

(12) 특허협력조약에 의하여 공개된 국제출원

(19) 세계지식재산권기구
국제사무국

(43) 국제공개일
2017 년 10 월 5 일 (05.10.2017)



(10) 국제공개번호
WO 2017/171241 A1

- (51) 국제특허분류:
C07D 209/56 (2006.01) C09K 11/06 (2006.01)
C07D 403/04 (2006.01) H01L 51/50 (2006.01)
C07D 403/10 (2006.01) H01L 51/00 (2006.01)
- (21) 국제출원번호: PCT/KR2017/001917
- (22) 국제출원일: 2017 년 2 월 22 일 (22.02.2017)
- (25) 출원언어: 한국어
- (26) 공개언어: 한국어
- (30) 우선권정보:
10-2016-0036748 2016 년 3 월 28 일 (28.03.2016) KR
- (71) 출원인: 주식회사 두산 (DOOSAN CORPORATION)
[KR/KR]; 04563 서울시 중구 장충단로 275, Seoul (KR).
- (72) 발명자: 김충한 (KIM, Choong Han); 16858 경기도 용인시 수지구 수지로 112 번길 10 (성북동), Gyeonggi-do (KR). 박우재 (PARK, Woo Jae); 16858 경기도 용인시 수지구 수지로 112 번길 10 (성북동), Gyeonggi-do (KR).
- (74) 대리인: 윤여광 (YOON, Yu Kwang) 등; 03737 서울시 서대문구 충정로 7, 구세군빌딩 15 층, 위더피플법률사무소, 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, DJ, 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, KH, KN, KP, KW, KZ, LA, LC, LK, LR, LS, LU, LY, MA, MD, ME, MG, MK, MN, MW, MX, MY, MZ, NA, NG, NI, NO, NZ, OM, PA, PE, PG, PH, PL, PT, QA, RO, RS, RU, RW, SA, SC, SD, SE, SG, SK, SL, SM, ST, SV, SY, TH, TJ, TM, TN, TR, TT, TZ, UA, UG, US, UZ, VC, VN, ZA, ZM, ZW.

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

공개:

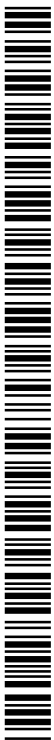
— 국제조사보고서와 함께 (조약 제 21 조(3))

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

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

(57) Abstract: The present invention relates to: a novel compound having an excellent light-emitting ability; and an organic electroluminescent element having characteristics, which are improved, such as light-emitting efficiency, driving voltage, and lifespan since one or more organic layers thereof contain the compound.

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



WO 2017/171241 A1

명세서

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

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

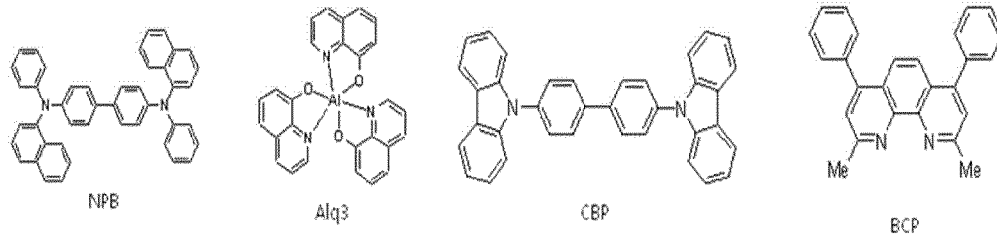
[2]

배경기술

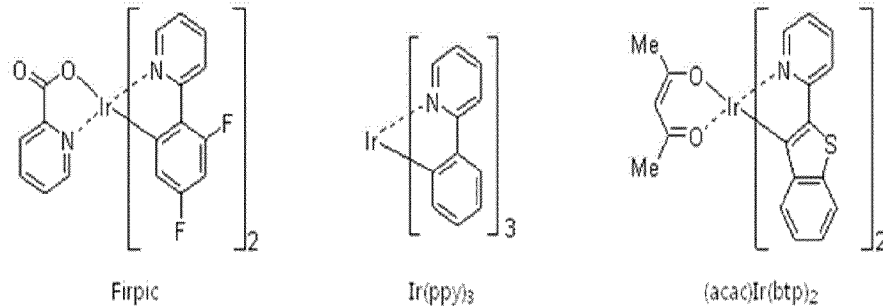
- [3] 1950년대 Bermanose의 유기 박막 발광 관측을 시점으로 1965년 안트라센 단결정을 이용한 청색 전기발광으로 이어진 유기 전계 발광 (electroluminescent, EL) 소자(이하, 간단히 '유기 EL 소자'로 칭함)에 대한 연구는 1987년 탕(Tang)에 의하여 정공층과 발광층의 기능층으로 나눈 적층구조의 유기 EL 소자가 제시되었다. 이후 고효율, 고수명의 유기 EL 소자를 만들기 위하여, 소자 내 각각의 특징적인 유기물 층을 도입하는 형태로 발전하여 왔으며, 이에 사용되는 특화된 물질의 개발로 이어졌다.
- [4] 유기 전계 발광 소자는 두 전극 사이에 전압을 걸어 주면 양극에서는 정공이 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.
- [5] 유기 EL 소자의 발광층 형성재료는 발광색에 따라 청색, 녹색, 적색 발광 재료로 구분될 수 있다. 그밖에, 보다 나은 천연색을 구현하기 위한 발광재료로 노란색 및 주황색 발광재료도 사용된다. 또한, 색순도의 증가와 에너지 전이를 통한 발광 효율을 증가시키기 위하여, 발광 재료로서 호스트/도판트 계를 사용할 수 있다. 도판트 물질은 유기 물질을 사용하는 형광 도판트와 Ir, Pt 등의 중원자(heavy atoms)가 포함된 금속 착체 화합물을 사용하는 인광 도판트로 나눌 수 있다. 이러한 인광 재료의 개발은 이론적으로 형광에 비해 4배까지의 발광 효율을 향상시킬 수 있어 인광 도판트 뿐만 아니라 인광 호스트 재료들에 대해 관심이 집중되고 있다.
- [6] 현재까지 정공 주입층, 정공 수송층, 정공 차단층, 전자 수송층으로는, 하기 화학식으로 표현된 NPB, BCP, Alq₃ 등이 널리 알려져 있고, 발광 재료는 안트라센 유도체들이 형광 도판트/호스트 재료로서 보고되고 있다. 특히 발광재료 중 효율 향상 측면에서 큰 장점을 가지고 있는 인광 재료로서는 Firpic, Ir(ppy)₃, (acac)Ir(btp)₂ 등과 같은 Ir을 포함하는 금속 착체 화합물이 청색, 녹색,

적색 도판트 재료로 사용되고 있다. 현재까지는 CBP가 인광 호스트 재료로 우수한 특성을 나타내고 있다.

[7]



[8]



[9] 그러나 기존의 재료들은 발광 특성 측면에서는 유리한 면이 있으나, 유리전이온도가 낮고 열적 안정성이 매우 좋지 않아 유기 EL 소자에서의 수명 측면에서 만족할만한 수준이 되지 못하고 있다.

[10]

발명의 상세한 설명

기술적 과제

[11] 상기한 문제점을 해결하기 위해, 본 발명은 유기 전계 발광 소자에 적용할 수 있으며, 정공, 전자 주입 및 수송능, 발광능 등이 모두 우수한 신규 유기 화합물을 제공하는 것을 목적으로 한다.

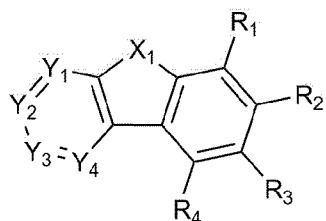
[12] 또한 본 발명은 상기 신규 유기 화합물을 포함하여 낮은 구동전압과 높은 발광효율을 나타내며 수명이 향상되는 유기 전계 발광 소자를 제공하는 것을 또 다른 목적으로 한다.

[13]

과제 해결 수단

[14] 전술한 목적을 달성하기 위해, 본 발명은 하기 화학식 1로 표시되는 화합물을 제공한다.

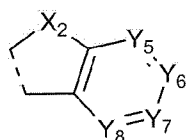
[15] [화학식 1]



[16] 상기 화학식 1에서,

[17] R_1 과 R_2 , R_2 와 R_3 , 및 R_3 과 R_4 중 적어도 한쌍은 서로 결합하여 하기 화학식 2와 축합 환을 형성하고;

[18] [화학식2]



[19] 상기 화학식 2에서,

[20] 점선은 화학식 1과 축합이 이루어지는 부분이고;

[21] X_1 및 X_2 는 서로 동일하거나 또는 상이하며, 각각 독립적으로 O, S, Se, N(Ar_1), C(Ar_2)(Ar_3) 및 Si(Ar_4)(Ar_5)로 구성된 군으로부터 선택되고;

[22] Y_1 내지 Y_8 은 서로 동일하거나 또는 상이하며, 각각 독립적으로 N 또는 C(R_5)에서 선택되고, 이때 R_5 가 복수인 경우, 복수의 R_5 는 서로 같거나 또는 상이하며;

[23] 축합환을 비(非)형성하는 R_1 내지 R_4 및 R_5 는 서로 같거나 또는 상이하며, 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 40의 헤테로시클로알킬기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬옥시기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴옥시기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬실릴기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴실릴기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬보론기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴보론기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴포스핀기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴포스핀옥사이드기 및 $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택되고, 인접한 각각의 R_5 는 서로 결합하여 축합 방향족환 또는 축합 헤테로방향족환을 형성할 수 있으며;

[24] Ar_1 내지 Ar_5 는 서로 동일하거나 또는 상이하며, 각각 독립적으로 $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_2\sim C_{40}$ 의 알케닐기, $C_2\sim C_{40}$ 의 알키닐기, $C_3\sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬옥시기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴옥시기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬실릴기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴실릴기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬보론기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴보론기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴포스핀기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴포스핀옥사이드기 및 $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택되고;

[25] 다만 상기 X_1 및 X_2 중 적어도 하나는 C(Ar_2)(Ar_3)이고, 이때 Ar_2 와 Ar_3 중 하나는 $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬기이고, 다른 하나는 $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴기이며;

[26] 상기 R_1 내지 R_4 , R_5 , Ar_1 내지 Ar_5 에서 알킬기, 시클로알킬기, 헤테로시클로알킬기, 아릴기, 헤테로아릴기, 알킬옥시기, 아릴옥시기, 알킬실릴기, 아릴실릴기, 알킬보론기, 아릴보론기, 아릴포스핀기, 아릴포스핀옥사이드기 및 아릴아민기는 각각 독립적으로, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_2\sim C_{40}$ 의 알케닐기, $C_2\sim C_{40}$ 의 알키닐기, $C_3\sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬옥시기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴옥시기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬실릴기,

C₆~C₆₀의 아릴실릴기, C₁~C₄₀의 알킬보론기, C₆~C₆₀의 아릴보론기, C₆~C₆₀의 아릴포스핀기, C₆~C₆₀의 아릴포스핀옥사이드기 및 C₆~C₆₀의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상으로 치환될 수 있으며, 이때 복수개의 치환기로 치환될 경우 이들은 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

- [27] 또한, 본 발명은 (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 중 적어도 하나는 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하는 것을 특징으로 하는 유기 전계 발광 소자를 제공한다.

[28]

발명의 효과

- [29] 본 발명의 화학식 1로 표시되는 화합물은 열적 안정성 및 발광 특성이 우수하기 때문에 유기 전계 발광 소자의 유기물층의 재료로 사용될 수 있다. 특히, 본 발명의 화학식 1로 표시되는 화합물을 인광 호스트 재료로 사용할 경우, 종래의 호스트 재료에 비해 우수한 발광 성능, 낮은 구동전압, 높은 효율 및 장수명을 갖는 유기 전계 발광 소자를 제조할 수 있고, 나아가 성능 및 수명이 향상된 풀 칼라 디스플레이 패널도 제조할 수 있다.

[30]

발명의 실시를 위한 형태

- [31] 이하, 본 발명을 상세히 설명한다.
- [32] <신규 유기 화합물>
- [33] 본 발명은 카바졸(carbazole)에 다중 헤테로사이클릭환(heterocyclic ring), 예컨대 인덴 모이어티(indene moiety)가 축합되어 기본 골격을 이루며, 상기 인덴 모이어티에 서로 다른 모이어티(예, 알킬기; 아릴기 또는 헤테로아릴기)가 비대칭 구조(asymmetric structure)로 도입되어 화학식 1로 표시되는 것을 특징으로 한다.
- [34] 이러한 화학식 1로 표시되는 화합물은, 카바졸의 기본 정공 이동도를 높여주어 높은 효율 증가 효과를 도모할 수 있으며, 인덴 모이어티에 도입된 디메틸기(dimethyl group)의 공간상 부피(Bulkiness)를 증가시켜 삼중항 에너지(T1)를 높여주므로 발광효율을 증가시킬 수 있다.
- [35] 또한 인덴 모이어티에 디메틸이 치환되는 경우 2개의 메틸기가 나타내는 최적각에 비해, 메틸페닐기가 치환되었을 경우 메틸기와 페닐기 간의 최적각이 보다 크기 때문에, 전자 분리(electron separation) 및 밴드갭(band gap)을 극대화하는 효과를 도모할 수 있으며, 소자의 정공(hole)과 전자(electron) 간의 밸런스를 맞추어 소자 특성을 향상시킬 수 있다.
- [36] 보다 구체적으로, 유기 전계 발광 소자의 인광 발광층에서, 호스트 물질의 삼중항 에너지 갭은 일반적으로 도펀트의 삼중항 에너지 갭보다 높아야 한다. 즉, 호스트의 가장 낮은 여기 상태가 도펀트의 가장 낮은 방출 상태보다

에너지가 더 높은 경우, 인광 발광 효율이 향상될 수 있다. 상기 화학식 1의 화합물은 삼중항 에너지가 높고, 넓은 일중항 에너지 준위와 높은 삼중항 에너지 준위를 가지는 인텐 유도체가 축합되어 있는 기본 골격에 특정의 치환기가 도입됨으로써, 에너지 준위가 도펀트보다 높게 조절될 수 있어 호스트 물질로 사용될 수 있다.

- [37] 또한 본 발명의 신규 화합물은 전자 공여성이 큰 전자주게기(electron donating group, EDG)인 인텐(indene)과 카바졸(carbazole) 모이어티가 융합되므로, 삼중항 에너지(T1)가 크고, 전기화학적으로 안정하며, 도펀트로의 캐리어 전이가 용이하면서 에너지를 가두어 두는 관점에서도 용이하다. 이에 따라, 발광층에서 생성된 엑시톤이 발광층에 인접하는 전자수송층 또는 정공수송층으로 확산되는 것을 방지할 수 있다. 이러한 화학식 1의 화합물을 이용하여 정공 수송층과 발광층 사이에 유기물층(이하, '발광 보조층'이라 함)을 형성할 경우, 상기 화합물에 의해서 엑시톤의 확산이 방지되기 때문에, 상기 제1 엑시톤 확산 방지층을 포함하지 않은 종래의 유기 전계 발광 소자와 달리, 실질적으로 발광층 내에서 발광에 기여하는 엑시톤의 수가 증가되어 소자의 발광 효율이 개선될 수 있다. 또한, 상기 화학식 1의 화합물을 이용하여 발광층과 전자 수송층 사이에 유기물층(이하, '수명 개선층'이라 함)을 형성할 경우에도, 상기 화학식 1의 화합물에 의해 엑시톤의 확산이 방지됨으로써, 유기 전계 발광 소자의 내구성 및 안정성이 향상될 수 있고, 이로 인해 소자의 반감 수명이 효율적으로 증가될 수 있다. 이와 같이, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 발광층의 호스트 이외에, 발광 보조층 재료 또는 수명 개선층 재료로 사용될 수 있다.
- [38] 아울러, 상기 화학식 1의 화합물은 상기 기본 골격에 도입되는 치환기의 종류에 따라 HOMO 및 LUMO 에너지 레벨을 조절할 수 있어, 넓은 밴드갭을 가질 수 있고 높은 캐리어 수송성을 가질 수 있다. 일례로, 상기 화합물은 상기 기본 골격에 질소-함유 헤테로환(예컨대, 피리딘기, 피리미딘기, 트리아진기 등)과 같이 전자 흡수성이 큰 전자 끌개기(EWG)가 결합될 경우, 분자 전체가 바이폴라(bipolar) 특성을 갖기 때문에, 정공과 전자의 결합력을 높일 수 있다. 이와 같이, 상기 기본 골격에 EWG가 도입된 상기 화학식 1의 화합물은 우수한 캐리어 수송성 및 발광 특성이 우수하기 때문에, 유기 전계 발광 소자의 발광층 재료 이외에, 전자주입/수송층 재료, 또는 수명 개선층 재료로도 사용될 수 있다.
- [39] 반면에, 상기 화학식 1의 기본 골격에 아릴아민기, 카바졸기, 터페닐기, 트리페닐렌기 등과 같이 전자 공여성이 큰 전자 주게기(EDG)가 결합될 경우, 정공의 주입 및 수송이 원활하게 이루어지기 때문에, 발광층 재료 이외에, 정공주입/수송층 또는 발광 보조층 재료로도 유용하게 사용될 수 있다.
- [40] 이와 같이, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 유기 전계 발광 소자의 발광 특성을 향상시킴과 동시에, 정공 주입/수송 능력, 전자 주입/수송 능력, 발광 효율, 구동 전압, 수명 특성 등을 향상시킬 수 있다. 따라서, 본 발명에 따른 화학식 1의 화합물은 유기 전계 발광 소자의 유기물층 재료, 바람직하게는

발광층 재료(청색, 녹색 및/또는 적색의 인광 호스트 재료), 전자 수송/주입층 재료 및 정공 수송/주입층 재료, 발광보조층 재료, 수명개선층 재료, 더 바람직하게는 발광층 재료, 전자 주입층 재료, 발광보조층 재료, 수명 개선층 재료로 사용될 수 있다.

- [41] 나아가, 상기 화학식 1의 화합물은 상기 기본 골격에 다양한 치환체, 특히 아릴기 및/또는 헤테로아릴기가 도입되어 화합물의 분자량이 유의적으로 증대됨으로써, 유리 전이온도(T_g)가 향상되어 종래의 발광 재료(예를 들어, 4,4-dicarbazolybiphenyl (이하, 'CBP'라 함)보다 높은 열적 안정성을 가질 뿐만 아니라 캐리어 수송능, 발광능 등이 우수하다. 또한, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 유기물층의 결정화 억제에도 효과가 있으므로, 이를 포함하는 유기 전계 발광 소자는 성능 및 수명 특성이 크게 향상될 수 있고, 이러한 유기 전계 발광 소자가 적용된 풀 칼라 유기 발광 패널도 성능이 극대화될 수 있다.
- [42] 본 발명에서는 화학식 1로 표시되는 화합물(예, 카바졸)과 화학식 2로 표시되는 화합물(예, 인덴 모이어티)이 축합하여 기본 골격을 이루되, 상기 인덴 모이어티에 서로 다른 치환기(예, 알킬기; 아릴기 또는 헤테로아릴기 등)가 도입되어 비대칭 구조를 이룬다.
- [43] 상기 화학식 1로 표시되는 화합물에서, X₁ 및 X₂는 서로 동일하거나 또는 상이하며, 각각 독립적으로 O, S, Se, N(Ar₁), C(Ar₂)(Ar₃) 및 Si(Ar₄)(Ar₅)로 구성된 군으로부터 선택된다.
- [44] 이때 상기 X₁ 및 X₂ 중 적어도 하나는 C(Ar₂)(Ar₃)이고, 이때 Ar₂와 Ar₃ 중 하나는 C₁~C₄₀의 알킬기이고, 다른 하나는 C₆~C₆₀의 아릴기인 것이 바람직하다. 또한 상기 X₁ 및 X₂ 중 다른 하나는 O, S, Se, N(Ar₁), 및 Si(Ar₄)(Ar₅)로 구성된 군에서 선택될 수 있으며, 바람직하게는 N(Ar₁)이다.
- [45] Ar₁ 내지 Ar₅는 서로 동일하거나 또는 상이하며, 각각 독립적으로 C₁~C₄₀의 알킬기, C₂~C₄₀의 알케닐기, C₂~C₄₀의 알키닐기, C₃~C₄₀의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, C₆~C₆₀의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴기, C₁~C₄₀의 알킬옥시기, C₆~C₆₀의 아릴옥시기, C₁~C₄₀의 알킬실릴기, C₆~C₆₀의 아릴실릴기, C₁~C₄₀의 알킬보론기, C₆~C₆₀의 아릴보론기, C₆~C₆₀의 아릴포스핀기, C₆~C₆₀의 아릴포스핀옥사이드기 및 C₆~C₆₀의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택된다.
- [46] 본 발명에서, Ar₁ 내지 Ar₅는 각각 독립적으로 C₁~C₄₀의 알킬기, C₆~C₆₀의 아릴기, 및 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴기인 경우가 바람직하다.
- [47] Y₁ 내지 Y₈은 서로 동일하거나 또는 상이하며, 각각 독립적으로 N 또는 C(R₅)에서 선택되고, 이때 R₅가 복수인 경우, 복수의 R₅는 서로 같거나 또는 상이하다. 본 발명에서, Y₁ 내지 Y₈은 각각 독립적으로 C(R₅)인 경우가 바람직하다.
- [48] 축합환을 비(非)형성하는 R₁ 내지 R₄ 및 R₅는 서로 같거나 또는 상이하며, 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 시아노기, 니트로기, C₁~C₄₀의 알킬기, C₂~C₄₀의 알케닐기, C₂~C₄₀의 알키닐기, C₃~C₄₀의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40의

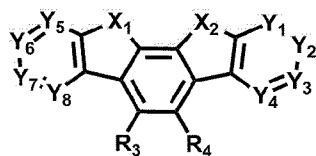
헤테로시클로알킬기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬옥시기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴옥시기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬실릴기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴실릴기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬보론기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴보론기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴포스핀기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴포스핀옥사이드기 및 $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택되고, 인접한 각각의 R_5 는 서로 결합하여 축합 방향족환 또는 축합 헤테로방향족환을 형성할 수 있다.

[49] 본 발명에서, R_1 내지 R_5 는 각각 독립적으로 수소, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴기, 및 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴기로 구성된 군에서 선택되는 것이 바람직하다.

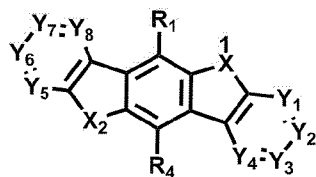
[50] 상기 R_1 내지 R_4 , R_5 , Ar_1 내지 Ar_5 에서, 알킬기, 알케닐기, 알키닐기, 아릴기, 헤테로아릴기, 아릴옥시기, 알킬옥시기, 아릴아민기, 시클로알킬기, 헤테로시클로알킬기, 알킬실릴기, 알킬보론기, 아릴보론기, 아릴포스핀기, 아릴포스핀옥사이드기 및 아릴실릴기는 각각 중수소, 할로젠, 시아노기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_2 \sim C_{40}$ 의 알케닐기, $C_2 \sim C_{40}$ 의 알키닐기, $C_6 \sim C_{40}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 40의 헤테로아릴기, $C_6 \sim C_{40}$ 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 군에서 선택된 1종 이상으로 치환될 수 있다. 이때 복수 개의 치환기가 치환되는 경우 이들은 각각 서로 동일하거나 상이하다.

[51] 전술한 화학식 1로 표시되는 화합물과 화학식 2가 서로 축합하여 형성되는 본 발명의 신규 화합물은, 하기 화학식 3 내지 화학식 5 중 어느 하나로 표시되는 화합물로 보다 구체화될 수 있다.

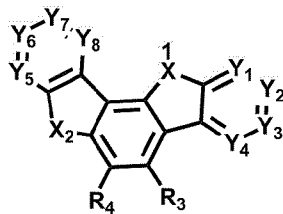
[52] [화학식3]



[53] [화학식4]



[54] [화학식 5]



[55] 상기 화학식 3 내지 화학식 5에 있어서,

[56] X_1 , X_2 , R_1 , $R_3 \sim R_4$ 및 Y_1 내지 Y_8 는 상기 화학식 1~2에서 정의된 바와 같다.

[57] 본 발명의 바람직한 일례에 따르면, X_1 은 $N(Ar_1)$ 이고, X_2 는 $C(Ar_2)(Ar_3)$ 이며,

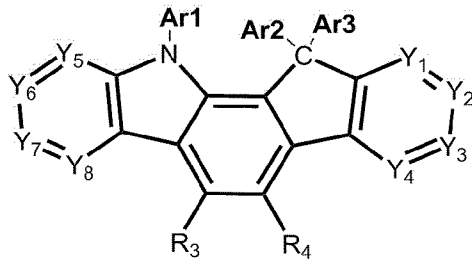
[58] Ar_1 은 $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴기 및 $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택되고;

[59] Ar_2 와 Ar_3 중 하나는 $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬기이고, 다른 하나는 $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴기일 수 있다.

[60] 전술한 화학식 3 내지 화학식 5는, 하기 화학식 3A 내지 화학식 5A로 보다 구체화될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

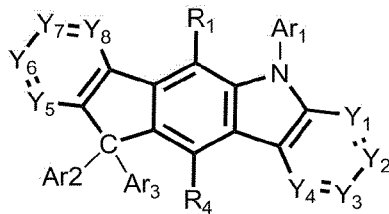
[61] [화학식 3A]

[62]



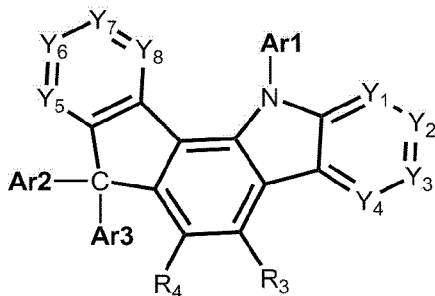
[63] [화학식 4A]

[64]



[65] [화학식 5A]

[66]



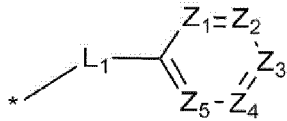
[67] 상기 화학식 3A 내지 화학식 5A에 있어서,

[68] Ar_1 은 $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴기, 또는 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴기이고;

[69] Ar_2 는 메틸기이고, Ar_3 는 페닐기인 것이 바람직하다.

[70] 한편 본 발명에 따른 화학식 1로 표시되는 화합물에서, 축합환을 비(非)형성하는 R_1 내지 R_5 , Ar_1 내지 Ar_5 중 적어도 하나는 하기 화학식 6으로 표시되는 치환체일 수 있으며, 바람직하게는 Ar_1 일 수 있다.

[71] [화학식6]



[72] 상기 화학식 6에서,

[73] *는 상기 화학식 1에 결합되는 부분을 의미하고;

[74] L_1 은 당 분야에 알려진 통상적인 통상적인 2가(divalent) 그룹의 연결기(Linker)일 수 있으며, 일례로 단일결합이거나, 또는 $C_6 \sim C_{18}$ 의 아릴렌기 및 핵원자수 5 내지 18의 헤테로아릴렌기로 이루어진 군에서 선택될 수 있다.

[75] 상기 L_1 의 보다 구체적인 예로는 페닐렌기, 비페닐렌기, 나프틸렌기, 안트라세닐렌기, 인데닐렌기, 피란트레닐렌기, 카르바졸릴렌기, 티오펜릴렌기, 인돌릴렌기, 푸리닐렌기, 퀴놀리닐렌기, 피롤릴렌기, 이머다졸릴렌기, 옥사졸릴렌기, 티아졸릴렌기, 트리아졸릴렌기, 피리디닐렌기, 피리미디닐렌기 등이 있다. 상기 화학식 6에서, L_1 은 단일결합이거나, 페닐렌기, 비페닐렌기 또는 카바졸릴기인 것이 바람직하다.

[76] Z_1 내지 Z_5 는 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 N 또는 $C(R_6)$ 이며, 다만 Z_1 내지 Z_5 중 적어도 하나는 N인 것이 바람직하다.

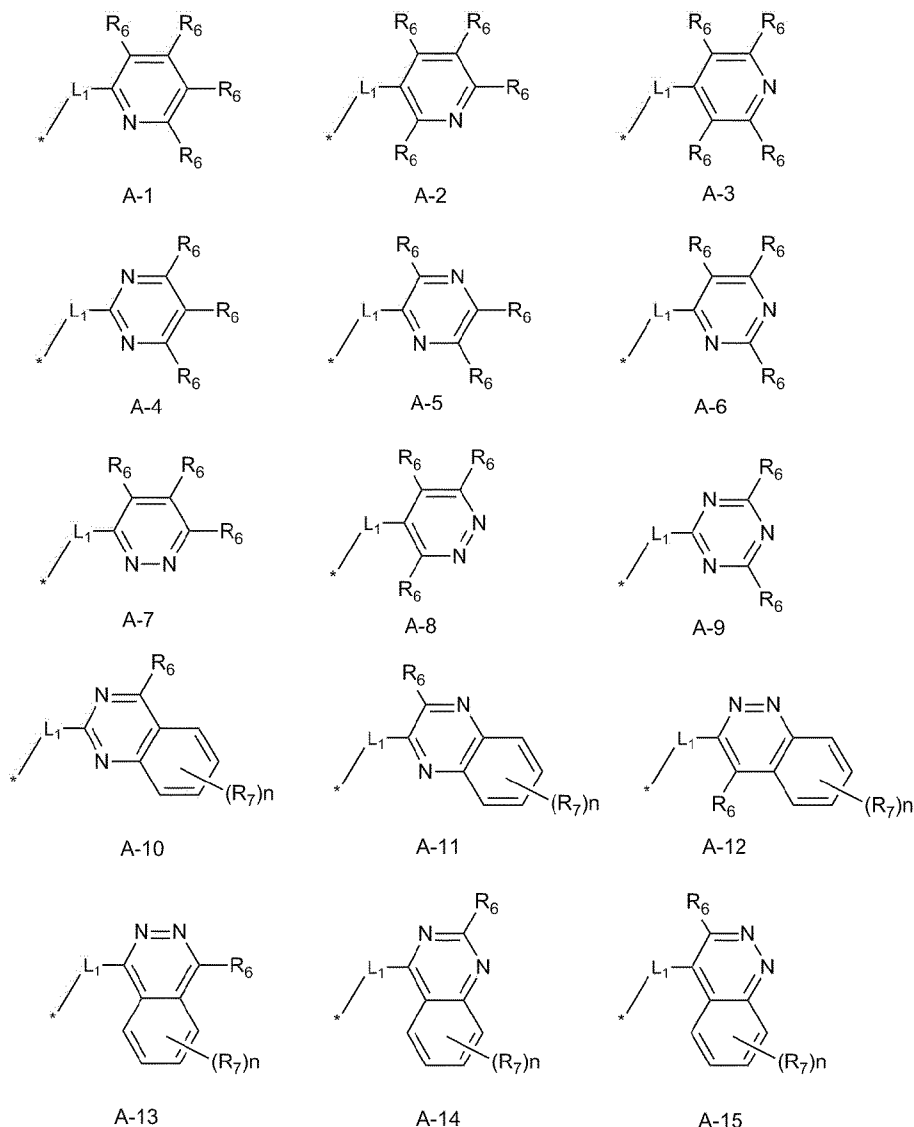
[77] 또한 R_6 이 복수인 경우, 복수의 R_6 는 서로 동일하거나 상이하며, 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 시아노기, 니트로기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_2 \sim C_{40}$ 의 알케닐기, $C_2 \sim C_{40}$ 의 알키닐기, $C_6 \sim C_{40}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 40의 헤테로아릴기, $C_6 \sim C_{40}$ 의 아릴옥시기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬옥시기, $C_3 \sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, $C_6 \sim C_{40}$ 의 아릴아민기, $C_1 \sim C_{40}$ 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 군에서 선택되거나, 또는 인접하는 기(예컨대, L, 인접하는 다른 R_6)와 결합하여 축합 고리를 형성할 수 있다. 이때 R_6 는 수소, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_6 \sim C_{40}$ 의 아릴기, 및 핵원자수 5 내지 40의 헤테로아릴기로 구성된 군에서 선택되는 것이 바람직하다.

[78] 상기 R_6 의 알킬기, 알케닐기, 알키닐기, 아릴기, 헤테로아릴기, 아릴옥시기, 알킬옥시기, 시클로알킬기, 헤테로시클로알킬기, 아릴아민기, 알킬실릴기, 알킬보론기, 아릴보론기, 아릴포스핀기, 아릴포스핀옥사이드기 및 아릴실릴기는 각각 독립적으로 중수소, 할로젠, 시아노기, 니트로기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_2 \sim C_{40}$ 의 알케닐기, $C_2 \sim C_{40}$ 의 알키닐기, $C_6 \sim C_{40}$ 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 군에서 선택된 1종 이상의 치환기로 치환될 수 있으며, 이때 상기 치환기가 복수인 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

[79] 상기 화학식 6으로 표시되는 치환체는 하기 화학식 A-1 내지 A-15로 표시되는 치환체 군 중 어느 하나로 보다 구체화 될 수 있다.

[80]



[81] 상기 A-1 내지 A-15에서,

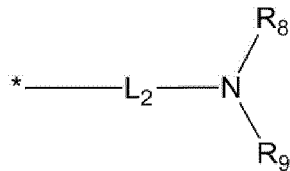
[82] L_1 및 R_6 은 각각 전술한 화학식 6에서 정의된 바와 같고,

[83] n 은 0 내지 4의 정수로서, 상기 n 이 0인 경우, 수소가 치환기 R_7 로 치환되지 않는 것을 의미하고, 상기 n 이 1 내지 4의 정수인 경우, R_7 는 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 40의 헤테로시클로알킬기, $C_6 \sim C_{40}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 40의 헤테로아릴기, $C_6 \sim C_{40,60}$ 의 아릴옥시기, $C_1 \sim C_{40}$ 의

알킬옥시기, $C_6 \sim C_{40}$ 의 아릴아민기, $C_1 \sim C_{40}$ 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 군에서 선택되거나, 또는 인접하는 기(예컨대, L_1 , R_6 또는 다른 R_7 등)와 결합하여 축합 고리를 형성할 수 있다.

- [84] 상기 R_7 의 알킬기, 알케닐기, 알키닐기, 시클로알킬기, 헤테로시클로알킬기, 아릴기, 헤테로아릴기, 아릴옥시기, 알킬옥시기, 아릴아민기, 알킬실릴기, 알킬보론기, 아릴보론기, 아릴포스핀기, 아릴포스핀옥사이드기 및 아릴실릴기는 각각 독립적으로 중수소, 할로젠, 시아노기, 니트로기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_2 \sim C_{40}$ 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 군에서 선택된 1종 이상의 치환기로 치환될 수 있으며, 이때 상기 치환기가 복수인 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이할 수 있다.
- [85] 또한 본 발명에 따른 화학식 1로 표시되는 화합물에서, 축합환을 비(非)형성하는 R_1 내지 R_5 , Ar_1 내지 Ar_5 중 적어도 하나는 하기 화학식 7로 표시되는 치환체일 수 있으며, 바람직하게는 Ar_1 일 수 있다.

- [86] [화학식7]

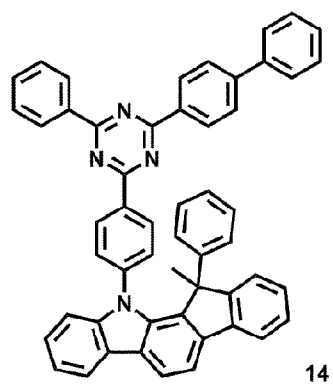
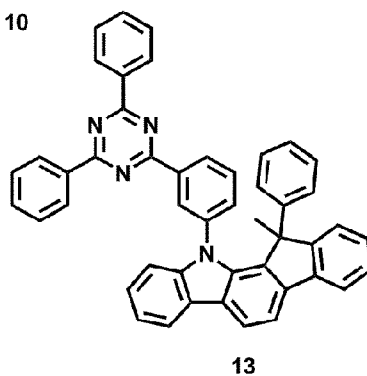
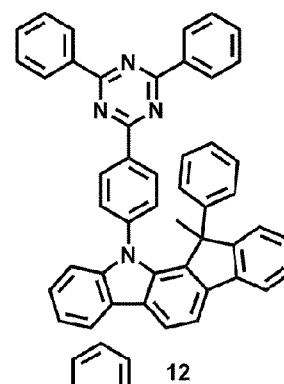
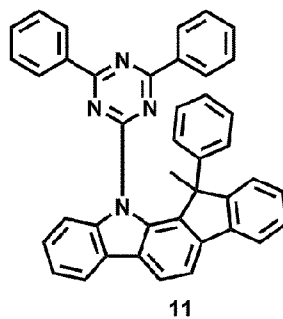
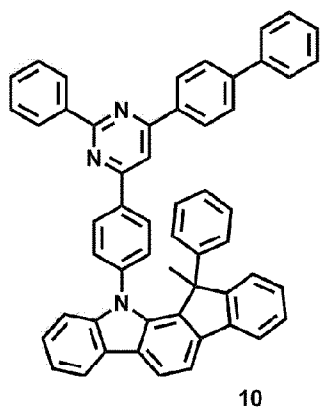
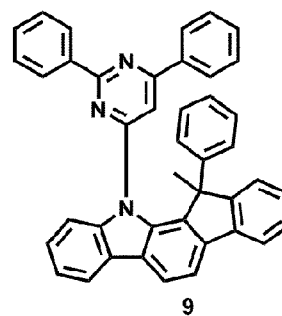
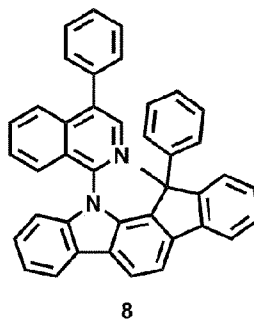
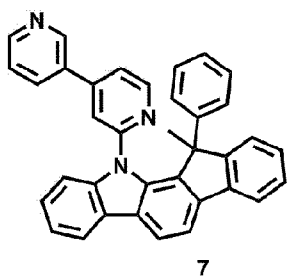
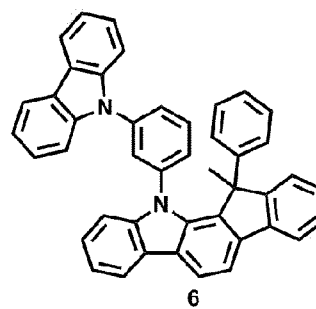
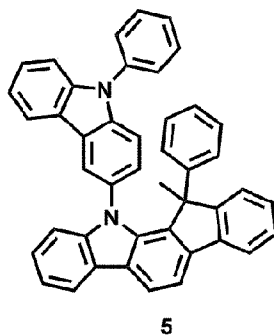
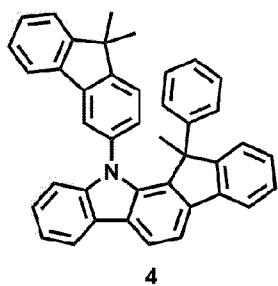
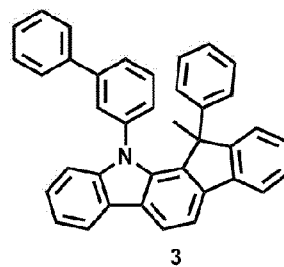
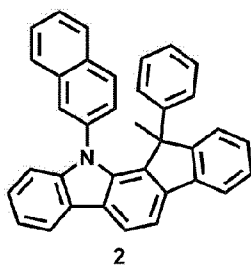
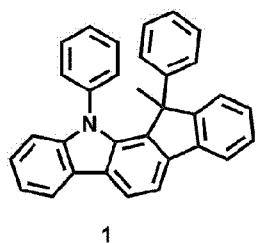


- [87] 상기 화학식 7에서,
- [88] *는 상기 화학식 1에 결합되는 부분을 의미하고;
- [89] L_2 은 단일결합이거나, 또는 $C_6 \sim C_{18}$ 의 아릴렌기 및 핵원자수 5 내지 18의 헤테로아릴렌기로 이루어진 군에서 선택되고, 바람직하게 단일결합이거나, 페닐렌기, 비페닐렌기, 카바졸릴기일 수 있다.
- [90] R_8 및 R_9 는 서로 동일하거나 또는 상이하며, 각각 독립적으로 $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_6 \sim C_{40}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 40의 헤테로아릴기 및 $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택되거나, 또는 R_8 및 R_9 가 서로 결합하여 축합 고리를 형성할 수 있다.
- [91] 상기 R_8 및 R_9 에서 알킬기, 아릴기, 헤테로아릴기 및 아릴아민기는 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, $C_6 \sim C_{40}$ 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,

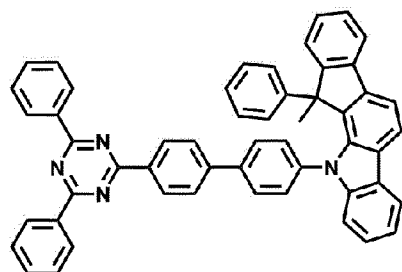
$C_6 \sim C_{40}$ 의 아릴포스핀옥사이드기 및 $C_6 \sim C_{40}$ 의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상의 치환기로 치환되거나 비치환되고, 이때 상기 치환기가 복수인 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

- [92] 이상에서 설명한 본 발명의 화학식 1로 표시되는 화합물은 하기 예시되는 화학식 1 내지 화학식 55 중 어느 하나로 표시되는 화합물로 보다 구체화될 수 있다. 그러나 본 발명의 화학식 1로 표시되는 화합물이 하기 예시된 것들에 의해 한정되는 것은 아니다.

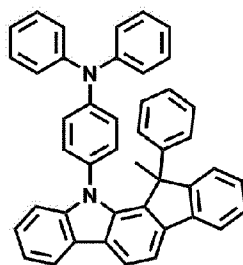
[93]



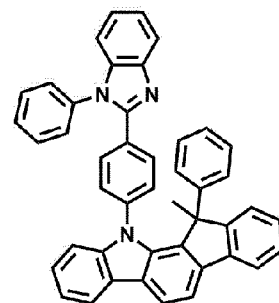
[94]



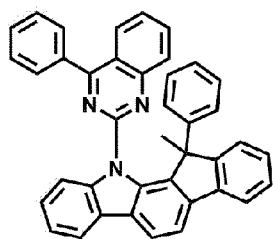
15



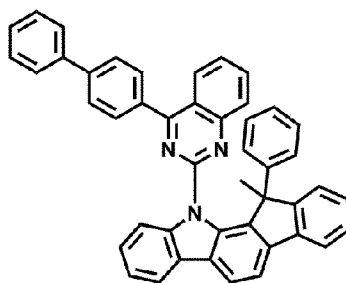
16



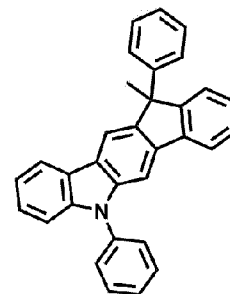
17



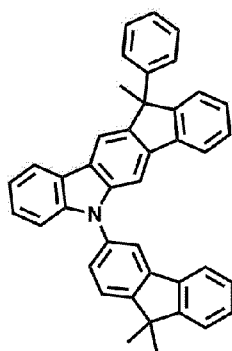
18



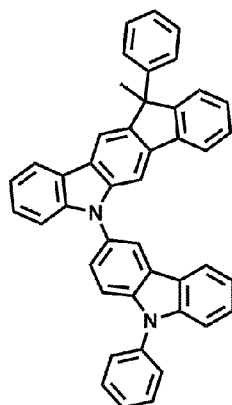
19



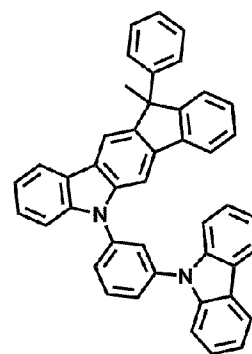
20



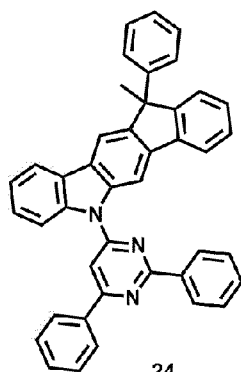
21



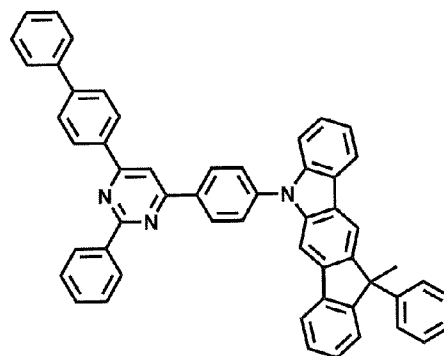
22



23

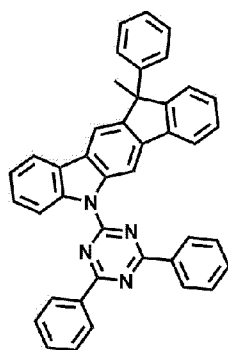


24

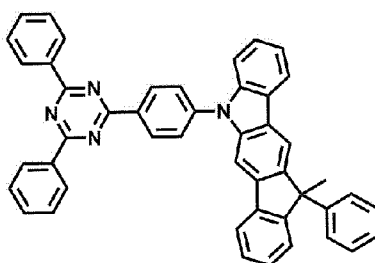


25

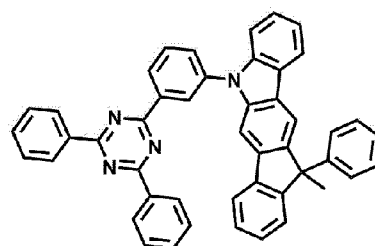
[95]



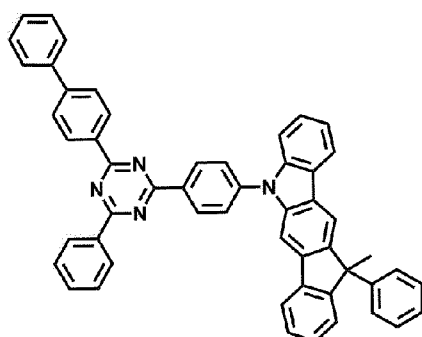
26



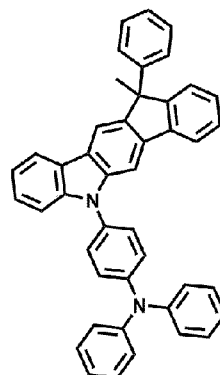
27



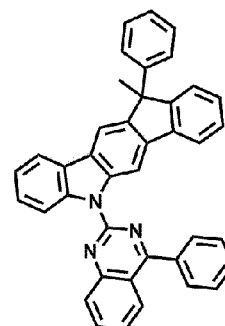
28



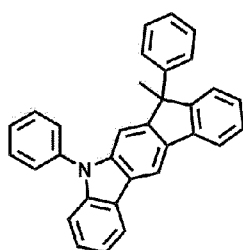
29



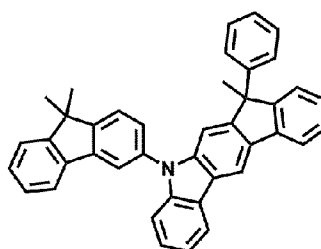
30



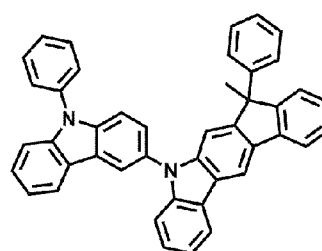
31



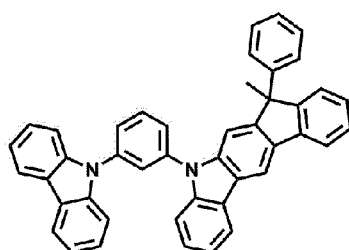
32



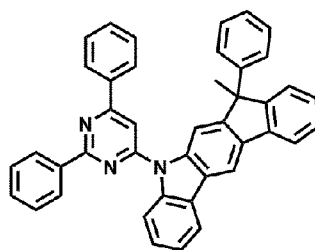
33



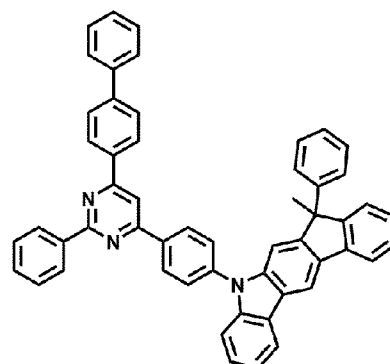
34



35

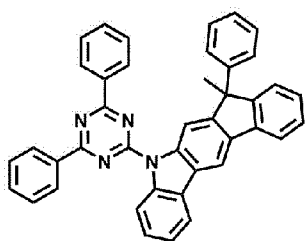


36

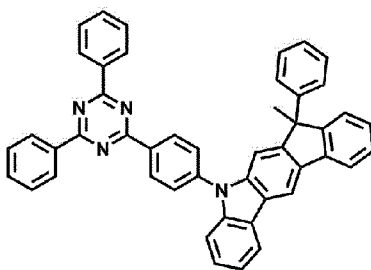


37

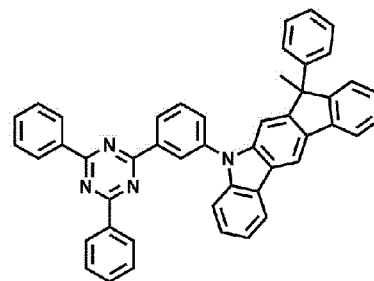
[96]



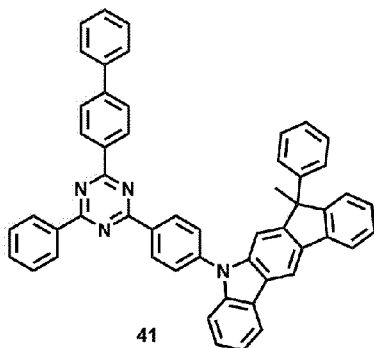
38



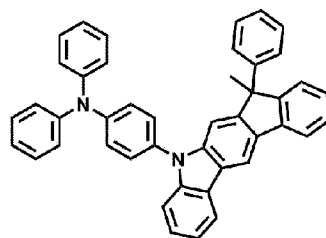
39



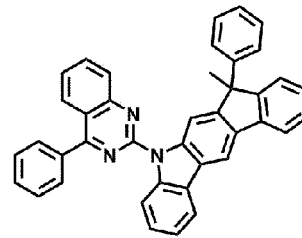
40



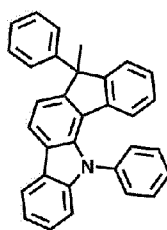
41



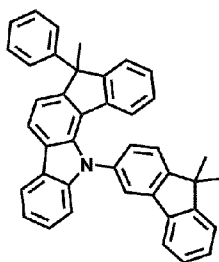
42



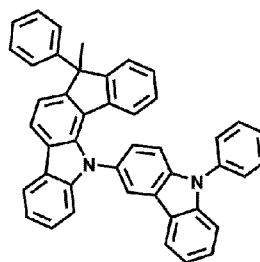
43



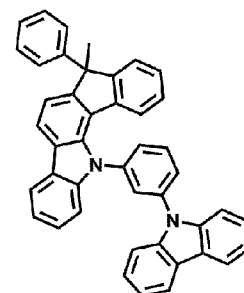
44



45

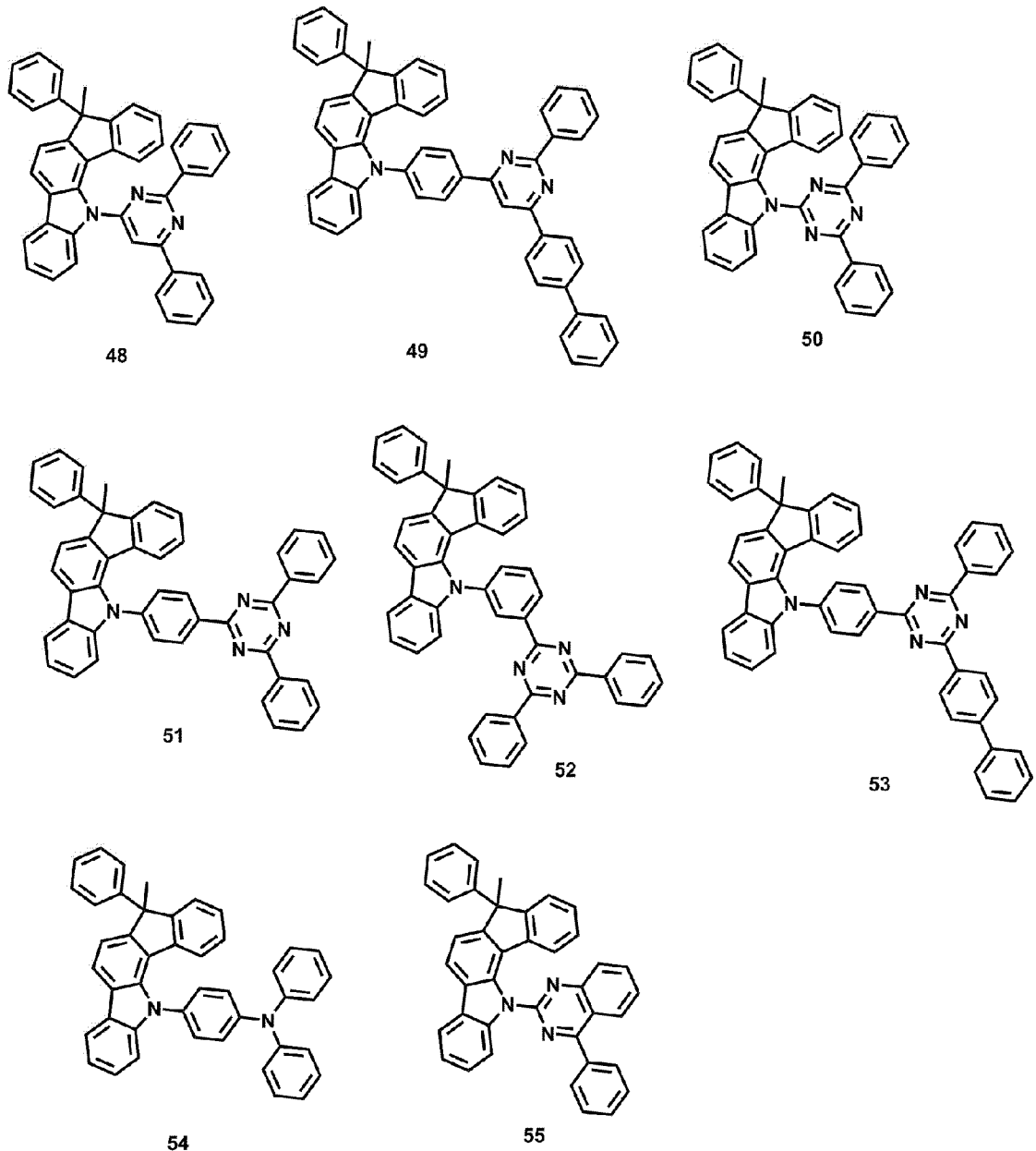


46



47

[97]



[98]

[99] 본 발명에서 "알킬"은 탄소수 1 내지 40의 직쇄 또는 측쇄의 포화 탄화수소에서 유래되는 1가의 치환기를 의미한다. 이의 예로는 메틸, 에틸, 프로필, 이소부틸, sec-부틸, 펜틸, iso-아밀, 헥실 등을 들 수 있으나, 이에 한정되지는 않는다.

[100] 본 발명에서 "알케닐(alkenyl)"은 탄소-탄소 이중 결합을 1개 이상 가진 탄소수 2 내지 40의 직쇄 또는 측쇄의 불포화 탄화수소에서 유래되는 1가의 치환기를 의미한다. 이의 예로는 비닐(vinyl), 알릴(allyl), 이소프로펜일(isopropenyl), 2-부텐일(2-butenyl) 등을 들 수 있으나, 이에 한정되지는 않는다.

[101] 본 발명에서 "알키닐(alkynyl)"은 탄소-탄소 삼중 결합을 1개 이상 가진 탄소수 2 내지 40의 직쇄 또는 측쇄의 불포화 탄화수소에서 유래되는 1가의 치환기를 의미한다. 이의 예로는 에티닐(ethynyl), 2-프로파닐(2-propynyl) 등을 들 수

있으나, 이에 한정되지는 않는다.

- [102] 본 발명에서 "아릴"은 단독 고리 또는 2 이상의 고리가 조합된 탄소수 6 내지 40의 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 등을 들 수 있으나, 이에 한정되지는 않는다.
- [103] 본 발명에서 "헤테로아릴"은 핵원자수 5 내지 40의 모노헤테로사이클릭 또는 폴리헤테로사이클릭 방향족 탄화수소로부터 유래된 1가의 치환기를 의미한다. 이때, 고리 중 하나 이상의 탄소, 바람직하게는 1 내지 3개의 탄소가 N, O, S 또는 Se와 같은 헤테로원자로 치환된다. 또한, 2 이상의 고리가 서로 단순 부착(pendant)되거나 축합된 형태도 포함될 수 있고, 나아가 아릴기와의 축합된 형태도 포함될 수 있다. 이러한 헤테로아릴의 예로는 피리딜, 피라지닐, 피리미디닐, 피리다지닐, 트리아지닐과 같은 6-원 모노사이클릭 고리, 페녹사티에닐(phenoxathieryl), 인돌리지닐(indoliziny), 인돌릴(indolyl), 퓨리닐(puriny), 퀴놀릴(quinoly), 벤조티아졸(benzothiazole), 카바졸릴(carbazoly)과 같은 폴리사이클릭 고리 및 2-퓨라닐, N-이미다졸릴, 2-이속사졸릴, 2-피리디닐, 2-피리미디닐 등을 들 수 있으나, 이에 한정되지는 않는다.
- [104] 본 발명에서 "아릴옥시"는 RO-로 표시되는 1가의 치환기로, 상기 R은 탄소수 5 내지 40의 아릴을 의미한다. 이러한 아릴옥시의 예로는 페닐옥시, 나프틸옥시, 디페닐옥시 등을 들 수 있으나, 이에 한정되지는 않는다.
- [105] 본 발명에서 "알킬옥시"는 R'O-로 표시되는 1가의 치환기로, 상기 R'은 탄소수 1 내지 40의 알킬을 의미하며, 직쇄(linear), 측쇄(branched) 또는 사이클릭(cyclic) 구조를 포함할 수 있다. 알킬옥시의 예로는 메톡시, 에톡시, n-프로폭시, 1-프로폭시, t-부톡시, n-부톡시, 펜톡시 등을 들 수 있으나, 이에 한정되지는 않는다.
- [106] 본 발명에서 "아릴아민"은 탄소수 6 내지 40의 아릴로 치환된 아민을 의미한다.
- [107] 본 발명에서 "사이클로알킬"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) 등을 들 수 있으나, 이에 한정되지는 않는다.
- [108] 본 발명에서 "헤테로사이클로알킬"은 핵원자수 3 내지 40의 비-방향족 탄화수소로부터 유래된 1가의 치환기를 의미하며, 고리 중 하나 이상의 탄소, 바람직하게는 1 내지 3개의 탄소가 N, O, S 또는 Se와 같은 헤테로 원자로 치환된다. 이러한 헤테로사이클로알킬의 예로는 모르폴린, 피페라진 등을 들 수 있으나, 이에 한정되지는 않는다.
- [109] 본 발명에서 "알킬실릴"은 탄소수 1 내지 40의 알킬로 치환된 실릴이고,

"아릴실릴"은 탄소수 5 내지 40의 아릴로 치환된 실릴을 의미한다.

[110] 본 발명에서 "축합고리"는 축합 지방족 고리, 축합 방향족 고리, 축합 헤테로지방족 고리, 축합 헤테로방향족 고리 또는 이들의 조합된 형태를 의미한다.

[111]

[112] <유기 전계 발광 소자>

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

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

[115] 상기 1층 이상의 유기물층은 정공주입층, 정공수송층, 발광보조층, 발광층, 전자수송층 및 전자주입층 중 어느 하나 이상일 수 있고, 이 중에서 적어도 하나의 유기물층은 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함할 수 있다. 구체적으로 상기 화학식 1의 화합물을 포함하는 유기물층은 발광층, 전자수송층, 정공수송층인 것이 바람직하다.

[116] 본 발명의 유기 전계 발광 소자의 발광층은 호스트 재료를 포함할 수 있는데, 이때 호스트 재료로서 상기 화학식 1의 화합물을 포함할 수 있다. 또한 본 발명의 유기 전계 발광 소자의 발광층은 상기 화학식 1의 화합물 이외의 화합물을 호스트로 포함할 수 있다.

[117] 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 유기 전계 발광 소자의 발광층 재료, 바람직하게는 청색, 녹색, 적색의 인광 호스트 재료로 포함할 경우, 발광층에서 정공과 전자의 결합력이 높아지기 때문에, 유기 전계 발광 소자의 효율(발광효율 및 전력효율), 수명, 휘도 및 구동전압 등을 향상시킬 수 있다. 구체적으로 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 녹색 및/또는 적색의 인광 호스트, 형광 호스트, 또는 도펀트 재료로서 유기 전계 발광 소자에 포함되는 것이 바람직하다. 특히, 본 발명의 화학식 1로 표시되는 화합물은 발광층의 인광 호스트, 형광 호스트 또는 도펀트 재료인 것이 바람직하며, 발광층의 인광 호스트인 것이 더욱 바람직하다.

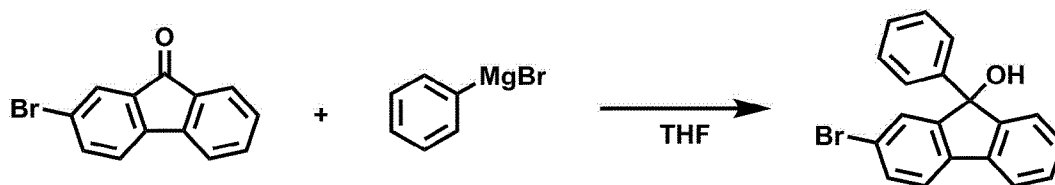
[118] 이러한 본 발명의 유기 전계 발광 소자의 구조는 특별히 한정되지 않으나, 기판, 양극, 정공주입층, 정공수송층, 발광보조층, 발광층, 전자수송층 및 음극이 순차적으로 적층된 구조일 수 있다. 이때, 상기 정공주입층, 정공수송층, 발광보조층, 발광층, 전자수송층 및 전자주입층 중 하나 이상은 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함할 수 있고, 바람직하게는 정공수송층, 전자저지층, 발광보조층이 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함할 수 있다. 한편 상기 전자수송층 위에는 전자주입층이 추가로 적층될 수 있다.

- [119] 본 발명의 유기 전계 발광 소자의 구조는 전극과 유기물층 계면에 절연층 또는 접착층이 삽입된 구조일 수 있다.
- [120] 본 발명의 유기 전계 발광 소자는 상기 유기물층 중 1층 이상이 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하는 것을 제외하고는, 당업계에 공지된 재료 및 방법으로 유기물층 및 전극을 형성하여 제조할 수 있다.
- [121] 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, 이에 한정되지는 않는다.
- [122] 본 발명의 유기 전계 발광 소자 제조 시 사용되는 기판은 특별히 한정되지 않으나, 실리콘 웨이퍼, 석영, 유리판, 금속판, 플라스틱 필름 및 시트 등을 사용할 수 있다.
- [123] 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 등을 들 수 있으나, 이에 한정되지는 않는다.
- [124] 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 등을 들 수 있으나, 이에 한정되지는 않는다.
- [125] 또한, 정공 주입층, 정공 수송층, 전자 주입층 및 전자 수송층은 특별히 한정되는 것은 아니며, 당 업계에 알려진 통상의 물질을 사용할 수 있다.
- [126] 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.

[127]

[128] [준비예 1][129] a-1의 합성[130] 2-bromo-9-phenyl-9H-fluoren-9-ol의 합성

[131]



- [132] 질소 기류 하에서 THF anhydrous 1L를 flask에 넣고 2-bromo-9H-fluoren-9-one (50.0g, 192 mmol)을 넣었다. 온도를 0°C까지 천천히 냉각한 후 phenylmagnesium bromide (52g, 288mmol)을 반응온도 3°C를 넘지 않게 1시간동안 천천히 적가하였다 적가 종결 후 Bath를 제거하고 온도를 상온으로 천천히 올렸다.

상온에서 24시간 교반 후 TLC로 반응 진행을 확인하였다. 반응이 종결되면 H₂O 500ml를 천천히 적가하고 6N HCl 500ml를 천천히 적가하여 중화시켰다.

용액메틸렌클로라이드로 추출하고 감압조건에서 농축한 후 컬럼크로마토그래피를 이용하여 목적 화합물 58g (90%)을 얻었다.

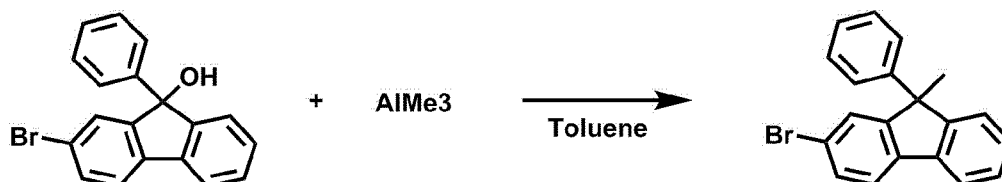
[133] GC-Mass (이론치: 336.01 g/mol, 측정치: 337.22 g/mol)

[134] ¹H-NMR: δ 7.1 (d, 1H), 7.8 (d, 1H), 7.72 (s, 1H), 7.55 (d, 1H), 7.4~7.2 (m, 8H), 6.7 (br, 1H)

[135] a-2의 합성

[136] 2-bromo-9-methyl-9-phenyl-9H-fluorene의 합성

[137]



[138] 질소 기류 하에서 2-bromo-9-phenyl-9H-fluoren-9-ol (58g, 172mmol)와 200 ml의 Toluene을 flask에 넣는다. Trimethylaluminium (24.7g, 344mmol)을 천천히 적가하고 100°C에서 24시간 동안 환류교반하였다. 반응 종결 후 메틸렌클로라이드로 추출하고 감압조건에서 농축한 후 컬럼크로마토그래피를 이용하여 목적 화합물 46g (80%)을 얻었다.

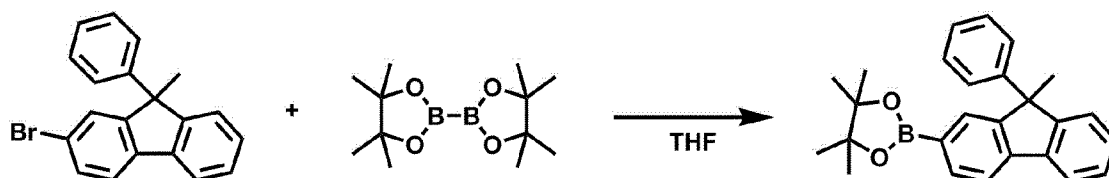
[139] GC-Mass (이론치: 334.04 g/mol, 측정치: 335.24 g/mol)

[140] ¹H-NMR: δ 7.9 (d, 1H), 7.8 (d, 1H), 7.78(s, 1H), 7.55~7.53 (m, 2H), 7.28~7.22(m, 7H), 2.28 (s, 3H)

[141] a-3의 합성

[142] 4,4,5,5-tetramethyl-2-(9-methyl-9-phenyl-9H-fluoren-2-yl)-1,3,2-dioxaborolane의 합성

[143]



[144] 질소 기류 하에서 2-bromo-9-methyl-9-phenyl-9H-fluorene (46g, 137mmol), 4,4,4',4',5,5,5',5'-octamethyl-2,2'-bi(1,3,2-dioxaborolane) (52g, 205.8mmol), Pd(dppf)Cl₂ (3g, 8.22mmol), KOAc (40 g, 411mmol)와 200ml ml의 1,4-dioxane를 넣고 130°C에서 8시간 동안 환류교반하였다. 반응 종결 후 에틸아세테이트로 추출하고 감압조건에서 농축한 후 컬럼크로마토그래피를 이용하여 목적 화합물 31g (60%)을 얻었다.

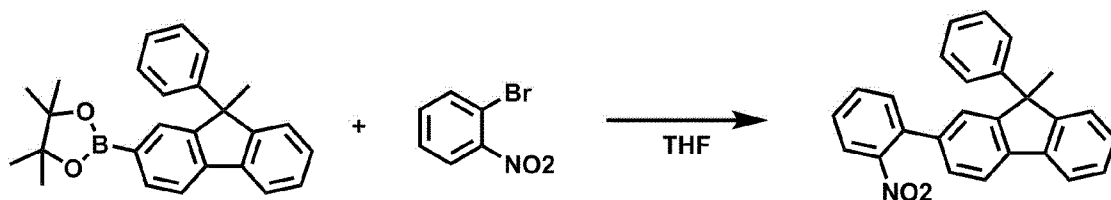
[145] GC-Mass (이론치: 382.21 g/mol, 측정치: 382.31 g/mol)

[146] ¹H-NMR: δ 7.9 (m, 2H), 7.3~7.1 (m, 12H), 2.28 (s, 3H), 1.6 (s, 12H)

[147] a-4의 합성

[148] 9-methyl-2-(2-nitrophenyl)-9-phenyl-9H-fluorene의 합성

[149]



[150] 질소 기류 하에서

4,4,5,5-tetramethyl-2-(9-methyl-9-phenyl-9H-fluoren-2-yl)-1,3,2-dioxaborolane (31g, 81mmol), 1-bromo-2-nitrobenzene (19.6g, 97mmol), K_2CO_3 (22.3g, 162mmol) $Pd(PPh_3)_4$ (4.6g, 4.05mmol)와 80ml/80ml/80ml의 Toluene/EtOH/H₂O를 넣고 100°C에서 8시간 동안 교반하였다. 반응 종결 후 메틸렌클로라이드로 추출하고 감압조건에서 농축한 후 컬럼크로마토그래피를 이용하여 목적 화합물 26g (85%)을 얻었다.

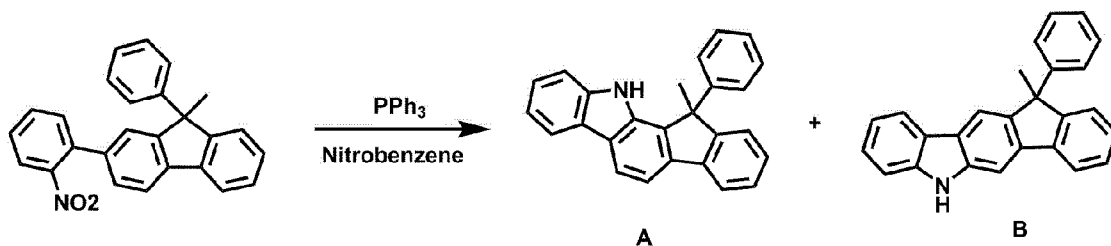
[151] GC-Mass (이론치: 377.14 g/mol, 측정치: 377.44 g/mol)

[152] ¹H-NMR: 8.09~7.71 (m, 8H), 7.55 (d, 1H), 7.38~7.22 (m, 7H), 7.28 (s, 3H)

[153] a-5의 합성

[154] 12-methyl-12-phenyl-11,12-dihydroindeno[2,1-a]carbazole(A), 11-methyl-11-phenyl-5,11-dihydroindeno[1,2-b]carbazole(B)의 합성

[155]



[156] 질소 기류 하에서 9-methyl-2-(2-nitrophenyl)-9-phenyl-9H-fluorene (26g, 68.8mmol), PPh_3 (36g, 137.7mmol), 200ml nitrobenzene를 넣고 8시간 동안 환류교반하였다. 반응 종결 후 메틸렌클로라이드로 추출하고 감압조건에서 농축한 후 컬럼크로마토그래피를 이용하여 목적 화합물 A; 14.5g(61%), B; 6.24g(26%)을 얻었다.

[157] GC-Mass (A; 이론치: 345.14 g/mol, 측정치: 345.45 g/mol)

[158] A; ¹H-NMR: 11.02 (br, 1H), 8.24~8.19 (m, 3H), 7.9 (d, 1H), 7.63~7.18 (m, 11H), 2.08 (s, 3H)

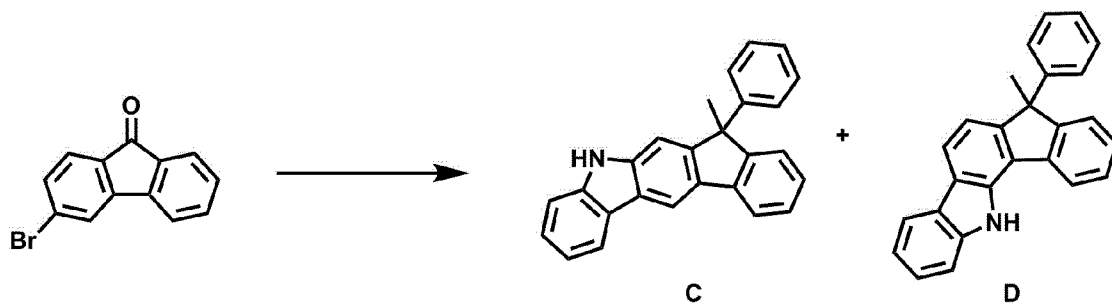
[159] B; ¹H-NMR: 11.66 (br, 1H), 8.3~8.16 (m, 3H), 7.7 (m, 2H), 7.66~7.22 (m, 10H), 2.28 (s, 3H)

[160]

[161] [준비예 2]

[162] 7-methyl-7-phenyl-5,7-dihydroindeno[2,1-b]carbazole(C), 7-methyl-7-phenyl-7,12-dihydroindeno[1,2-a]carbazole(D)의 합성

[163]



[164] 반응물로 3-bromo-9H-fluoren-9-one을 사용한 것을 제외하고는, 상기 [준비에 1]과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 C; 11g(46%), D; 9.8g(41%)을 얻었다.

[165] GC-Mass (A; 이론치: 345.14 g/mol, 측정치: 345.45 g/mol)

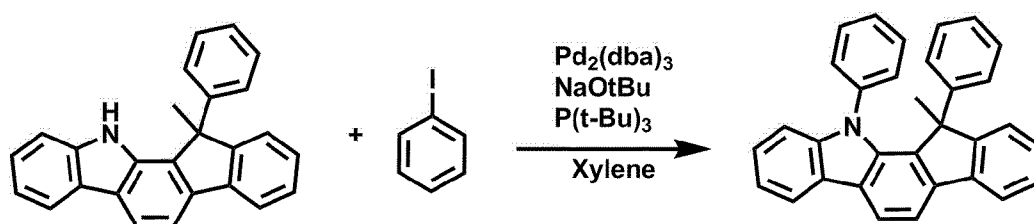
[166] C; ¹H-NMR: 11.6 (br, 1H), 8.2~8.19 (m, 2H), 7.88 (s, 1H), 7.71~7.18 (m, 11H), 2.08 (s, 3H)

[167] D; ¹H-NMR: 11.66 (br, 1H), 8.24~8.19 (m, 3H), 7.72~7.18 (m, 11H), 2.18 (s, 3H)

[168]

[169] [합성에 1] Mat 1의 합성

[170]



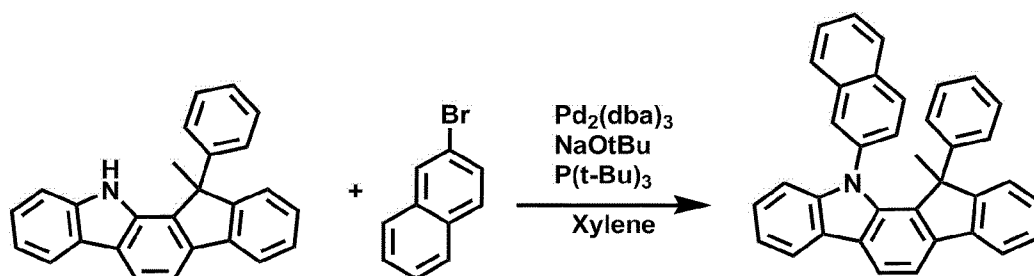
[171] 12-methyl-12-phenyl-11,12-dihydroindeno[2,1-a]carbazole 5g(14.47mmol)과 Iodobenzene 3.24g(15.9mmol)에 xylene 250 mL를 가하였다. Pd₂(dba)₃ 0.79g(0.86mmol), P(t-Bu)₃ 0.71g(1.73mmol), NaOtBu 3.47g(36.17mmol)을 첨가 후 120°C에서 24시간 가열환류하였다. 상온으로 온도를 낮추고 반응액에 염화암모늄 수용액 500 mL로 반응을 종결시켰다. 혼합액을 M.C 500 mL로 추출한 후, 증류수로 세척하였다. 얻어진 유기층을 무수 MgSO₄로 건조하고, 감압증류하고 실리카겔 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물 4.8g(수율 80%)을 얻었다.

[172] ¹H-NMR: 8.55(d, 1H), 8.24~8.21(m, 2H), 7.94~7.90(m, 2H), 7.74(d, 1H), 7.62~7.16(m, 14H), 2.7(s, 3H); HRMS [M]⁺: 421.54

[173]

[174] [합성에 2] Mat 2의 합성

[175]



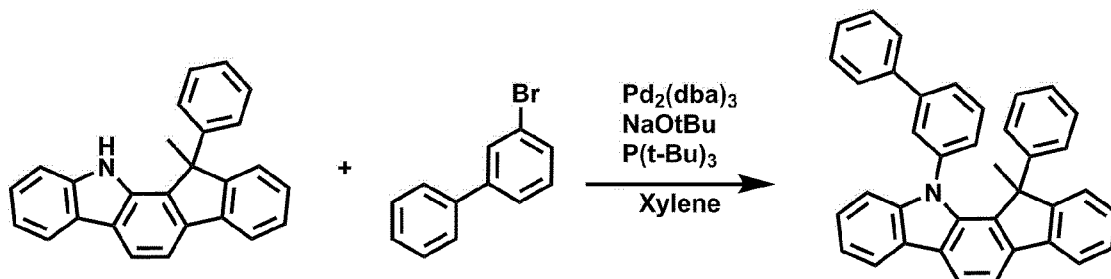
[176] 반응물로 2-bromonaphthalene을 사용한 것을 제외하고는, 상기 [합성예 1]과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 11.2g을 얻었다.

[177] HRMS [M]⁺: 471.60

[178]

[179] [합성예 3] Mat 3의 합성

[180]



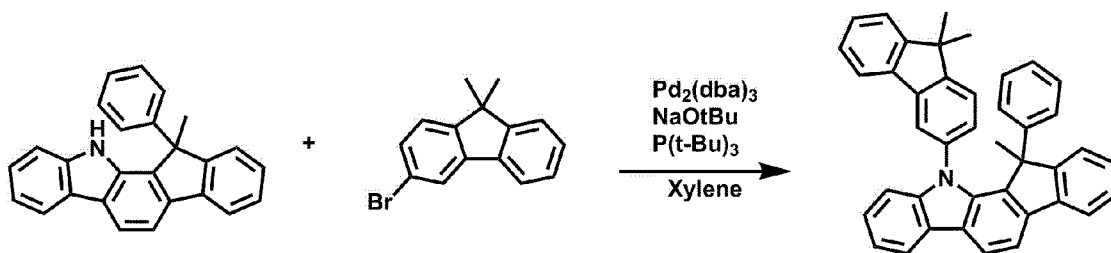
[181] 반응물로 3-bromo-1,1'-biphenyl을 사용한 것을 제외하고는, 상기 [합성예 1]과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 10.8g을 얻었다.

[182] HRMS [M]⁺: 497.64

[183]

[184] [합성예 4] Mat 4의 합성

[185]



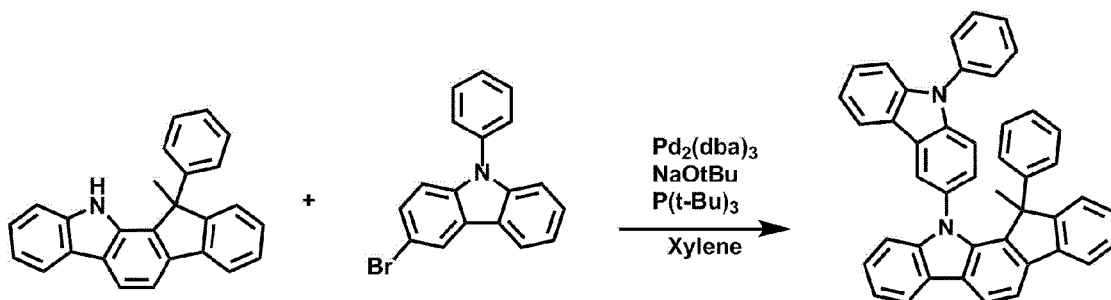
[186] 반응물로 3-bromo-9,9-dimethyl-9H-fluorene을 사용한 것을 제외하고는, 상기 [합성예 1]과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 12.4g을 얻었다.

[187] HRMS [M]⁺: 537.71

[188]

[189] [합성예 5] Mat 5의 합성

[190]



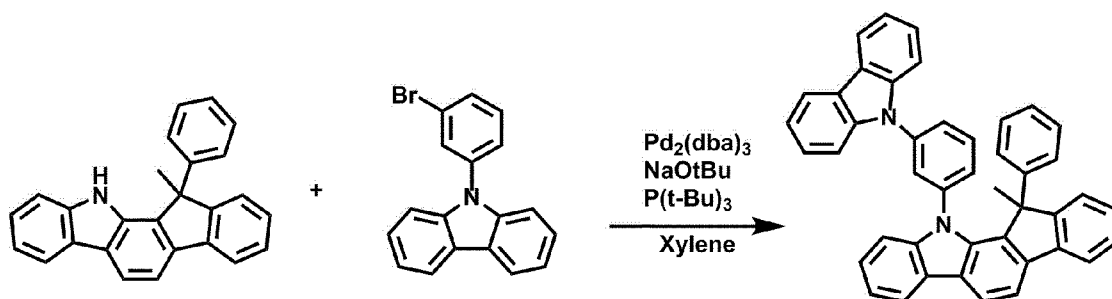
[191] 반응물로 3-bromo-9-phenyl-9H-carbazole을 사용한 것을 제외하고는, 상기 [합성예 1]과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 12g을 얻었다.

[192] HRMS [M]⁺: 586.74

[193]

[194] [합성예 6] Mat 6의 합성

[195]



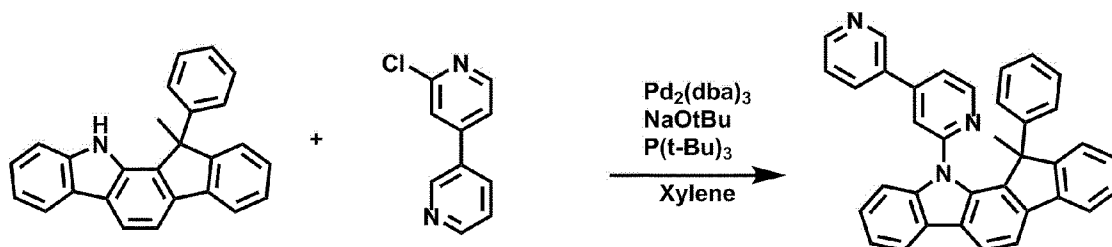
[196] 반응물로 9-(3-bromophenyl)-9H-carbazole을 사용한 것을 제외하고는, 상기 [합성예 1]과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 12.3g을 얻었다.

[197] HRMS $[\text{M}]^+$: 586.74

[198]

[199] [합성예 7] Mat 7의 합성

[200]



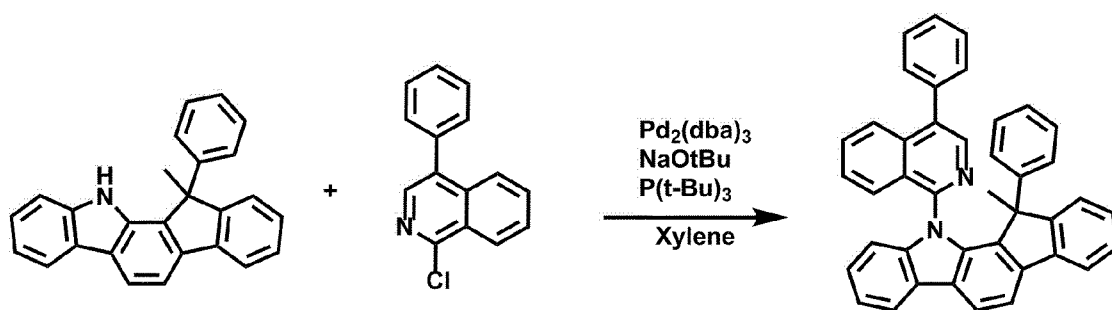
[201] 반응물로 2'-chloro-3,4'-bipyridine을 사용한 것을 제외하고는, 상기 [합성예 1]과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 8.7g을 얻었다.

[202] HRMS $[\text{M}]^+$: 499.62

[203]

[204] [합성예 8] Mat 8의 합성

[205]



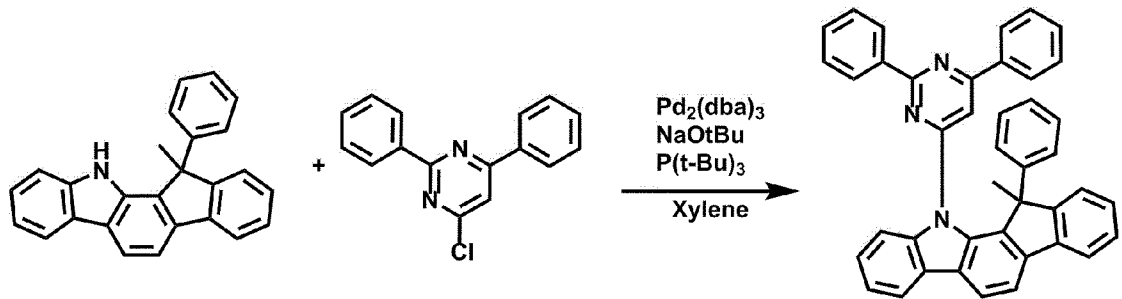
[206] 반응물로 1-chloro-4-phenylisoquinoline을 사용한 것을 제외하고는, 상기 [합성예 1]과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 11.9g을 얻었다.

[207] HRMS $[\text{M}]^+$: 548.69

[208]

[209] [합성예 9] Mat 9의 합성

[210]



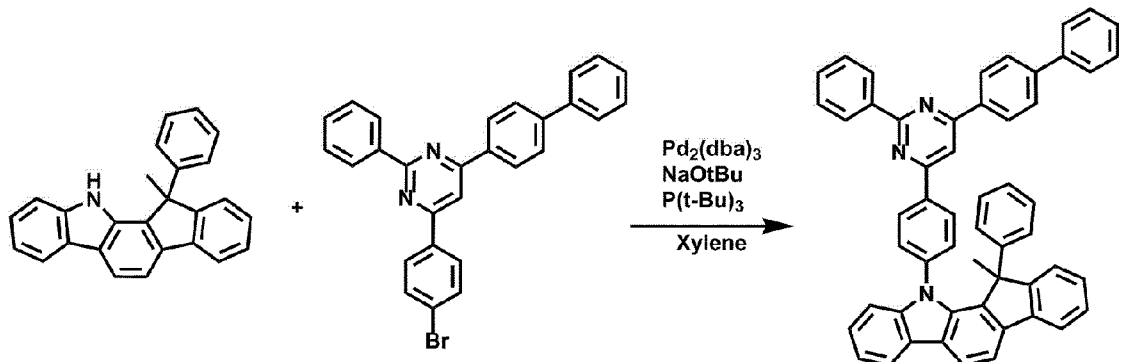
[211] 반응물로 4-chloro-2,6-diphenylpyrimidine을 사용한 것을 제외하고는, 상기 [합성예 1]과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 9g을 얻었다.

[212] HRMS $[\text{M}]^+$: 575.72

[213]

[214] [합성예 10] Mat 10의 합성

[215]



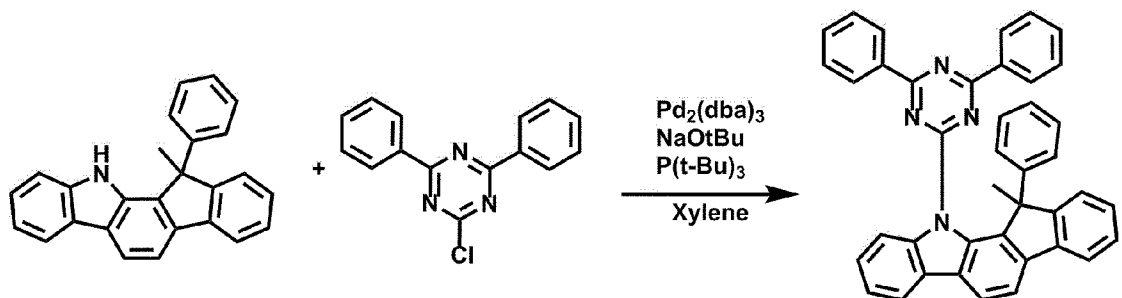
[216] 반응물로 4-([1,1'-biphenyl]-4-yl)-6-(4-bromophenyl)-2-phenylpyrimidine을 사용한 것을 제외하고는, 상기 [합성예 1]과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 14.2g을 얻었다.

[217] HRMS $[\text{M}]^+$: 727.91

[218]

[219] [합성예 11] Mat 11의 합성

[220]



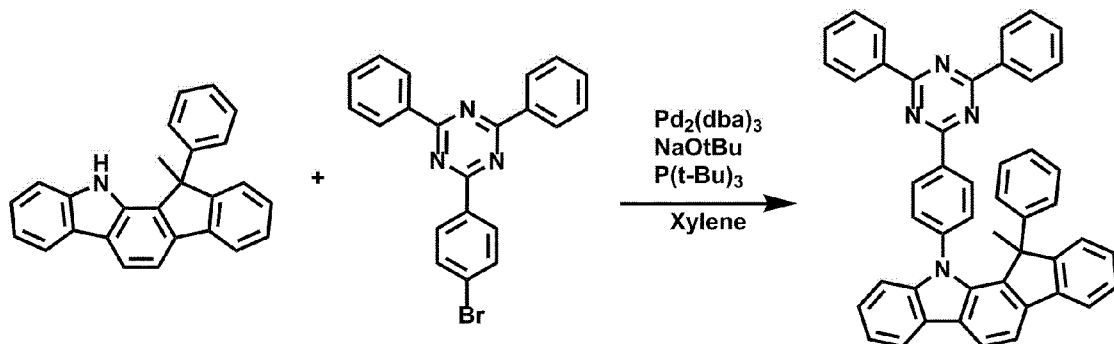
[221] 반응물로 2-chloro-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine을 사용한 것을 제외하고는, 상기 [합성예 1]과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 8.2g을 얻었다.

[222] HRMS $[\text{M}]^+$: 576.70

[223]

[224] [합성예 12] Mat 12의 합성

[225]



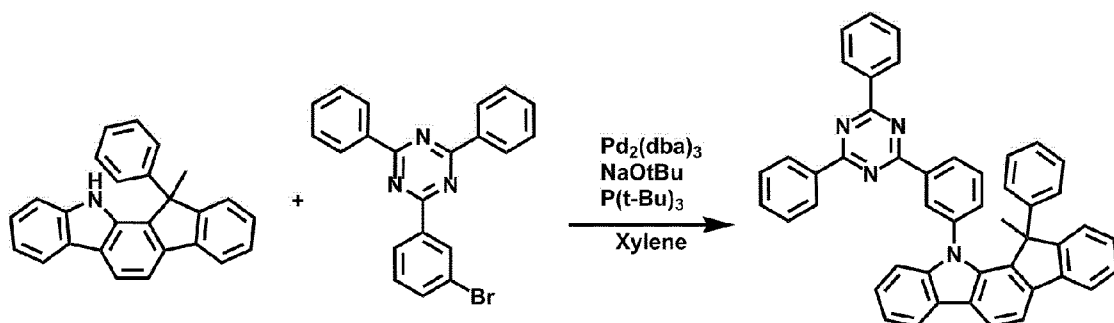
[226] 반응물로 2-(4-bromophenyl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine을 사용한 것을 제외하고는, 상기 [합성에 1]과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 12.9g을 얻었다.

[227] HRMS [M]⁺: 652.80

[228]

[229] [합성에 13] Mat 13의 합성

[230]



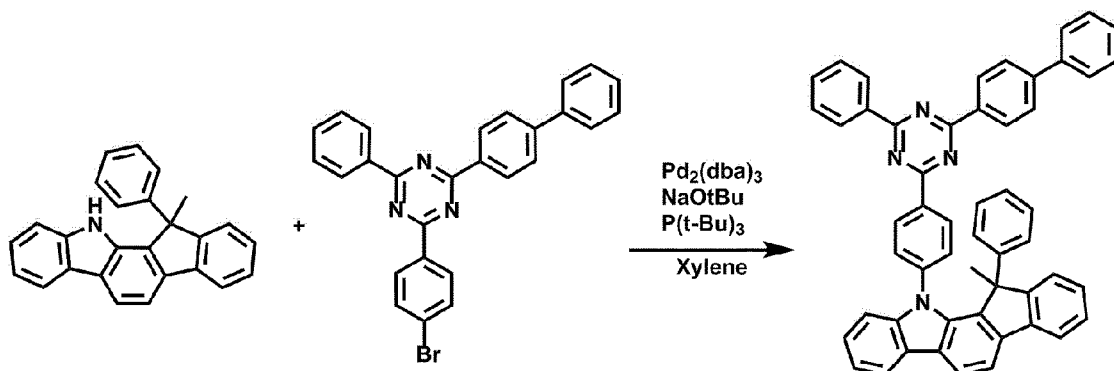
[231] 반응물로 2-(3-bromophenyl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine을 사용한 것을 제외하고는, 상기 [합성에 1]과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 11.1g을 얻었다.

[232] HRMS [M]⁺: 652.80

[233]

[234] [합성에 14] Mat 14의 합성

[235]



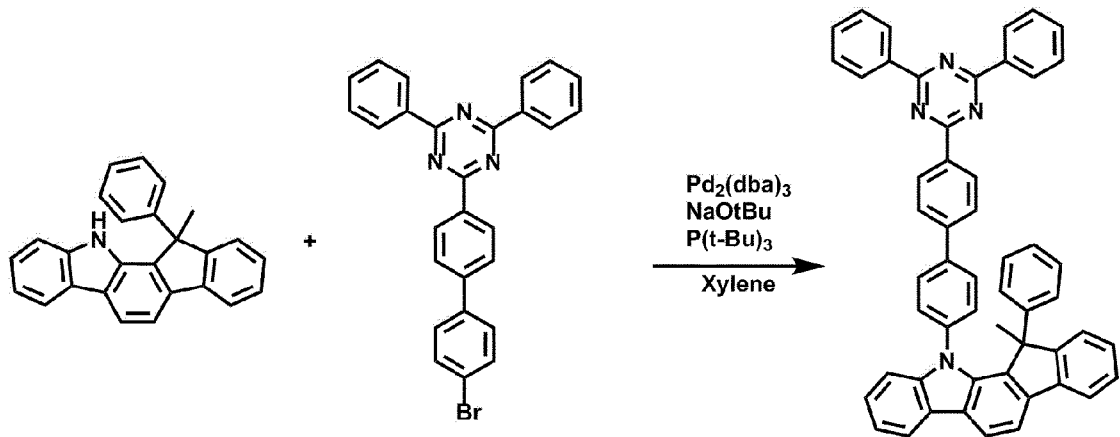
[236] 반응물로 2-([1,1'-biphenyl]-4-yl)-4-(4-bromophenyl)-6-phenyl-1,3,5-triazine을 사용한 것을 제외하고는, 상기 [합성에 1]과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 14.6g을 얻었다.

[237] HRMS [M]⁺: 728.90

[238]

[239] [합성예 15] Mat 15의 합성

[240]



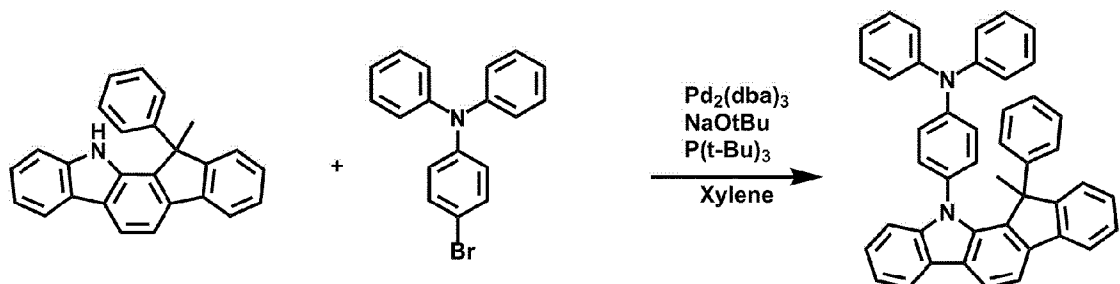
[241] 반응물로 2-(4'-bromo-[1,1'-biphenyl]-4-yl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine을 사용한 것을 제외하고는, 상기 [합성예 1]과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 15.3g을 얻었다.

[242] HRMS [M]⁺: 728.90

[243]

[244] [합성예 16] Mat 16의 합성

[245]



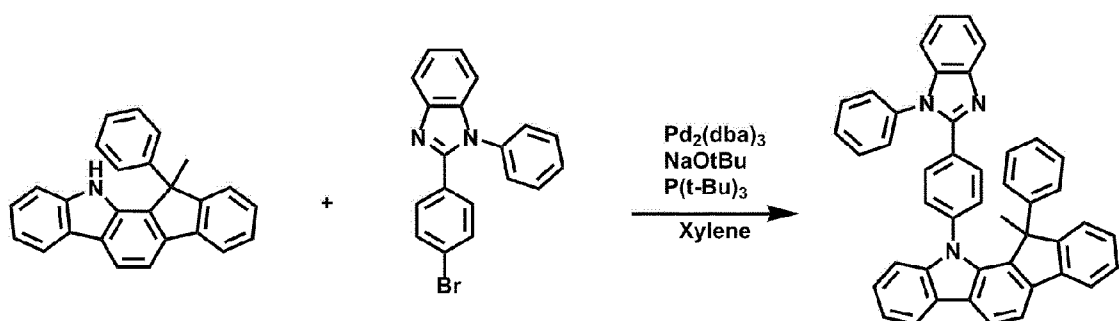
[246] 반응물로 4-bromo-N,N-diphenylaniline을 사용한 것을 제외하고는, 상기 [합성예 1]과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 15.3g을 얻었다.

[247] HRMS [M]⁺: 588.75

[248]

[249] [합성예 17] Mat 17의 합성

[250]



[251] 반응물로 2-(4-bromophenyl)-1-phenyl-1H-benzo[d]imidazole을 사용한 것을

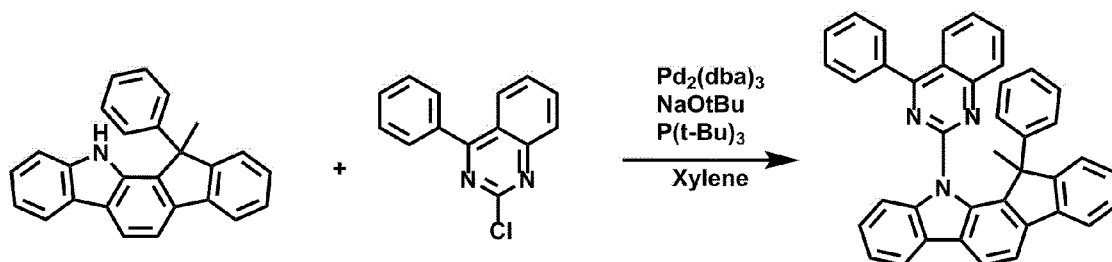
제외하고는, 상기 [합성예 1]과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 12.7g을 얻었다.

[252] HRMS [M]⁺: 613.76

[253]

[254] [합성예 18] Mat 18의 합성

[255]



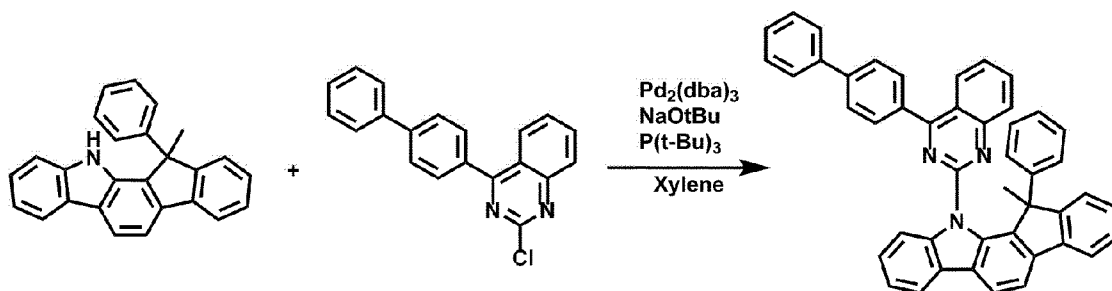
[256] 반응물로 2-chloro-4-phenylquinazoline을 사용한 것을 제외하고는, 상기 [합성예 1]과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 10.5g을 얻었다.

[257] HRMS [M]⁺: 549.68

[258]

[259] [합성예 19] Mat 19의 합성

[260]



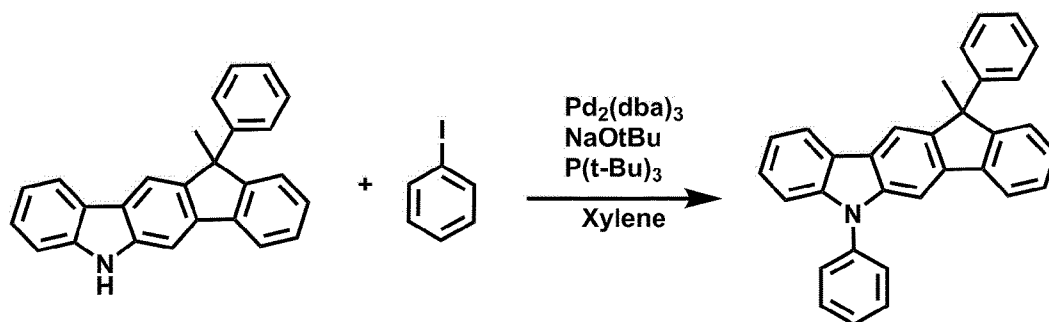
[261] 반응물로 4-([1,1'-biphenyl]-4-yl)-2-chloroquinazoline을 사용한 것을 제외하고는, 상기 [합성예 1]과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 11.0g을 얻었다.

[262] HRMS [M]⁺: 625.78

[263]

[264] [합성예 20] Mat 20의 합성

[265]



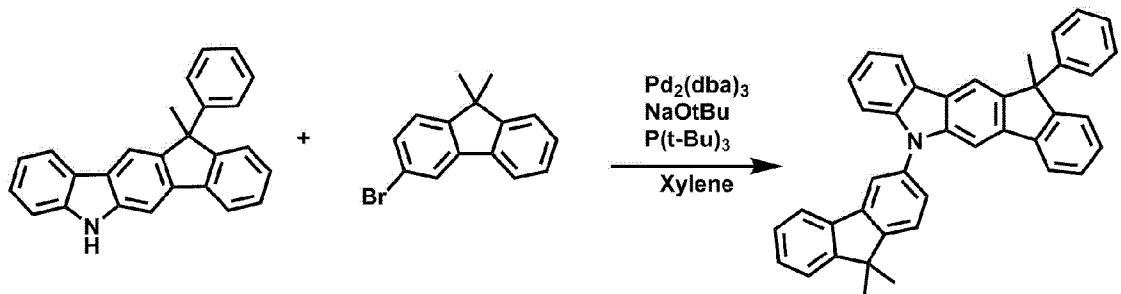
[266] 반응물로 11-methyl-11-phenyl-5,11-dihydroindeno[1,2-b]carbazole을 사용한 것을 제외하고는, 상기 [합성예 1]과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 8.7g을 얻었다.

[267] HRMS [M]⁺: 471.60

[268]

[269] [합성예 21] Mat 21의 합성

[270]



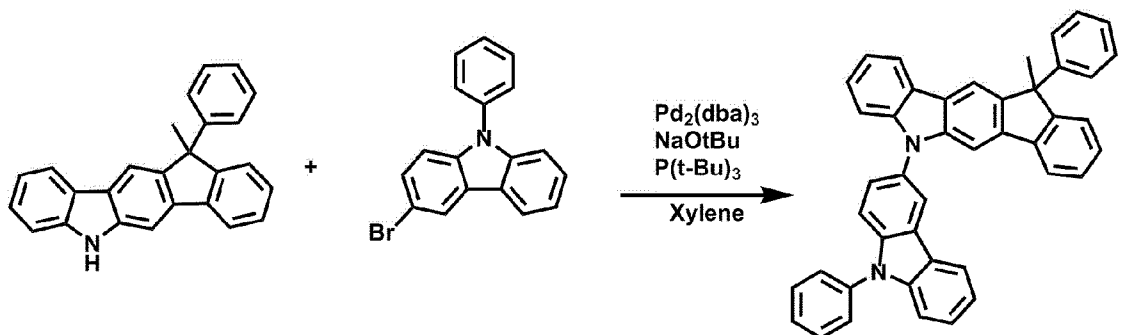
[271] 반응물로 11-methyl-11-phenyl-5,11-dihydroindeno[1,2-b]carbazole을 사용한 것을 제외하고는, 상기 [합성예 4]과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 13g을 얻었다.

[272] HRMS [M]⁺: 537.71

[273]

[274] [합성예 22] Mat 22의 합성

[275]



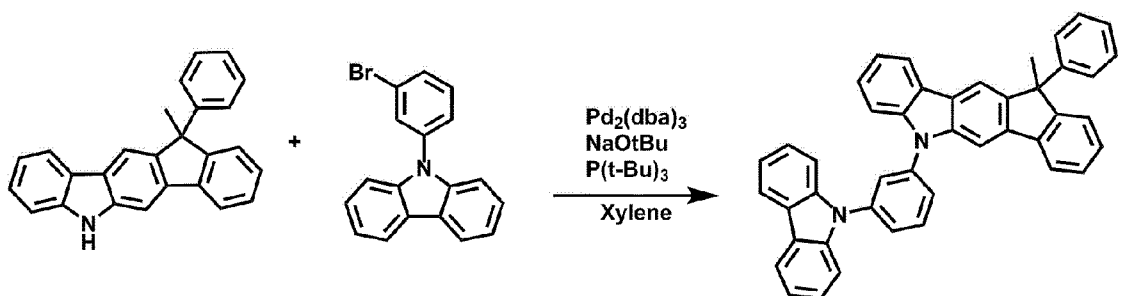
[276] 반응물로 11-methyl-11-phenyl-5,11-dihydroindeno[1,2-b]carbazole을 사용한 것을 제외하고는, 상기 [합성예 5]과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 11.3g을 얻었다.

[277] HRMS [M]⁺: 586.74

[278]

[279] [합성예 23] Mat 23의 합성

[280]



[281] 반응물로 11-methyl-11-phenyl-5,11-dihydroindeno[1,2-b]carbazole을 사용한 것을 제외하고는, 상기 [합성예 6]과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 10.8g을

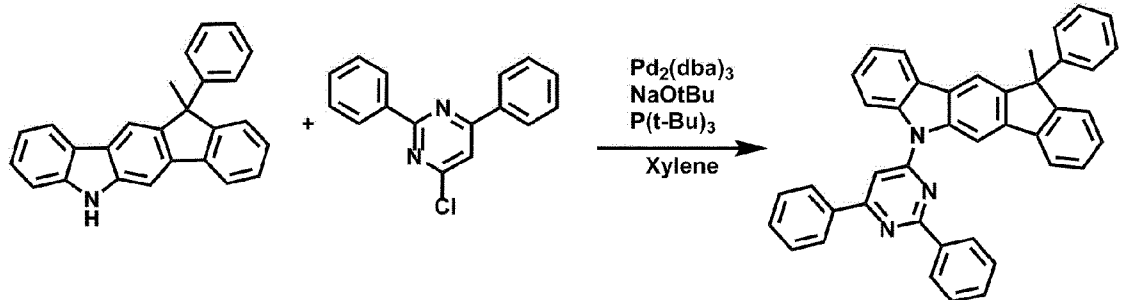
얻었다.

[282] HRMS [M]⁺: 586.74

[283]

[284] [합성예 24] Mat 24의 합성

[285]



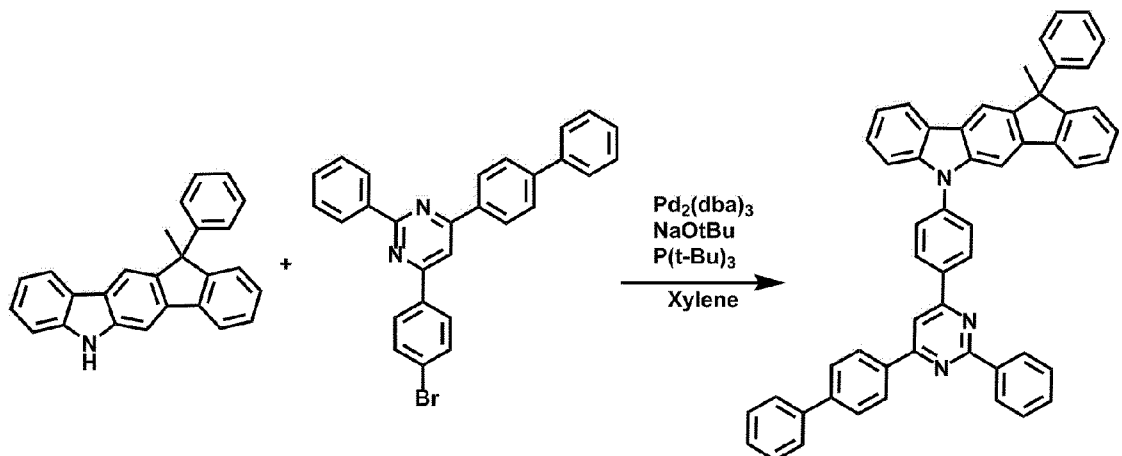
[286] 반응물로 11-methyl-11-phenyl-5,11-dihydroindeno[1,2-b]carbazole을 사용한 것을 제외하고는, 상기 [합성예 9]과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 9.6g을 얻었다.

[287] HRMS [M]⁺: 575.72

[288]

[289] [합성예 25] Mat 25의 합성

[290]



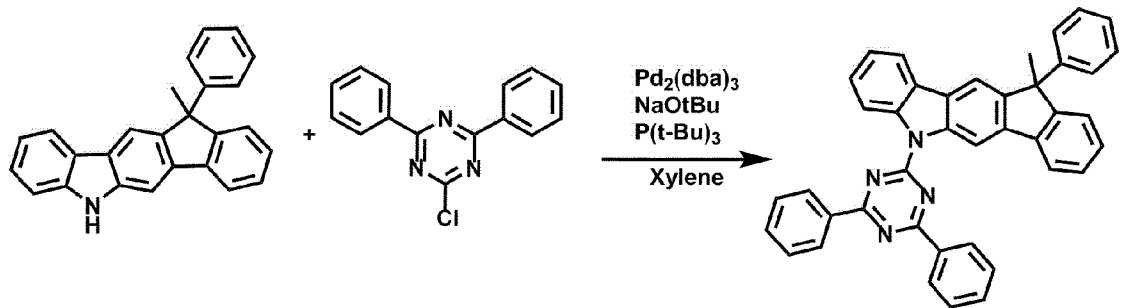
[291] 반응물로 11-methyl-11-phenyl-5,11-dihydroindeno[1,2-b]carbazole을 사용한 것을 제외하고는, 상기 [합성예 10]과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 14.5g을 얻었다.

[292] HRMS [M]⁺: 727.91

[293]

[294] [합성예 26] Mat 26의 합성

[295]



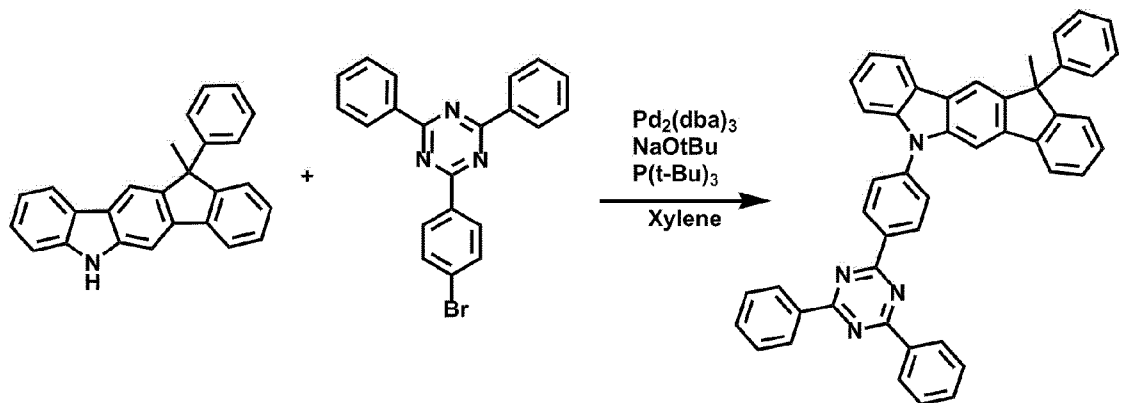
[296] 반응물로 11-methyl-11-phenyl-5,11-dihydroindeno[1,2-b]carbazole을 사용한 것을 제외하고는, 상기 [합성예 11]과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 8g을 얻었다.

[297] HRMS [M]⁺: 576.70

[298]

[299] [합성예 27] Mat 27의 합성

[300]



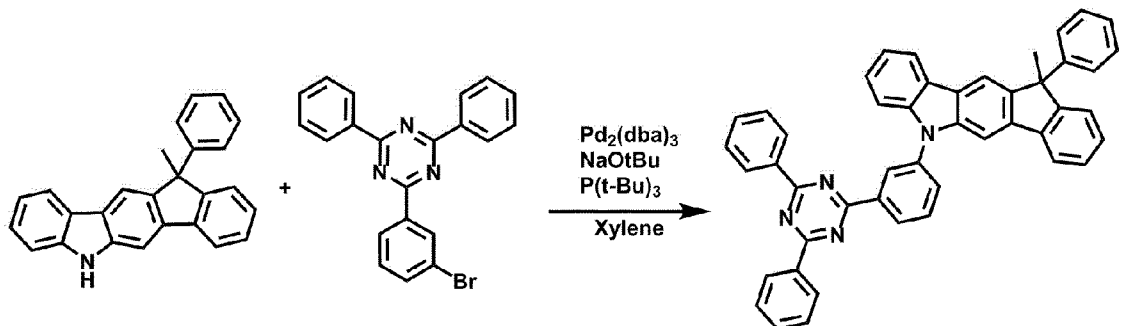
[301] 반응물로 11-methyl-11-phenyl-5,11-dihydroindeno[1,2-b]carbazole을 사용한 것을 제외하고는, 상기 [합성예 12]과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 9.5g을 얻었다.

[302] HRMS [M]⁺: 652.80

[303]

[304] [합성예 28] Mat 28의 합성

[305]



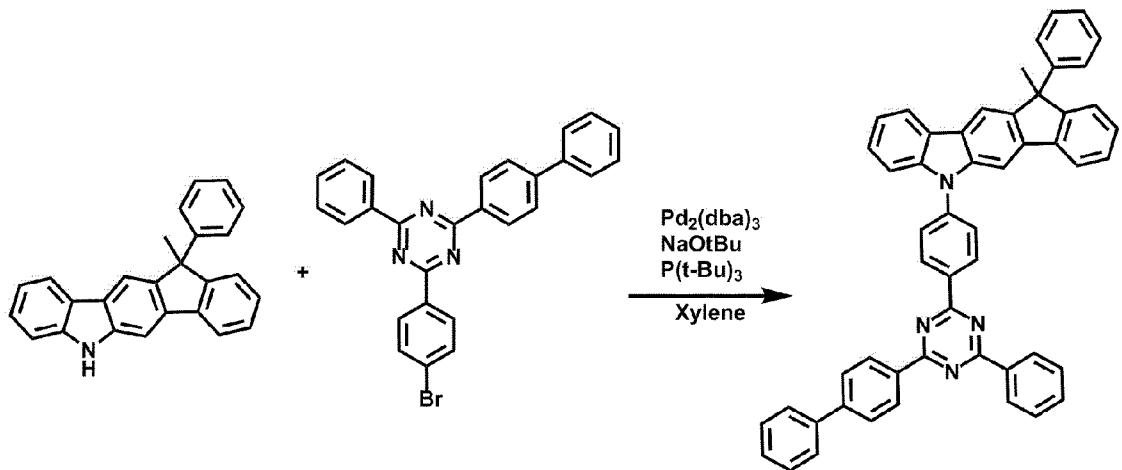
[306] 반응물로 11-methyl-11-phenyl-5,11-dihydroindeno[1,2-b]carbazole을 사용한 것을 제외하고는, 상기 [합성예 13]과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 13.9g을 얻었다.

[307] HRMS [M]⁺: 652.80

[308]

[309] [합성예 29] Mat 29의 합성

[310]



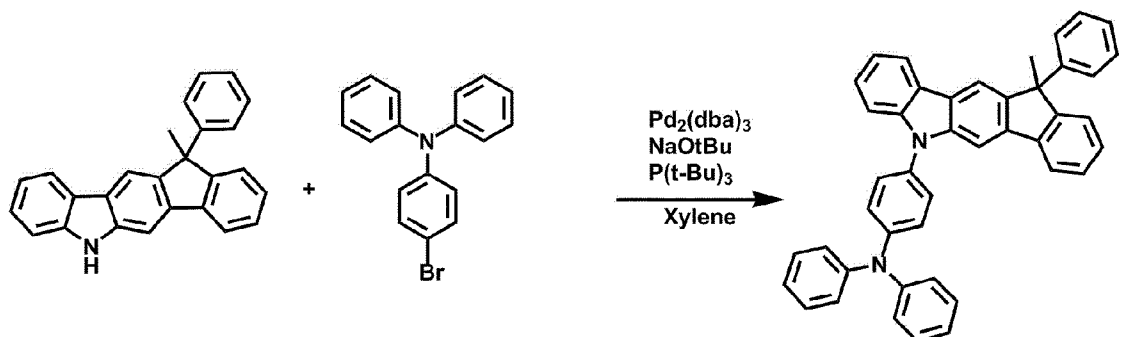
[311] 반응물로 11-methyl-11-phenyl-5,11-dihydroindeno[1,2-b]carbazole을 사용한 것을 제외하고는, 상기 [합성예 14]과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 10g을 얻었다.

[312] HRMS [M]⁺: 728.90

[313]

[314] [합성예 30] Mat 30의 합성

[315]



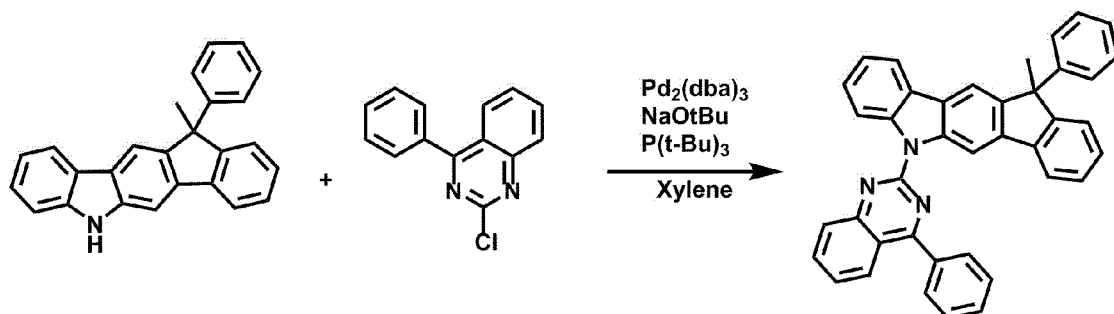
[316] 반응물로 11-methyl-11-phenyl-5,11-dihydroindeno[1,2-b]carbazole을 사용한 것을 제외하고는, 상기 [합성예 16]과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 12.2g을 얻었다.

[317] HRMS [M]⁺: 588.75

[318]

[319] [합성예 31] Mat 31의 합성

[320]



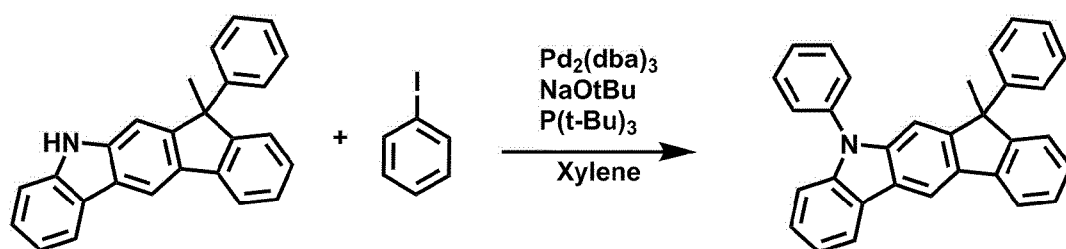
[321] 반응물로 11-methyl-11-phenyl-5,11-dihydroindeno[1,2-b]carbazole을 사용한 것을 제외하고는, 상기 [합성예 18]과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 11.4g을 얻었다.

[322] HRMS [M]⁺: 549.68

[323]

[324] [합성예 32] Mat 32의 합성

[325]



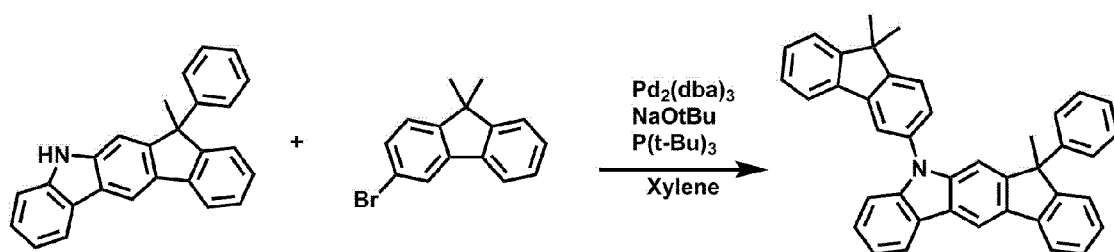
[326] 반응물로 7-methyl-7-phenyl-5,7-dihydroindeno[2,1-b]carbazole을 사용한 것을 제외하고는, 상기 [합성예 1]과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 12g을 얻었다.

[327] HRMS [M]⁺: 471.60

[328]

[329] [합성예 33] Mat 33의 합성

[330]



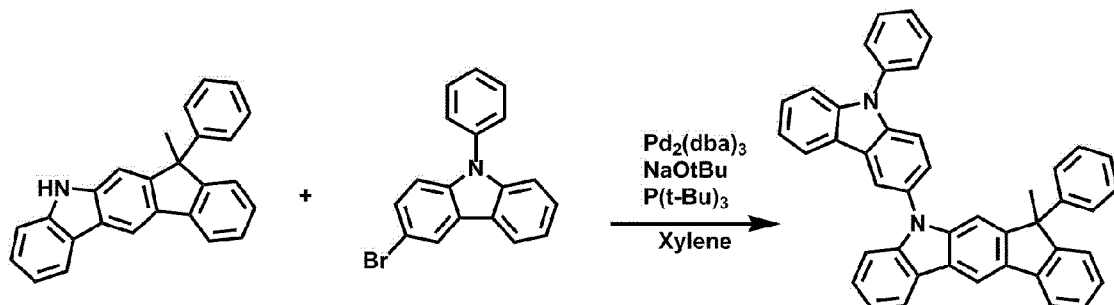
[331] 반응물로 7-methyl-7-phenyl-5,7-dihydroindeno[2,1-b]carbazole을 사용한 것을 제외하고는, 상기 [합성예 4]과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 10.5g을 얻었다.

[332] HRMS [M]⁺: 537.71

[333]

[334] [합성예 34] Mat 34의 합성

[335]



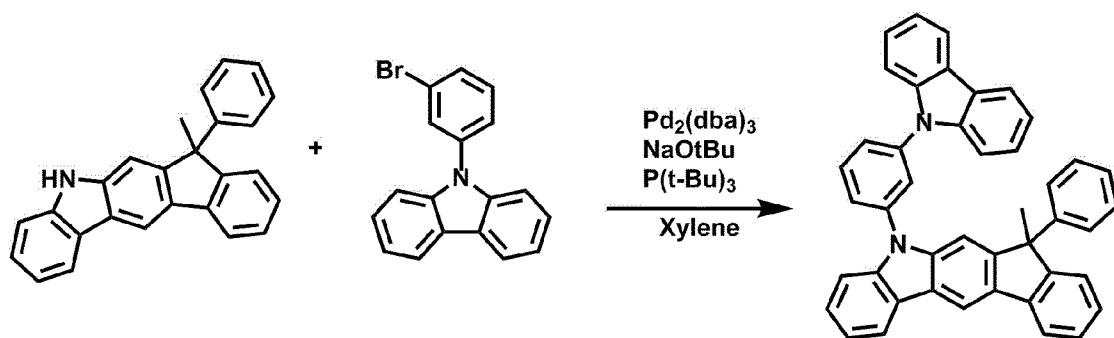
[336] 반응물로 7-methyl-7-phenyl-5,7-dihydroindeno[2,1-b]carbazole을 사용한 것을 제외하고는, 상기 [합성예 5]과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 11.4g을 얻었다.

[337] HRMS [M]⁺: 586.74

[338]

[339] [합성예 35] Mat 35의 합성

[340]



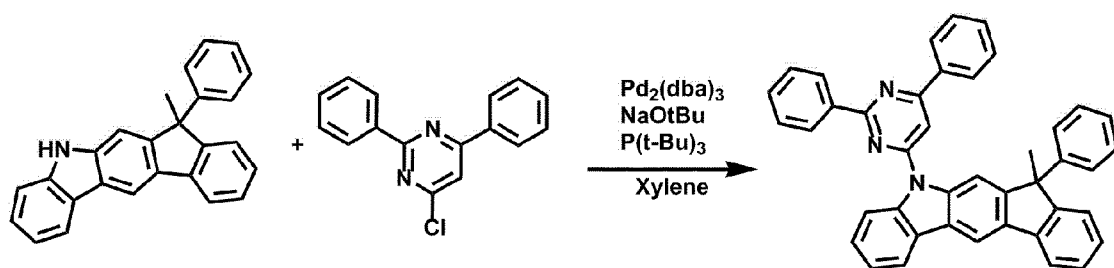
[341] 반응물로 7-methyl-7-phenyl-5,7-dihydroindeno[2,1-b]carbazole을 사용한 것을 제외하고는, 상기 [합성예 6]과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 12.7g을 얻었다.

[342] HRMS [M]⁺: 586.74

[343]

[344] [합성예 36] Mat 36의 합성

[345]



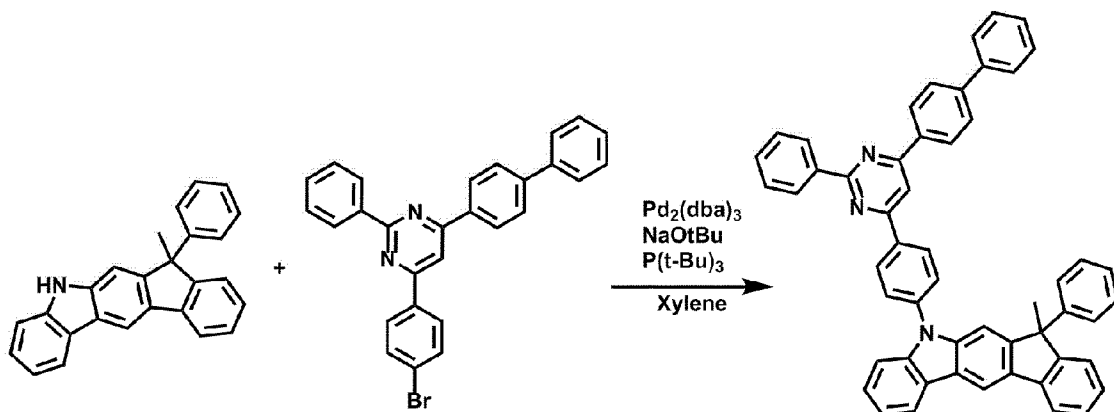
[346] 반응물로 7-methyl-7-phenyl-5,7-dihydroindeno[2,1-b]carbazole을 사용한 것을 제외하고는, 상기 [합성예 9]과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 13g을 얻었다.

[347] HRMS [M]⁺: 575.72

[348]

[349] [합성예 37] Mat 37의 합성

[350]



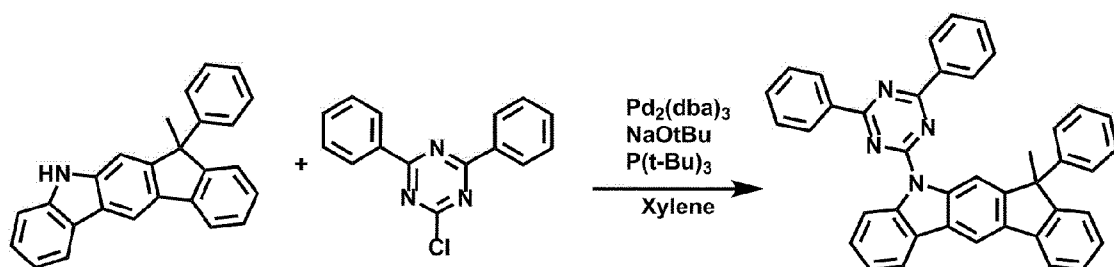
[351] 반응물로 7-methyl-7-phenyl-5,7-dihydroindeno[2,1-b]carbazole을 사용한 것을 제외하고는, 상기 [합성예 10]과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 11.3g을 얻었다.

[352] HRMS $[\text{M}]^+$: 727.91

[353]

[354] [합성예 38] Mat 38의 합성

[355]



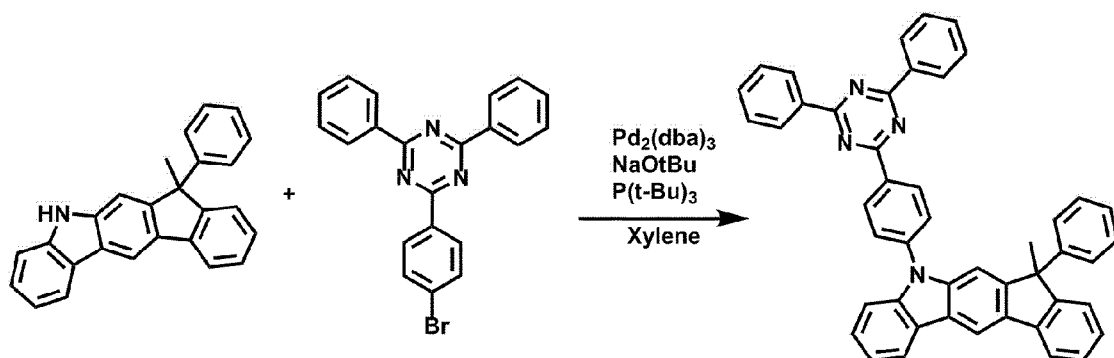
[356] 반응물로 7-methyl-7-phenyl-5,7-dihydroindeno[2,1-b]carbazole을 사용한 것을 제외하고는, 상기 [합성예 11]과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 12g을 얻었다.

[357] HRMS $[\text{M}]^+$: 576.70

[358]

[359] [합성예 39] Mat 39의 합성

[360]



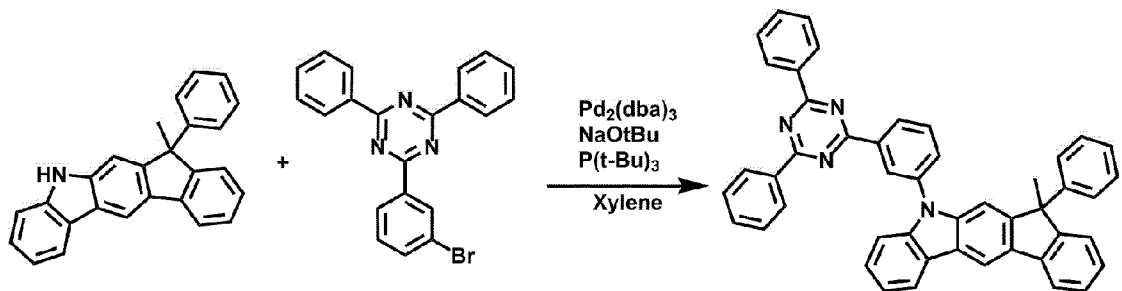
[361] 반응물로 7-methyl-7-phenyl-5,7-dihydroindeno[2,1-b]carbazole을 사용한 것을 제외하고는, 상기 [합성예 12]과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 14.8g을 얻었다.

[362] HRMS [M]⁺: 652.80

[363]

[364] [합성예 40] Mat 40의 합성

[365]



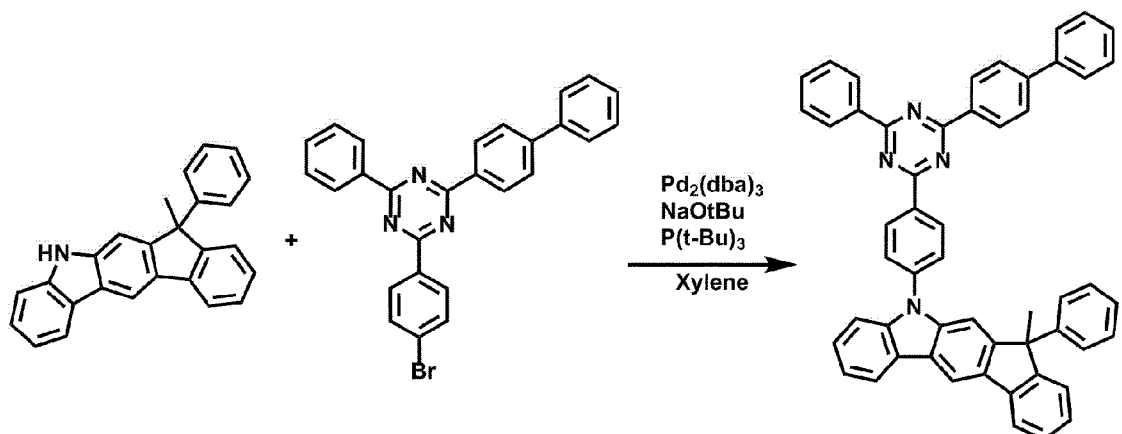
[366] 반응물로 7-methyl-7-phenyl-5,7-dihydroindeno[2,1-b]carbazole을 사용한 것을 제외하고는, 상기 [합성예 13]과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 8.4g을 얻었다.

[367] HRMS [M]⁺: 652.80

[368]

[369] [합성예 41] Mat 41의 합성

[370]



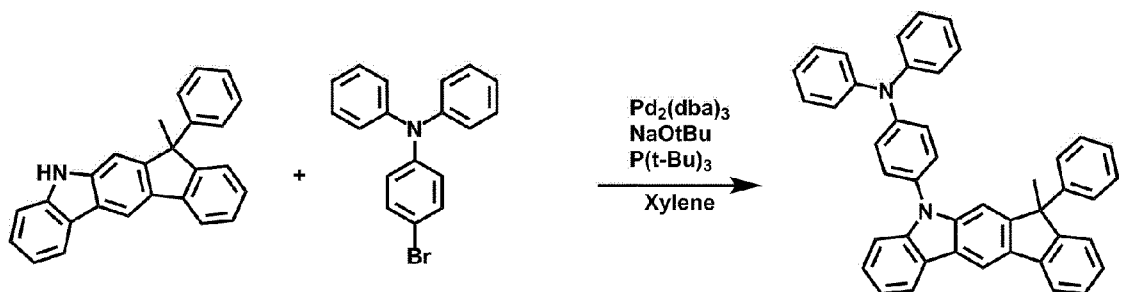
[371] 반응물로 7-methyl-7-phenyl-5,7-dihydroindeno[2,1-b]carbazole을 사용한 것을 제외하고는, 상기 [합성예 14]과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 10.5g을 얻었다.

[372] HRMS [M]⁺: 728.90

[373]

[374] [합성예 42] Mat 42의 합성

[375]



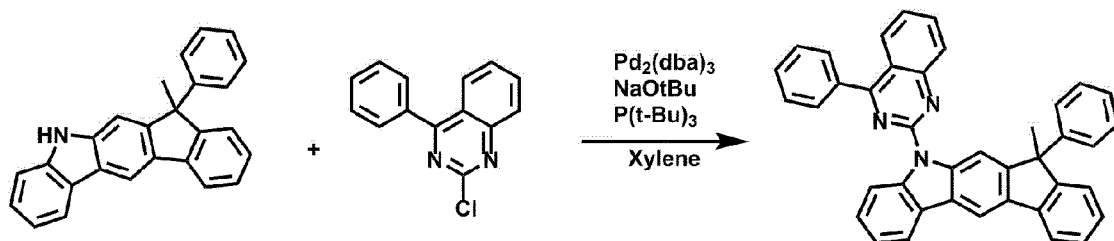
[376] 반응물로 7-methyl-7-phenyl-5,7-dihydroindeno[2,1-b]carbazole을 사용한 것을 제외하고는, 상기 [합성예 16]과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 11.6g을 얻었다.

[377] HRMS [M]⁺: 588.75

[378]

[379] [합성예 43] Mat 43의 합성

[380]



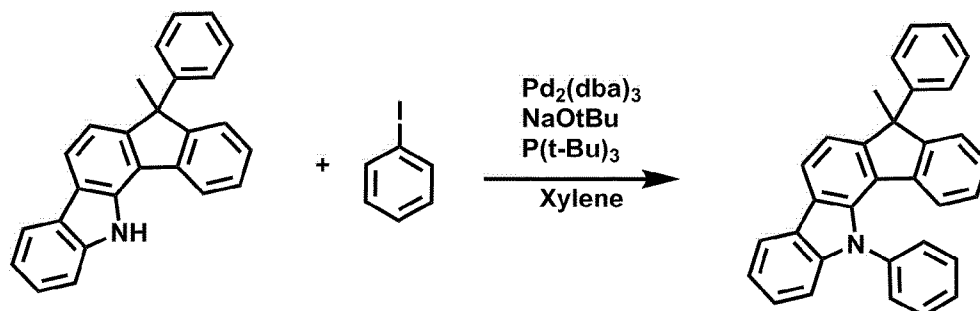
[381] 반응물로 7-methyl-7-phenyl-5,7-dihydroindeno[2,1-b]carbazole을 사용한 것을 제외하고는, 상기 [합성예 18]과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 13.8g을 얻었다.

[382] HRMS [M]⁺: 549.68

[383]

[384] [합성예 44] Mat 44의 합성

[385]



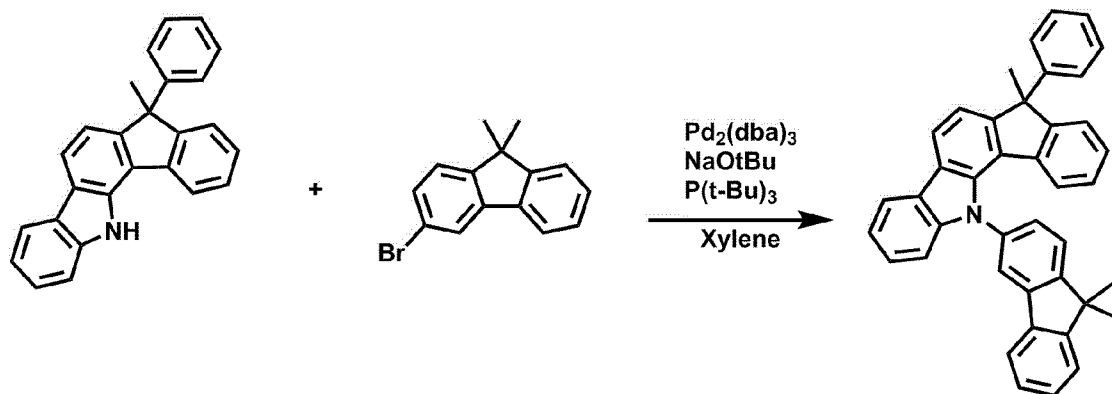
[386] 반응물로 7-methyl-7-phenyl-7,12-dihydroindeno[1,2-a]carbazole을 사용한 것을 제외하고는, 상기 [합성예 1]과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 12.2g을 얻었다.

[387] HRMS [M]⁺: 471.60

[388]

[389] [합성예 45] Mat 45의 합성

[390]



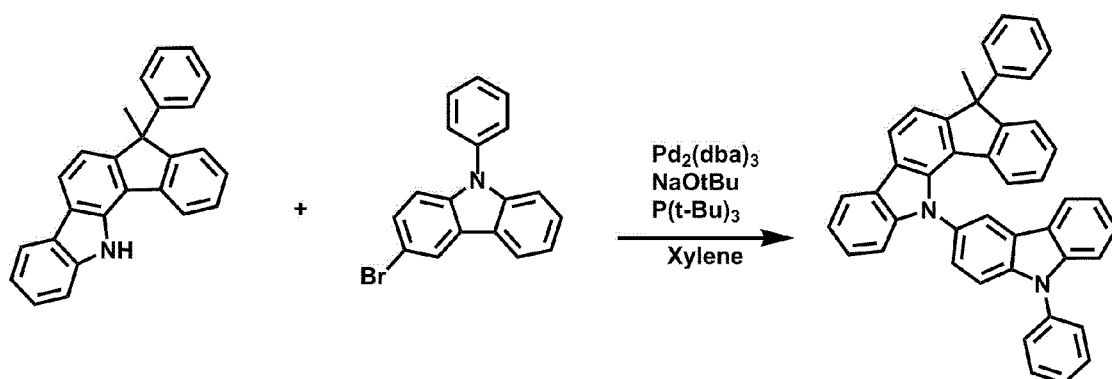
[391] 반응물로 7-methyl-7-phenyl-7,12-dihydroindeno[1,2-a]carbazole을 사용한 것을 제외하고는, 상기 [합성예 4]과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 9.4g을 얻었다.

[392] HRMS $[\text{M}]^+$: 537.71

[393]

[394] [합성예 46] Mat 46의 합성

[395]



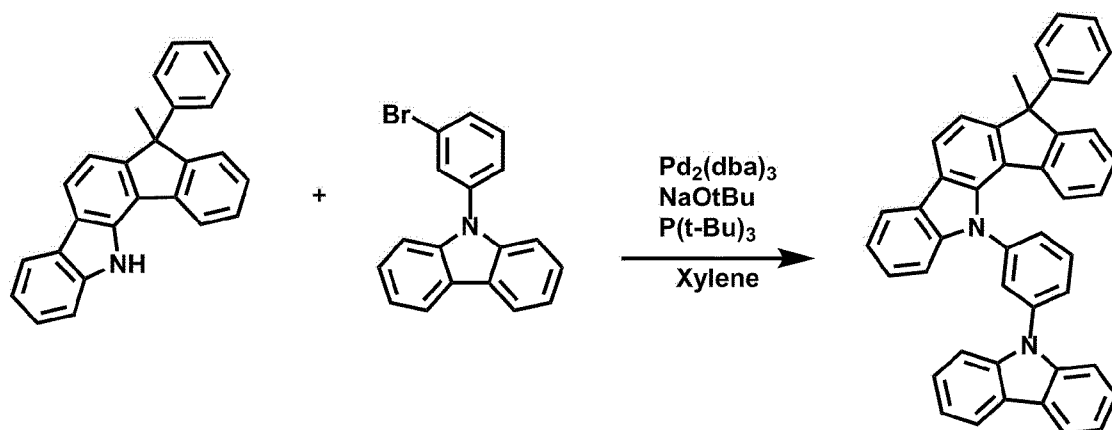
[396] 반응물로 7-methyl-7-phenyl-7,12-dihydroindeno[1,2-a]carbazole을 사용한 것을 제외하고는, 상기 [합성예 5]과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 10.3g을 얻었다.

[397] HRMS $[\text{M}]^+$: 586.74

[398]

[399] [합성예 47] Mat 47의 합성

[400]



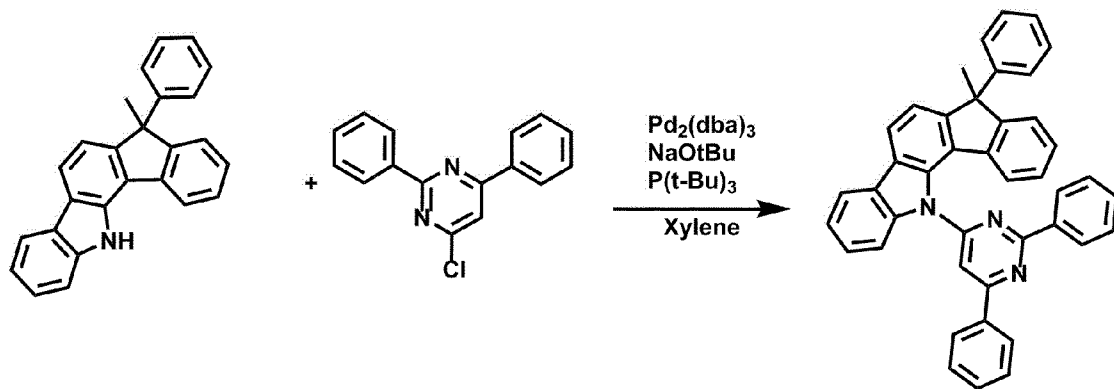
[401] 반응물로 7-methyl-7-phenyl-7,12-dihydroindeno[1,2-a]carbazole을 사용한 것을 제외하고는, 상기 [합성예 6]과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 11.7g을 얻었다.

[402] HRMS [M]⁺: 586.74

[403]

[404] [합성예 48] Mat 48의 합성

[405]



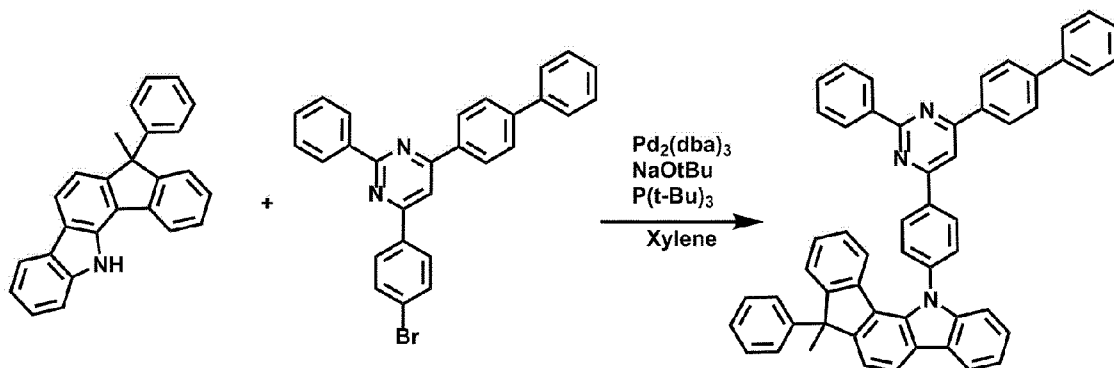
[406] 반응물로 7-methyl-7-phenyl-7,12-dihydroindeno[1,2-a]carbazole을 사용한 것을 제외하고는, 상기 [합성예 9]과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 10.2g을 얻었다.

[407] HRMS [M]⁺: 575.72

[408]

[409] [합성예 49] Mat 49의 합성

[410]



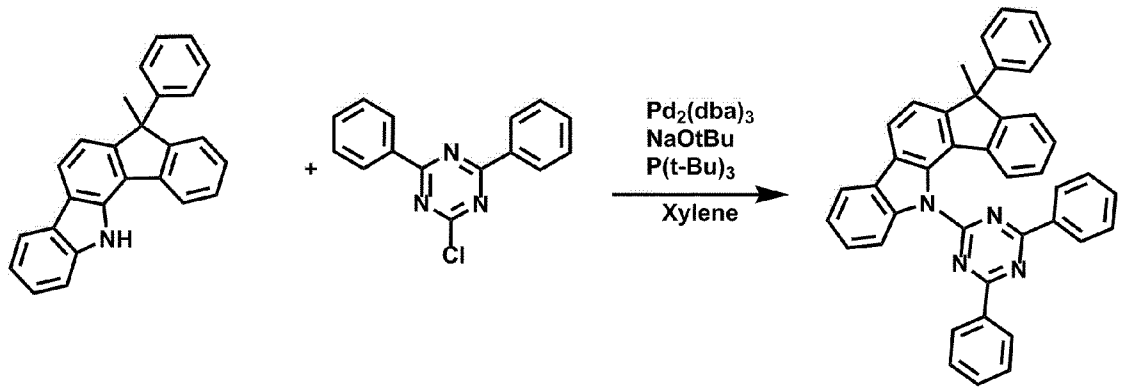
[411] 반응물로 7-methyl-7-phenyl-7,12-dihydroindeno[1,2-a]carbazole을 사용한 것을 제외하고는, 상기 [합성예 10]과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 12.4g을 얻었다.

[412] HRMS [M]⁺: 727.91

[413]

[414] [합성예 50] Mat 50의 합성

[415]



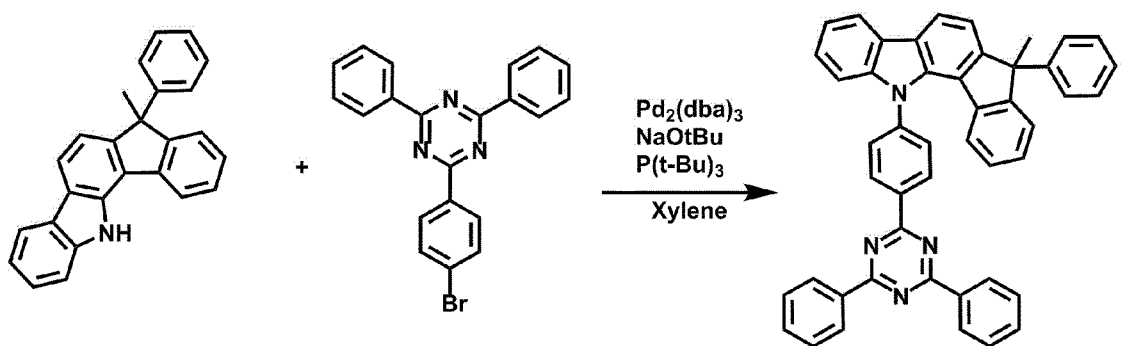
[416] 반응물로 7-methyl-7-phenyl-7,12-dihydroindeno[1,2-a]carbazole을 사용한 것을 제외하고는, 상기 [합성예 11]과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 7.9g을 얻었다.

[417] HRMS $[\text{M}]^+$: 576.70

[418]

[419] [합성예 51] Mat 51의 합성

[420]



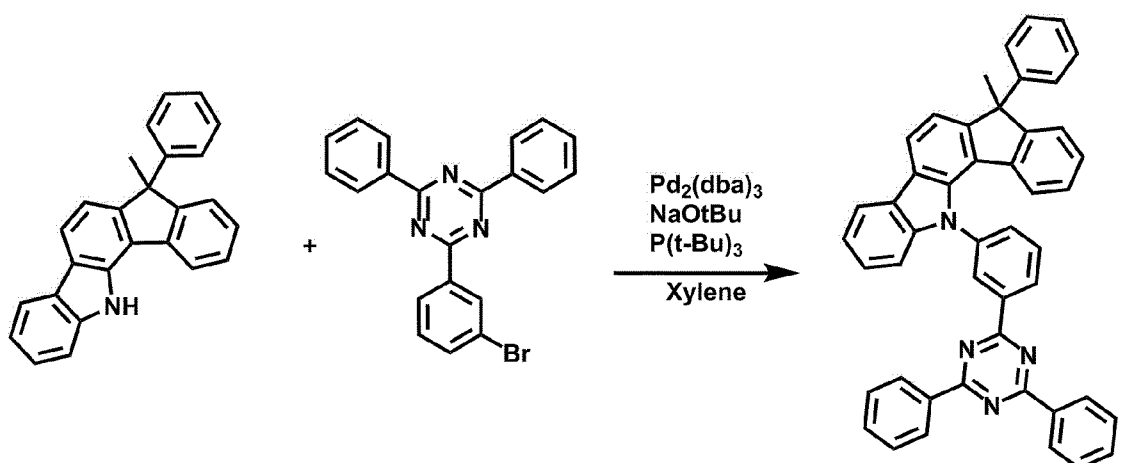
[421] 반응물로 7-methyl-7-phenyl-7,12-dihydroindeno[1,2-a]carbazole을 사용한 것을 제외하고는, 상기 [합성예 12]과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 13.6g을 얻었다.

[422] HRMS $[\text{M}]^+$: 652.80

[423]

[424] [합성예 52] Mat 52의 합성

[425]



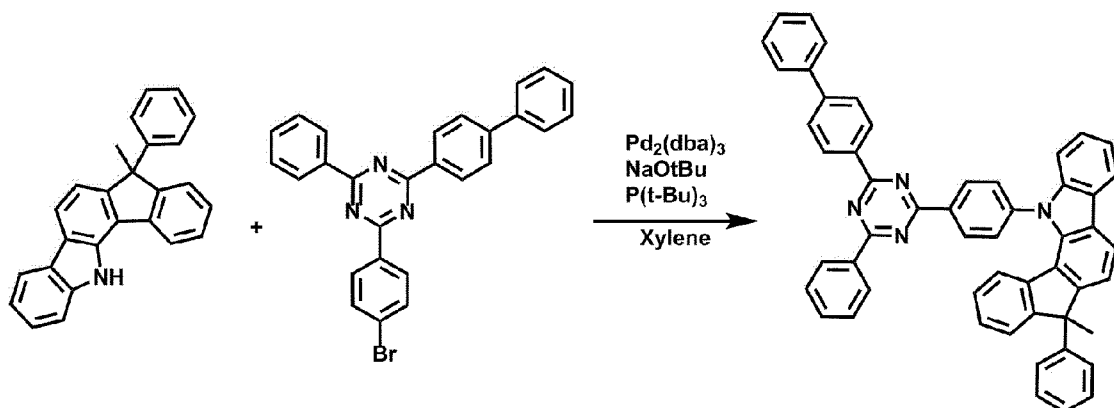
[426] 반응물로 7-methyl-7-phenyl-7,12-dihydroindeno[1,2-a]carbazole을 사용한 것을 제외하고는, 상기 [합성예 13]과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 10.1g을 얻었다.

[427] HRMS [M]⁺: 652.80

[428]

[429] [합성예 53] Mat 53의 합성

[430]



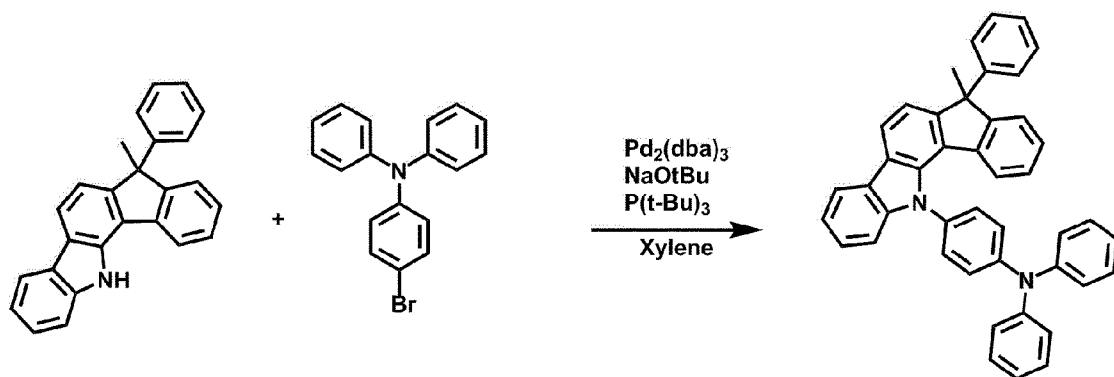
[431] 반응물로 7-methyl-7-phenyl-7,12-dihydroindeno[1,2-a]carbazole을 사용한 것을 제외하고는, 상기 [합성예 14]과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 13.2g을 얻었다.

[432] HRMS [M]⁺: 728.90

[433]

[434] [합성예 54] Mat 54의 합성

[435]



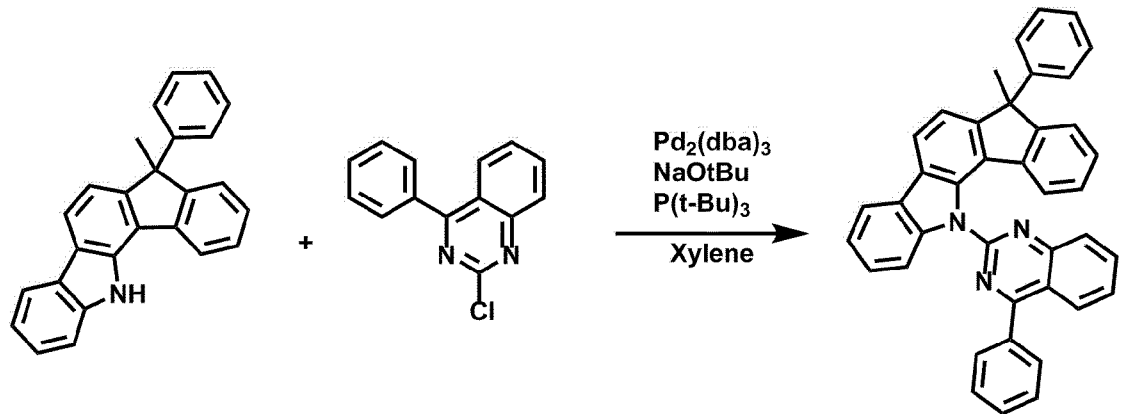
[436] 반응물로 7-methyl-7-phenyl-7,12-dihydroindeno[1,2-a]carbazole을 사용한 것을 제외하고는, 상기 [합성예 16]과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 14.8g을 얻었다.

[437] HRMS [M]⁺: 588.75

[438]

[439] [합성예 55] Mat 55의 합성

[440]



[441] 반응물로 7-methyl-7-phenyl-7,12-dihydroindeno[1,2-a]carbazole을 사용한 것을 제외하고는, 상기 [합성예 18]과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물 11.5g을 얻었다.

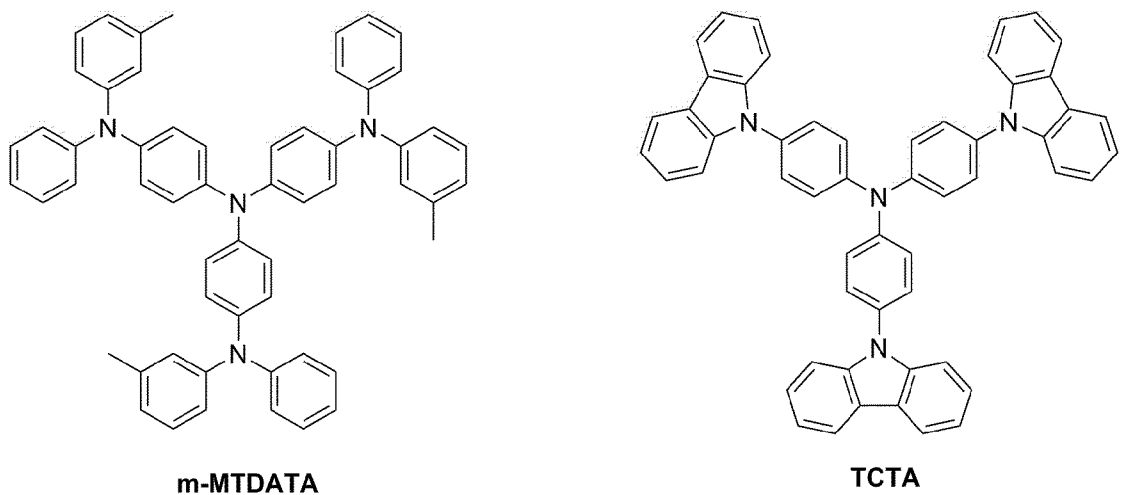
[442] HRMS $[\text{M}]^+$: 549.68

[443]

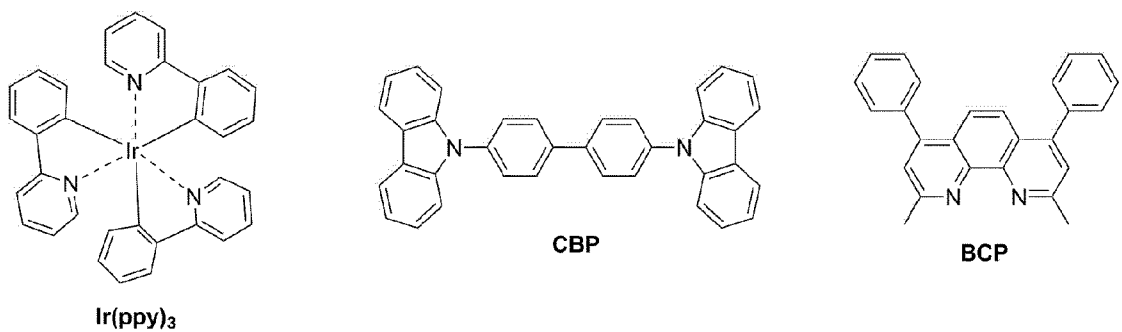
[444] [참조예]

[445] 하기 실시예 1~36; 및 비교예 1~17에서 사용되는 m-MTDATA, $(\text{piq})_2\text{Ir}(\text{acac})$, CBP, BCP, TCTA, $\text{Ir}(\text{ppy})_3$, NPB 및 REF1 내지 REF9 화합물의 구조는 하기와 같다.

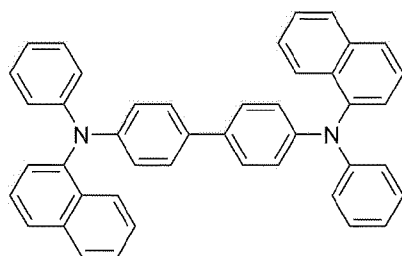
[446]



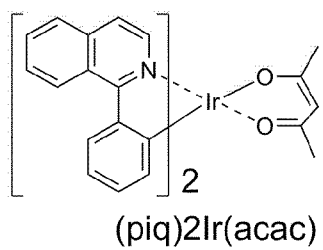
[447]



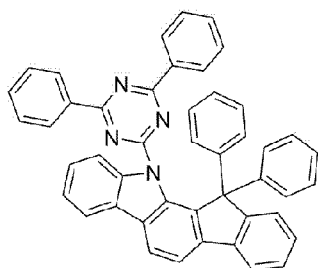
[448]



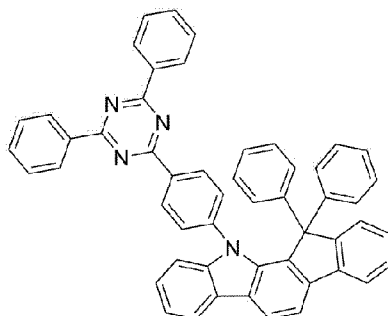
NPB

(piq)₂Ir(acac)

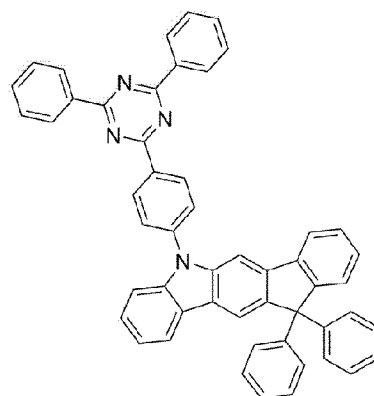
[449]



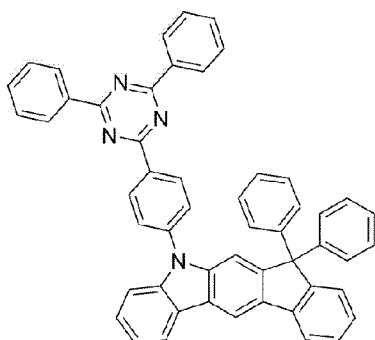
REF1



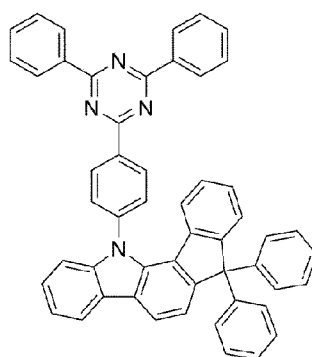
REF2



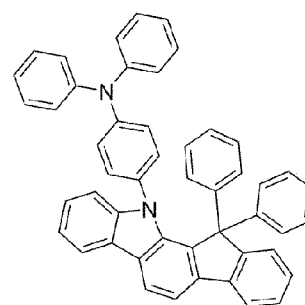
REF3



REF4

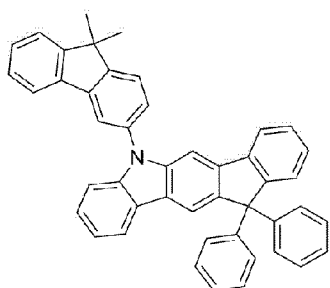


REF5

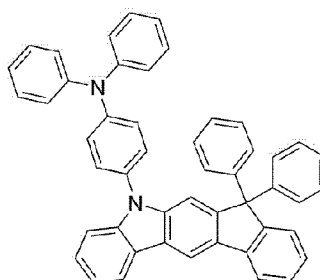


REF6

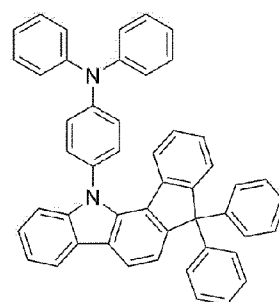
[450]



REF7



REF8



REF9

[451]

[452] [실시예 1 ~ 16] 녹색 유기 EL 소자의 제작

[453] 합성예 1~55에서 합성한 화합물 Mat1 ~ Mat55를 통상적으로 알려진 방법으로 고순도 승화정제를 한 후 아래의 과정에 따라 녹색 유기 EL 소자를 제작하였다.

[454] 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.

[455] 이렇게 준비된 ITO 투명 전극 위에 m-MTDATA (60 nm)/TCTA (80 nm)/ Mat3~4, Mat6, Mat11~13, Mat15, Mat26~28, Mat38~40, Mat50~52의 각각의 화합물 + 10 % Ir(ppy)₃ (30nm)/BCP (10 nm)/Alq₃ (30 nm)/LiF (1 nm)/Al (200 nm) 순으로 적층하여 유기 EL 소자를 제작하였다.

[456]

[457] [비교예 1~6] 녹색 유기 EL 소자의 제작

[458] 발광층 형성시 발광 호스트 물질로서 합성예 3에서 제조된 화합물 Mat3 대신 CBP 및 REF1 ~ REF5를 사용하는 것을 제외하고는, 상기 실시예 1과 동일한 과정을 수행하여 녹색 유기 EL 소자를 제작하였다.

[459]

[460] [평가예 1~16]

[461] 실시예 1 ~ 16 및 비교예 1~6에서 제작한 각각의 녹색 유기 EL 소자에 대하여 전류밀도 (10) mA/cm²에서의 구동전압, 전류효율 및 발광 피크를 측정하고, 그 결과를 하기 표 1에 나타내었다.

[462] [표1]

샘플	호스트	구동 전압(V)	EL 피크(nm)	전류 효율(cd/A)
실시예 1	Mat3	6.20	517	40.0
실시예 2	Mat4	6.33	516	40.5
실시예 3	Mat6	6.25	516	39.5
실시예 4	Mat11	5.89	517	38.9
실시예 5	Mat12	6.00	516	40.6
실시예 6	Mat13	6.20	516	39.6
실시예 7	Mat15	5.99	517	40.2
실시예 8	Mat26	5.98	516	39.8
실시예 9	Mat27	6.00	517	39.9
실시예 10	Mat28	5.99	516	39.4
실시예 11	Mat38	6.39	516	40.0
실시예 12	Mat39	6.24	517	40.0
실시예 13	Mat40	5.98	517	39.8
실시예 14	Mat50	5.69	516	39.5
실시예 15	Mat51	5.78	516	40.8
실시예 16	Mat52	5.88	516	40.5
비교예 1	CBP	6.93	516	38.2
비교예 2	REF1	6.22	516	39.5
비교예 3	REF2	6.48	516	38.8
비교예 4	REF3	6.26	517	38.2
비교예 5	REF4	6.35	517	38.7
비교예 6	REF5	6.55	516	38.4

[463] 상기 표 1에 나타낸 바와 같이, 본 발명에 따른 화합물(Mat3 ~ Mat52)을 발광층으로 사용하는 실시예 1~16의 녹색 유기 EL 소자는 종래 CBP 및 REF1 ~ REF5를 사용하는 비교예 1~6의 녹색 유기 EL 소자와 비교해 볼 때, 효율 및 구동전압 면에서 보다 우수한 성능을 나타내는 것을 알 수 있었다.

[464]

[465] [실시예 17 ~ 28] 적색 유기 EL 소자의 제작

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

- [467] 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.
- [468] 이렇게 준비된 ITO 투명 전극 위에 m-MTDATA (60 nm)/TCTA (80 nm)/ Mat9 ~ Mat55의 화합물 + 10 % (piq)₂Ir(acac) (30nm)/BCP (10 nm)/Alq₃ (30 nm)/LiF (1 nm)/Al (200 nm) 순으로 적층하여 유기 전계 발광 소자를 제작하였다.
- [469]
- [470] [비교예 7~12] 적색 유기 EL 소자의 제작
- [471] 발광층 형성시 발광 호스트 물질로서 상기 합성예 9의 화합물 Mat9 대신 CBP 및 REF1 ~ REF5 를 사용하는 것을 제외하고는, 상기 실시예 17과 동일한 과정을 수행하여 적색 유기 전계 발광 소자를 제작하였다.
- [472]
- [473] [평가예 17~28]
- [474] 실시예 17 ~ 28 및 비교예 7~12에서 제작한 각각의 유기 전계 발광 소자에 대하여 전류밀도 10 mA/cm²에서의 구동전압 및 전류효율을 측정하고, 그 결과를 하기 표 2에 나타내었다.

[475] [표2]

샘플	호스트	구동 전압(V)	전류효율(cd/A)
실시예 17	Mat9	5.00	9.5
실시예 18	Mat11	5.12	9.1
실시예 19	Mat12	4.97	8.9
실시예 20	Mat13	4.89	9.1
실시예 21	Mat18	5.00	9.0
실시예 22	Mat38	5.11	8.6
실시예 23	Mat39	4.99	9.4
실시예 24	Mat40	4.98	9.3
실시예 25	Mat43	5.14	9.0
실시예 26	Mat50	5.00	8.8
실시예 27	Mat51	5.12	8.5
실시예 28	Mat55	4.80	8.9
비교예 7	CBP	5.25	8.2
비교예 8	REF1	5.10	8.9
비교예 9	REF2	5.18	8.4
비교예 10	REF3	5.16	8.8
비교예 11	REF4	5.10	8.6
비교예 12	REF5	5.13	8.6

[476] 상기 표 2에 나타낸 바와 같이, 본 발명에 따른 화합물을 발광층의 재료로 사용한 실시예 17-28의 적색 유기 전계 발광소자는, 종래 CBP 및 REF1 ~ REF5를 발광층의 재료로 사용한 비교예 7~12의 적색 유기 전계 발광 소자와 비교해 볼 때, 효율 및 구동전압 면에서 우수한 성능을 나타내는 것을 알 수 있었다.

[477]

[478] [실시예 29] 유기 EL 소자의 제조

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

[480] 상기와 같이 준비된 ITO 투명 전극 위에 m-MTDATA(60nm)/합성예 3에서 합성된 화합물 Mat3 (80nm)/DS-H522 + 5% DS-501(30nm)/BCP(10nm)/Alq3(30

nm)/LiF(1nm)/Al(200nm) 순서로 유기 EL 소자를 제조하였다.

[481] 소자 제작에 사용된 DS-H522 및 DS-501은 (주)두산 전자 BG의 제품이다.

[482]

[483] [실시예 30 ~ 36] 유기 EL 소자의 제조

[484] 실시예 29에서 정공 수송층 형성시 정공 수송층 물질로 사용된 화합물 Mat3 대신 각각 합성된 화합물 Mat16 ~ Mat54 를 사용하는 것을 제외하고는, 상기 실시예 29와 동일하게 수행하여 유기 EL 소자를 제조하였다.

[485]

[486] [비교예 13~17] 유기 EL 소자의 제작

[487] 실시예 29에서 정공 수송층 형성시 정공 수송층 물질로 사용된 화합물 Mat3 대신 NPB 및 REF6 ~ REF9를 정공수송층 물질로 사용한 것을 제외하고는, 상기 실시예 29와 동일한 방법으로 유기 EL 소자를 제조하였다.

[488]

[489] [평가예 29~36]

[490] 실시예 29 ~ 36 및 비교예 13~17에서 각각 제조된 유기 EL 소자에 대하여 전류밀도 10 mA/cm²에서의 구동전압 및 전류효율을 측정하였고, 그 결과를 하기 표 3에 나타내었다.

[491] [표3]

샘플	정공수송층	구동 전압 (V)	전류효율 (cd/A)
실시예 29	Mat3	4.7	19.6
실시예 30	Mat16	4.6	19.3
실시예 31	Mat21	4.6	20.2
실시예 32	Mat30	5.1	20.3
실시예 33	Mat33	5.2	19.7
실시예 34	Mat42	5.0	19.1
실시예 35	Mat44	4.7	20.0
실시예 36	Mat54	4.8	19.5
비교예 13	NPB	5.2	18.1
비교예 14	REF6	5.0	19.1
비교예 15	REF7	5.1	18.6
비교예 16	REF8	5.2	18.4
비교예 17	REF9	5.4	18.8

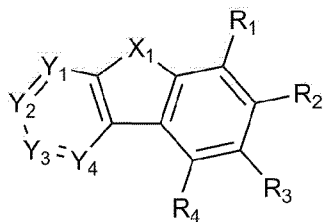
[492] 상기 표 3에 나타낸 바와 같이, 본 발명에 따른 화합물(Mat3 ~ Mat54)을 정공수송층으로 사용한 실시예 29~36의 유기 EL 소자는, 종래 NPB 및 REF6 ~

REF9를 정공수송층으로 사용한 비교예 13~17의 유기 EL 소자에 비해 전류효율 및 구동전압 면에서 보다 우수한 성능을 나타내는 것을 알 수 있었다.

청구범위

[청구항 1] 하기 화학식 1로 표시되는 화합물:

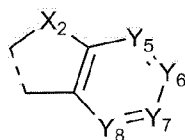
[화학식 1]



상기 화학식 1에서,

R_1 과 R_2 , R_2 와 R_3 , 및 R_3 과 R_4 중 적어도 한쌍은 서로 결합하여 하기 화학식 2와 축합 환을 형성하고;

[화학식 2]



상기 화학식 2에서,

점선은 축합이 이루어지는 부분이고;

X_1 및 X_2 는 서로 동일하거나 또는 상이하며, 각각 독립적으로 O, S, Se, N(Ar_1), C(Ar_2)(Ar_3) 및 Si(Ar_4)(Ar_5)로 구성된 군으로부터 선택되고;

Y_1 내지 Y_8 은 서로 동일하거나 또는 상이하며, 각각 독립적으로 N 또는 C(R_5)에서 선택되고, 이때 R_5 가 복수인 경우, 복수의 R_5 는 서로 같거나 또는 상이하며;

축합환을 비(非)형성하는 R_1 내지 R_4 및 R_5 는 서로 같거나 또는 상이하며, 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 시아노기, 니트로기, C_1 ~ C_{40} 의 알킬기, C_2 ~ C_{40} 의 알케닐기, C_2 ~ C_{40} 의 알키닐기, C_3 ~ C_{40} 의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, C_6 ~ C_{60} 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴기, C_1 ~ C_{40} 의 알킬옥시기, C_6 ~ C_{60} 의 아릴옥시기, C_1 ~ C_{40} 의 알킬실릴기, C_6 ~ C_{60} 의 아릴실릴기, C_1 ~ C_{40} 의 알킬보론기, C_6 ~ C_{60} 의 아릴보론기, C_6 ~ C_{60} 의 아릴포스핀기, C_6 ~ C_{60} 의 아릴포스핀옥사이드기 및 C_6 ~ C_{60} 의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택되고, 인접한 각각의 R_5 는 서로 결합하여 축합 방향족환 또는 축합 헤테로방향족환을 형성할 수 있으며;

Ar_1 내지 Ar_5 는 서로 동일하거나 또는 상이하며, 각각 독립적으로 C_1 ~ C_{40} 의 알킬기, C_2 ~ C_{40} 의 알케닐기, C_2 ~ C_{40} 의 알키닐기, C_3 ~ C_{40} 의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, C_6 ~ C_{60} 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴기, C_1 ~ C_{40} 의 알킬옥시기, C_6 ~ C_{60} 의 아릴옥시기, C_1 ~ C_{40} 의 알킬실릴기, C_6 ~ C_{60} 의 아릴실릴기, C_1 ~ C_{40} 의 알킬보론기, C_6 ~ C_{60} 의

아릴보론기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴포스핀기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴포스핀옥사이드기 및 $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택되고;
 다만 상기 X_1 및 X_2 중 적어도 하나는 $C(Ar_2)(Ar_3)$ 이고, 이때 Ar_2 와 Ar_3 중 하나는 $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬기이고, 다른 하나는 $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴기이며;
 상기 R_1 내지 R_4 , R_5 , Ar_1 내지 Ar_5 에서 알킬기, 시클로알킬기, 헤테로시클로알킬기, 아릴기, 헤테로아릴기, 알킬옥시기, 아릴옥시기, 알킬실릴기, 아릴실릴기, 알킬보론기, 아릴보론기, 아릴포스핀기, 아릴포스핀옥사이드기 및 아릴아민기는 각각 독립적으로, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_2\sim C_{40}$ 의 알케닐기, $C_2\sim C_{40}$ 의 알키닐기, $C_3\sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬옥시기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴옥시기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬실릴기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴실릴기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬보론기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴보론기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴포스핀기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴포스핀옥사이드기 및 $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상으로 치환될 수 있으며, 이때 복수개의 치환기로 치환될 경우 이들은 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

[청구항 2]

제1항에 있어서,

 X_1 은 $N(Ar_1)$ 이고, X_2 는 $C(Ar_2)(Ar_3)$ 이며,

Ar_1 은 $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴기 및 $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택되고;

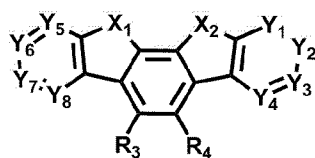
Ar_2 와 Ar_3 중 하나는 $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬기이고, 다른 하나는 $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴기인 것을 특징으로 하는 화합물.

[청구항 3]

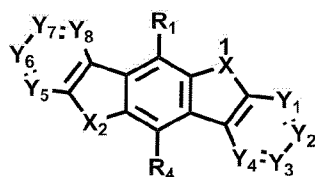
제1항에 있어서,

상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 하기 화학식 3 내지 화학식 5 중 어느 하나로 표시되는 것을 특징으로 하는 화합물:

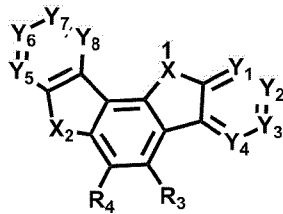
[화학식 3]



[화학식 4]



[화학식 5]



상기 화학식 3 내지 화학식 5에 있어서,

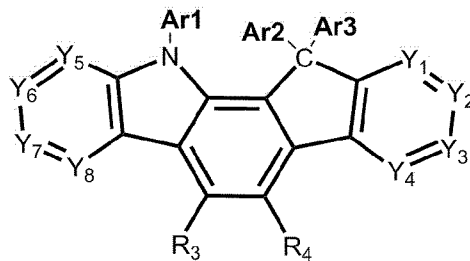
X_1 , X_2 , R_1 , $R_3 \sim R_4$ 및 Y_1 내지 Y_8 는 제1항에서 정의된 바와 같다.

[청구항 4]

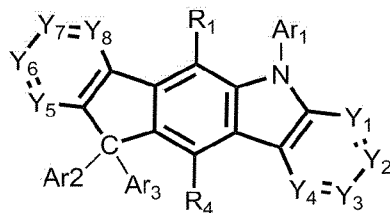
제1항에 있어서,

상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 하기 화학식 3A 내지 화학식 5A 중 어느 하나로 표시되는 것을 특징으로 하는 화합물:

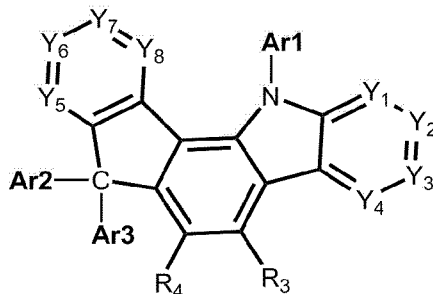
[화학식 3A]



[화학식 4A]



[화학식 5A]



상기 화학식 3A 내지 화학식 5A에 있어서,

Ar_1 은 $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴기, 또는 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴기이고;

Ar_2 는 메틸기이고, Ar_3 는 페닐기이고,

Ar_1 및 Ar_2 의 아릴기, 헤테로아릴기, 메틸기, 페닐기는 각각 독립적으로, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_2 \sim C_{40}$ 의 알케닐기, $C_2 \sim C_{40}$ 의 알키닐기, $C_3 \sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬옥시기, $C_6 \sim C_{60}$

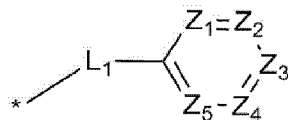
의 아릴옥시기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬실릴기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴실릴기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬보론기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴보론기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴포스핀기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴포스핀옥사이드기 및 $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상으로 치환될 수 있으며, 이때 복수개의 치환기로 치환될 경우 이들은 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

[청구항 5]

제1항에 있어서,

축합환을 비(非)형성하는 R_1 내지 R_5 , Ar_1 내지 Ar_5 중 적어도 하나는 하기 화학식 6으로 표시되는 치환체인 것을 특징으로 하는 화합물:

[화학식 6]



상기 화학식 6에서,

*는 상기 화학식 1에 결합되는 부분을 의미하고;

L_1 은 단일결합이거나, 또는 $C_6\sim C_{18}$ 의 아릴렌기 및 핵원자수 5 내지 18의 헤테로아릴렌기로 이루어진 군에서 선택되고,

Z_1 내지 Z_5 는 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 N 또는 $C(R_6)$ 이며, 다만 Z_1 내지 Z_5 중 적어도 하나는 N이고, 이때 R_6 이 복수인 경우, 복수의 R_6 는 서로 동일하거나 상이하며;

R_6 은 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, $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 40의 헤테로아릴기, $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴옥시기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬옥시기, $C_3\sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴아민기, $C_1\sim C_{40}$ 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 군에서 선택되거나, 또는 인접하는 기와 결합하여 축합 고리를 형성할 수 있으며;

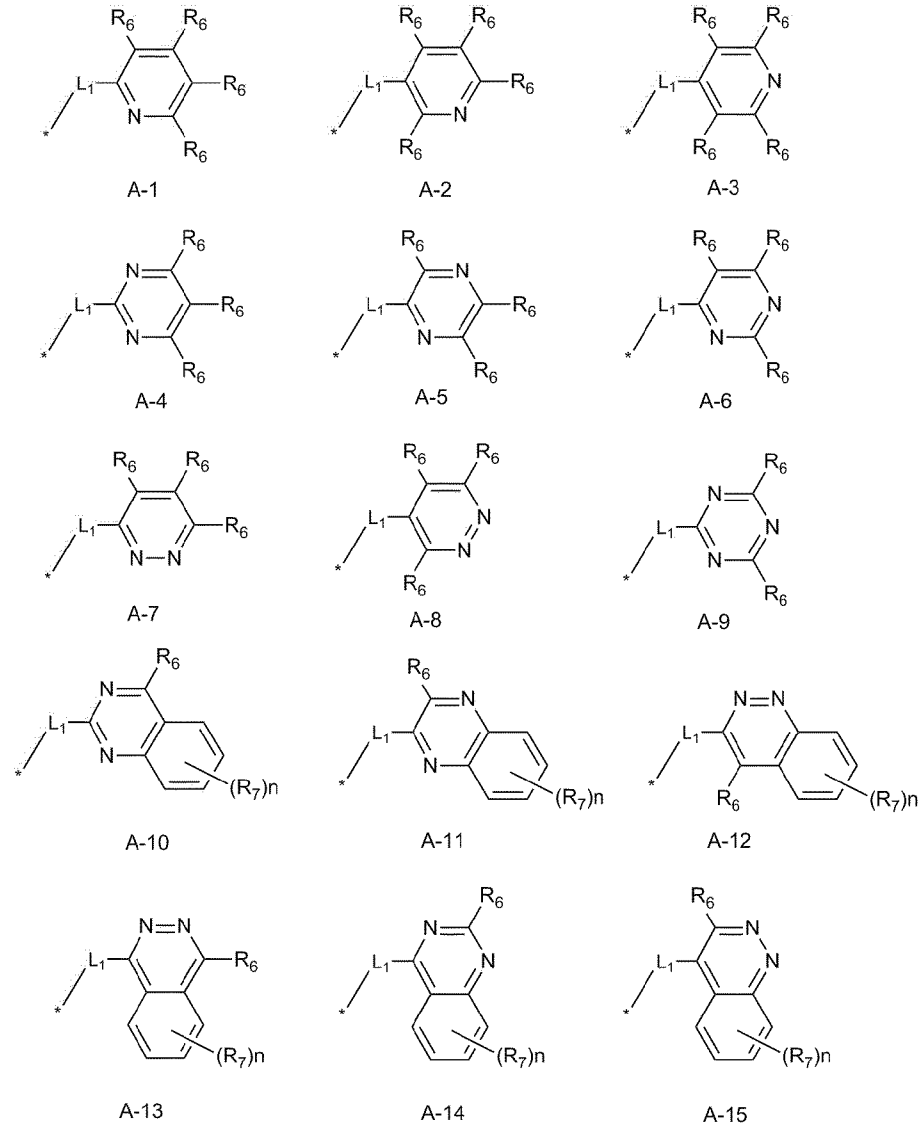
상기 R_6 의 알킬기, 알케닐기, 알키닐기, 아릴기, 헤테로아릴기, 아릴옥시기, 알킬옥시기, 시클로알킬기, 헤테로시클로알킬기, 아릴아민기, 알킬실릴기, 알킬보론기, 아릴보론기, 아릴포스핀기, 아릴포스핀옥사이드기 및 아릴실릴기는 각각 독립적으로 중수소, 할로젠, 시아노기, 니트로기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_2\sim C_{40}$ 의 알케닐기, $C_2\sim C_{40}$ 의 알키닐기, $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 40의 헤테로아릴기, $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴옥시기, $C_1\sim C_{40}$ 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 군에서 선택된 1종 이상의 치환기로 치환될 수

있으며, 이때 상기 치환기가 복수인 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

[청구항 6]

제5항에 있어서,

상기 화학식 6으로 표시되는 치환체는 하기 화학식 A-1 내지 A-15으로 구성되는 치환체 군에서 선택되는 것을 특징으로 하는 화합물:



상기 A-1 내지 A-15에서,

L_1 및 R_6 은 각각 제5항에서 정의된 바와 같고,

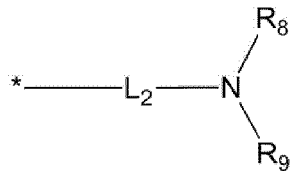
n 은 0 내지 4의 정수로서, 상기 n 이 1 내지 4의 정수인 경우, R_7 는 중수소, 할로젠, 시아노기, 니트로기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_2 \sim C_{40}$ 의 알케닐기, $C_2 \sim C_{40}$ 의 알키닐기, $C_3 \sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, $C_6 \sim C_{40}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 40의 헤테로아릴기, $C_6 \sim C_{40}$ 의 아릴옥시기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬옥시기, $C_6 \sim C_{40}$ 의 아릴아민기, $C_1 \sim C_{40}$ 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

C₆~C₄₀의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택되거나, 또는 인접하는 기와 결합하여 축합 고리를 형성할 수 있으며,
 상기 R₇의 알킬기, 알케닐기, 알키닐기, 시클로알킬기,
 헤테로시클로알킬기, 아릴기, 헤테로아릴기, 아릴옥시기, 알킬옥시기,
 아릴아민기, 알킬실릴기, 알킬보론기, 아릴보론기, 아릴포스핀기,
 아릴포스핀옥사이드기 및 아릴실릴기는 각각 독립적으로 중수소,
 할로젠, 시아노기, 니트로기, C₁~C₄₀의 알킬기, C₂~C₄₀의 알케닐기, C₂~C₄₀
 의 알키닐기, C₆~C₄₀의 아릴기, 핵원자수 5 내지 40의 헤테로아릴기, C₆~C₄₀
 의 아릴옥시기, C₁~C₄₀의 알킬옥시기, C₆~C₄₀의 아릴아민기, C₃~C₄₀의
 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, C₁~C₄₀의
 알킬실릴기, C₁~C₄₀의 알킬보론기, C₆~C₄₀의 아릴보론기, C₆~C₄₀의
 아릴포스핀기, C₆~C₄₀의 아릴포스핀옥사이드기 및 C₆~C₄₀의
 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상의 치환기로 치환될 수
 있으며, 이때 상기 치환기가 복수인 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이할
 수 있다.

[청구항 7]

제1항에 있어서,
 축합환을 비(非)형성하는 R₁ 내지 R₅, Ar₁ 내지 Ar₅ 중 적어도 하나는 하기
 화학식 7로 표시되는 치환체인 것을 특징으로 하는 화합물:

[화학식 7]



상기 화학식 7에서,

*는 상기 화학식 1에 결합되는 부분을 의미하고;

L₂은 단일결합이거나, 또는 C₆~C₁₈의 아릴렌기 및 핵원자수 5 내지 18의
 헤테로아릴렌기로 이루어진 군에서 선택되고,

R₈ 및 R₉는 서로 동일하거나 또는 상이하며, 각각 독립적으로 C₁~C₄₀의
 알킬기, C₆~C₄₀의 아릴기, 핵원자수 5 내지 40의 헤테로아릴기 및 C₆~C₆₀의
 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택되거나, 또는 R₈ 및 R₉가 서로
 결합하여 축합 고리를 형성할 수 있으며;

상기 R₈ 및 R₉에서 알킬기, 아릴기, 헤테로아릴기 및 아릴아민기는 각각
 독립적으로 중수소, 할로젠, 시아노기, 니트로기, C₁~C₄₀의 알킬기, C₂~C₄₀
 의 알케닐기, C₂~C₄₀의 알키닐기, C₆~C₄₀의 아릴기, 핵원자수 5 내지 40의
 헤테로아릴기, C₆~C₄₀의 아릴옥시기, C₁~C₄₀의 알킬옥시기, C₆~C₄₀의
 아릴아민기, C₃~C₄₀의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40의
 헤테로시클로알킬기, C₁~C₄₀의 알킬실릴기, C₁~C₄₀의 알킬보론기, C₆~C₄₀
 의 아릴보론기, C₆~C₄₀의 아릴포스핀기, C₆~C₄₀의 아릴포스핀옥사이드기

및 C₆~C₄₀의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상의 치환기로 치환될 수 있으며, 이때 상기 치환기가 복수인 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

[청구항 8] 양극, 음극 및 상기 양극과 음극 사이에 개재(介在)된 1층 이상의 유기물층을 포함하며, 상기 1층 이상의 유기물층 중 적어도 하나는 제1항 내지 제7항 중 어느 한 항에 기재된 화합물을 포함하는 유기 전계 발광 소자.

[청구항 9] 제8항에 있어서,
상기 화합물을 포함하는 유기물층은 발광층, 전자 주입층, 발광보조층, 및 수명 개선층으로 구성된 군에서 선택되는 것을 특징으로 하는 유기 전계 발광 소자.

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/KR2017/001917

A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER

C07D 209/56(2006.01)i, C07D 403/04(2006.01)i, C07D 403/10(2006.01)i, C09K 11/06(2006.01)i, H01L 51/50(2006.01)i, H01L 51/00(2006.01)i

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

B. FIELDS SEARCHED

Minimum documentation searched (classification system followed by classification symbols)

C07D 209/56; C07D 251/12; H01L 27/32; C07D 209/82; C09K 11/06; H01L 51/50; C07D 307/91; C07D 403/04; C07D 403/10; H01L 51/00

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

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

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

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

eKOMPASS (KIPO internal) & STN(Registry, Caplus) & Google & Keywords: organic electroluminescence element, indolocarbazole, organic layer, light-emitting efficiency, lifespan

C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
X	KR 10-2015-0034390 A (ROHM AND HAAS ELECTRONIC MATERIALS KOREA LTD.) 03 April 2015 See claims 1, 5, 6; paragraphs [0060]-[0062]; and compound C-94.	1,3,7,8,9
A		2,4-6
X	KR 10-2015-0034333 A (ROHM AND HAAS ELECTRONIC MATERIALS KOREA LTD.) 03 April 2015 See claims 1, 4, 8; and compounds H-7, H-8, etc..	1-9
X	KR 10-2015-0017605 A (CHEIL INDUSTRIES INC.) 17 February 2015 See claims 1, 2, 4; and compounds 1-3, 1-6.	1-9
X	KR 10-2016-0029187 A (SAMSUNG DISPLAY CO., LTD.) 15 March 2016 See claims 1, 2, 7, 8-10; and compounds 1, 15, 61, 79.	1-9
X	KR 10-2015-0130650 A (SAMSUNG DISPLAY CO., LTD.) 24 November 2015 See claims 1, 11, 18; and compounds B-7, B-8.	1-9
PX	KR 10-2016-0136211 A (ROHM AND HAAS ELECTRONIC MATERIALS KOREA LTD.) 29 November 2016 See claims 1-3, 7, 8; paragraphs [0094]-[0096]; and compound C-83.	1-9



Further documents are listed in the continuation of Box C.



See patent family annex.

* Special categories of cited documents:

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

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

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

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

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

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

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

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

"&" document member of the same patent family

Date of the actual completion of the international search

29 MAY 2017 (29.05.2017)

Date of mailing of the international search report

29 MAY 2017 (29.05.2017)

Name and mailing address of the ISA/KR



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

Facsimile No. +82-42-481-8578

Authorized officer

Telephone No.

INTERNATIONAL SEARCH REPORT
Information on patent family members

International application No.

PCT/KR2017/001917

Patent document cited in search report	Publication date	Patent family member	Publication date
KR 10-2015-0034390 A	03/04/2015	CN 105555913 A WO 2015-046955 A1	04/05/2016 02/04/2015
KR 10-2015-0034333 A	03/04/2015	CN 105531349 A WO 2015-046916 A1	27/04/2016 02/04/2015
KR 10-2015-0017605 A	17/02/2015	KR 10-1627743 B1	07/06/2016
KR 10-2016-0029187 A	15/03/2016	US 2016-0072077 A1	10/03/2016
KR 10-2015-0130650 A	24/11/2015	NONE	
KR 10-2016-0136211 A	29/11/2016	KR 10-2016-0136220 A TW 201641501 A	29/11/2016 01/12/2016

A. 발명이 속하는 기술분류(국제특허분류(IPC)) C07D 209/56(2006.01)i, C07D 403/04(2006.01)i, C07D 403/10(2006.01)i, C09K 11/06(2006.01)i, H01L 51/50(2006.01)i, H01L 51/00(2006.01)i		
B. 조사된 분야 조사된 최소문헌(국제특허분류를 기재) C07D 209/56; C07D 251/12; H01L 27/32; C07D 209/82; C09K 11/06; H01L 51/50; C07D 307/91; C07D 403/04; C07D 403/10; H01L 51/00 조사된 기술분야에 속하는 최소문헌 이외의 문헌 한국등록실용신안공보 및 한국공개실용신안공보: 조사된 최소문헌란에 기재된 IPC 일본등록실용신안공보 및 일본공개실용신안공보: 조사된 최소문헌란에 기재된 IPC		
국제조사에 이용된 전산 데이터베이스(데이터베이스의 명칭 및 검색어(해당하는 경우)) eKOMPASS(특허청 내부 검색시스템) & STN(Registry, Caplus) & Google & 키워드: 유기 전계 발광 소자, 인돌로카바졸, 유기물층, 발광효율, 수명		
C. 관련 문헌		
카테고리*	인용문헌명 및 관련 구절(해당하는 경우)의 기재	관련 청구항
X	KR 10-2015-0034390 A (롬엔드하스전자재료코리아유한회사) 2015.04.03 청구항 1, 5, 6; 단락 [0060]-[0062]; 및 화합물 C-94 참조.	1,3,7,8,9
A		2,4-6
X	KR 10-2015-0034333 A (롬엔드하스전자재료코리아유한회사) 2015.04.03 청구항 1, 4, 8; 및 화합물 H-7, H-8 등 참조.	1-9
X	KR 10-2015-0017605 A (제일모직주식회사) 2015.02.17 청구항 1, 2, 4; 및 화합물 1-3, 1-6 참조.	1-9
X	KR 10-2016-0029187 A (삼성디스플레이 주식회사) 2016.03.15 청구항 1, 2, 7, 8-10; 및 화합물 1, 15, 61, 79 참조.	1-9
X	KR 10-2015-0130650 A (삼성디스플레이 주식회사) 2015.11.24 청구항 1, 11, 18; 및 화합물 B-7, B-8 참조.	1-9
PX	KR 10-2016-0136211 A (롬엔드하스전자재료코리아유한회사) 2016.11.29 청구항 1-3, 7, 8; 단락 [0094]-[0096]; 및 화합물 C-83 참조.	1-9
☐ 추가 문헌이 C(계속)에 기재되어 있습니다. ☒ 대응특허에 관한 별지를 참조하십시오.		
* 인용된 문헌의 특별 카테고리: “A” 특별히 관련이 없는 것으로 보이는 일반적인 기술수준을 정의한 문헌 “E” 국제출원일보다 빠른 출원일 또는 우선일을 가지나 국제출원일 이후에 공개된 선출원 또는 특허 문헌 “L” 우선권 주장에 의문을 제기하는 문헌 또는 다른 인용문헌의 공개일 또는 다른 특별한 이유(이유를 명시)를 밝히기 위하여 인용된 문헌 “O” 구두 개시, 사용, 전시 또는 기타 수단을 언급하고 있는 문헌 “P” 우선일 이후에 공개되었으나 국제출원일 이전에 공개된 문헌 “T” 국제출원일 또는 우선일 후에 공개된 문헌으로, 출원과 상충하지 않으며 발명의 기초가 되는 원리나 이론을 이해하기 위해 인용된 문헌 “X” 특별한 관련이 있는 문헌. 해당 문헌 하나만으로 청구된 발명의 신규성 또는 진보성이 없는 것으로 본다. “Y” 특별한 관련이 있는 문헌. 해당 문헌이 하나 이상의 다른 문헌과 조합하는 경우로 그 조합이 당업자에게 자명한 경우 청구된 발명은 진보성이 없는 것으로 본다. “&” 동일한 대응특허문헌에 속하는 문헌		
국제조사의 실제 완료일 2017년 05월 29일 (29.05.2017)		국제조사보고서 발송일 2017년 05월 29일 (29.05.2017)
ISA/KR의 명칭 및 우편주소  대한민국 특허청 (35208) 대전광역시 서구 청사로 189, 4동 (둔산동, 정부대전청사) 팩스 번호 +82-42-481-8578		심사관 조한솔 전화번호 +82-42-481-5580 

국제조사보고서
대응특허에 관한 정보

국제출원번호

PCT/KR2017/001917

국제조사보고서에서 인용된 특허문헌	공개일	대응특허문헌	공개일
KR 10-2015-0034390 A	2015/04/03	CN 105555913 A WO 2015-046955 A1	2016/05/04 2015/04/02
KR 10-2015-0034333 A	2015/04/03	CN 105531349 A WO 2015-046916 A1	2016/04/27 2015/04/02
KR 10-2015-0017605 A	2015/02/17	KR 10-1627743 B1	2016/06/07
KR 10-2016-0029187 A	2016/03/15	US 2016-0072077 A1	2016/03/10
KR 10-2015-0130650 A	2015/11/24	없음	
KR 10-2016-0136211 A	2016/11/29	KR 10-2016-0136220 A TW 201641501 A	2016/11/29 2016/12/01