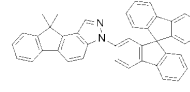
J-37



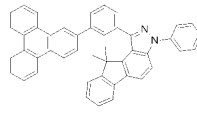
J-38



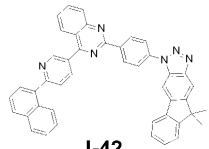
J-39



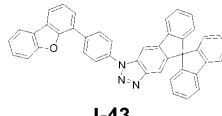
J-40



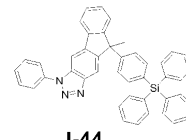
J-41



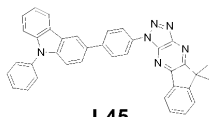
J-42



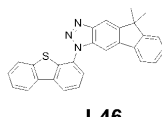
J-43



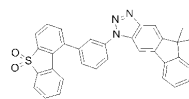
J-44



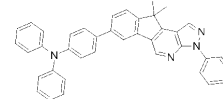
J-45



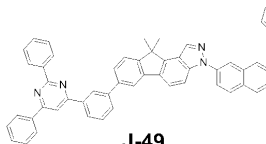
J-46



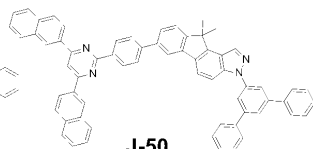
J-47



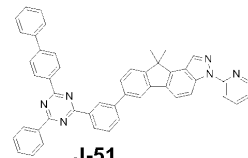
J-48



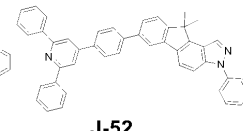
J-49



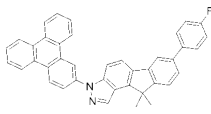
J-50



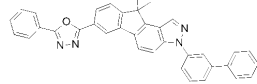
J-51



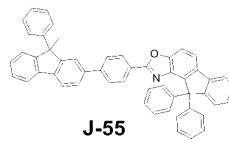
J-52



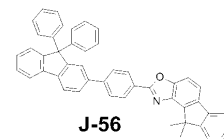
J-53



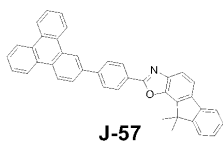
J-54



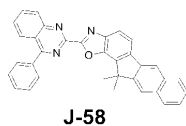
J-55



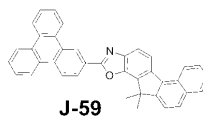
J-56



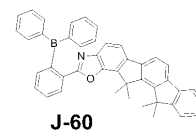
J-57



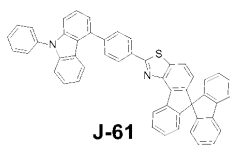
J-58



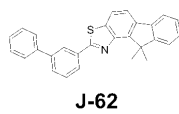
J-59



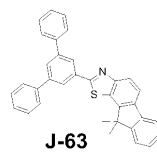
J-60



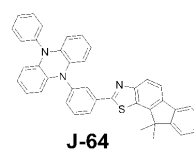
J-61



J-62

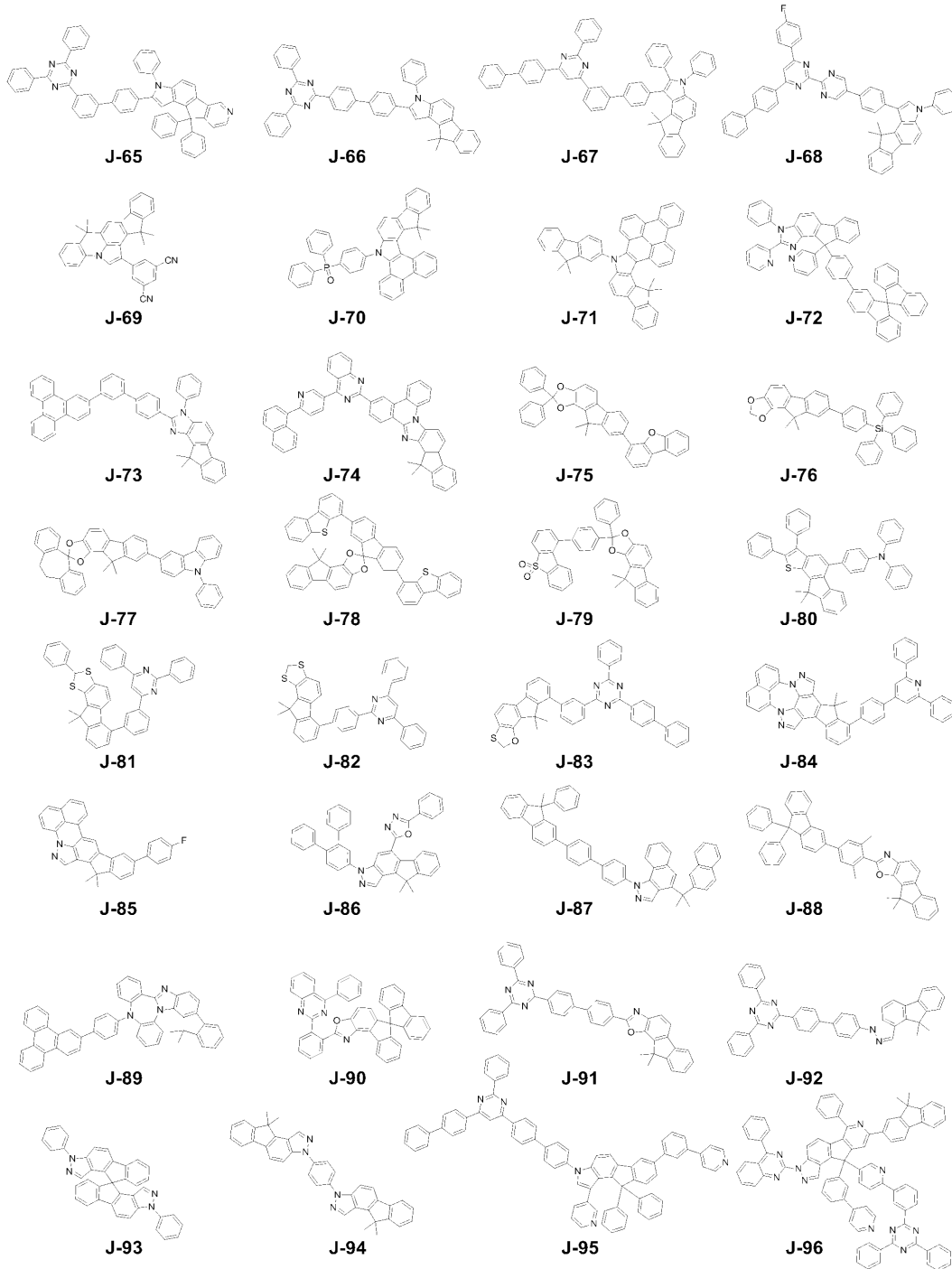


J-63



J-64

[0203]



[0204]

[0205]

본 발명에서 상기 화학식 1로 표시되는 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.

[0207]

2. 유기 전계 발광 소자

[0208]

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

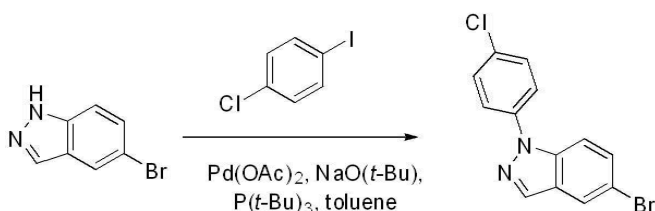
[0209]

구체적으로, 본 발명은 양극(anode), 음극(cathode), 및 상기 양극과 음극 사이에 개재(介在)된 1층 이상의 유기물층을 포함하는 유기 전계 발광 소자로서, 상기 1층 이상의 유기물층 중 적어도 하나는 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함한다. 이때, 상기 화합물은 단독 또는 2 이상 혼합되어 사용될 수 있다.

- [0210] 상기 1층 이상의 유기물층은 정공 주입층, 정공 수송층, 발광층, 발광 보조층, 수명 개선층, 전자 수송층, 전자 수송 보조층 및 전자 주입층 중 어느 하나 이상일 수 있고, 이 중에서 적어도 하나의 유기물층이 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함할 수 있다. 바람직하게는 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하는 유기물층은 발광층일 수 있다.
- [0211] 본 발명의 일례에 따르면, 유기 전계 발광 소자의 발광층은 호스트 재료를 포함할 수 있는데, 이때 호스트 재료로서 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함할 수 있다. 이와 같이, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 유기 전계 발광 소자의 발광층 재료, 바람직하게는 녹색의 인광 호스트로 포함할 경우, 발광층에서 정공과 전자의 결합력이 높아지기 때문에, 유기 전계 발광 소자의 효율(발광효율 및 전력효율), 수명, 휘도 및 구동전압 등이 향상될 수 있다.
- [0212] 전술한 본 발명에 따른 유기 전계 발광 소자의 구조는 특별히 한정되지 않으며, 예컨대 기관, 양극, 정공 주입층, 정공 수송층, 발광층, 전자 수송층 및 음극이 순차적으로 적층된 구조일 수 있다. 이때, 상기 발광층과 전자 수송층 사이에는 전자 수송 보조층이 추가로 적층될 수 있고, 상기 전자수송층 위에는 전자 주입층이 추가로 적층될 수 있다. 본 발명에서 상기 정공 주입층, 정공 수송층, 발광층, 전자 수송층, 전자 수송 보조층 및 전자 주입층 중 하나 이상은 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함할 수 있고, 바람직하게는 발광층이 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함할 수 있다.
- [0213] 또, 본 발명의 유기 전계 발광 소자의 구조는 양극, 1층 이상의 유기물층 및 음극이 순차적으로 적층될 뿐만 아니라, 전극과 유기물층 계면에 절연층 또는 접착층이 삽입된 구조일 수 있다.
- [0214] 본 발명의 유기 전계 발광 소자는 상기 유기물층 중 적어도 하나 이상(예컨대, 발광층)이 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하도록 형성하는 것을 제외하고는, 당 기술 분야에 알려져 있는 재료 및 방법을 이용하여 다른 유기물층 및 전극을 형성하여 제조될 수 있다.
- [0215] 상기 유기물층은 진공 증착법이나 용액 도포법에 의하여 형성될 수 있다. 상기 용액 도포법의 예로는 스핀 코팅, 딥코팅, 닥터 블레이딩, 잉크젯 프린팅 또는 열 전사법 등이 있으나, 이에 한정되지 않는다.
- [0216] 본 발명에서 사용 가능한 기관으로는 특별히 한정되지 않으며, 실리콘 웨이퍼, 석영, 유리판, 금속판, 플라스틱 필름 및 시트 등이 사용될 수 있다.
- [0217] 또, 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 또는 폴리아닐린과 같은 전도성 고분자; 및 카본블랙 등이 있으나, 이에 한정되지는 않는다.
- [0218] 또, 음극 물질로는 마그네슘, 칼슘, 나트륨, 칼륨, 타이타늄, 인듐, 이트륨, 리튬, 가돌리늄, 알루미늄, 은, 주석, 또는 납과 같은 금속 또는 이들의 합금; 및 LiF/Al 또는 LiO₂/Al과 같은 다층 구조 물질 등이 있으나, 이에 한정되지는 않는다.
- [0220] 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.

[0222] **[준비예 1] A-1의 합성**

[0223] <단계1> 5-브로모-1-(4-클로로페닐)-1H-인다졸의 합성



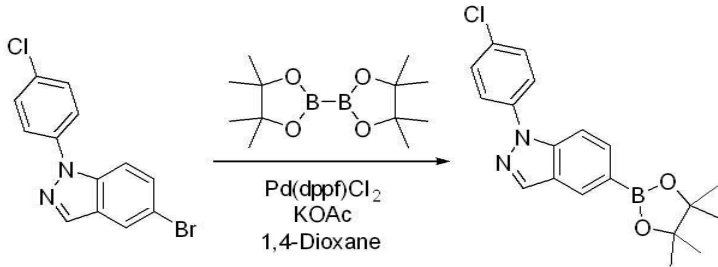
[0224]

[0225] 질소 기류 하에서 5-브로모-1H-인다졸 (1.32 g, 6.7 mmol), 1-클로로-4-요오드벤젠 (1.90 g, 8.0 mmol),

Pd(OAc)₂ (0.08 g, 0.34 mmol), P(*t*-Bu)₃ (0.16 ml, 0.67 mmol), NaO(*t*-Bu) (1.29 g, 13.4 mmol) 및 톨루엔 (70 ml)을 혼합하고 110°C 에서 2시간 동안 교반하였다. 반응이 종결된 후 톨루엔을 농축하고, 고체염을 여과한 뒤, 재결정으로 정제하여 목적 화합물인 5-브로모-1-(4-클로로페닐)-1H-인다졸 (1.32 g, 수율 64%)을 얻었다.

[0226] ¹H-NMR: δ 7.35 (m, 2H), 7.53 (m, 3H), 8.01 (s, 1H), 8.20 (d, 1H), 8.37 (s, 1H)

[0228] <단계2> 1-(4-클로로페닐)-5-(4,4,5,5-테트라메틸-1,3,2-디옥사보로란-2-일)-1H-인다졸 의 합성



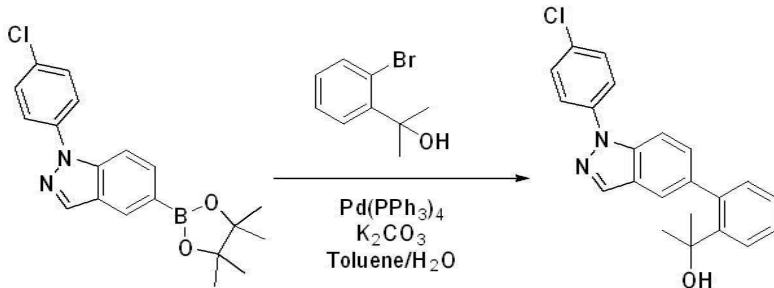
[0229]

[0230] 질소 기류 하에서 5-브로모-1-(4-클로로페닐)-1H-인다졸 (39.37 g, 0.128 mol), 4,4,4',4',5,5,5',5'-옥타메틸-2,2'-비(1,3,2-디옥사보로란) (48.58 g, 0.191 mol), Pd(dppf)Cl₂ (5.2 g, 5 mol), KOAc (37.55 g, 0.383 mol) 및 1,4-디옥산 (500 ml)을 혼합한 다음, 130°C에서 12시간 동안 교반하였다.

[0231] 반응이 종결된 후 에틸아세테이트로 추출한 다음, MgSO₄로 수분을 제거하고, 컬럼크로마토그래피 (Hexane:EA = 10:1 (v/v))로 정제하여 1-(4-클로로페닐)-5-(4,4,5,5-테트라메틸-1,3,2-디옥사보로란-2-일)-1H-인다졸 (25.42 g, 수율: 56%)을 얻었다.

[0232] ¹H-NMR: δ 1.20 (s, 12H), 7.35 (m, 2H), 7.57 (m, 3H), 8.13 (s, 1H), 8.35 (m, 2H)

[0234] <단계3> 2-(2-(1-(4-클로로페닐)-1H-인다졸-5-일)페닐)프로판-2-올 의 합성

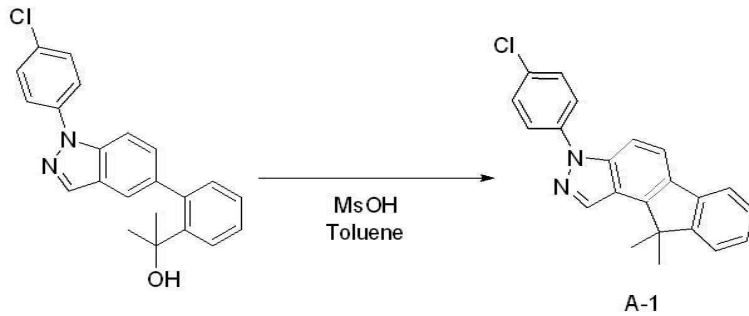


[0235]

[0236] 1-(4-클로로페닐)-5-(4,4,5,5-테트라메틸-1,3,2-디옥사보로란-2-일)-1H-인다졸 (3.54 g, 10 mmol), 2-(2-브로모페닐)프로판-2-올 (2.36 g, 11 mmol), K₂CO₃ (2.07 g, 15 mmol), Pd(PPh₃)₄ (0.58 g, 0.5 mmol) 및 톨루엔(60 mL)과 정제수(15ml)을 혼합하고 110°C에서 12시간 동안 교반하였다. 상온으로 식힌 후 H₂O를 첨가하고 염수를 이용하여 추출하였다. Na₂SO₄로 수분을 제거한 후 유기층을 농축한 후 컬럼크로마토그래피를 실시하여 2-(2-(1-(4-클로로페닐)-1H-인다졸-5-일)페닐)프로판-2-올 (1.99 g, 55%)를 얻었다.

[0237] ¹H-NMR: δ 1.35 (s, 6H), 5.50 (s, 1H), 7.40 (m, 7H), 7.77 (m, 2H), 8.19 (s, 1H), 8.37 (s, 1H), 8.50 (d, 1H)

[0239] <단계4> A-1의 합성



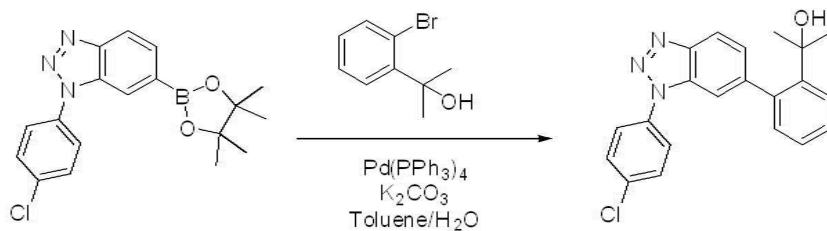
[0240]

[0241] 0℃로 온도를 낮추고 톨루엔 1L에 2-(2-(1-(4-클로로페닐)-1H-인다졸-5-일)페닐)프로판-2-올 108.8 g (0.3 mol)을 넣어준 후 메탄술포산 19.5 mL (0.03 mol)를 한 방울씩 첨가하였다. 상온으로 온도를 올린 후 정제수 300 mL를 첨가하여 반응을 종결하였다. 혼합액을 CH₂Cl₂로 추출한 후, 분리한 유기층을 포화탄산칼슘 20 mL로 중화하고 증류수로 세척하였다. 얻어진 유기층을 무수 MgSO₄로 건조하고, 감압증류하고 실리카겔 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 A-1 (31.03 g, 수율 30%)을 얻었다.

[0242] ¹H-NMR : δ 1.69 (s, 6H), 7.36 (m, 3H), 7.55 (m, 3H), 7.74 (m, 2H), 8.24 (d, 1H), 8.40 (m, 2H)

[0244] [준비예 2] A-2의 합성

[0245] <단계1> 2-(2-(1-(4-클로로페닐)-1H-벤조[d][1,2,3]트리아졸-6-일)페닐)프로판-2-올 의 합성

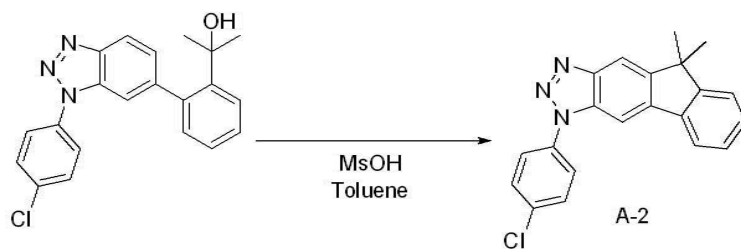


[0246]

[0247] 준비예 1의 <단계 3>에서 사용된 1-(4-클로로페닐)-5-(4,4,5,5-테트라메틸-1,3,2-디옥사보로란-2-일)-1H-인다졸 대신 1-(4-클로로페닐)-6-(4,4,5,5-테트라메틸-1,3,2-디옥사보로란-2-일)-1H-벤조[d][1,2,3]트리아졸 (3.55 g, 10 mmol)를 사용하는 것을 제외하고는 상기 준비예 1의 <단계 3>과 동일한 과정을 수행하여 2-(2-(1-(4-클로로페닐)-1H-벤조[d][1,2,3]트리아졸-6-일)페닐)프로판-2-올 를 얻었다.

[0248] ¹H-NMR: δ 1.35 (s, 6H), 5.50 (s, 1H), 7.40 (m, 7H), 7.79 (m, 2H), 8.15 (d, 1H), 8.32 (s, 1H)

[0250] <단계2> A-2의 합성



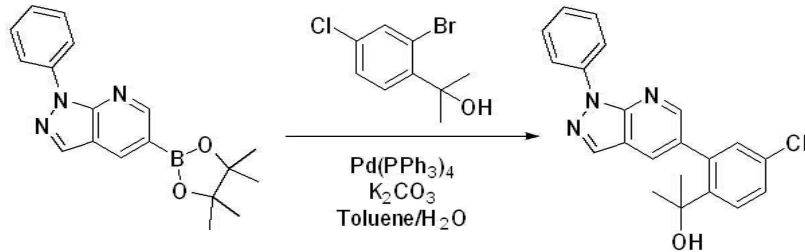
[0251]

[0252] 준비예 1의 <단계 4>에서 사용된 2-(2-(1-(4-클로로페닐)-1H-인다졸-5-일)페닐)프로판-2-올 대신 상기 준비예 2의 <단계 1>에서 얻은 2-(2-(1-(4-클로로페닐)-1H-벤조[d][1,2,3]트리아졸-6-일)페닐)프로판-2-올 (109.15 g, 0.3 mol)를 사용하는 것을 제외하고는 상기 준비예 1의 <단계 4>와 동일한 과정을 수행하여 A-2를 얻었다.

[0253] $^1\text{H-NMR}$: δ 1.69 (s, 6H), 7.37 (m, 3H), 7.56 (m, 3H), 7.74 (d, 1H), 8.24 (d, 1H), 8.33 (m, 2H)

[0255] **[준비예 3] A-3의 합성**

[0256] <단계1> 2-(4-클로로-2-(1-페닐-1H-피라졸로[3,4-b]피리딘-5-일)페닐)프로판-2-올의 합성

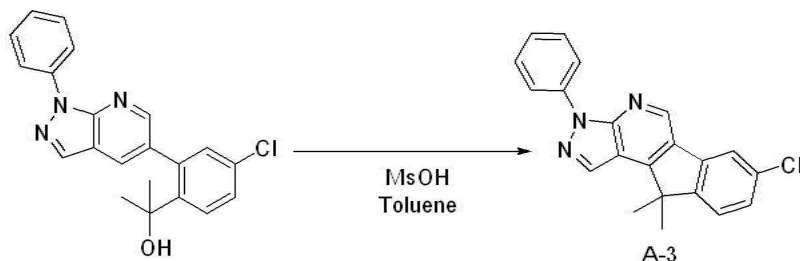


[0257]

[0258] 준비예 1의 <단계 3>에서 사용된 1-(4-클로로페닐)-5-(4,4,5,5-테트라메틸-1,3,2-디옥사보로란-2-일)-1H-인다졸 대신 1-페닐-5-(4,4,5,5-테트라메틸-1,3,2-디옥사보로란-2-일)-1H-피라졸로[3,4-b]피리딘 (3.21 g, 10 mmol)를 사용하고 2-(2-브로모페닐)프로판-2-올 대신 2-(2-브로모-4-클로로페닐)프로판-2-올 (2.74 g, 11 mmol)를 사용하는 것을 제외하고는 상기 준비예 1의 <단계 3>과 동일한 과정을 수행하여 2-(2-(1-(4-클로로페닐)-1H-벤조[d][1,2,3]트리아졸-6-일)페닐)프로판-2-올을 얻었다.

[0259] $^1\text{H-NMR}$: δ 1.35 (s, 6H), 5.50 (s, 1H), 7.55 (m, 5H), 8.00 (s, 1H), 8.09 (s, 1H), 8.22 (m, 3H), 9.24 (s, 1H)

[0261] <단계2> A-3의 합성



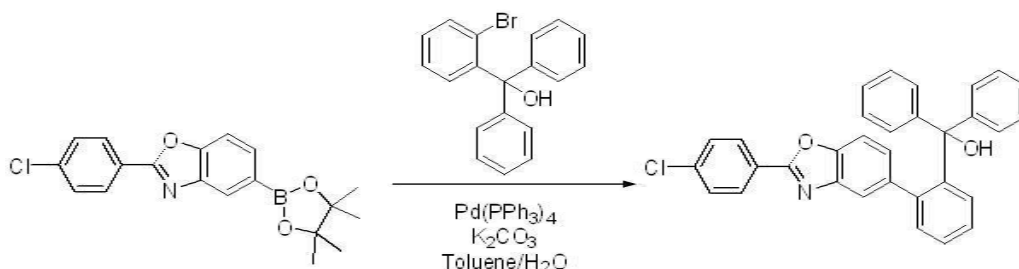
[0262]

[0263] 준비예 1의 <단계 4>에서 사용된 2-(2-(1-(4-클로로페닐)-1H-인다졸-5-일)페닐)프로판-2-올 대신 상기 준비예 3의 <단계 1>에서 얻은 2-(2-(1-(4-클로로페닐)-1H-벤조[d][1,2,3]트리아졸-6-일)페닐)프로판-2-올 (109.15 g, 0.3 mol)를 사용하는 것을 제외하고는 상기 준비예 1의 <단계 4>와 동일한 과정을 수행하여 A-3를 얻었다.

[0264] $^1\text{H-NMR}$: δ 1.69 (s, 6H), 7.31 (d, 1H), 7.50 (m, 4H), 7.96 (s, 1H), 8.20 (m, 3H), 9.24 (s, 1H)

[0266] **[준비예 4] A-4의 합성**

[0267] <단계1> (2-(2-(4-클로로페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)페닐)디페닐메탄올의 합성



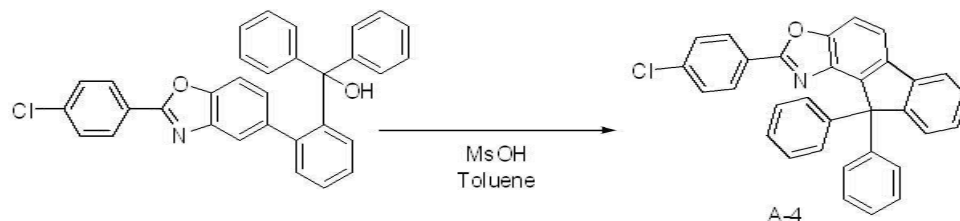
[0268]

[0269] 준비예 1의 <단계 3>에서 사용된 1-(4-클로로페닐)-5-(4,4,5,5-테트라메틸-1,3,2-디옥사보로란-2-일)-1H-인다졸

대신 2-(4-클로로페닐)-5-(4,4,5,5-테트라메틸-1,3,2-디옥사보로란-2-일)벤조[d]옥사졸 (3.55 g, 10 mmol)를 사용하고 2-(2-브로모페닐)프로판-2-올 대신 (2-브로모페닐)디페닐메탄올 (3.73 g, 11 mmol)를 사용하는 것을 제외하고는 상기 준비예 1의 <단계 3>과 동일한 과정을 수행하여 (2-(2-(4-클로로페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)페닐)디페닐메탄올을 얻었다.

[0270] $^1\text{H-NMR}$: δ 6.72 (s, 1H), 7.28 (m, 10H), 7.50 (m, 5H), 7.75 (m, 5H), 8.09 (s, 1H)

[0272] <단계2> A-4의 합성



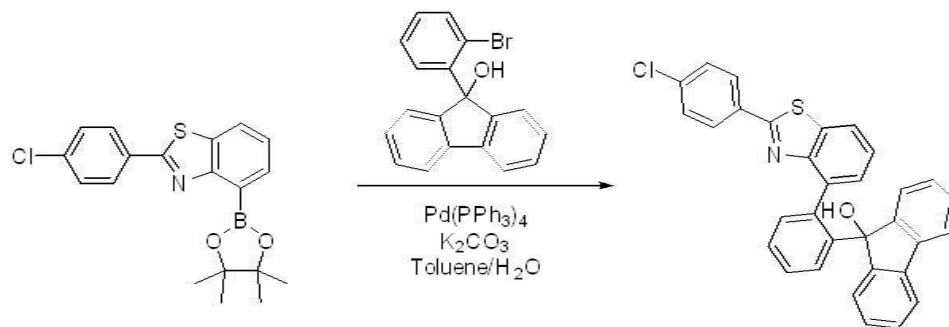
[0273]

[0274] 준비예 1의 <단계 4>에서 사용된 2-(2-(1-(4-클로로페닐)-1H-인다졸-5-일)페닐)프로판-2-올 대신 상기 준비예 4의 <단계 1>에서 얻은 (2-(2-(4-클로로페닐)벤조[d]옥사졸-5-일)페닐)디페닐메탄올 (149.69 g, 0.3 mol)를 사용하는 것을 제외하고는 상기 준비예 1의 <단계 4>와 동일한 과정을 수행하여 A-4를 얻었다.

[0275] $^1\text{H-NMR}$: δ 7.20 (m, 11H), 7.38 (m, 2H), 7.55 (m, 3H), 7.71 (m, 2H), 7.90 (m, 2H)

[0277] [준비예 5] A-5의 합성

[0278] <단계1> 9-(2-(2-(4-클로로페닐)벤조[d]티아졸-4-일)페닐)-9H-플루오렌-9-올 의 합성

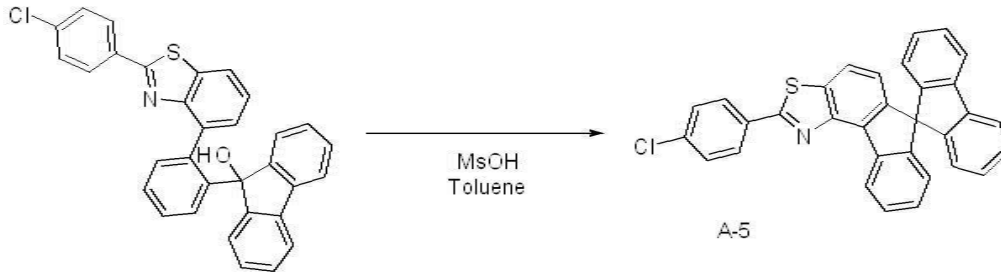


[0279]

[0280] 준비예 1의 <단계 3>에서 사용된 1-(4-클로로페닐)-5-(4,4,5,5-테트라메틸-1,3,2-디옥사보로란-2-일)-1H-인다졸 대신 2-(4-클로로페닐)-4-(4,4,5,5-테트라메틸-1,3,2-디옥사보로란-2-일)벤조[d]티아졸 (3.72 g, 10 mmol)를 사용하고 2-(2-브로모페닐)프로판-2-올 대신 9-(2-브로모페닐)-9H-플루오렌-9-올 (3.71 g, 11 mmol)를 사용하는 것을 제외하고는 상기 준비예 1의 <단계 3>과 동일한 과정을 수행하여 9-(2-(2-(4-클로로페닐)벤조[d]티아졸-4-일)페닐)-9H-플루오렌-9-올 를 얻었다.

[0281] $^1\text{H-NMR}$: δ 6.72 (s, 1H), 7.38 (m, 11H), 7.75 (m, 2H), 7.90 (m, 3H), 8.02 (m, 2H), 8.12 (d, 1H)

[0283] <단계2> A-5의 합성



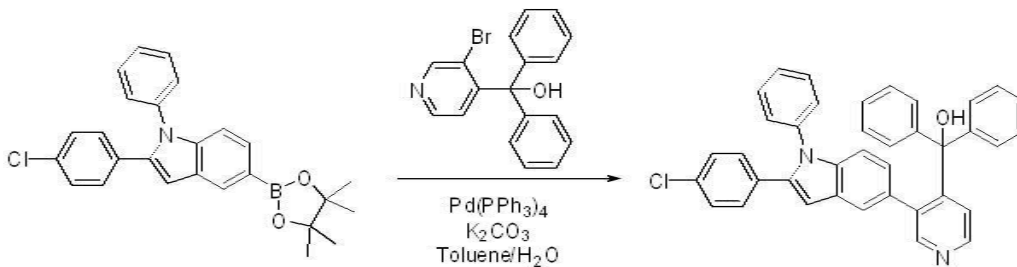
[0284]

[0285] 준비예 1의 <단계 4>에서 사용된 2-(2-(1-(4-클로로페닐)-1H-인다졸-5-일)페닐)프로판-2-올 대신 상기 준비예 5의 <단계 1>에서 얻은 9-(2-(2-(4-클로로페닐)벤조[d]티아졸-4-일)페닐)-9H-플루오렌-9-올 (150.61 g, 0.3 mol)를 사용하는 것을 제외하고는 상기 준비예 1의 <단계 4>와 동일한 과정을 수행하여 A-5를 얻었다.

[0286] ¹H-NMR: δ 7.40 (m, 11H), 7.74 (d, 1H), 7.89 (m, 2H), 8.02 (m, 3H), 8.24 (d, 1H)

[0288] [준비예 6] A-6의 합성

[0289] <단계1> (3-(2-(4-클로로페닐)-1-페닐-1H-인돌-5-일)피리딘-4-일)디페닐메탄올의 합성

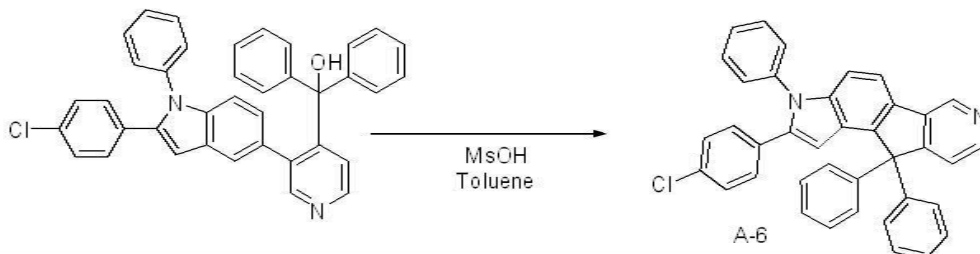


[0290]

[0291] 준비예 1의 <단계 3>에서 사용된 1-(4-클로로페닐)-5-(4,4,5,5-테트라메틸-1,3,2-디옥사보로란-2-일)-1H-인다졸 대신 2-(4-클로로페닐)-1-페닐-5-(4,4,5,5-테트라메틸-1,3,2-디옥사보로란-2-일)-1H-인돌 (4.30 g, 10 mmol)를 사용하고 2-(2-브로모페닐)프로판-2-올 대신 (3-브로모피리딘-4-일)디페닐메탄올 (3.74 g, 11 mmol)를 사용하는 것을 제외하고는 상기 준비예 1의 <단계 3>과 동일한 과정을 수행하여 (3-(2-(4-클로로페닐)-1-페닐-1H-인돌-5-일)피리딘-4-일)디페닐메탄올을 얻었다.

[0292] ¹H-NMR: δ 6.71 (s, 1H), 6.80 (s, 1H), 7.16 (d, 1H), 7.25 (m, 10H), 7.60 (m, 7H), 7.98 (m, 2H), 8.13 (d, 1H), 8.20 (d, 1H), 8.30 (m, 2H), 9.24 (s, 1H)

[0294] <단계2> A-6의 합성



[0295]

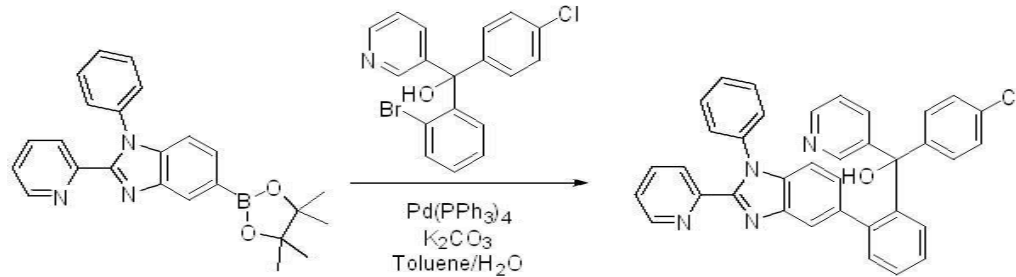
[0296] 준비예 1의 <단계 4>에서 사용된 2-(2-(1-(4-클로로페닐)-1H-인다졸-5-일)페닐)프로판-2-올 대신 상기 준비예 6의 <단계 1>에서 얻은 (3-(2-(4-클로로페닐)-1-페닐-1H-인돌-5-일)피리딘-4-일)디페닐메탄올 (168.93 g, 0.3 mol)를 사용하는 것을 제외하고는 상기 준비예 1의 <단계 4>와 동일한 과정을 수행하여 A-6를 얻었다.

[0297] ¹H-NMR: δ 6.80 (s, 1H), 7.20 (m, 11H), 7.56 (m, 7H), 8.00 (m, 3H), 8.20 (d, 1H), 8.29 (d, 1H), 9.24

(s, 1H)

[0299] [준비에 7] A-7의 합성

[0300] <단계1> (4-클로로페닐)(2-(1-페닐-2-(피리딘-2-일)-1H-벤조[d]이미다졸-5-일)페닐)(피리딘-3-일)메탄올의 합성

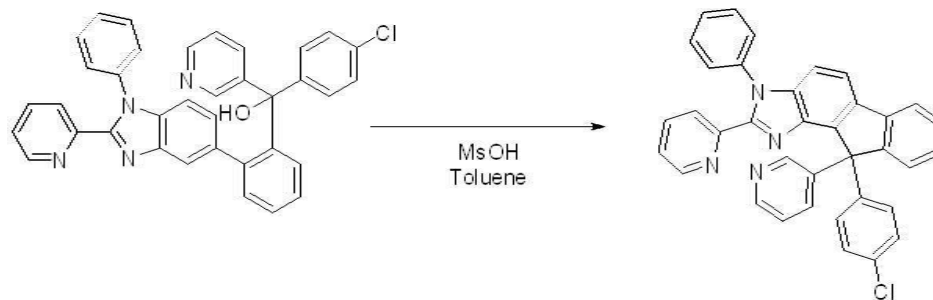


[0301]

[0302] 준비예 1의 <단계 3>에서 사용된 1-(4-클로로페닐)-5-(4,4,5,5-테트라메틸-1,3,2-디옥사보로란-2-일)-1H-인다졸 대신 1-페닐-2-(피리딘-2-일)-5-(4,4,5,5-테트라메틸-1,3,2-디옥사보로란-2-일)-1H-벤조[d]이미다졸 (3.97 g, 10 mmol)를 사용하고 2-(2-브로모페닐)프로판-2-올 대신 (2-브로모페닐)(4-클로로페닐)(피리딘-3-일)메탄올 (4.12 g, 11 mmol)를 사용하는 것을 제외하고는 상기 준비예 1의 <단계 3>과 동일한 과정을 수행하여 (4-클로로페닐)(2-(1-페닐-2-(피리딘-2-일)-1H-벤조[d]이미다졸-5-일)페닐)(피리딘-3-일)메탄올을 얻었다.

[0303] ¹H-NMR: δ 6.71 (s, 1H), 7.22 (m, 2H), 7.41 (m, 11H), 7.62 (t, 1H), 7.85 (m, 3H), 8.04 (s, 1H), 8.20 (m, 2H), 8.33 (d, 1H), 8.41 (d, 1H), 8.55 (m, 2H)

[0305] <단계2> A-7의 합성

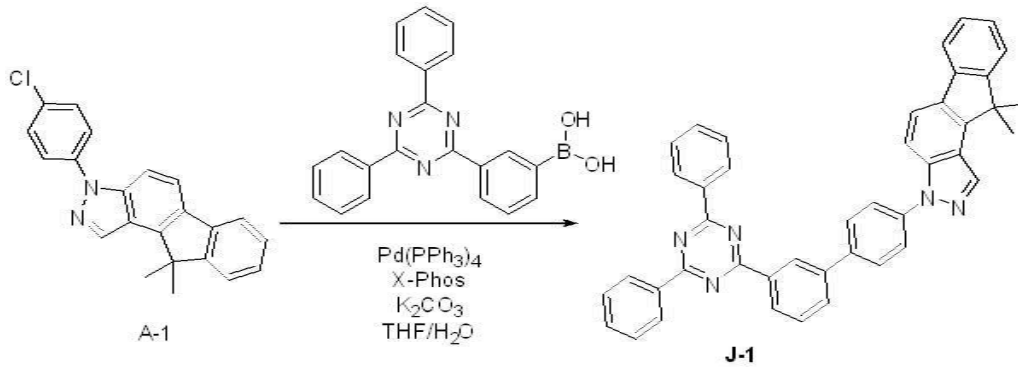


[0306]

[0307] 준비예 1의 <단계 4>에서 사용된 2-(2-(1-(4-클로로페닐)-1H-인다졸-5-일)페닐)프로판-2-올 대신 상기 준비예 7의 <단계 1>에서 얻은 (4-클로로페닐)(2-(1-페닐-2-(피리딘-2-일)-1H-벤조[d]이미다졸-5-일)페닐)(피리딘-3-일)메탄올 (169.52 g, 0.3 mol)를 사용하는 것을 제외하고는 상기 준비예 1의 <단계 4>와 동일한 과정을 수행하여 A-7를 얻었다.

[0308] ¹H-NMR: δ 7.12 (m, 2H), 7.24 (t, 1H), 7.50 (m, 12H), 7.85 (t, 1H), 8.24 (m, 6H), 8.59 (d, 1H)

[0310] **[합성예 1] J-1의 합성**

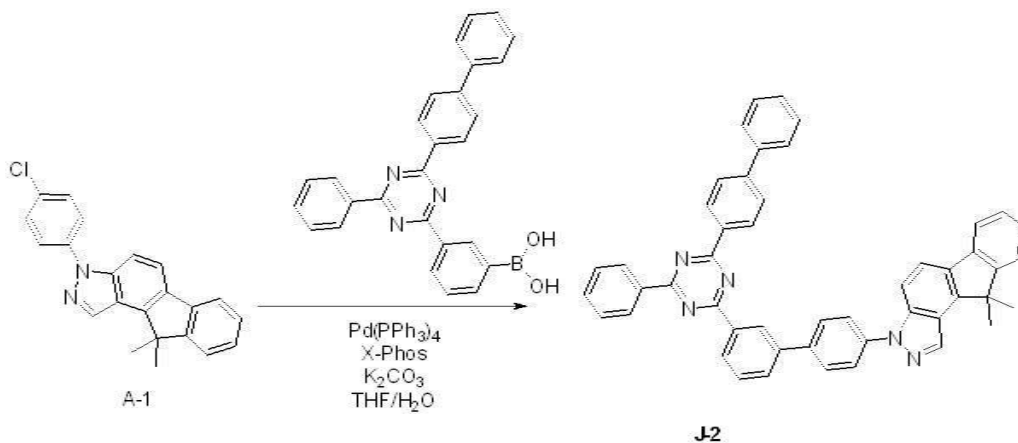


[0311]

[0312] 질소 기류 하에서 A-1 (3.44 g, 10.0 mmol), (3-(4,6-디페닐-1,3,5-트리아진-2-일)페닐)보로닉산 (3.53 g, 10.0 mmol), K_2CO_3 (4.27 g, 30.0 mmol), $\text{Pd(PPh}_3)_4$ (0.58 g, 5 mol%), X-Phos (0.8 g, 5.00 mmol)를 120 ml / 40 ml의 THF/ H_2O 에 넣고 90°C에서 12시간 동안 교반하였다. 반응 종결 후 메틸렌클로라이드로 추출하고 MgSO_4 를 넣고 필터하였다. 필터된 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피를 이용하여 목적 화합물인 J-1 (3.08 g, 수율 50%)를 획득하였다.

[0313] [Mass]: 617

[0315] **[합성예 2] J-2의 합성**

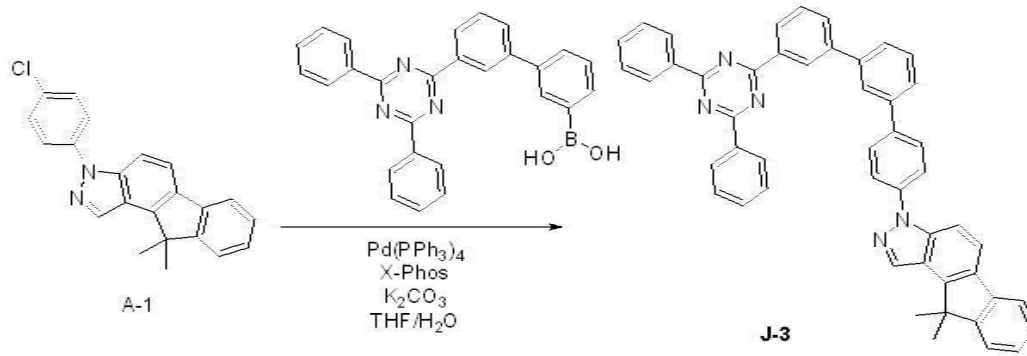


[0316]

[0317] (3-(4,6-디페닐-1,3,5-트리아진-2-일)페닐)보로닉산 대신 (3-(4-([1,1'-bi(4-phenyl)]-4-yl)-6-페닐-1,3,5-트리아진-2-일)페닐)보로닉산 (4.29 g, 10.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 합성예 1과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 J-2 (4.57 g, 수율 66%)를 얻었다.

[0318] [Mass]: 693

[0320] **[합성예 3] J-3의 합성**

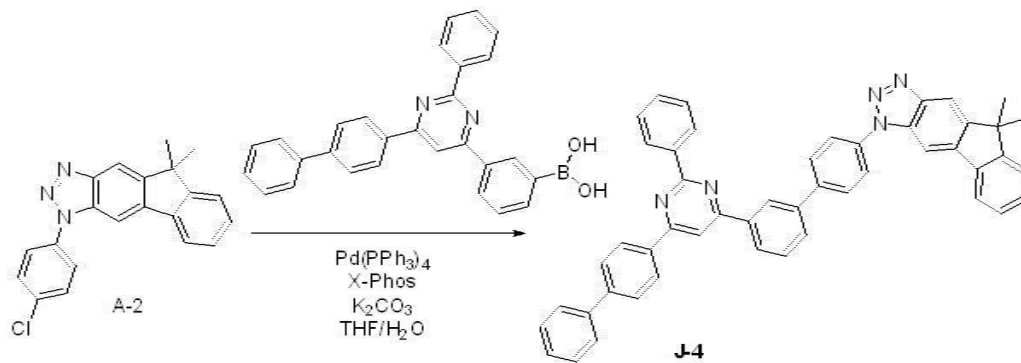


[0321]

[0322] (3-(4,6-디페닐-1,3,5-트리아진-2-일)페닐)보로닉산 대신 (3'-(4,6-디페닐-1,3,5-트리아진-2-일)-[1,1'-비페닐]-3-일)보로닉산 (4.29 g, 10.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 합성예 1과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 J-3 (4.57 g, 수율 66%)를 얻었다.

[0323] [Mass]: 693

[0325] **[합성예 4] J-4의 합성**

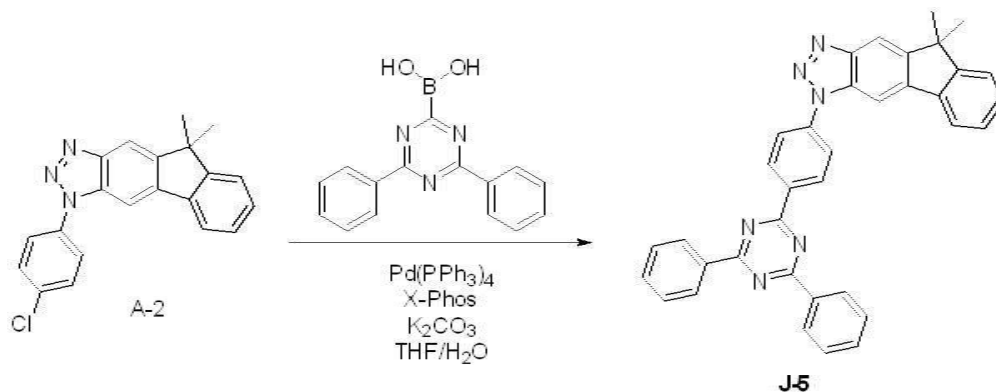


[0326]

[0327] A-1 대신 A-2 (3.45 g, 10.0 mmol) 를 사용하고 (3-(4,6-디페닐-1,3,5-트리아진-2-일)페닐)보로닉산 대신 (6-([1,1'-비페닐]-4-일)-2-페닐피리미딘-4-일)페닐)보로닉산 (4.28 g, 10.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 합성예 1과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 J-4 (4.23 g, 수율 61%)를 얻었다.

[0328] [Mass]: 693

[0330] **[합성예 5] J-5의 합성**



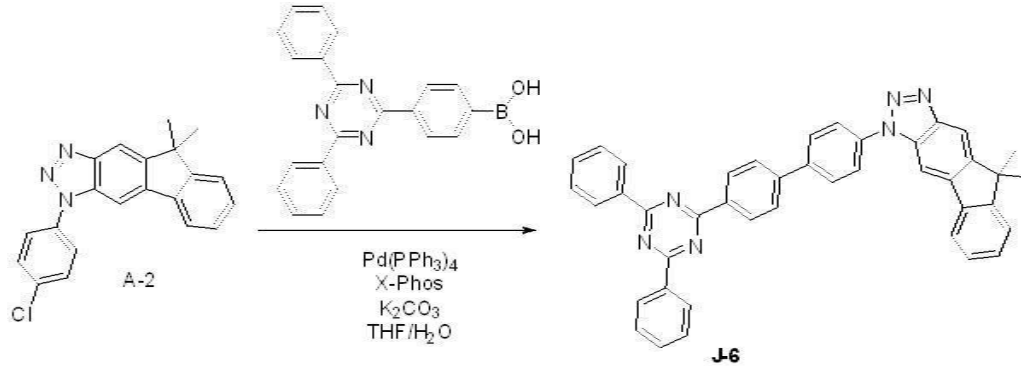
[0331]

[0332] A-1 대신 A-2 (3.45 g, 10.0 mmol) 를 사용하고 (3-(4,6-디페닐-1,3,5-트리아진-2-일)페닐)보로닉산 대신 (4,6-디페닐-1,3,5-트리아진-2-일)보로닉산 (2.77 g, 10.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 합성예 1과 동일

한 과정을 수행하여 목적 화합물인 J-5 (2.55 g, 수율 47%)를 얻었다.

[0333] [Mass]: 542

[0335] **[합성예 6] J-6의 합성**

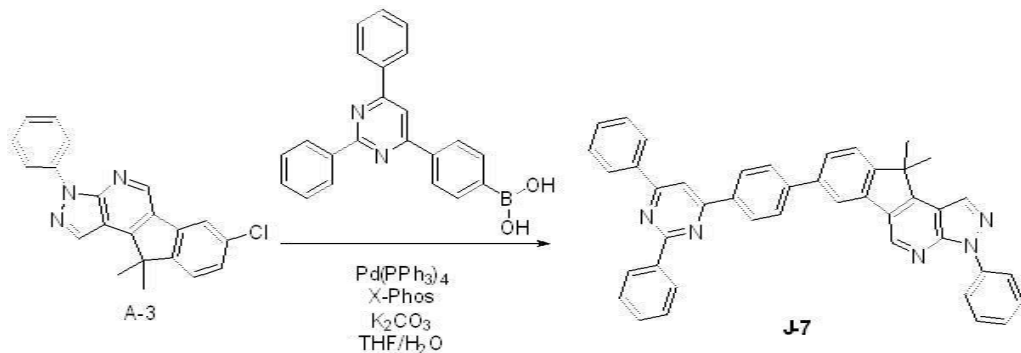


[0336]

[0337] A-1 대신 A-2 (3.45 g, 10.0 mmol) 를 사용하고 (3-(4,6-디페닐-1,3,5-트리아진-2-일)페닐)보로닉산 대신 (4-(4,6-디페닐-1,3,5-트리아진-2-일)페닐)보로닉산 (3.53 g, 10.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 합성예 1과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 J-6 (2.41 g, 수율 39%)를 얻었다.

[0338] [Mass]: 618

[0340] **[합성예 7] J-7의 합성**

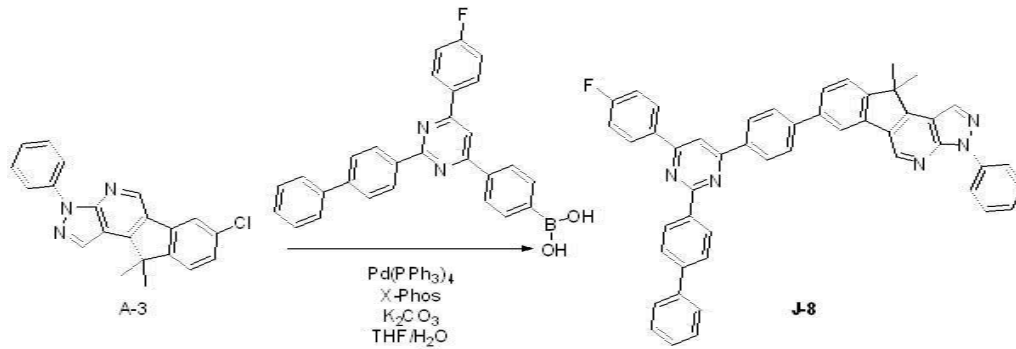


[0341]

[0342] A-1 대신 A-3 (3.45 g, 10.0 mmol) 를 사용하고 (3-(4,6-디페닐-1,3,5-트리아진-2-일)페닐)보로닉산 대신 (2,6-디페닐피리미딘-4-일)페닐)보로닉산 (3.52 g, 10.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 합성예 1과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 J-7 (3.58 g, 수율 58%)를 얻었다.

[0343] [Mass]: 617

[0345] **[합성예 8] J-8의 합성**



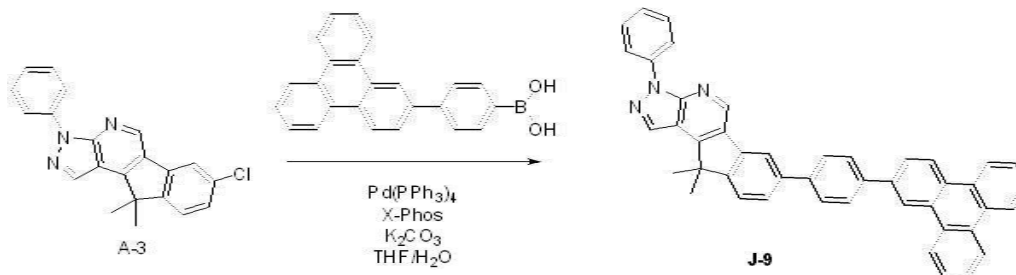
[0346]

[0347] A-1 대신 A-3 (3.45 g, 10.0 mmol) 를 사용하고 (3-(4,6-디페닐-1,3,5-트리아진-2-일)페닐)보로닉산 대신 (4-(2-([1,1'-비페닐]-4-일)-6-(4-플루오로페닐)피리미딘-4-일)페닐)보로닉산 (4.46 g, 10.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 합성예 1과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 J-8 (2.34 g, 수율 33%)를 얻었다.

[0348]

[Mass]: 711

[0350] **[합성예 9] J-9의 합성**



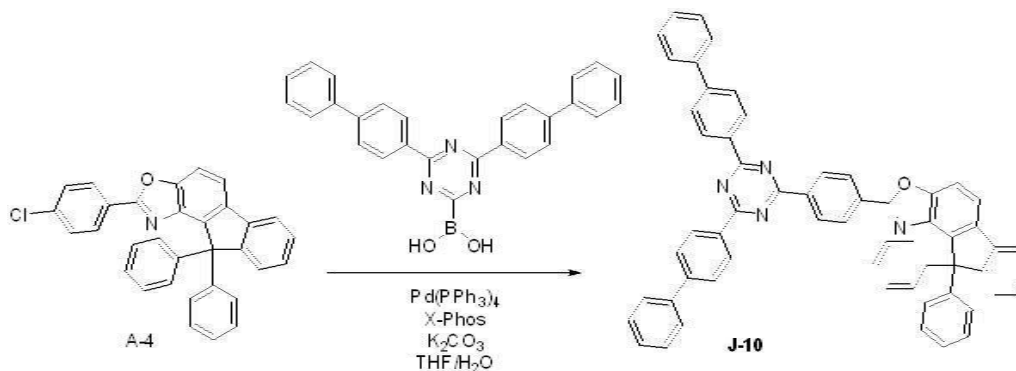
[0351]

[0352] A-1 대신 A-3 (3.45 g, 10.0 mmol) 를 사용하고 (3-(4,6-디페닐-1,3,5-트리아진-2-일)페닐)보로닉산 대신 (4-(트리페닐렌-2-일)페닐)보로닉산 (3.48 g, 10.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 합성예 1과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 J-9 (2.70 g, 수율 44%)를 얻었다.

[0353]

[Mass]: 613

[0355] **[합성예 10] J-10의 합성**

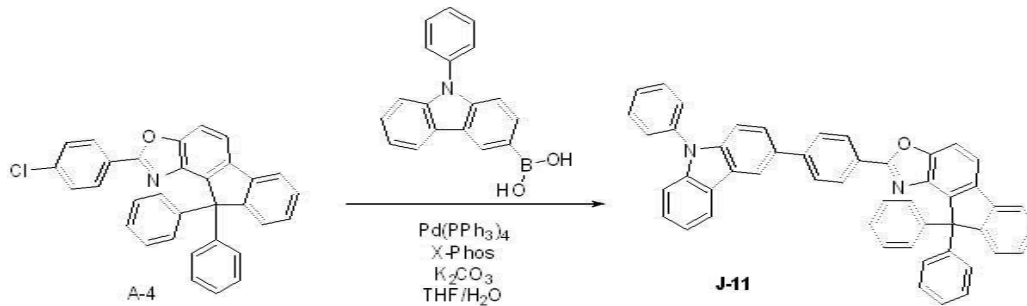


[0356]

[0357] A-1 대신 A-4 (4.69 g, 10.0 mmol) 를 사용하고 (3-(4,6-디페닐-1,3,5-트리아진-2-일)페닐)보로닉산 대신 (4,6-디([1,1'-비페닐]-4-일)-1,3,5-트리아진-2-일)보로닉산 (4.29 g, 10.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 합성예 1과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 J-10 (3.68 g, 수율 45%)를 얻었다.

[0358] [Mass]: 818

[0360] **[합성예 11] J-11의 합성**

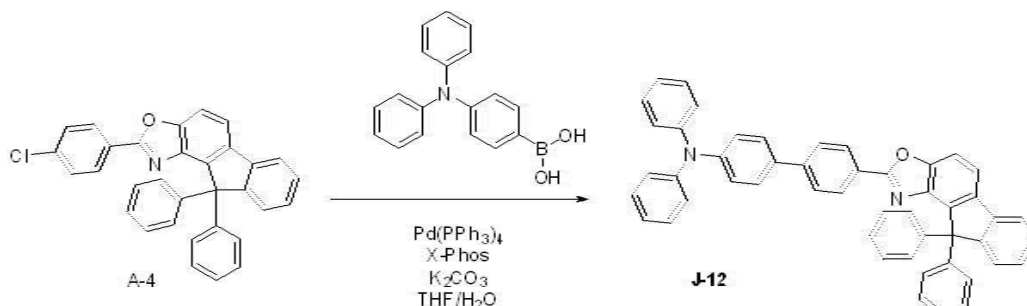


[0361]

[0362] A-1 대신 A-4 (4.69 g, 10.0 mmol) 를 사용하고 (3-(4,6-디페닐-1,3,5-트리아진-2-일)페닐)보로닉산 대신 (9-페닐-9H-카바졸-3-일)보로닉산 (2.87 g, 10.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 합성예 1과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 J-11 (3.11 g, 수율 46%)를 얻었다.

[0363] [Mass]: 676

[0365] **[합성예 12] J-12의 합성**

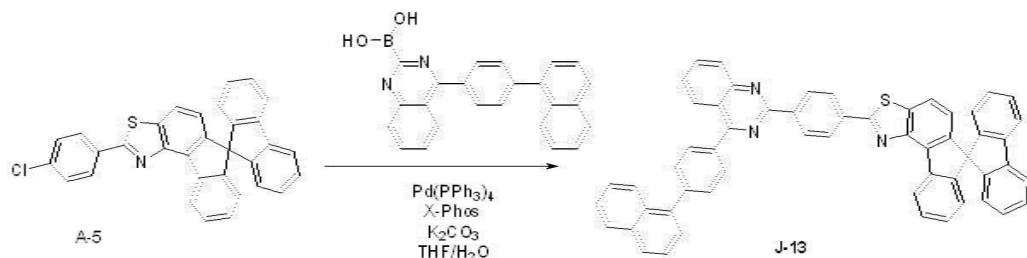


[0366]

[0367] A-1 대신 A-4 (4.69 g, 10.0 mmol) 를 사용하고 (3-(4,6-디페닐-1,3,5-트리아진-2-일)페닐)보로닉산 대신 (4-(디페닐아미노)페닐)보로닉산 (2.89 g, 10.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 합성예 1과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 J-12 (3.19 g, 수율 47%)를 얻었다.

[0368] [Mass]: 678

[0370] **[합성예 13] J-13의 합성**

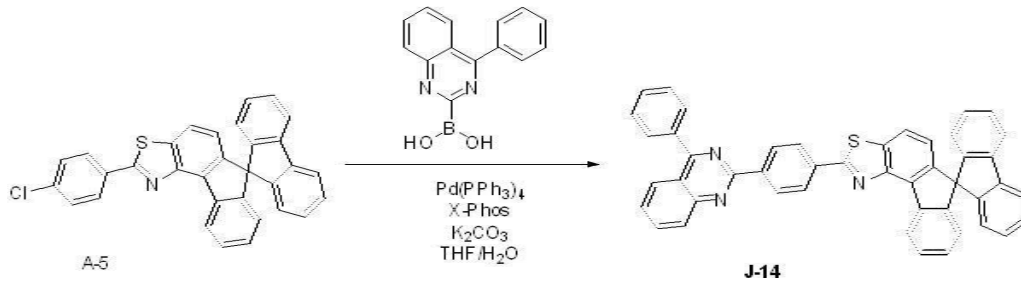


[0371]

[0372] A-1 대신 A-5 (4.84 g, 10.0 mmol) 를 사용하고 (3-(4,6-디페닐-1,3,5-트리아진-2-일)페닐)보로닉산 대신 (4-(4-(나프탈렌-1-일)페닐)퀴나졸린-2-일)보로닉산 (3.76 g, 10.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 합성예 1과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 J-13 (3.74 g, 수율 48%)를 얻었다.

[0373] [Mass]: 779

[0375] **[합성예 14] J-14의 합성**

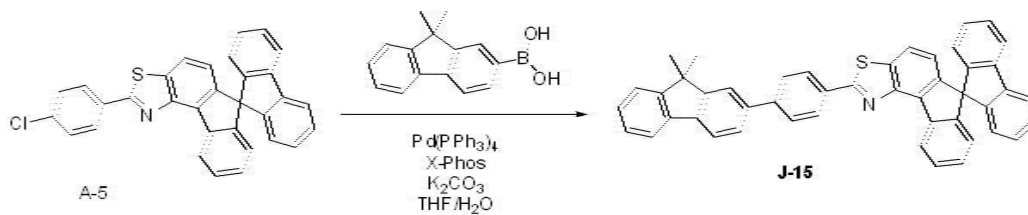


[0376]

[0377] A-1 대신 A-5 (4.84 g, 10.0 mmol) 를 사용하고 (3-(4,6-디페닐-1,3,5-트리아진-2-일)페닐)보로닉산 대신 (4-페닐퀴나졸린-2-일)보로닉산 (2.50 g, 10.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 합성예 1과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 J-14 (3.20 g, 수율 49%)를 얻었다.

[0378] [Mass]: 653

[0380] **[합성예 15] J-15의 합성**

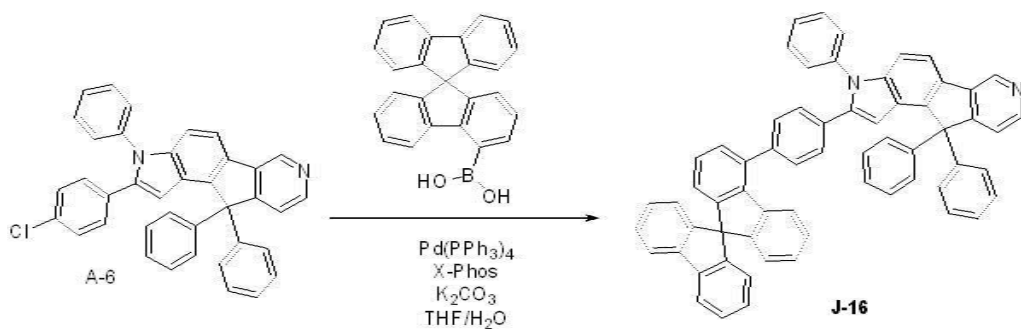


[0381]

[0382] A-1 대신 A-5 (4.84 g, 10.0 mmol) 를 사용하고 (3-(4,6-디페닐-1,3,5-트리아진-2-일)페닐)보로닉산 대신 (9,9-디메틸-9H-플루오렌-2-일)보로닉산 (2.38 g, 10.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 합성예 1과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 J-15 (3.20 g, 수율 50%)를 얻었다.

[0383] [Mass]: 641

[0385] **[합성예 16] J-16의 합성**

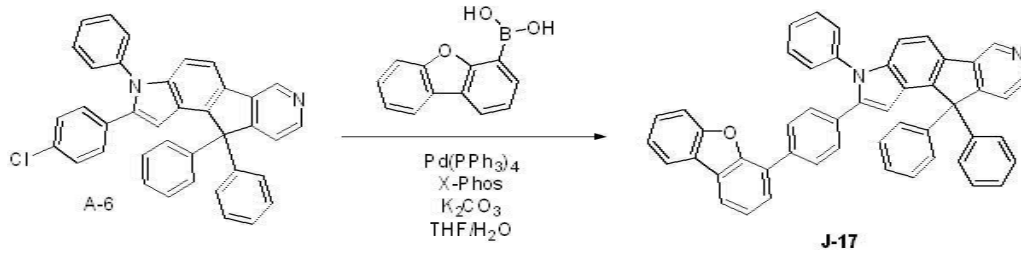


[0386]

[0387] A-1 대신 A-6 (5.45 g, 10.0 mmol) 를 사용하고 (3-(4,6-디페닐-1,3,5-트리아진-2-일)페닐)보로닉산 대신 9,9'-스피로비[플루오렌]-4-일보로닉산 (3.60 g, 10.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 합성예 1과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 J-16 (4.04 g, 수율 49%)를 얻었다.

[0388] [Mass]: 825

[0390] **[합성예 17] J-17의 합성**

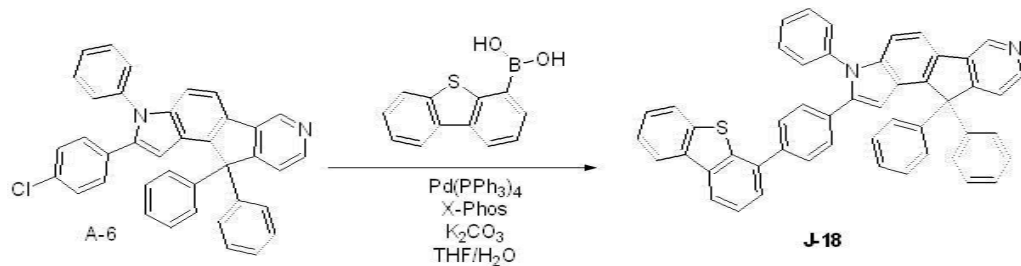


[0391]

[0392] A-1 대신 A-6 (5.45 g, 10.0 mmol) 를 사용하고 (3-(4,6-디페닐-1,3,5-트리아진-2-일)페닐)보로닉산 대신 디벤조[b,d]퓨란-4-일보로닉산 (2.12 g, 10.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 합성에 1과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 J-17 (3.24 g, 수율 48%)를 얻었다.

[0393] [Mass]: 676

[0395] **[합성예 18] J-18의 합성**

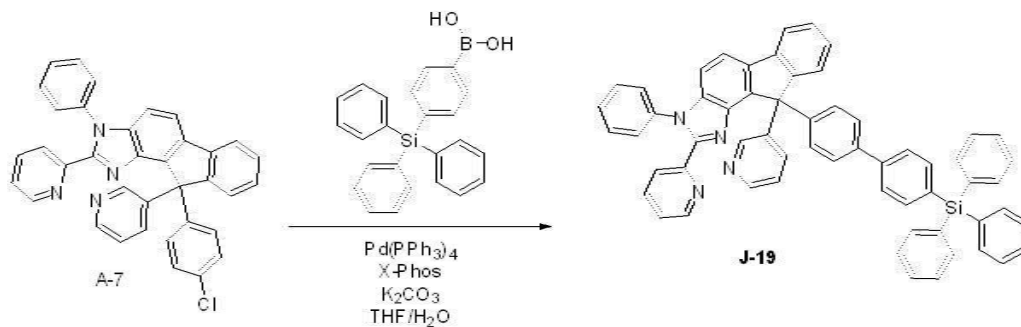


[0396]

[0397] A-1 대신 A-6 (5.45 g, 10.0 mmol) 를 사용하고 (3-(4,6-디페닐-1,3,5-트리아진-2-일)페닐)보로닉산 대신 디벤조[b,d]티오펜-4-일보로닉산 (2.28 g, 10.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 합성에 1과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 J-18 (3.25 g, 수율 47%)를 얻었다.

[0398] [Mass]: 692

[0400] **[합성예 19] J-19의 합성**

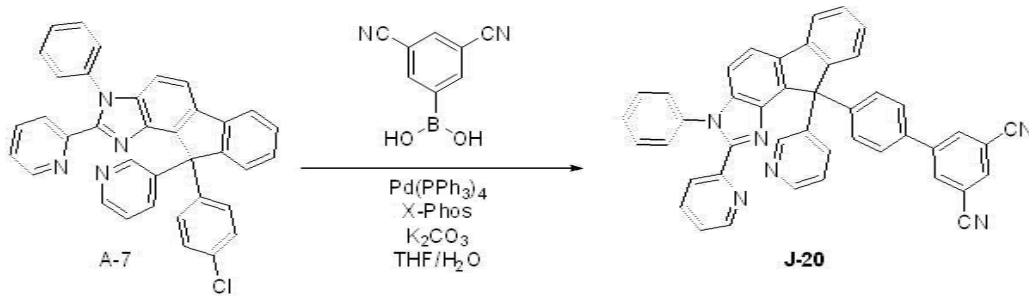


[0401]

[0402] A-1 대신 A-7 (5.47 g, 10.0 mmol) 를 사용하고 (3-(4,6-디페닐-1,3,5-트리아진-2-일)페닐)보로닉산 대신 (4-(트리페닐실릴)페닐)보로닉산 (3.80 g, 10.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 합성에 1과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 J-19 (3.89 g, 수율 46%)를 얻었다.

[0403] [Mass]: 847

[0405] **[합성예 20] J-20의 합성**

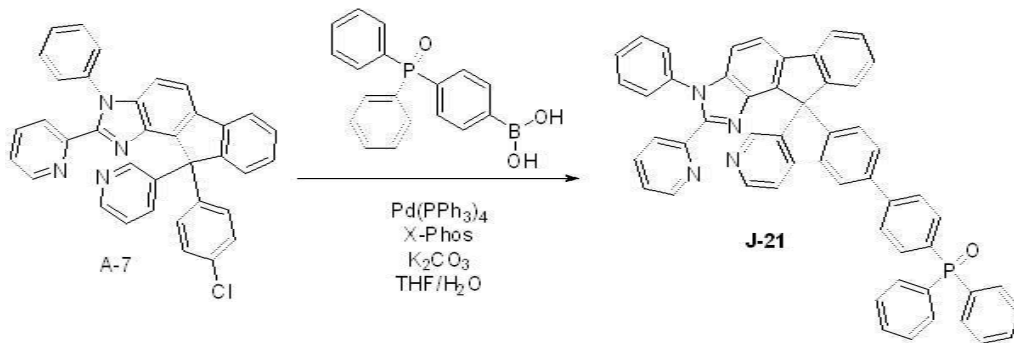


[0406]

[0407] A-1 대신 A-7 (5.47 g, 10.0 mmol) 를 사용하고 (3-(4,6-디페닐-1,3,5-트리아진-2-일)페닐)보로닉산 대신 (3,5-디시아노페닐)보로닉산 (1.71 g, 10.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 합성예 1과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 J-20 (2.87 g, 수율 45%)를 얻었다.

[0408] [Mass]: 638

[0410] **[합성예 21] J-21의 합성**



[0411]

[0412] A-1 대신 A-7 (5.47 g, 10.0 mmol) 를 사용하고 (3-(4,6-디페닐-1,3,5-트리아진-2-일)페닐)보로닉산 대신 (4-(디페닐포스포릴)페닐)보로닉산 (3.22 g, 10.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 합성예 1과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 J-21 (3.47 g, 수율 44%)를 얻었다.

[0413] [Mass]: 788

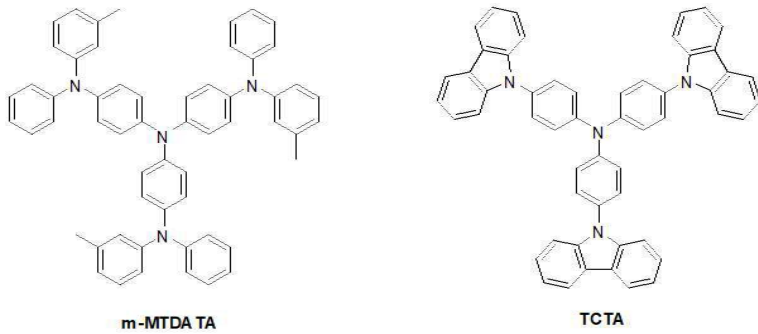
[0415] **[실시에 1 ~ 10] 유기 전계 발광 소자의 제작**

[0416] 상기 합성예에서 합성한 화합물을 통상적으로 알려진 방법으로 고순도 승화정제를 한 후 아래의 과정에 따라 녹색 유기 전계 발광 소자를 제작하였다.

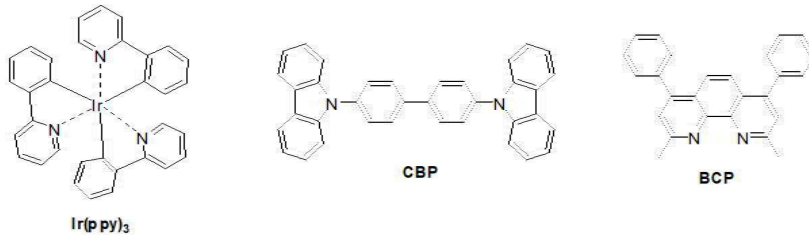
[0417] 먼저, ITO (Indium tin oxide)가 1500Å 두께로 박막 코팅된 유리 기판을 증류수 초음파로 세척하였다. 증류수 세척이 끝나면 이소프로필 알코올, 아세톤, 메탄올 등의 용제로 초음파 세척을 하고 건조시킨 후 UV OZONE 세정기 (Power sonic 405, 화신테크)로 이송시킨 다음 UV를 이용하여 상기 기판을 5분간 세정하고 진공 증착기로 기판을 이송하였다.

[0418] 이렇게 준비된 ITO 투명 전극 위에 m-MTDATA (60 nm)/TCTA (80 nm)/ 90% 하기 표 1의 호스트 화합물 + 10 % Ir(ppy)₃ (300nm)/BCP (10 nm)/Alq₃ (30 nm)/LiF (1 nm)/Al (200 nm) 순으로 적층하여 유기 EL 소자를 제작하였다.

[0419] m-MTDATA, TCTA, Ir(ppy)₃, CBP 및 BCP의 구조는 하기와 같다.



[0420]



[0421]

[0422]

[**비교예 1**] 유기 전계 발광 소자의 제작

[0424] 발광층 형성시 발광 호스트 물질로서 화합물 J-1 대신 CBP를 사용하는 것을 제외하고는 실시예 1과 동일한 과정으로 유기 EL 소자를 제작하였다.

[**평가예**]

[0427] 실시예 1-10 및 비교예 1에서 제작한 각각의 유기 EL 소자에 대하여 전류밀도 10 mA/cm²에서의 구동전압, 전류효율 및 발광 피크를 측정하고, 그 결과를 하기 표 1에 나타내었다.

표 1

[0429]

샘플	호스트	구동 전압 (V)	발광 피크 (nm)	전류효율 (cd/A)
실시예 1	J-1	6.72	517	41.3
실시예 2	J-2	6.73	515	39.7
실시예 3	J-3	6.73	518	38.9
실시예 4	J-4	6.73	518	41.3
실시예 5	J-5	6.48	518	41.3
실시예 6	J-6	6.86	517	43.1
실시예 7	J-7	6.77	515	43.5
실시예 8	J-8	6.66	518	41.4
실시예 9	J-9	6.65	518	42.2
실시예 10	J-10	6.65	517	42
비교예 1	CBP	6.93	516	38.2

[0431]

상기 표 1에 나타난 바와 같이, 본 발명에 따른 화합물(J-1 ~ J-10)을 녹색 유기 전계 발광 소자의 발광층으로 사용하였을 경우(실시예 1 ~ 10) 종래 CBP를 사용한 녹색 유기 전계 발광 소자(비교예 1)와 비교해 볼 때 효율 및 구동전압 면에서 우수한 성능을 나타내는 것을 알 수 있다.