

(12) 특허협력조약에 의하여 공개된 국제출원

(19) 세계지식재산권기구
국제사무국

(43) 국제공개일
2015년 6월 11일 (11.06.2015)



(10) 국제공개번호
WO 2015/084043 A2

- (51) 국제특허분류:
C07D 487/04 (2006.01) H01L 51/50 (2006.01)
C09K 11/06 (2006.01)
- (21) 국제출원번호: PCT/KR2014/011745
- (22) 국제출원일: 2014년 12월 3일 (03.12.2014)
- (25) 출원언어: 한국어
- (26) 공개언어: 한국어
- (30) 우선권정보:
10-2013-0150875 2013년 12월 5일 (05.12.2013) KR
- (71) 출원인: 주식회사 두산 (DOOSAN CORPORATION)
[KR/KR]; 100-730 서울시 중구 장충단로 275, Seoul (KR).
- (72) 발명자: 이용환 (LEE, Yonghwan); 463-916 경기도 성남시 분당구 양현로 509, 202동 1503호 (야탑동, 매화마을아파트), Gyeonggi-do (KR). 김영배 (KIM, Young Bae); 445-772 경기도 화성시 효행로 291번길 26, 107동 702호 (기안동, 신일해피트리아파트), Gyeonggi-do (KR). 박성진 (PARK, Sung Jin); 448-505 경기도 경기도 용인시 수지구 풍덕천로 160번길 19-9 202호 (풍덕천동, 설화주택 1), Gyeonggi-do (KR). 이창준 (LEE, Chang Jun); 425-722 경기도 안산시 단원구 당곡1로 10, 535-404 (고잔동, 주공 5단지아파트), Gyeonggi-do (KR). 신진용 (SHIN, Jinyong); 448-515 경기도 용인시 수지구 침곡로 16, 505동 1007호 (상현동, 서원마을금회베스트빌 5단지아파트), Gyeonggi-do (KR). 김태형 (KIM, Tae Hyung); 463-786 경기도 성남시분당구 내정로 55, 326동 1201호 (정자동, 상록마을우성아파트), Gyeonggi-do (KR). 백영미 (BEAK, Youngmi); 448-737 경기도 용인시 수지구 성북2로 76번길 31, 105동

1104호 (성북동, 대우푸르지오아파트), Gyeonggi-do (KR).

(74) 대리인: 특허법인 한빛 (HANBEOT PATENT & LAW FIRM); 120-013 서울시 서대문구 충정로 7 구세군빌딩 15층, Seoul (KR).

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

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

공개:

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

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

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

(57) Abstract: The present invention relates to a novel organic compound and an organic electroluminescent device comprising the same, wherein the organic compound is contained in one or more organic layers, preferably in a light-emitting layer, so that the luminescence efficiency, operation voltage and lifespan of the device can be improved.

(57) 요약서: 본 발명은 신규 유기 화합물 및 이를 포함하는 유기 전계 발광 소자에 관한 것으로서, 상기 유기 화합물을 하나 이상의 유기층, 바람직하게는 발광층에 포함함으로써, 소자의 발광효율, 구동 전압, 수명 등이 향상될 수 있다.



WO 2015/084043 A2

명세서

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

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

배경기술

- [2] 1950년대 Bernanose의 유기 박막 발광 관측을 시점으로 하여, 1965년 안트라센 단결정을 이용한 청색 전기발광으로 유기 전계 발광(electroluminescent, EL) 소자(이하, 간단히 '유기 EL 소자'로 칭함)에 대한 연구가 이어져 왔다. 1987년 Tang(Tang)에 의하여 정공층과 발광층의 기능층으로 나눈 적층구조의 유기 EL 소자가 제시되었다. 이후, 고효율, 고수명의 유기 EL 소자를 만들기 위하여, 소자 내 각각의 특징적인 유기물 층을 도입하는 형태로 발전하여 왔으며, 이에 사용되는 특화된 물질의 개발로 이어졌다.
- [3] 유기 전계 발광 소자에서는 두 전극 사이에 전압을 걸어 주면 양극에서는 정공이 유기물층으로 주입되고, 음극에서는 전자가 유기물층으로 주입된다. 주입된 정공과 전자가 만났을 때 엑시톤(exciton)이 형성되며, 이 엑시톤이 바닥상태로 떨어질 때 빛이 나게 된다. 이때, 유기물층으로 사용되는 물질은 그 기능에 따라, 발광 물질, 정공 주입 물질, 정공 수송 물질, 전자 수송 물질, 전자 주입 물질 등으로 분류될 수 있다.
- [4] 발광 물질은 발광색에 따라 청색, 녹색, 적색 발광 물질과, 보다 나은 천연색을 구현하기 위해 필요한 노란색 및 주황색 발광 물질로 구분될 수 있다. 또한, 색순도의 증가와 에너지 전이를 통한 발광 효율을 증가시키기 위하여, 발광 물질로서 호스트/도판트 계를 사용할 수 있다.
- [5] 도판트 물질은 유기 물질을 사용하는 형광 도판트와 Ir, Pt 등의 중원자(heavy atoms)가 포함된 금속 착체 화합물을 사용하는 인광 도판트로 나눌 수 있다. 이때, 인광 재료는 이론적으로 형광 재료에 비해 최대 4배의 발광 효율을 향상시킬 수 있기 때문에, 인광 도판트 뿐만 아니라 인광 호스트 재료들에 대한 연구가 많이 진행되고 있다.
- [6] 현재까지 정공 주입층, 정공 수송층, 정공 차단층, 전자 수송층으로는 NPB, BCP, Alq₃ 등이 널리 알려져 있으며, 발광 재료로는 안트라센 유도체들이 형광 도판트/호스트 재료로서 보고되고 있다. 특히, 발광 재료 중 효율 향상 측면에서 큰 장점을 가지고 있는 인광 재료들은 청색(blue), 녹색(green), 적색(red) 도판트 재료로서 Firpic, Ir(ppy)₃, (acac)Ir(btp)₂ 등의 Ir을 포함하는 금속 착체 화합물이 사용되고 있다. 현재까지는 4,4-dicarbazolybiphenyl(CBP)가 인광 호스트 재료로서 우수한 특성을 나타내고 있다.
- [7] 그러나, 기존의 재료들은 발광 특성 측면에서는 유리한 면이 있으나,

유리전이온도가 낮아 열적 안정성이 떨어지기 때문에, OLED 소자에서의 수명 측면에서 만족할 만한 수준이 되지 못하는 실정이다. 따라서, 보다 성능이 뛰어난 재료의 개발이 요구되고 있다.

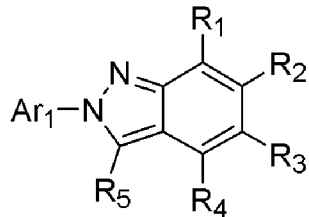
발명의 상세한 설명

기술적 과제

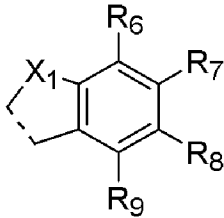
- [8] 본 발명은 높은 유리 전이온도로 인해 열적 안정성이 우수하면서, 정공과 전자의 결합력을 향상시킬 수 있는 신규 유기 화합물을 제공하는 것을 목적으로 한다.
- [9] 또, 본 발명은 상기 신규 유기 화합물을 포함하여 구동전압, 발광효율 등이 향상된 유기 전계 발광 소자를 제공하는 것을 목적으로 한다.

과제 해결 수단

- [10] 본 발명은 하기 화학식 1로 표시되는 화합물을 제공한다:
- [11] 화학식 1



- [12] 상기 화학식 1에서,
- [13] R₁ 내지 R₅는 서로 동일하거나 상이하며, 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 시아노, 치환 또는 비치환된 C₁~C₄₀의 알킬기, 치환 또는 비치환된 C₂~C₄₀의 알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₂~C₄₀의 알키닐기, 치환 또는 비치환된 C₆~C₄₀의 아릴기, 치환 또는 비치환된 핵원자수 5 내지 40의 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 C₆~C₄₀의 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C₁~C₄₀의 알킬옥시기, 치환 또는 비치환된 C₆~C₄₀의 아릴아민기, 치환 또는 비치환된 C₃~C₄₀의 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C₁~C₄₀의 알킬실릴기, 치환 또는 비치환된 C₁~C₄₀의 알킬보론기, 치환 또는 비치환된 C₆~C₄₀의 아릴보론기, 치환 또는 비치환된 C₆~C₄₀의 아릴포스핀기, 치환 또는 비치환된 C₆~C₄₀의 아릴포스핀옥사이드기, 및 치환 또는 비치환된 C₆~C₄₀의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택되거나, 또는 인접하는 기와 결합하여 축합 고리를 형성할 수 있으며,
- [14] 다만, R₁ 및 R₂, R₂ 및 R₃, R₃ 및 R₄ 중 적어도 하나는 서로 결합하여 하기 화학식 2로 표시되는 축합 고리를 형성하고;
- [15] 화학식 2



- [16] 상기 화학식 2에서,
- [17] 점선은 화학식 1의 R_1 및 R_2 , R_2 및 R_3 , R_3 및 R_4 중 적어도 하나와 결합하여 축합이 이루어지는 부위를 의미하며;
- [18] X_1 은 O, S, Se, N(Ar_2), C(Ar_3)(Ar_4) 및 Si(Ar_5)(Ar_6)으로 이루어진 군에서 선택되고;
- [19] Ar_1 내지 Ar_6 는 서로 동일하거나 상이하며, 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬기, 치환 또는 비치환된 $C_2\sim C_{40}$ 의 알케닐기, 치환 또는 비치환된 $C_2\sim C_{40}$ 의 알키닐기, 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴기, 치환 또는 비치환된 핵원자수 5 내지 40의 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬옥시기, 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴아민기, 치환 또는 비치환된 $C_3\sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬실릴기, 치환 또는 비치환된 $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬보론기, 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴보론기, 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴포스핀기, 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴포스핀옥사이드기 및 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택되며;
- [20] R_6 내지 R_9 는 서로 동일하거나 상이하며, 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 시아노, 치환 또는 비치환된 $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬기, 치환 또는 비치환된 $C_2\sim C_{40}$ 의 알케닐기, 치환 또는 비치환된 $C_2\sim C_{40}$ 의 알키닐기, 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴기, 치환 또는 비치환된 핵원자수 5 내지 40의 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬옥시기, 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴아민기, 치환 또는 비치환된 $C_3\sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬실릴기, 치환 또는 비치환된 $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬보론기, 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴보론기, 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴포스핀기, 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴포스핀옥사이드기 및 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택되거나, 또는 인접하는 기와 결합하여 축합 고리를 형성할 수 있으며;
- [21] 이때, 상기 R_1 내지 R_9 , 및 Ar_1 내지 Ar_6 의 알킬기, 알케닐기, 알키닐기, 아릴기, 헤테로아릴기, 아릴옥시기, 알킬옥시기, 아릴아민기, 시클로알킬기, 헤테로시클로알킬기, 알킬실릴기, 알킬보론기, 아릴보론기, 아릴포스핀기, 아릴포스핀옥사이드기 및 아릴실릴기는 각각 독립적으로 중수소, 할로젠, 시아노기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_2\sim C_{40}$ 의 알케닐기, $C_2\sim C_{40}$ 의 알키닐기, $C_6\sim C_{40}$ 의

아릴기, 핵원자수 5 내지 40의 헤테로아릴기, $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴옥시기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬옥시기, $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴아민기, $C_3\sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬실릴기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬보론기, $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴보론기, $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴포스핀기, $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴포스핀옥사이드기 및 $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴실릴기로 이루어진 군으로부터 선택되는 1종 이상의 치환기로 치환될 수 있고, 다만 상기 치환기가 복수인 경우, 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

- [22] 또한, 본 발명은 양극, 음극, 및 상기 양극과 음극 사이에 개재(介在)된 1층 이상의 유기물층을 포함하는 유기 전계 발광 소자로서, 상기 1층 이상의 유기물층 중에서 적어도 하나는 상기 화합물을 포함하는 것이 특징인 유기 전계 발광 소자를 제공한다.

- [23] 상기 화합물을 포함하는 유기물층은 발광층이고, 이때 상기 화합물은 호스트 물질로 사용될 수 있다.

발명의 효과

- [24] 본 발명의 화학식 1로 표시되는 화합물은 열적 안정성 및 인광 특성이 우수하기 때문에, 유기 전계 발광 소자의 발광층에 적용될 수 있다.

- [25] 따라서, 본 발명의 화학식 1로 표시되는 화합물을 인광 호스트 물질로 사용할 경우, 종래 호스트 물질에 비해 우수한 발광 성능, 낮은 구동전압, 높은 효율 및 장수명을 갖는 유기 전계 발광 소자를 제조할 수 있고, 나아가 성능, 수명이 크게 향상된 풀 칼라 디스플레이 패널도 제조할 수 있다.

발명의 실시를 위한 형태

- [26] 이하, 본 발명을 상세히 설명한다.

- [27] 본 발명에 따른 신규 화합물은 인다졸 모이어티(indazole moiety)의 말단에 인돌 모이어티(indole moiety) 또는 벤젠이 축합된 5원 헤테로환 모이어티(예컨대, 인덴, 벤조싸이오펜, 벤조퓨란, 벤조실롤)가 축합되어 기본 골격을 이루며, 이러한 기본 골격에 다양한 치환체가 결합된 구조로서, 상기 화학식 1로 표시되는 것을 특징으로 한다. 이러한 화학식 1로 표시되는 화합물은 종래 유기 EL 소자용 재료 [예: 4,4-dicarbazolybiphenyl (이하, 'CBP'로 표시함)]보다 분자량이 클 뿐만 아니라, 넓은 에너지 밴드갭을 가지면서, 정공과 전자의 결합력을 높일 수 있다. 따라서, 상기 화학식 1의 화합물을 유기 EL 소자에 이용할 경우, 소자의 구동 전압, 효율(발광효율, 전력효율), 수명 및 휘도 측면이 향상될 수 있다.

- [28] 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 인다졸 모이어티(indazole moiety)의 말단에 인돌 모이어티(indole moiety) 또는 벤젠이 축합된 5원 헤테로환 모이어티가 축합된 구조로 인해서 넓은 밴드갭을 가질 수 있다. 뿐만 아니라, 상기 화합물은 상기 기본 골격에 결합된 다양한 방향족 환 치환체로 인해 분자 전체가 바이폴라(bipolar) 특성을 가지면서, 정공과 전자의 결합력을 높일 수 있다. 따라서, 유기 EL 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, 발광효율, 구동전압, 수명 특성 등이 개선될 수 있다. 그리고, 상기 치환체들에 따라 에너지 레벨이 조절될 수 있어 넓은 밴드갭(sky blue ~ red)을 갖게 되고, 따라서 발광층뿐만 아니라, 정공 수송층, 정공 주입층, 전자수송층, 전자주입층 등으로도 응용될 수 있다.

- [29] 또한, 상기 화학식 1의 화합물은 다수 도입된 다양한 방향족 환(aromatic ring) 치환체로 인해 분자량이 유의적으로 증대됨으로써, 유리전이온도가 향상될 수 있고, 이로 인해 종래 CBP 보다 높은 열적 안정성을 가질 수 있다. 또한, 상기 인다졸 모이어티의 말단에 인돌 모이어티(indole moiety) 또는 벤젠이 축합된 5원 헤테로환 모이어티가 축합됨으로써, 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.
- [30] 아울러, 본 발명에 따른 화학식 1의 화합물을 유기 EL 소자의 정공 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 EL 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.
- [31] 본 발명에 따른 화학식 1로 표시되는 화합물에서 R_1 내지 R_5 는 서로 동일하거나 상이하며, 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 시아노, 치환 또는 비치환된 $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬기, 치환 또는 비치환된 $C_2 \sim C_{40}$ 의 알케닐기, 치환 또는 비치환된 $C_2 \sim C_{40}$ 의 알키닐기, 치환 또는 비치환된 $C_6 \sim C_{40}$ 의 아릴기, 치환 또는 비치환된 핵원자수 5 내지 40의 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 $C_6 \sim C_{40}$ 의 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬옥시기, 치환 또는 비치환된 $C_6 \sim C_{40}$ 의 아릴아민기, 치환 또는 비치환된 $C_3 \sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬실릴기, 치환 또는 비치환된 $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬보론기, 치환 또는 비치환된 $C_6 \sim C_{40}$ 의 아릴보론기, 치환 또는 비치환된 $C_6 \sim C_{40}$ 의 아릴포스핀기, 치환 또는 비치환된 $C_6 \sim C_{40}$ 의 아릴포스핀옥사이드기 및 치환 또는 비치환된 $C_6 \sim C_{40}$ 의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택되거나, 또는 인접하는 기와 결합하여 축합 고리를 형성할 수 있으며,
- [32] 바람직하게 R_1 내지 R_5 는 서로 동일하거나 상이하며, 각각 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 $C_6 \sim C_{40}$ 의 아릴기, 치환 또는 비치환된 핵원자수 5 내지 40의 헤테로아릴기, 및 치환 또는 비치환된 $C_6 \sim C_{40}$ 의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택될 수 있다.
- [33] 이때, 상기 R_1 내지 R_5 의 알킬기, 알케닐기, 알키닐기, 아릴기, 헤테로아릴기,

아릴옥시기, 알킬옥시기, 아릴아민기, 시클로알킬기, 헤테로시클로알킬기, 알킬실릴기, 알킬보론기, 아릴보론기, 아릴포스핀기, 아릴포스핀옥사이드기 및 아릴실릴기는 각각 독립적으로 중수소, 할로젠, 시아노기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_2\sim C_{40}$ 의 알케닐기, $C_2\sim C_{40}$ 의 알키닐기, $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 40의 헤테로아릴기, $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴옥시기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬옥시기, $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴아민기, $C_3\sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬실릴기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬보론기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴보론기, $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴포스핀기, $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴포스핀옥사이드기 및 $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴실릴기로 이루어진 군으로부터 선택되는 1종 이상의 치환기로 치환될 수 있되, 상기 치환기가 복수인 경우, 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

- [34] 다만, R_1 및 R_2 , R_2 및 R_3 , R_3 및 R_4 중 적어도 하나는 서로 축합(fused)하여 상기 화학식 2로 표시되는 축합고리를 형성한다. 예를 들어, 상기 R_1 및 R_2 이 서로 결합하여 상기 화학식 2로 표시되는 축합 고리를 형성할 경우, 하기 화학식 3 또는 4로 표시되는 화합물이 형성된다.
- [35] 상기 화학식 2에서 점선은 화학식 1의 R_1 및 R_2 , R_2 및 R_3 , R_3 및 R_4 중 적어도 하나와 축합이 이루어지는 부위를 의미한다.
- [36] 상기 X_1 는 O, S, Se, N(Ar_2), C(Ar_3)(Ar_4) 및 Si(Ar_5)(Ar_6)으로 이루어진 군에서 선택되고, 바람직하게 N(Ar_2)일 수 있다.
- [37] 상기 Ar_1 내지 Ar_6 은 서로 동일하거나 상이하며, 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬기, 치환 또는 비치환된 $C_2\sim C_{40}$ 의 알케닐기, 치환 또는 비치환된 $C_2\sim C_{40}$ 의 알키닐기, 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴기, 치환 또는 비치환된 핵원자수 5 내지 40의 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬옥시기, 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴아민기, 치환 또는 비치환된 $C_3\sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬실릴기, 치환 또는 비치환된 $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬보론기, 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴보론기, 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴포스핀기, 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴포스핀옥사이드기 및 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택된다.
- [38] 이때, 상기 Ar_1 내지 Ar_6 의 알킬기, 알케닐기, 알키닐기, 아릴기, 헤테로아릴기, 아릴옥시기, 알킬옥시기, 아릴아민기, 시클로알킬기, 헤테로시클로알킬기, 알킬실릴기, 알킬보론기, 아릴보론기, 아릴포스핀기, 아릴포스핀옥사이드기 및 아릴실릴기는 각각 독립적으로 중수소, 할로젠, 시아노기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_2\sim C_{40}$ 의 알케닐기, $C_2\sim C_{40}$ 의 알키닐기, $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 40의 헤테로아릴기, $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴옥시기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬옥시기, $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴아민기, $C_3\sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬실릴기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬보론기, $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴보론기, $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴포스핀기, $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴포스핀옥사이드기 및 $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴실릴기로 이루어진

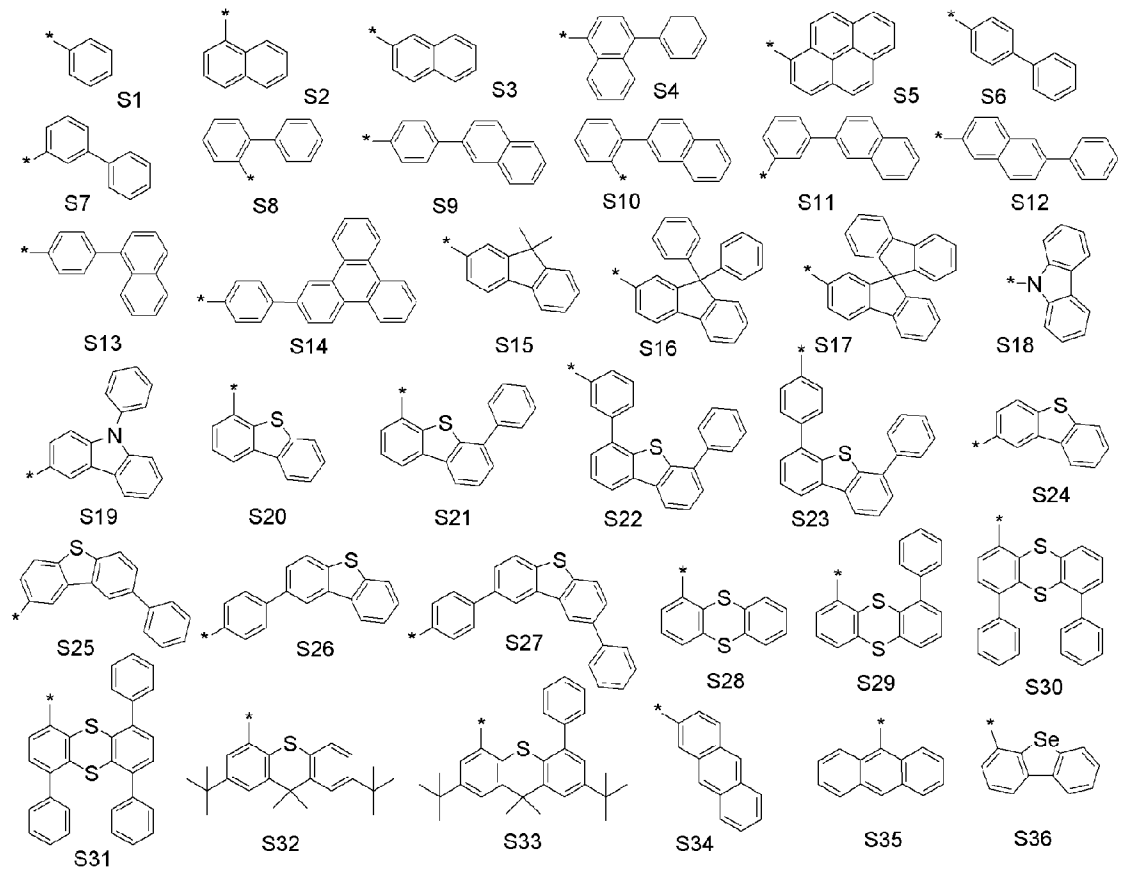
군으로부터 선택되는 1종 이상의 치환기로 치환될 수 있고, 다만 상기 치환기가 복수인 경우, 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

- [39] 바람직하게 상기 Ar_1 내지 Ar_6 은 서로 동일하거나 상이하며, 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴기 및 치환 또는 비치환된 핵원자수 5 내지 40의 헤테로아릴기로 이루어진 군으로부터 선택될 수 있다.
- [40] 이때, 상기 Ar_1 내지 Ar_6 의 아릴기 및 헤테로아릴기는 각각 독립적으로 중수소, 할로젠, 시아노기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_2\sim C_{40}$ 의 알케닐기, $C_2\sim C_{40}$ 의 알키닐기, $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 40의 헤테로아릴기, $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴옥시기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬옥시기, $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴아민기, $C_3\sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬실릴기, 및 $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴실릴기로 이루어진 군으로부터 선택되는 1종 이상의 치환기로 치환될 수 있고, 다만 상기 치환기가 복수인 경우, 서로 동일하거나 상이할 수 있다.
- [41] 상기 R_6 내지 R_9 는 서로 동일하거나 상이하며, 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 시아노, 치환 또는 비치환된 $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬기, 치환 또는 비치환된 $C_2\sim C_{40}$ 의 알케닐기, 치환 또는 비치환된 $C_2\sim C_{40}$ 의 알키닐기, 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴기, 치환 또는 비치환된 핵원자수 5 내지 40의 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬옥시기, 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴아민기, 치환 또는 비치환된 $C_3\sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬실릴기, 치환 또는 비치환된 $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬보론기, 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴보론기, 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴포스핀기, 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴포스핀옥사이드기 및 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택되거나, 또는 인접하는 기와 결합하여 축합 고리를 형성할 수 있다.
- [42] 바람직하게 R_6 내지 R_9 는 서로 동일하거나 상이하며, 각각 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴기, 치환 또는 비치환된 핵원자수 5 내지 40의 헤테로아릴기 및 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택될 수 있다.
- [43] 이때, 상기 R_6 내지 R_9 의 알킬기, 알케닐기, 알키닐기, 아릴기, 헤테로아릴기, 아릴옥시기, 알킬옥시기, 아릴아민기, 시클로알킬기, 헤테로시클로알킬기, 알킬실릴기, 알킬보론기, 아릴보론기, 아릴포스핀기, 아릴포스핀옥사이드기 및 아릴실릴기는 각각 독립적으로 중수소, 할로젠, 시아노기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_2\sim C_{40}$ 의 알케닐기, $C_2\sim C_{40}$ 의 알키닐기, $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 40의 헤테로아릴기, $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴옥시기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬옥시기, $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴아민기, $C_3\sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬실릴기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬보론기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴보론기, $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴포스핀기, $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴포스핀옥사이드기 및 $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴실릴기로 이루어진 군으로부터 선택되는 1종 이상의 치환기로 치환될 수 있고, 다만 상기 치환기가

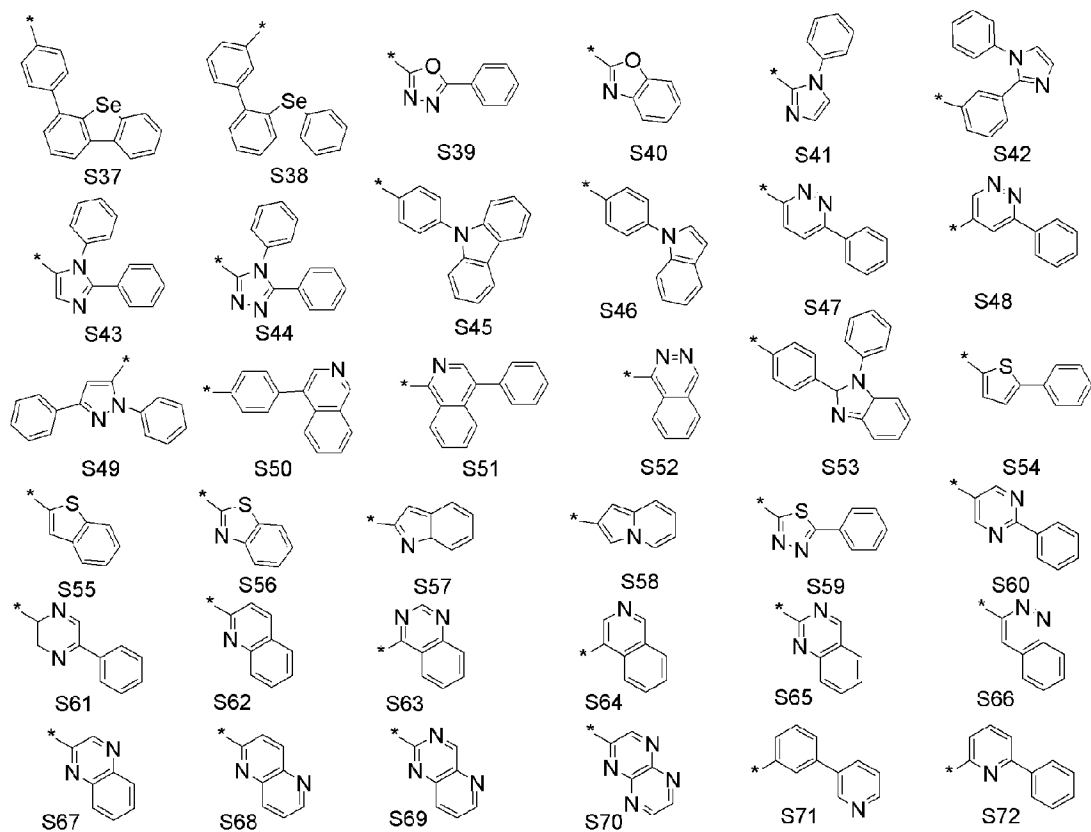
복수인 경우, 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

[44] 본 발명에 따른 화학식 1의 화합물에서, 바람직하게 R_1 내지 R_9 , 및 Ar_1 내지 Ar_6 은 각각 독립적으로 수소, 또는 하기 치환기 S1 내지 S206으로 이루어진 군에서 선택될 수 있는데, 이에 한정되는 것은 아니다.

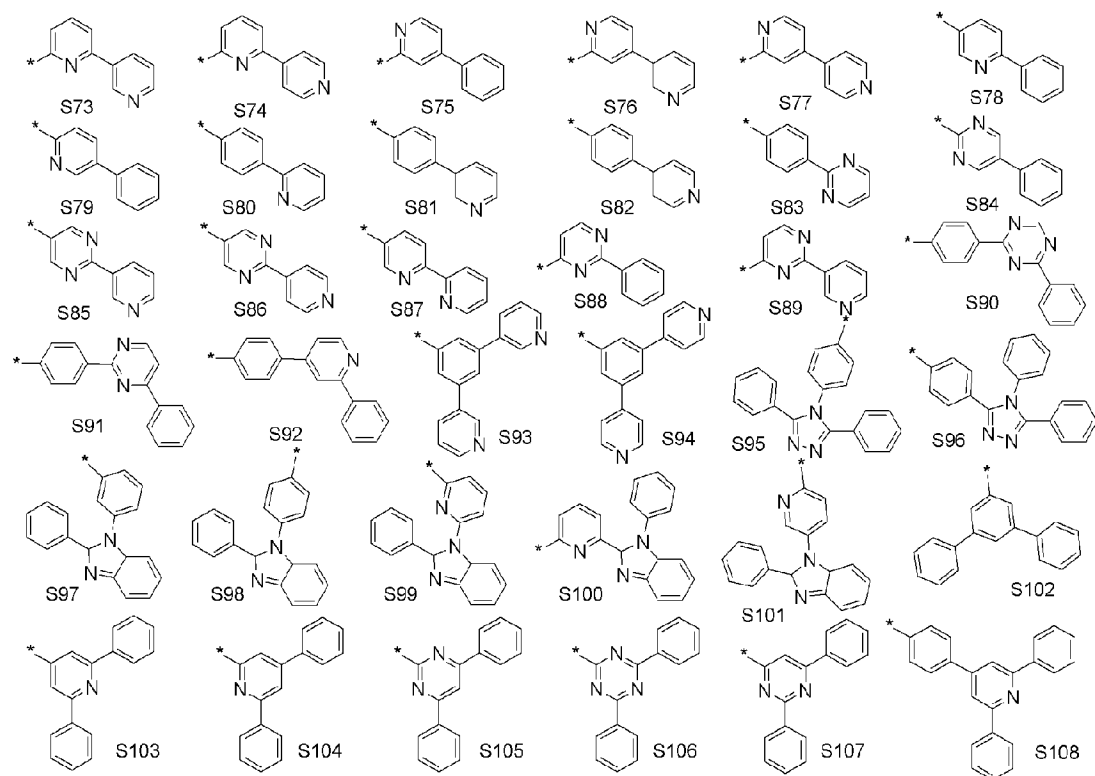
[45]



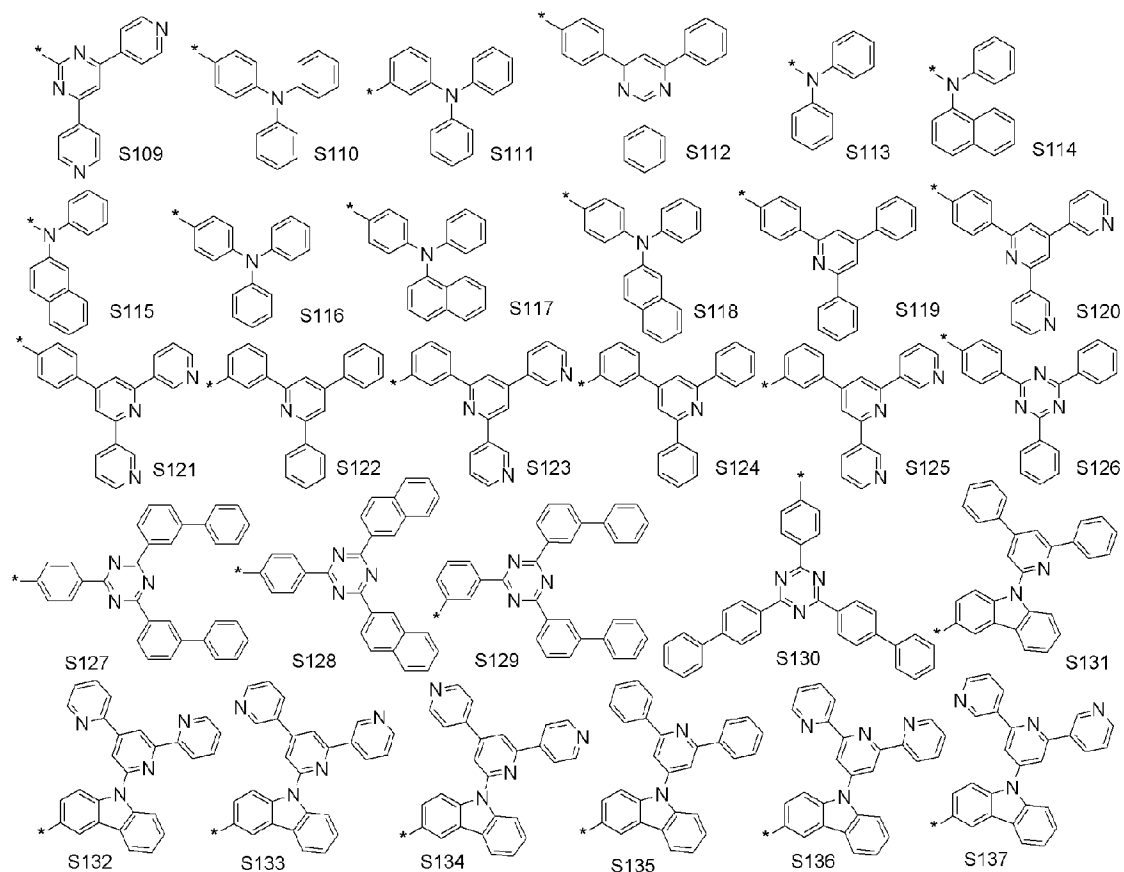
[46]



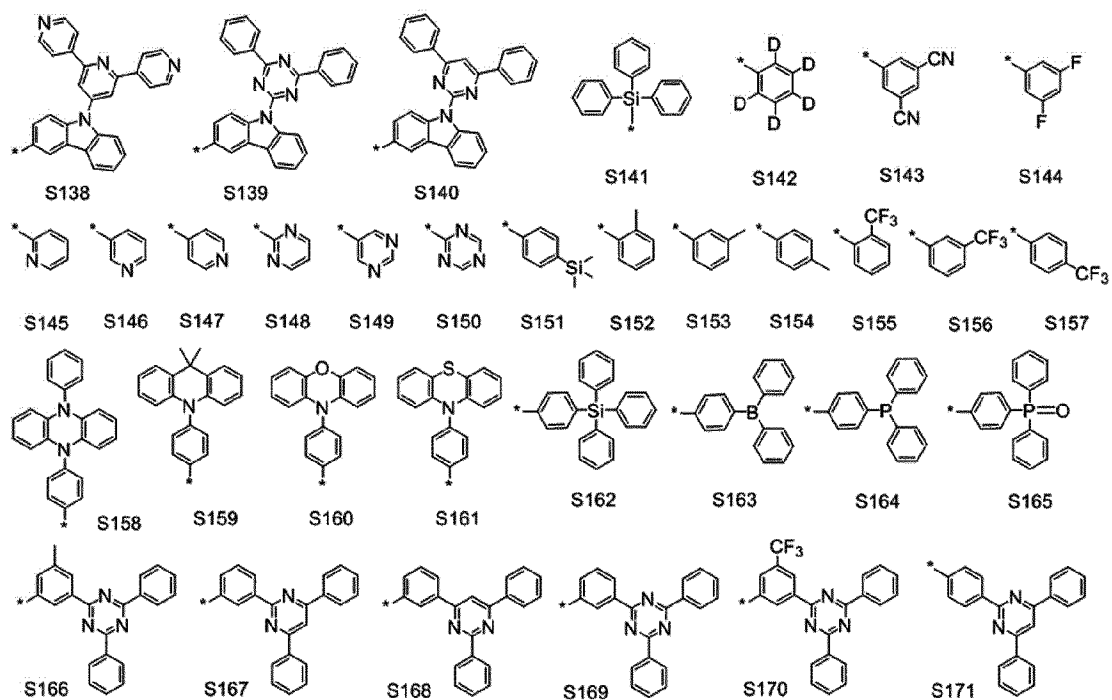
[47]



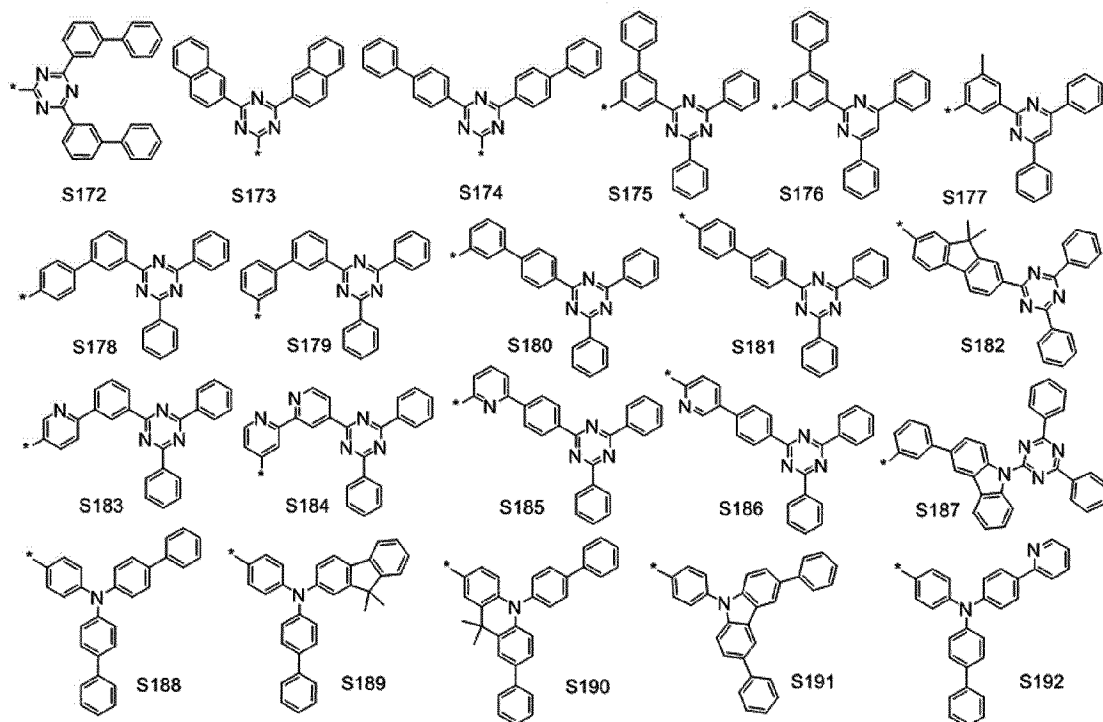
[48]



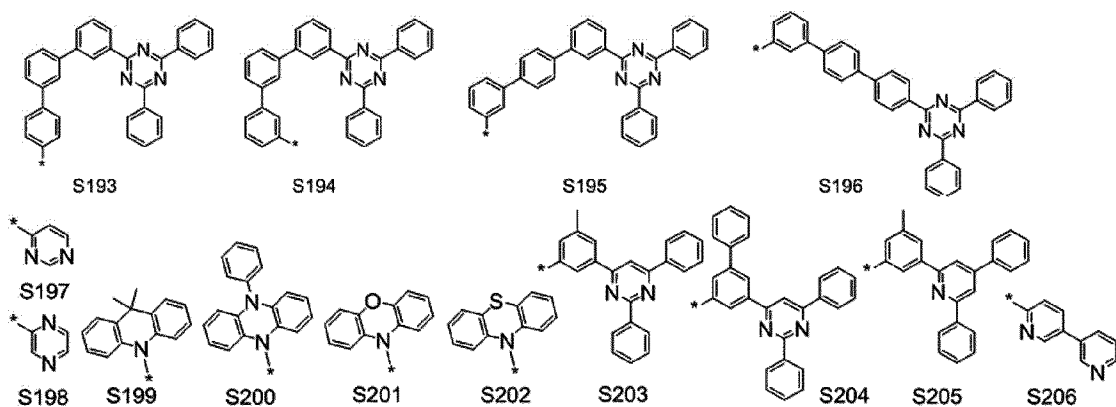
[49]



[50]

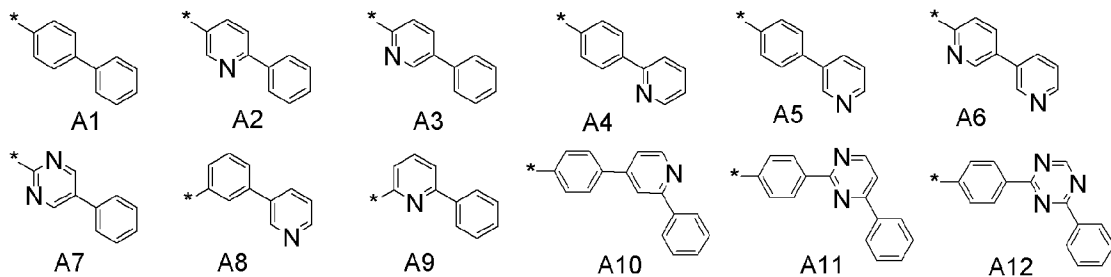


[51]

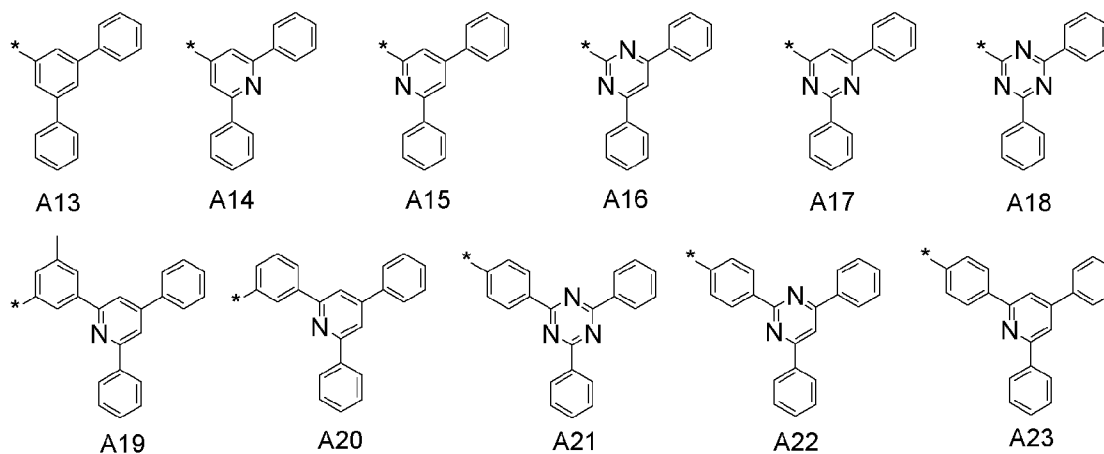


[52] 상기 화학식 1의 화합물에서, 상기 Ar₁ 내지 Ar₆은 서로 동일하거나 상이하며, 각각 독립적으로 하기 치환기 A1 내지 A66으로 이루어진 군에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

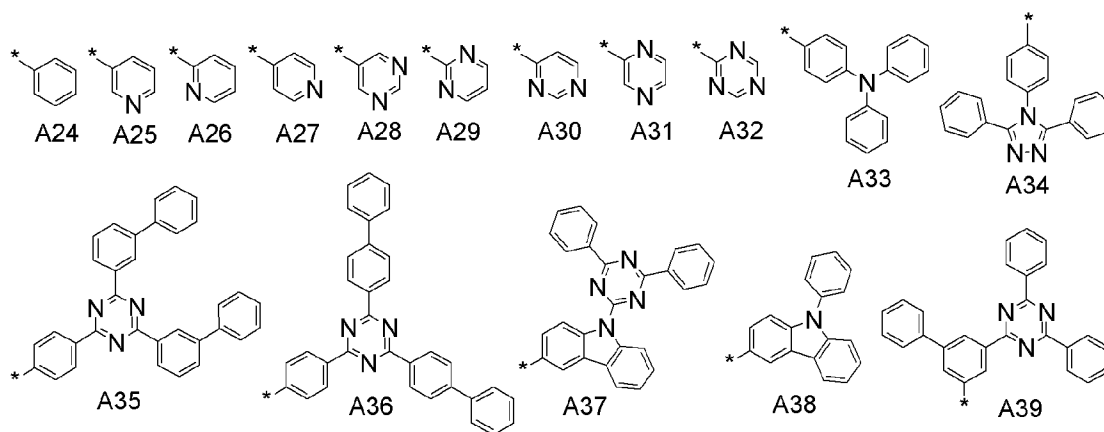
[53]



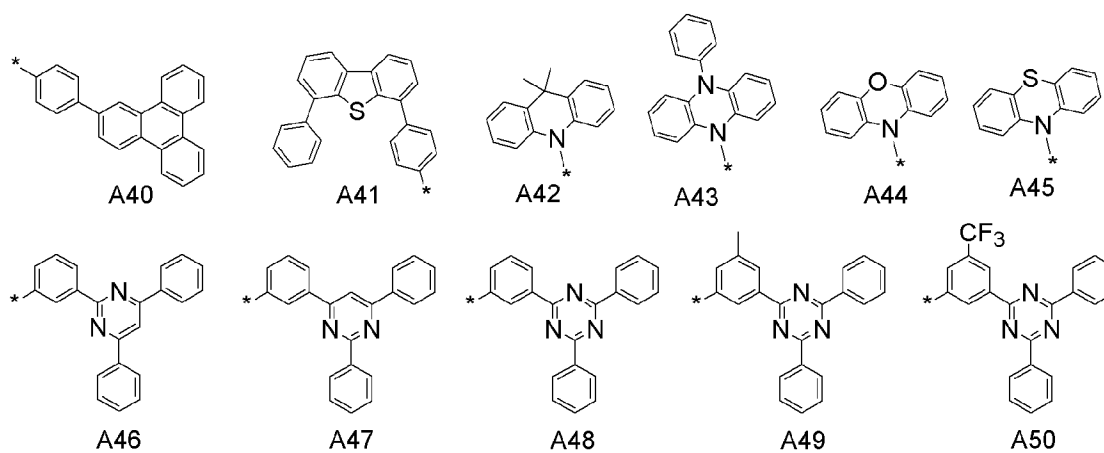
[54]



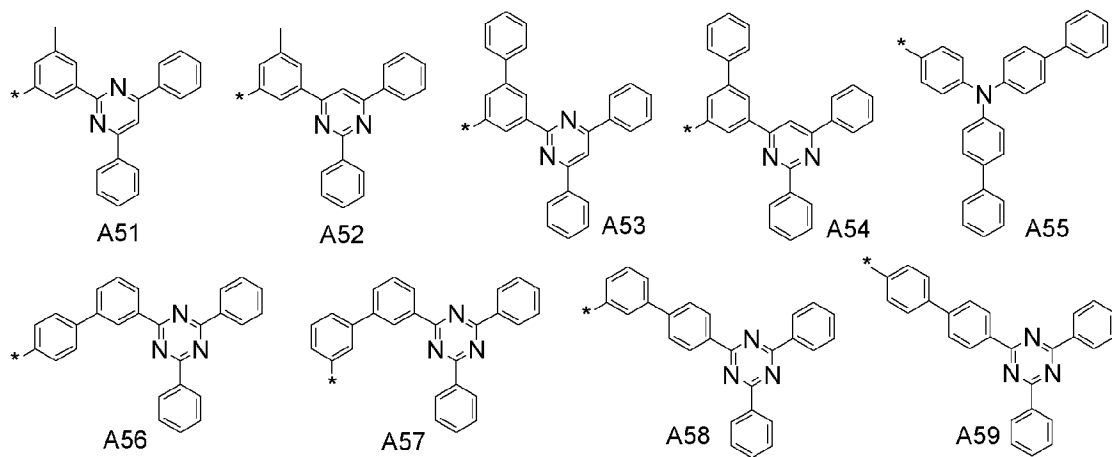
[55]



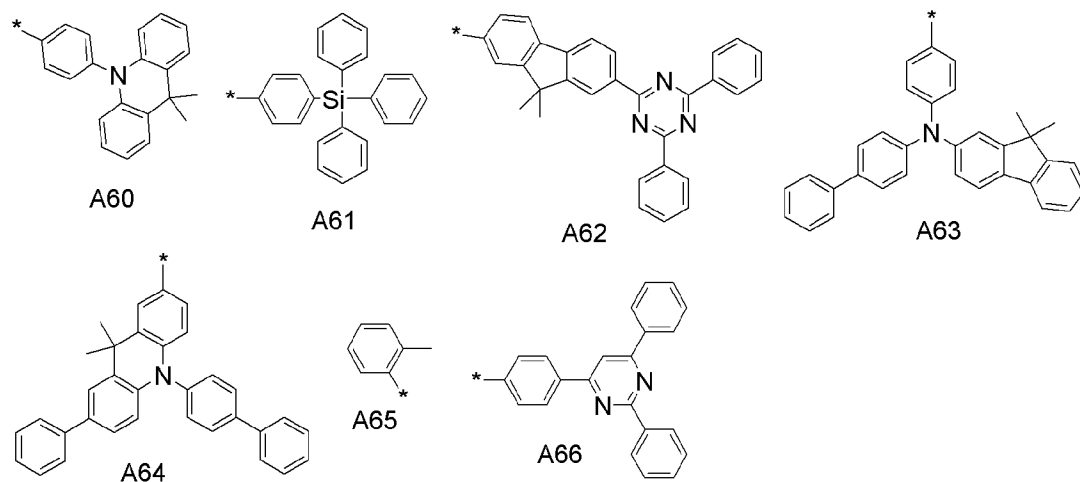
[56]



[57]

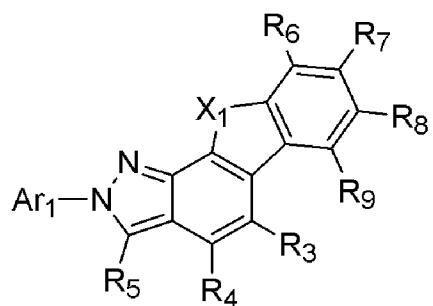


[58]

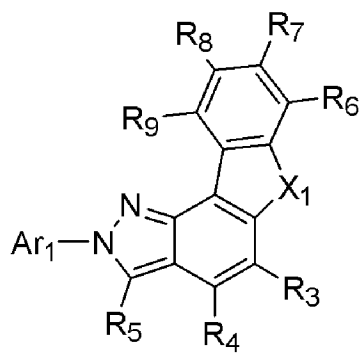


[59] 본 발명에 따른 화학식 1로 표시되는 화합물의 예로는 하기 화학식 3 내지 화학식 8으로 표시되는 화합물 등이 있는데, 이에 한정되지 않는다.

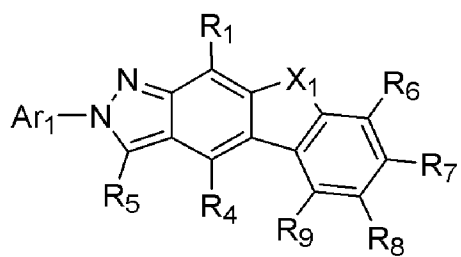
[60] 화학식 3



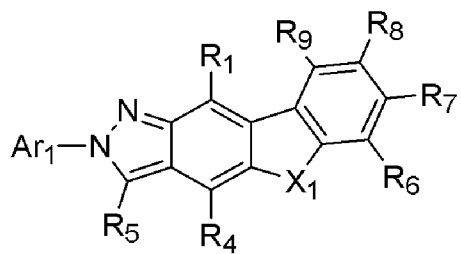
[61] 화학식 4



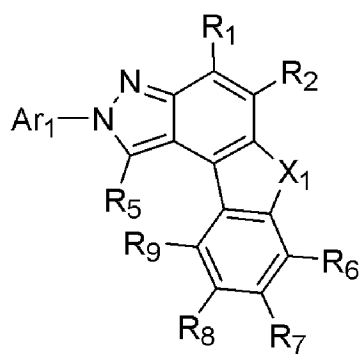
[62] 화학식 5



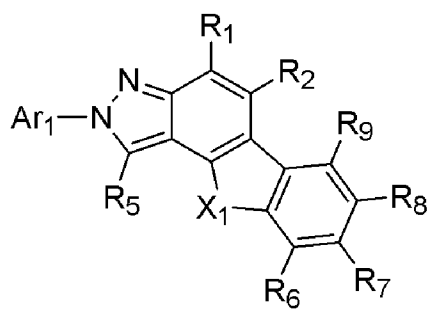
[63] 화학식 6



[64] 화학식 7

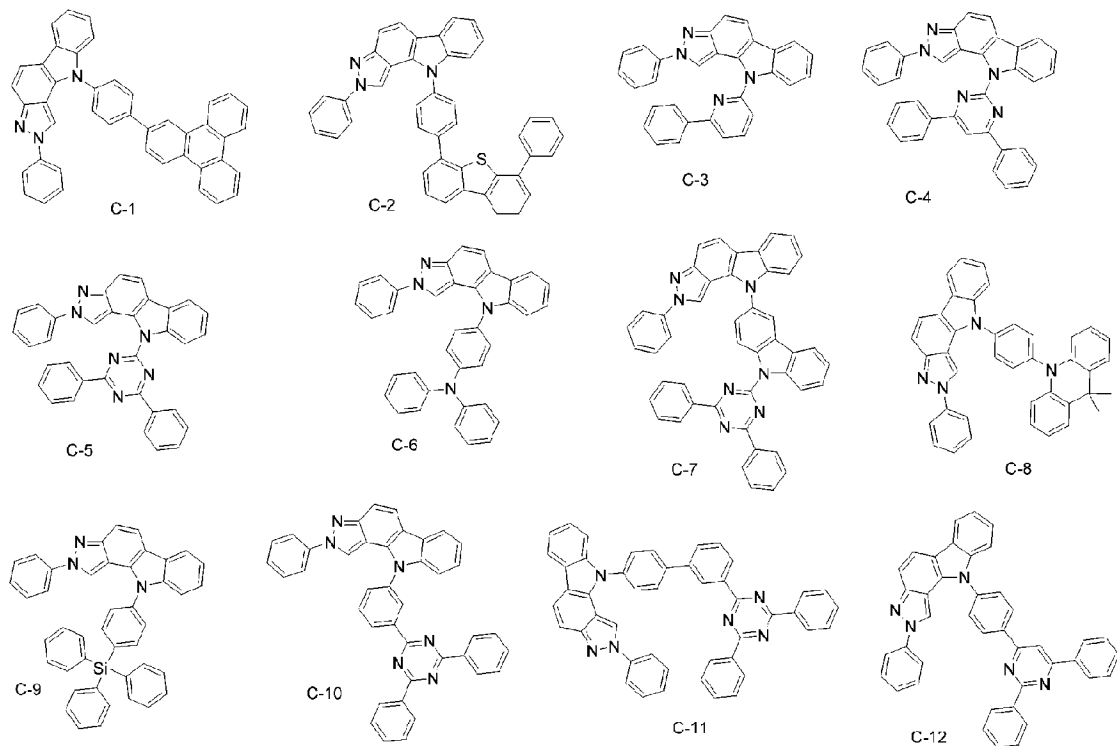


[65] 화학식 8

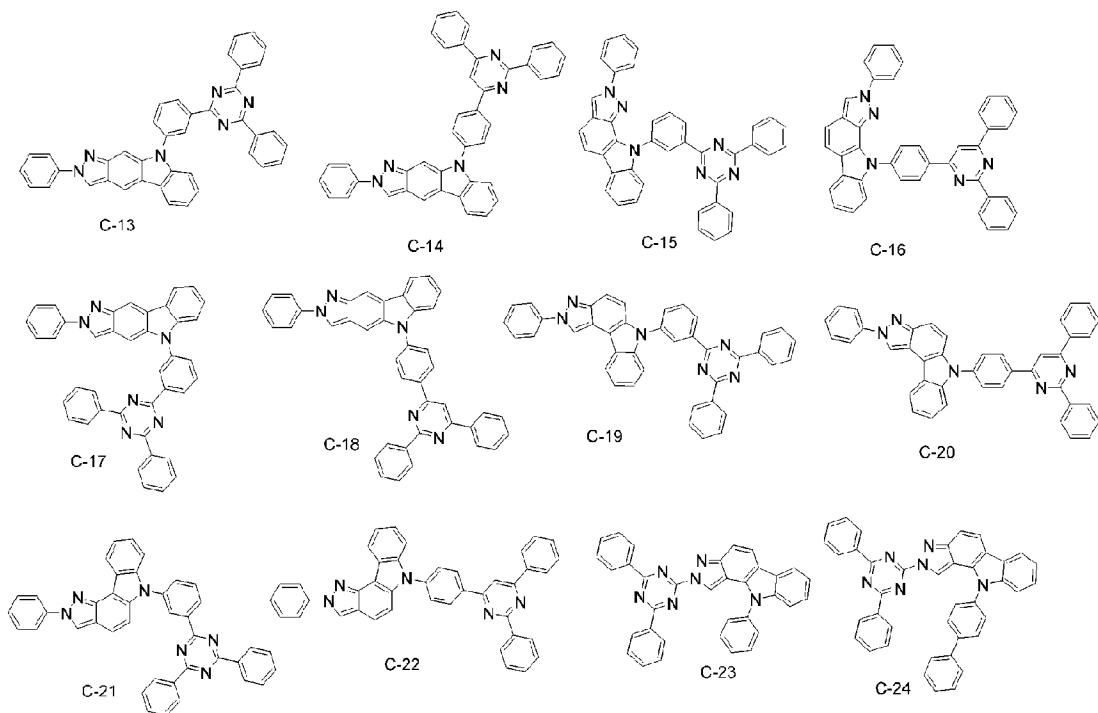


- [66] 상기 화학식 3 내지 화학식 8 에서,
 [67] 상기 R₁ 내지 R₉, Ar₁ 및 X₁은 각각 상기 화학식 1에서 정의된 바와 같다.
 [68]
 [69] 상기 화학식 1로 표시되는 화합물의 대표적인 예로는 하기 화합물들이 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

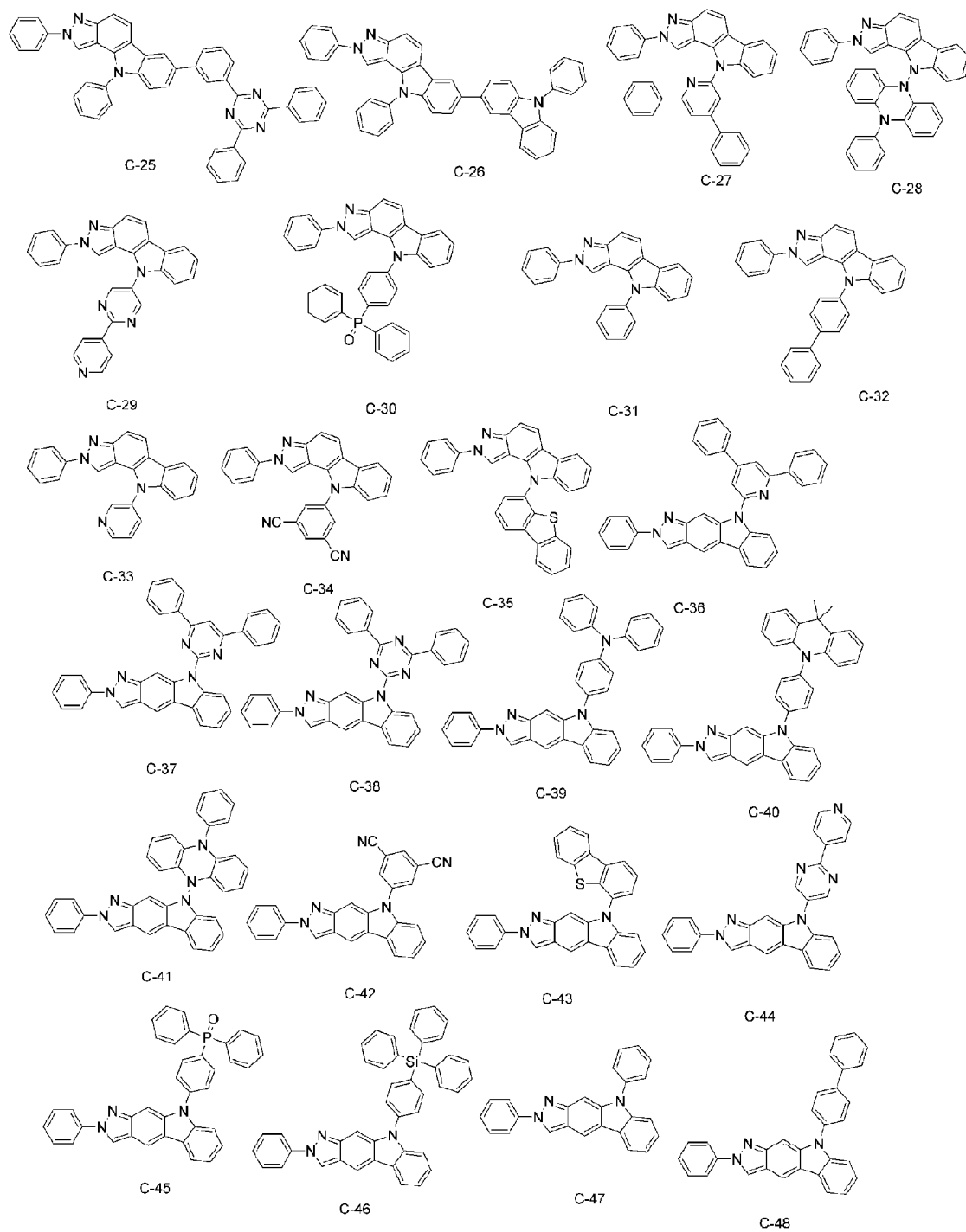
[70]



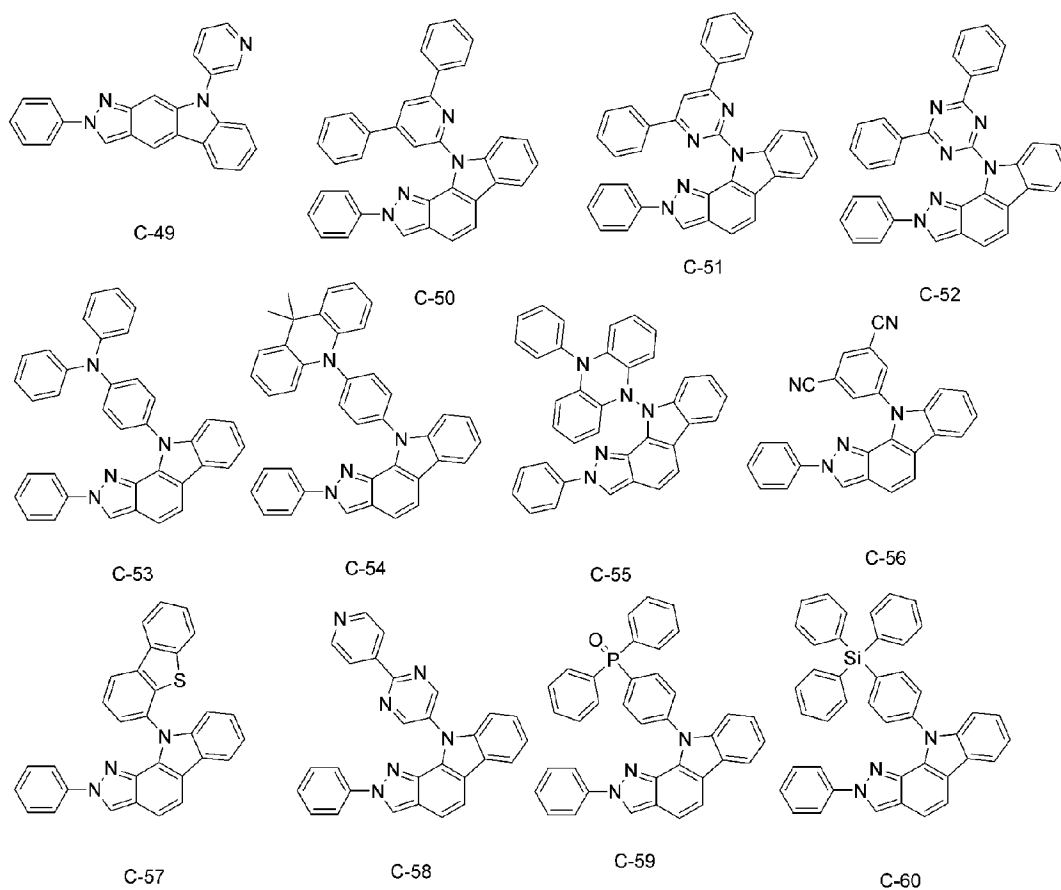
[71]



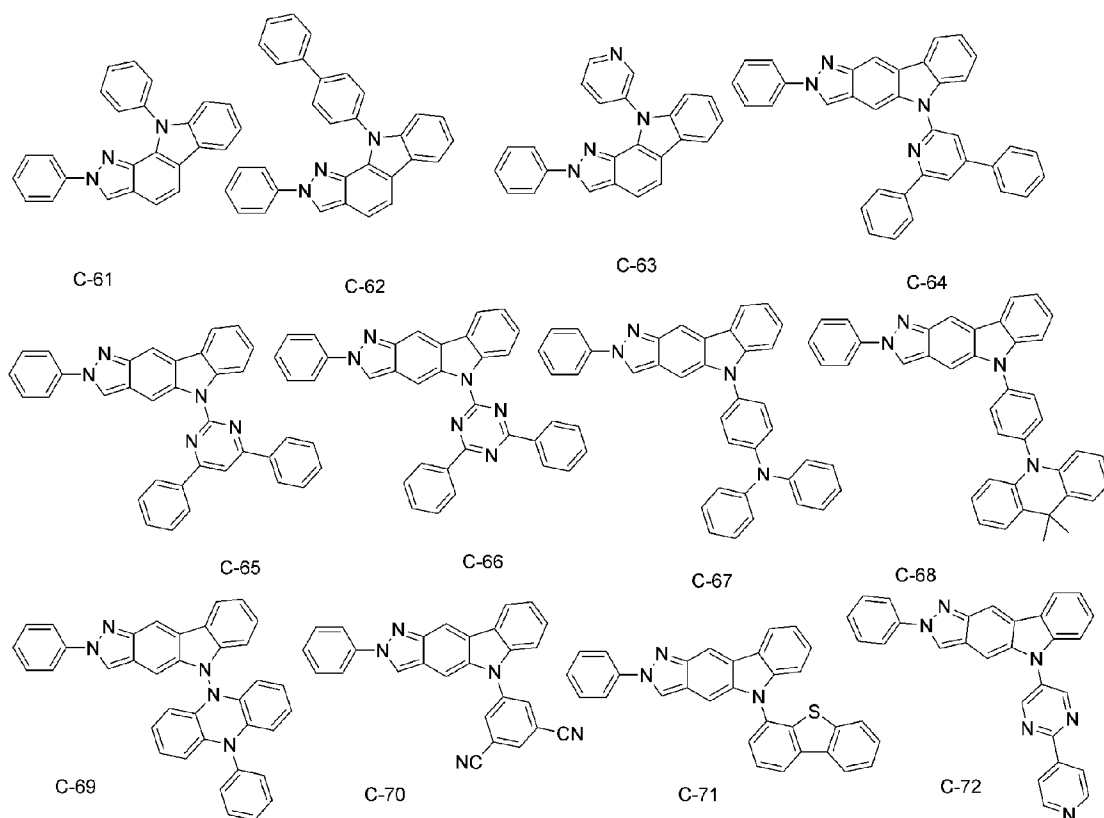
[72]



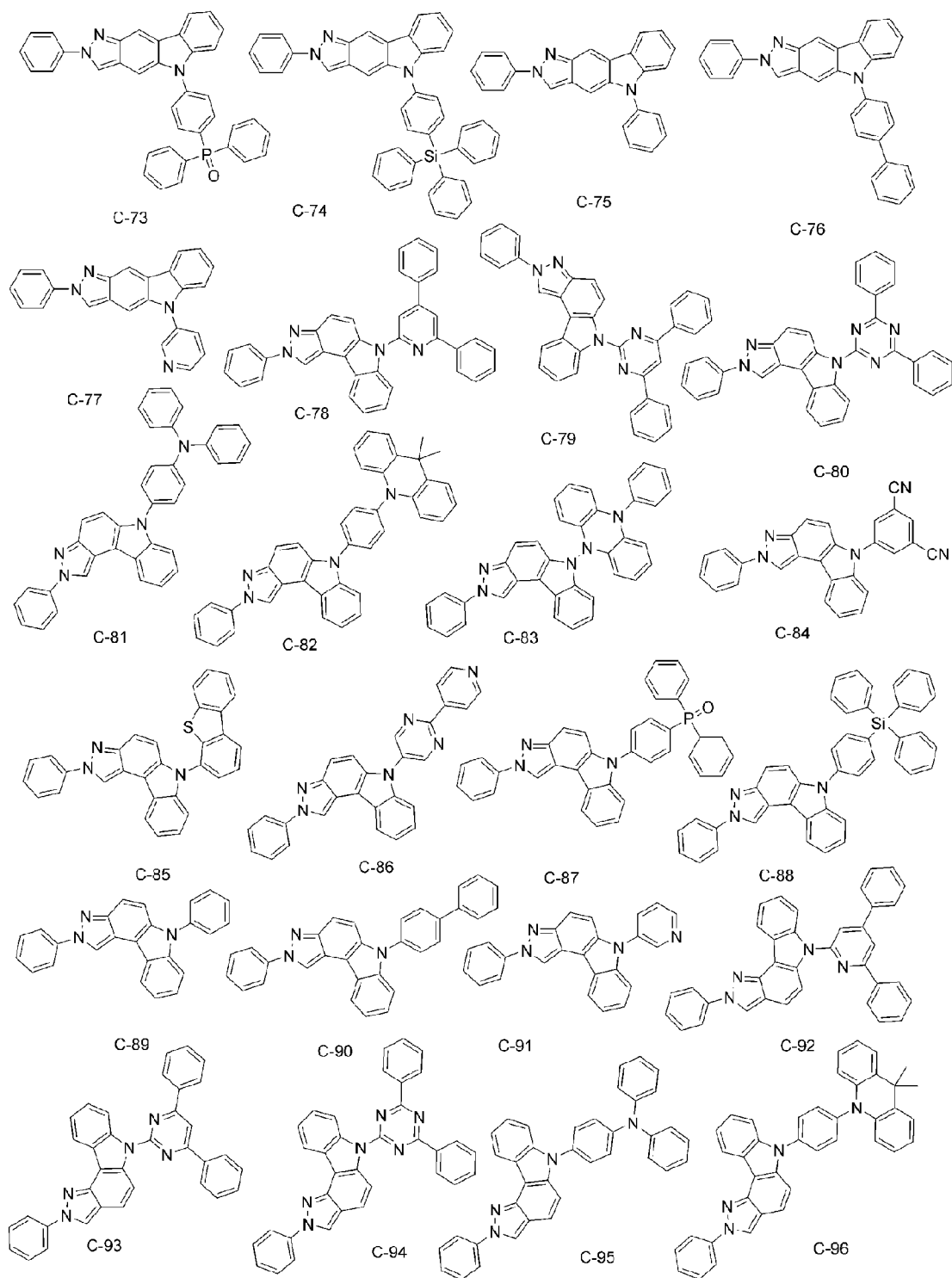
[73]



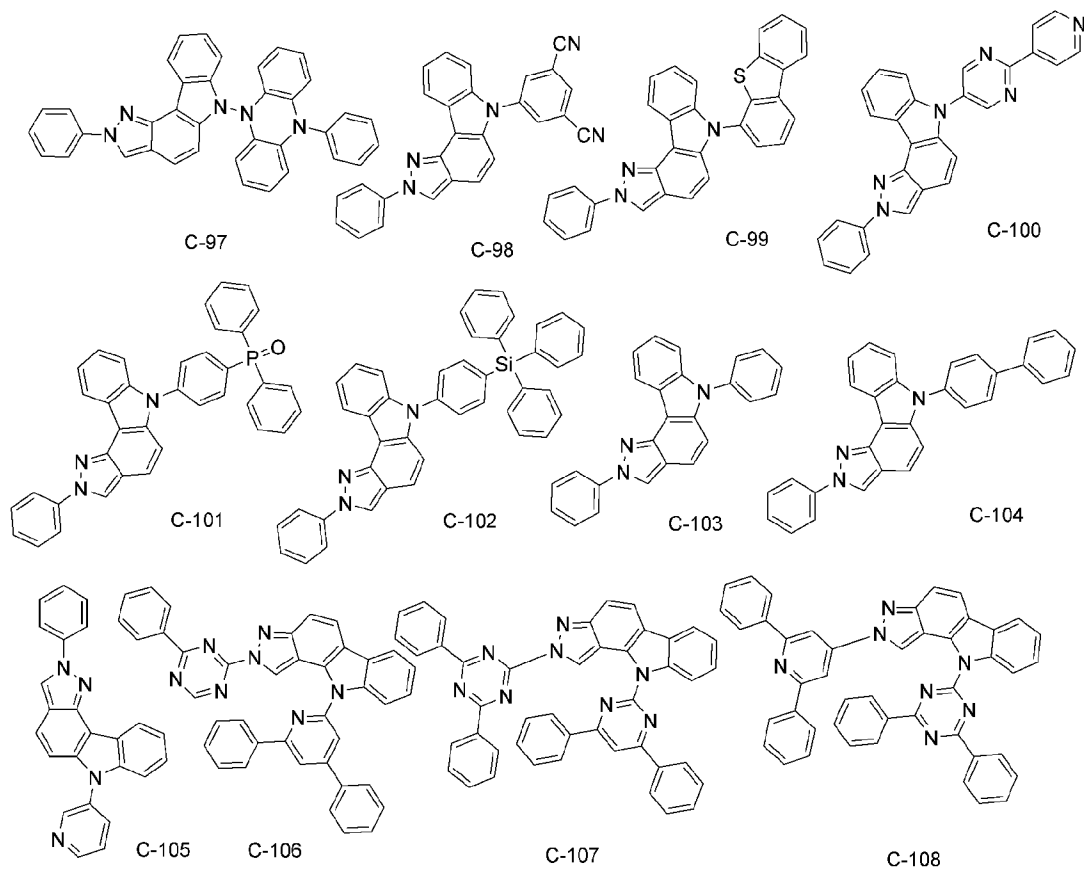
[74]



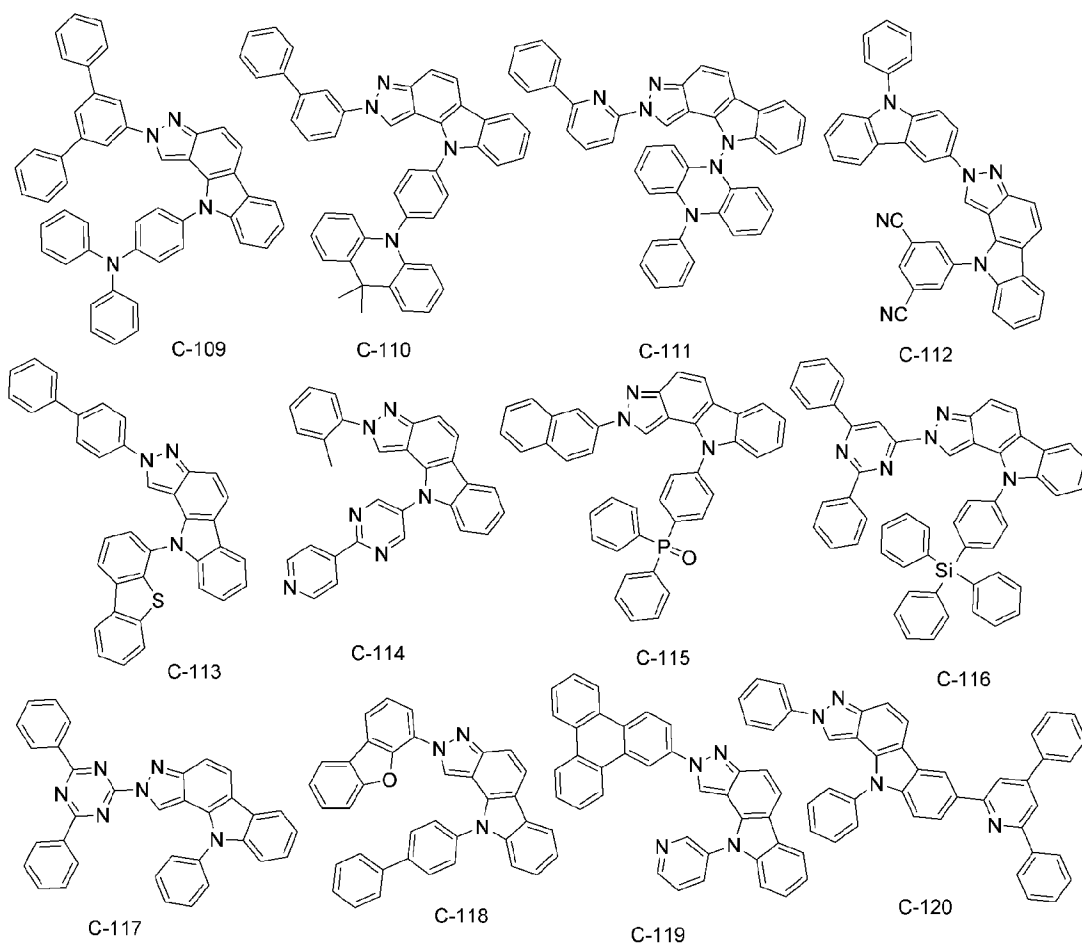
[75]



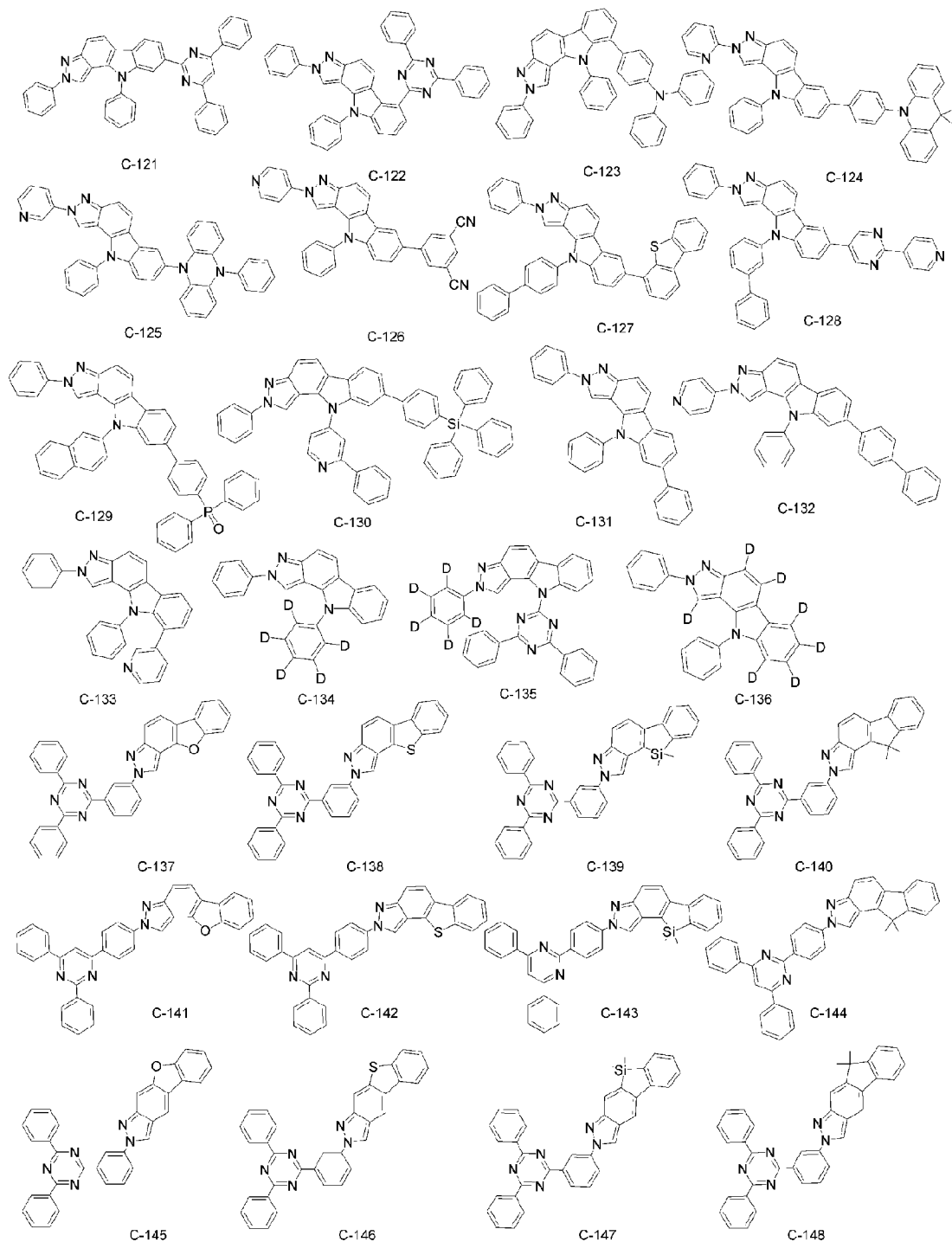
[76]



[77]



[78]



[79]

[80]

본 발명에서 사용된 "비치환된 알킬"은 탄소수 1 내지 40의 직쇄 또는 측쇄의 포화 탄화수소에서 유래되는 1가의 치환기이며, 이의 예로는 메틸, 에틸, 프로필, 이소부틸, sec-부틸, 펜틸, iso-아밀, 헥실 등을 포함한다.

[81]

"비치환된 알케닐(alkenyl)"은 탄소-탄소 이중 결합을 1개 이상 가진, 탄소수 2 내지 40의 직쇄 또는 측쇄의 불포화 탄화수소에서 유래되는 1가의 치환기이며, 이의 예로는 비닐(vinyl), 알릴(allyl), 이소프로펜일(isopropenyl), 2-부텐일(2-butenyl) 등이 있으며, 이에 한정되는 것은 아니다.

- [82] "비치환된 알키닐(alkynyl)"은 탄소-탄소 삼중 결합을 1개 이상 가진, 탄소수 2 내지 40의 직쇄 또는 측쇄의 불포화 탄화수소에서 유래되는 1가의 치환기이며, 이의 예로는 에타인일(ethynyl), 2-프로파인일(2-propynyl) 등이 있는데, 이에 제한되는 것은 아니다.
- [83] "비치환된 아릴"은 단독 고리 또는 2 이상의 고리가 조합된, 탄소수 6 내지 60의 방향족 탄화수소로부터 유래된 1가의 치환기를 의미한다. 2 이상의 고리가 서로 단순 부착(pendant)되거나 축합된(fused) 형태로 부착될 수 있다. 아릴의 예로는 페닐, 나프틸, 페난트릴, 안트릴 등이 포함되며 이에 한정되는 것은 아니다.
- [84] "비치환된 헤테로아릴"은 핵원자수 5 내지 40의 모노헤테로사이클릭 또는 폴리헤테로사이클릭 방향족 탄화수소로부터 유래된 1가의 치환기를 의미한다. 고리 중 하나 이상의 탄소, 바람직하게는 1 내지 3개의 탄소가 N, O, S 또는 Se와 같은 헤테로원자로 치환된다. 2 이상의 고리가 서로 단순 부착(pendant)되거나 축합된(fused) 형태로 부착될 수 있고, 나아가 아릴기와의 축합된 형태도 포함하는 것으로 해석한다. 헤테로아릴의 예로는 피리딜, 피라지닐, 피리미디닐, 피리다지닐, 트리아지닐과 같은 6-원 모노사이클릭 고리; 페녹사티에닐(phenoxathieryl), 인돌리지닐(indoliziny), 인돌릴(indolyl), 퓨리닐(puriny), 퀴놀릴(quinolyl), 벤조티아졸(benzothiazole), 카바졸릴(carbazolyl)과 같은 폴리사이클릭 고리를 포함하고, 2-푸라닐, N-이미다졸릴, 2-이속사졸릴, 2-피리디닐, 2-피리미디닐 등도 포함하는 것으로 해석한다.
- [85] "비치환된 아릴옥시"는 RO-로 표시되는 1가의 치환기로서, 상기 R은 탄소수 5 내지 60의 아릴이다. 아릴옥시의 예로는 페닐옥시, 나프틸옥시, 디페닐옥시 등이 있다.
- [86] "비치환된 알킬옥시"는 R'O-로 표시되는 1가의 치환기로서, 상기 R'은 1 내지 40개의 알킬을 의미하며, 직쇄(linear), 측쇄(branched) 또는 사이클릭(cyclic) 구조를 포함하는 것으로 해석한다. 알킬옥시의 예로는 메톡시, 에톡시, n-프로폭시, 1-프로폭시, t-부톡시, n-부톡시, 펜톡시 등이 포함될 수 있으며 이에 한정되지는 않는다.
- [87] "비치환된 아릴아민"은 탄소수 6 내지 60의 아릴로 치환된 아민을 의미한다.
- [88] "비치환된 시클로알킬"은 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 포함되지만 이에 한정되는 것은 아니다.
- [89] "비치환된 헤테로시클로알킬"은 핵원자수 3 내지 40의 비-방향족 탄화수소로부터 유래된 1가의 치환기를 의미하며, 고리 중 하나 이상의 탄소, 바람직하게는 1 내지 3개의 탄소가 N, O 또는 S와 같은 헤테로 원자로 치환된다. 이의 비-제한적인 예로는 모르폴린, 피페라진 등이 있다.

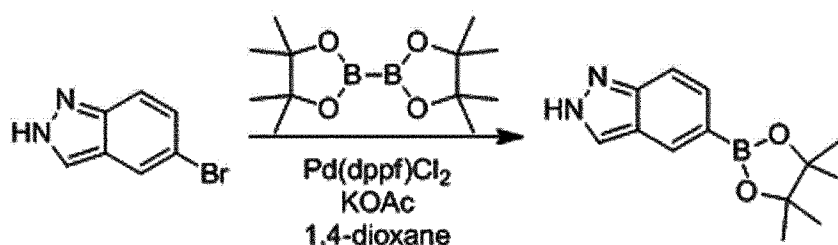
- [90] "알킬실릴"은 탄소수 1 내지 40의 알킬로 치환된 실릴이고, "아릴실릴"은 탄소수 5 내지 40의 아릴로 치환된 실릴을 의미한다.
- [91] "축합(fused) 고리"는 축합 지방족 고리, 축합 방향족 고리, 축합 헤테로지방족 고리, 축합 헤테로방향족 고리 또는 이들의 조합된 형태를 의미한다.
- [92] 본 발명의 화학식 1의 화합물은 일반적인 합성방법에 따라 합성될 수 있다(*Chem. Rev.*, 60:313 (1960); *J. Chem. SOC.* 4482 (1955); *Chem. Rev.* 95: 2457 (1995) 등 참조). 본 발명의 화합물에 대한 상세한 합성 과정은 후술하는 합성예에서 구체적으로 기술하도록 한다.
- [93]
- [94] 한편, 본 발명은 전술한 화학식 1로 표시되는 화합물, 바람직하게는 상기 화학식 3 내지 화학식 8 중 어느 하나로 표시되는 화합물을 포함하는 유기 전계 발광 소자를 제공한다.
- [95] 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 화합물, 바람직하게는 상기 화학식 3 내지 화학식 8 중 어느 하나로 표시되는 화합물을 포함한다. 이때, 상기 화합물은 단독으로 또는 2 이상이 혼합되어 사용될 수 있다.
- [96] 상기 1층 이상의 유기물층은 정공주입층, 정공수송층, 발광층, 전자수송층 및 전자주입층 중 어느 하나 이상일 수 있고, 이 중에서 적어도 하나의 유기물층이 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함할 수 있다. 바람직하게는 상기 화합물 1의 화합물을 포함하는 유기물층은 발광층일 수 있다.
- [97] 본 발명의 일례에 따르면, 유기 전계 발광 소자의 발광층은 호스트 재료를 포함할 수 있는데, 이때 호스트 재료로서 상기 화학식 1의 화합물을 포함할 수 있다. 이와 같이, 상기 화학식 1의 화합물을 유기 전계 발광 소자의 발광층 재료, 바람직하게는 청색, 녹색, 적색의 인광 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.
- [98] 전술한 본 발명에 따른 유기 전계 발광 소자의 구조는 특별히 한정되지 않으며, 예컨대 기판, 양극, 정공주입층, 정공수송층, 발광층, 전자수송층 및 음극이 순차적으로 적층된 구조일 수 있다. 이때, 상기 정공주입층, 정공수송층, 발광층, 전자수송층 및 전자주입층 중 하나 이상은 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함할 수 있고, 바람직하게는 발광층이 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함할 수 있다. 특히, 본 발명의 화합물은 발광층의 인광 호스트로 이용될 수 있다. 상기 전자수송층 위에는 전자주입층이 추가로 적층될 수 있다.
- [99] 또한, 본 발명에 따른 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.

- [100] 본 발명에 따른 유기 전계 발광 소자는 상기 유기물층 중 1층 이상(예컨대, 발광층)이 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하도록 형성하는 것을 제외하고는, 당 기술 분야에 알려져 있는 재료 및 방법을 이용하여 다른 유기물층 및 전극을 형성하여 제조될 수 있다.
- [101] 상기 유기물층은 진공 증착법이나 용액 도포법에 의하여 형성될 수 있다. 상기 용액 도포법의 예로는 스핀 코팅, 딥코팅, 닥터 블레이딩, 잉크젯 프린팅 또는 열전사법 등이 있으나, 이들에 한정되지 않는다.
- [102] 본 발명에서 사용 가능한 기판으로는 특별히 한정되지 않으며, 실리콘 웨이퍼, 석영, 유리판, 금속판, 플라스틱 필름 및 시트 등이 사용될 수 있다.
- [103] 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 있는데, 이에 한정되지 않는다.
- [104] 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 있는데, 이에 한정되지 않는다.
- [105]
- [106] 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.

[107] [준비예 1] 화합물 IC-1 및 IC-2의 합성

[108] <단계 1> 5-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-2H-indazole의 합성

[109]

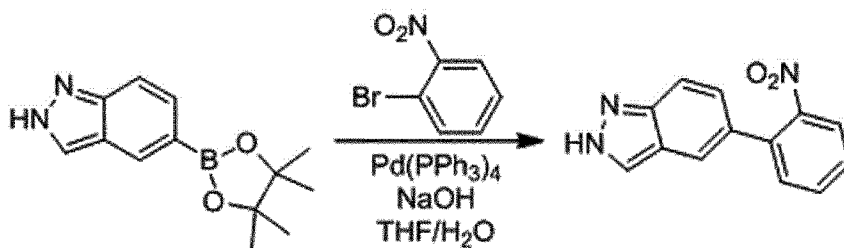


- [110] 질소 기류 하에서 5-bromo-2H-indazole (25.22 g, 0.128 mol), 4,4,4',4',5,5,5',5'-octamethyl-2,2'-bi(1,3,2-dioxaborolane) (48.58 g, 0.191 mol), Pd(dppf)Cl₂ (5.2 g, 5 mol), KOAc (37.55 g, 0.383 mol) 및 1,4-dioxane (500 ml)를 혼합한 다음, 130 °C에서 12시간 동안 교반하였다.
- [111] 반응이 종결된 후, 에틸아세테이트로 유기층을 추출한 다음, MgSO₄로 수분을 제거하고, 상기 유기층을 컬럼크로마토그래피 (Hexane:EA = 10:1 (v/v))로 정제하여 5-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-2H-indazole (22.49 g, 수율: 72%)을 얻었다.

[112] $^1\text{H-NMR}$: δ 1.24 (s, 12H), 7.45 (s, 1H), 7.55 (2, 1H), 7.63 (d, 1H), 7.75 (d, 1H), 13.81 (s, 1H)

[113] <단계 2> 5-(2-nitrophenyl)-2H-indazole의 합성

[114]



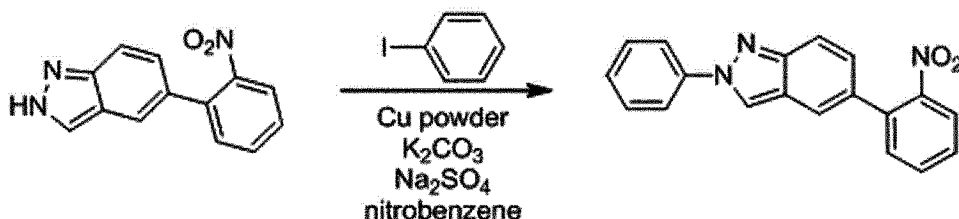
[115] 질소 기류 하에서 1-bromo-2-nitrobenzene (15.23 g, 75.41 mmol)과 상기 준비예 1의 <단계 1>에서 얻은 5-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-2H-indazole (22.09 g, 90.49 mmol), NaOH (9.05 g, 226.24 mmol) 및 THF/H₂O(400 ml/200 ml)를 혼합한 다음, 40 °C에서 Pd(PPh₃)₄ (4.36 g, 5 mol%)를 넣고, 80 °C에서 12시간 동안 교반하였다.

[116] 반응 종결 후, 메틸렌클로라이드로 유기층을 추출한 다음, MgSO₄를 넣고 여과하였다. 얻어진 유기층에서 용매를 제거한 후, 상기 유기층을 컬럼 크로마토그래피 (Hexane:EA = 3:1 (v/v))로 정제하여 5-(2-nitrophenyl)-2H-indazole (13.64 g, 수율: 63%)을 얻었다.

[117] $^1\text{H-NMR}$: δ 7.50 (m, 2H), 7.80 (m, 6H), 13.81(s, 1H)

[118] <단계 3> 5-(2-nitrophenyl)-2-phenyl-2H-indazole의 합성

[119]



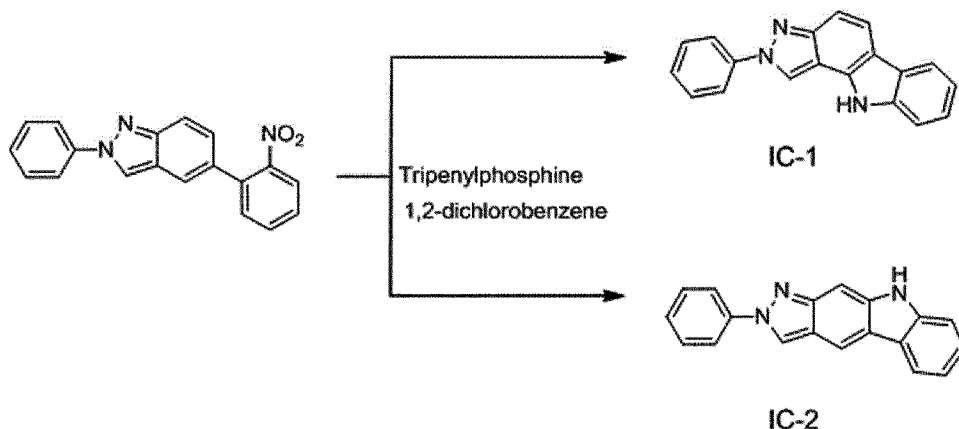
[120] 질소 기류 하에서 상기 준비예 1의 <단계 2>에서 얻은 5-(2-nitrophenyl)-2H-indazole (11.04 g, 46.17 mmol), iodobenzene (14.13 g, 69.26 mmol), Cu powder (0.29 g, 4.62 mmol), K₂CO₃ (6.38 g, 46.17 mmol), Na₂SO₄ (6.56 g, 46.17 mmol), nitrobenzene (200 ml)를 혼합한 다음, 190 °C에서 12시간 동안 교반하였다.

[121] 반응 종결 후 nitrobenzene을 제거한 다음, 메틸렌클로라이드로 유기층을 분리하고 MgSO₄를 사용하여 물을 제거하였다. 이후, 상기 유기층에서 용매를 제거한 후, 상기 유기층을 컬럼 크로마토그래피 (Hexane:MC = 3:1 (v/v))로 정제하여 5-(2-nitrophenyl)-2-phenyl-2H-indazole (10.34 g, 수율: 71%)을 얻었다.

[122] $^1\text{H-NMR}$: δ 7.46 (t, 1H), 7.60 (m, 6H), 7.91 (t, 1H), 8.05 (m, 3H), 8.39 (d, 1H), 8.54 (s, 1H)

[123] <단계 4> 화합물 IC-1 및 IC-2의 합성

[124]



[125] 질소 기류 하에서 상기 준비예 1의 <단계 3>에서 얻은 5-(2-nitrophenyl)-2-phenyl-2H-indazole (5.01 g, 15.91 mmol), triphenylphosphine (10.43 g, 39.77 mmol) 및 1,2-dichlorobenzene (50 ml)를 혼합한 다음, 12시간 동안 교반하였다.

[126] 반응 종료 후 1,2-dichlorobenzene를 제거하고 디클로로메탄으로 유기층을 추출한 다음, MgSO_4 로 물을 제거하고, 상기 유기층을 컬럼크로마토그래피 (Hexane:MC=3:1 (v/v))로 정제하여 화합물 IC-1 (2.39 g, 수율: 53%) 및 화합물 IC-2를 얻었다.

[127] 화합물 IC-1의 $^1\text{H-NMR}$: δ 7.29 (t, 1H), 7.55 (m, 8H), 8.12 (d, 1H), 8.32 (d, 1H), 8.55 (s, 1H), 10.09 (s, 1H)

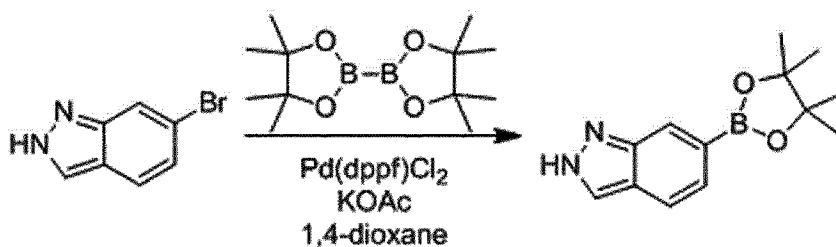
[128] 화합물 IC-2의 $^1\text{H-NMR}$: δ 7.29 (t, 1H), 7.56 (m, 8H), 7.85 (s, 1H), 8.12 (d, 1H), 8.52 (s, 1H), 10.21 (s, 1H)

[129]

[130] [준비예 2] 화합물 IC-3 및 IC-4의 합성

[131] <단계 1> 6-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-2H-indazole 의 합성

[132]

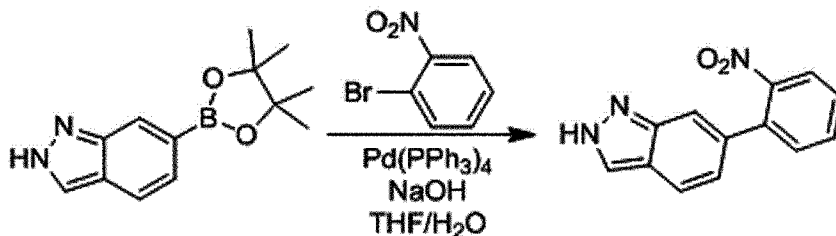


[133] 준비예 1의 <단계 1>에서 사용된 5-bromo-2H-indazole 대신 6-bromo-2H-indazole(25.22 g, 0.128 mol)를 사용하는 것을 제외하고는, 상기 준비예 1의 <단계 1>과 동일한 과정을 수행하여 6-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-2H-indazole 을 얻었다.

[134] $^1\text{H-NMR}$: δ 1.25 (s, 12H), 7.45 (s, 1H), 7.56 (m, 2H), 7.75 (d, 1H), 13.72 (s, 1H)

[135] <단계 2> 6-(2-nitrophenyl)-2H-indazole의 합성

[136]



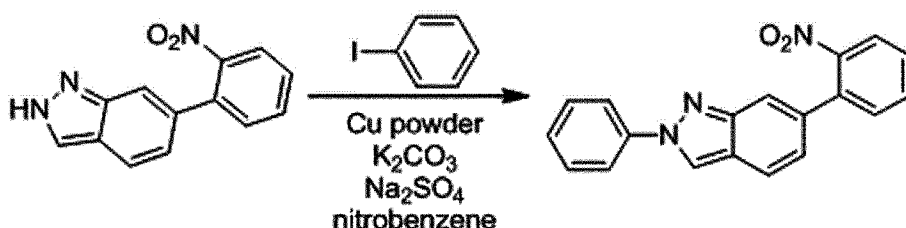
[137] 준비예 1의 <단계 2>에서 사용된

5-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-2H-indazole 대신 상기 준비예 2의 <단계 1>에서 얻은 6-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-2H-indazole (22.09 g, 90.49 mmol)를 사용하는 것을 제외하고는, 상기 준비예 1의 <단계 2>과 동일한 과정을 수행하여 6-(2-nitrophenyl)-2H-indazole을 얻었다.

[138] $^1\text{H-NMR}$: δ 7.19 (d, 1H), 7.60 (m, 3H), 8.00 (m, 4H), 13.75 (s, 1H)

[139] <단계 3> 6-(2-nitrophenyl)-2-phenyl-2H-indazole의 합성

[140]

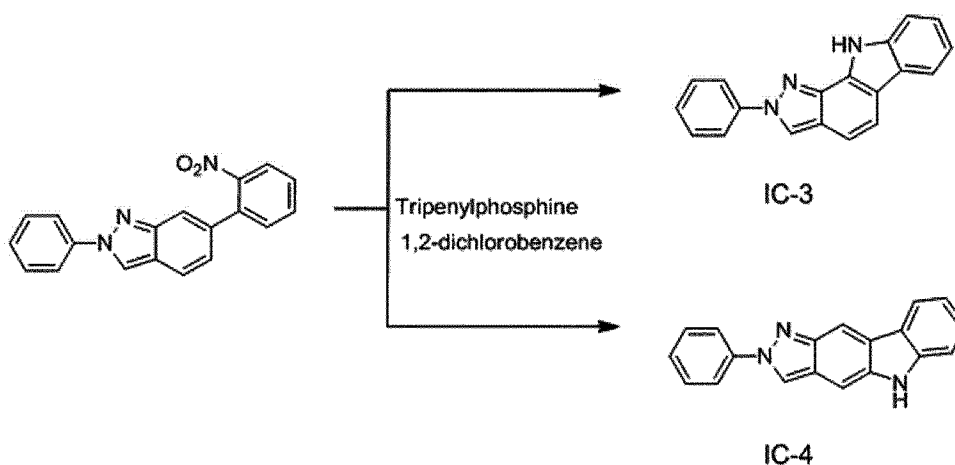


[141] 준비예 1의 <단계 3>에서 사용된 5-(2-nitrophenyl)-2H-indazole 대신 상기 준비예 2의 <단계 2>에서 얻은 6-(2-nitrophenyl)-2H-indazole (11.04 g, 46.17 mmol)를 사용하는 것을 제외하고는, 상기 준비예 1의 <단계 3>과 동일한 과정을 수행하여 6-(2-nitrophenyl)-2-phenyl-2H-indazole을 얻었다.

[142] $^1\text{H-NMR}$: δ 7.58 (m, 7H), 7.95 (m, 5H), 8.53 (s, 1H)

[143] <단계 4> 화합물 IC-3 및 IC-4의 합성

[144]



[145] 준비예 1의 <단계 4>에서 사용된 5-(2-nitrophenyl)-2-phenyl-2H-indazole 대신 상기 준비예 2의 <단계 3>에서 얻은 6-(2-nitrophenyl)-2-phenyl-2H-indazole (5.01 g, 15.91 mmol)를 사용하는 것을 제외하고는, 상기 준비예 1의 <단계 4>과 동일한 과정을 수행하여 화합물 IC-3 및 IC-4를 얻었다.

[146] 화합물 IC-3의 $^1\text{H-NMR}$: δ 7.27 (m, 2H), 7.56 (m, 7H), 7.92 (d, 1H), 8.13 (d, 1H), 8.54 (s, 1H), 10.19 (s, 1H)

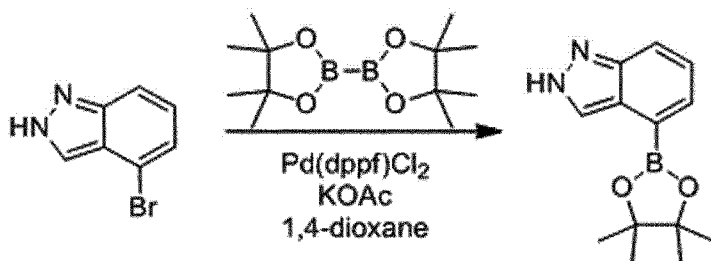
[147] 화합물 IC-4의 $^1\text{H-NMR}$: δ 7.29 (t, 1H), 7.59 (m, 8H), 7.85 (s, 1H), 8.11 (d, 1H), 8.54 (s, 1H), 10.22 (s, 1H)

[148]

[149] [준비예 3] 화합물 IC-5의 합성

[150] <단계 1> 4-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-2H-indazole의 합성

[151]

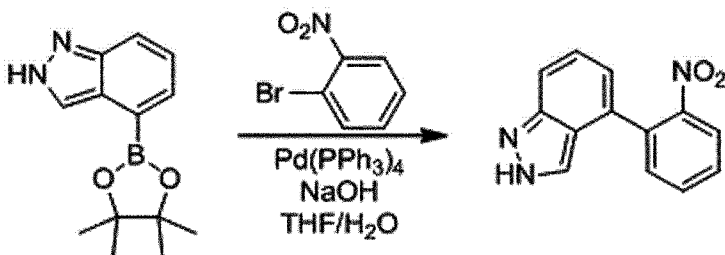


[152] 준비예 1의 <단계 1>에서 사용된 5-bromo-2H-indazole 대신 4-bromo-2H-indazole (25.22 g, 0.128 mol)를 사용하는 것을 제외하고는, 상기 준비예 1의 <단계 1>과 동일한 과정을 수행하여 4-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-2H-indazole을 얻었다.

[153] $^1\text{H NMR}$: δ 1.26 (s, 12H), 7.45 (t, 1H), 7.55 (s, 1H), 7.63 (d, 1H), 7.75 (d, 1H), 13.54 (s, 1H)

[154] <단계 2> 4-(2-nitrophenyl)-2H-indazole의 합성

[155]

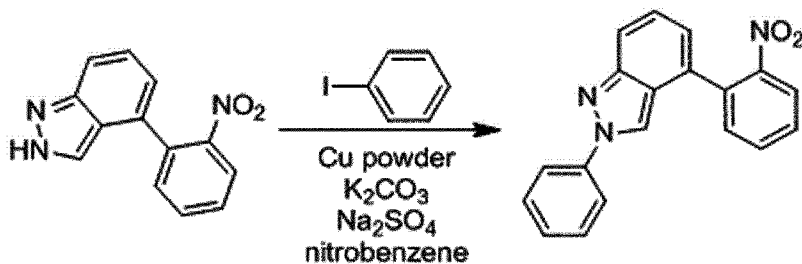


[156] 준비예 1의 <단계 2>에서 사용된 5-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-2H-indazole 대신 상기 준비예 3의 <단계 1>에서 얻은 4-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-2H-indazole (22.09 g, 90.49 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 상기 준비예 1의 <단계 2>와 동일한 과정을 수행하여 4-(2-nitrophenyl)-2H-indazole을 얻었다.

[157] $^1\text{H NMR}$: δ 7.55 (m, 3H), 7.71 (m, 2H), 7.95 (m, 3H), 13.62 (s, 1H)

[158] <단계 3> 4-(2-nitrophenyl)-2-phenyl-2H-indazole의 합성

[159]

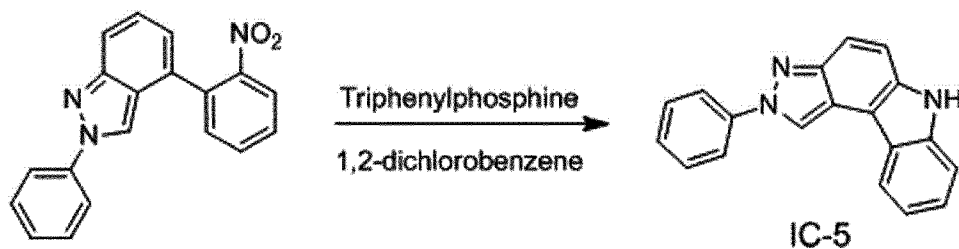


[160] 준비예 1의 <단계 3>에서 사용된 5-(2-nitrophenyl)-2H-indazole 대신 상기 준비예 3의 <단계 2>에서 얻은 4-(2-nitrophenyl)-2H-indazole (11.04 g, 46.17 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 준비예 1의 <단계 3>과 동일한 과정을 수행하여 4-(2-nitrophenyl)-2-phenyl-2H-indazole을 얻었다.

[161] ¹H NMR: δ 7.57 (m, 8H), 7.90 (t, 1H), 8.01 (m, 2H), 8.29 (d, 1H), 8.55 (s, 1H)

[162] <단계 4> 화합물 IC-5의 합성

[163]



[164] 준비예 1의 <단계 4>에서 사용된 5-(2-nitrophenyl)-2-phenyl-2H-indazole 대신 상기 준비예 3의 <단계 3>에서 얻은 4-(2-nitrophenyl)-2-phenyl-2H-indazole (5.01 g, 15.91 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 준비예 1의 <단계 4>와 동일한 과정을 수행하여 화합물 IC-5을 얻었다.

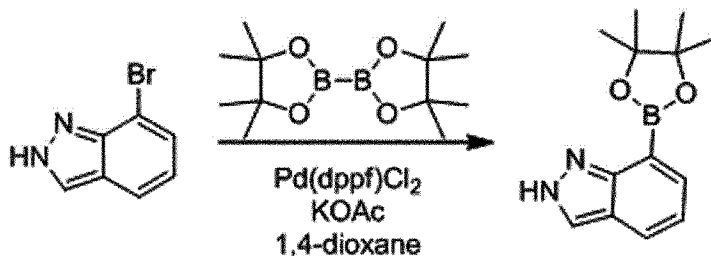
[165] ¹H NMR: δ 7.29 (t, 1H), 7.58 (m, 7H), 8.09 (m, 2H), 8.35 (d, 1H), 8.56 (s, 1H), 10.21 (s, 1H)

[166]

[167] [준비예 4] 화합물 IC-6의 합성

[168] <단계 1> 7-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-2H-indazole 의 합성

[169]

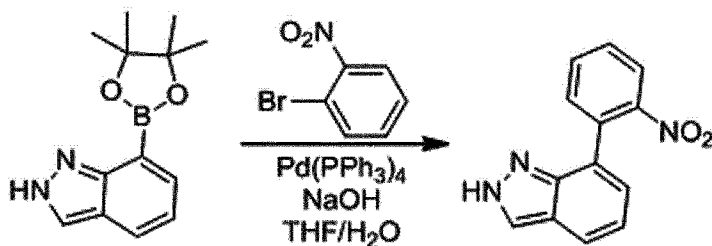


[170] 준비예 1의 <단계 1>에서 사용된 5-bromo-2H-indazole 대신 7-bromo-2H-indazole (25.22 g, 0.128 mol)를 사용하는 것을 제외하고는, 준비예 1의 <단계 1>과 동일한 과정을 수행하여 7-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-2H-indazole을 얻었다.

[171] ¹H NMR: δ 1.25 (s, 12H), 7.44 (t, 1H), 7.56 (m, 2H), 7.75 (d, 1H), 13.51 (s, 1H)

[172] <단계 2> 7-(2-nitrophenyl)-2H-indazole의 합성

[173]



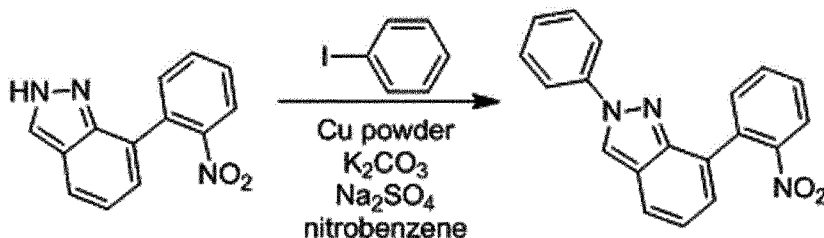
[174] 준비예 1의 <단계 2>에서 사용된

5-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-2H-indazole 대신 상기 준비예 4의 <단계 1>에서 얻은 7-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-2H-indazole (22.09 g, 90.49 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 준비예 1의 <단계 2>와 동일한 과정을 수행하여 7-(2-nitrophenyl)-2H-indazole을 얻었다.

[175] $^1\text{H NMR}$: δ 7.53 (m, 3H), 7.67 (t, 1H), 7.90 (m, 4H), 13.47 (s, 1H)

[176] <단계 3> 7-(2-nitrophenyl)-2-phenyl-2H-indazole의 합성

[177]

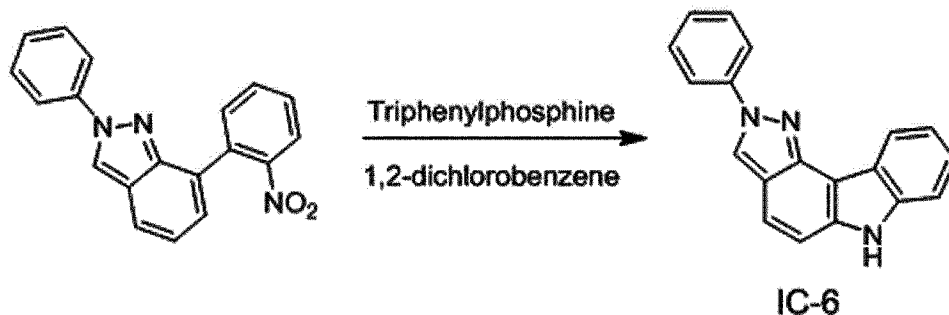


[178] 준비예 1의 <단계 3>에서 사용된 5-(2-nitrophenyl)-2H-indazole 대신 상기 준비예 4의 <단계 2>에서 얻은 7-(2-nitrophenyl)-2H-indazole (11.04 g, 46.17 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 준비예 1의 <단계 3>과 동일한 과정을 수행하여 7-(2-nitrophenyl)-2-phenyl-2H-indazole을 얻었다.

[179] $^1\text{H NMR}$: δ 7.56 (m, 8H), 7.89 (m, 2H), 8.02 (m, 2H), 8.55 (s, 1H)

[180] <단계 4> 화합물 IC-6의 합성

[181]



[182] 준비예 1의 <단계 4>에서 사용된 5-(2-nitrophenyl)-2-phenyl-2H-indazole 대신 상기 준비예 4의 <단계 3>에서 얻은 7-(2-nitrophenyl)-2-phenyl-2H-indazole (5.01 g, 15.91 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 준비예 1의 <단계 4>와 동일한 과정을 수행하여 화합물 IC-6을 얻었다.

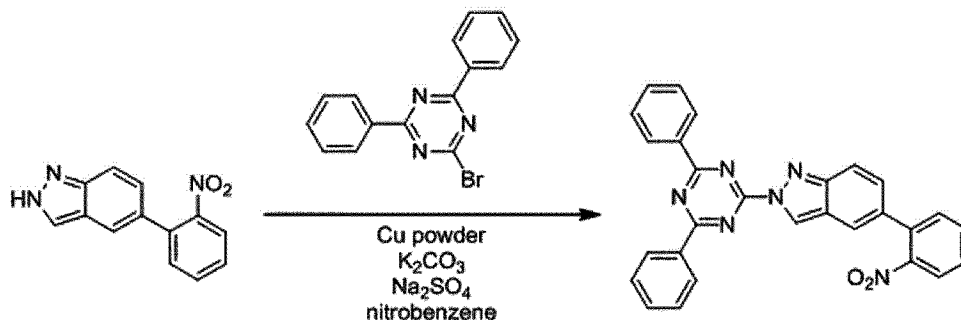
[183] $^1\text{H NMR}$: δ 7.29 (t, 1H), 7.58 (m, 7H), 7.92 (d, 2H), 8.14 (d, 1H), 8.53 (s, 1H), 10.70 (s, 1H)

[184]

[185] [준비예 5] 화합물 IC-7의 합성

[186] <단계 1> 2-(4,6-diphenyl-1,3,5-triazin-2-yl)-5-(2-nitrophenyl)-2H-indazole의 합성

[187]



[188] 준비예 1의 <단계 3>에서 사용된 Iodobenzene 대신

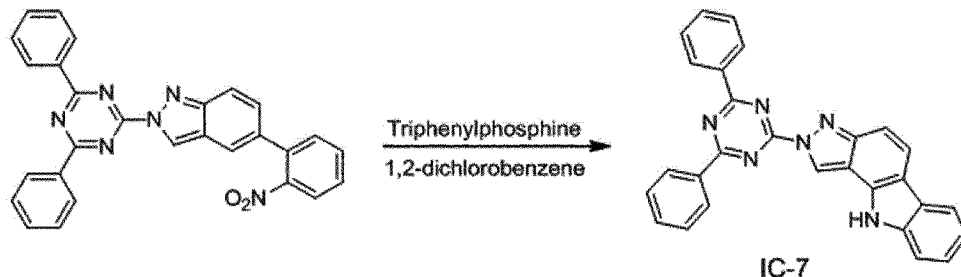
2-bromo-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine (21.62 g, 69.26 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 준비예 1의 <단계 3>과 동일한 과정을 수행하여

2-(4,6-diphenyl-1,3,5-triazin-2-yl)-5-(2-nitrophenyl)-2H-indazole 을 얻었다.

[189] ¹H-NMR: δ 7.45 (m, 6H), 7.65 (m, 2H), 7.90 (t, 1H), 8.03 (m, 2H), 8.38 (m, 7H)

[190] <단계 2> 화합물 IC-7의 합성

[191]

[192] 준비예 1의 <단계 4>에서 사용된 5-(2-nitrophenyl)-2-phenyl-2H-indazole 대신
상기 준비예 5의 <단계 1>에서 얻은

2-(4,6-diphenyl-1,3,5-triazin-2-yl)-5-(2-nitrophenyl)-2H-indazole (7.48 g, 15.91 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 준비예 1의 <단계 4>와 동일한 과정을 수행하여 화합물 IC-7를 얻었다.

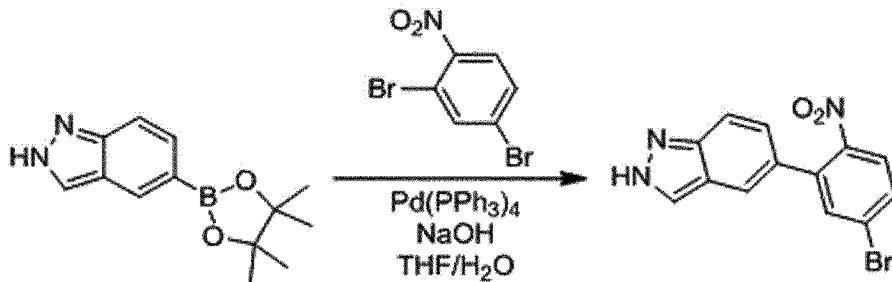
[193] ¹H-NMR: δ 7.29 (t, 1H), 7.49 (m, 8H), 7.63 (d, 1H), 8.11 (d, 1H), 8.28 (m, 6H), 10.11 (s, 1H)

[194]

[195] [준비예 6] 화합물 IC-8의 합성

[196] <단계 1> 5-(5-bromo-2-nitrophenyl)-2H-indazole의 합성

[197]

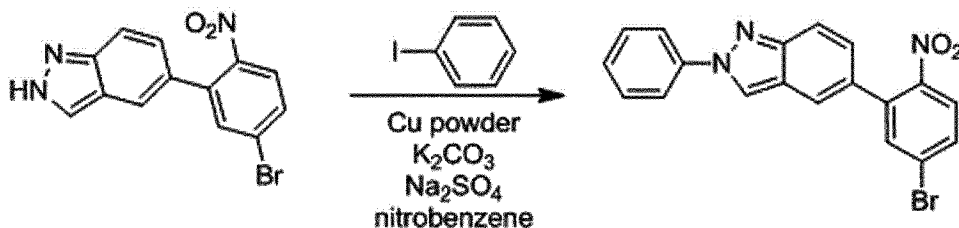


- [198] 준비에 1의 <단계 2>에서 사용된 1-bromo-2-nitrobenzene 대신 2,4-dibromo-1-nitrobenzene (21.18 g, 75.41 mmol) 을 사용하는 것을 제외하고는, 준비에 1의 <단계 2>와 동일한 과정을 수행하여 5-(5-bromo-2-nitrophenyl)-2H-indazole을 얻었다.

[199] ^1H NMR: δ 7.52 (m, 2H), 7.72 (m, 3H), 7.97 (d, 1H), 8.19 (d, 1H), 13.12 (s, 1H)

[200] <단계 2> 5-(5-bromo-2-nitrophenyl)-2-phenyl-2H-indazole의 합성

[201]

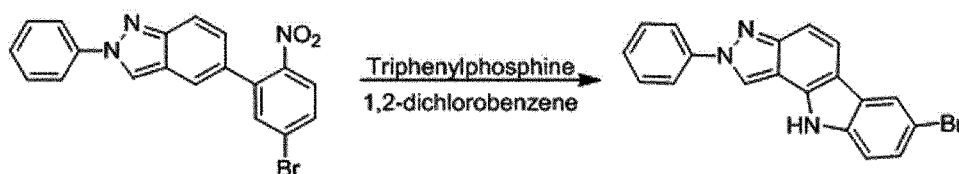


- [202] 준비에 1의 <단계 3>에서 사용된 5-(2-nitrophenyl)-2H-indazole 대신 상기 준비에 6의 <단계 1>에서 얻은 5-(5-bromo-2-nitrophenyl)-2H-indazole (14.69 g, 46.17 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 준비에 1의 <단계 3>과 동일한 과정을 수행하여 5-(5-bromo-2-nitrophenyl)-2-phenyl-2H-indazole을 얻었다.

[203] ^1H NMR: δ 7.45 (t, 1H), 7.60 (m, 5H), 7.72 (s, 1H), 7.98 (d, 1H), 8.07 (s, 1H), 8.19 (d, 1H), 8.38 (d, 1H), 8.52 (s, 1H)

[204] <단계 3> 7-bromo-2-phenyl-2,10-dihydropyrazolo[4,3-a]carbazole 의 합성

[205]

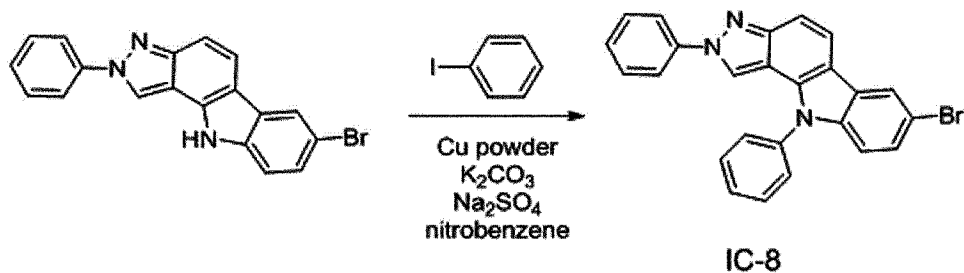


- [206] 준비에 1의 <단계 4>에서 사용된 5-(2-nitrophenyl)-2-phenyl-2H-indazole 대신 상기 준비에 6의 <단계 2>에서 얻은 5-(5-bromo-2-nitrophenyl)-2-phenyl-2H-indazole (6.27 g, 15.91 mmol) 을 사용하는 것을 제외하고는, 준비에 1의 <단계 4>와 동일한 과정을 수행하여 7-bromo-2-phenyl-2,10-dihydropyrazolo[4,3-a]carbazole을 얻었다.

[207] ^1H -NMR: δ 7.54 (m, 8H), 8.03 (s, 1H), 8.33 (d, 1H), 8.53 (s, 1H), 10.55 (s, 1H)

[208] <단계 4> 화합물 IC-8의 합성

[209]



[210] 준비예 1의 <단계 3>에서 사용된 5-(2-nitrophenyl)-2H-indazole 대신 상기 준비예 6의 <단계 3>에서 얻은

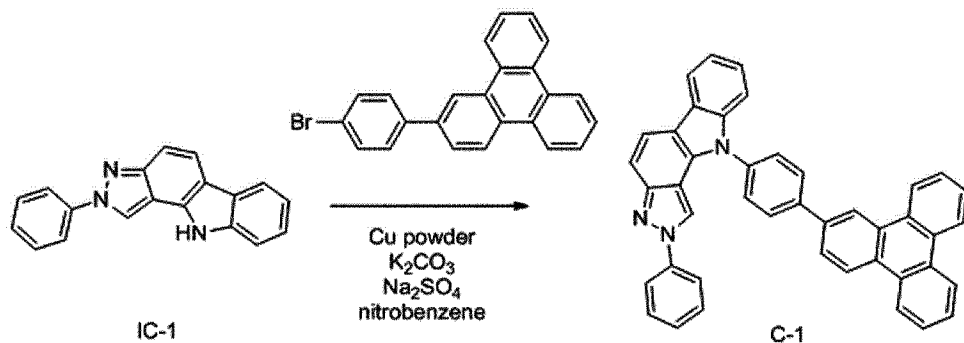
7-bromo-2-phenyl-2,10-dihydropyrazolo[4,3-a]carbazole (3.98 g, 11 mmol) 을 사용한 것을 제외하고, 준비예 1의 <단계 3>과 동일한 방법으로 화합물 IC-8을 얻었다.

[211] $^1\text{H NMR}$: δ 7.25 (d, 1H), 7.58 (m, 11H), 7.72 (s, 1H), 7.88 (d, 1H), 8.32 (d, 1H), 8.53 (s, 1H)

[212]

[213] [합성예 1] 화합물 C-1의 합성

[214]



[215] 질소 기류 하에서 준비예 1에서 합성된 화합물 IC-1 (3.76 g, 13.29 mmol), 2-(4-bromophenyl)triphenylene (10.18 g, 26.57 mmol), Cu powder (0.17 g, 2.66 mmol), K_2CO_3 (3.66 g, 26.57 mmol), Na_2SO_4 (3.78 g, 26.57 mmol) 및 nitrobenzene (100 ml)를 혼합한 다음, 190 °C에서 12시간 동안 교반하였다.

[216] 반응이 종결된 후 nitrobenzene을 제거하고 메틸렌클로라이드로 유기층을 분리한 다음, MgSO_4 를 사용하여 물을 제거하였다. 이후, 상기 유기층의 용매를 제거한 후 상기 유기층을 컬럼크로마토그래피로 정제하여 화합물 C-1 (5.37 g, 수율: 69%)을 얻었다.

[217] GC-Mass (이론치: 585.69 g/mol, 측정치: 585 g/mol)

[218]

[219] [합성예 2] 화합물 C-2의 합성

The reaction scheme shows the synthesis of compound C-2 from compound IC-1 and a dibenzothiophene derivative. The reaction conditions are Cu powder, K₂CO₃, Na₂SO₄, and nitrobenzene.

IC-1: c1ccc(cc1)n2c3ccccc3c4c2[nH]c5ccccc45

Dibenzothiophene derivative: c1ccc(cc1)c2c3ccccc3c4c2sc5ccccc45

C-2: c1ccc(cc1)n2c3ccccc3c4c2[nH]c5ccccc45

Chemical reaction scheme showing the synthesis of compound C-3 from compound IC-1 and 3-bromo-2-phenylpyridine. The reaction conditions are Cu powder, K₂CO₃, Na₂SO₄, and nitrobenzene.

IC-1 + 3-bromo-2-phenylpyridine $\xrightarrow[\text{nitrobenzene}]{\text{Cu powder, K}_2\text{CO}_3, \text{Na}_2\text{SO}_4}$ C-3

Chemical reaction scheme showing the synthesis of compound C-4 from compound IC-1 and 2-chloro-4,6-diphenylpyrimidine. The reaction conditions are Cu powder, K₂CO₃, Na₂SO₄, and nitrobenzene.

IC-1 + 2-chloro-4,6-diphenylpyrimidine $\xrightarrow[\text{Na}_2\text{SO}_4, \text{nitrobenzene}]{\text{Cu powder, K}_2\text{CO}_3}$ C-4

[231] 합성예 1에서 사용된 2-(4-bromophenyl)triphenylene 대신

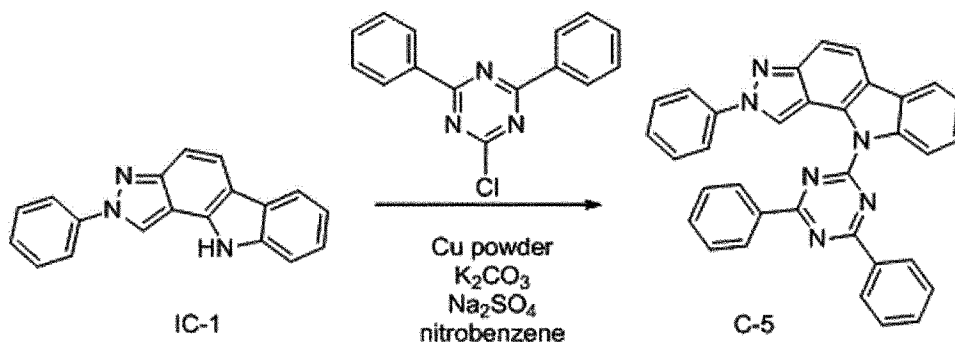
2-chloro-4,6-diphenylpyrimidine (7.08 g, 26.57 mmol) 을 사용하는 것을 제외하고는, 합성에 1과 동일한 과정을 수행하여 화합물 C-4 (5.11 g, 수율: 75%)을 얻었다.

[232] GC-Mass (이론치: 513.59 g/mol, 측정치: 513 g/mol)

[233]

[234] [합성예 5] 화합물 C-5의 합성

[235]



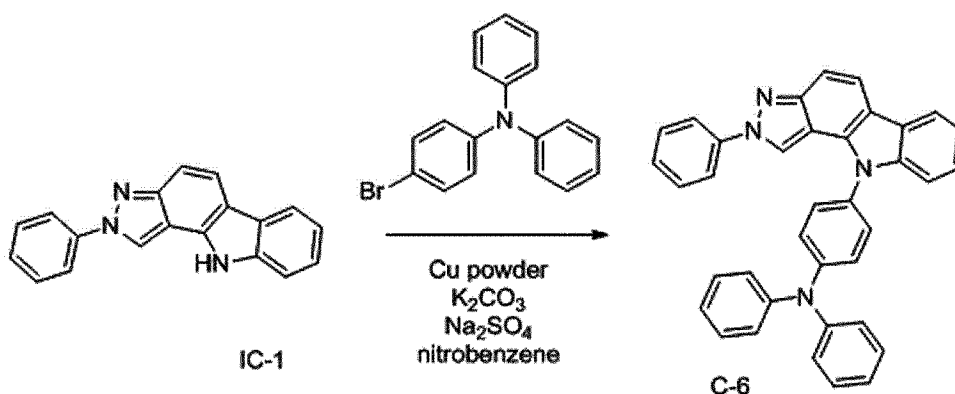
[236] 합성예 1에서 사용된 2-(4-bromophenyl)triphenylene 대신 2-chloro-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine (7.11 g, 26.57 mmol) 을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 1과 동일한 과정을 수행하여 화합물 C-5 (4.71 g, 수율: 69%)을 얻었다.

[237] GC-Mass (이론치: 514.58 g/mol, 측정치: 514 g/mol)

[238]

[239] [합성예 6] 화합물 C-6의 합성

[240]



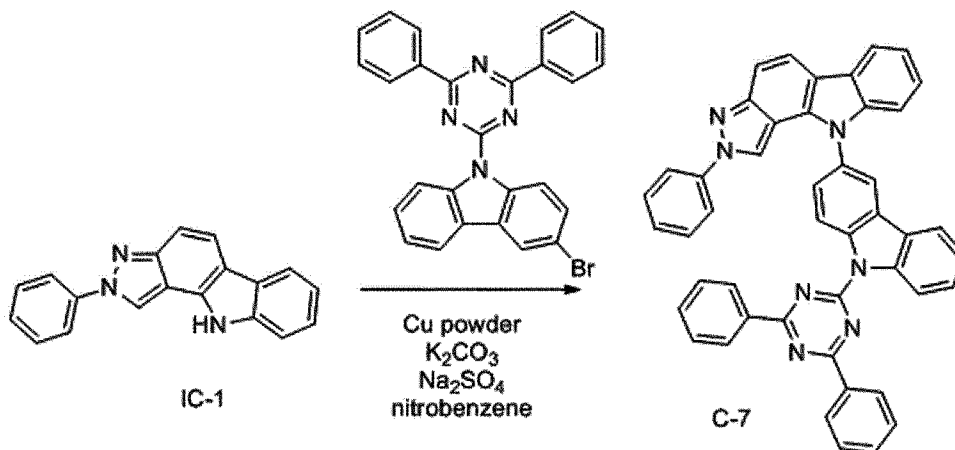
[241] 합성예 1에서 사용된 2-(4-bromophenyl)triphenylene 대신 4-bromo-N,N-diphenylaniline (8.61 g, 26.57 mmol)를 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 1과 동일한 과정을 수행하여 화합물 C-6 (4.34 g, 수율: 62%)을 얻었다.

[242] GC-Mass (이론치: 526.63 g/mol, 측정치: 526 g/mol)

[243]

[244] [합성예 7] 화합물 C-7의 합성

[245]



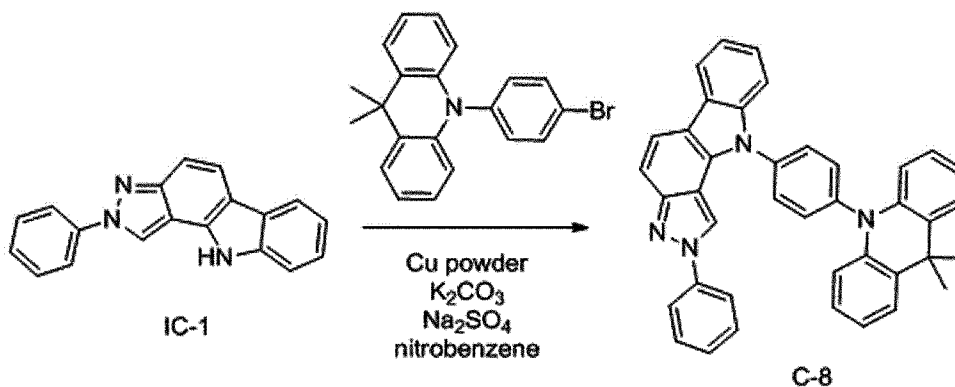
[246] 합성예 1에서 사용된 2-(4-bromophenyl)triphenylene 대신 3-bromo-9-(4,6-diphenyl-1,3,5-triazin-2-yl)-9H-carbazole (12.68 g, 26.57 mmol)를 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 1과 동일한 과정을 수행하여 화합물 C-7 (5.24 g, 수율: 58%)을 얻었다.

[247] GC-Mass (이론치: 679.77 g/mol, 측정치: 679 g/mol)

[248]

[249] [합성예 8] 화합물 C-8의 합성

[250]



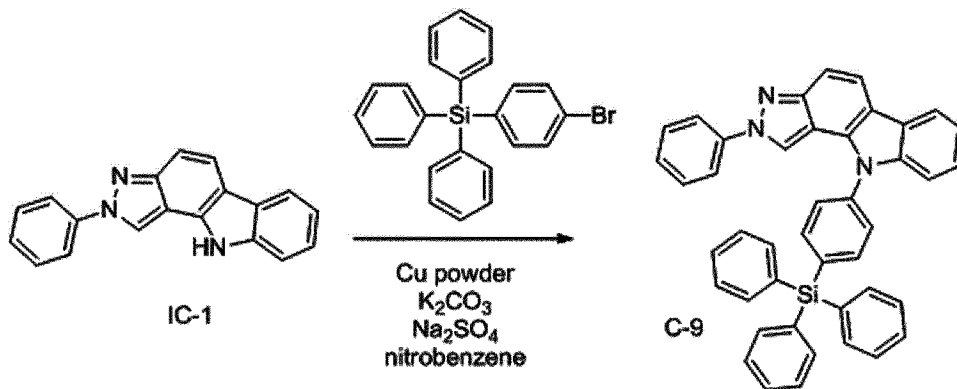
[251] 합성예 1에서 사용된 2-(4-bromophenyl)triphenylene 대신 10-(4-bromophenyl)-9,9-dimethyl-9,10-dihydroacridine (9.67 g, 26.57 mmol)를 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 1과 동일한 과정을 수행하여 화합물 C-8 (5.72 g, 수율: 76%)을 얻었다.

[252] GC-Mass (이론치: 566.69 g/mol, 측정치: 566 g/mol)

[253]

[254] [합성예 9] 화합물 C-9의 합성

[255]



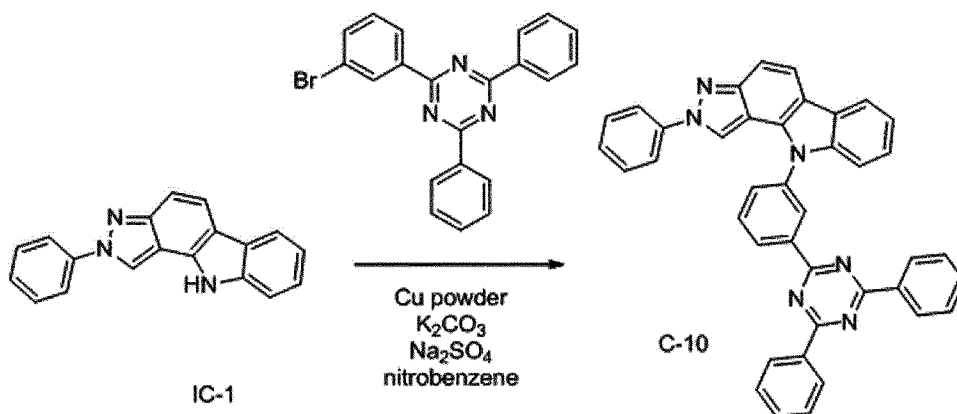
[256] 합성에 1에서 사용된 2-(4-bromophenyl)triphenylene 대신 (4-bromophenyl)triphenylsilane(11.04 g, 26.57 mmol) 를 사용하는 것을 제외하고는, 합성에 1과 동일한 과정을 수행하여 화합물 C-9 (4.68 g, 수율: 57%)를 얻었다.

[257] GC-Mass (이론치: 617.81 g/mol, 측정치: 617 g/mol)

[258]

[259] [합성예 10] 화합물 C-10의 합성

[260]



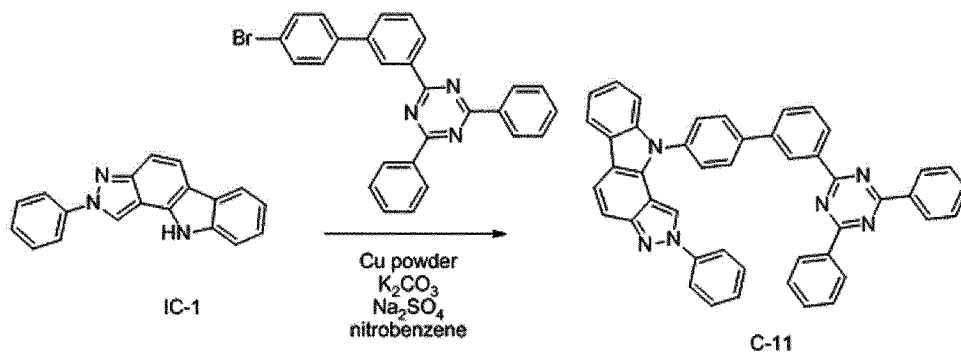
[261] 합성에 1에서 사용된 2-(4-bromophenyl)triphenylene 대신 2-(3-bromophenyl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine(10.32 g, 26.57 mmol) 를 사용하는 것을 제외하고는, 합성에 1과 동일한 과정을 수행하여 화합물 C-10 (6.28 g, 수율: 80%)을 얻었다.

[262] GC-Mass (이론치: 590.67 g/mol, 측정치: 590 g/mol)

[263]

[264] [합성예 11] 화합물 C-11의 합성

[265]



[266]

합성에 1에서 사용된 2-(4-bromophenyl)triphenylene 대신 2-(4'-bromo-[1,1'-biphenyl]-3-yl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine(12.34 g, 26.57 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성에 1과 동일한 과정을 수행하여 화합물 C-11 (7.44 g, 수율: 84%)을 얻었다.

[267]

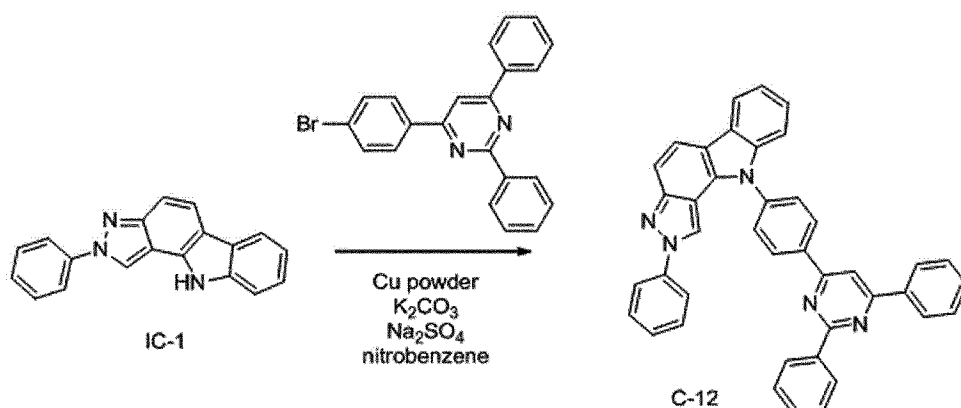
GC-Mass (이론치: 666.77 g/mol, 측정치: 666 g/mol)

[268]

[269]

[합성예 12] 화합물 C-12의 합성

[270]



[271]

합성에 1에서 사용된 2-(4-bromophenyl)triphenylene 대신 4-(4-bromophenyl)-2,6-diphenylpyrimidine (10.28 g, 26.57 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성에 1과 동일한 과정을 수행하여 화합물 C-12 (6.42 g, 수율: 82%)를 얻었다.

[272]

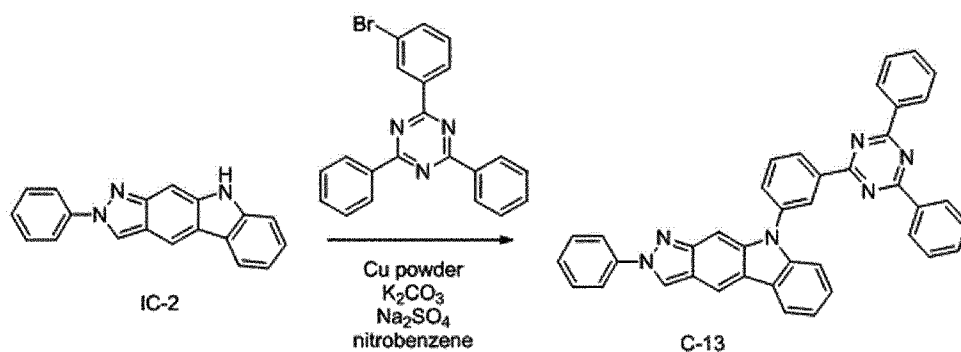
GC-Mass (이론치: 589.69 g/mol, 측정치: 589 g/mol)

[273]

[274]

[합성예 13] 화합물 C-13의 합성

[275]



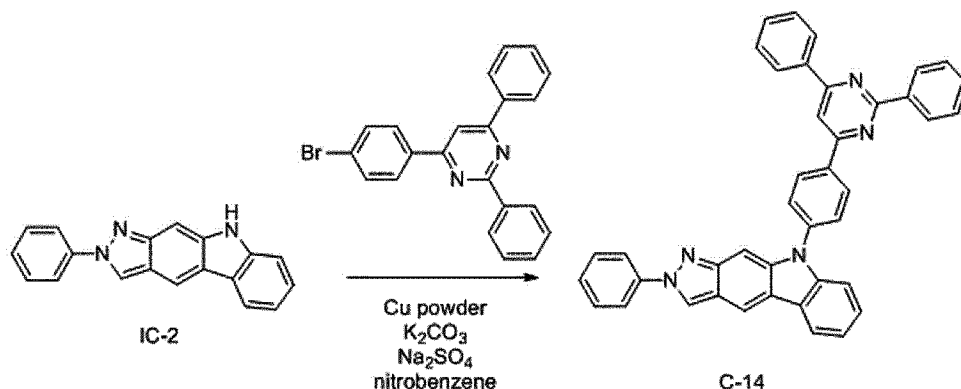
[276] 합성에 10에서 사용된 화합물 IC-1 대신 준비예 1에서 합성된 화합물 IC-2 (3.76 g, 13.29 mmol)를 사용하는 것을 제외하고는, 합성에 10과 동일한 과정을 수행하여 화합물 C-13 (5.65 g, 수율: 72%)을 얻었다.

[277] GC-Mass (이론치: 590.67 g/mol, 측정치: 590 g/mol)

[278]

[279] [합성예 14] 화합물 C-14의 합성

[280]



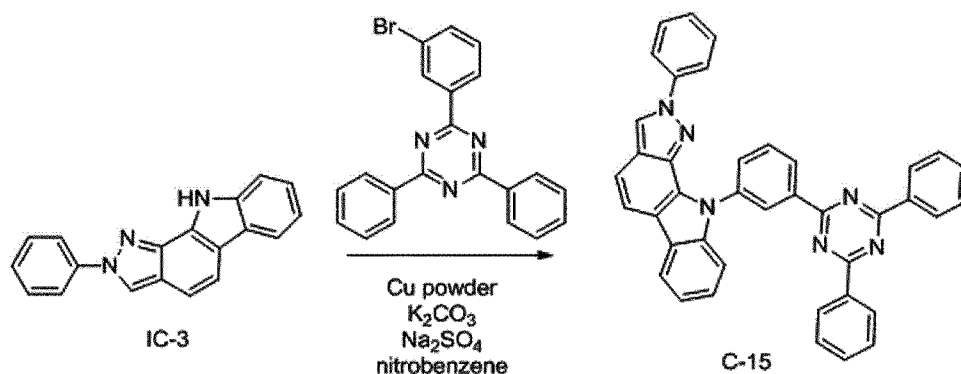
[281] 합성에 12에서 사용된 화합물 IC-1 대신 준비예 1에서 합성된 IC-2 (3.76 g, 13.29 mmol)를 사용하는 것을 제외하고는, 합성에 12와 동일한 과정을 수행하여 화합물 C-14 (5.95 g, 수율: 76%)을 얻었다.

[282] GC-Mass (이론치: 589.69 g/mol, 측정치: 589 g/mol)

[283]

[284] [합성예 15] 화합물 C-15의 합성

[285]



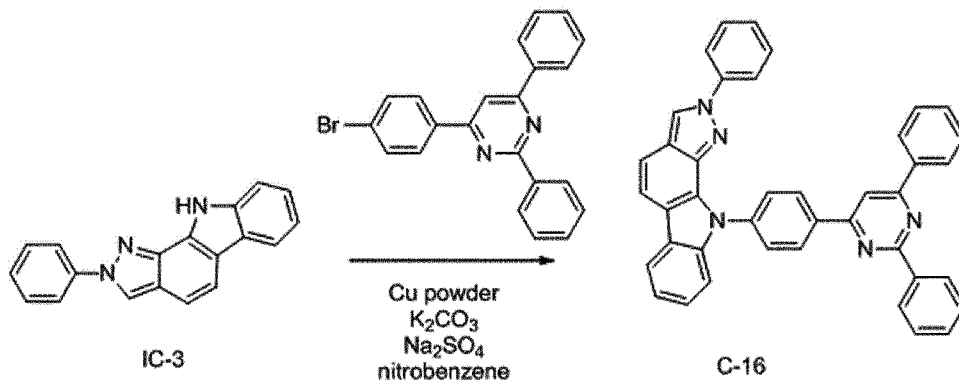
[286] 합성에 10에서 사용된 화-물 IC-1 대신 준비예 2에서 합성된 화합물 IC-3 (3.76 g, 13.29 mmol)를 사용하는 것을 제외하고는, 합성에 10과 동일한 과정을 수행하여 화합물 C-15 (6.75 g, 수율: 86%)을 얻었다.

[287] GC-Mass (이론치: 590.67 g/mol, 측정치: 590 g/mol)

[288]

[289] [합성예 16] 화합물 C-16의 합성

[290]



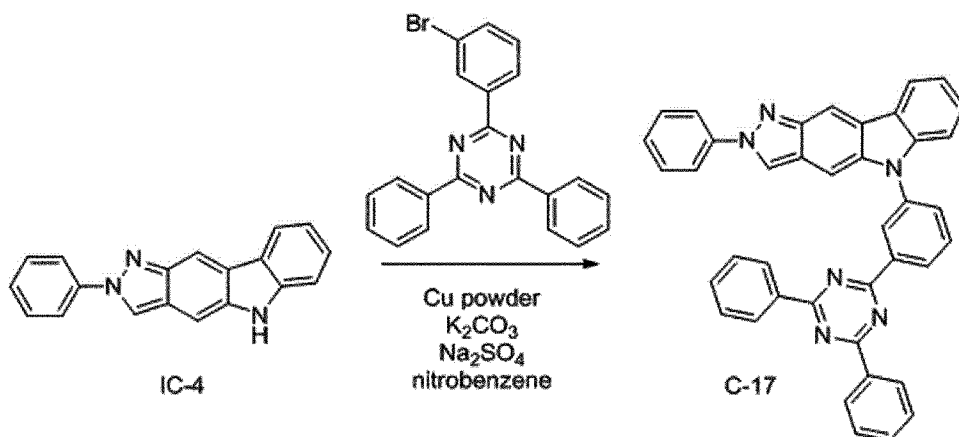
[291] 합성에 12에서 사용된 화합물 IC-1 대신 준비예 2에서 합성된 IC-3 (3.76 g, 13.29 mmol)를 사용하는 것을 제외하고는, 합성에 12와 동일한 과정을 수행하여 화합물 C-16 (5.64 g, 수율: 72%)을 얻었다.

[292] GC-Mass (이론치: 589.69 g/mol, 측정치: 589 g/mol)

[293]

[294] [합성예 17] 화합물 C-17의 합성

[295]



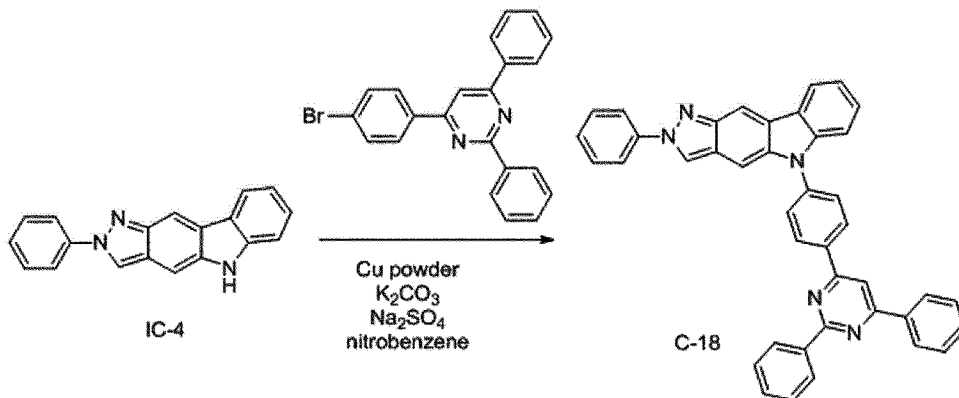
[296] 합성에 10에서 사용된 화합물 IC-1 대신 준비예 2에서 합성된 화합물 IC-4 (3.76 g, 13.29 mmol)를 사용하는 것을 제외하고는, 합성에 10과 동일한 과정을 수행하여 화합물 C-17 (4.63 g, 수율: 59%)을 얻었다.

[297] GC-Mass (이론치: 590.67 g/mol, 측정치: 590 g/mol)

[298]

[299] [합성예 18] 화합물 C-18의 합성

[300]



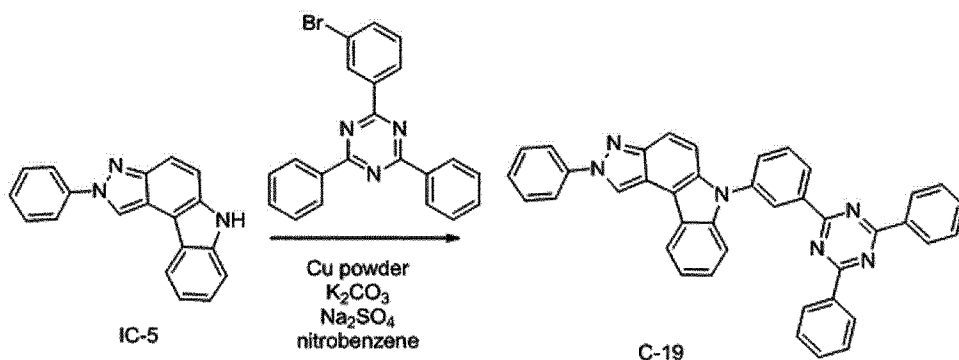
[301] 합성에 12에서 사용된 화합물 IC-1 대신 준비예 2에서 합성된 IC-4 (3.76 g, 13.29 mmol)를 사용하는 것을 제외하고는, 합성에 12와 동일한 과정을 수행하여 화합물 C-18 (4.93 g, 수율: 63%)을 얻었다.

[302] GC-Mass (이론치: 589.69 g/mol, 측정치: 589 g/mol)

[303]

[304] [합성예 19] 화합물 C-19의 합성

[305]



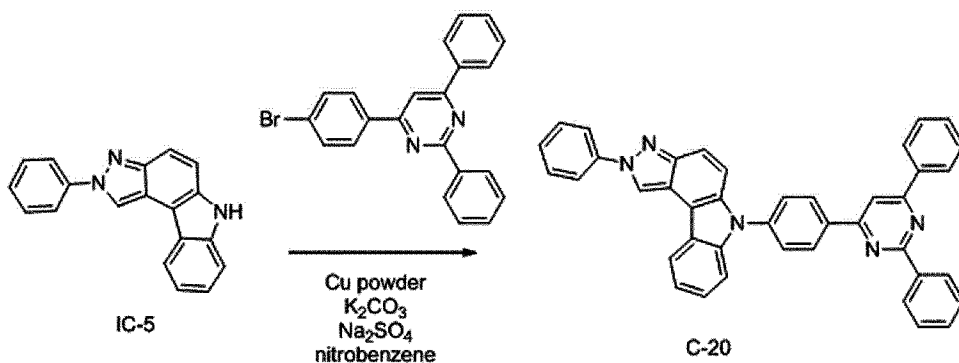
[306] 합성에 10에서 사용된 화합물 IC-1 대신 준비예 3에서 합성된 화합물 IC-5 (3.76 g, 13.29 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성에 10과 동일한 과정을 수행하여 화합물 C-19 (6.83 g, 수율: 87%)을 얻었다.

[307] GC-Mass (이론치: 590.67 g/mol, 측정치: 590 g/mol)

[308]

[309] [합성예 20] 화합물 C-20의 합성

[310]



[311] 합성에 12에서 사용된 화합물 IC-1 대신 준비예 3에서 합성된 IC-5 (3.76 g, 13.29

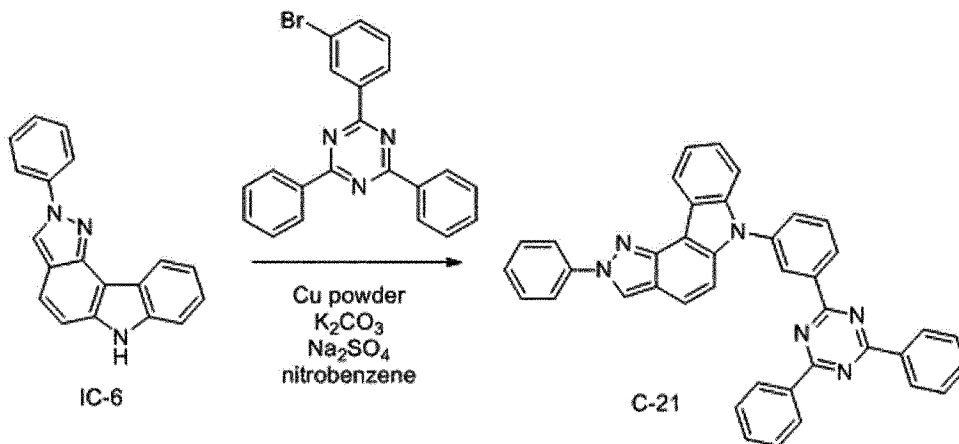
mmol)를 사용하는 것을 제외하고는, 합성에 12와 동일한 과정을 수행하여 화합물 C-20 (5.79 g, 수율: 74%)을 얻었다.

[312] GC-Mass (이론치: 589.69 g/mol, 측정치: 589 g/mol)

[313]

[314] [합성예 21] 화합물 C-21의 합성

[315]



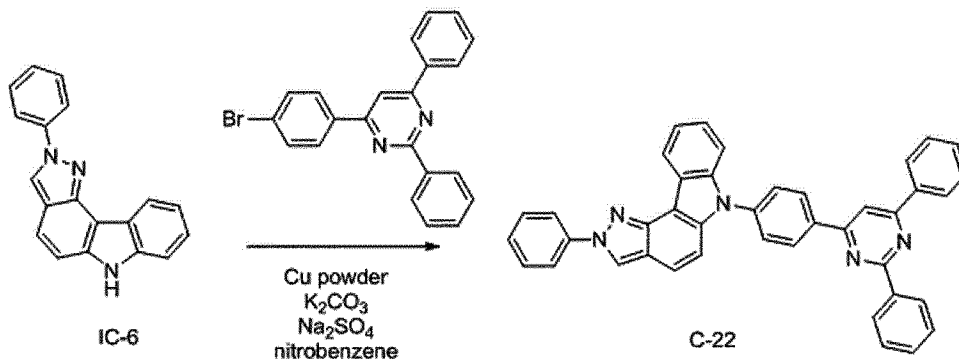
[316] 합성에 10에서 사용된 화합물 IC-1 대신 준비예 4에서 합성된 화합물 IC-6 (3.76 g, 13.29 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성에 10와 동일한 과정을 수행하여 화합물 C-21 (4.55 g, 수율: 58%)을 얻었다.

[317] GC-Mass (이론치: 590.67 g/mol, 측정치: 590 g/mol)

[318]

[319] [합성예 22] 화합물 C-22의 합성

[320]



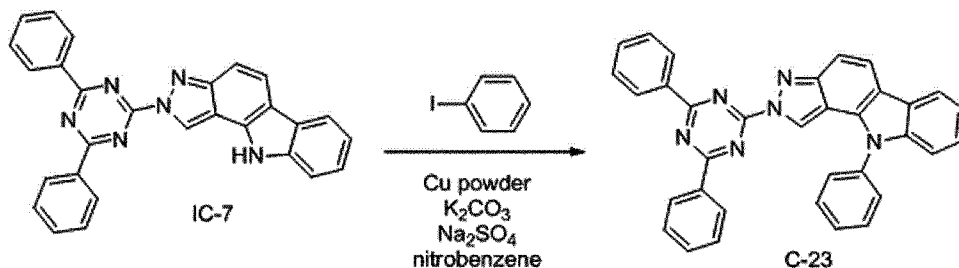
[321] 합성에 12에서 사용된 화합물 IC-1 대신 준비예 4에서 합성된 IC-6 (3.76 g, 13.29 mmol)를 사용하는 것을 제외하고는, 합성에 12와 동일한 과정을 수행하여 화합물 C-22 (3.84 g, 수율: 49%)을 얻었다.

[322] GC-Mass (이론치: 589.69 g/mol, 측정치: 589 g/mol)

[323]

[324] [합성예 23] 화합물 C-23의 합성

[325]



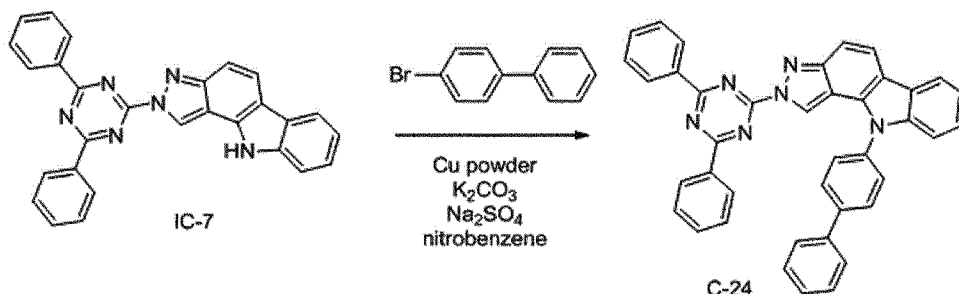
[326] 합성에 10에서 사용된 화합물 IC-1 대신 준비예 7에서 합성된 화합물 IC-7(5.82 g, 13.29 mmol)을 사용하고, 2-(3-bromophenyl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine 대신 iodobenzene(5.42 g, 26.57 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성에 10과 동일한 과정을 수행하여 화합물 C-23 (5.47 g, 수율: 80%)를 얻었다.

[327] GC-Mass (이론치: 514.58 g/mol, 측정치: 514 g/mol)

[328]

[329] [합성예 24] 화합물 C-24의 합성

[330]



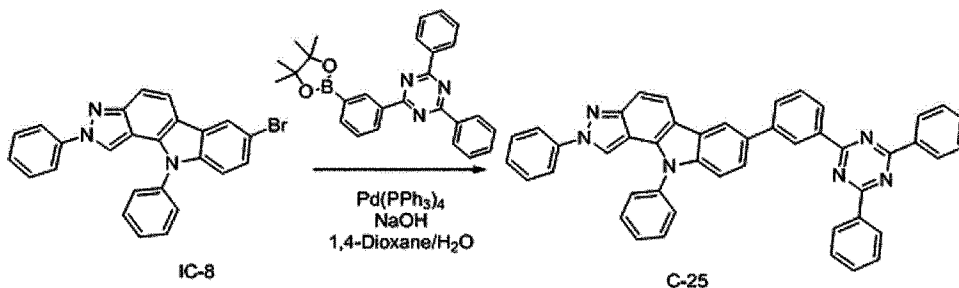
[331] 합성에 23에서 사용된 iodobenzene 대신 4-bromo-1,1'-biphenyl (6.19 g, 26.57 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성에 23과 동일한 과정을 수행하여 화합물 C-24 (5.18 g, 수율: 66%)를 얻었다.

[332] GC-Mass (이론치: 590.67 g/mol, 측정치: 590 g/mol)

[333]

[334] [합성예 25] 화합물 C-25의 합성

[335]



[336] 질소 기류 하에서 준비예 6에서 합성된 화합물 IC-8 (3.20 g, 7.31 mmol), 2,4-diphenyl-6-(3-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)phenyl)-1,3,5-triazine (3.81 g, 8.77 mmol), NaOH (0.87 g, 21.93 mmol), Pd(PPh₃)₄ (0.25 g, 0.21 mmol) 및 1,4-dioxane, H₂O (30 ml, 8 ml)를 혼합한 다음, 100 °C에서 12시간 동안 교반하였다. 반응 종결 후, 에틸아세테이트로 유기층을 추출한 다음, MgSO₄를 넣고 필터링하였다. 필터링된 유기층의 용매를 제거한 후

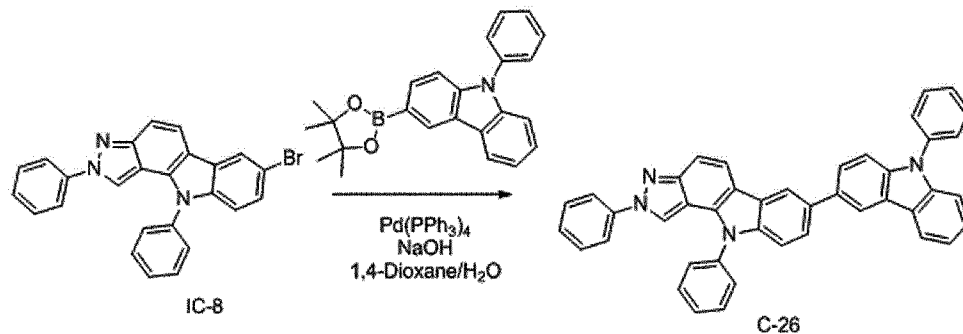
컬럼크로마토그래피를 이용하여 화합물 C-25 (2.38 g, 수율: 49%)를 얻었다.

[337] GC-Mass (이론치: 666.77 g/mol, 측정치: 666 g/mol)

[338]

[339] [합성예 26] 화합물 C-26의 합성

[340]



[341] 합성예 25에서 사용된

2,4-diphenyl-6-(3-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)phenyl)-1,3,5-triazine 대신 9-phenyl-3-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-9H-carbazole(3.23 g, 8.77 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 합성예 25와 동일한 과정을 수행하여 화합물 C-26 (1.71 g, 수율: 39%)을 얻었다.

[342] GC-Mass (이론치: 600.71 g/mol, 측정치: 600 g/mol)

[343]

[344] [실시예 1] 유기 EL 소자의 제작

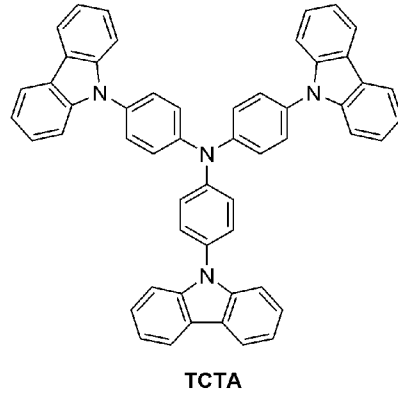
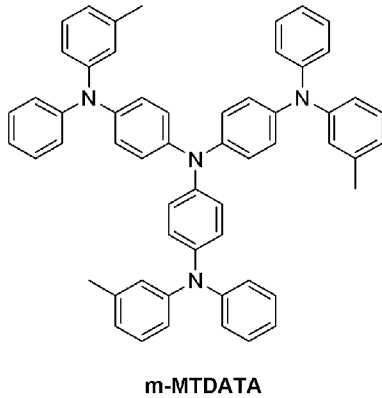
[345] 합성예 1에서 합성된 화합물 C-1을 통상적으로 알려진 방법으로 고순도 승화정제를 한 후 아래의 과정에 따라 녹색 유기 EL 소자를 제작하였다.

[346] 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 (Power sonic 405, 화신테크)로 이송시킨 다음, UV를 이용하여 상기 기판을 5분간 세정하고 진공 증착기로 기판을 이송하였다.

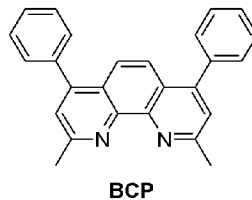
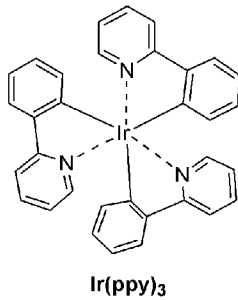
[347] 이렇게 준비된 ITO 투명 전극 위에 m-MTDATA (60 nm)/TCTA (80 nm)/화합물 C-1 + 10 % Ir(ppy)₃ (30 nm)/BCP (10 nm)/Alq₃ (30 nm)/LiF (1 nm)/Al (200 nm) 순으로 적층하여 유기 EL 소자를 제작하였다.

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

[349]



[350]



[351]

[352] **[실시예 2] ~ [실시예 26] - 녹색 유기 EL 소자의 제조**

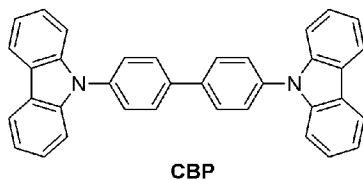
[353] 실시예 1에서 발광층 형성시 발광 호스트 물질로서 사용된 화합물 C-1 대신 합성예 2 ~ 26에서 각각 합성된 화합물 C-2 ~ C-26을 사용하는 것을 제외하고는, 실시예 1과 동일하게 수행하여 녹색 유기 EL 소자를 제조하였다.

[354]

[355] **[비교예 1] 유기 EL 소자의 제작**

[356] 실시예 1에서 발광층 형성시 발광 호스트 물질로서 화합물 C-1 대신 CBP를 사용하는 것을 제외하고는, 실시예 1과 동일한 과정으로 유기 EL 소자를 제작하였다. 사용된 CBP의 구조는 다음과 같다.

[357]



[358]

[359] **[평가예 1]**

[360] 실시예 1 내지 26 및 비교예 1에서 각각 제작된 유기 EL 소자에 대하여, 전류밀도 10 mA/cm²에서의 구동전압, 전류효율 및 발광 피크를 측정하였고, 그 결과를 하기 표 1에 나타내었다.

[361] **표 1**

[Table 1]

샘플	호스트	구동 전압 (V)	EL 피크 (nm)	전류효율 (cd/A)
실시예 1	C-1	6.89	515	40.5
실시예 2	C-2	6.61	518	41.5
실시예 3	C-3	6.68	515	41.3
실시예 4	C-4	6.62	516	43.5
실시예 5	C-5	6.87	518	41.7
실시예 6	C-6	6.64	517	41.6
실시예 7	C-7	6.91	518	38.8
실시예 8	C-8	6.65	518	40.3
실시예 9	C-9	6.91	517	40.2
실시예 10	C-10	6.65	515	39.1
실시예 11	C-11	6.91	517	39.2
실시예 12	C-12	6.84	516	39.3
실시예 13	C-13	6.66	516	39.4
실시예 14	C-14	6.63	517	41.2
실시예 15	C-15	6.68	517	41.2
실시예 16	C-16	6.71	517	38.8
실시예 17	C-17	6.69	517	41
실시예 18	C-18	6.7	517	40.6
실시예 19	C-19	6.71	517	40.7
실시예 20	C-20	6.72	516	40.8
실시예 21	C-21	6.89	516	39.8
실시예 22	C-22	6.73	518	40.9
실시예 23	C-23	6.73	516	38.4
실시예 24	C-24	6.87	518	41.2
실시예 25	C-25	6.75	516	41.2
실시예 26	C-26	6.75	516	38.3
비교예 1	CBP	6.93	516	38.2

[362] 상기 표1에 나타낸 바와 같이, 본 발명에 따른 화합물(C-1 ~ C-26)을 발광층으로 사용한 실시예 1 내지 26의 녹색 유기 EL 소자의 경우, 종래 CBP를 사용한

비교예 1의 녹색 유기 EL 소자에 비해, 효율 및 구동전압 면에서 우수한 성능을 나타내는 것을 알 수 있다.

[363]

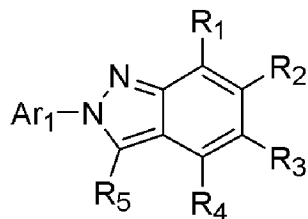
[364] 이상을 통해 본 발명의 바람직한 실시예에 대하여 설명하였지만, 본 발명은 이에 한정되는 것이 아니고 특허청구범위와 발명의 상세한 설명의 범위 안에서 여러 가지로 변형하여 실시하는 것이 가능하고 이 또한 발명의 범주에 속하는 것은 당연하다.

청구범위

[청구항 1]

하기 화학식 1로 표시되는 화합물:

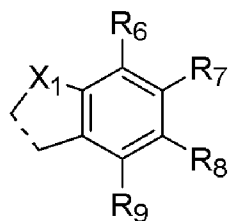
[화학식 1]



(상기 화학식 1에서,

R₁ 내지 R₅는 서로 동일하거나 상이하며, 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 시아노, 치환 또는 비치환된 C₁~C₄₀의 알킬기, 치환 또는 비치환된 C₂~C₄₀의 알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₂~C₄₀의 알키닐기, 치환 또는 비치환된 C₆~C₄₀의 아릴기, 치환 또는 비치환된 핵원자수 5 내지 40의 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 C₆~C₄₀의 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 C₁~C₄₀의 알킬옥시기, 치환 또는 비치환된 C₆~C₄₀의 아릴아민기, 치환 또는 비치환된 C₃~C₄₀의 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C₁~C₄₀의 알킬실릴기, 치환 또는 비치환된 C₁~C₄₀의 알킬보론기, 치환 또는 비치환된 C₆~C₄₀의 아릴보론기, 치환 또는 비치환된 C₆~C₄₀의 아릴포스핀기, 치환 또는 비치환된 C₆~C₄₀의 아릴포스핀옥사이드기, 및 치환 또는 비치환된 C₆~C₄₀의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택되거나, 또는 인접하는 기와 결합하여 축합 고리를 형성할 수 있으며, 다만, R₁ 및 R₂, R₂ 및 R₃, R₃ 및 R₄ 중 적어도 하나는 서로 결합하여 하기 화학식 2로 표시되는 축합고리를 형성하고;

[화학식 2]



상기 화학식 2에서,

X₁은 O, S, Se, N(Ar₂), C(Ar₃)(Ar₄) 및 Si(Ar₅)(Ar₆)으로 이루어진 군에서 선택되고;

Ar₁ 내지 Ar₆는 서로 동일하거나 상이하며, 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 C₁~C₄₀의 알킬기, 치환 또는 비치환된 C₂~C₄₀의 알케닐기, 치환 또는 비치환된 C₂~C₄₀의 알키닐기, 치환 또는

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

R_6 내지 R_9 는 서로 동일하거나 상이하며, 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 시아노, 치환 또는 비치환된 $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬기, 치환 또는 비치환된 $C_2 \sim C_{40}$ 의 알케닐기, 치환 또는 비치환된 $C_2 \sim C_{40}$ 의 알키닐기, 치환 또는 비치환된 $C_6 \sim C_{40}$ 의 아릴기, 치환 또는 비치환된 핵원자수 5 내지 40의 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 $C_6 \sim C_{40}$ 의 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬옥시기, 치환 또는 비치환된 $C_6 \sim C_{40}$ 의 아릴아민기, 치환 또는 비치환된 $C_3 \sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬실릴기, 치환 또는 비치환된 $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬보론기, 치환 또는 비치환된 $C_6 \sim C_{40}$ 의 아릴보론기, 치환 또는 비치환된 $C_6 \sim C_{40}$ 의 아릴포스핀기, 치환 또는 비치환된 $C_6 \sim C_{40}$ 의 아릴포스핀옥사이드기 및 치환 또는 비치환된 $C_6 \sim C_{40}$ 의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택되거나, 또는 인접하는 기와 결합하여 축합 고리를 형성할 수 있으며;

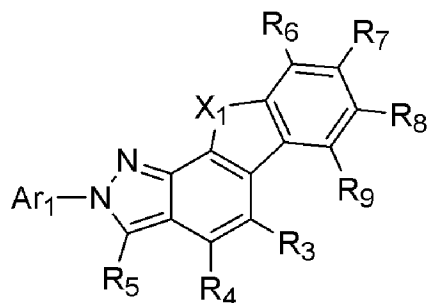
이때, 상기 R_1 내지 R_9 , 및 Ar_1 내지 Ar_6 의 알킬기, 알케닐기, 알키닐기, 아릴기, 헤테로아릴기, 아릴옥시기, 알킬옥시기, 아릴아민기, 시클로알킬기, 헤테로시클로알킬기, 알킬실릴기, 알킬보론기, 아릴보론기, 아릴포스핀기, 아릴포스핀옥사이드기 및 아릴실릴기는 각각 독립적으로 중수소, 할로젠, 시아노기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_2 \sim C_{40}$ 의 알케닐기, $C_2 \sim C_{40}$ 의 알키닐기, $C_6 \sim C_{40}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 40의 헤테로아릴기, $C_6 \sim C_{40}$ 의 아릴옥시기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬옥시기, $C_6 \sim C_{40}$ 의 아릴아민기, $C_3 \sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬실릴기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬보론기, $C_6 \sim C_{40}$ 의 아릴보론기, $C_6 \sim C_{40}$ 의 아릴포스핀기, $C_6 \sim C_{40}$ 의 아릴포스핀옥사이드기 및 $C_6 \sim C_{40}$ 의 아릴실릴기로 이루어진 군으로부터 선택되는 1종 이상의 치환기로 치환될 수 있고, 다만 상기 치환기가 복수인 경우, 서로 동일하거나 상이할 수 있음).

[청구항 2]

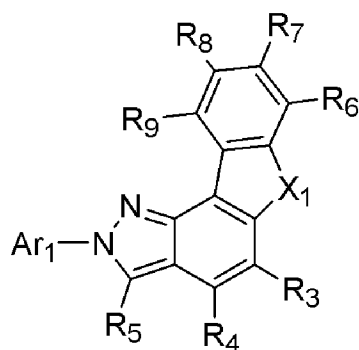
제1항에 있어서,

상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 하기 화학식 3 내지 8 중 어느 하나로 표시되는 것이 특징인 화합물:

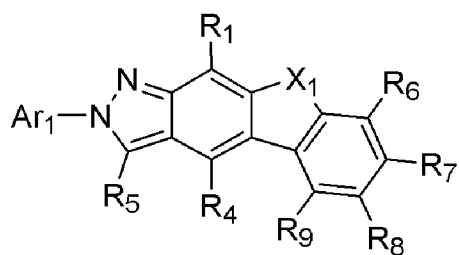
[화학식 3]



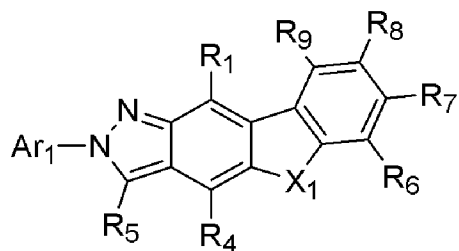
[화학식 4]



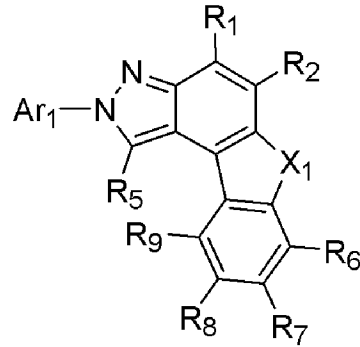
[화학식 5]



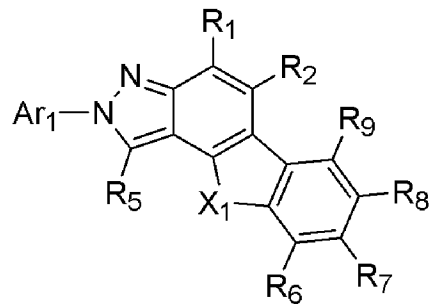
[화학식 6]



[화학식 7]



[화학식 8]



(상기 화학식 3 내지 화학식 8 에서,

R_1 내지 R_9 , Ar_1 및 X_1 은 각각 제1항에서 정의된 바와 같음).

[청구항 3]

제1항에 있어서,

X_1 은 $N(Ar_2)$ 이고,

Ar_2 는 제1항에서 정의한 바와 같은 것이 특징인 화합물.

[청구항 4]

제1항에 있어서,

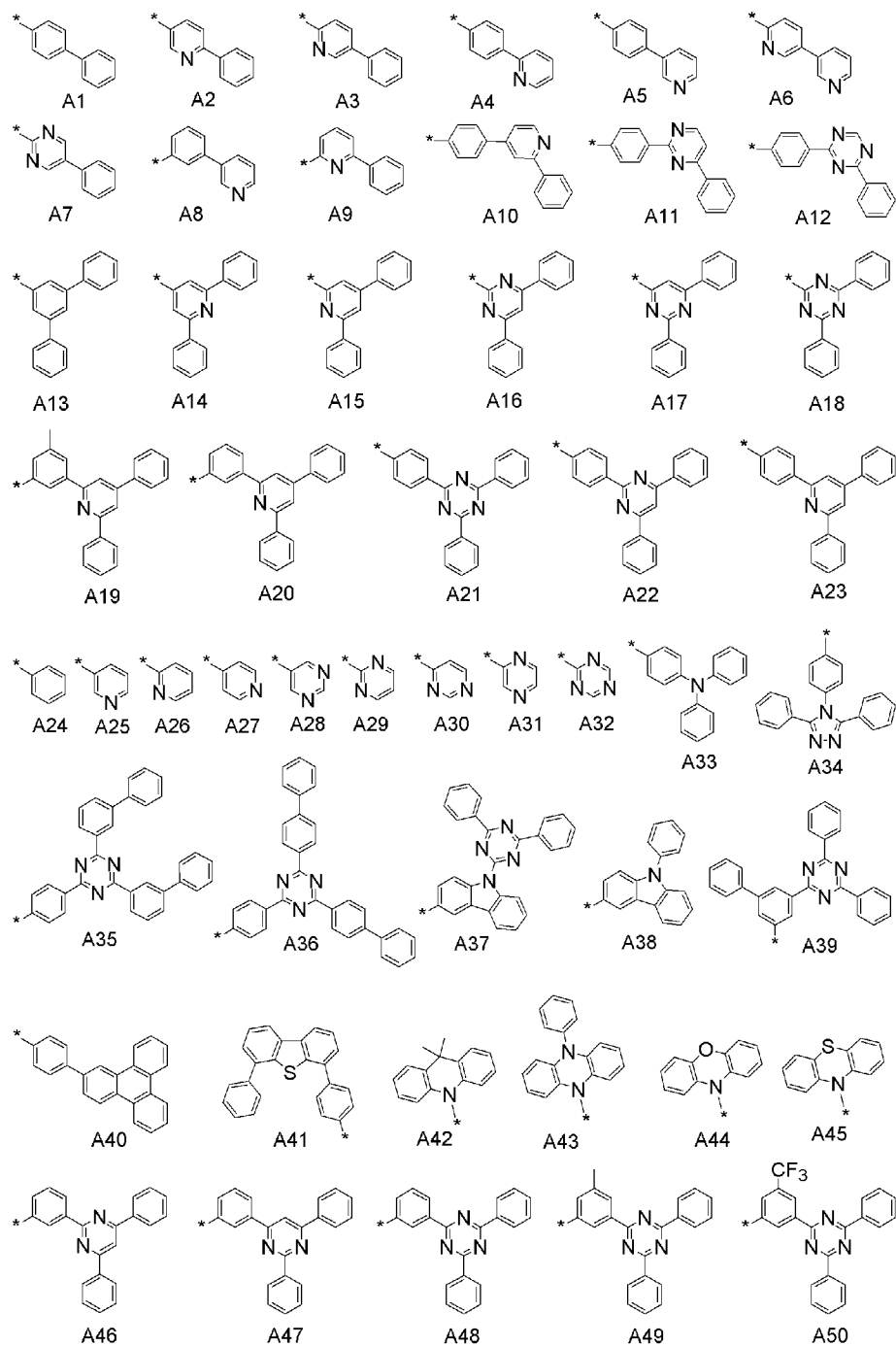
상기 Ar_1 내지 Ar_6 는 서로 동일하거나 상이하며, 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 $C_6 \sim C_{40}$ 의 아릴기, 및 치환 또는 비치환된 핵원자수 5 내지 40의 헤테로아릴기로 이루어진 군으로부터 선택되고,

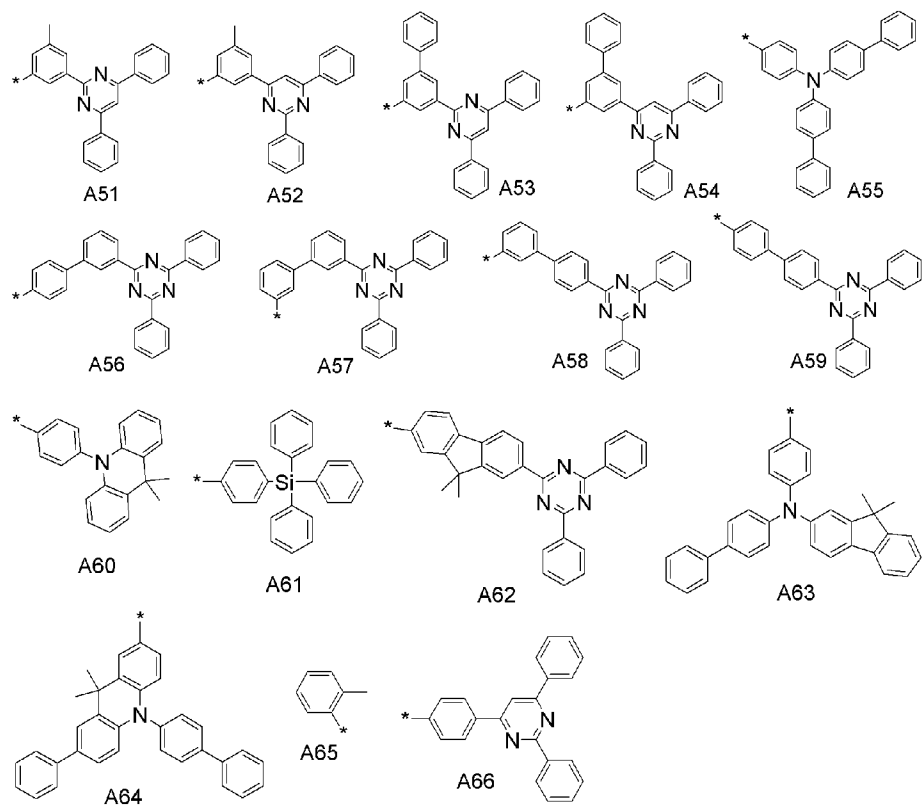
이때, Ar_1 내지 Ar_6 의 아릴기 및 헤테로아릴기는 각각 독립적으로 중수소, 할로젠, 시아노기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_2 \sim C_{40}$ 의 알케닐기, $C_2 \sim C_{40}$ 의 알키닐기, $C_6 \sim C_{40}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 40의 헤테로아릴기, $C_6 \sim C_{40}$ 의 아릴옥시기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬옥시기, $C_6 \sim C_{40}$ 의 아릴아민기, $C_3 \sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬실릴기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬보론기, $C_6 \sim C_{40}$ 의 아릴보론기, $C_6 \sim C_{40}$ 의 아릴포스핀기, $C_6 \sim C_{40}$ 의 아릴포스핀옥사이드기 및 $C_6 \sim C_{40}$ 의 아릴실릴기로 이루어진 군으로부터 선택되는 1종 이상의 치환기로 치환될 수 있되, 상기 치환기가 복수인 경우, 서로 동일하거나 상이할 수 있는 것이 특징인 화합물.

[청구항 5]

제1항에 있어서,

상기 Ar₁ 내지 Ar₆는 서로 동일하거나 상이하며, 각각 독립적으로 하기 치환기 A1 내지 A66으로 이루어진 군에서 선택되는 것이 특징인 화합물:





[청구항 6]

양극, 음극, 및 상기 양극과 음극 사이에 개재(介在)된 1층 이상의 유기물층을 포함하는 유기 전계 발광 소자에 있어서,
상기 1층 이상의 유기물층 중 적어도 하나는 제1항 내지 제5항 중 어느 한 항에 기재된 화합물을 포함하는 것이 특징인 유기 전계 발광 소자.

[청구항 7]

제6항에 있어서,
상기 화합물을 포함하는 유기물층은 발광층인 것이 특징인 유기 전계 발광 소자.