

(12) 특허협력조약에 의하여 공개된 국제출원

(19) 세계지식재산권기구
국제사무국

(43) 국제공개일
2016 년 6 월 30 일 (30.06.2016)



(10) 국제공개번호
WO 2016/105161 A2

- (51) 국제특허분류:
C07D 403/14 (2006.01) C09K 11/06 (2006.01)
C07D 209/82 (2006.01) H01L 51/50 (2006.01)
- (21) 국제출원번호: PCT/KR2015/014260
- (22) 국제출원일: 2015 년 12 월 24 일 (24.12.2015)
- (25) 출원언어: 한국어
- (26) 공개언어: 한국어
- (30) 우선권정보:
10-2014-0190735 2014 년 12 월 26 일 (26.12.2014) KR
- (71) 출원인: 주식회사 두산 (DOOSAN CORPORATION)
[KR/KR]; 04563 서울시 중구 장충단로 275, Seoul (KR).
- (72) 발명자: 김성무 (KIM, Sung Moo); 16840 경기도 용인시 수지구 풍덕천로 75, 707 동 1302 호, Gyeonggi-do (KR). 한송이 (HAN, Song Ie); 16849 경기도 용인시 수지구 수지로 113 번길 15, 208 동 304 호, Gyeonggi-do (KR). 김재미 (KIM, Jaemee); 16860 경기도 용인시 수지구 심곡로 87, 1040 호, Gyeonggi-do (KR).
- (74) 대리인: 특허법인 정안 (HONESTY & JR PARTNERS INTELLECTUAL PROPERTY LAW GROUP); 135-833 서울시 강남구 선릉로 615 5 층, Seoul (KR).

- (81) 지정국 (별도의 표시가 없는 한, 가능한 모든 종류의 국내 권리의 보호를 위하여): AE, AG, AL, AM, AO, AT, AU, AZ, BA, BB, BG, BH, BN, BR, BW, BY, BZ, CA, CH, CL, CN, CO, CR, CU, CZ, DE, DK, DM, DO, DZ, EC, EE, EG, ES, FI, GB, GD, GE, GH, GM, GT, HN, HR, HU, ID, IL, IN, IR, IS, JP, KE, KG, KN, KP, KZ, LA, LC, LK, LR, LS, LU, LY, MA, MD, ME, MG, MK, MN, MW, MX, MY, MZ, NA, NG, NI, NO, NZ, OM, PA, PE, PG, PH, PL, PT, QA, RO, RS, RU, RW, SA, SC, SD, SE, SG, SK, SL, SM, ST, SV, SY, TH, TJ, TM, TN, TR, TT, TZ, UA, UG, US, UZ, VC, VN, ZA, ZM, ZW.
- (84) 지정국 (별도의 표시가 없는 한, 가능한 모든 종류의 역내 권리의 보호를 위하여): ARIPO (BW, GH, GM, KE, LR, LS, MW, MZ, NA, RW, SD, SL, ST, SZ, TZ, UG, ZM, ZW), 유라시아 (AM, AZ, BY, KG, KZ, RU, TJ, TM), 유럽 (AL, AT, BE, BG, CH, CY, CZ, DE, DK, EE, ES, FI, FR, GB, GR, HR, HU, IE, IS, IT, LT, LU, LV, MC, MK, MT, NL, NO, PL, PT, RO, RS, SE, SI, SK, SM, TR), OAPI (BF, BJ, CF, CG, CI, CM, GA, GN, GQ, GW, KM, ML, MR, NE, SN, TD, TG).

공개:

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

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

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

(57) Abstract: The present invention relates to a novel compound and an organic electroluminescent element comprising same and, more particularly, to a novel carbazole-based compound having excellent thermal stability and phosphorescent properties and an organic electroluminescent element comprising same in one or more organic layers thereof and thus requiring a low driving voltage and having high luminous efficiency and improved lifespan characteristics.

(57) 요약서: 본 발명은 신규 화합물 및 이를 포함하는 유기 전계 발광 소자에 관한 것으로서, 보다 구체적으로는 열적 안정성 및 인광 특성 등이 우수한 신규한 카바졸계 화합물 및 이를 하나 이상의 유기물층에 포함하여 낮은 구동 전압과 높은 발광 효율 및 향상된 수명 특성을 갖는 유기 전계 발광 소자에 관한 것이다.



WO 2016/105161 A2

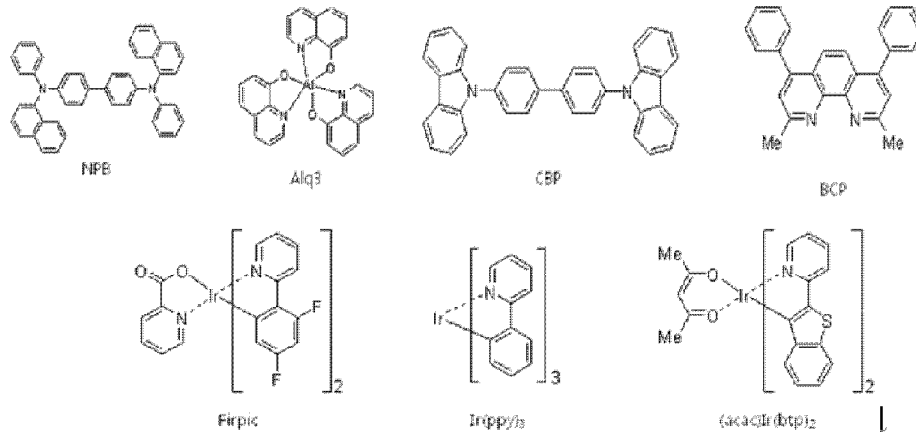
명세서

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

- [1] 본 발명은 신규한 유기 발광 화합물 및 이를 이용한 유기 전계 발광 소자에 관한 것으로, 보다 상세하게는 열적 안정성 및 인광 특성 등이 우수한 신규한 카바졸계 화합물 및 이를 하나 이상의 유기물층에 포함하여 낮은 구동 전압과 높은 발광 효율 및 향상된 수명 특성을 갖는 유기 전계 발광 소자에 관한 것이다.
- ### 배경기술
- [2] 1950년대 베르나소스(Bernanose)의 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 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.
- [3] 유기 EL 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] 유기 EL 소자의 발광층 형성 재료는 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/도펀트 계를 사용할 수 있다.
- [5] 도펀트 물질은 유기 물질을 사용하는 형광 도펀트와 Ir, Pt 등의 중원자(heavy atoms)가 포함된 금속 착체 화합물을 사용하는 인광 도펀트로 나눌 수 있다. 이때, 인광 재료는 이론적으로 형광 재료에 비해 최대 4배의 발광 효율을 향상시킬 수 있기 때문에, 인광 도펀트 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 도펀트/호스트 재료로서 보고되고 있다. 특히, 발광 재료 중 효율 향상 측면에서 큰 장점을 가지고 있는 인광 재료들은 청색(blue), 녹색(green), 적색(red) 도펀트 재료로서 Firpic, Ir(ppy)₃, (acac)Ir(btp)₂ 등의 Ir을 포함하는 금속 착체 화합물이 사용되고 있다. 현재까지는 4,4-디카바졸리비페닐(4,4-dicarbazolybiphenyl,

CBP)가 인광 호스트 재료로서 우수한 특성을 나타내고 있다.

[7]



[8] 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

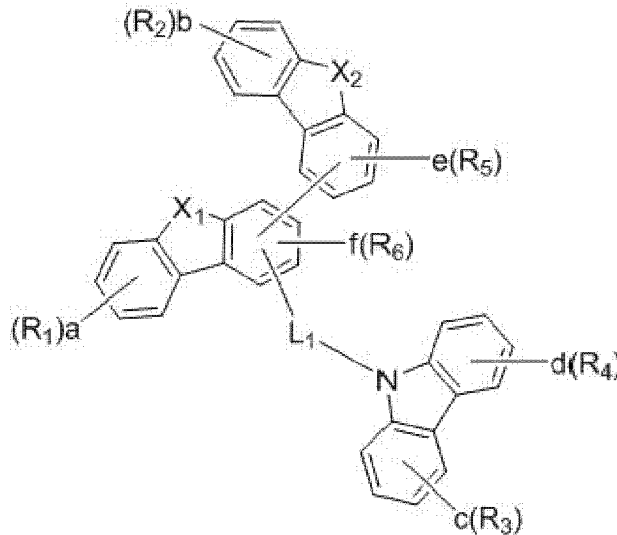
기술적 과제

- [9] 본 발명은 높은 유리 전이온도를 가지고, 열적 안정성이 우수하면서, 정공과 전자와의 결합력을 향상시킬 수 있는 신규 유기 화합물을 제공하는 것을 목적으로 한다.
- [10] 또한, 본 발명은 상기 신규 유기 화합물을 포함하여 낮은 구동 전압, 높은 발광 효율을 나타내며 수명 특성 등이 향상된 유기 전계 발광 소자를 제공하는 것을 목적으로 한다.

과제 해결 수단

- [11] 상기 목적을 달성하기 위하여, 본 발명은 하기 화학식 1로 표시되는 화합물을 제공한다:
- [12] [화학식 1]

[13]



[14] 상기 화학식 1에서,

[15] X_1 및 X_2 는 각각 독립적으로 O, S, Se, N(Ar_1), C(Ar_2)(Ar_3) 및 Si(Ar_4)(Ar_5)로 구성된 군으로부터 선택되며, X_1 및 X_2 중 적어도 하나는 N(Ar_1)이며;[16] L_1 은 단일결합, $C_6 \sim C_{40}$ 의 아릴렌기 및 핵원자수 5 내지 40개의 헤테로아릴렌기로 구성된 군에서 선택되며;

[17] a, b, c 및 d는 각각 독립적으로 0 내지 4의 정수이고;

[18] e는 0 내지 3의 정수이며;

[19] f는 0 내지 2의 정수이며;

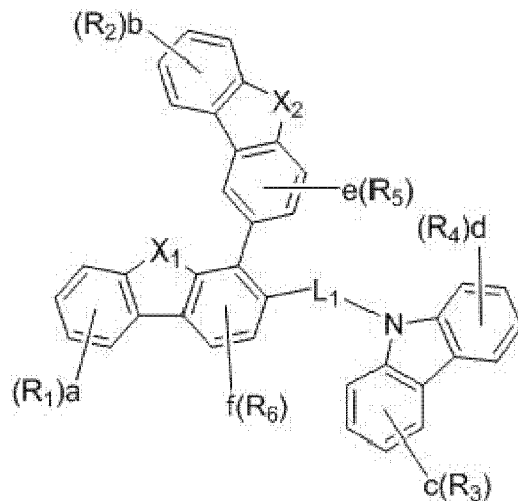
[20] Ar_1 내지 Ar_5 는 각각 독립적으로 수소, 중수소(D), 할로젠, 시아노, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_2 \sim C_{40}$ 의 알케닐기, $C_2 \sim C_{40}$ 의 알키닐기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 40개의 헤테로아릴기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴옥시기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬옥시기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴아민기, $C_3 \sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬실릴기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬보론기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴보론기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬포스핀기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬포스피닐기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴포스핀기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 모노 또는 디아릴포스피닐기, 및 $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택되거나, 인접하는 기와 결합하여 축합 고리를 형성할 수 있고, 상기 Ar_1 내지 Ar_5 각각이 복수 개인 경우 이들은 서로 동일하거나 상이하며;[21] R_1 내지 R_6 는 각각 독립적으로 중수소(D), 할로젠, 시아노, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_2 \sim C_{40}$ 의 알케닐기, $C_2 \sim C_{40}$ 의 알키닐기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 40개의 헤테로아릴기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴옥시기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬옥시기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴아민기, $C_3 \sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬실릴기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬보론기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴보론기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬포스핀기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬포스피닐기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴포스핀기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 모노 또는 디아릴포스피닐기, 및 $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택되거나, 인접하는 기와 결합하여 축합 고리를 형성할 수 있으며, 상기 R_1 내지 R_6 각각이

복수 개인 경우 이들은 서로 동일하거나 상이하며;

- [22] 상기 L_1 의 아릴렌기 및 헤테로아릴렌기와 Ar_1 내지 Ar_5 및 R_1 내지 R_6 의 알킬기, 알케닐기, 알키닐기, 아릴기, 헤테로아릴기, 아릴옥시기, 알킬옥시기, 아릴아민기, 시클로알킬기, 헤테로시클로알킬기, 알킬실릴기, 알킬보론기, 아릴보론기, 알킬포스핀기, 알킬포스피닐기, 아릴포스핀기, 모노 또는 디아릴포스피닐기 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, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 40개의 헤테로아릴기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴옥시기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬옥시기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴아민기, $C_3 \sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬실릴기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬보론기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴보론기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬포스핀기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬포스피닐기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴포스핀기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴실릴기로 이루어진 군으로부터 선택되는 하나 이상의 치환기로 치환되거나 비치환되고, 복수 개의 치환기로 치환되는 경우, 이들 서로 동일하거나 상이할 수 있다.
- [23] 본 발명의 바람직한 한 구현 예에 따르면, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 하기 화학식 2 내지 화학식 7 중 어느 하나로 표시되는 것일 수 있다:

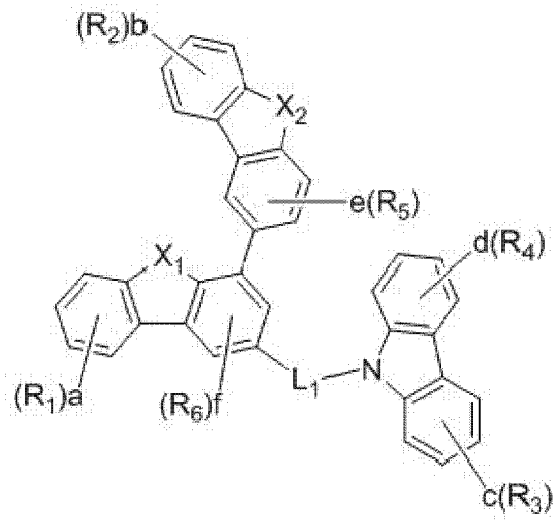
[24] [화학식 2]

[25]



[26] [화학식 3]

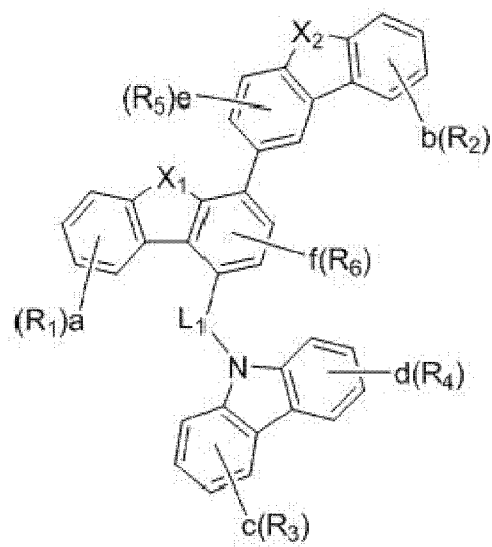
[27]



[28]

[화학식 4]

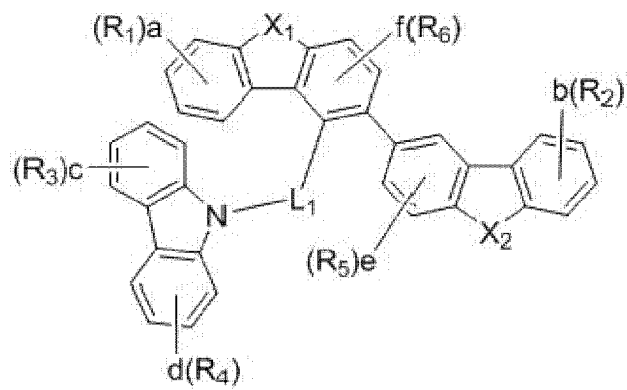
[29]



[30]

[화학식 5]

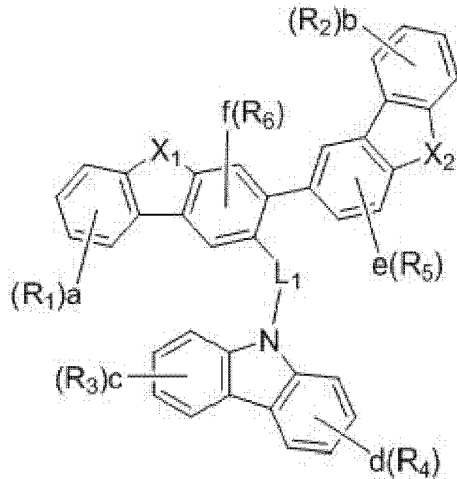
[31]



[32]

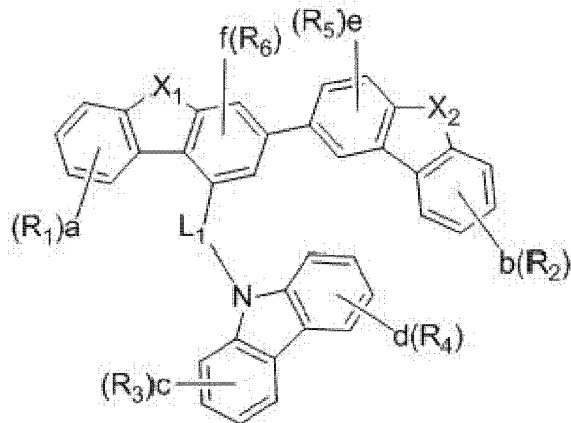
[화학식 6]

[33]



[34] [화학식 7]

[35]



[36] 상기 화학식 2 내지 화학식 7에서,

[37] L_1 , X_1 내지 X_2 , R_1 내지 R_6 , Ar_1 내지 Ar_5 , a, b, c, d, e 및 f 각각은 상기 화학식 1에서 정의된 바와 같다.[38] 본 발명의 바람직한 한 구현 예에 따르면, 상기 화학식 1에서 X_1 및 X_2 는 모두 $N(Ar_1)$ 이며, 복수 개의 Ar_1 은 서로 동일하거나 상이할 수 있다.[39] 본 발명의 바람직한 한 구현 예에 따르면, 상기 화학식 1에서 L_1 은 단일결합, 페닐렌기 또는 비페닐렌기일 수 있다.[40] 본 발명의 바람직한 한 구현 예에 따르면, 상기 화학식 1에서 Ar_1 내지 Ar_5 는 각각 독립적으로, 수소, 중수소(D), $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 40개의 헤테로아릴기로 이루어진 군에서 선택되고, R_5 및 R_6 는 모두 수소일 수 있다.[41] 본 발명의 바람직한 한 구현 예에 따르면, 상기 화학식 1에서 R_1 내지 R_4 는 각각 독립적으로 중수소(D), $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 40개의 헤테로아릴기로 이루어진 군에서 선택될 수 있다.

[42] 본 발명의 바람직한 한 구현 예에 따르면, e 및 f는 모두 0일 수 있다.

[43] 본 발명의 바람직한 한 구현 예에 따르면, 상기 화학식 1에서 Ar_1 내지 Ar_5 및 R_1 내지 R_4 중 적어도 하나는 하기 화학식 8로 표시되는 치환기일 수 있다:

[44] [화학식 8]

[45]



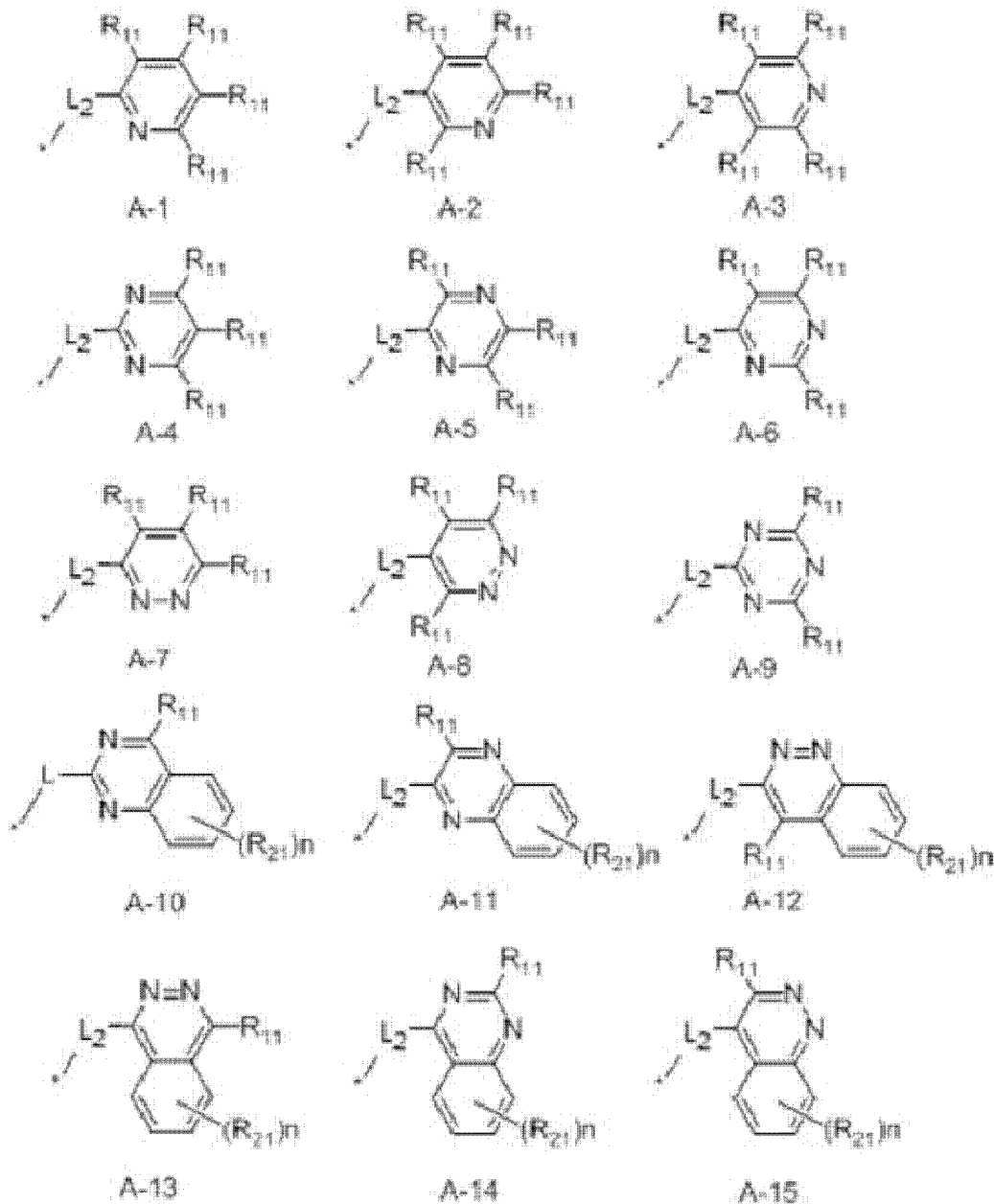
[46] 상기 화학식 8에서,

[47] *는 상기 화학식 1에 결합되는 부분을 의미하고;

[48] L_2 는 단일결합, $C_6 \sim C_{40}$ 의 아릴렌기 및 핵원자수 5 내지 40개의 헤테로아릴렌기로 이루어진 군에서 선택되며;[49] Z_1 내지 Z_5 는 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 N 또는 $C(R_{11})$ 이 되, 상기 Z_1 내지 Z_5 중 적어도 하나는 N이고;[50] 상기 R_{11} 이 복수 개인 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이하며, 상기 R_{11} 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, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 40개의 헤테로아릴기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴옥시기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬옥시기, $C_3 \sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴아민기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬실릴기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬보론기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴보론기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴포스핀기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택되거나, 인접하는 기와 결합하여 축합 고리를 형성할 수 있으며;[51] 상기 R_{11} 의 알킬기, 알케닐기, 알키닐기, 아릴기, 헤테로아릴기, 아릴옥시기, 알킬옥시기, 시클로알킬기, 헤테로시클로알킬기, 아릴아민기, 알킬실릴기, 알킬보론기, 아릴보론기, 아릴포스핀기, 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 아릴실릴기는 각각 독립적으로 중수소, 할로젠, 시아노기, 니트로기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_2 \sim C_{40}$ 의 알케닐기, $C_2 \sim C_{40}$ 의 알키닐기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 40개의 헤테로아릴기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴옥시기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬옥시기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴아민기, $C_3 \sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬실릴기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬보론기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴보론기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴포스핀기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상의 치환기로 치환되거나 비치환되고, 복수 개의 치환기로 치환되는 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

[52] 본 발명의 바람직한 한 구현 예에 따르면, 상기 화학식 8로 표시되는 치환기는 하기 화학식 A-1 내지 화학식 A-15 중 어느 하나로 표시되는 치환기일 수 있다:

[53]



[54] 상기 화학식 A-1 내지 A-15에서,

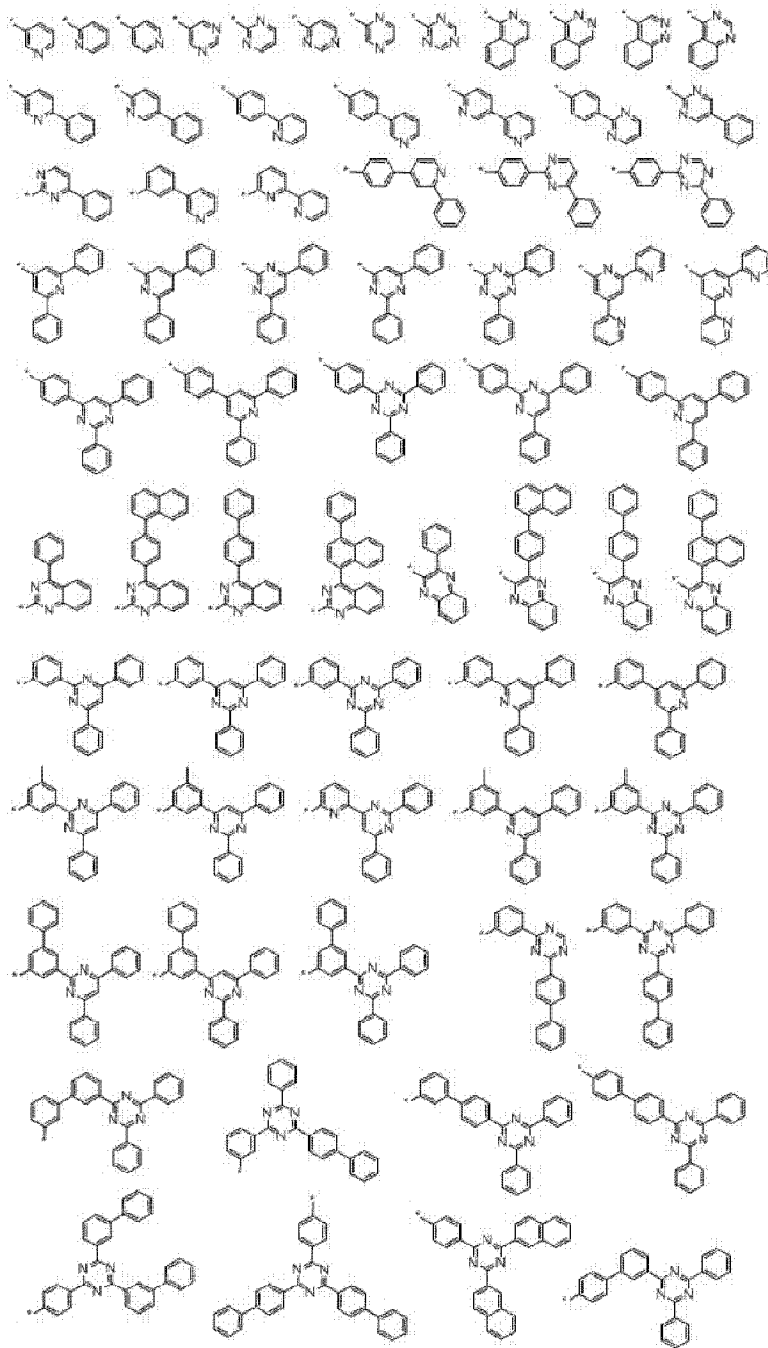
[55] *는 결합이 이루어지는 부분을 의미하고;

[56] n 은 0 내지 4의 정수로서, 상기 n 이 0인 경우, 수소가 치환기 R_{21} 로 치환되지 않는 것을 의미하고, 상기 n 이 1 내지 4의 정수인 경우, R_{21} 은 중수소, 할로젠, 시아노기, 니트로기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_2 \sim C_{40}$ 의 알케닐기, $C_2 \sim C_{40}$ 의 알키닐기, $C_3 \sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 40개의 헤테로아릴기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴옥시기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬옥시기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴아민기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬실릴기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬보론기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴보론기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴포스핀기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택되거나, 인접하는 기와 결합하여 축합 고리를 형성할 수 있으며, 상기 R_{21} 이 복수 개인

경우 이들은 서로 동일하거나 상이하며;

- [57] 상기 R_{21} 의 알킬기, 알케닐기, 알키닐기, 시클로알킬기, 헤테로시클로알킬기, 아릴기, 헤테로아릴기, 아릴옥시기, 알킬옥시기, 아릴아민기, 알킬실릴기, 알킬보론기, 아릴보론기, 아릴포스핀기, 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 아릴실릴기는 각각 독립적으로 중수소, 할로젠, 시아노기, 니트로기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_2 \sim C_{40}$ 의 알케닐기, $C_2 \sim C_{40}$ 의 알키닐기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 40개의 헤테로아릴기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴옥시기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬옥시기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴아민기, $C_3 \sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬실릴기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬보론기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴보론기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴포스핀기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상의 치환기로 치환되거나 비치환되고, 복수 개의 치환기로 치환되는 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이하며;
- [58] L_2 및 R_{11} 은 각각 상기 화학식 8에서 정의된 바와 같다.
- [59] 본 발명의 바람직한 한 구현 예에 따르면, 상기 화학식 A-1 내지 A-5 중 어느 하나로 표시되는 치환기는 아래의 치환기로 이루어진 군에서 선택되는 것을 특징으로 한다:

[60]



[61] 상기 치환기에서, *는 결합이 이루어지는 부분을 의미한다.

[62] 또한, 본 발명은 (i) 양극, (ii) 음극 및 (iii) 상기 양극과 음극 사이에 개재(介在)된 1층 이상의 유기물층을 포함하며, 상기 1층 이상의 유기물층 중에서 적어도 하나는 상기 화학식 1의 화합물을 포함하는 것이 특징인 유기 전계 발광 소자를 제공한다.

[63] 본 발명의 바람직한 한 구현 예에 따르면, 상기 화학식 1의 화합물을 포함하는 1층 이상의 유기물층 중 적어도 하나는 정공 주입층, 정공 수송층, 전자수송층, 전자주입층 및 발광층으로 구성된 군으로부터 선택될 수 있으며, 바람직하게는 발광층일 수 있고, 보다 바람직하게는 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은

발광층의 녹색 또는 적색의 인광 호스트로 사용될 수 있다.

- [64] 본 발명에서 "알킬"은 탄소수 1 내지 40개의 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.
- [65] 본 발명에서 "알케닐(alkenyl)"은 탄소-탄소 이중 결합을 1개 이상 가진 탄소수 2 내지 40개의 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.
- [66] 본 발명에서 "알키닐(alkynyl)"은 탄소-탄소 삼중 결합을 1개 이상 가진 탄소수 2 내지 40개의 직쇄 또는 측쇄의 불포화 탄화수소에서 유래되는 1가의 치환기를 의미한다. 이의 예로는 에티닐(ethynyl), 2-프로파닐(2-propynyl) 등을 들 수 있으나, 이에 한정되지는 않는다.
- [67] 본 발명에서 "아릴"은 단독 고리 또는 2이상의 고리가 조합된 탄소수 6 내지 60개의 방향족 탄화수소로부터 유래된 1가의 치환기를 의미한다. 또한, 2 이상의 고리가 서로 단순 부착(pendant)되거나 축합된 형태도 포함될 수 있다. 이러한 아릴의 예로는 페닐, 나프틸, 페난트릴, 안트릴 등을 들 수 있으나, 이에 한정되지는 않는다.
- [68] 본 발명에서 "헤테로아릴"은 핵원자수 5 내지 40개의 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(phenoxathienyl), 인돌리지닐(indoliziny), 인돌릴(indolyl), 퓨리닐(puriny), 퀴놀릴(quinolyl), 벤조티아졸(benzothiazole), 카바졸릴(carbazolyl)과 같은 폴리사이클릭 고리 및 2-퓨라닐, N-이미다졸릴, 2-이속사졸릴, 2-피리디닐, 2-피리미디닐 등을 들 수 있으나, 이에 한정되지는 않는다.
- [69] 본 발명에서 "아릴옥시"는 RO-로 표시되는 1가의 치환기로, 상기 R은 탄소수 6 내지 60개의 아릴을 의미한다. 이러한 아릴옥시의 예로는 페닐옥시, 나프틸옥시, 디페닐옥시 등을 들 수 있으나, 이에 한정되지는 않는다.
- [70] 본 발명에서 "알킬옥시"는 R'O-로 표시되는 1가의 치환기로, 상기 R'은 탄소수 1 내지 40개의 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.

- [71] 본 발명에서 "아릴아민"은 탄소수 6 내지 60개의 아릴로 치환된 아민을 의미한다.
- [72] 본 발명에서 "사이클로알킬"은 탄소수 3 내지 40개의 모노사이클릭 또는 폴리사이클릭 비-방향족 탄화수소로부터 유래된 1개의 치환기를 의미한다. 이러한 사이클로알킬의 예로는 사이클로프로필, 사이클로펜틸, 사이클로헥실, 노르보닐(norbornyl), 아다만틴(adamantine) 등을 들 수 있으나, 이에 한정되지는 않는다.
- [73] 본 발명에서 "헤테로사이클로알킬"은 핵원자수 3 내지 40개의 비-방향족 탄화수소로부터 유래된 1개의 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.
- [74] 본 발명에서 "알킬실릴"은 탄소수 1 내지 40개의 알킬로 치환된 실릴이고, "아릴실릴"은 탄소수 6 내지 60개의 아릴로 치환된 실릴을 의미한다.
- [75] 본 발명에서 "축합고리"는 축합 지방족 고리, 축합 방향족 고리, 축합 헤테로지방족 고리, 축합 헤테로방향족 고리 또는 이들의 조합된 형태를 의미한다.

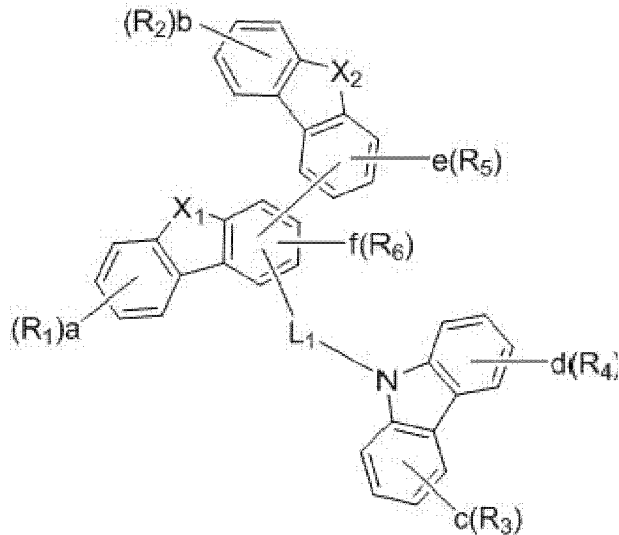
발명의 효과

- [76] 본 발명에 따른 화학식 1로 표시되는 화합물은 열적 안정성 및 인광 특성이 우수하기 때문에, 유기 전계 발광 소자의 유기물층의 재료로 사용될 수 있다.
- [77] 특히, 본 발명에 따른 화학식 1로 표시되는 화합물을 인광 호스트 재료로 사용할 경우, 종래 호스트 재료에 비해 우수한 발광 성능, 낮은 구동 전압, 높은 효율 및 장수명을 갖는 유기 전계 발광 소자를 제조할 수 있도록 하며, 나아가 성능, 수명이 크게 향상된 풀 칼라 디스플레이 패널도 제조할 수 있도록 한다.

발명의 실시를 위한 최선의 형태

- [78] 본 발명은 하기 화학식 1로 표시되는 화합물을 제공한다:
- [79] [화학식 1]

[80]



[81] 상기 화학식 1에서,

[82] X_1 및 X_2 는 각각 독립적으로 O, S, Se, N(Ar_1), C(Ar_2)(Ar_3) 및 Si(Ar_4)(Ar_5)로 구성된 군으로부터 선택되며, X_1 및 X_2 중 적어도 하나는 N(Ar_1)이며;[83] L_1 은 단일결합, $C_6 \sim C_{40}$ 의 아릴렌기 및 핵원자수 5 내지 40개의 헤테로아릴렌기로 구성된 군에서 선택되며;

[84] a, b, c 및 d는 각각 독립적으로 0 내지 4의 정수이고;

[85] e는 0 내지 3의 정수이며;

[86] f는 0 내지 2의 정수이며;

[87] Ar_1 내지 Ar_5 는 각각 독립적으로 수소, 중수소(D), 할로젠, 시아노, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_2 \sim C_{40}$ 의 알케닐기, $C_2 \sim C_{40}$ 의 알키닐기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 40개의 헤테로아릴기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴옥시기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬옥시기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴아민기, $C_3 \sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬실릴기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬보론기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴보론기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬포스핀기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬포스피닐기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴포스핀기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 모노 또는 디아릴포스피닐기, 및 $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택되거나, 인접하는 기와 결합하여 축합 고리를 형성할 수 있고, 상기 Ar_1 내지 Ar_5 각각이 복수 개인 경우 이들은 서로 동일하거나 상이하며;[88] R_1 내지 R_6 는 각각 독립적으로 중수소(D), 할로젠, 시아노, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_2 \sim C_{40}$ 의 알케닐기, $C_2 \sim C_{40}$ 의 알키닐기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 40개의 헤테로아릴기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴옥시기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬옥시기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴아민기, $C_3 \sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬실릴기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬보론기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴보론기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬포스핀기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬포스피닐기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴포스핀기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 모노 또는 디아릴포스피닐기, 및 $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택되거나, 인접하는 기와 결합하여 축합 고리를 형성할 수 있으며, 상기 R_1 내지 R_6 각각이

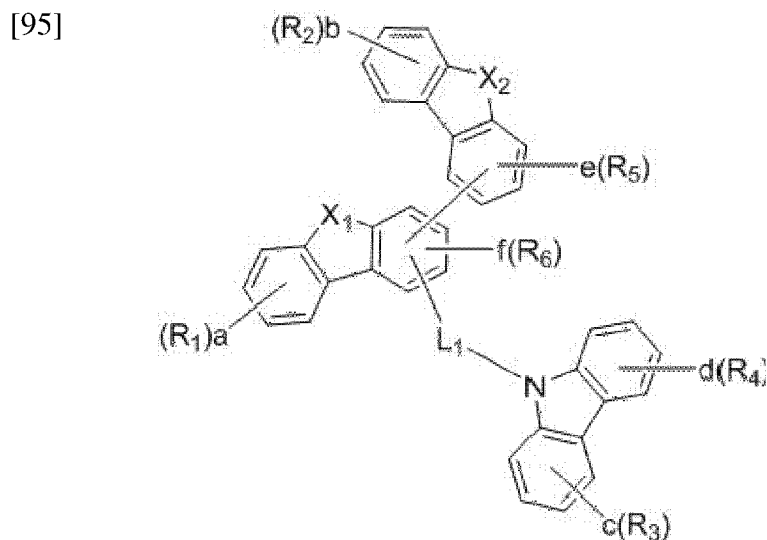
복수 개인 경우 이들은 서로 동일하거나 상이하며;

- [89] 상기 L_1 의 아릴렌기 및 헤테로아릴렌기와 Ar_1 내지 Ar_5 및 R_1 내지 R_6 의 알킬기, 알케닐기, 알키닐기, 아릴기, 헤테로아릴기, 아릴옥시기, 알킬옥시기, 아릴아민기, 시클로알킬기, 헤테로시클로알킬기, 알킬실릴기, 알킬보론기, 아릴보론기, 알킬포스핀기, 알킬포스피닐기, 아릴포스핀기, 모노 또는 디아릴포스피닐기 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, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 40개의 헤테로아릴기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴옥시기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬옥시기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴아민기, $C_3 \sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬실릴기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬보론기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴보론기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬포스핀기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬포스피닐기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴포스핀기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴실릴기로 이루어진 군으로부터 선택되는 하나 이상의 치환기로 치환되거나 비치환되고, 복수 개의 치환기로 치환되는 경우, 이들 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

발명의 실시를 위한 형태

- [90] 이하, 본 발명을 상세히 설명한다.
- [91] **1. 신규 유기 화합물**
- [92] 본 발명은 열적 안정성 및 인광 특성 등이 우수한 신규한 카바졸계 화합물에 관한 것으로, 보다 상세하게는 적어도 2 이상의 카바졸(carbazole) 모이어티를 포함하고, 디벤조모이어티가 결합하여 기본 골격을 이루며, 이러한 기본 골격에 다양한 치환기가 결합된 구조를 갖는 화합물을 제공한다. 단, 이때 이들의 결합 위치는 특별히 제한되지 않는다.
- [93] 구체적으로, 본 발명에서 제공하는 신규 유기 화합물은 하기 화학식 1로 표시되는 것을 특징으로 한다:

- [94] [화학식 1]



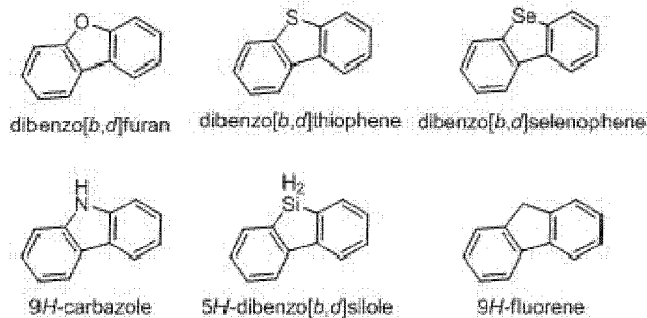
- [96] 상기 화학식 1에서,

- [97] X_1 및 X_2 는 각각 독립적으로 O, S, Se, N(Ar₁), C(Ar₂)(Ar₃) 및 Si(Ar₄)(Ar₅)로 구성된 군으로부터 선택되며, X_1 및 X_2 중 적어도 하나는 N(Ar₁)이며, 바람직하게는 X_1 및 X_2 는 모두 N(Ar₁)이고, 복수 개의 Ar₁은 서로 동일하거나 상이하며;
- [98] L_1 은 당 업계에 알려진 2가(divalent) 그룹의 연결기(linker)로서, 단일결합, C₆~C₄₀의 아릴렌기 및 핵원자수 5 내지 40개의 헤테로아릴렌기로 구성된 군에서 선택되고, 바람직하게는 페닐렌기, 비페닐렌기, 나프틸렌기, 안트라세닐렌기, 인데닐렌기, 피란트레닐렌기, 카바졸릴렌기, 티오펜릴렌기, 인돌릴렌기, 푸리닐렌기, 퀴놀리닐렌기, 피롤릴렌기, 이미다졸릴렌기, 옥사졸릴렌기, 티아졸릴렌기, 트리아졸릴렌기, 피리디닐렌기 및 피리미디닐렌기로 이루어진 군에서 선택되며, 보다 바람직하게는 단일결합, 페닐렌기 또는 비페닐렌기이고;
- [99] a, b, c 및 d는 각각 독립적으로 0 내지 4의 정수이고;
- [100] e는 0 내지 3의 정수이고, f는 0 내지 2의 정수이며, 바람직하게는 상기 e 및 f 모두 0이고;
- [101] Ar₁ 내지 Ar₅는 각각 독립적으로 수소, 중수소(D), 할로젠, 시아노, C₁~C₄₀의 알킬기, C₂~C₄₀의 알케닐기, C₂~C₄₀의 알키닐기, C₆~C₆₀의 아릴기, 핵원자수 5 내지 40개의 헤테로아릴기, C₆~C₆₀의 아릴옥시기, C₁~C₄₀의 알킬옥시기, C₆~C₆₀의 아릴아민기, C₃~C₄₀의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, C₁~C₄₀의 알킬실릴기, C₁~C₄₀의 알킬보론기, C₆~C₆₀의 아릴보론기, C₁~C₄₀의 알킬포스핀기, C₁~C₄₀의 알킬포스피닐기, C₆~C₆₀의 아릴포스핀기, C₆~C₆₀의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 C₆~C₆₀의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택되거나, 인접하는 기와 결합하여 축합 고리를 형성할 수 있고, 상기 Ar₁ 내지 Ar₅ 각각이 복수 개인 경우 이들은 서로 동일하거나 상이하며, 바람직하게는 Ar₁ 내지 Ar₅는 각각 독립적으로, 수소, 중수소(D), C₆~C₆₀의 아릴기, 핵원자수 5 내지 40개의 헤테로아릴기로 이루어진 군에서 선택되며;
- [102] R₁ 내지 R₆는 각각 독립적으로 중수소(D), 할로젠, 시아노, C₁~C₄₀의 알킬기, C₂~C₄₀의 알케닐기, C₂~C₄₀의 알키닐기, C₆~C₆₀의 아릴기, 핵원자수 5 내지 40개의 헤테로아릴기, C₆~C₆₀의 아릴옥시기, C₁~C₄₀의 알킬옥시기, C₆~C₆₀의 아릴아민기, C₃~C₄₀의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, C₁~C₄₀의 알킬실릴기, C₁~C₄₀의 알킬보론기, C₆~C₆₀의 아릴보론기, C₁~C₄₀의 알킬포스핀기, C₁~C₄₀의 알킬포스피닐기, C₆~C₆₀의 아릴포스핀기, C₆~C₆₀의 모노 또는 디아릴포스피닐기, 및 C₆~C₆₀의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택되거나, 인접하는 기와 결합하여 축합 고리를 형성할 수 있으며, 상기 R₁ 내지 R₆ 각각이 복수 개인 경우 이들은 서로 동일하거나 상이하고, 바람직하게는 R₁ 내지 R₆는 각각 독립적으로 중수소(D), C₆~C₆₀의 아릴기, 핵원자수 5 내지 40개의 헤테로아릴기로 이루어진 군에서 선택되며;
- [103] 상기 L₁의 아릴렌기 및 헤테로아릴렌기와 Ar₁ 내지 Ar₅ 및 R₁ 내지 R₆의 알킬기, 알케닐기, 알키닐기, 아릴기, 헤테로아릴기, 아릴옥시기, 알킬옥시기,

아릴아민기, 시클로알킬기, 헤테로시클로알킬기, 알킬실릴기, 알킬보론기, 아릴보론기, 알킬포스핀기, 알킬포스피닐기, 아릴포스핀기, 모노 또는 디아릴포스피닐기 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, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 40개의 헤테로아릴기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴옥시기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬옥시기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴아민기, $C_3\sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬실릴기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬보론기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴보론기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬포스핀기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬포스피닐기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴포스핀기, $C_6\sim C_{60}$ 의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴실릴기로 이루어진 군으로부터 선택되는 하나 이상의 치환기로 치환되거나 비치환되고, 복수 개의 치환기로 치환되는 경우, 이들 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

[104] 본 발명의 화학식 1로 표시되는 화합물에서 포함될 수 있는 디벤조모이어티는 하기 구조 중에서 선택될 수 있다.

[105]



[106] 한편, 카바졸(carbazole) 모이어티의 경우 유기 전계 발광 소자용 재료, 특히 인광 호스트 재료로서 다양하게 사용된다. 카바졸 모이어티는 삼중항 에너지가 3.0 eV로 크고, HOMO 에너지 레벨이 6.0 eV로 낮아 주로 청색 인광 호스트에 사용된다. 따라서, 카바졸(carbazole) 모이어티의 한쪽 벤젠 고리에 2개의 상기 디벤조 모이어티가 결합된 본 발명의 화학식 1로 나타나는 화합물의 경우 삼중항 에너지가 3.0 eV 보다 작고, HOMO 에너지 레벨이 상승하여 에너지 밴드 갭이 청색/녹색/적색 인광 호스트에 적합하게 된다.

[107] 또한, 본 발명의 상기 화학식 1로 표시되는 화합물에서는 카바졸(carbazole) 모이어티의 한쪽 벤젠고리에 카바졸(carbazole) 모이어티와 상기 디벤조 모이어티 중 하나가 결합하여 입체 장애(steric hinderance)를 일으킨다. 따라서 화합물 분자가 뒤틀리게 되어 파이파이-스태킹 ($\pi\text{-}\pi\text{-stacking}$)으로 인한 발광 특성 저하 문제를 해결하고, 그로 인해 여기 이합체(엑사이머, excimer) 형성을 막음으로써 발광 효율이 개선되는 효과를 누리게 된다.

[108] 또한, 본 발명의 상기 화학식 1로 표시되는 화합물에서, 카바졸 모이어티는 전자 공여성이 큰 전자주는기(electron donating group, EDG)의 특성을 가진다. 카바졸(carbazole) 모이어티의 9번 위치에 전자끄는기(EWG)가 치환기로 도입될 경우, 본 발명의 화합물은 전자 흡수성이 큰 전자끄는기(electron withdrawing

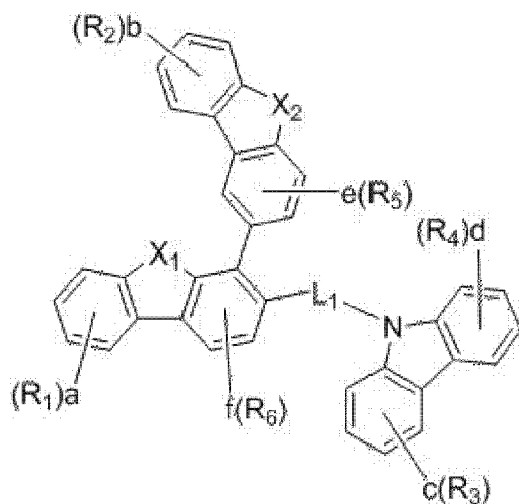
group, EWG)와 전자 공여성이 큰 전자주기기(electron donating group, EDG)를 모두 포함하여 분자 전체가 양극성(bipolar)을 가지게 된다. 본 발명의 화학식 1로 표시되는 양극성(bipolar) 화합물은 정공과 전자의 결합력을 높일 수 있기 때문에 인광 발광층에서 호스트로서 유리할 뿐만 아니라, 정공 수송층, 정공 주입층 및 전자수송층 등으로도 응용될 수 있다.

[109] 한편, 본 발명의 화학식 1로 표시되는 화합물은 분자 내 도입된 치환기로 인해 화합물의 분자량이 유의적으로 증대되어 유리전이온도가 향상됨에 따라 종래의 CBP(4,4-dicarbazolybiphenyl) 보다 높은 열적 안정성을 나타낸다. 또한, 본 발명의 화학식 1로 표시되는 화합물은 유기물층의 결정화 억제에도 효과가 있다.

[110] 본 발명의 바람직한 한 구현 예에 따르면, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 하기 화학식 2 내지 화학식 7 중 어느 하나로 표시되는 화합물일 수 있다:

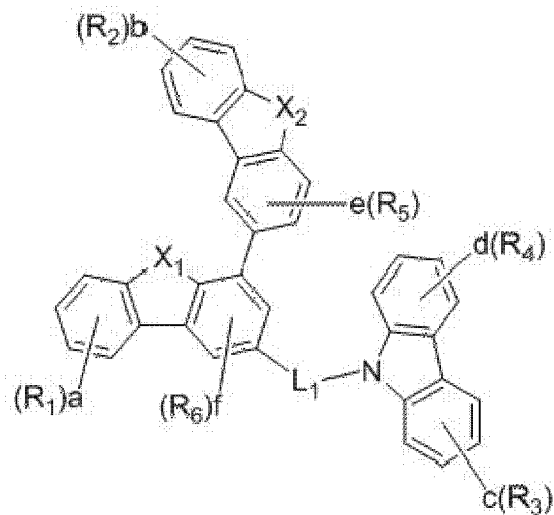
[111] [화학식 2]

[112]



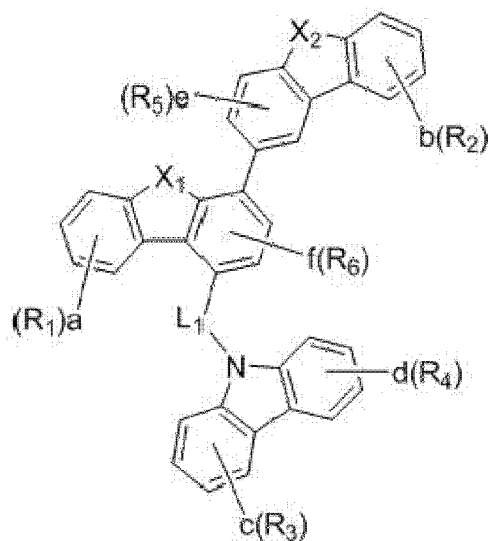
[113] [화학식 3]

[114]



[115] [화학식 4]

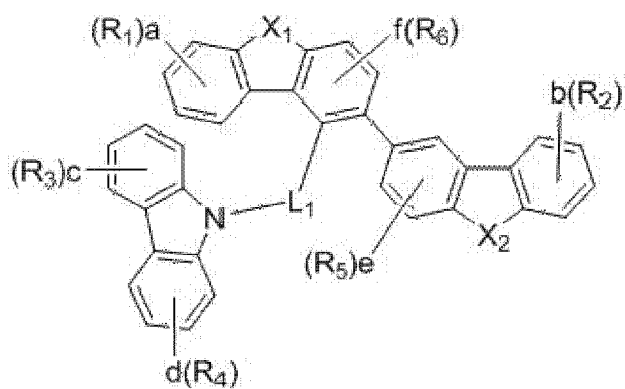
[116]



[117]

[화학식 5]

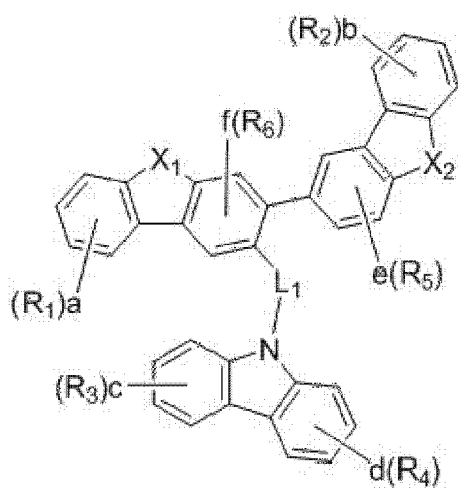
[118]



[119]

[화학식 6]

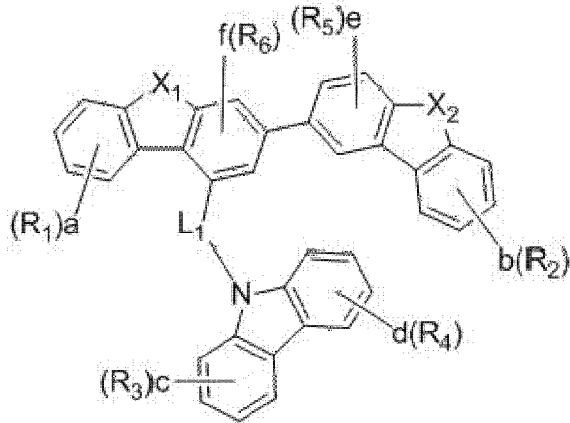
[120]



[121]

[화학식 7]

[122]



[123] 상기 화학식 2 내지 화학식 7에서,

[124] L_1 , X_1 내지 X_2 , R_1 내지 R_6 , Ar_1 내지 Ar_5 , a , b , c , d , e 및 f 각각은 상기 화학식 1에서 정의된 바와 같다.[125] 본 발명의 바람직한 한 구현 예에 따르면, 상기 화학식 1에서 Ar_1 내지 Ar_5 및 R_1 내지 R_4 중 적어도 하나는 하기 화학식 8로 표시되는 치환기일 수 있다.

[126] [화학식 8]

[127]



[128] 상기 화학식 8에서,

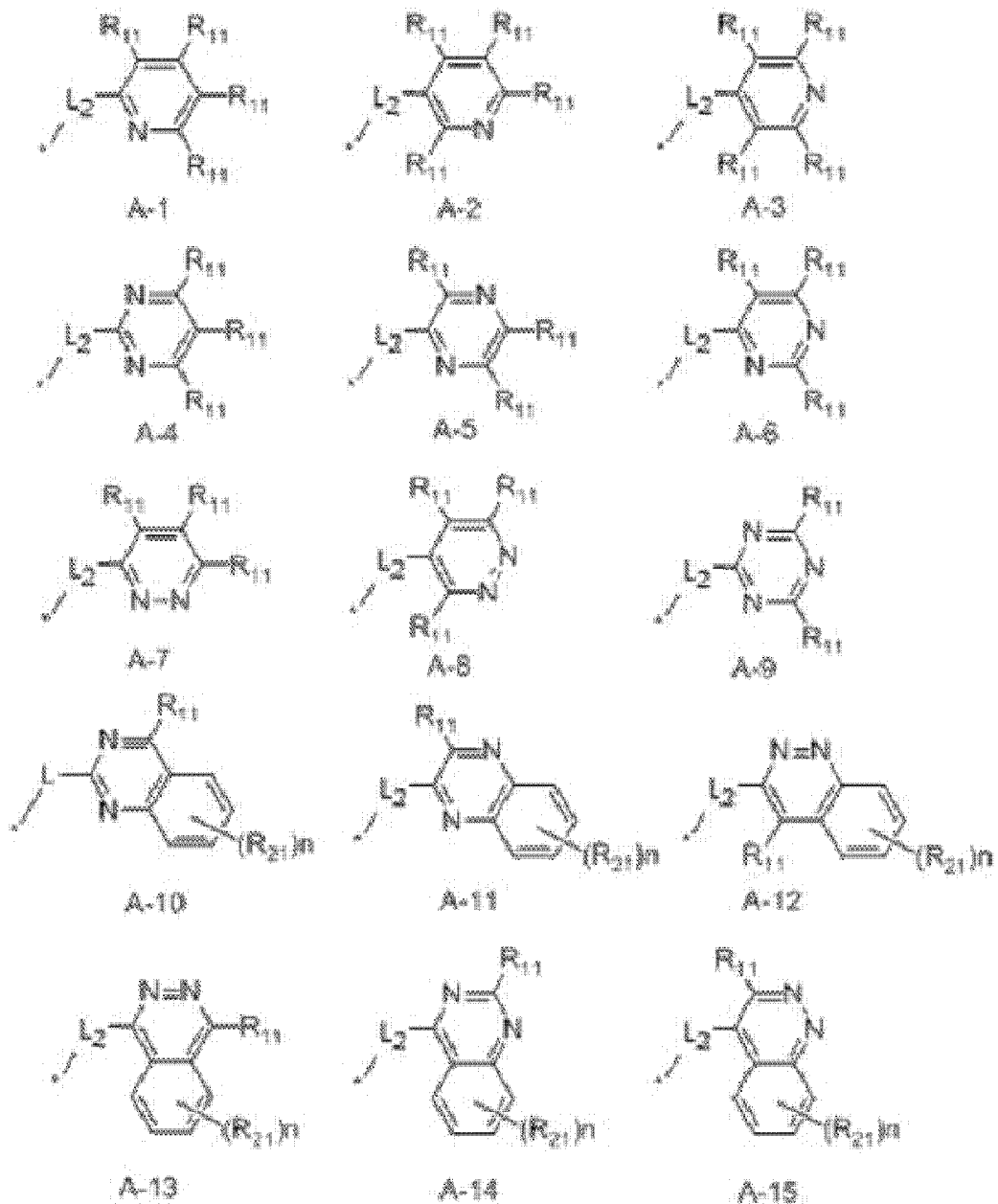
[129] *는 상기 화학식 1에 결합되는 부분을 의미하고;

[130] L_2 는 단일결합, $C_6 \sim C_{40}$ 의 아릴렌기 및 핵원자수 5 내지 40개의 헤테로아릴렌기로 이루어진 군에서 선택되며;[131] Z_1 내지 Z_5 는 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 N 또는 $C(R_{11})$ 이 되, 상기 Z_1 내지 Z_5 중 적어도 하나는 N이고;[132] 상기 R_{11} 이 복수 개인 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이하며, R_{11} 은 중수소, 할로젠, 시아노기, 니트로기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_2 \sim C_{40}$ 의 알케닐기, $C_2 \sim C_{40}$ 의 알키닐기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 40개의 헤테로아릴기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴옥시기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬옥시기, $C_3 \sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴아민기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬실릴기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬보론기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴보론기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴포스핀기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택되거나, 인접하는 기와 결합하여 축합 고리를 형성할 수 있으며;[133] 상기 R_{11} 의 알킬기, 알케닐기, 알키닐기, 아릴기, 헤테로아릴기, 아릴옥시기, 알킬옥시기, 시클로알킬기, 헤테로시클로알킬기, 아릴아민기, 알킬실릴기, 알킬보론기, 아릴보론기, 아릴포스핀기, 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 아릴실릴기는 각각 독립적으로 중수소, 할로젠, 시아노기, 니트로기, $C_1 \sim C_{40}$ 의

알킬기, $C_2 \sim C_{40}$ 의 알케닐기, $C_2 \sim C_{40}$ 의 알키닐기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 40개의 헤테로아릴기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴옥시기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬옥시기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴아민기, $C_3 \sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬실릴기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬보론기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴보론기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴포스핀기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상의 치환기로 치환되거나 비치환되고, 복수 개의 치환기로 치환되는 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

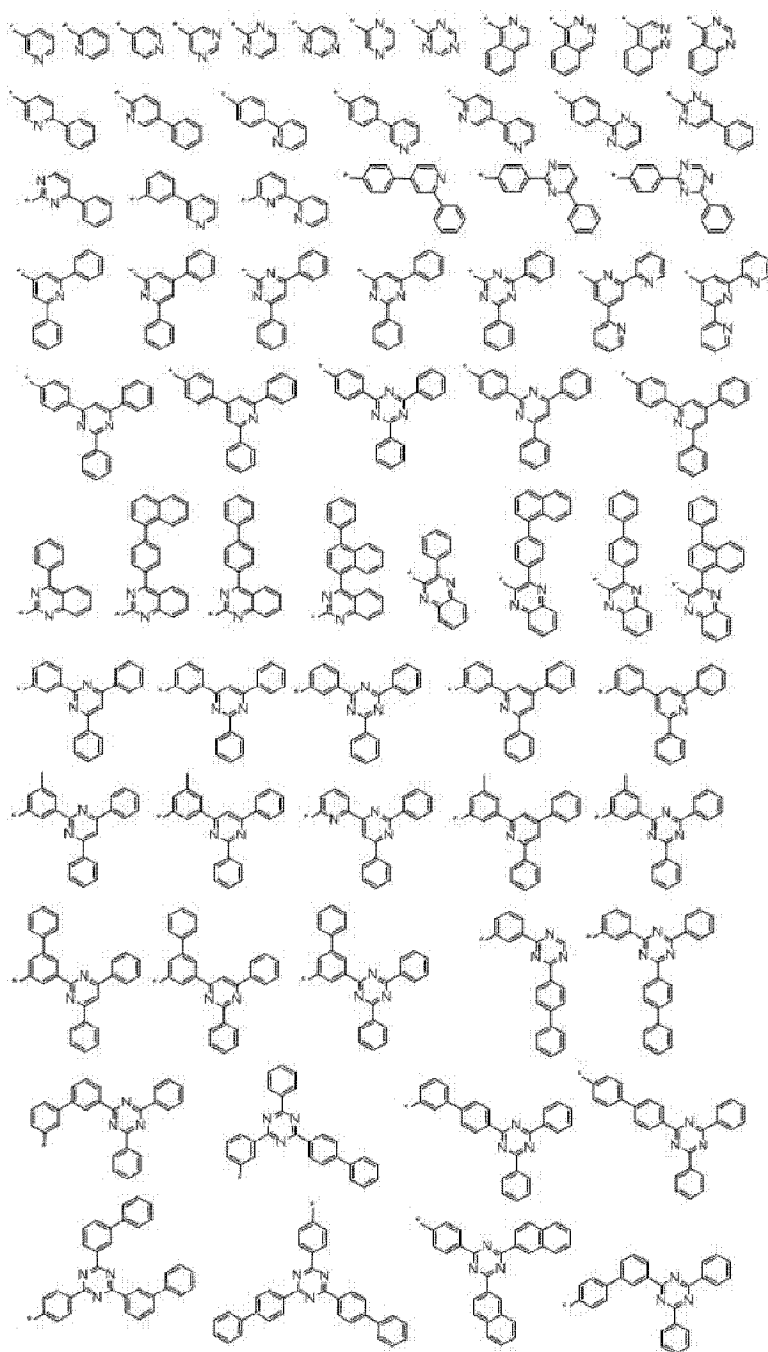
[134] 본 발명의 바람직한 한 구현 예에 따르면, 상기 화학식 1에서 Ar_1 내지 Ar_5 및 R_1 내지 R_4 중 적어도 하나는 하기 화학식 A-1 내지 화학식 A-15 중 어느 하나로 표시되는 치환기일 수 있다:

[135]



- [136] 상기 화학식 A-1 내지 화학식 A-15 에서,
- [137] *는 결합이 이루어지는 부분을 의미하고;
- [138] n 은 0 내지 4의 정수로서, 상기 n 이 0인 경우, 수소가 치환기 R_{21} 로 치환되지 않는 것을 의미하고, 상기 n 이 1 내지 4의 정수인 경우, R_{21} 은 중수소, 할로젠, 시아노기, 니트로기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_2 \sim C_{40}$ 의 알케닐기, $C_2 \sim C_{40}$ 의 알키닐기, $C_3 \sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 40개의 헤테로아릴기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴옥시기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬옥시기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴아민기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬실릴기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬보론기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴보론기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴포스핀기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택되거나, 인접하는 기와 결합하여 축합 고리를 형성할 수 있으며, 상기 R_{21} 이 복수 개인 경우 이들은 서로 동일하거나 상이하며;
- [139] 상기 R_{21} 의 알킬기, 알케닐기, 알키닐기, 시클로알킬기, 헤테로시클로알킬기, 아릴기, 헤테로아릴기, 아릴옥시기, 알킬옥시기, 아릴아민기, 알킬실릴기, 알킬보론기, 아릴보론기, 아릴포스핀기, 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 아릴실릴기는 각각 독립적으로 중수소, 할로젠, 시아노기, 니트로기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_2 \sim C_{40}$ 의 알케닐기, $C_2 \sim C_{40}$ 의 알키닐기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 40개의 헤테로아릴기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴옥시기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬옥시기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴아민기, $C_3 \sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬실릴기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬보론기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴보론기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴포스핀기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상의 치환기로 치환되거나 비치환되고, 복수 개의 치환기로 치환되는 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이하며;
- [140] L_2 및 R_{11} 은 각각 상기 화학식 8에서 정의된 바와 같다.
- [141] 본 발명의 바람직한 한 구현 예에 따르면, 상기 화학식 A-1 내지 화학식 A-15 중 어느 하나로 표시되는 치환기는 아래의 치환기로 이루어진 군에서 선택되는 것이 바람직하다. 그러나 이에 특별히 한정되는 것은 아니다:

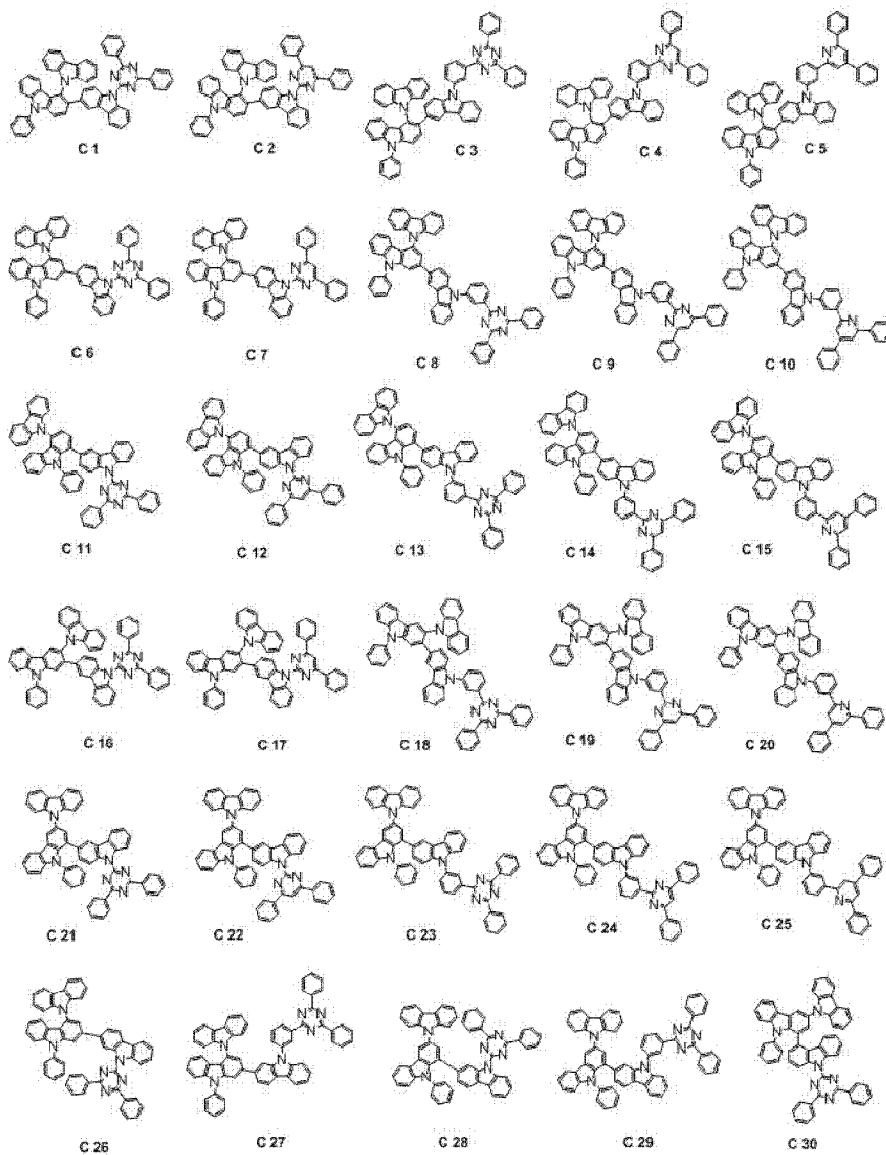
[142]



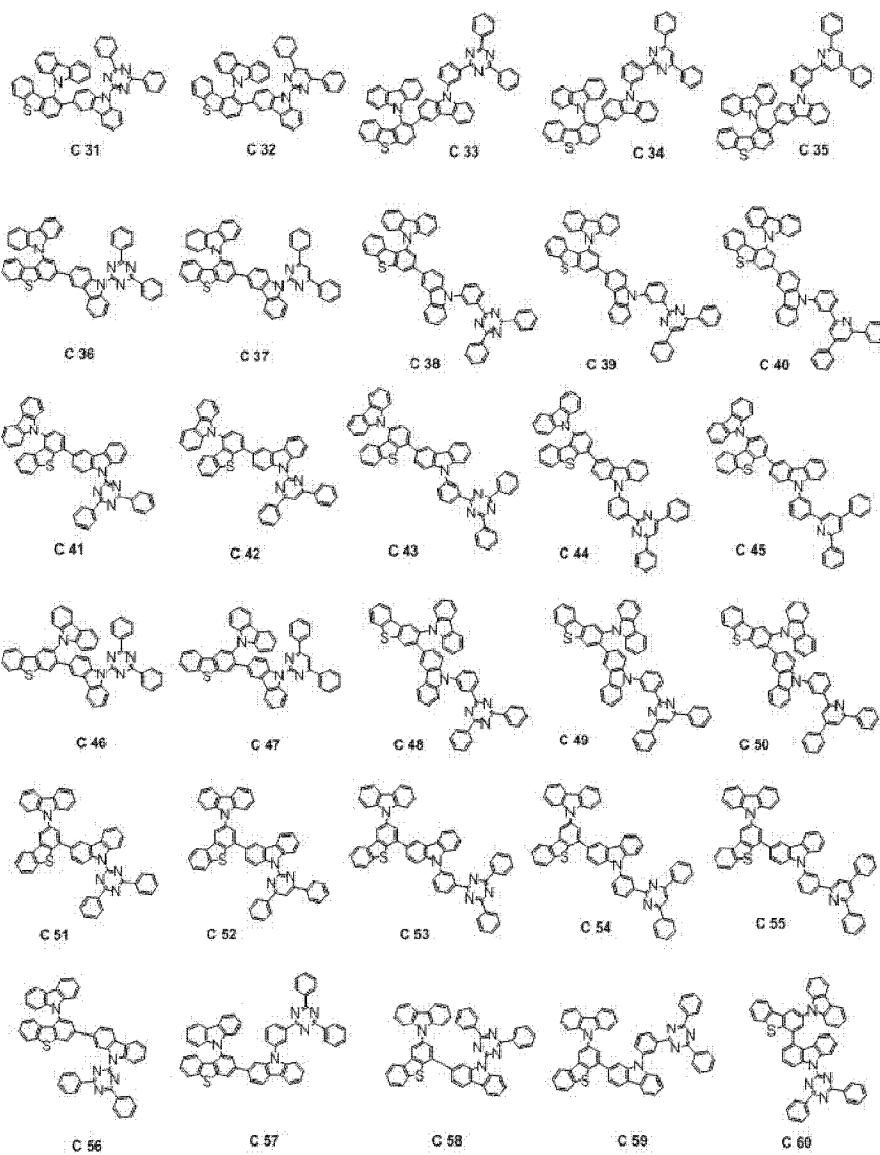
[143] 단, 상기 치환기에서, *는 결합이 이루어지는 부분을 의미한다.

[144] 본 발명의 바람직한 한 구현 예에 따르면, 본 발명의 화학식 1로 표시되는 화합물은 보다 구체적으로 아래의 화합물로 이루어진 군에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다:

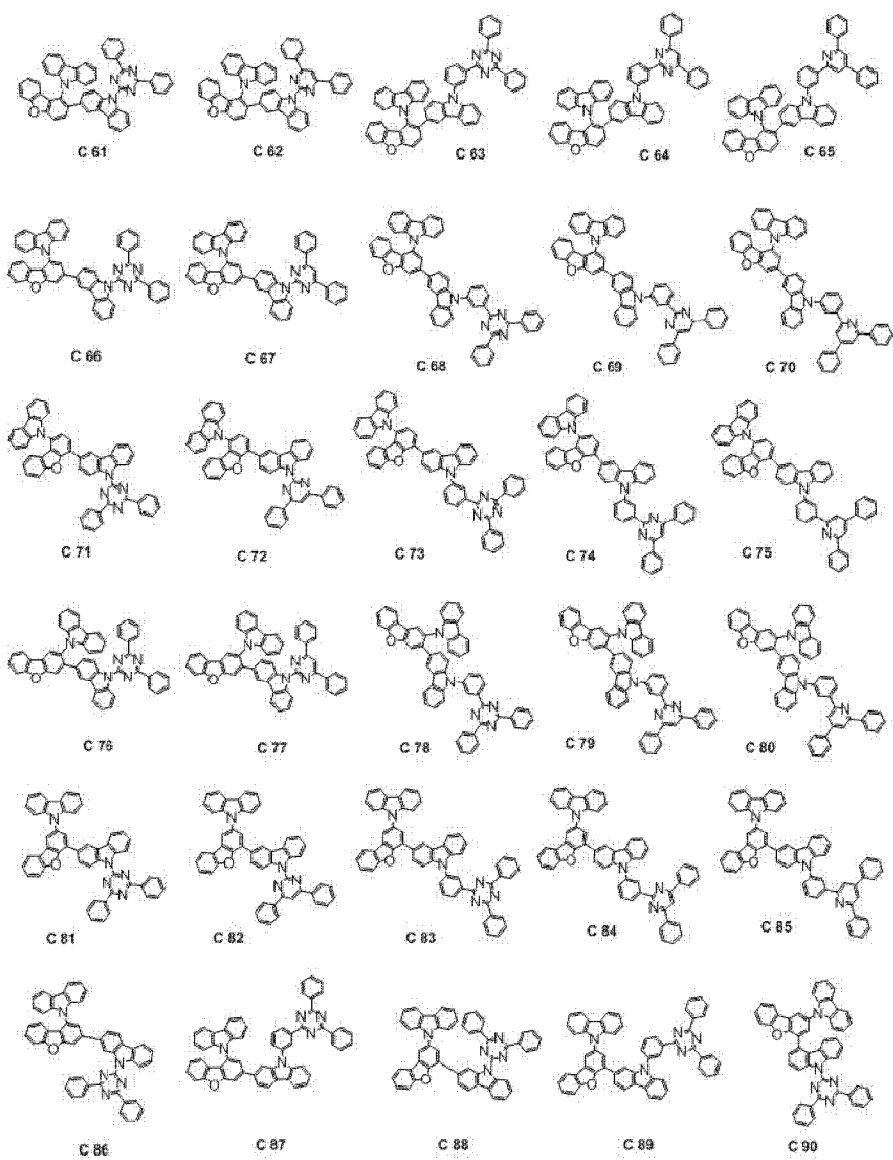
[145]



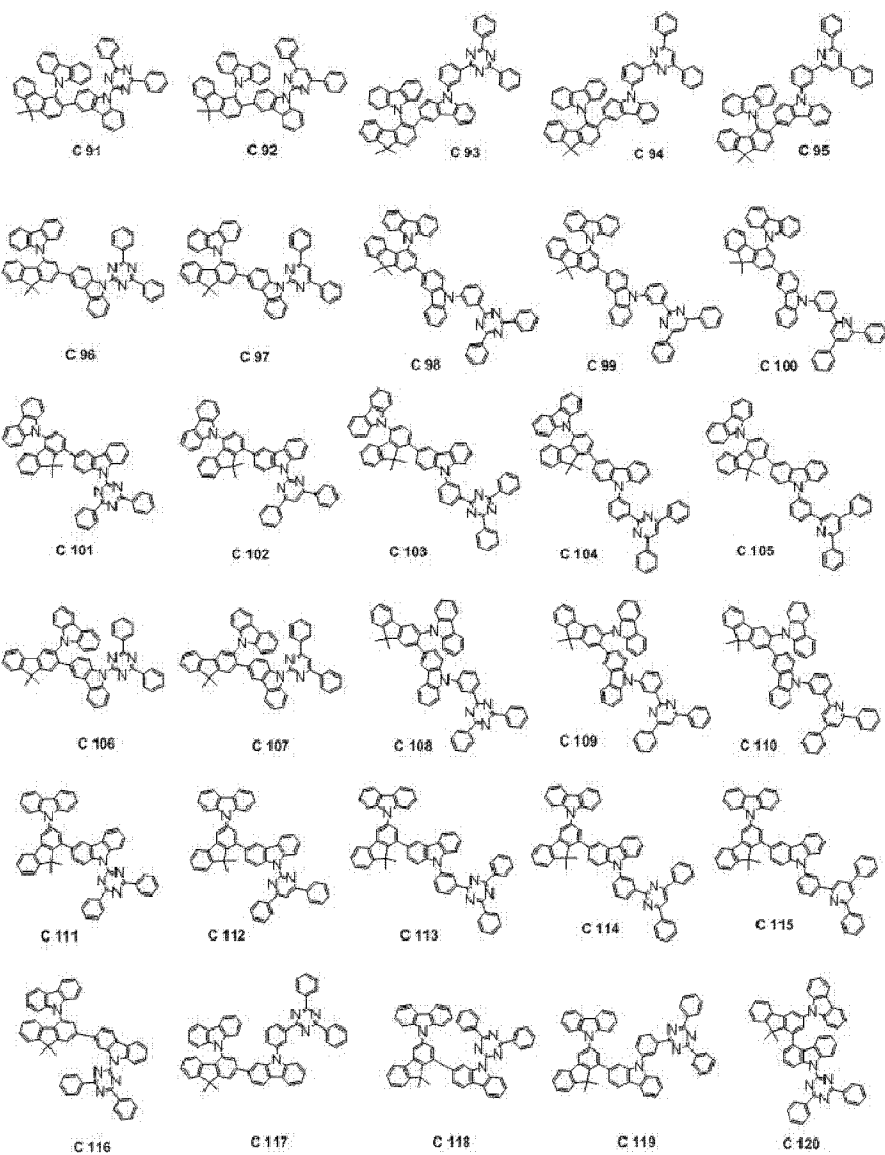
[146]



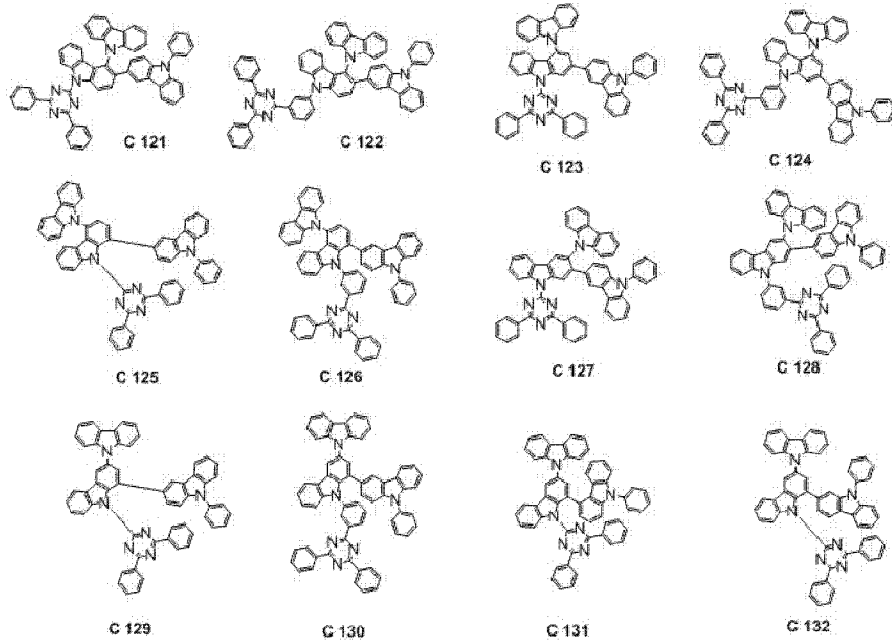
[147]



[148]



[149]



[150]

[151] **2. 유기 전계 발광 소자**

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

[153] 구체적으로, 본 발명에 따른 유기 전계 발광 소자는 (i) 양극(anode), (ii) 음극(cathode) 및 (iii) 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 화학식 1로 표시되는 화합물은 단독으로 사용되거나, 2 이상이 혼합되어 사용될 수 있다.

[154] 본 발명의 일례에 따르면, 상기 유기 전계 발광 소자에 있어서, 1층 이상의 유기물층은 정공주입층, 정공수송층, 발광층, 전자수송층 및 전자주입층 중 어느 하나 이상일 수 있고, 이 중에서 적어도 하나의 유기물층은 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함할 수 있다. 바람직하게는 상기 화학식 1의 화합물을 포함하는 유기물층은 발광층일 수 있다.

[155] 또한, 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 호스트 재료로 포함할 경우, 발광층에서 정공과 전자의 결합력이 높아지기 때문에, 유기 전계 발광 소자의 효율(발광효율 및 전력효율), 수명, 휘도 및 구동전압 등이 향상될 수 있다. 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 녹색 및/또는 적색의 인광 호스트, 형광 호스트, 또는 도펀트 재료로서 유기 발광 소자에 포함될 수 있다.

[156] 여기서, 상기 유기 전계 발광 소자의 구조는 특별히 한정되지 않으며, 예컨대 기판, 양극, 정공주입층, 정공수송층, 발광층, 전자수송층 및 음극이 순차적으로

적층된 구조일 수 있다. 이때, 상기 전자수송층 위에는 전자주입층이 추가로 적층될 수 있으며, 상기한 바와 같이, 정공주입층, 정공수송층, 발광층, 전자수송층 및 전자주입층 중 하나 이상은 본 발명에 따른 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함할 수 있다.

[157] 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.

[158] 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.

[159] 상기 유기물층은 진공 증착법이나 용액 도포법에 의하여 형성될 수 있다. 상기 용액 도포법의 예로는 스핀 코팅, 딥코팅, 닥터 블레이딩, 잉크젯 프린팅 또는 열 전사법 등이 있으나, 이들에 한정되지 않는다.

[160] 한편, 진공 증착법을 통해 유기 전계 발광 소자의 유기물 층을 형성하는 방법으로는 높은 열 전도도를 가진 세라믹 도가니가 사용되며, 단계적이고 지속적인 증발 제어가 가능하고 유기물이 튀는 현상이 없도록 설계되어야 한다. 증발원의 온도 상승이 적절히 이루어지지 않아 지나치게 짧은 시간에 증발온도까지 도달한 유기물은 튀는 현상이 발생되어 증발원의 입구가 막히게 되고, 이로 인해 유기물의 증착 속도가 일정하지 않게 되어 원하는 박막 특성을 얻지 못하게 된다. 또한, 유기물이 증착 도중에 변색 또는 탈색될 가능성도 높아진다. 유기물은 물질에 따라 용해(Melting) 또는 승화(Sublimation)되어 증착되는 특성을 가지는데, 승화 방식으로 증착되는 경우는 화합물이 고체 상태에서 승화 과정을 거쳐 바로 유기물 층을 형성하는 반면, 용해 방식의 경우는 고체가 액체를 거쳐 기화되어 유기물 층을 형성한다. 용해 방식은 승화 방식에 비해 재료가 상변화를 한 단계 더 거치게 되므로, 증착 온도나 균일성을 컨트롤하기가 어렵다. 이때, 본 발명에 따른 화학식 1로 표시되는 화합물은 승화 방식으로 증착되어 균일한 박막 특성을 가질 수 있어 발광 특성이 개선된다.

[161] 결과적으로, 본 발명에 따른 화학식 1의 화합물을 유기 전계 발광 소자의 정공 주입/수송층 재료 또는 청색, 녹색 및/또는 적색의 인광 호스트 재료, 전자 주입/수송층 재료로 사용할 경우, 종래의 유기물층 재료(예를 들어, CBP) 비해 유기 전계 발광 소자의 효율 및 수명을 크게 향상시킬 수 있다. 또한 이러한 유기 전계 발광 소자 수명 향상은 풀 칼라 유기 발광 패널의 성능을 극대화시킬 수 있다.

[162] 한편, 본 발명에서 사용 가능한 기판으로는 특별히 한정되지 않으며, 실리콘 웨이퍼, 석영, 유리판, 금속판, 플라스틱 필름 및 시트 등이 사용될 수 있다.

[163] 또, 사용 가능한 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.

[164] 또, 사용 가능한 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.

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

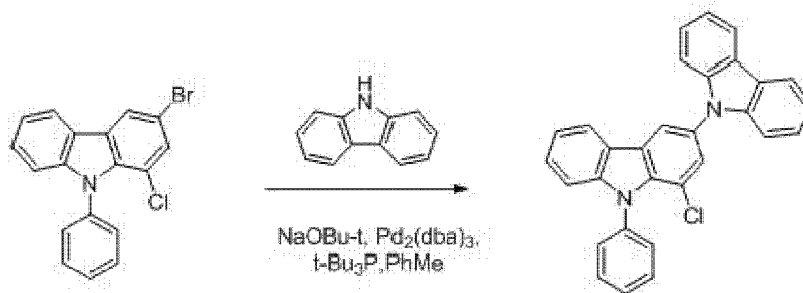
[166] 이하 본 발명을 실시예를 통하여 상세히 설명하면 다음과 같다. 단, 하기 실시예는 본 발명을 예시하는 것일 뿐, 본 발명이 하기 실시예에 의해 한정되는 것은 아니다.

[167]

[168] [준비예 1] TCZ-1의 합성

[169] <단계 1> 1-클로로-9-페닐-9H-3,9'-비카바졸의 합성

[170]



[171] 질소 기류 하에서 3-브로모-1-클로로-9-페닐-9H-카바졸 (17.8 g, 50.0 mmol), 9H-카바졸 (8.35 g, 50.0 mmol), Pd₂(dba)₃ (2.30 g, 2.5 mmol), (t-Bu)₃P (1.01 g, 5.0 mmol), 나트륨 터셔리-부톡사이드 (14.7 g, 150.0 mmol) 을 500 ml 톨루엔 에 넣고 110°C에서 12시간 동안 교반하였다. 반응 종결 후 메틸렌클로라이드로 추출하고 MgSO₄를 넣고 여과하였다. 여과된 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피를 이용하여 목적 화합물인 1-클로로-9-페닐-9H-3,9'-비카바졸 (14.8 g, 수율 67 %)를 얻었다.

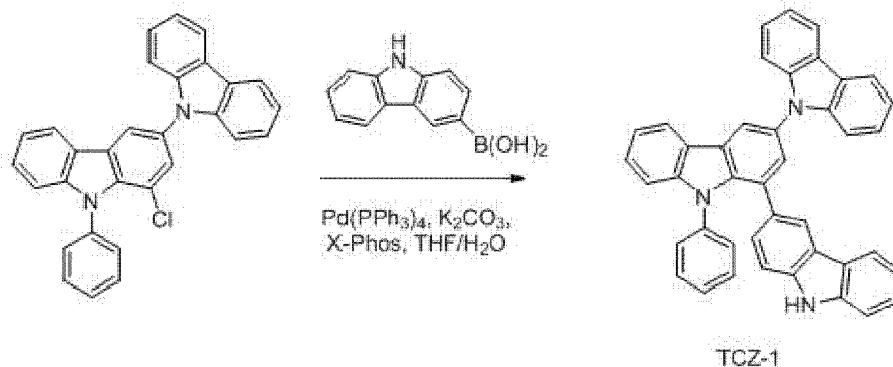
[172] Mass : [(M+H)⁺] : 443

[173] Elemental Analysis: C, 81.35; H, 4.32; Cl, 8.00; N, 6.32

[174]

[175] <단계 2> TCZ-1의 합성

[176]



[177] 질소 기류 하에서 1-클로로-9-페닐-9H-3,9'-비카바졸 (13.3 g, 30.0 mmol), (9H-카바졸-3-일)보론산 (6.33 g, 30.0 mmol), K_2CO_3 (12.8 g, 90.0 mmol), $Pd(PPh_3)_4$ (1.73 g, 5 mol%), X-Phos (2.4 g, 5.00 mmol)를 250 ml / 120 ml의 THF/ H_2O 를 넣고 $90^\circ C$ 에서 12시간 동안 교반하였다. 반응 종결 후 메틸렌클로라이드로 추출하고 $MgSO_4$ 를 넣고 여과하였다. 여과된 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피를 이용하여 목적 화합물인 TCZ-1 (10.5 g, 수율 61%)를 획득하였다.

[178] Mass : $[(M+H)^+]$: 574

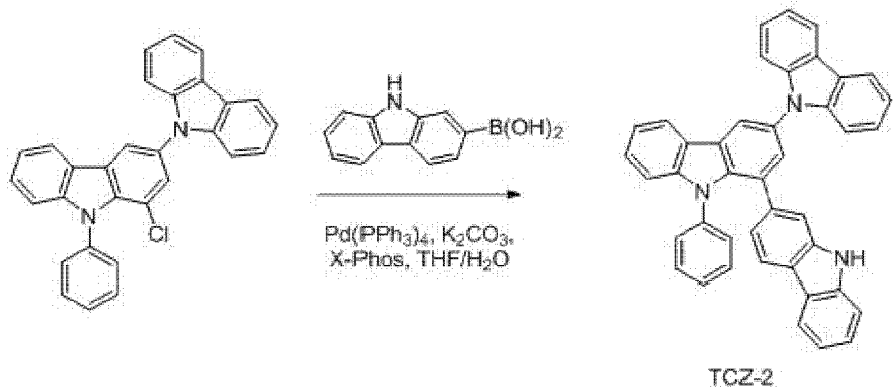
[179] 1H -NMR : δ 7.16 (m, 2H), 7.20 (m, 2H), 7.35 (m, 2H), 7.52 (m, 7H), 7.67 (m, 3H), 7.74 (m, 2H), 7.95 (m, 4H), 8.19 (m, 2H), 8.52 (m, 2H), 11.54 (s, 1H)

[180]

[181] [준비에 2] TCZ-2의 합성

[182] <단계 1> TCZ-2의 합성

[183]



[184] (9H-카바졸-3-일)보론산 대신 (9H-카바졸-2-일)보론산 (6.33 g, 30.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 준비예 1의 <단계 2>와 동일한 과정을 수행하여 TCZ-2 (11.2 g, 수율 65 %)을 얻었다.

[185] Mass : $[(M+H)^+]$: 574

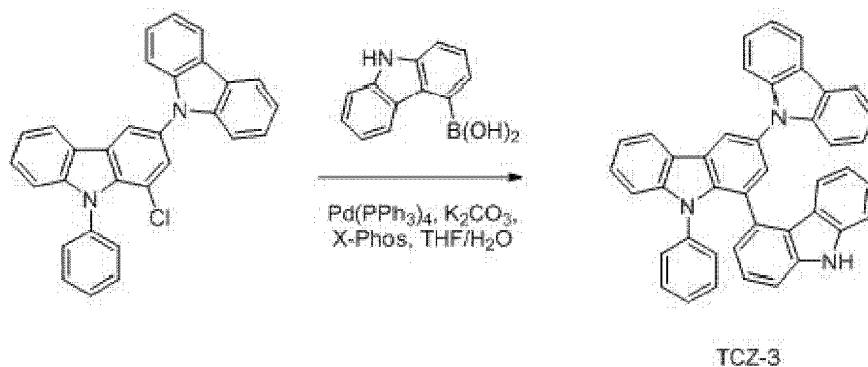
[186] 1H -NMR : δ 7.19 (m, 4H), 7.35 (m, 2H), 7.54 (m, 7H), 7.62 (m, 3H), 7.75 (m, 2H), 7.94 (m, 3H), 8.19 (m, 2H), 8.31 (t, 1H), 8.55 (m, 2H), 11.55 (s, 1H)

[187]

[188] [준비에 3] TCZ-3의 합성

[189] <단계 1> TCZ-3의 합성

[190]



[191] (9H-카바졸-3-일)보론산 대신 (9H-카바졸-4-일)보론산 (6.33 g, 30.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 준비예 1의 <단계 2>와 동일한 과정을 수행하여 TCZ-3 (8.95 g, 수율 52 %)을 얻었다.

[192] Mass : [(M+H)⁺] : 574

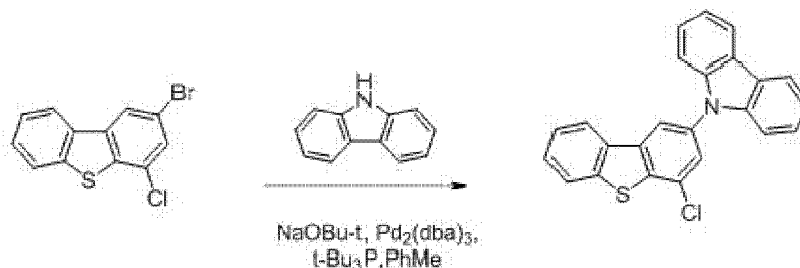
[193] ¹H-NMR : δ 7.19 (m, 4H), 7.35 (m, 2H), 7.55 (m, 8H), 7.62 (m, 3H), 7.75 (m, 2H), 7.94 (m, 2H), 8.20 (m, 2H), 8.54 (m, 2H), 11.56 (s, 1H)

[194]

[195] [준비예 4] TCZ-4의 합성

[196] <단계 1> 9-(4-클로로디벤조[b,d]티오펜-2-일)-9H-카바졸의 합성

[197]



[198] 3-브로모-1-클로로-9-페닐-9H-카바졸 대신

2-브로모-4-클로로디벤조[b,d]티오펜 (14.9 g, 50.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 준비예 1의 <단계 1>과 동일한 과정을 수행하여

9-(4-클로로디벤조[b,d]티오펜-2-일)-9H-카바졸 (14.6 g, 수율 76 %)을 얻었다.

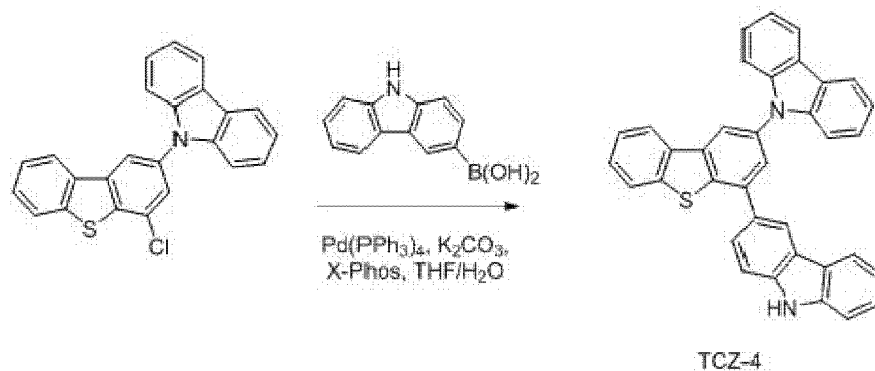
[199] Mass : [(M+H)⁺] : 384

[200] Elemental Analysis: C, 75.09; H, 3.68; Cl, 9.23; N, 3.65; S, 8.35

[201]

[202] <단계 2> TCZ-4의 합성

[203]



[204] 1-클로로-9-페닐-9H-3,9'-비카바졸 대신 9-(4-클로로디벤조[b,d]티오펜-2-일)-9H-카바졸 (11.5 g, 30.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 준비예 1의 <단계 2>와 동일한 과정을 수행하여 TCZ-4 (10.2 g, 수율 66 %)를 얻었다.

[205] Mass : [(M+H)⁺] : 515

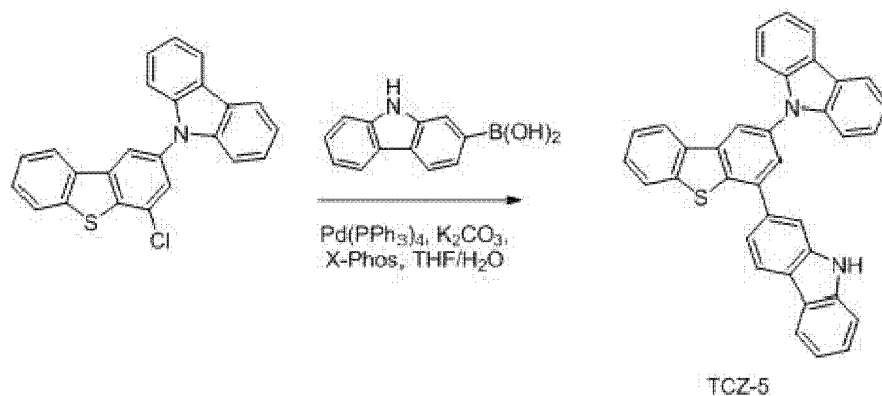
[206] ¹H-NMR : δ 7.18 (m, 3H), 7.35 (t, 1H), 7.51 (m, 5H), 7.63 (d, 1H), 7.77 (m, 2H), 7.92 (m, 4H), 8.00 (s, 1H), 8.20 (m, 2H), 8.50 (m, 2H), 11.56 (s, 1H)

[207]

[208] [준비예 5] TCZ-5의 합성

[209] <단계 1> TCZ-5의 합성

[210]



[211] 1-클로로-9-페닐-9H-3,9'-비카바졸 대신 9-(4-클로로디벤조[b,d]티오펜-2-일)-9H-카바졸 (11.5 g, 30.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 준비예 2의 <단계 1>과 동일한 과정을 수행하여 TCZ-5 (9.12 g, 수율 59 %)를 얻었다.

[212] Mass : [(M+H)⁺] : 515

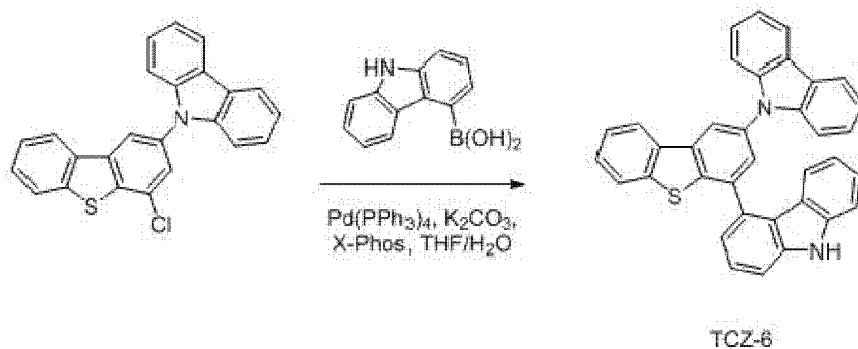
[213] ¹H-NMR : δ 7.16 (t, 1H), 7.21 (m, 2H), 7.35 (t, 1H), 7.53 (m, 5H), 7.63 (d, 1H), 7.75 (m, 2H), 7.92 (m, 3H), 8.01 (s, 1H), 8.20 (m, 2H), 8.31 (d, 1H), 8.50 (m, 2H), 11.55 (s, 1H)

[214]

[215] [준비예 6] TCZ-6의 합성

[216] <단계 1> TCZ-6의 합성

[217]



[218] 1-클로로-9-페닐-9H-3,9'-비카바졸 대신

9-(4-클로로디벤조[b,d]티오펜-2-일)-9H-카바졸 (11.5 g, 30.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 준비예 3의 <단계 1>과 동일한 과정을 수행하여 TCZ-6 (7.57 g, 수율 49 %)을 얻었다.

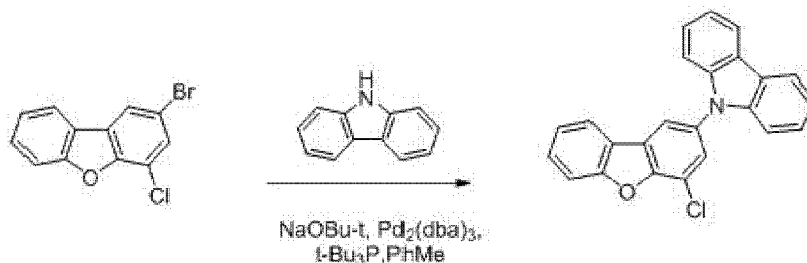
[219] Mass : [(M+H)⁺] : 515

[220] ¹H-NMR : δ 7.19 (m, 3H), 7.35 (t, 1H), 7.52 (m, 6H), 7.64 (d, 1H), 7.77 (m, 2H), 7.93 (m, 3H), 8.00 (s, 1H), 8.19 (m, 2H), 8.50 (m, 2H), 11.56 (s, 1H)

[221]

[222] [준비예 7] TCZ-7의 합성[223] <단계 1> 9-(4-클로로디벤조[b,d]퓨란-2-일)-9H-카바졸의 합성

[224]



[225] 3-브로모-1-클로로-9-페닐-9H-카바졸 대신 2-브로모-4-클로로디벤조[b,d]퓨란 (14.1 g, 50.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 준비예 1의 <단계 1>과 동일한 과정을 수행하여 9-(4-클로로디벤조[b,d]퓨란-2-일)-9H-카바졸 (13.1 g, 수율 71 %)을 얻었다.

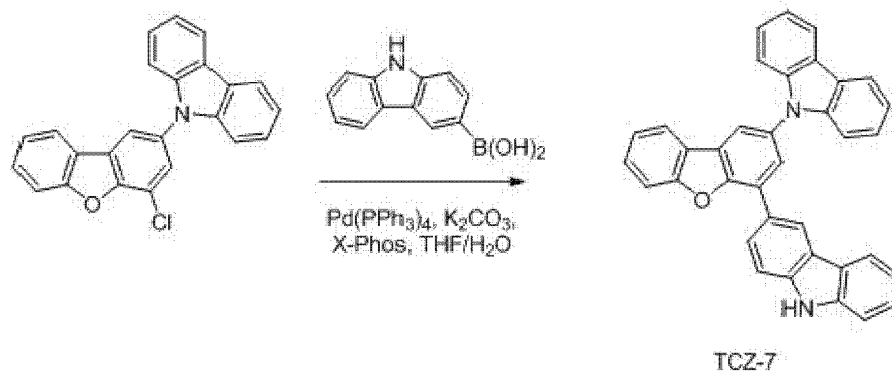
[226] Mass : [(M+H)⁺] : 368

[227] Elemental Analysis: C, 78.37; H, 3.84; Cl, 9.64; N, 3.81; O, 4.35

[228]

[229] <단계 2> TCZ-7의 합성

[230]



[231] 1-클로로-9-페닐-9H-3,9'-비카바졸 대신
9-(4-클로로디벤조[b,d]퓨란-2-일)-9H-카바졸 (11.0 g, 30.0 mmol)을 사용하는
것을 제외하고는 준비예 1의 <단계 2>와 동일한 과정을 수행하여 TCZ-7 (8.38 g,
수율 56 %)를 얻었다.

[232] Mass : [(M+H)⁺] : 499

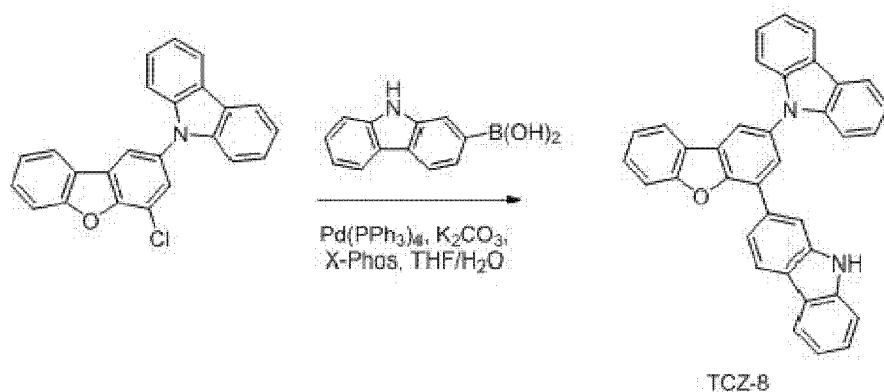
[233] ¹H-NMR : δ 7.19 (m, 3H), 7.35 (m, 3H), 7.52 (m, 4H), 7.62 (m, 2H), 7.71 (m, 2H),
7.93 (m, 4H), 8.19 (m, 2H), 8.55 (d, 1H), 11.55 (s, 1H)

[234]

[235] [준비예 8] TCZ-8의 합성

[236] <단계 1> TCZ-8의 합성

[237]



[238] 1-클로로-9-페닐-9H-3,9'-비카바졸 대신
9-(4-클로로디벤조[b,d]퓨란-2-일)-9H-카바졸 (11.0 g, 30.0 mmol)을 사용하는
것을 제외하고는 준비예 2의 <단계 1>과 동일한 과정을 수행하여 TCZ-8 (8.68 g,
수율 58 %)를 얻었다.

[239] Mass : [(M+H)⁺] : 499

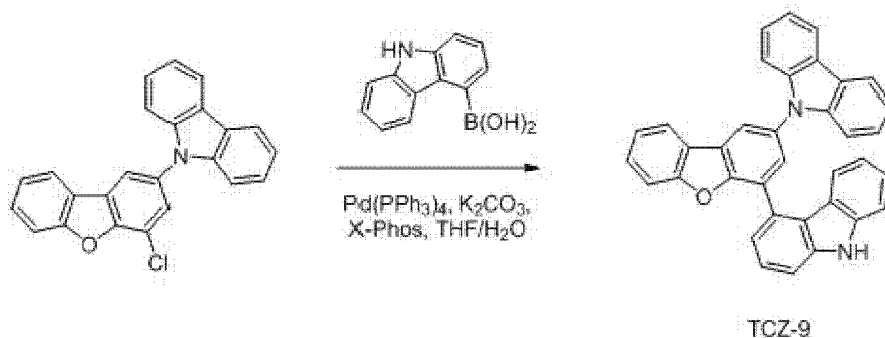
[240] ¹H-NMR : δ 7.20 (m, 3H), 7.37 (m, 3H), 7.52 (m, 4H), 7.65 (m, 2H), 7.71 (m, 2H),
7.92 (m, 3H), 8.19 (m, 2H), 8.31 (d, 1H), 8.55 (d, 1H), 11.55 (s, 1H)

[241]

[242] [준비예 9] TCZ-9의 합성

[243] <단계 1> TCZ-9의 합성

[244]



[245] 1-클로로-9-페닐-9H-3,9'-비카바졸 대신

9-(4-클로로디벤조[b,d]퓨란-2-일)-9H-카바졸 (11.0 g, 30.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 준비예 3의 <단계 1>과 동일한 과정을 수행하여 TCZ-9 (6.59 g, 수율 44 %)를 얻었다.

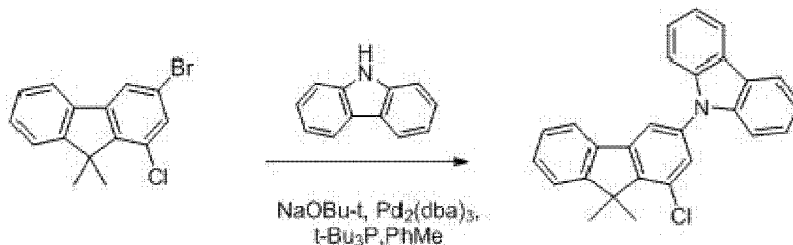
[246] Mass : [(M+H)⁺] : 499

[247] ¹H-NMR : δ 7.19 (m, 3H), 7.33 (m, 3H), 7.55 (m, 5H), 7.65 (m, 2H), 7.71 (m, 2H), 7.93 (m, 3H), 8.20 (m, 2H), 8.55 (d, 1H), 11.55 (s, 1H)

[248]

[249] [준비예 10] TCZ-10의 합성[250] <단계 1> 9-(1-클로로-9,9-디메틸-9H-플루오렌-3-일)-9H-카바졸의 합성

[251]



[252] 3-브로모-1-클로로-9-페닐-9H-카바졸 대신

3-브로모-1-클로로-9,9-디메틸-9H-플루오렌 (15.4 g, 50.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 준비예 1의 <단계 1>과 동일한 과정을 수행하여

9-(1-클로로-9,9-디메틸-9H-플루오렌-3-일)-9H-카바졸 (14.4 g, 수율 73 %)을 얻었다.

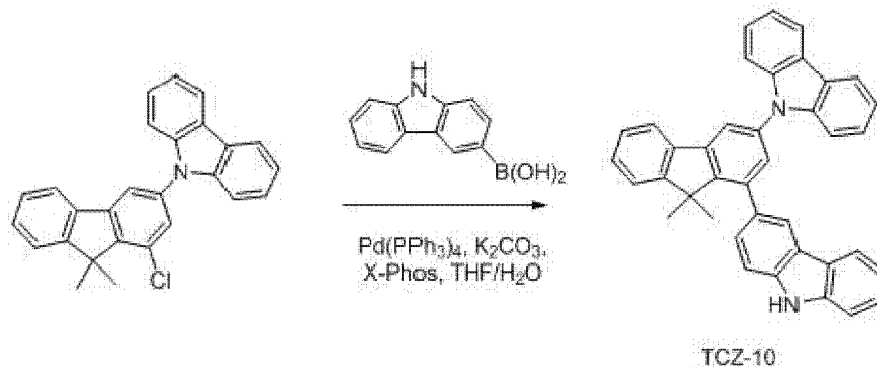
[253] Mass : [(M+H)⁺] : 394

[254] Elemental Analysis: C, 82.33; H, 5.12; Cl, 9.00; N, 3.56

[255]

[256] <단계 2> TCZ-10의 합성

[257]



[258] 1-클로로-9-페닐-9H-3,9'-비카바졸 대신

9-(1-클로로-9,9-디메틸-9H-플루오렌-3-일)-9H-카바졸 (11.8 g, 30.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 준비예 1의 <단계 2>와 동일한 과정을 수행하여 TCZ-10 (8.03 g, 수율 51%)을 얻었다.

[259] Mass : [(M+H)⁺] : 525

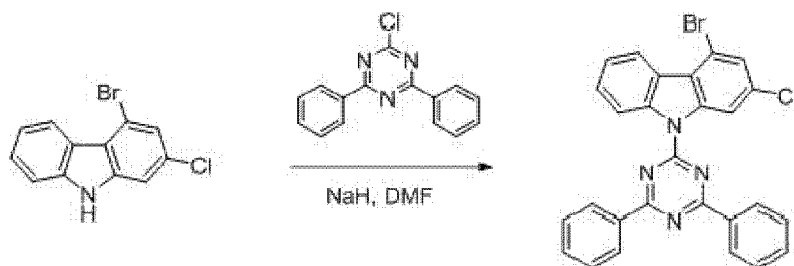
[260] ¹H-NMR : δ 1.64 (s, 6H), 7.21 (m, 4H), 7.35 (m, 2H), 7.52 (m, 4H), 7.63 (d, 1H), 7.73 (m, 2H), 7.99 (m, 5H), 8.21 (m, 2H), 8.52 (d, 1H), 11.56 (s, 1H)

[261]

[262] [준비예 11] TCZ-11의 합성

[263] <단계 1> 4-브로모-2-클로로-9-(4,6-디페닐-1,3,5-트리아진-2-일)-9H-카바졸의 합성

[264]



[265] 질소 기류 하에서 4-브로모-2-클로로-9H-카바졸 (14.0 g, 50.0 mmol), NaH (1.2 g, 50.0 mmol) 및 DMF(150 ml)를 혼합하고 상온에서 10분 동안 교반한 뒤 2-클로로-4,6-디페닐-1,3,5-트리아진 (13.4 g, 50.0 mmol)을 넣고 상온에서 1시간 동안 교반하였다. 반응이 종결된 후 물을 넣고 고체 화합물을 여과한 후, 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 4-브로모-2-클로로-9-(4,6-디페닐-1,3,5-트리아진-2-일)-9H-카바졸 (20.7 g, 수율 81%)을 얻었다.

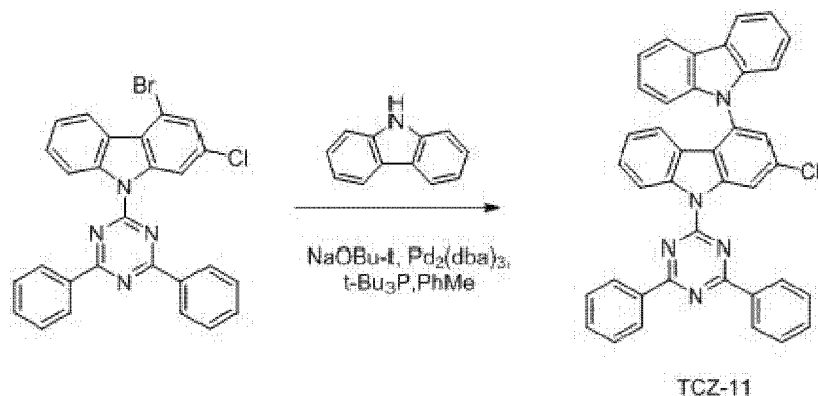
[266] Mass : [(M+H)⁺] : 511, 513

[267] Elemental Analysis: C, 63.36; H, 3.15; Br, 15.61; Cl, 6.93; N, 10.95

[268]

[269] <단계 2> TCZ-11의 합성

[270]



[271] 3-브로모-1-클로로-9-페닐-9H-카바졸 대신

4-브로모-2-클로로-9-(4,6-디페닐-1,3,5-트리아진-2-일)-9H-카바졸 (15.3 g, 30.0 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 준비예 1의 <단계 1>과 동일한 과정을 수행하여 TCZ-11 (10.4 g, 수율 58 %)을 얻었다.

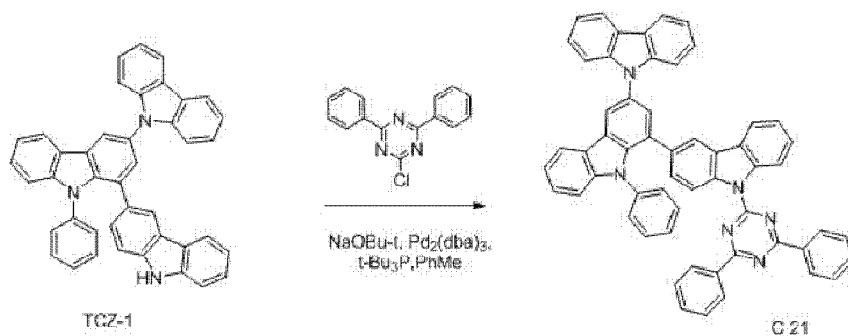
[272] Mass : [(M+H)⁺] : 598

[273] ¹H-NMR : δ 7.13 (s, 1H), 7.19 (m, 3H), 7.33 (m, 3H), 7.51 (m, 8H), 7.94 (m, 2H), 8.19 (d, 1H), 8.36 (d, 4H), 8.55 (d, 1H)

[274]

[275] [합성예 1] C 21의 합성

[276]



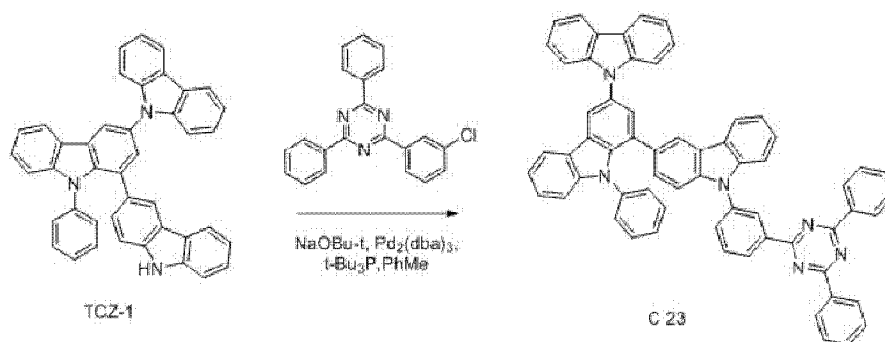
[277] 질소 기류 하에서 TCZ-1 (5.74 g, 10.0 mmol), 2-클로로-4,6-디페닐-1,3,5-트리아진 (2.68 g, 10.0 mmol), Pd₂(dba)₃ (0.46 g, 0.5 mmol), (t-Bu)₃P (0.20 g, 1.0 mmol), 나트륨 터셔리-부톡사이드 (2.94 g, 30.0 mmol)을 500 ml 톨루엔에 넣고 110°C에서 12시간 동안 교반하였다. 반응 종결 후 메틸렌클로라이드로 추출하고 MgSO₄를 넣고 여과하였다. 여과된 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피를 이용하여 목적 화합물인 C 21 (6.20 g, 수율 77 %)를 얻었다.

[278] Mass : [(M+H)⁺] : 805

[279]

[280] [합성예 2] C 23의 합성

[281]



[282]

2-클로로-4,6-디페닐-1,3,5-트리아진 대신 2-(3-클로로페닐)-4,6-디페닐-1,3,5-트리아진 (3.44 g, 10.00 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 합성에 1과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 C 23 (7.75 g, 수율 88%)을 얻었다.

[283]

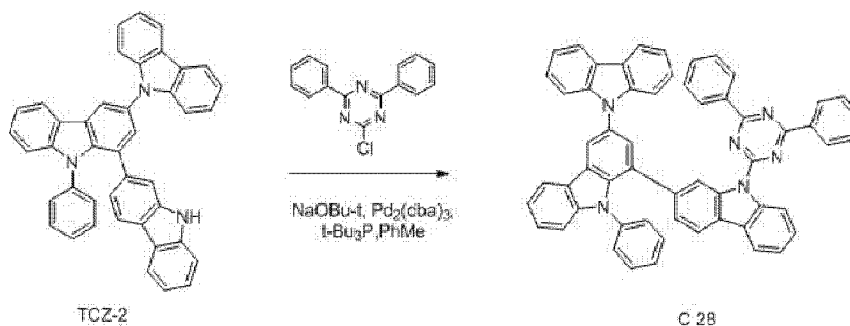
Mass : [(M+H)⁺] : 881

[284]

[285]

[합성에 3] C 28의 합성

[286]



[287]

TCZ-1 대신 TCZ-2 (5.74 g, 10.00 mmol)를 사용하는 것을 제외하고는 합성에 1과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 C 28 (6.44 g, 수율 80%)을 얻었다.

[288]

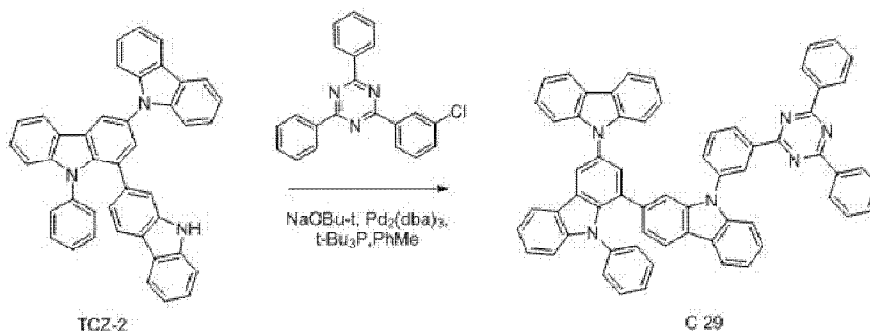
Mass : [(M+H)⁺] : 805

[289]

[290]

[합성에 4] C 29의 합성

[291]



[292]

TCZ-1 대신 TCZ-2 (5.74 g, 10.00 mmol)를 사용하는 것을 제외하고는 합성에 2와 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 C 29 (7.14 g, 수율 81%)을 얻었다.

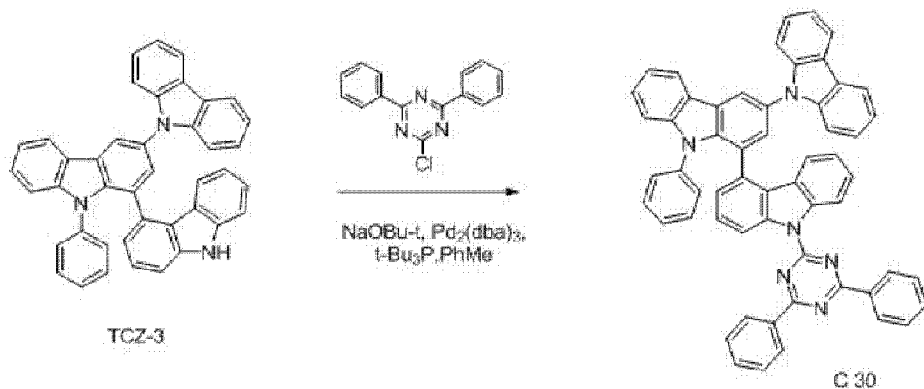
[293]

Mass : [(M+H)⁺] : 881

[294]

[295] [합성예 5] C 30의 합성

[296]



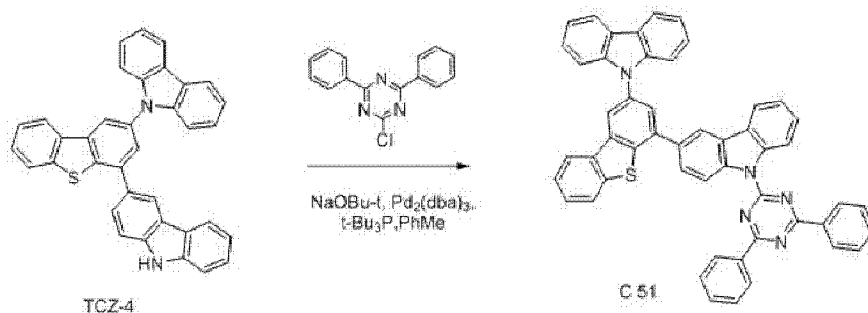
[297] TCZ-1 대신 TCZ-3 (5.74 g, 10.00 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 합성예 1과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 C 30 (5.64 g, 수율 70%)을 얻었다.

[298] Mass : [(M+H)⁺] : 805

[299]

[300] [합성예 6] C 51의 합성

[301]



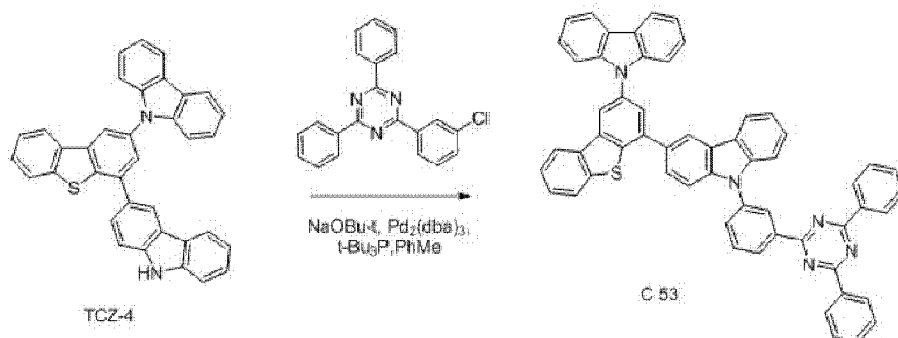
[302] TCZ-1 대신 TCZ-4 (5.15 g, 10.00 mmol)를 사용하는 것을 제외하고는 합성예 1과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 C 51 (5.37 g, 수율 72%)을 얻었다.

[303] Mass : [(M+H)⁺] : 746

[304]

[305] [합성예 7] C 53의 합성

[306]



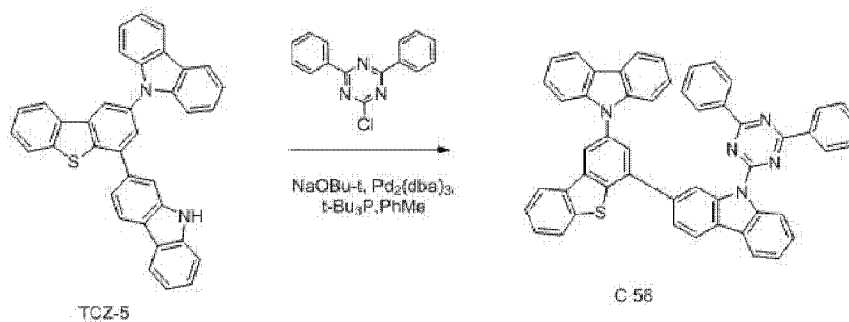
[307] TCZ-1 대신 TCZ-4 (5.15 g, 10.00 mmol)를 사용하는 것을 제외하고는 합성예 2와 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 C 53 (6.49 g, 수율 79%)을 얻었다.

[308] Mass : [(M+H)⁺] : 822

[309]

[310] [합성예 8] C 58의 합성

[311]



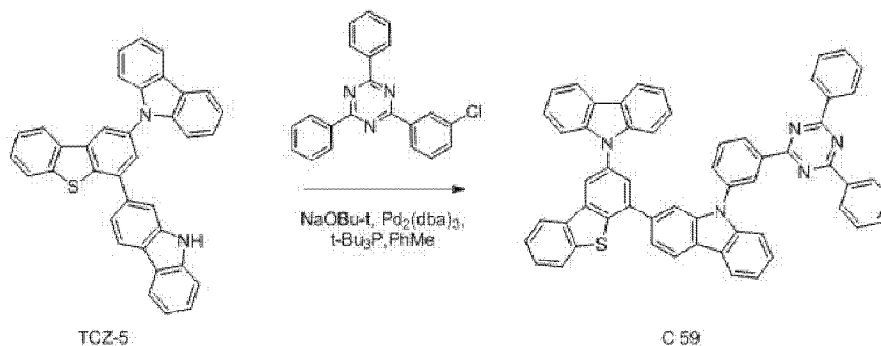
[312] TCZ-1 대신 TCZ-5 (5.15 g, 10.00 mmol)를 사용하는 것을 제외하고는 합성예 1과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 C 58 (5.30 g, 수율 71%)을 얻었다.

[313] Mass : [(M+H)⁺] : 746

[314]

[315] [합성예 9] C 59의 합성

[316]



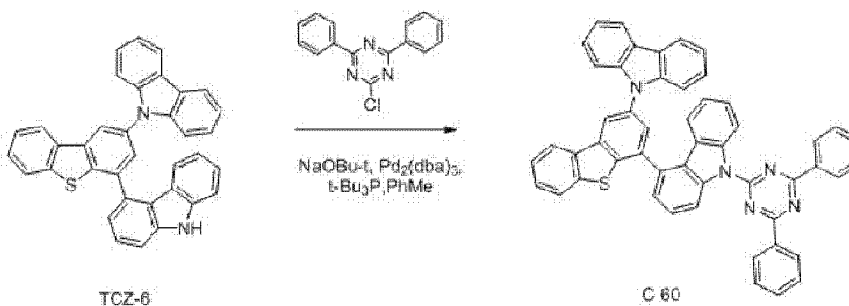
[317] TCZ-1 대신 TCZ-5 (5.15 g, 10.00 mmol)를 사용하는 것을 제외하고는 합성예 2와 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 C 59 (6.74 g, 수율 82%)를 얻었다.

[318] Mass : [(M+H)⁺] : 822

[319]

[320] [합성예 10] C 60의 합성

[321]



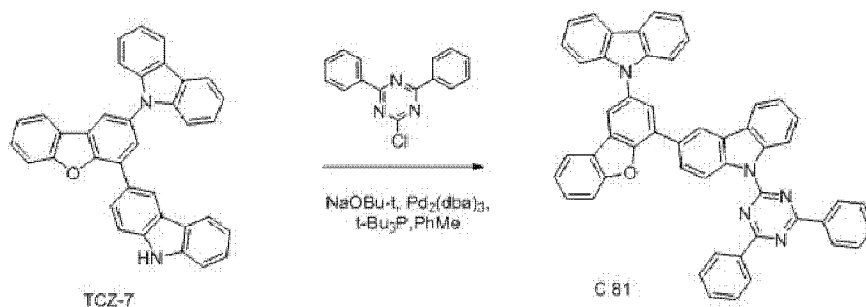
[322] TCZ-1 대신 TCZ-6 (5.15 g, 10.00 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 합성예 1과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 C 60 (5.30 g, 수율 71%)을 얻었다.

[323] Mass : [(M+H)⁺] : 746

[324]

[325] [합성예 11] C 81의 합성

[326]



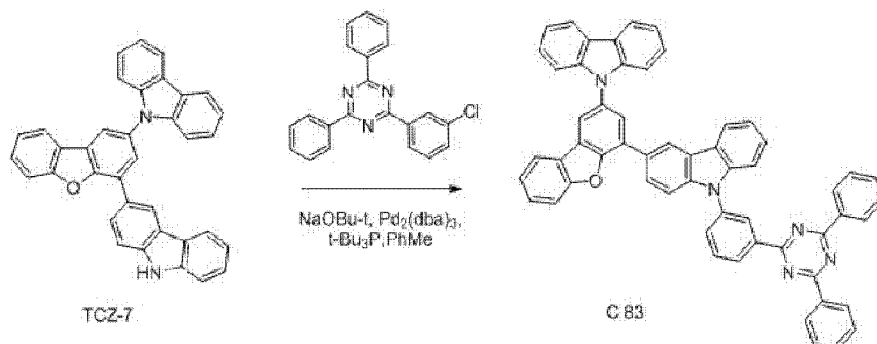
[327] TCZ-1 대신 TCZ-7 (4.99 g, 10.00 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 합성예 1과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 C 81 (5.40 g, 수율 74%)을 얻었다.

[328] Mass : [(M+H)⁺] : 730

[329]

[330] [합성예 12] C 83의 합성

[331]



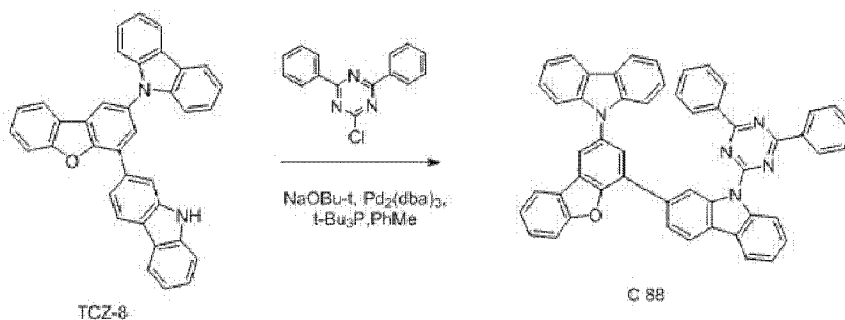
[332] TCZ-1 대신 TCZ-7 (4.99 g, 10.00 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 합성예 2와 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 C 83 (6.69 g, 수율 83%)을 얻었다.

[333] Mass : [(M+H)⁺] : 806

[334]

[335] [합성예 13] C 88의 합성

[336]



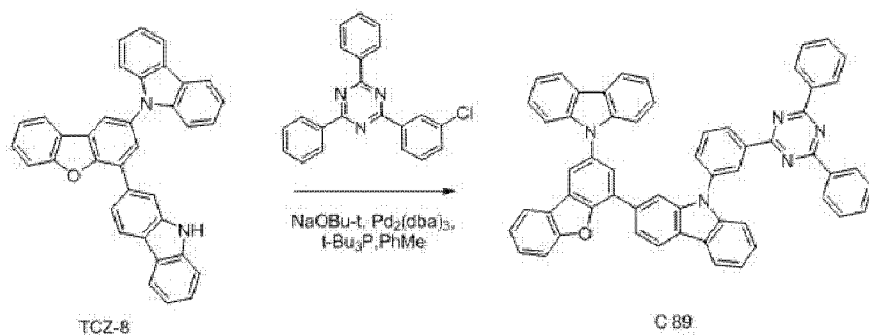
[337] TCZ-1 대신 TCZ-8 (4.99 g, 10.00 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 합성예 1과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 C 88 (5.11 g, 수율 70%)을 얻었다.

[338] Mass : [(M+H)⁺] : 730

[339]

[340] [합성예 14] C 89의 합성

[341]



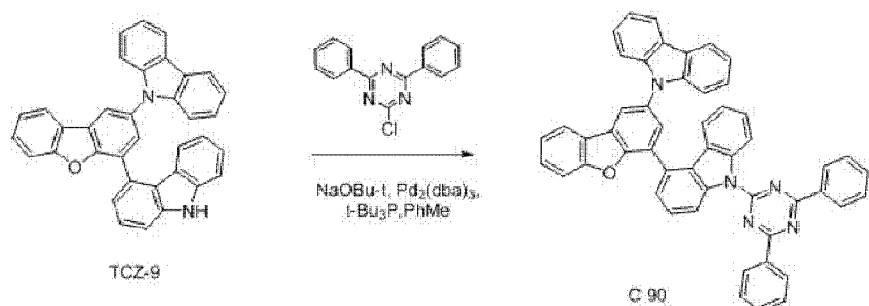
[342] TCZ-1 대신 TCZ-8 (4.99 g, 10.00 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 합성예 2와 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 C 89 (7.01 g, 수율 87%)을 얻었다.

[343] Mass : [(M+H)⁺] : 806

[344]

[345] [합성예 15] C 90의 합성

[346]



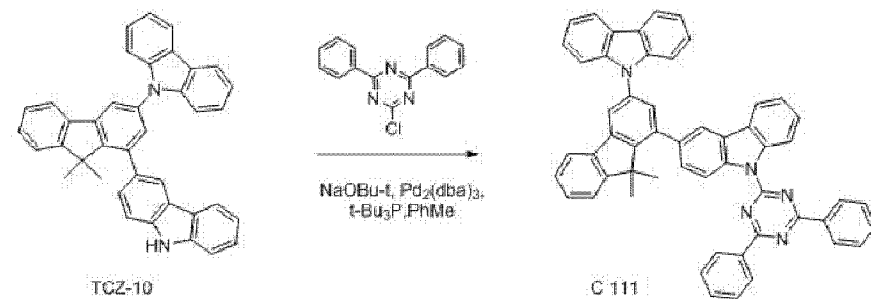
[347] TCZ-1 대신 TCZ-9 (4.99 g, 10.00 mmol)를 사용하는 것을 제외하고는 합성예 1과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 C 90 (5.26 g, 수율 72%)을 얻었다.

[348] Mass : [(M+H)⁺] : 730

[349]

[350] [합성예 16] C 111의 합성

[351]



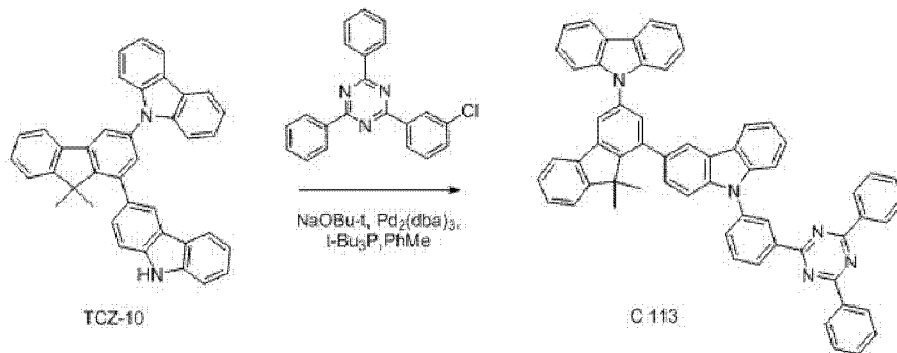
[352] TCZ-1 대신 TCZ-10 (5.25 g, 10.00 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 합성예 1과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 C 111 (5.37 g, 수율 71%)을 얻었다.

[353] Mass : [(M+H)⁺] : 756

[354]

[355] [합성예 17] C 113의 합성

[356]



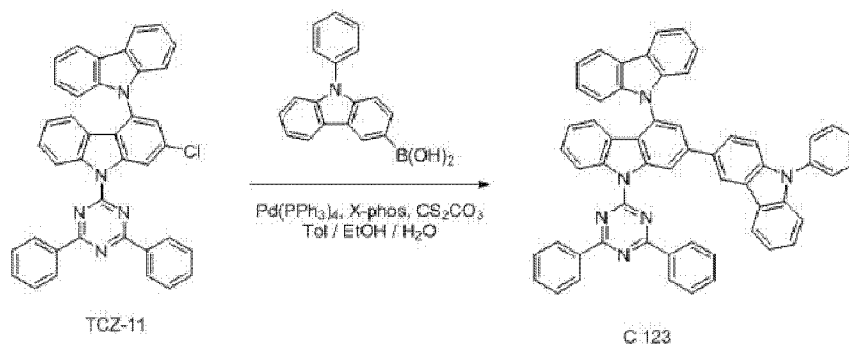
[357] TCZ-1 대신 TCZ-10 (5.25 g, 10.00 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 합성예 2와 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 C 113 (6.41 g, 수율 77%)을 얻었다.

[358] Mass : [(M+H)⁺] : 832

[359]

[360] [합성예 18] C 123의 합성

[361]



[362] 질소 기류 하에서 TCZ-11 (5.98 g, 10.0 mmol), (9-페닐-9H-카바졸-3-일)보론산 (2.87 g, 30.0 mmol), K₂CO₃ (4.27 g, 30.0 mmol), Pd(PPh₃)₄ (0.58 g, 5 mol%), X-Phos (0.8 g, 5.00 mmol)를 120 ml / 40 ml / 40 ml의 Tol/EtOH/H₂O를 넣고 90°C에서 12시간 동안 교반하였다. 반응 종결 후 메틸렌클로라이드로 추출하고 MgSO₄를 넣고 여과하였다. 여과된 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피를 이용하여 목적 화합물인 C 123 (4.51 g, 수율 56%)를 획득하였다.

[363] Mass : [(M+H)⁺] : 805

[364]

[365] [실시예 1 ~ 18] 녹색 유기 EL 소자의 제작

[366] 합성예 1~18에서 합성한 화합물 C 21 ~ C 123을 통상적으로 알려진 방법으로 고순도 승화정제를 한 후 아래의 과정에 따라 녹색 유기 EL 소자를 제작하였다.

[367] 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.

[368] 이렇게 준비된 ITO 투명 전극 위에 m-MTDATA (60 nm)/TCTA (80 nm)/ C 21 ~

[370]



[378] [표1]

샘플	호스트	구동 전압(V)	EL 피크(nm)	전류 효율(cd/A)
실시예 1	C 21	6.61	518	38.6
실시예 2	C 23	6.70	517	39.3
실시예 3	C 28	6.49	518	38.5
실시예 4	C 29	6.81	518	39.9
실시예 5	C 30	6.73	517	40.2
실시예 6	C 51	6.74	518	40.8
실시예 7	C 53	6.77	518	40.7
실시예 8	C 58	6.71	516	39.2
실시예 9	C 59	6.68	517	39.8
실시예 10	C 60	6.63	517	39.4
실시예 11	C 81	6.49	518	38.5
실시예 12	C 83	6.87	517	39.1
실시예 13	C 88	6.66	517	41.3
실시예 14	C 89	6.70	517	40.4
실시예 15	C 90	6.82	517	42.2
실시예 16	C 111	6.81	518	41.5
실시예 17	C 113	6.82	518	41.7
실시예 18	C 123	6.81	518	39.6
비교예 1	CBP	6.93	516	38.2

[379]

[380] 상기 표 1에 나타낸 바와 같이, 본 발명에 따른 화합물(C 21 ~ C 123)을 녹색 유기 EL 소자의 발광층으로 사용하였을 경우(실시예 1~18) 종래 CBP를 사용한 녹색 유기 EL 소자(비교예1)와 비교해 볼 때 효율 및 구동 전압 면에서 보다 우수한 성능을 나타내는 것을 알 수 있다.

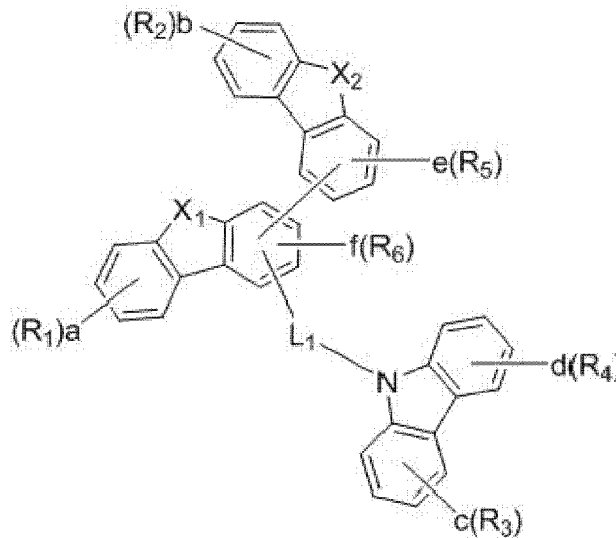
산업상 이용가능성

[381] 본 발명은 신규한 유기 발광 화합물 및 이를 이용한 유기 전계 발광 소자에 관한 것으로, 보다 상세하게는 열적 안정성 및 인광 특성 등이 우수한 신규한 카바졸계 화합물 및 이를 하나 이상의 유기물층에 포함하여 낮은 구동 전압과 높은 발광 효율 및 향상된 수명 특성을 갖는 유기 전계 발광 소자에 관한 것이다.

청구범위

[청구항 1] 하기 화학식 1로 표시되는 화합물:

[화학식 1]



상기 화학식 1에서,

X_1 및 X_2 는 각각 독립적으로 O, S, Se, N(Ar_1), C(Ar_2)(Ar_3) 및 Si(Ar_4)(Ar_5)로 구성된 군으로부터 선택되며, X_1 내지 X_2 중 적어도 하나는 N(Ar_1)이며;

L_1 은 단일결합, $C_6 \sim C_{40}$ 의 아릴렌기 및 핵원자수 5 내지 40개의 헤테로아릴렌기로 구성된 군에서 선택되며;

a, b, c 및 d는 각각 독립적으로 0 내지 4의 정수이고;

e는 0 내지 3의 정수이며;

f는 0 내지 2의 정수이며;

Ar_1 내지 Ar_5 는 각각 독립적으로 수소, 중수소(D), 할로젠, 시아노, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_2 \sim C_{40}$ 의 알케닐기, $C_2 \sim C_{40}$ 의 알키닐기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 40개의 헤테로아릴기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴옥시기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬옥시기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴아민기, $C_3 \sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬실릴기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬보론기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴보론기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬포스핀기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬포스피닐기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴포스핀기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 모노 또는

디아릴포스피닐기 및 $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴실릴기로 이루어진 군에서

선택되거나, 인접하는 기와 결합하여 축합 고리를 형성하고, 상기 Ar_1 내지 Ar_5 각각이 복수 개인 경우 이들은 서로 동일하거나 상이하며;

R_1 내지 R_6 는 각각 독립적으로 중수소(D), 할로젠, 시아노, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_2 \sim C_{40}$ 의 알케닐기, $C_2 \sim C_{40}$ 의 알키닐기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 40개의 헤테로아릴기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴옥시기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬옥시기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴아민기, $C_3 \sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬실릴기, $C_1 \sim C_{40}$ 의

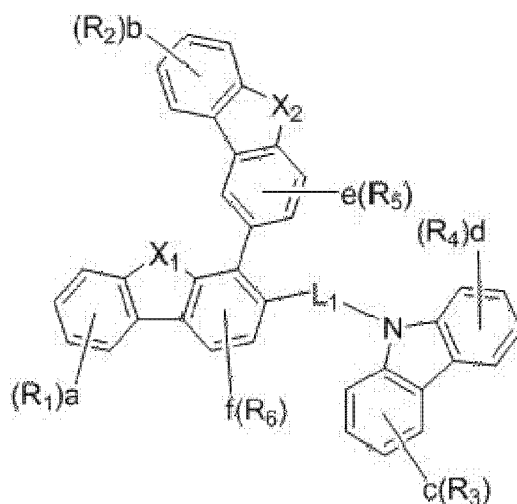
알킬보론기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴보론기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬포스핀기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬포스피닐기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴포스핀기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 모노 또는 디아릴포스피닐기, 및 $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택되거나, 인접하는 기와 결합하여 축합 고리를 형성할 수 있으며, 상기 R_1 내지 R_6 각각이 복수 개인 경우 이들은 서로 동일하거나 상이하며; 상기 L_1 의 아릴렌기 및 헤테로아릴렌기와 Ar_1 내지 Ar_5 및 R_1 내지 R_6 의 알킬기, 알케닐기, 알키닐기, 아릴기, 헤테로아릴기, 아릴옥시기, 알킬옥시기, 아릴아민기, 시클로알킬기, 헤테로시클로알킬기, 알킬실릴기, 알킬보론기, 아릴보론기, 알킬포스핀기, 알킬포스피닐기, 아릴포스핀기, 모노 또는 디아릴포스피닐기 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, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 40개의 헤테로아릴기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴옥시기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬옥시기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴아민기, $C_3 \sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬실릴기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬보론기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴보론기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬포스핀기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬포스피닐기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴포스핀기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴실릴기로 이루어진 군으로부터 선택되는 하나 이상의 치환기로 치환되거나 비치환되고, 복수 개의 치환기로 치환되는 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이하다.

[청구항 2]

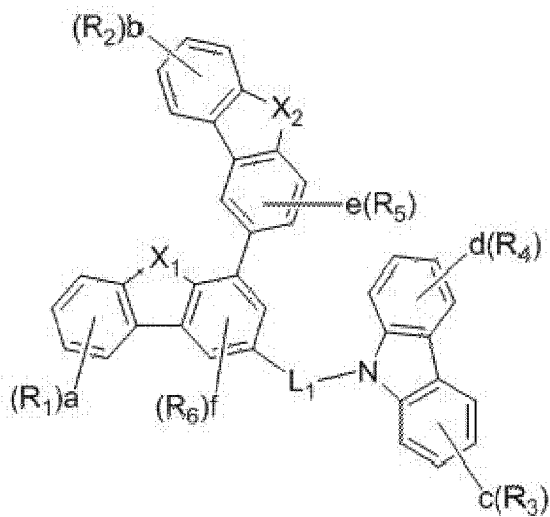
제1항에 있어서,

상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 하기 화학식 2 내지 화학식 7 중 어느 하나로 표시되는 화합물인 것을 특징으로 하는 화합물:

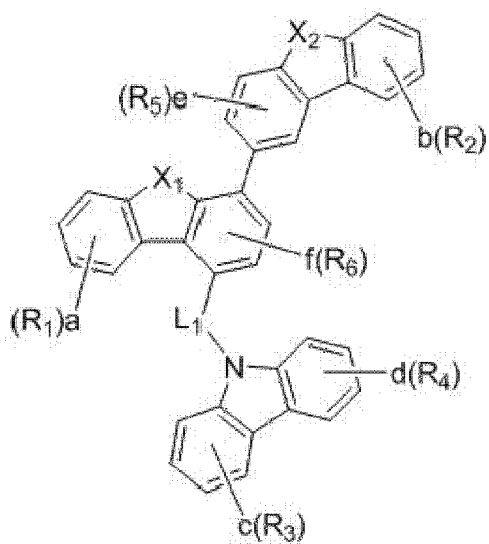
[화학식 2]



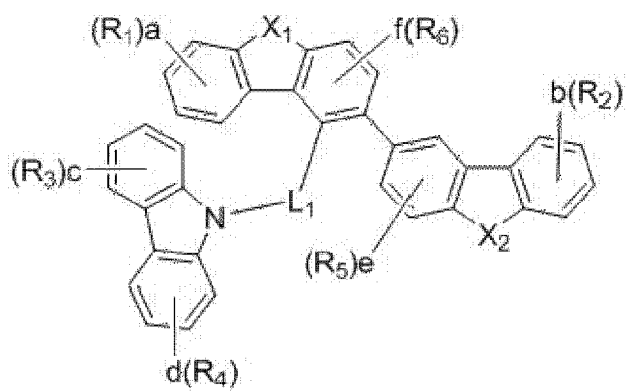
[화학식 3]



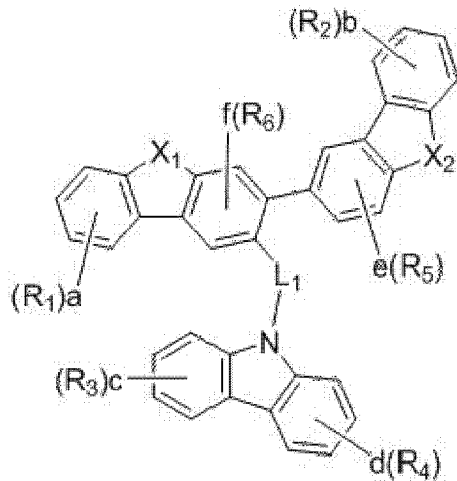
[화학식 4]



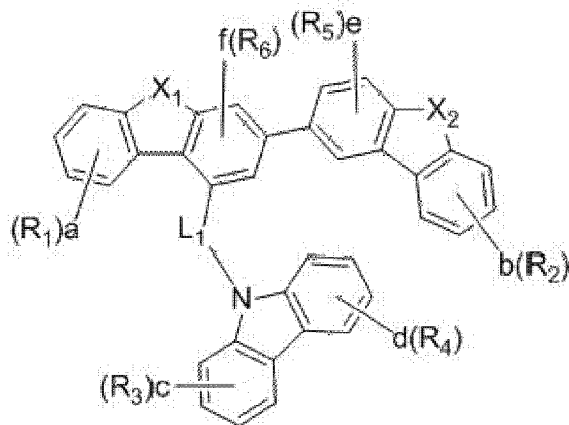
[화학식 5]



[화학식 6]



[화학식 7]



상기 화학식 2 내지 화학식 7에서,

L_1 , X_1 내지 X_2 , R_1 내지 R_6 , Ar_1 내지 Ar_5 및 a 내지 f 각각은 제1항에서 정의된 바와 같다.

[청구항 3] 제1항에 있어서,
 X_1 및 X_2 는 모두 $N(Ar_1)$ 이며, 복수의 Ar_1 은 서로 동일하거나 상이한 것을 특징으로 하는 화합물.

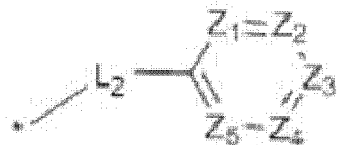
[청구항 4] 제1항에 있어서,
 상기 L_1 은 단일결합, 페닐렌기 또는 비페닐렌기인 것을 특징으로 하는 화합물.

[청구항 5] 제1항에 있어서,
 Ar_1 내지 Ar_5 는 각각 독립적으로 수소, 중수소(D), $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴기 및 핵원자수 5 내지 40개의 헤테로아릴기로 이루어진 군에서 선택되고;
 R_1 내지 R_4 는 각각 독립적으로 중수소(D), $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴기 및 핵원자수 5 내지 40개의 헤테로아릴기로 이루어진 군에서 선택되며;
 e 및 f는 모두 0인 것을 특징으로 하는 화합물.

[청구항 6] 제1항에 있어서,
 Ar_1 내지 Ar_5 및 R_1 내지 R_4 중 적어도 하나는 하기 화학식 8로 표시되는

치환기인 것을 특징으로 하는 화합물:

[화학식 8]



상기 화학식 8에서,

*는 상기 화학식 1에 결합되는 부분을 의미하고;

L_2 는 단일결합, $C_6 \sim C_{40}$ 의 아릴렌기 및 핵원자수 5 내지 40개의
헤테로아릴렌기로 이루어진 군에서 선택되며;

Z_1 내지 Z_5 는 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 N 또는 $C(R_{11})$
)이되, 상기 Z_1 내지 Z_5 중 적어도 하나는 N이고;

상기 R_{11} 이 복수 개인 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이하며, R_{11} 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, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 40개의

헤테로아릴기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴옥시기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬옥시기, $C_3 \sim C_{40}$ 의
시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, $C_6 \sim C_{60}$ 의
아릴아민기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬실릴기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬보론기, $C_6 \sim C_{60}$ 의
아릴보론기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴포스핀기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 모노 또는

디아릴포스피닐기 및 $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴실릴기로 이루어진 군에서
선택되거나, 인접하는 기와 결합하여 축합 고리를 형성하며;

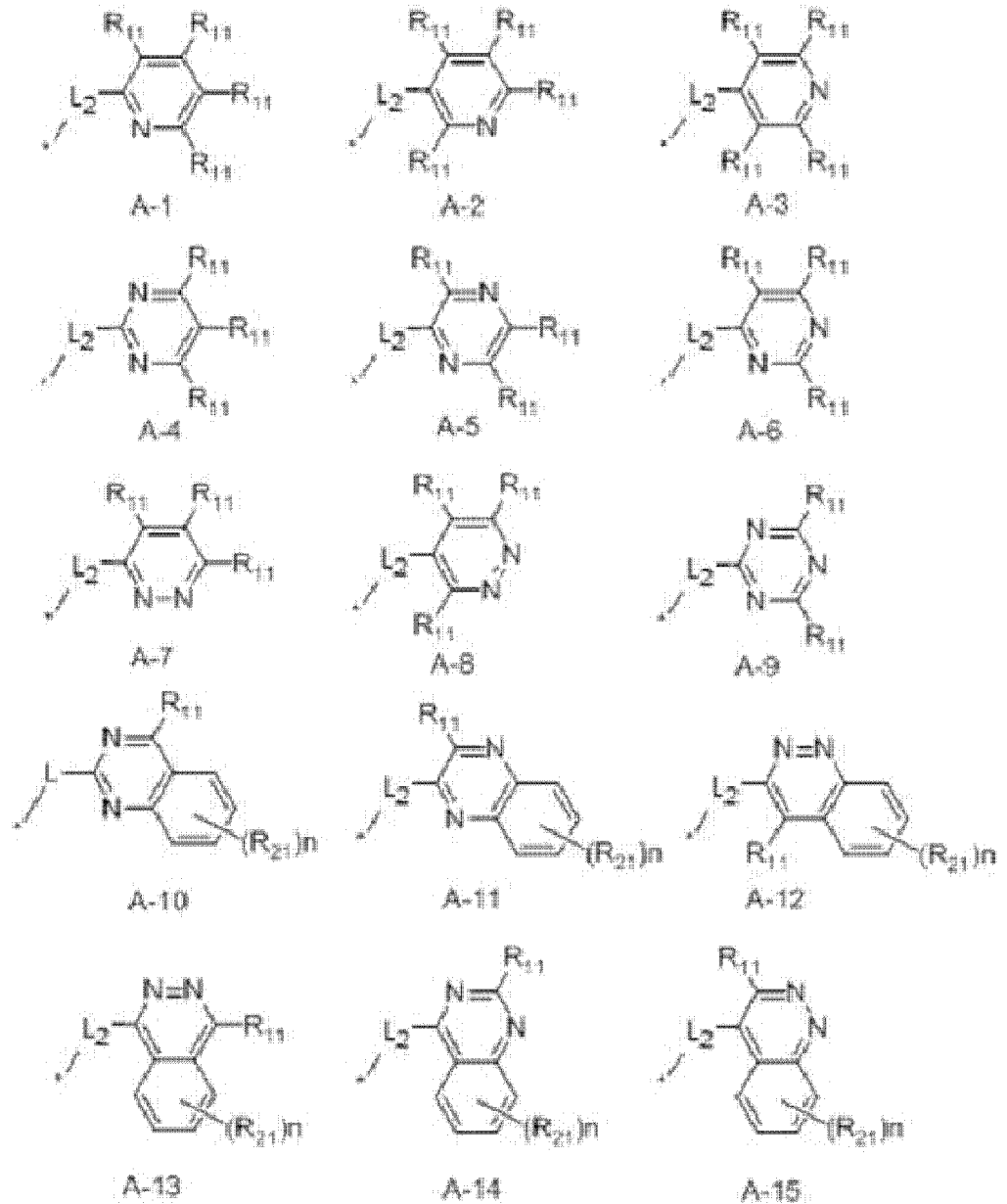
상기 R_{11} 의 알킬기, 알케닐기, 알키닐기, 아릴기, 헤테로아릴기,
아릴옥시기, 알킬옥시기, 시클로알킬기, 헤테로시클로알킬기,
아릴아민기, 알킬실릴기, 알킬보론기, 아릴보론기, 아릴포스핀기, 모노
또는 디아릴포스피닐기 및 아릴실릴기는 각각 독립적으로 중수소,

할로젠, 시아노기, 니트로기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_2 \sim C_{40}$ 의 알케닐기, $C_2 \sim C_{40}$
의 알키닐기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 40개의 헤테로아릴기, C_6
 $\sim C_{60}$ 의 아릴옥시기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬옥시기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴아민기, $C_3 \sim C_{40}$ 의
시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, $C_1 \sim C_{40}$ 의
알킬실릴기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬보론기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴보론기, $C_6 \sim C_{60}$ 의
아릴포스핀기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 $C_6 \sim C_{60}$ 의
아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상의 치환기로 치환되거나
비치환되고, 복수 개의 치환기로 치환되는 경우, 이들은 서로 동일하거나
상이하다.

[청구항 7]

제6항에 있어서,

상기 화학식 8로 표시되는 치환기는 하기 화학식 A-1 내지 화학식 A-15 중
어느 하나로 표시되는 치환기인 것을 특징으로 하는 화합물:



상기 화학식 A-1 내지 A-15 에서,

*는 결합이 이루어지는 부분을 의미하고;

n 은 0 내지 4의 정수로서, 상기 n 이 0인 경우, 수소가 치환기 R_{21} 로 치환되지 않는 것을 의미하고, 상기 n 이 1 내지 4의 정수인 경우, R_{21} 은 중수소, 할로젠, 시아노기, 니트로기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_2 \sim C_{40}$ 의 알케닐기, $C_2 \sim C_{40}$ 의 알키닐기, $C_3 \sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 40개의 헤테로아릴기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴옥시기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬옥시기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴아민기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬실릴기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬보론기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴보론기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴포스핀기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴실릴기로 이루어진 군에서

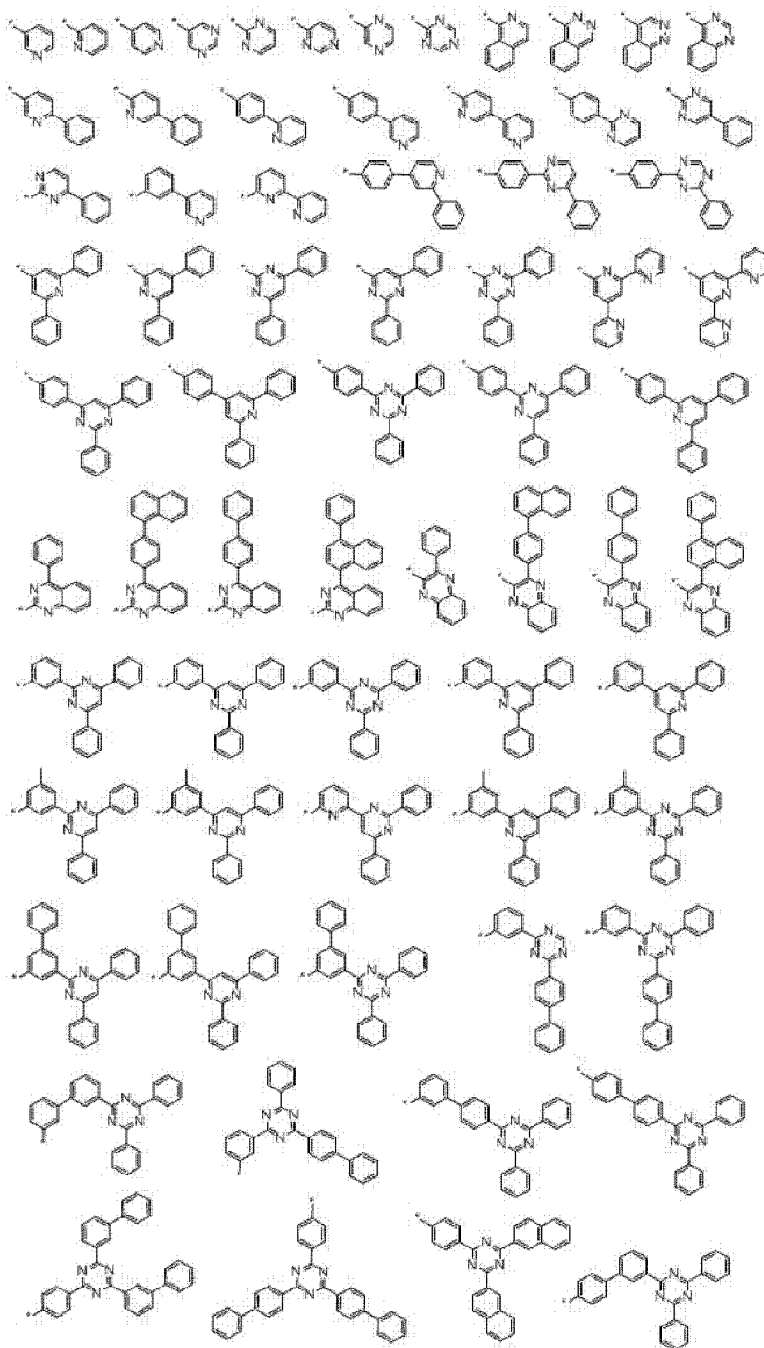
선택되거나, 인접하는 기와 결합하여 축합 고리를 형성하며, 상기 R_{21} 이 복수 개인 경우 이들은 서로 동일하거나 상이하며;
 상기 R_{21} 의 알킬기, 알케닐기, 알키닐기, 시클로알킬기, 헤테로시클로알킬기, 아릴기, 헤테로아릴기, 아릴옥시기, 알킬옥시기, 아릴아민기, 알킬실릴기, 알킬보론기, 아릴보론기, 아릴포스핀기, 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 아릴실릴기는 각각 독립적으로 중수소, 할로젠, 시아노기, 니트로기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_2\sim C_{40}$ 의 알케닐기, $C_2\sim C_{40}$ 의 알키닐기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 40의 헤테로아릴기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴옥시기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬옥시기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴아민기, $C_3\sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40개의 헤테로시클로알킬기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬실릴기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬보론기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴보론기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴포스핀기, $C_6\sim C_{60}$ 의 모노 또는 디아릴포스피닐기 및 $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상의 치환기로 치환되거나 비치환되고, 복수 개의 치환기로 치환되는 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이하며;

L_2 및 R_{11} 은 각각 제6항에서 정의된 바와 같다.

[청구항 8]

제7항에 있어서,

상기 화학식 A-1 내지 A-5 중 어느 하나로 표시되는 치환기는 아래의 치환기로 이루어진 군에서 선택되는 것을 특징으로 하는 화합물:

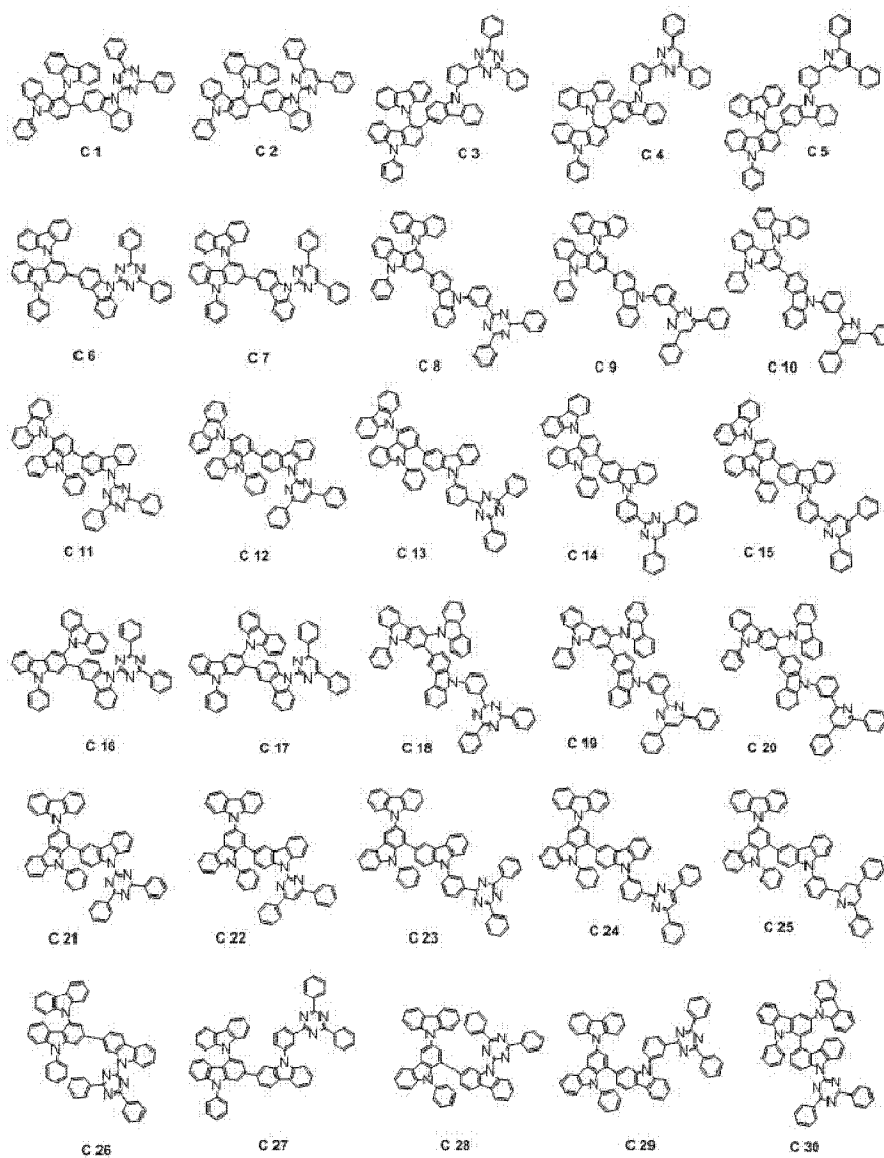


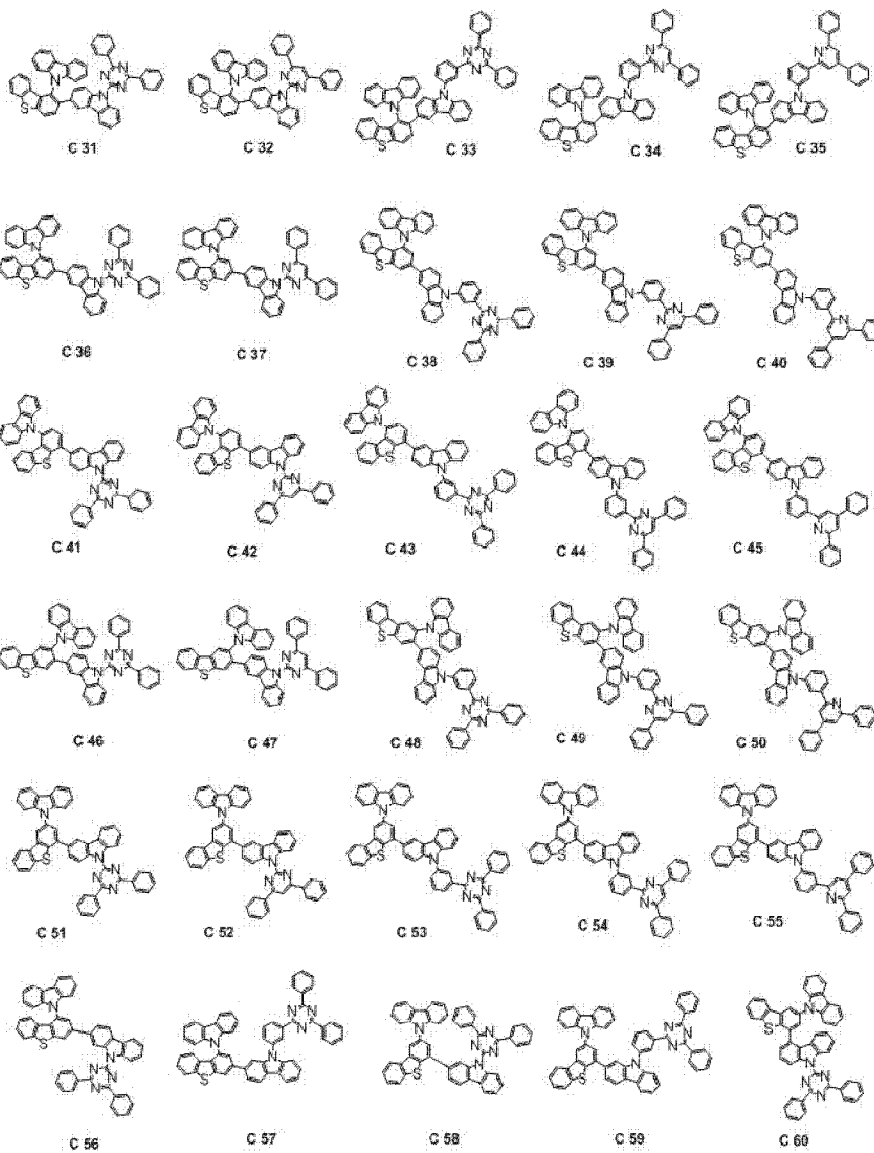
상기 치환기에서, *는 결합이 이루어지는 부분을 의미한다.

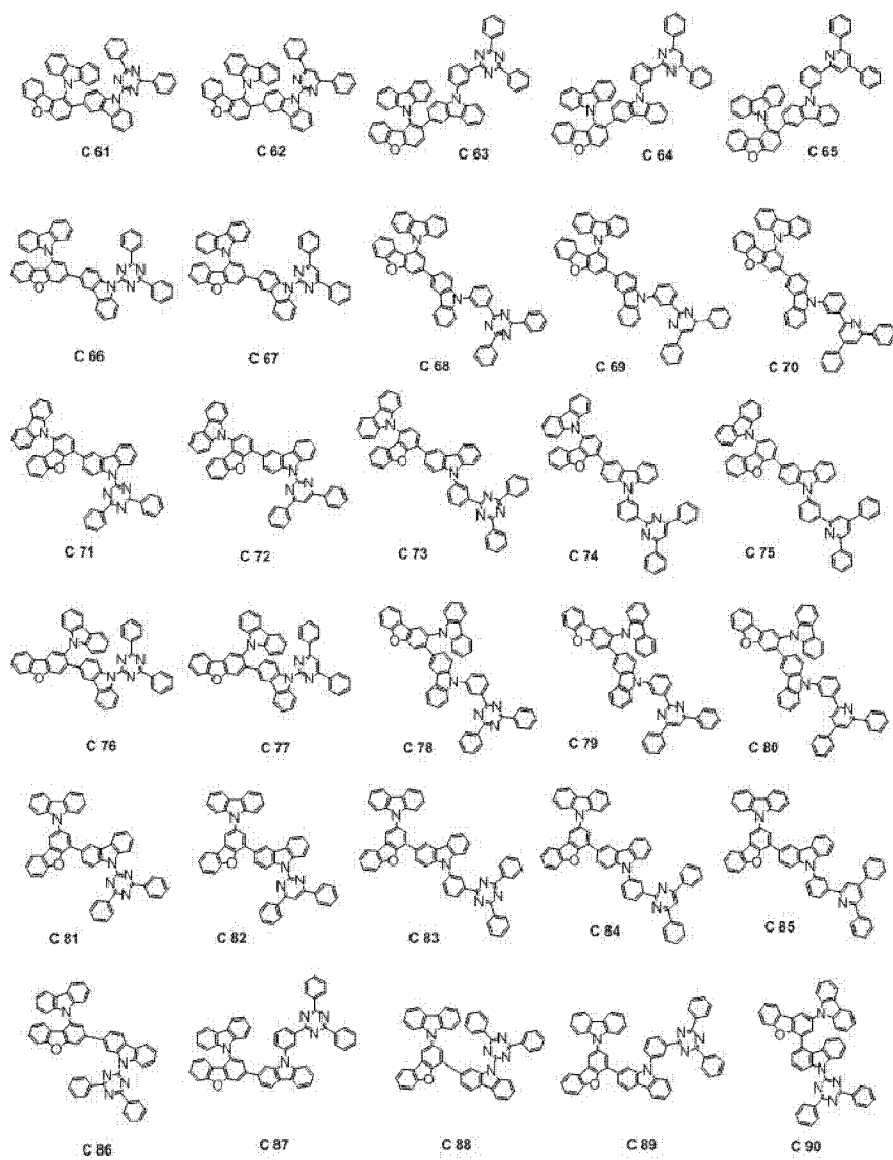
[청구항 9]

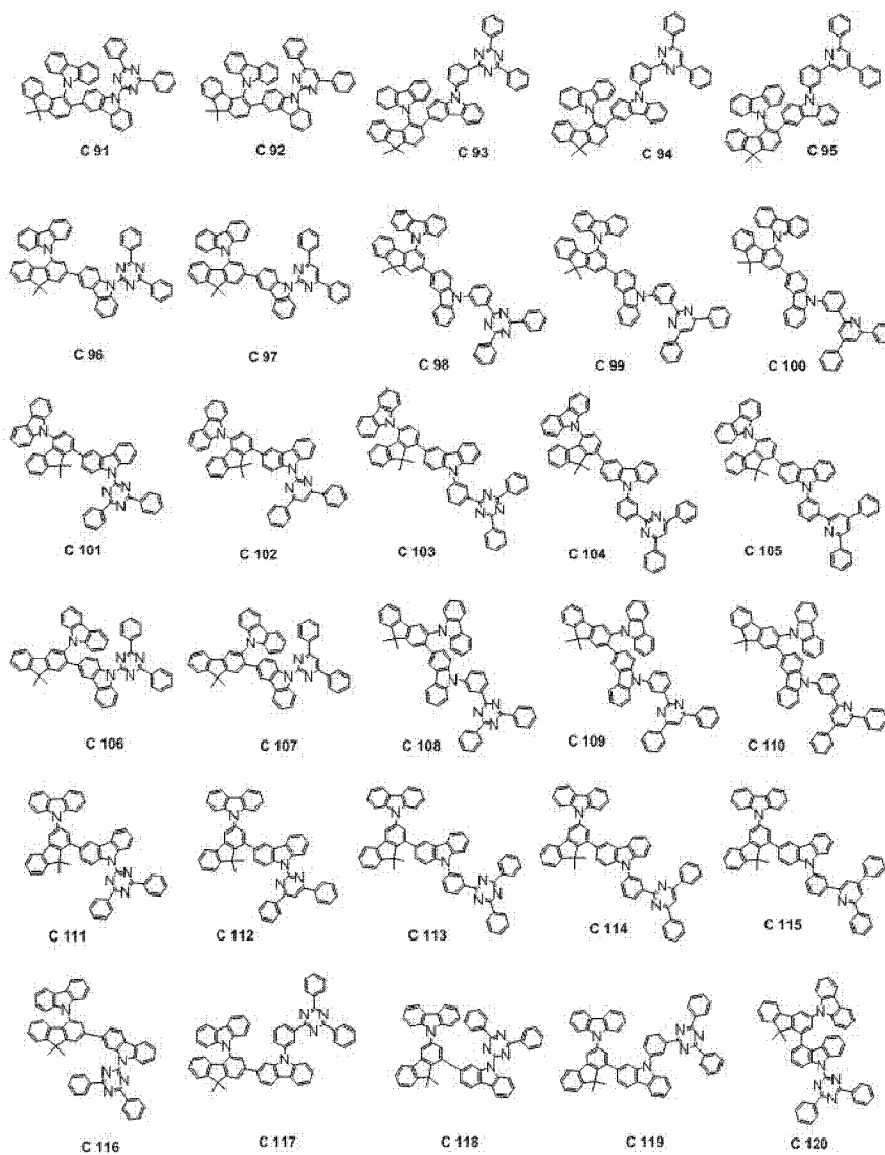
제1항에 있어서,

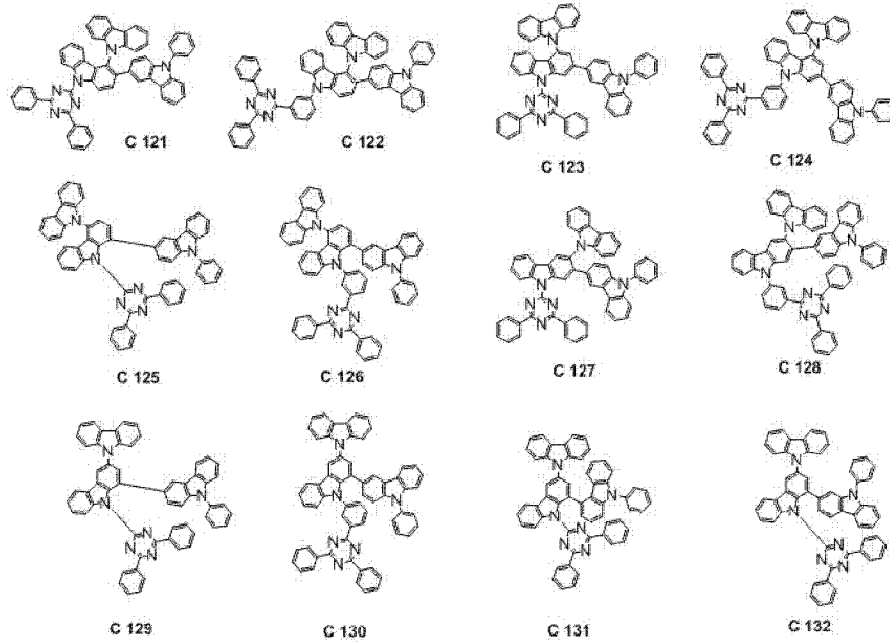
상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 아래의 화합물로 이루어진 군에서 선택되는 것을 특징으로 하는 화합물:











- [청구항 10] (i) 양극, (ii) 음극 및 (iii) 상기 양극과 음극 사이에 개재(介在)된 1층 이상의 유기물층을 포함하며,
상기 1층 이상의 유기물층 중 적어도 하나는 제1항 내지 제9항 중 어느 한 항에 기재된 화합물을 포함하는 것이 특징인 유기 전계 발광 소자.
- [청구항 11] 제10항에 있어서,
상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하는 유기물층은 발광층, 발광 보조층, 정공 수송층, 정공 주입층, 전자 수송층 및 전자 주입층으로 이루어진 군에서 선택되는 것을 특징으로 하는 유기 전계 발광 소자.
- [청구항 12] 제11항에 있어서,
상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하는 유기물층은 발광층인 것이 특징인 유기 전계 발광 소자.
- [청구항 13] 제12항에 있어서,
상기 화합물은 발광층의 인광 호스트로 사용되는 유기 전계 발광 소자.