

(12) 특허협력조약에 의하여 공개된 국제출원

(19) 세계지식재산권기구
국제사무국

(43) 국제공개일
2015년 7월 2일 (02.07.2015)



(10) 국제공개번호
WO 2015/099477 A2

(51) 국제특허분류:
C07D 487/14 (2006.01)

(21) 국제출원번호: PCT/KR2014/012881

(22) 국제출원일: 2014년 12월 26일 (26.12.2014)

(25) 출원언어: 한국어

(26) 공개언어: 한국어

(30) 우선권정보:
10-2013-0166100 2013년 12월 27일 (27.12.2013) KR

(71) 출원인: 주식회사 두산 (DOOSAN CORPORATION)
[KR/KR]; 100-730 서울시 중구 장충단로 275, Seoul (KR).

(72) 발명자: 김홍석 (KIM, Hongsuk); 448-160 경기도 용인시 수지구 대지로 77, 101동 702호 (죽전동, 휴먼빌 아파트), Gyeonggi-do (KR). 김영배 (KIM, Young Bae); 445-772 경기도 화성시 효행로 291번길 26, 107동 702호 (기안동, 신일해피트리아파트), Gyeonggi-do (KR). 이창준 (LEE, Chang Jun); 425-722 경기도 안산시 단원구 당곡1로 10, 535-404 (고잔동, 주공 5단지아파트), Gyeonggi-do (KR). 신진용 (SHIN, Jinyong); 448-515 경기도 용인시 수지구 침곡로 16, 505동 1007호 (상현동, 서원마을금회베스트빌 5단지아파트), Gyeonggi-do (KR). 라종규 (LA, Jonggyu); 425-080 경기도 안산시 단원구 초지2로 41, 1513동 605호 (초지동, 그린빌 15단지), Gyeonggi-do (KR). 김태형 (KIM, Tae Hyung); 463-786 경기도 성남시 분당구 내정로 55 326동 1201호 (정자동, 상록마을우성아파트), Gyeonggi-do (KR). 백영미 (BEAK, Youngmi); 448-737 경기도 용인시 수지

구 성북2로 76번길 31, 105동 1104호 (성북동, 대우푸르지오아파트), Gyeonggi-do (KR).

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

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

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

공개:

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

(54) Title: ORGANIC COMPOUND AND ORGANIC LIGHT-EMITTING DIODE DEVICE USING SAME

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

(57) Abstract: The present invention relates to an organic compound and an organic light-emitting diode device comprising the same. The compound according to the present invention can be used for an organic layer of an organic light-emitting diode device preferably for a light-emitting layer, and can thereby improve light-emission efficiency, driving voltage and life expectancy of the organic light-emitting diode device.

(57) 요약서: 본 발명은 유기 화합물 및 이를 포함하는 유기 전계 발광 소자에 관한 것으로서, 본 발명에 따른 화합물은 유기 전계 발광 소자의 유기물층, 바람직하게는 발광층에 사용됨에 따라 유기 전계 발광 소자의 발광효율, 구동전압, 수명 등을 향상시킬 수 있다.



WO 2015/099477 A2

명세서

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

- [1] 본 발명은 신규한 유기 화합물 및 상기 화합물을 포함하는 유기 전계 발광 소자에 관한 것이다.

배경기술

- [2] 유기 전계 발광 소자는 두 전극 사이에 전압을 걸어 주면 양극에서는 정공이 유기물층으로 주입되고, 음극에서는 전자가 유기물층으로 주입된다. 주입된 정공과 전자가 만났을 때 엑시톤(exciton)이 형성되며, 이 엑시톤이 바닥상태로 떨어질 때 빛이 나게 된다. 상기 유기물층에 포함되는 물질은 그 기능에 따라, 발광 물질, 정공 주입 물질, 정공 수송 물질, 전자 수송 물질, 전자 주입 물질 등으로 분류될 수 있다.
- [3] 상기 발광 물질은 발광색에 따라 청색, 녹색, 적색의 발광 물질과, 보다 나은 천연색을 구현하기 위해 필요한 노란색 및 주황색의 발광 물질로 구분될 수 있다. 또한 색순도의 증가와 에너지 전이를 통해 발광 효율을 증가시키기 위하여 발광 물질로서 호스트/도판트 계를 사용할 수 있다.
- [4] 도판트 물질은 유기 물질을 사용하는 형광 도판트와 Ir, Pt 등의 중원자(heavy atoms)가 포함된 금속 착체 화합물을 사용하는 인광 도판트로 나눌 수 있다. 이때 인광 도판트는 이론적으로 형광 도판트에 비해 최대 4배의 발광 효율을 향상시킬 수 있기 때문에 인광 도판트 뿐만 아니라 인광 호스트에 대한 연구가 많이 진행되고 있다.
- [5] 현재 발광층에 사용되는 형광 도판트/호스트 물질로는 안트라센 유도체들이 알려져 있다. 또한 발광층에 사용되는 인광 도판트 물질로는 Firpic, Ir(ppy)₃, (acac)Ir(btp)₂ 등의 Ir을 포함하는 금속 착체 화합물이 알려져 있고, 인광 호스트 물질로는 4,4-dicarbazolybiphenyl(CBP)가 알려져 있다.
- [6] 그러나 기존의 재료들은 유리전이온도가 낮고 열적 안정성이 좋지 않아 유기 전계 발광 소자에서의 수명 측면에서 만족할만한 수준이 되지 못하고 있으며, 발광 특성 측면에서도 여전히 개선이 필요하다.

발명의 상세한 설명

기술적 과제

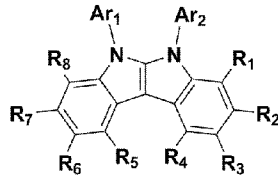
- [7] 상기한 문제점을 해결하기 위해 본 발명은 유리 전이온도가 높으며 열적 안정성이 우수하고, 발광 특성이 개선된 신규 유기 화합물을 제공하는 것을 목적으로 한다.
- [8] 또 본 발명은 상기 유기 화합물을 포함하는 유기 전계 발광 소자를 제공하는 것을 목적으로 한다.

과제 해결 수단

[9] 상기 목적을 달성하기 위하여 본 발명은 하기 화학식 1 또는 2로 표시되는 화합물을 제공한다.

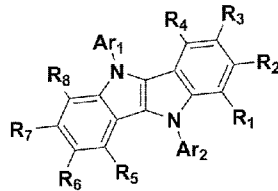
[10] [화학식 1]

[11]



[12] [화학식 2]

[13]

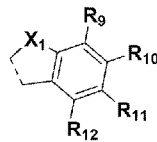


[14] 상기 화학식 1 또는 2에서,

[15] R₁과 R₂, R₂와 R₃, R₃과 R₄, R₅와 R₆, R₆과 R₇, 또는 R₇와 R₈ 중 적어도 하나는 서로 결합하여 하기 화학식 3으로 표시되는 축합 고리를 형성하고,

[16] [화학식 3]

[17]



[18] 상기 화학식 3에서,

[19] 점선은 상기 화학식 1 또는 2와 축합이 이루어지는 부분이고,

[20] X₁은 C(Ar₃)(Ar₄), N(Ar₅), O, S 및 Si(Ar₆)(Ar₇)로 이루어진 군에서 선택되며,

[21] 축합 고리를 형성하는 것을 제외한 R₁ 내지 R₁₂는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 시아노기, 니트로기, C₁~C₄₀의 알킬기, C₂~C₄₀의 알케닐기, C₂~C₄₀의 알키닐기, C₃~C₄₀의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, C₆~C₆₀의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴기, C₁~C₄₀의 알킬옥시기, C₆~C₆₀의 아릴옥시기, C₃~C₄₀의 알킬실릴기, C₆~C₆₀의 아릴실릴기, C₁~C₄₀의 알킬보론기, C₆~C₆₀의 아릴보론기, C₆~C₆₀의 아릴포스핀기, C₆~C₆₀의 아릴포스핀옥사이드기 및 C₆~C₆₀의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택되거나, 인접한 기와 결합하여 축합 고리를 형성할 수 있으며,

[22] Ar₁ 내지 Ar₇은 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, C₃~C₄₀의 알킬실릴기, C₆~C₆₀의 아릴실릴기, C₁~C₄₀의 알킬보론기, C₆~C₆₀의 아릴보론기, C₆~C₆₀의 아릴포스핀기, C₆~C₆₀의 아릴포스핀옥사이드기 및 C₆~C₆₀의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택되고,

[23] 상기 R₁ 내지 R₁₂ 및 Ar₁ 내지 Ar₇의 알킬기, 알케닐기, 알키닐기, 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, $C_3 \sim C_{40}$ 의 알킬실릴기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴실릴기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬보론기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴보론기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴포스핀기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴포스핀옥사이드기 및 $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상으로 치환 또는 비치환된다. 이때, R_1 내지 R_{12} 및 Ar_1 내지 Ar_7 이 복수의 치환기로 치환될 경우, 복수의 치환기는 서로 동일하거나 상이하다.

- [24] 또한, 본 발명은 양극, 음극 및 상기 양극과 음극 사이에 개재(介在)된 1층 이상의 유기물층을 포함하는 유기 전계 발광 소자로서, 상기 1층 이상의 유기물층 중 적어도 하나는 상기 화학식 1 또는 2로 표시되는 화합물을 포함하는 유기 전계 발광 소자를 제공한다.
- [25] 본 발명에서 알킬은 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.
- [26] 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.
- [27] 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.
- [28] 본 발명에서 아릴은 단독 고리 또는 2 이상의 고리가 조합된 탄소수 6 내지 60의 방향족 탄화수소로부터 유래된 1가의 치환기를 의미한다. 또한, 2 이상의 고리가 서로 단순 부착(pendant)되거나 축합된 형태도 포함될 수 있다. 이러한 아릴의 예로는 페닐, 나프틸, 페난트릴, 안트릴 등을 들 수 있으나, 이에 한정되지는 않는다.
- [29] 본 발명에서 헤테로아릴은 핵원자수 5 내지 60의 모노헤테로사이클릭 또는 폴리헤테로사이클릭 방향족 탄화수소로부터 유래된 1가의 치환기를 의미한다. 이때, 고리 중 하나 이상의 탄소, 바람직하게는 1 내지 3개의 탄소가 N, O, S 또는 Se와 같은 헤테로원자로 치환된다. 또한, 2 이상의 고리가 서로 단순 부착(pendant)되거나 축합된 형태도 포함될 수 있고, 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-푸라닐, N-이미다졸릴, 2-이속사졸릴, 2-피리디닐, 2-피리미디닐 등을 들 수 있으나, 이에 한정되지는 않는다.

- [30] 본 발명에서 아릴옥시는 RO-로 표시되는 1가의 치환기로, 상기 R은 탄소수 6 내지 60의 아릴을 의미한다. 이러한 아릴옥시의 예로는 페닐옥시, 나프틸옥시, 디페닐옥시 등을 들 수 있으나, 이에 한정되지는 않는다.
- [31] 본 발명에서 알킬옥시는 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.
- [32] 본 발명에서 아릴아민은 탄소수 6 내지 60의 아릴로 치환된 아민을 의미한다.
- [33] 본 발명에서 시클로알킬은 탄소수 3 내지 40의 모노사이클릭 또는 폴리사이클릭 비-방향족 탄화수소로부터 유래된 1가의 치환기를 의미한다. 이러한 사이클로알킬의 예로는 사이클로프로필, 사이클로펜틸, 사이클로헥실, 노르보닐(norbornyl), 아다만틴(adamantine) 등을 들 수 있으나, 이에 한정되지는 않는다.
- [34] 본 발명에서 헤테로시클로알킬은 핵원자수 3 내지 40의 비-방향족 탄화수소로부터 유래된 1가의 치환기를 의미하며, 고리 중 하나 이상의 탄소, 바람직하게는 1 내지 3개의 탄소가 N, O, S 또는 Se와 같은 헤테로 원자로 치환된다. 이러한 헤테로시클로알킬의 예로는 모르폴린, 피페라진 등을 들 수 있으나, 이에 한정되지는 않는다.
- [35] 본 발명에서 알킬실릴은 탄소수 1 내지 40의 알킬로 치환된 실릴이고, 아릴실릴은 탄소수 6 내지 60의 아릴로 치환된 실릴을 의미한다.
- [36] 본 발명에서 축합 고리는 축합 지방족 고리, 축합 방향족 고리, 축합 헤테로지방족 고리, 축합 헤테로방향족 고리 또는 이들의 조합된 형태를 의미한다.

발명의 실시를 위한 형태

- [37] 이하, 본 발명을 설명한다.
- [38]
- [39] **1. 신규 유기 화합물**
- [40] 본 발명의 화합물은 인돌로인돌 모이어티를 기본 골격으로 하여 축합(fused) 탄소고리 (바람직하게는 축합 헤테로환 모이어티)가 연결되고, 다양한 치환체가 결합된 것으로, 상기 화학식 1 또는 2로 표시된다.
- [41] 이러한 본 발명의 화학식 1 또는 2로 표시되는 화합물은 기본 골격에 도입되는

치환기의 종류에 따라 HOMO 및 LUMO 에너지 레벨이 조절되어 넓은 밴드갭 및 우수한 캐리어 수송성을 나타낼 수 있다. 따라서 본 발명의 화학식 1 또는 2로 표시되는 화합물은 유기 전계 발광 소자의 유기물층 재료로 유용하게 적용될 수 있다.

[42] 예를 들어, 상기 화학식 1 또는 2로 표시되는 화합물의 기본 골격에 질소 함유 헤테로환(예컨대, 피리딘기, 피리미딘기, 트리아진기등)과 같이 전자 흡수성이 큰 전자 끌개기(EWG)가 결합될 경우, 분자 전체가 바이폴라(bipolar) 특성을 가져 정공과 전자의 결합력을 높일 수 있기 때문에 유기 전계 발광 소자의 발광층에서 호스트로 유리하다. 또한 전자 끌개기가 도입된 상기 화학식 1 또는 2로 표시되는 화합물은 캐리어 수송성이 우수하기 때문에 유기 전계 발광 소자의 전자주입층 또는 전자수송층에도 유용하다.

[43] 한편 상기 화학식 1 또는 2로 표시되는 화합물의 기본 골격에 아릴아민기, 카바졸기, 터페닐기, 트리페닐렌기 등과 같이 전자 공여성이 큰 전자 주개기(EDG)가 결합될 경우, 정공의 주입 및 수송이 원활하게 이루어지기 때문에 유기 전계 발광 소자의 정공주입/수송층 또는 발광 보조층 재료로도 유용하다.

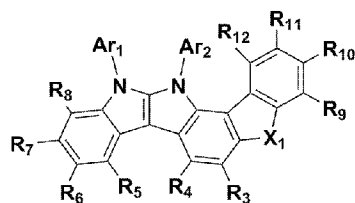
[44] 또한 상기 화학식 1 또는 2로 표시되는 화합물은 기본 골격에 다양한 치환체, 특히 아릴기 및/또는 헤테로아릴기가 도입되어 화합물의 분자량이 유의적으로 되기 때문에 유리 전이온도가 높아 종래의 유기물층 재료(예를 들어, CBP)보다 열적 안정성이 우수하다. 또 상기 화학식 1 또는 2로 표시되는 화합물은 유기물층의 결정화 억제에도 효과가 있다.

[45] 따라서, 본 발명의 화학식 1 또는 2로 표시되는 화합물을 유기물층에 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.

[46] 이러한 본 발명의 화학식 1로 표기되는 화합물은 하기 화학식 4 내지 9로 표시되는 화합물로 이루어진 군에서 선택되는 것이 바람직하다.

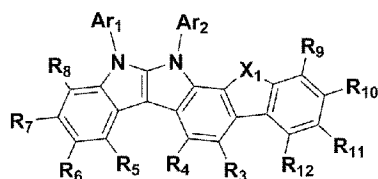
[47] [화학식 4]

[48]



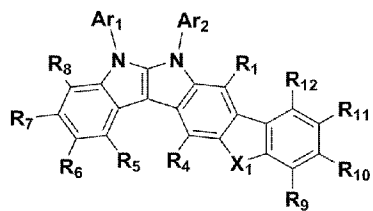
[49] [화학식 5]

[50]



[51] [화학식 6]

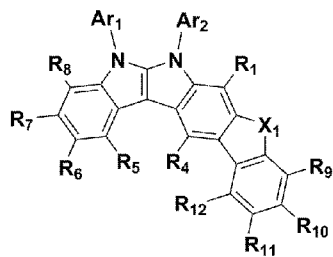
[52]



[53]

[화학식 7]

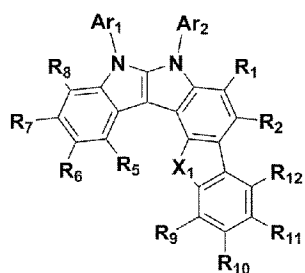
[54]



[55]

[화학식 8]

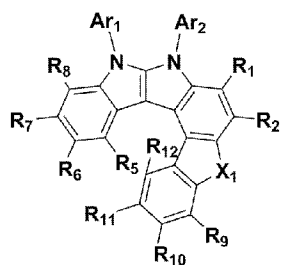
[56]



[57]

[화학식 9]

[58]



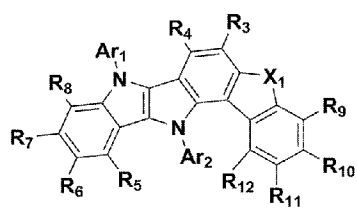
[59] 상기 화학식 4 내지 9에서, Ar₁, Ar₂, X₁ 및 R₁ 내지 R₁₂는 상기에서 정의한 바와 동일하다.

[60] 또한 본 발명의 화학식 2로 표시되는 화합물은 하기 화학식 10 내지 15로 표시되는 화합물로 이루어진 군에서 선택되는 것이 바람직하다.

[61]

[화학식 10]

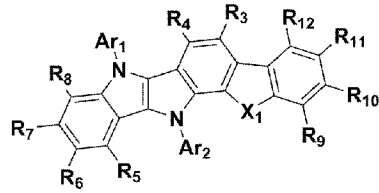
[62]



[63]

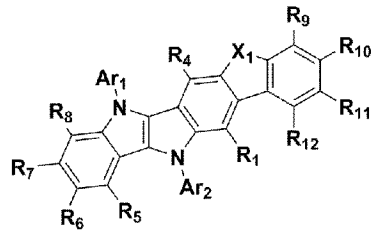
[화학식 11]

[64]



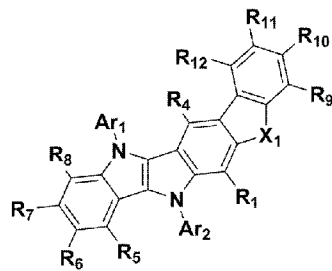
[65] [화학식 12]

[66]



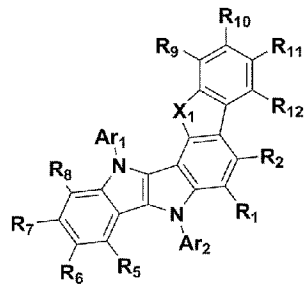
[67] [화학식 13]

[68]



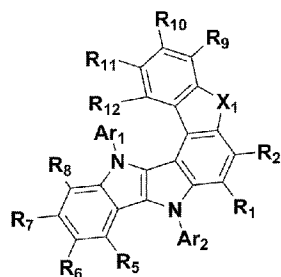
[69] [화학식 14]

[70]



[71] [화학식 15]

[72]



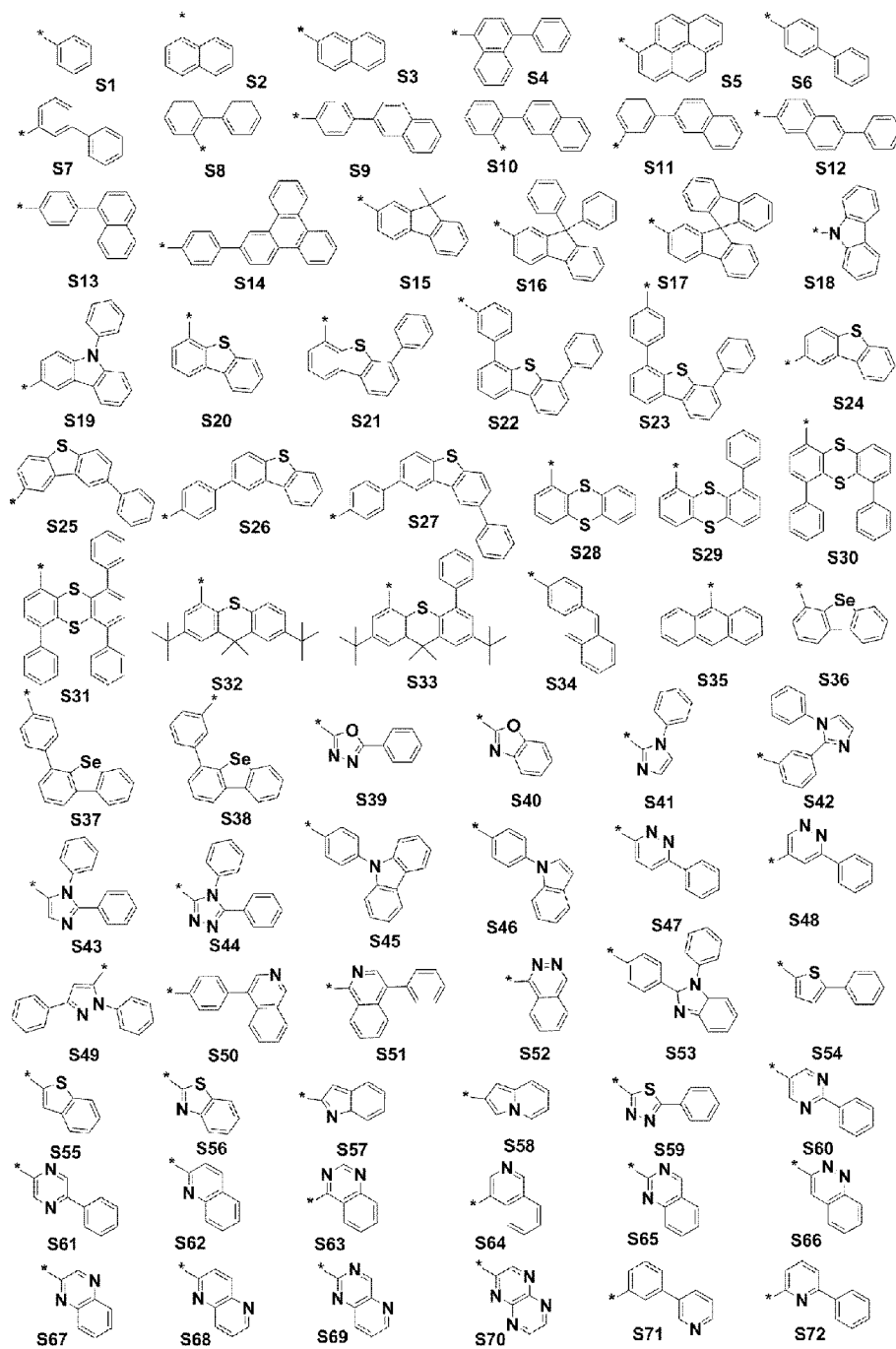
[73] 상기 화학식 10 내지 15에서,

[74] Ar₁, Ar₂, X₁ 및 R₁ 내지 R₁₂은 상기에서 정의한 바와 동일하다.

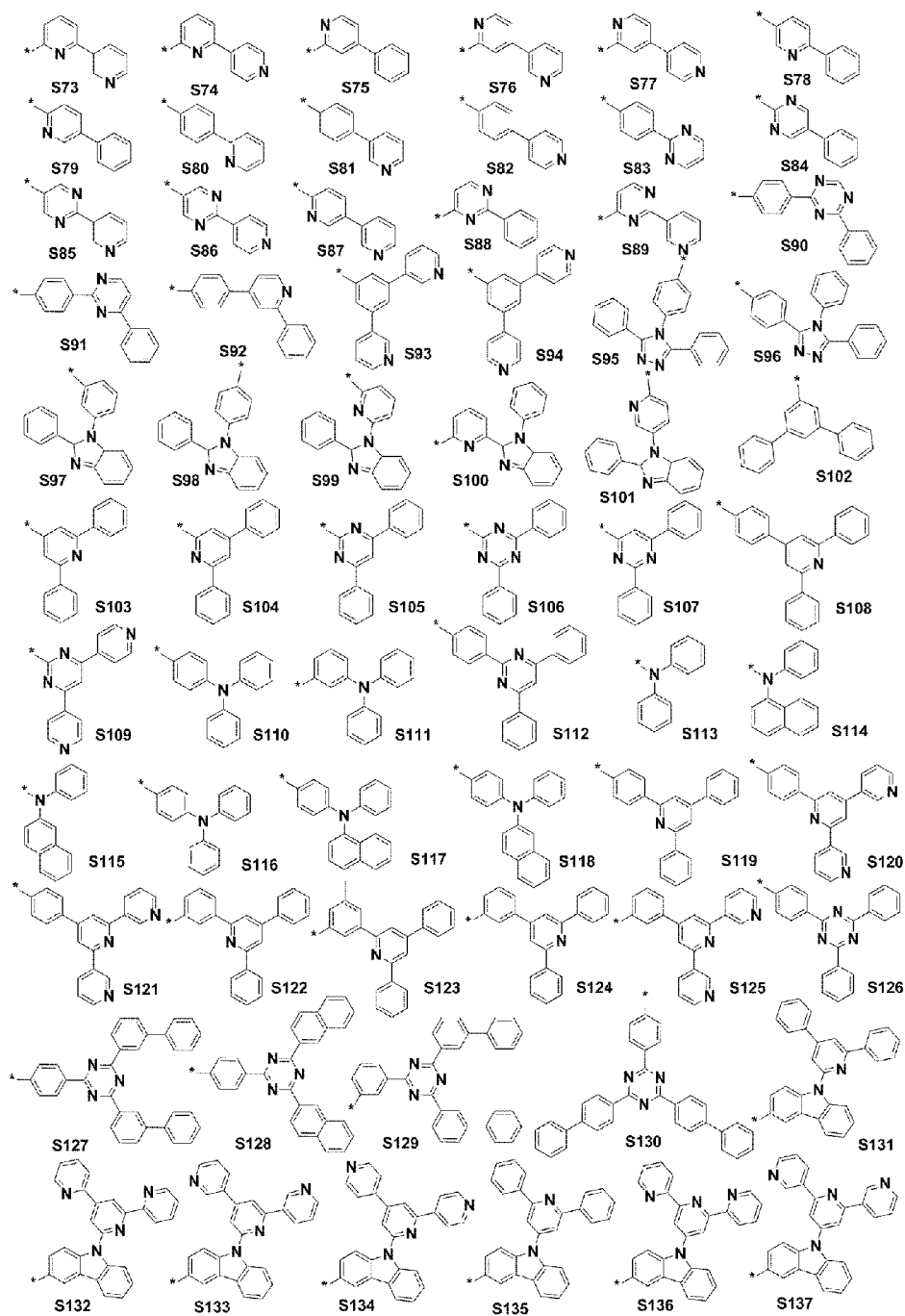
[75] 상기 화학식 4 내지 화학식 15로 표시되는 화합물에서 R₅와 R₆, R₆과 R₇, 또는 R₇와 R₈ 중 하나는 서로 결합하여 상기 화학식 3과 같은 축합 고리를 형성하거나 형성하지 않을 수 있다.

- [76] 이러한 본 발명의 화학식 1 또는 2로 표시되는 화합물은, X_1 이 $C(Ar_3)(Ar_4)$, $N(Ar_5)$, O, S 및 $Si(Ar_6)(Ar_7)$ 로 이루어진 군에서 선택되는데, 유기 전계 발광 소자의 특성을 고려할 때 X_1 은 $N(Ar_5)$ 인 것이 바람직하다.
- [77] 또한 화합물의 넓은 밴드갭과 열적 안정성을 고려했을 때, 본 발명의 화학식 1 또는 2로 표시되는 화합물에서 Ar_1 , Ar_2 및 Ar_3 는 각각 독립적으로 $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴기, 또는 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴기인 것이 바람직하다.
- [78] 또한 본 발명의 화학식 1 또는 2로 표시되는 화합물에서, 축합 고리를 형성하는 것을 제외한 R_1 내지 R_{12} 는 각각 독립적으로 수소, 할로젠, 시아노기, 니트로기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴기 및 $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택되는 것이 바람직하다.
- [79] 구체적으로, 본 발명의 화학식 1 또는 2로 표시되는 화합물에서, Ar_1 내지 Ar_7 및 축합 고리를 형성하는 것을 제외한 R_1 내지 R_{12} 는 각각 독립적으로 수소, 또는 하기 S1 내지 S204로 표시되는 구조(치환체)로 이루어진 군에서 선택될 수 있으나 이에 한정되는 것은 아니다.

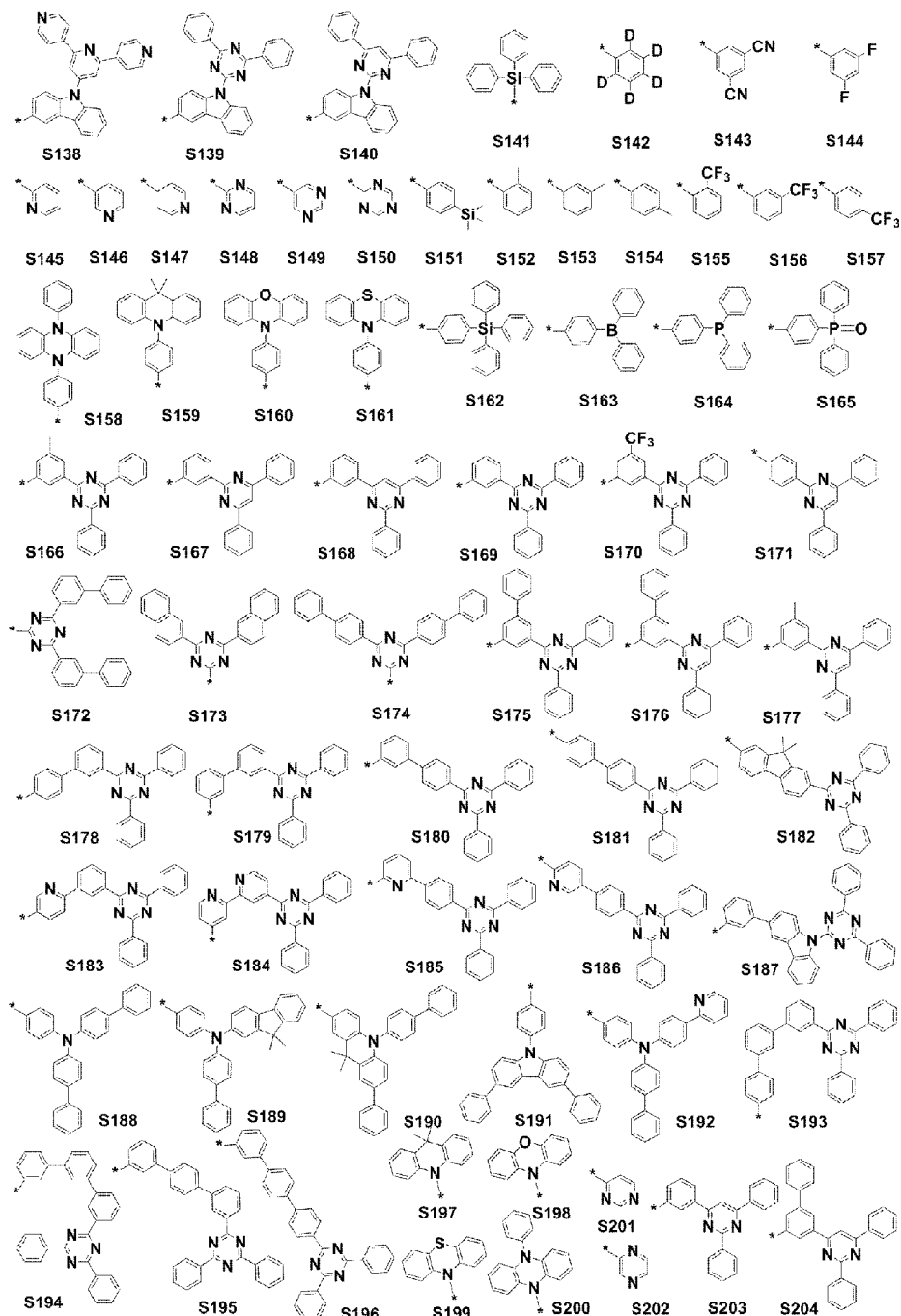
[80]



[81]



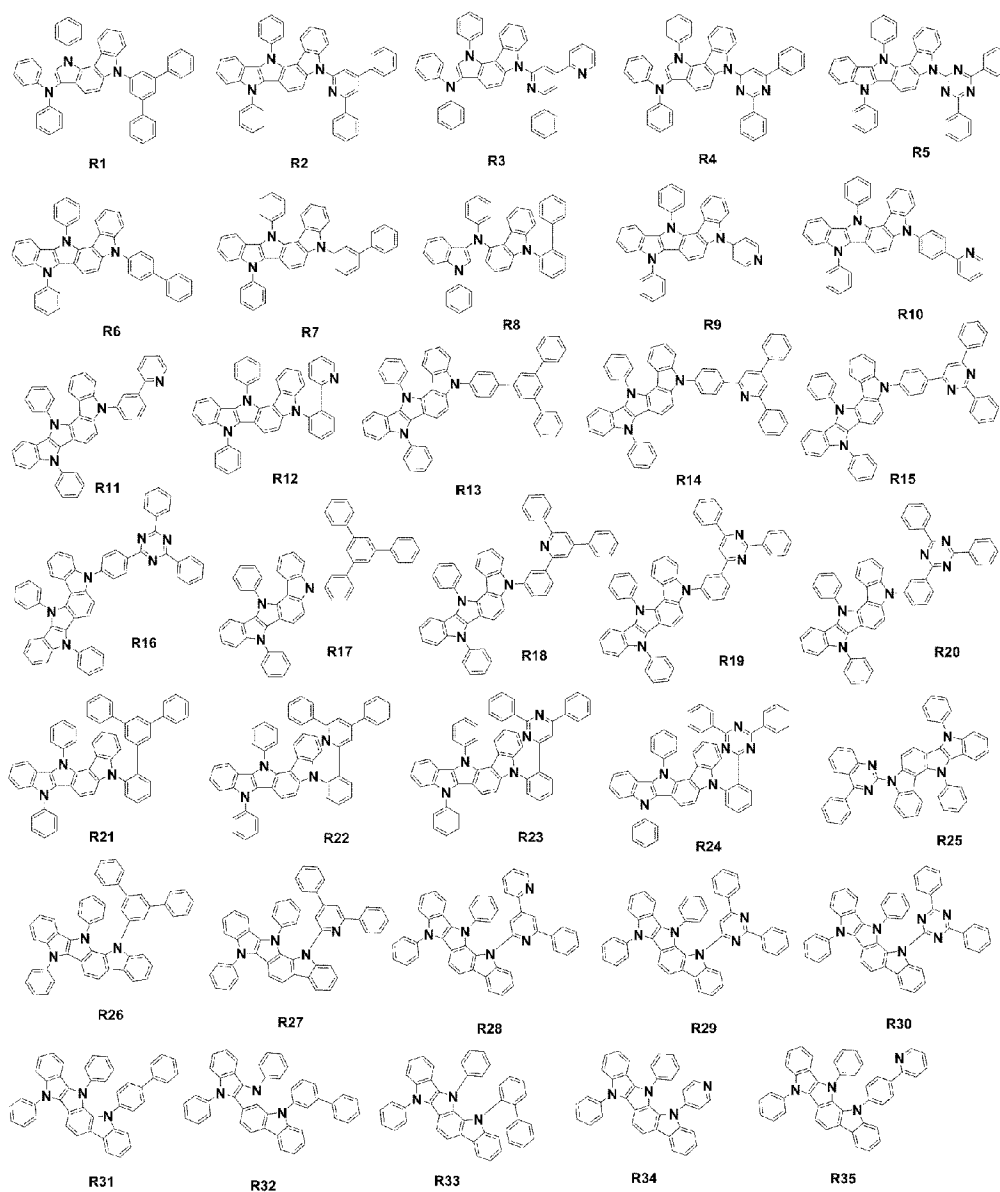
[82]



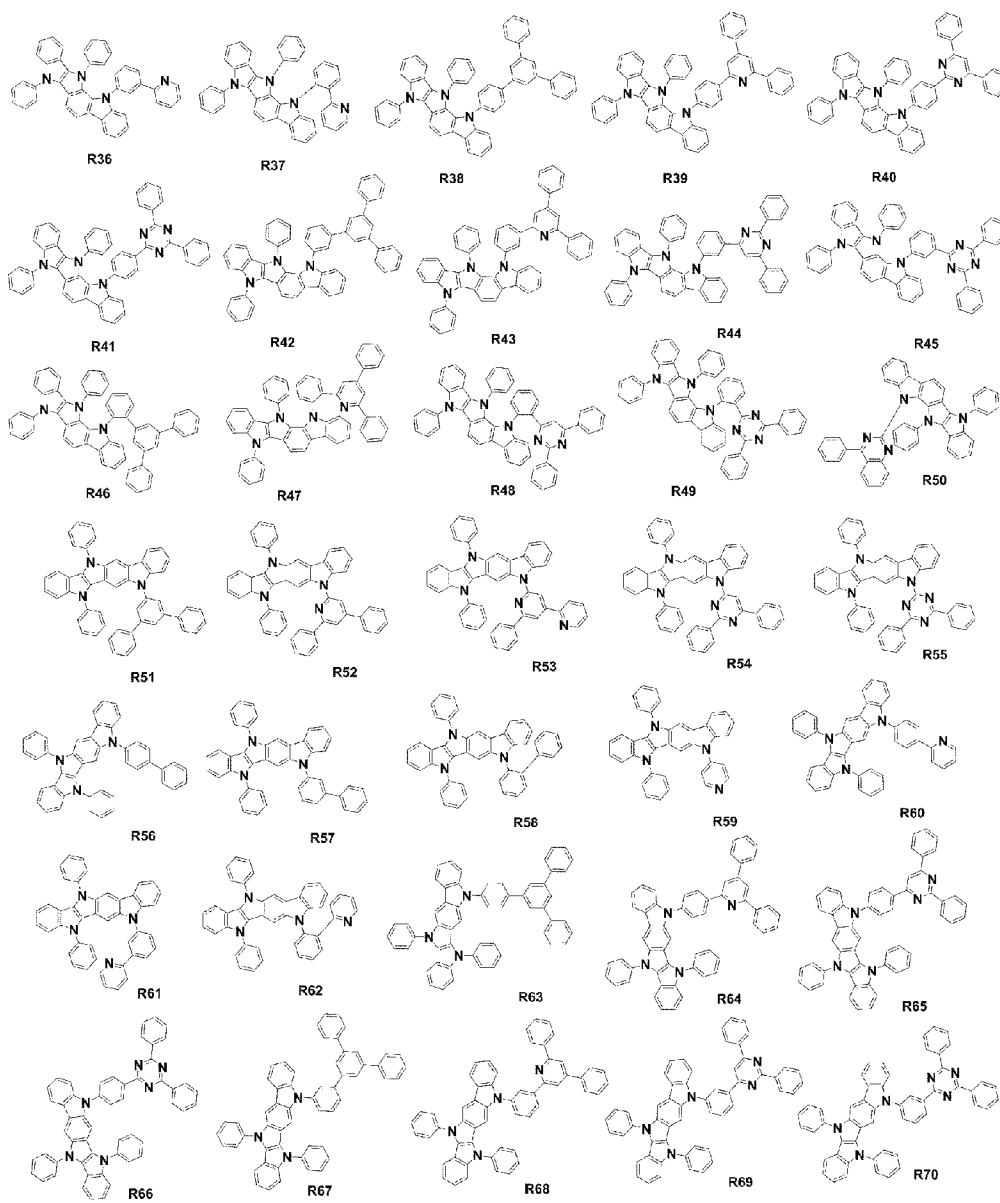
[83]

이러한 본 발명의 화학식 1 또는 2로 표시되는 화합물은 하기 예시된 화학식들로 보다 구체화될 수 있다. 그러나 본 발명의 화학식 1 또는 2로 표시되는 화합물이 하기 예시된 화합물들로 한정되는 것은 아니다.

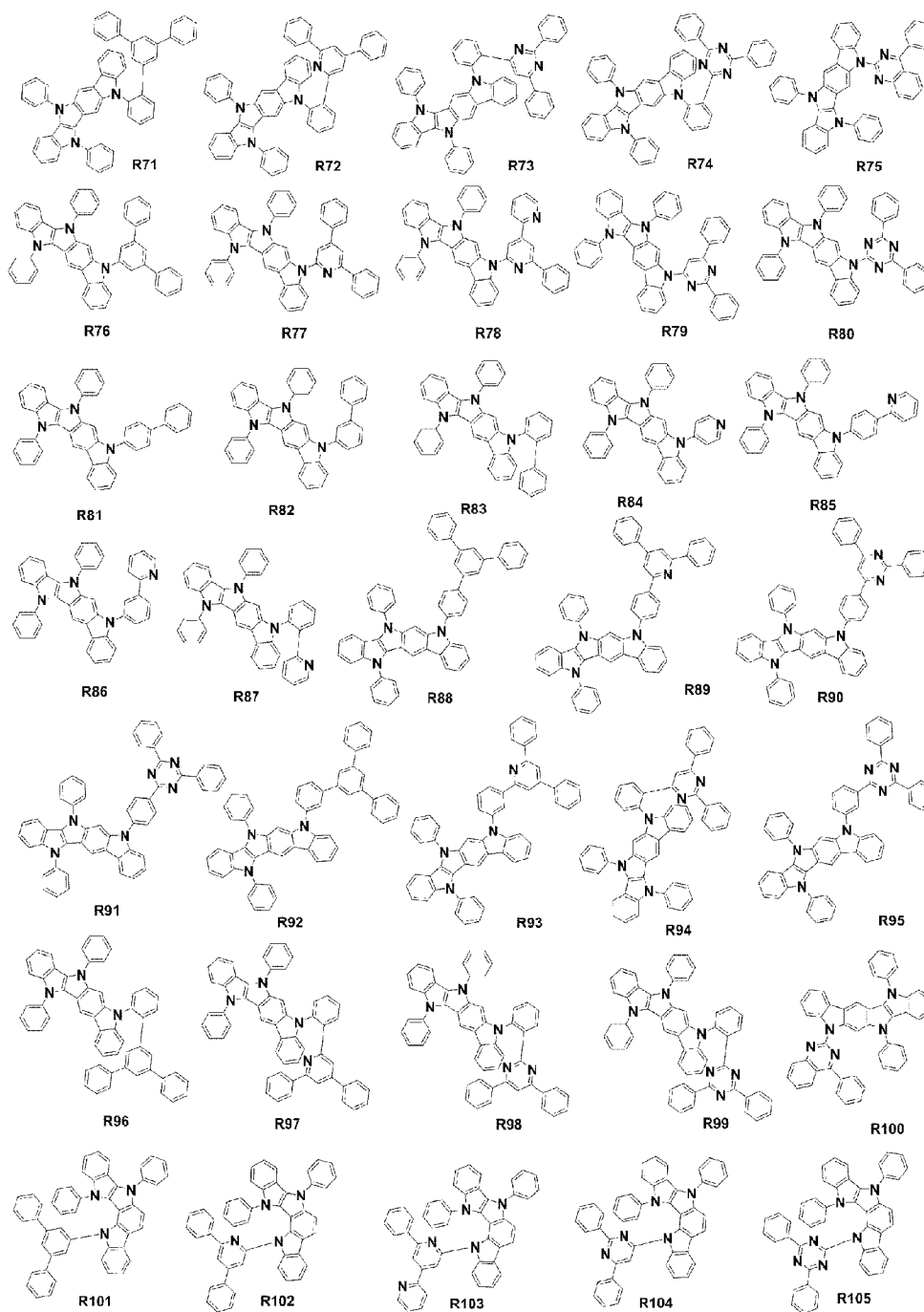
[84]



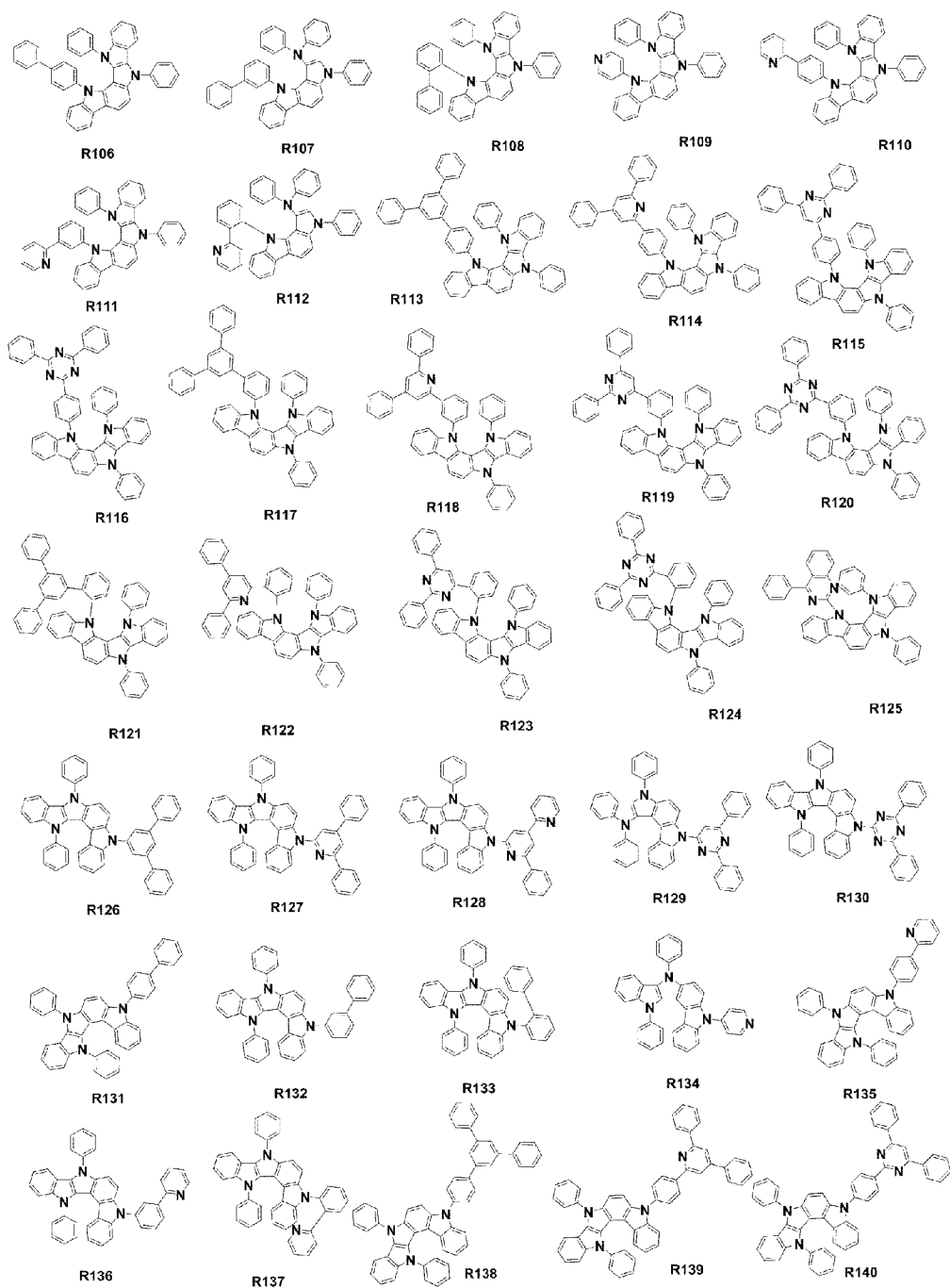
[85]



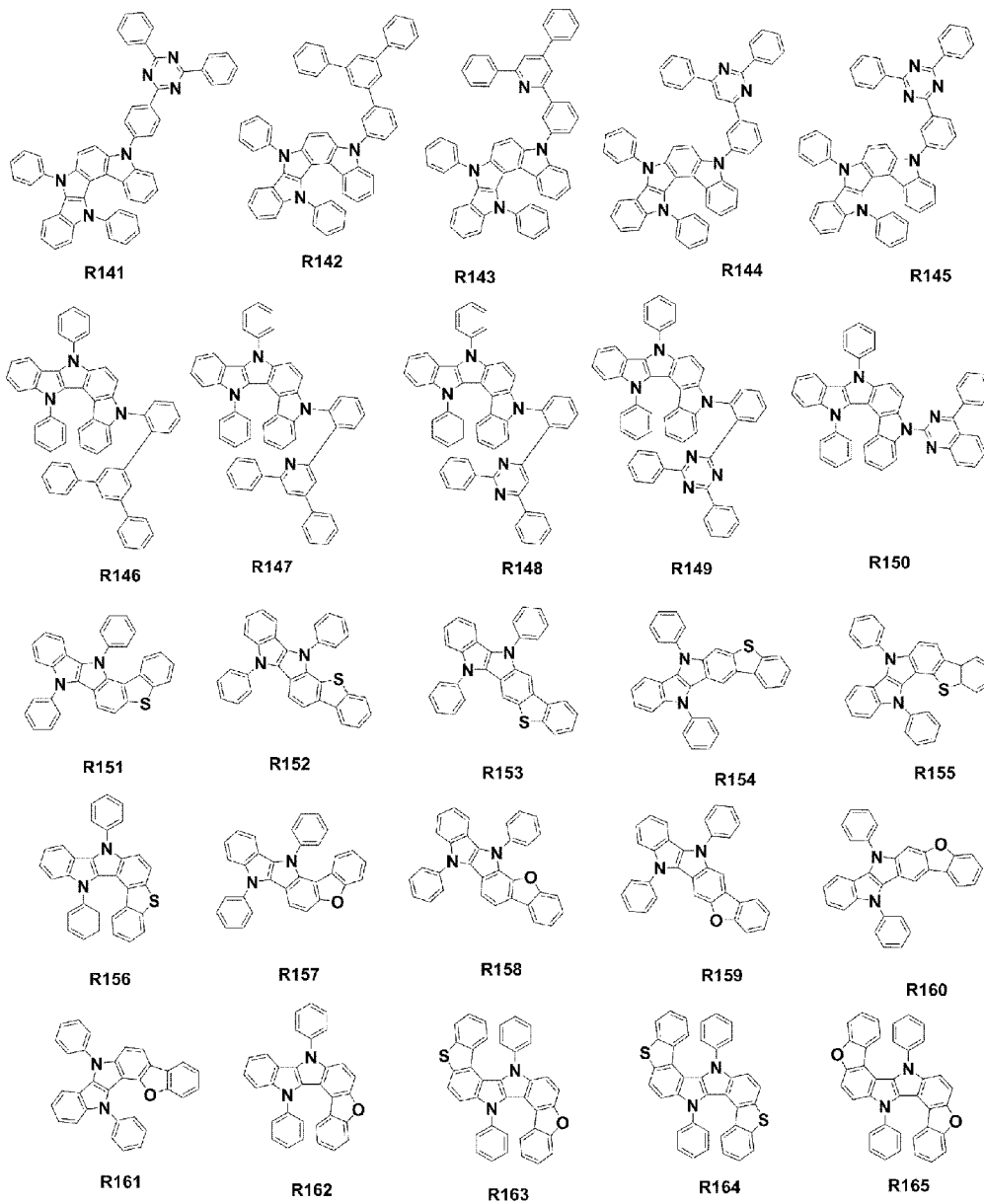
[86]



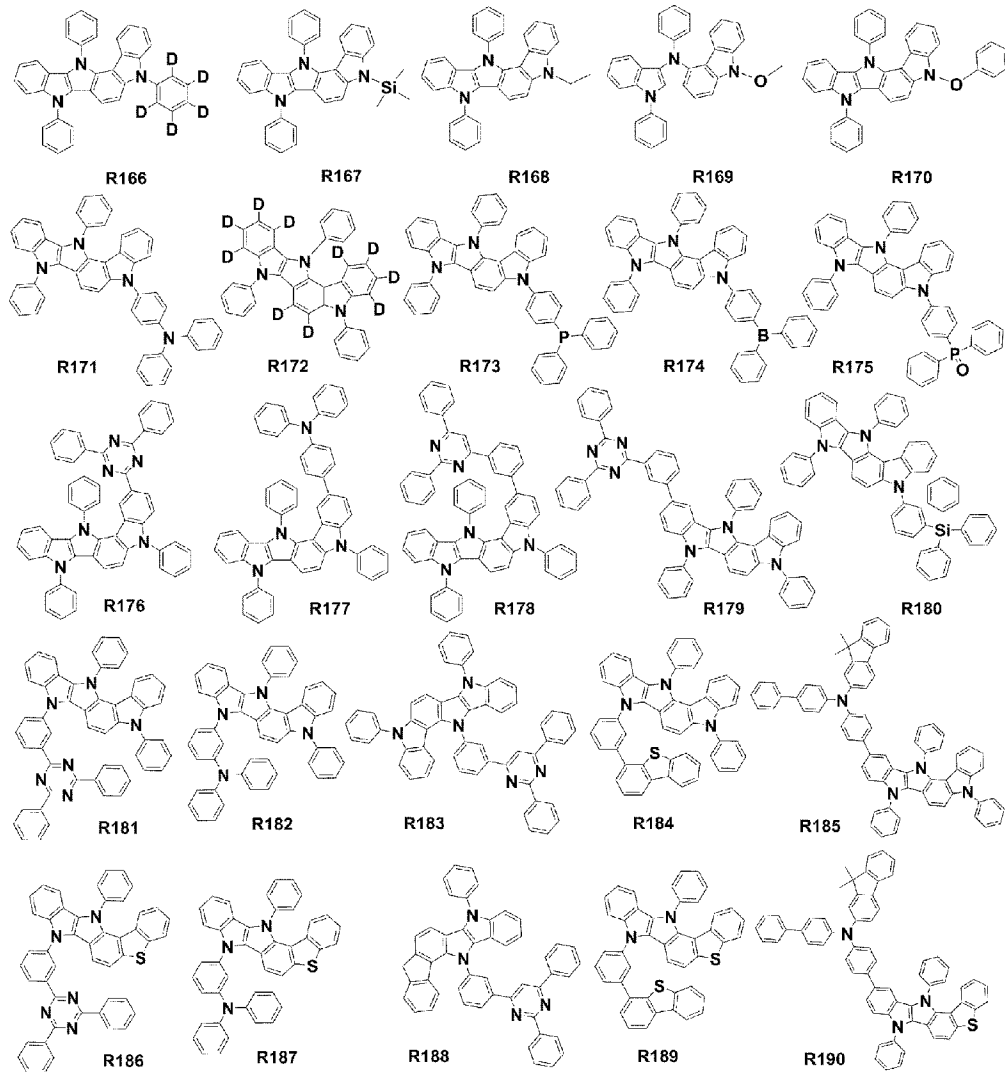
[87]



[88]



[89]



[90]

[91] **2. 유기 전계 발광 소자**

[92] 본 발명은 양극, 음극 및 상기 양극과 음극 사이에 개재(介在)된 1층 이상의 유기물층을 포함하며, 상기 유기물층 중 적어도 하나는 상기 화학식 1 또는 2로 표시되는 화합물을 1종 이상 포함하는 유기 전계 발광 소자를 제공한다.

[93] 상기 화학식 1 또는 2로 표시되는 화합물을 포함하는 유기물층은 정공 주입층, 정공 수송층, 발광층, 전자 수송층 및 전자 주입층 중 어느 하나 이상일 수 있다. 바람직하게는 상기 화학식 1 또는 2로 표시되는 화합물은 발광층 물질로서 유기 전계 발광 소자에 포함될 수 있다. 이 경우 유기 전계 발광 소자는 발광효율, 휘도, 전력효율, 열적 안정성 및 소자 수명이 향상될 수 있다.

[94] 특히 본 발명의 화학식 1 또는 2로 표시되는 화합물은 발광층의 인광 호스트, 형광 호스트 또는 도펀트인 것이 바람직하며, 발광층의 인광 호스트인 것이 더욱 바람직하다.

[95] 이러한 본 발명의 유기 전계 발광 소자의 구조는 특별히 한정되지 않으나, 기판, 양극, 정공 주입층, 정공 수송층, 발광층, 전자 수송층 및 음극이 순차적으로

적층된 것일 수 있다. 이때 정공 주입층, 정공 수송층 및 발광층 중 하나 이상은 상기 화학식 1 또는 2로 표시되는 화합물을 1종 이상 포함할 수 있다. 상기 전자 수송층 위에는 전자 주입층이 위치할 수도 있다.

[96] 또한 본 발명의 유기 전계 발광 소자는 전극과 유기물층 계면에 절연층 또는 접착층이 삽입된 구조로 이루어질 수도 있다.

[97] 본 발명의 유기 전계 발광 소자에서 상기 화학식 1 또는 2로 표시되는 화합물을 포함하는 유기물층은 진공증착법이나 용액 도포법에 의하여 형성될 수 있다. 상기 용액 도포법의 예로는 스핀 코팅, 딥코팅, 닥터 블레이딩, 잉크젯 프린팅 또는 열 전사법 등이 있으나, 이들에 한정되지는 않는다.

[98] 본 발명의 유기 전계 발광 소자는 유기물층 중 1층 이상을 상기 화학식 1 또는 2로 표시되는 화합물을 포함하도록 형성하는 것을 제외하고는 당 기술 분야에 알려져 있는 재료 및 방법을 이용하여 유기물층 및 전극을 형성함으로써 제조될 수 있다.

[99] 예컨대, 기판으로는 실리콘 웨이퍼, 석영 또는 유리판, 금속판, 플라스틱 필름 등이 사용될 수 있다.

[100] 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 및 폴리아닐린과 같은 전도성 고분자; 또는 카본블랙 등이 있으나, 이들에 한정되는 것은 아니다.

[101] 음극 물질로는 마그네슘, 칼슘, 나트륨, 칼륨, 타이타늄, 인듐, 이트륨, 리튬, 가돌리늄, 알루미늄, 은, 주석, 또는 납과 같은 금속 또는 이들의 합금; LiF/Al 또는 LiO₂/Al과 같은 다층 구조 물질 등이 있으나, 이들에 한정되는 것은 아니다.

[102] 정공 주입층, 정공 수송층, 전자 주입층 및 전자 수송층으로 사용되는 물질은 당업계에 알려진 통상의 물질이라면 특별히 한정되지 않는다.

[103]

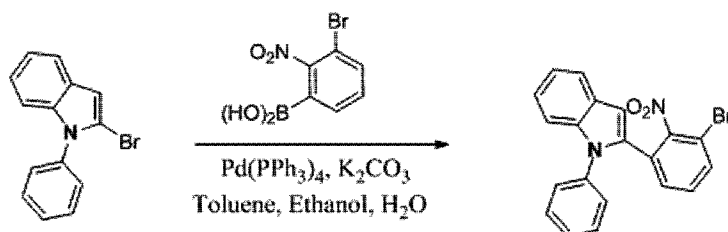
[104] 이하, 본 발명을 실시예를 통하여 상세히 설명하면 다음과 같다. 단, 하기 실시예는 본 발명을 예시하는 것일 뿐 본 발명이 하기 실시예에 의해 한정되는 것은 아니다.

[105]

[106] [준비예 1] A3의 합성

[107] <단계 1> 2-(3-bromo-2-nitrophenyl)-1-phenyl-1H-indole의 합성

[108]



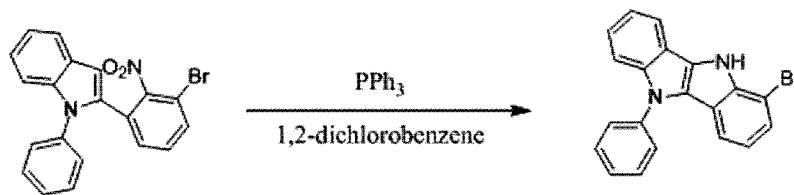
[109] 질소 기류 하에서 2-bromo-1-phenyl-1H-indole, 10.9g, (40.0mmol), 3-bromo-2-nitrophenylboronic acid, 9.8g (40.0mmol), 2.3g (5 mol%)의 $\text{Pd}(\text{PPh}_3)_4$ 및 potassium carbonate 16.6g (120.0mmol)을 80ml/40ml/40ml의 Toluene/ H_2O /Ethanol에 넣고 110°C 에서 3시간 동안 교반하였다. 반응 종료 후, 메틸렌클로라이드를 이용하여 유기층을 분리하고 MgSO_4 를 사용하여 물을 제거하였다. 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피로 정제하여 2-(3-bromo-2-nitrophenyl)-1-phenyl-1H-indole (13.7g, 34.8mmol, 수율 87%)을 얻었다.

[110] GC-Mass (이론치: 393.23g/mol, 측정치: 393g/mol)

[111] $^1\text{H-NMR}$: δ 6.78(s, 1H), 6.82~6.85(m, 1H), 7.28(m, 1H), 7.41~7.48(m, 5H), 7.76~7.79(m, 2H), 7.91~7.94(m, 3H)

[112] <단계 2> 1-bromo-5-phenyl-5,10-dihydroindolo[3,2-b]indole의 합성

[113]



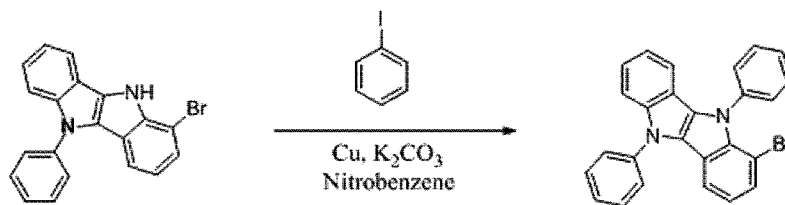
[114] 질소 기류 하에서 2-(3-bromo-2-nitrophenyl)-1-phenyl-1H-indole 13.7 g (34.8 mmol), triphenylphosphine 22.8 g (87.0 mmol), 1,2-dichlorobenzene 140 ml를 넣은 후 12시간 동안 교반하였다. 반응 종료 후 1,2-dichlorobenzene를 제거하고 메틸렌클로라이드를 이용하여 유기층을 분리하고 MgSO_4 를 사용하여 물을 제거하였다. 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피로 정제하여 1-bromo-5-phenyl-5,10-dihydroindolo[3,2-b]indole (9.2g, 25.4mmol, 수율 73%)을 얻었다.

[115] GC-Mass (이론치: 361.23g/mol, 측정치: 361g/mol)

[116] $^1\text{H-NMR}$: δ 7.16~7.56(s, 9H), 7.91(d, 1H), 8.02(d, 1H), 8.71(m, 1H), 9.98(s, 1H)

[117] <단계 3> 1-bromo-5,10-diphenyl-5,10-dihydroindolo[3,2-b]indole의 합성

[118]



[119] 질소 기류 하에서 1-bromo-5-phenyl-5,10-dihydroindolo[3,2-b]indole 9.2 g (25.4 mmol), iodobenzene 15.6 g (76.2 mmol), Cu powder 1.1 g (17.8 mmol), K_2CO_3 7.0 g (50.8 mmol), nitrobenzene 70 ml을 혼합하고 200°C 에서 12시간 동안 교반하였다. 반응 종결 후 nitrobenzene을 제거하고 메틸렌클로라이드로 유기층을 분리하여 MgSO_4 를 사용하여 물을 제거하였다. 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피로 정제하여

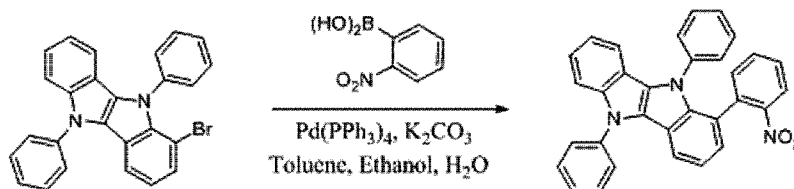
1-bromo-5,10-diphenyl-5,10-dihydroindolo[3,2-b]indole (8.7g, 20.0mmol, 수율 79%)을 얻었다.

[120] GC-Mass (이론치: 437.33g/mol, 측정치: 437g/mol)

[121] $^1\text{H-NMR}$: δ 7.11(t, 1H), 7.21~28(m, 3H), 7.41~7.57(m, 10H), 7.91(d, 1H), 8.65 (d, 1H), 8.71(d, 1H)

[122] <단계 4> 1-(2-nitrophenyl)-5,10-diphenyl-5,10-dihydroindolo[3,2-b]indole의 합성

[123]



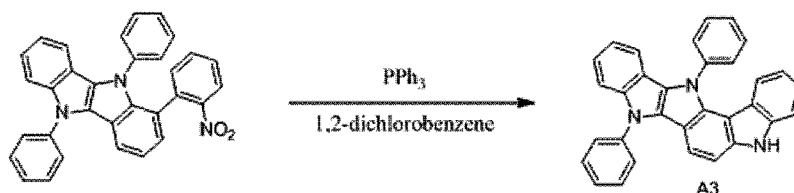
[124] 질소 기류 하에서 1-bromo-5,10-diphenyl-5,10-dihydroindolo[3,2-b]indole 8.7g, (20.0mmol), 2-nitrophenylboronic acid 3.3g (20.0mmol), 1.1g (5 mol%)의 $\text{Pd}(\text{PPh}_3)_4$ 및 potassium carbonate 8.3g (60.0mmol)을 80ml/40ml/40ml의 Toluene/ H_2O /Ethanol에 넣고 110°C 에서 3시간 동안 교반하였다. 반응 종료 후, 메틸렌클로라이드를 이용하여 유기층을 분리하고 MgSO_4 를 사용하여 물을 제거하였다. 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피로 정제하여 1-(2-nitrophenyl)-5,10-diphenyl-5,10-dihydroindolo[3,2-b]indole (7.7g, 16.0mmol, 수율 80%)을 얻었다.

[125] GC-Mass (이론치: 479.53g/mol, 측정치: 479g/mol)

[126] $^1\text{H-NMR}$: δ 7.24~7.32(m, 3H), 7.42~56(m, 11H), 7.61~7.94(m, 4H), 8.25(d, 1H), 8.69~8.72(m, 2H)

[127] <단계 5> A3의 합성

[128]



[129] 질소 기류 하에서 1-(2-nitrophenyl)-5,10-diphenyl-5,10-dihydroindolo[3,2-b]indole 7.7 g (16.0 mmol), triphenylphosphine 10.5 g (40.0 mmol), 1,2-dichlorobenzene 80 ml를 넣은 후 12시간 동안 교반하였다. 반응 종료 후 1,2-dichlorobenzene를 제거하고 메틸렌클로라이드를 이용하여 유기층을 분리하고 MgSO_4 를 사용하여 물을 제거하였다. 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피로 정제하여 A3 (5.5g, 12.3mmol, 수율 77%)을 얻었다.

[130] GC-Mass (이론치: 447.53g/mol, 측정치: 447g/mol)

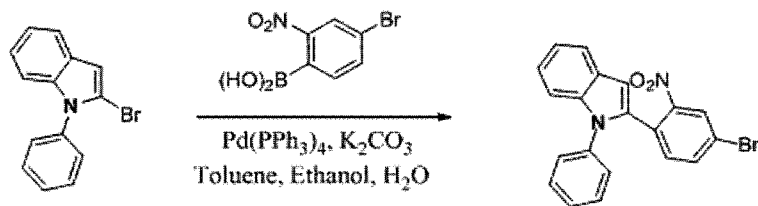
[131] $^1\text{H-NMR}$: δ 7.24~7.31(m, 3H), 7.41~7.61(m, 13H), 7.91(d, 1H), 8.09(d, 1H), 8.41(d, 1H), 8.71(d, 1H), 9.94(s, 1H)

[132]

[133] [준비예 2] B3와 B4의 합성

[134] <단계 1> 2-(4-bromo-2-nitrophenyl)-1-phenyl-1H-indole의 합성

[135]



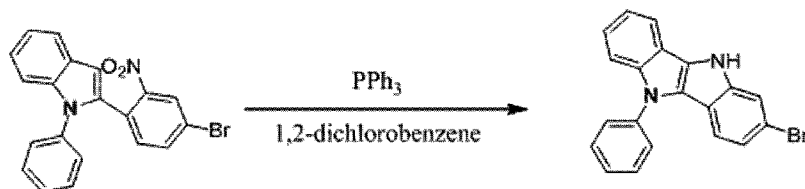
[136] 질소 기류 하에서 2-bromo-1-phenyl-1H-indole 10.9g (40.0mmol), 4-bromo-2-nitrophenylboronic acid 9.8g (40.0mmol), 2.3g (5 mol%)의 Pd(PPh₃)₄, potassium carbonate, 16.6g (120.0mmol)와 80ml/40ml/40ml의 Toluene/H₂O/Ethanol를 넣고 110°C에서 2시간 동안 교반하였다. 반응 종료 후, 메틸렌클로라이드를 이용하여 유기층을 분리하고 MgSO₄를 사용하여 물을 제거하였다. 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피로 정제하여 2-(4-bromo-2-nitrophenyl)-1-phenyl-1H-indole (13.4g, 34.0mmol, 수율 85%)을 얻었다.

[137] GC-Mass (이론치: 393.23g/mol, 측정치: 393g/mol)

[138] ¹H-NMR: δ 6.87(s, 1H), 6.85(m, 1H), 7.29(m, 1H), 7.41~7.54(m, 5H), 7.91~7.93(m, 3H), 8.01(d, 1H), 8.61(d, 1H)

[139] <단계 2> 2-bromo-5-phenyl-5,10-dihydroindolo[3,2-b]indole의 합성

[140]



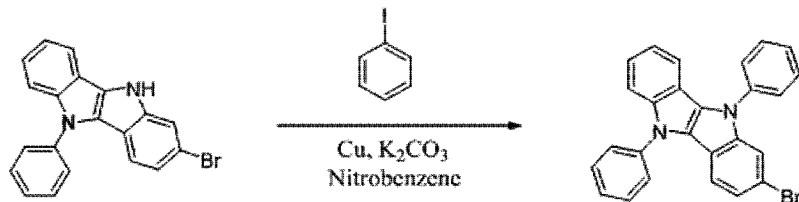
[141] 질소 기류 하에서 2-(4-bromo-2-nitrophenyl)-1-phenyl-1H-indole 13.4 g (34.0 mmol), triphenylphosphine 22.3 g (85.0 mmol), 1,2-dichlorobenzene 140 ml를 넣은 후 12시간 동안 교반하였다. 반응 종료 후 1,2-dichlorobenzene를 제거하고 메틸렌클로라이드를 이용하여 유기층을 분리하고 MgSO₄를 사용하여 물을 제거하였다. 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피로 정제하여 2-bromo-5-phenyl-5,10-dihydroindolo[3,2-b]indole (9.0g, 24.8mmol, 수율 73%)을 얻었다.

[142] GC-Mass (이론치: 361.23g/mol, 측정치: 361g/mol)

[143] ¹H-NMR: δ 7.21~7.31(m, 3H), 7.41~7.54(m, 6H), 7.91~7.94(m, 2H), 8.71(d, 1H), 9.96(s, 1H)

[144] <단계 3> 2-bromo-5,10-diphenyl-5,10-dihydroindolo[3,2-b]indole의 합성

[145]



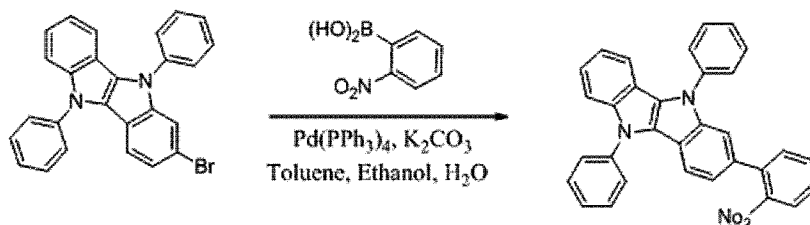
- [146] 질소 기류 하에서 1-bromo-5-phenyl-5,10-dihydroindolo[3,2-b]indole 9.0g (24.8 mmol), iodobenzene 15.2 g (74.5 mmol), Cu powder 1.1 g (17.4 mmol), K₂CO₃ 6.9 g (49.6 mmol), nitrobenzene 70 ml을 혼합하고 200 °C에서 12시간 동안 교반하였다. 반응 종결 후 nitrobenzene을 제거하고 메틸렌클로라이드로 유기층을 분리하여 MgSO₄를 사용하여 물을 제거하였다. 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피로 정제하여 2-bromo-5,10-diphenyl-5,10-dihydroindolo[3,2-b]indole (8.7g, 20.0mmol, 수율 81%)을 얻었다.

[147] GC-Mass (이론치: 437.33g/mol, 측정치: 437g/mol)

[148] ¹H-NMR: δ 7.16~7.31(m, 3H), 7.41~7.54(m, 10H), 7.91(d, 1H), 8.28(d, 1H), 8.72~8.74(m, 2H)

[149] <단계 4> 2-(2-nitrophenyl)-5,10-diphenyl-5,10-dihydroindolo[3,2-b]indole의 합성

[150]



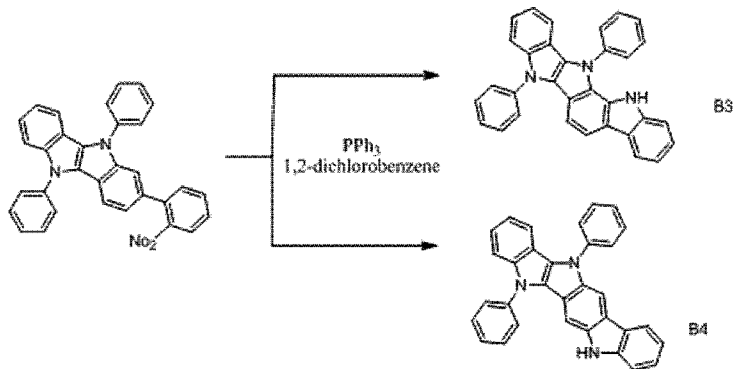
- [151] 1-bromo-5,10-diphenyl-5,10-dihydroindolo[3,2-b]indole 대신 2-bromo-5,10-diphenyl-5,10-dihydroindolo[3,2-b]indole (8.7g, 20.0mmol)을 사용한 것을 제외하고는, 준비예 1의 <단계 4>과 동일한 과정을 수행하여 2-(2-nitrophenyl)-5,10-diphenyl-5,10-dihydroindolo[3,2-b]indole (7.2g, 15.0mmol, 수율 75 %)을 얻었다.

[152] GC-Mass (이론치: 479.53g/mol, 측정치: 479g/mol)

[153] ¹H-NMR: δ 7.41~7.54(m, 16H), 7.75(d, 1H), 7.91(d, 1H), 8.07(d, 1H), 8.44(d, 1H), 8.71(d, 1H)

[154] <단계 5> B3와 B4의 합성

[155]



[156] 1-(2-nitrophenyl)-5,10-diphenyl-5,10-dihydroindolo[3,2-b]indole 대신 2-(2-nitrophenyl)-5,10-diphenyl-5,10-dihydroindolo[3,2-b]indole (7.2g, 15.0mmol)을 사용한 것을 제외하고는, 준비예 1의 <단계 5>과 동일한 과정을 수행하여 B3 (2.2g, 5.0mmol, 수율 33 %)와 B4 (2.0g, 4.4mmol, 수율 29 %)을 얻었다.

[157] B3의 GC-Mass (이론치: 447.53g/mol, 측정치: 447g/mol)

[158] $^1\text{H-NMR}$: δ 7.23~7.31(m, 3H) 7.41~7.59(m, 12H) 7.81~7.87(m, 2H) 8.08(d, 1H), 8.39(d, 1H), 8.65(d, 1H), 9.94(s, 1H)

[159] B4의 GC-Mass (이론치: 447.53g/mol, 측정치: 447g/mol)

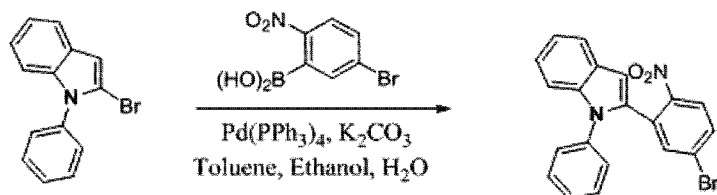
[160] $^1\text{H-NMR}$: δ 7.41~7.58(m, 17H), 7.91(d, 1H), 8.08(d, 1H), 8.71(d, 1H), 9.95(s, 1H)

[161]

[162] [준비예 3] C3와 C4의 합성

[163] <단계 1> 2-(5-bromo-2-nitrophenyl)-1-phenyl-1H-indole의 합성

[164]



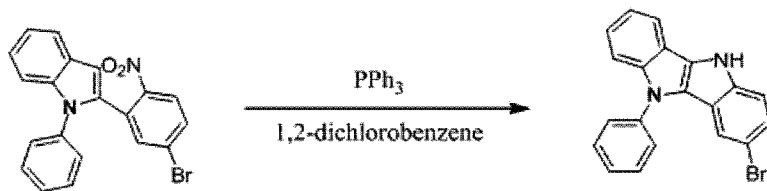
[165] 질소 기류 하에서 2-bromo-1-phenyl-1H-indole 10.9g, (40.0mmol), 5-bromo-2-nitrophenylboronic acid 9.8g (40.0mmol), 2.3g (5 mol%)의 $\text{Pd}(\text{PPh}_3)_4$ 및 potassium carbonate 16.6g (120.0mmol)를 80ml/40ml/40ml의 Toluene/ H_2 O/Ethanol에 넣고 110°C에서 2시간 동안 교반하였다. 반응 종료 후, 메틸렌클로라이드를 이용하여 유기층을 분리하고 MgSO_4 를 사용하여 물을 제거하였다. 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피로 정제하여 2-(5-bromo-2-nitrophenyl)-1-phenyl-1H-indole (13.5g, 34.0mmol, 수율 86%)을 얻었다.

[166] GC-Mass (이론치: 393.23g/mol, 측정치: 393g/mol)

[167] $^1\text{H-NMR}$: δ 6.80(s, 1H), 6.86(t, 1H), 7.32(m, 1H), 7.44~7.57(m, 5H), 7.71(s, 1H), 7.93~7.96(m, 3H), 8.19(d, 1H)

[168] <단계 2> 3-bromo-5-phenyl-5,10-dihydroindolo[3,2-b]indole의 합성

[169]



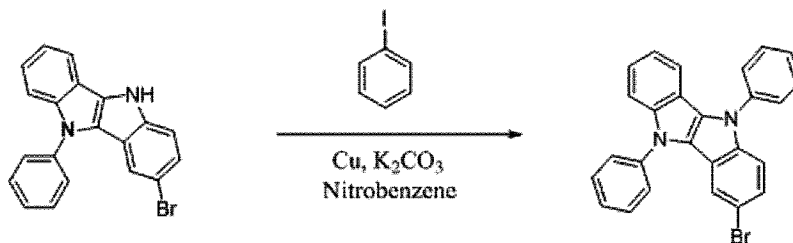
[170] 질소 기류 하에서 2-(5-bromo-2-nitrophenyl)-1-phenyl-1H-indole 13.5 g (34.4 mmol), triphenylphosphine 22.6 g (86.0 mmol), 1,2-dichlorobenzene 140 ml를 넣은 후 12시간 동안 교반하였다. 반응 종료 후 1,2-dichlorobenzene를 제거하고 메틸렌클로라이드를 이용하여 유기층을 분리하고 MgSO_4 를 사용하여 물을 제거하였다. 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피로 정제하여 3-bromo-5-phenyl-5,10-dihydroindolo[3,2-b]indole (9.2g, 25.5mmol, 수율 74%)을 얻었다.

[171] GC-Mass (이론치: 361.23g/mol, 측정치: 361g/mol)

[172] $^1\text{H-NMR}$: δ 7.21~7.57(m, 9H), 7.91(d, 1H), 8.02(d, 1H), 8.71(d, 1H), 7.93(s, 1H)

[173] <단계 3> 3-bromo-5,10-diphenyl-5,10-dihydroindolo[3,2-b]indole의 합성

[174]



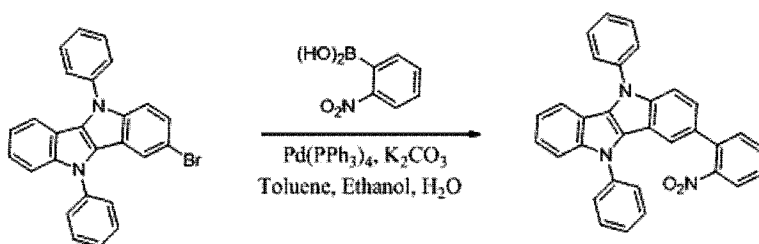
[175] 질소 기류 하에서 3-bromo-5-phenyl-5,10-dihydroindolo[3,2-b]indole 9.2g (25.5 mmol), iodobenzene 15.6 g (76.4 mmol), Cu powder 1.1 g (17.8 mmol), K_2CO_3 7.0 g (50.9 mmol), nitrobenzene 70 ml을 혼합하고 200°C 에서 12시간 동안 교반하였다. 반응 종결 후 nitrobenzene을 제거하고 메틸렌클로라이드로 유기층을 분리하여 MgSO_4 를 사용하여 물을 제거하였다. 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피로 정제하여 3-bromo-5,10-diphenyl-5,10-dihydroindolo[3,2-b]indole (8.7g, 20.0mmol, 수율 79%)을 얻었다.

[176] GC-Mass (이론치: 437.33g/mol, 측정치: 437g/mol)

[177] $^1\text{H-NMR}$: δ 7.21~7.28(m, 3H) 7.41~7.55(m, 10H), 7.69(d, 1H), 7.78(d, 1H), 7.91(d, 1H). 8.72(d, 1H)

[178] <단계 4> 3-(2-nitrophenyl)-5,10-diphenyl-5,10-dihydroindolo[3,2-b]indole의 합성

[179]



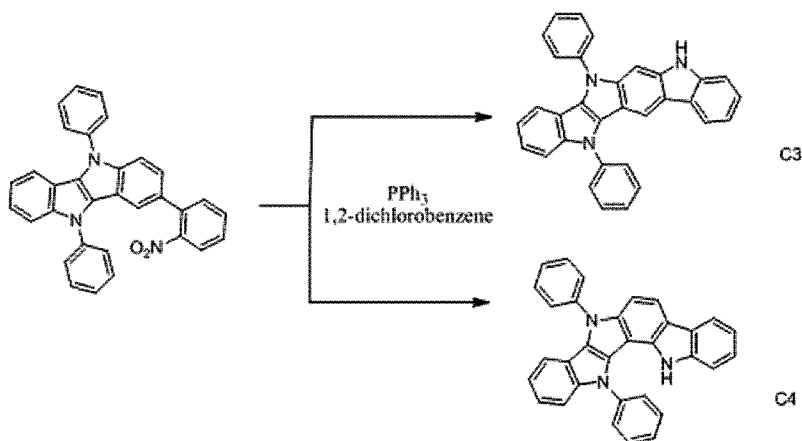
[180] 1-bromo-5,10-diphenyl-5,10-dihydroindolo[3,2-b]indole 대신
3-bromo-5,10-diphenyl-5,10-dihydroindolo[3,2-b]indole (8.7g, 20.0mmol)을 사용한
것을 제외하고는 준비예 1의 <단계 4>와 동일한 과정을 수행하여
3-(2-nitrophenyl)-5,10-diphenyl-5,10-dihydroindolo[3,2-b]indole (7.1g, 14.8mmol,
수율 74 %)을 얻었다.

[181] GC-Mass (이론치: 479.53g/mol, 측정치: 479g/mol)

[182] $^1\text{H-NMR}$: δ 7.24~7.31(m, 2H), 7.42~7.65(m, 11H), 7.71(s, 1H), 7.90~8.01(m, 5H),
8.16(d, 1H), 8.72(d, 1H)

[183] <단계 5> C3와 C4의 합성

[184]



[185] 1-(2-nitrophenyl)-5,10-diphenyl-5,10-dihydroindolo[3,2-b]indole 대신
3-(2-nitrophenyl)-5,10-diphenyl-5,10-dihydroindolo[3,2-b]indole (7.1g, 14.8mmol)을
사용한 것을 제외하고는 준비예 1의 <단계 5>과 동일한 과정을 수행하여 C3
(2.5g, 5.5mmol, 수율 37 %)와 C4 (2.1g, 4.6mmol, 수율 31 %)을 얻었다.

[186] C3의 GC-Mass (이론치: 447.53g/mol, 측정치: 447g/mol)

[187] $^1\text{H-NMR}$: δ 7.24~7.55(m, 17H), 7.92(d, 1H), 8.11(s, 1H), 8.72(d, 1H), 9.96(s, 1H)

[188] C4의 GC-Mass (이론치: 447.53g/mol, 측정치: 447g/mol)

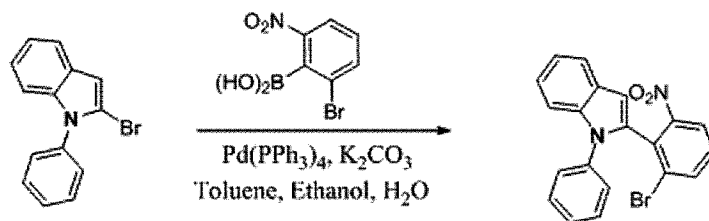
[189] $^1\text{H-NMR}$: δ 7.24~7.31(m, 3H), 7.44~7.56(m, 12H), 7.93~7.95(m, 3H), 8.09(d, 1H),
8.72(d, 1H), 9.96(s, 1H)

[190]

[191] [준비예 4] D3의 합성

[192] <단계 1> 2-(2-bromo-6-nitrophenyl)-1-phenyl-1H-indole의 합성

[193]



[194] 질소 기류 하에서 2-bromo-1-phenyl-1H-indole 10.9g (40.0mmol),
2-bromo-6-nitrophenylboronic acid 9.8g (40.0mmol), 2.3g (5 mol%)의 $\text{Pd(PPh}_3)_4$ 및

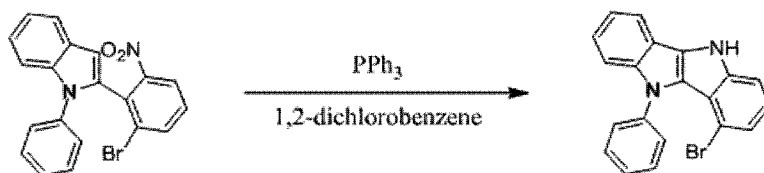
potassium carbonate 16.6g (120.0mmol)를 80ml/40ml/40ml의 Toluene/H₂O/Ethanol에 넣고 110°C에서 2시간 동안 교반하였다. 반응 종료 후, 메틸렌클로라이드를 이용하여 유기층을 분리하고 MgSO₄를 사용하여 물을 제거하였다. 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피로 정제하여 2-(2-bromo-6-nitrophenyl)-1-phenyl-1H-indole (13.5g, 34.0mmol, 수율 86%)을 얻었다.

[195] GC-Mass (이론치: 393.23g/mol, 측정치: 393g/mol)

[196] ¹H-NMR: δ 6.78(s, 1H), 8.85(m, 1H), 7.31(m, 1H), 7.47~7.53(m, 6H), 7.93~7.94(m, 3H), 8.02(d, 1H)

[197] <단계 2> 4-bromo-5-phenyl-5,10-dihydroindolo[3,2-b]indole의 합성

[198]



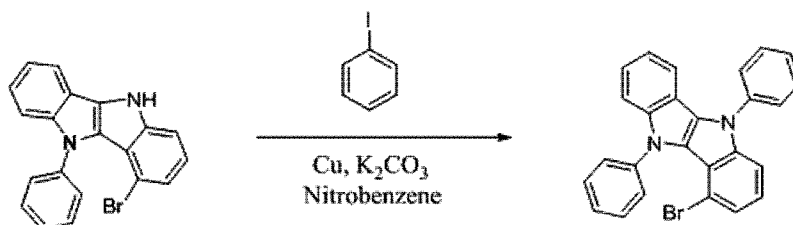
[199] 질소 기류 하에서 2-(2-bromo-6-nitrophenyl)-1-phenyl-1H-indole 13.5 g (34.4 mmol), triphenylphosphine 22.6 g (86.0 mmol), 1,2-dichlorobenzene 140 ml를 넣은 후 12시간 동안 교반하였다. 반응 종료 후 1,2-dichlorobenzene를 제거하고 메틸렌클로라이드를 이용하여 유기층을 분리하고 MgSO₄를 사용하여 물을 제거하였다. 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피로 정제하여 4-bromo-5-phenyl-5,10-dihydroindolo[3,2-b]indole (9.3g, 25.8mmol, 수율 75%)을 얻었다.

[200] GC-Mass (이론치: 361.23g/mol, 측정치: 361g/mol)

[201] ¹H-NMR: δ 7.24~7.32(m, 4H), 7.41~7.56(m, 6H), 7.91(d, 1H), 8.71(d, 1H), 9.97(s, 1H)

[202] <단계 3> 4-bromo-5,10-diphenyl-5,10-dihydroindolo[3,2-b]indole의 합성

[203]



[204] 질소 기류 하에서 4-bromo-5-phenyl-5,10-dihydroindolo[3,2-b]indole 9.3g (25.8mmol), iodobenzene 15.8 g (77.4 mmol), Cu powder 1.2g (18.1mmol), K₂CO₃ 7.1g (51.6mmol), nitrobenzene 80ml을 혼합하고 200°C에서 12시간 동안 교반하였다. 반응 종결 후 nitrobenzene을 제거하고 메틸렌클로라이드로 유기층을 분리하여 MgSO₄를 사용하여 물을 제거하였다. 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피로 정제하여 4-bromo-5,10-diphenyl-5,10-dihydroindolo[3,2-b]indole (8.7g, 20.0mmol, 수율

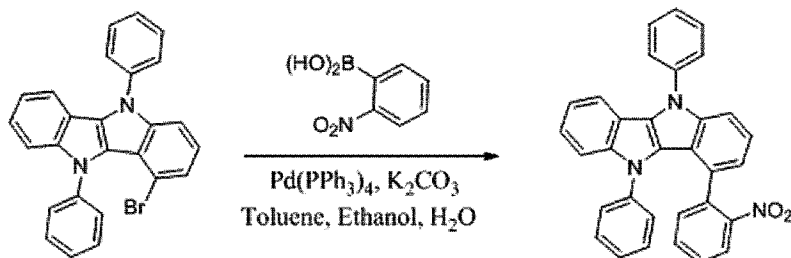
78%)을 얻었다.

[205] GC-Mass (이론치: 437.33g/mol, 측정치: 437g/mol)

[206] $^1\text{H-NMR}$: δ 7.14~7.28(d, 4H), 7.42~7.55(m, 10H), 7.84~7.97(m, 2H), 8.74(d, 1H)

[207] <단계 4> 4-(2-nitrophenyl)-5,10-diphenyl-5,10-dihydroindolo[3,2-b]indole의 합성

[208]



[209] 1-bromo-5,10-diphenyl-5,10-dihydroindolo[3,2-b]indole 대신

4-bromo-5,10-diphenyl-5,10-dihydroindolo[3,2-b]indole (8.7g, 20.0mmol)을 사용한 것을 제외하고는 준비에 1의 <단계 4>과 동일한 과정을 수행하여

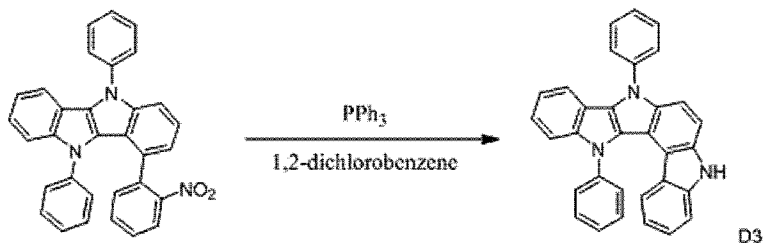
4-(2-nitrophenyl)-5,10-diphenyl-5,10-dihydroindolo[3,2-b]indole (7.0g, 14.6mmol, 수율 73 %)을 얻었다.

[210] GC-Mass (이론치: 479.53g/mol, 측정치: 479g/mol)

[211] $^1\text{H-NMR}$: δ 7.22~7.54(m, 14H), 7.86~8.03(m, 6H), 8.75(d, 1H)

[212] <단계 5> D3의 합성

[213]



[214] 1-(2-nitrophenyl)-5,10-diphenyl-5,10-dihydroindolo[3,2-b]indole 대신

4-(2-nitrophenyl)-5,10-diphenyl-5,10-dihydroindolo[3,2-b]indole (7.0g, 14.6mmol)을 사용한 것을 제외하고는 준비에 1의 <단계 5>과 동일한 과정을 수행하여 D3(4.8g, 10.7mmol, 수율 73 %)을 얻었다.

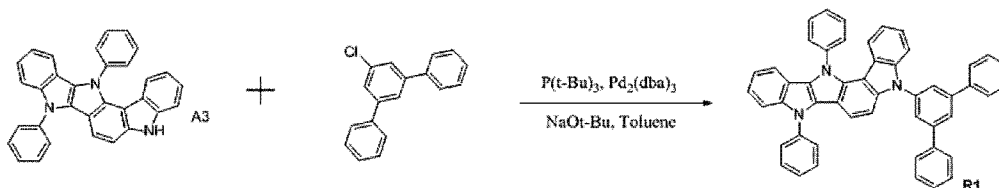
[215] GC-Mass (이론치: 447.53g/mol, 측정치: 447g/mol)

[216] $^1\text{H-NMR}$: δ 7.24~7.31(m, 2H), 7.42~7.56(m, 13H), 7.93~7.95(m, 2H), 8.08(d, 1H), 8.71(d, 2H), 9.97(s, 1H)

[217]

[218] [합성예 1] R1의 합성

[219]



[220] 질소 기류 하에서 A3 5.5g(12.3mmol), 5'-chloro-1,1',3',1''-Terphenyl 3.6g

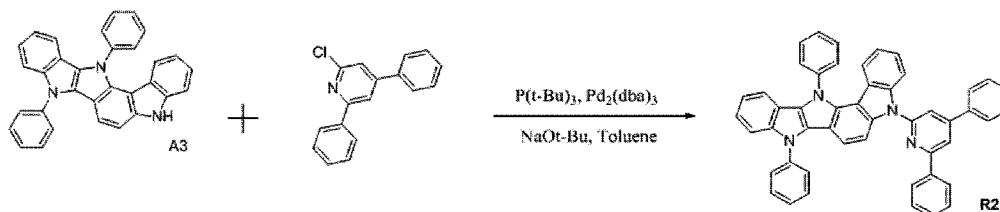
(13.6mmol), 0.6g (5 mol%)의 $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$, tri-tert-butylphosphine 0.1g (0.6mmol) 및 Sodium tert-butoxide 3.6g (37.0mmol)를 90ml의 Toluene을 넣고 110°C에서 4시간 동안 교반하였다. 반응이 종결된 후 메틸렌클로라이드로 유기층을 분리한 다음 MgSO_4 를 사용하여 물을 제거하였다. 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 R1 (5.1g, 7.5mmol, 수율 61%)을 얻었다.

[221] GC-Mass (이론치: 675.82g/mol, 측정치: 675g/mol)

[222]

[223] [합성예 2] R2의 합성

[224]



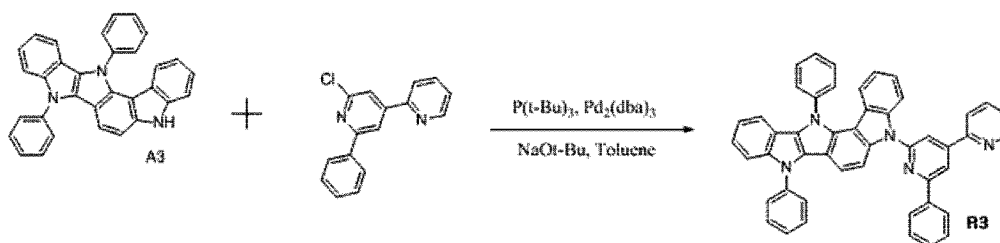
[225] 5'-chloro-1,1',3',1''-Terphenyl 대신 2-chloro-4,6-diphenylpyridine 3.6g (13.6mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 합성예 1과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 R2 (5.3g, 7.8mmol, 수율 63 %)을 얻었다.

[226] GC-Mass (이론치: 676.81 g/mol, 측정치: 676 g/mol)

[227]

[228] [합성예 3] R3의 합성

[229]



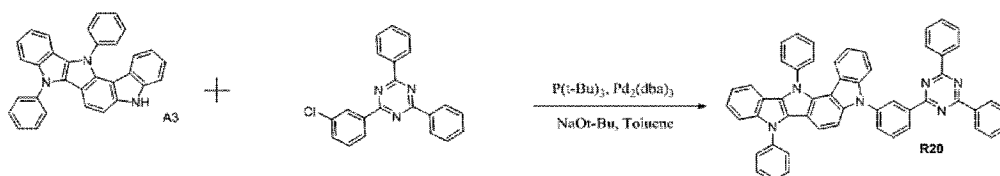
[230] 5'-chloro-1,1',3',1''-Terphenyl 대신 2'-chloro-6'-phenyl-2,4'-bipyridine 3.6g (13.6mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 합성예 1과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 R3 (5.6g, 8.3mmol, 수율 67 %)을 얻었다.

[231] GC-Mass (이론치: 677.79 g/mol, 측정치: 677.79 g/mol)

[232]

[233] [합성예 4] R20의 합성

[234]



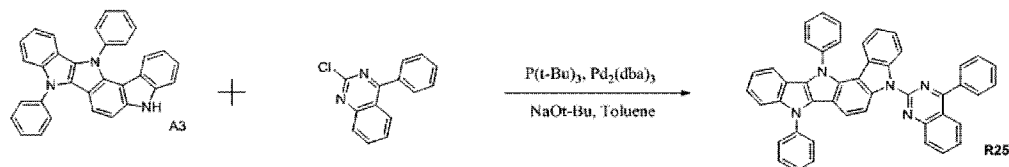
[235] 5'-chloro-1,1',3',1''-Terphenyl 대신 2-(3-chlorophenyl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine 4.7g(13.6mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 합성예 1과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 R20 (6.0g, 7.9mmol, 수율 64 %)을 얻었다.

[236] GC-Mass (이론치: 754.88 g/mol, 측정치: 754.88 g/mol)

[237]

[238] [합성예 5] R25의 합성

[239]



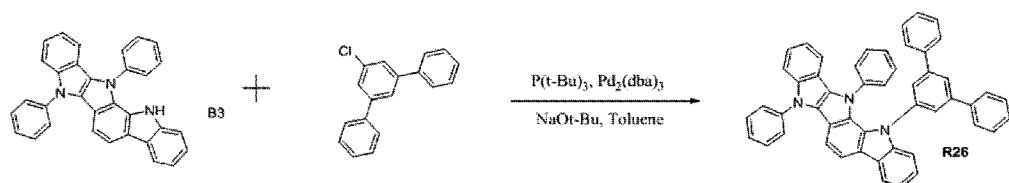
[240] 5'-chloro-1,1',3',1''-Terphenyl 대신 2-chloro-4-phenylquinazoline 3.3g (13.6mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 합성예 1과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 R25 (5.1g, 7.9mmol, 수율 64 %)을 얻었다.

[241] GC-Mass (이론치: 651.76 g/mol, 측정치: 651 g/mol)

[242]

[243] [합성예 6] R26의 합성

[244]



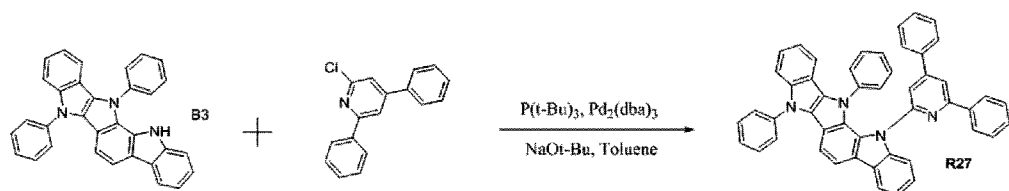
[245] 질소 기류 하에서 B3 2.2g (5.0mmol), 5'-chloro-1,1',3',1''-Terphenyl 1.4g (5.4mmol), 0.2g (5mol%)의 $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$, tri-tert-butylphosphine 0.1g (0.6mmol) 및 Sodium tert-butoxide 1.4g (14.9mmol)를 50ml의 Toluene에 넣고 110°C에서 4시간 동안 교반하였다. 반응이 종결된 후 메틸렌클로라이드로 유기층을 분리한 다음 MgSO_4 를 사용하여 물을 제거하였다. 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 R26 (2.0g, 3.0mmol, 수율 61%)을 얻었다.

[246] GC-Mass (이론치: 675.82g/mol, 측정치: 675g/mol)

[247]

[248] [합성예 7] R27의 합성

[249]



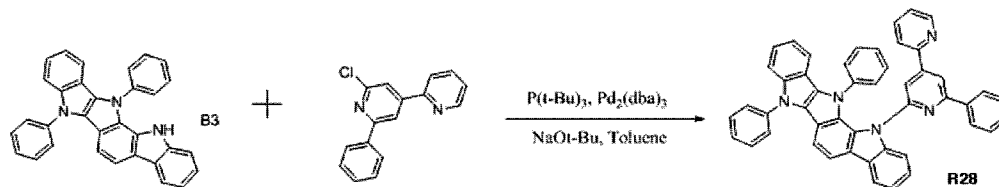
[250] 5'-chloro-1,1',3',1''-Terphenyl 대신 2-chloro-4,6-diphenylpyridine 1.5g (5.4mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 합성예 6과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 R27 (2.0g, 3.0mmol, 수율 61 %)을 얻었다.

[251] GC-Mass (이론치: 676.81 g/mol, 측정치: 676 g/mol)

[252]

[253] [합성예 8] R28의 합성

[254]



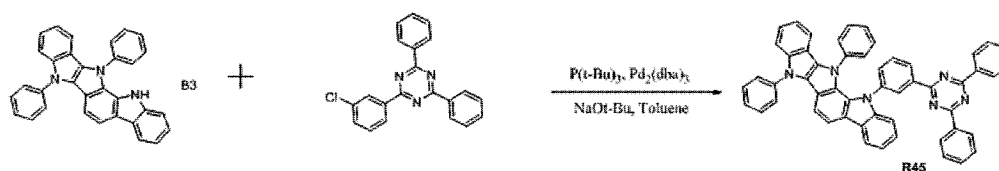
[255] 5'-chloro-1,1',3',1''-Terphenyl 대신 2'-chloro-6'-phenyl-2,4'-bipyridine 1.5g (5.4mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 합성에 6과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 R28 2.1g (3.1mmol, 수율 63 %)을 얻었다.

[256] GC-Mass (이론치: 677.79 g/mol, 측정치: 677.79 g/mol)

[257]

[258] [합성예 9] R45의 합성

[259]



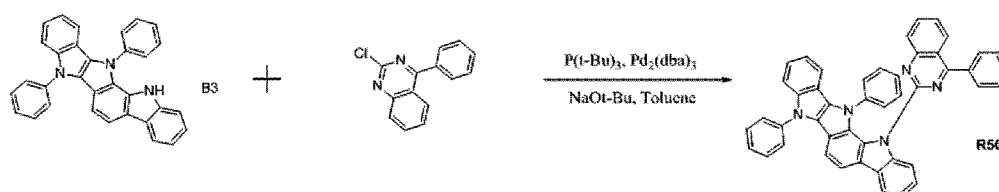
[260] 5'-chloro-1,1',3',1''-Terphenyl 대신 2-(3-chlorophenyl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine 1.9g(5.4mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 합성에 6과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 R45 (2.4g, 3.1mmol, 수율 63 %)을 얻었다.

[261] GC-Mass (이론치: 754.88 g/mol, 측정치: 754.88 g/mol)

[262]

[263] [합성예 10] R50의 합성

[264]



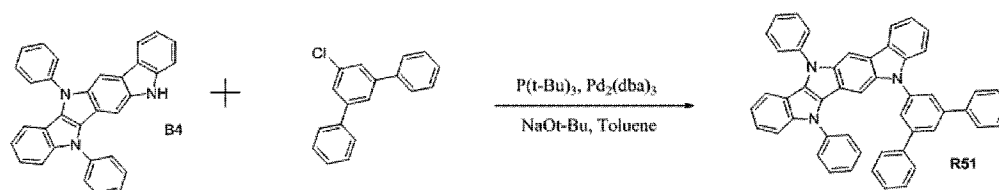
[265] 5'-chloro-1,1',3',1''-Terphenyl 대신 2-chloro-4-phenylquinazoline 1.3g (5.4mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 합성에 6과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 R50 (2.1g, 7.9mmol, 수율 65 %)을 얻었다.

[266] GC-Mass (이론치: 651.76 g/mol, 측정치: 651 g/mol)

[267]

[268] [합성예 11] R51의 합성

[269]



[270] 질소 기류 하에서 B4 2.0g (4.4mmol), 5'-chloro-1,1',3',1''-Terphenyl 1.3g (4.8mmol), 0.2g (5 mol%)의 Pd₂(dba)₃, tri-tert-butylphosphine 0.1g (0.6mmol) 및 Sodium tert-butoxide 1.3g (13.1mmol)를 30ml의 Toluene에 넣고 110°C에서 4시간

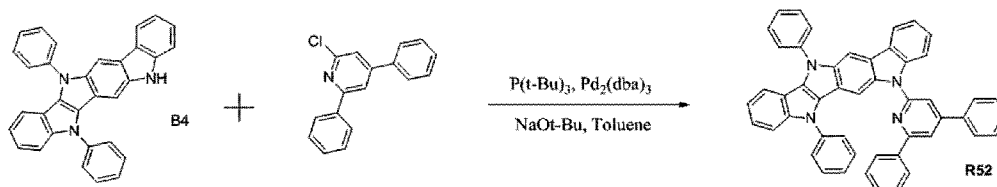
동안 교반하였다. 반응이 종결된 후 메틸렌클로라이드로 유기층을 분리한 다음 MgSO_4 를 사용하여 물을 제거하였다. 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 R51 (1.8g, 3.0mmol, 수율 61%)을 얻었다.

[271] GC-Mass (이론치: 675.82g/mol, 측정치: 675g/mol)

[272]

[273] [합성 예 12] R52의 합성

[274]



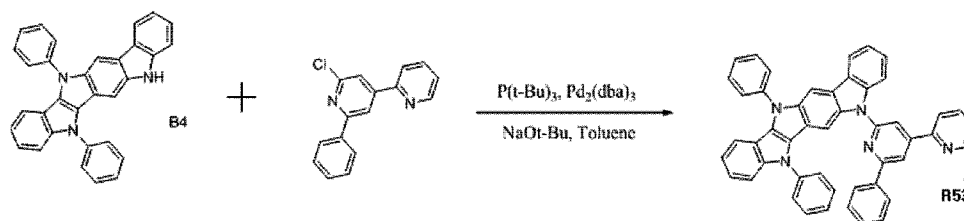
[275] 5'-chloro-1,1',3,1''-Terphenyl 대신 2-chloro-4,6-diphenylpyridine 1.3g (4.8mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 합성에 11과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 R52 (2.0g, 3.0mmol, 수율 68 %)을 얻었다.

[276] GC-Mass (이론치: 676.81 g/mol, 측정치: 676 g/mol)

[277]

[278] [합성 예 13] R53의 합성

[279]



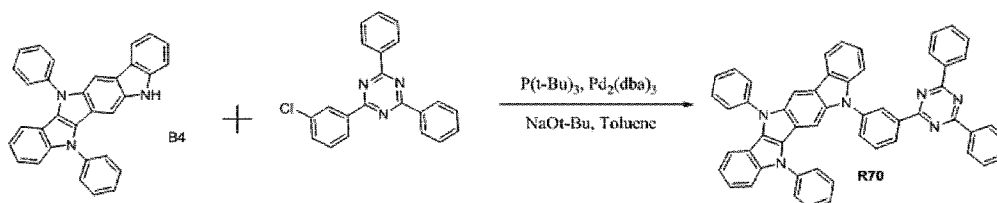
[280] 5'-chloro-1,1',3,1''-Terphenyl 대신 2'-chloro-6'-phenyl-2,4'-bipyridine 1.3g (4.8mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 합성에 11과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 R53 (2.0g, 3.1mmol, 수율 68 %)을 얻었다.

[281] GC-Mass (이론치: 677.79 g/mol, 측정치: 677.79 g/mol)

[282]

[283] [합성 예 14] R70의 합성

[284]



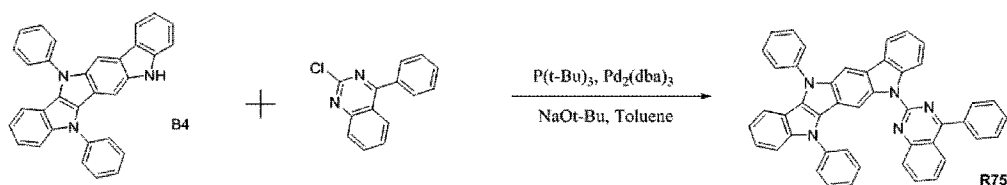
[285] 5'-chloro-1,1',3,1''-Terphenyl 대신 2-(3-chlorophenyl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine 1.7g (4.8mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 합성에 11과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 R70 (2.1g, 2.8mmol, 수율 65 %)을 얻었다.

[286] GC-Mass (이론치: 754.88 g/mol, 측정치: 754.88 g/mol)

[287]

[288] [합성예 15] R75의 합성

[289]



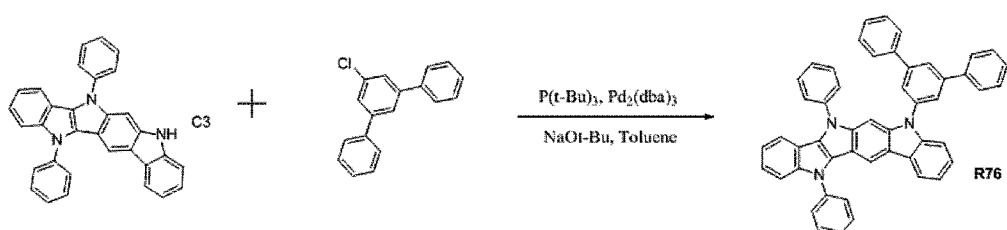
[290] 5'-chloro-1,1',3',1''-Terphenyl 대신 2-chloro-4-phenylquinazoline 1.2g (4.8mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 합성예 11과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 R75 (1.8g, 2.8mmol, 수율 65 %)을 얻었다.

[291] GC-Mass (이론치: 651.76 g/mol, 측정치: 651 g/mol)

[292]

[293] [합성예 16] R76의 합성

[294]



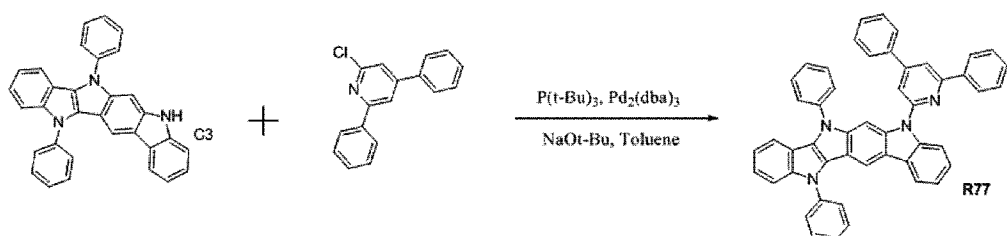
[295] 질소 기류 하에서 C3 2.5g (5.5mmol), 5'-chloro-1,1',3',1''-Terphenyl 1.6g (6.0mmol), 0.3g (5 mol%)의 $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$, tri-tert-butylphosphine 0.1g (0.6mmol) 및 Sodium tert-butoxide 1.6g (16.4mmol)를 40ml의 Toluene에 넣고 110°C에서 4시간 동안 교반하였다. 반응이 종결된 후 메틸렌클로라이드로 유기층을 분리한 다음 MgSO_4 를 사용하여 물을 제거하였다. 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 R76 (2.4g, 3.5mmol, 수율 64%)을 얻었다.

[296] GC-Mass (이론치: 675.82g/mol, 측정치: 675g/mol)

[297]

[298] [합성예 17] R77의 합성

[299]



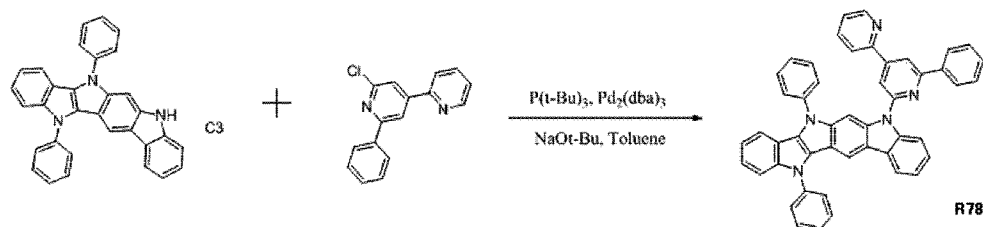
[300] 5'-chloro-1,1',3',1''-Terphenyl 대신 2-chloro-4,6-diphenylpyridine 1.6g (6.0mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 합성예 16과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 R77 (2.3g, 3.3mmol, 수율 61 %)을 얻었다.

[301] GC-Mass (이론치: 676.81 g/mol, 측정치: 676 g/mol)

[302]

[303] [합성예 18] R78의 합성

[304]



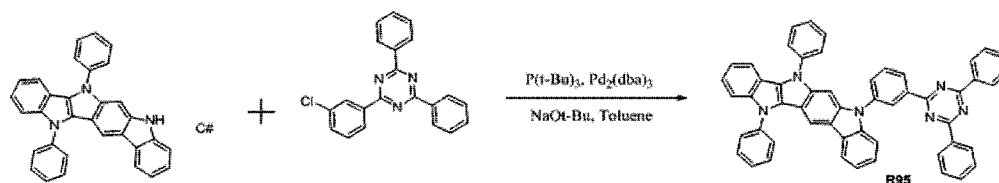
[305] 5'-chloro-1,1',3',1''-Terphenyl 대신 2'-chloro-6'-phenyl-2,4'-bipyridine 1.6g (6.0mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 합성에 16과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 R78 (2.3g, 3.4mmol, 수율 62 %)을 얻었다.

[306] GC-Mass (이론치: 677.79 g/mol, 측정치: 677.79 g/mol)

[307]

[308] [합성예 19] R95의 합성

[309]



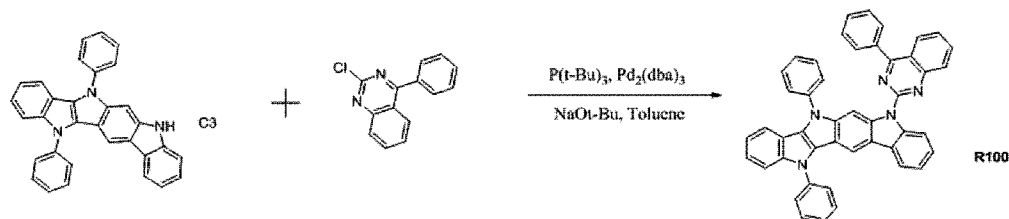
[310] 5'-chloro-1,1',3',1''-Terphenyl 대신 2-(3-chlorophenyl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine 2.1g (6.0mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 합성에 16과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 R95 (2.8g, 3.7mmol, 수율 67 %)을 얻었다.

[311] GC-Mass (이론치: 754.88 g/mol, 측정치: 754.88 g/mol)

[312]

[313] [합성예 20] R100의 합성

[314]



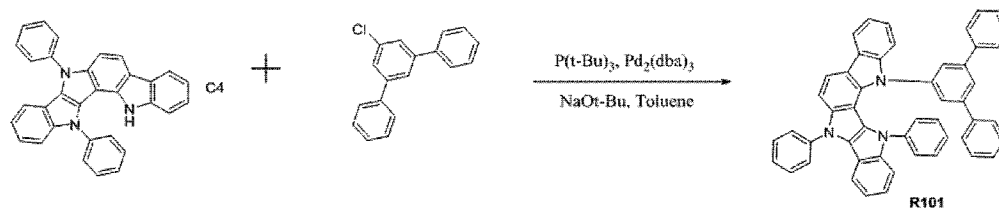
[315] 5'-chloro-1,1',3',1''-Terphenyl 대신 2-chloro-4-phenylquinazoline 1.5g (6.0mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 합성에 16과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 R100 (2.4g, 3.7mmol, 수율 67 %)을 얻었다.

[316] GC-Mass (이론치: 651.76 g/mol, 측정치: 651 g/mol)

[317]

[318] [합성예 21] R101의 합성

[319]



[320] 질소 기류 하에서 C4 2.1g (4.6mmol), 5'-chloro-1,1',3',1''-Terphenyl 1.3g

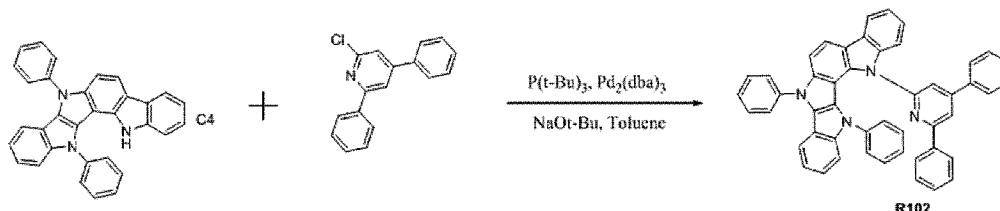
(5.0mmol), 0.2g (5 mol%)의 $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$, tri-tert-butylphosphine 0.1g (0.6mmol) 및 Sodium tert-butoxide 1.3g (13.8mmol)를 30ml의 Toluene을 넣고 110°C에서 4시간 동안 교반하였다. 반응이 종결된 후 메틸렌클로라이드로 유기층을 분리한 다음 MgSO_4 를 사용하여 물을 제거하였다. 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 R101 (2.0g, 2.9mmol, 수율 64%)을 얻었다.

[321] GC-Mass (이론치: 675.82g/mol, 측정치: 675g/mol)

[322]

[323] [합성예 22] R102의 합성

[324]



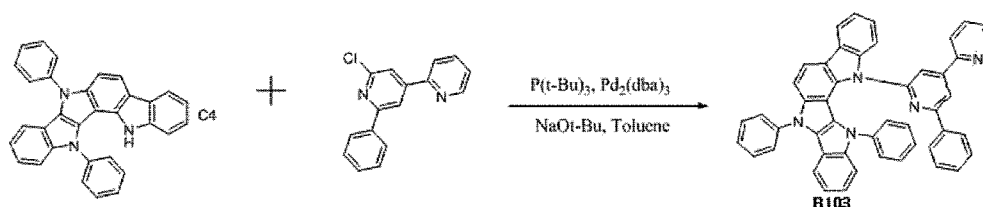
[325] 5'-chloro-1,1',3',1''-Terphenyl 대신 2-chloro-4,6-diphenylpyridine 1.3g (5.0mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 합성예 21과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 R102 (2.0g, 2.9mmol, 수율 64 %)을 얻었다.

[326] GC-Mass (이론치: 676.81 g/mol, 측정치: 676 g/mol)

[327]

[328] [합성예 23] R103의 합성

[329]



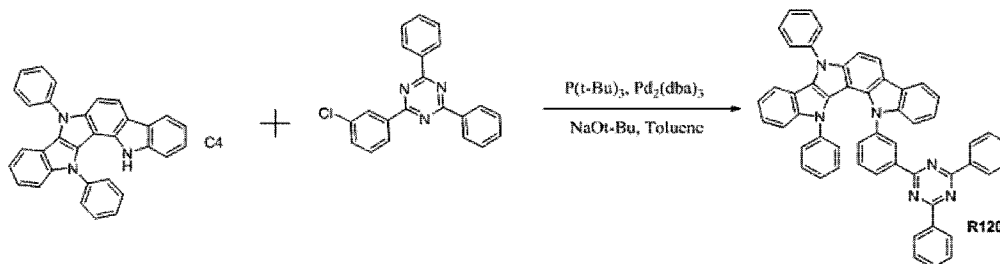
[330] 5'-chloro-1,1',3',1''-Terphenyl 대신 2'-chloro-6'-phenyl-2,4'-bipyridine 1.4g (5.0mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 합성예 21과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 R103 (2.0 g, 2.9mmol, 수율 66 %)을 얻었다.

[331] GC-Mass (이론치: 677.79 g/mol, 측정치: 677.79 g/mol)

[332]

[333] [합성예 24] R120의 합성

[334]



[335] 5'-chloro-1,1',3',1''-Terphenyl 대신 2-(3-chlorophenyl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine 1.7g (5.0mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 합성예 21과 동일한 과정을

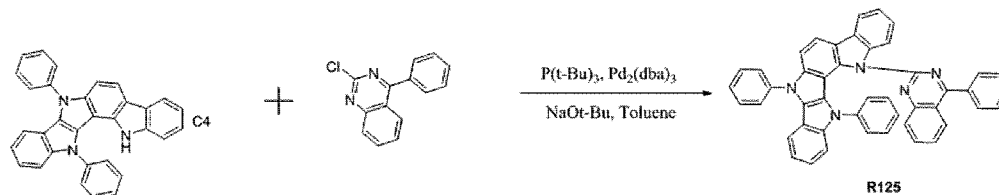
수행하여 목적 화합물인 R120 (2.2g, 2.9mmol, 수율 66 %)을 얻었다.

[336] GC-Mass (이론치: 754.88 g/mol, 측정치: 754.88 g/mol)

[337]

[338] [합성예 25] R125의 합성

[339]



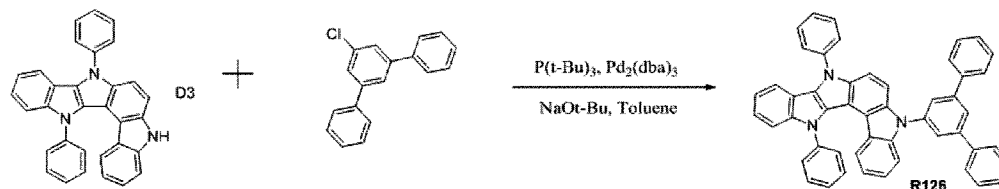
[340] 5'-chloro-1,1',3',1''-Terphenyl 대신 2-chloro-4-phenylquinazoline 1.2g (5.0mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 합성예 21과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 R125 (2.0 g, 3.1mmol, 수율 67 %)을 얻었다.

[341] GC-Mass (이론치: 651.76 g/mol, 측정치: 651 g/mol)

[342]

[343] [합성예 26] R126의 합성

[344]



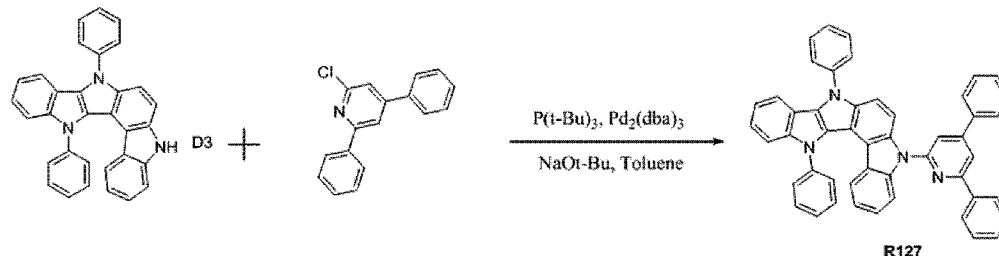
[345] 질소 기류 하에서 D3 4.8g (10.7mmol), 5'-chloro-1,1',3',1''-Terphenyl 3.1g (11.7mmol), 0.5g (5 mol%)의 Pd₂(dba)₃, tri-tert-butylphosphine 0.1g (0.6mmol) 및 Sodium tert-butoxide 3.1g (32.0mmol)를 100ml의 Toluene에 넣고 110°C에서 4시간 동안 교반하였다. 반응이 종결된 후 메틸렌클로라이드로 유기층을 분리한 다음 MgSO₄를 사용하여 물을 제거하였다. 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 R126 (4.6g, 6.8mmol, 수율 64%)을 얻었다.

[346] GC-Mass (이론치: 675.82 g/mol, 측정치: 675 g/mol)

[347]

[348] [합성예 27] R127의 합성

[349]



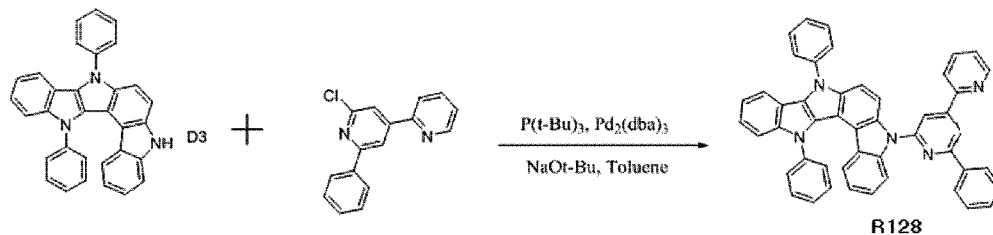
[350] 5'-chloro-1,1',3',1''-Terphenyl 대신 2-chloro-4,6-diphenylpyridine 3.1g (11.7mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 합성예 26과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 R127 (4.5g, 6.6mmol, 수율 62 %)을 얻었다.

[351] GC-Mass (이론치: 676.81 g/mol, 측정치: 676 g/mol)

[352]

[353] [합성 예 28] R128의 합성

[354]



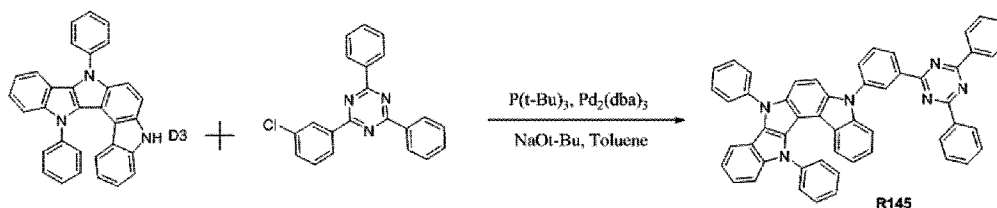
[355] 5'-chloro-1,1',3',1''-Terphenyl 대신 2'-chloro-6'-phenyl-2,4'-bipyridine 3.1g (11.7mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 합성에 26과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 R128 (4.5 g, 6.6mmol, 수율 62 %)을 얻었다.

[356] GC-Mass (이론치: 677.79 g/mol, 측정치: 677.79 g/mol)

[357]

[358] [합성 예 29] R145의 합성

[359]



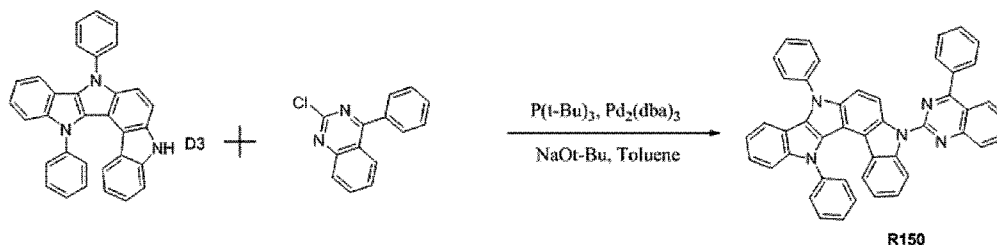
[360] 5'-chloro-1,1',3',1''-Terphenyl 대신 2-(3-chlorophenyl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine 4.0g (11.7mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 합성에 26과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 R145 (5.0g, 6.6mmol, 수율 62 %)을 얻었다.

[361] GC-Mass (이론치: 754.88 g/mol, 측정치: 754.88 g/mol)

[362]

[363] [합성 예 30] R150의 합성

[364]



[365] 5'-chloro-1,1',3',1''-Terphenyl 대신 2-chloro-4-phenylquinazoline 2.8g (11.7mmol)을 사용하는 것을 제외하고는 합성에 26과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 R150 (4.5 g, 6.9mmol, 수율 65 %)을 얻었다.

[366] GC-Mass (이론치: 651.76 g/mol, 측정치: 651 g/mol)

[367]

[368] [실시예 1 내지 18] 녹색 유기 전계 발광 소자의 제조

[369] 합성예에서 합성한 화합물을 통상적으로 알려진 방법으로 고순도 승화정제를 한 후 아래의 과정에 따라 소자를 제조하였다.

[381] 卅 1

[Table 1]

샘플	호스트	구동전압(V)	발광피크(nm)	전류효율(cd/A)
실시예 1	R1	6.2	515	41.2
실시예 2	R3	6.1	515	41.1
실시예 3	R20	6.2	515	41.2
실시예 4	R26	6.3	514	41.7
실시예 5	R28	5.9	515	40.5
실시예 6	R45	5.5	515	41.2
실시예 7	R51	6.2	515	40.9
실시예 8	R53	6.4	515	41.1
실시예 9	R70	6.4	514	42.1
실시예 10	R76	6.2	514	41.5
실시예 11	R78	6.9	514	41.5
실시예 12	R95	6.2	515	41.2
실시예 13	R101	6.1	515	41.1
실시예 14	R103	6.2	515	41.2
실시예 15	R120	6.3	514	41.7
실시예 16	R126	5.9	515	40.5
실시예 17	R128	5.5	515	41.2
실시예 18	R145	6.2	515	40.9
비교예 1	CBP	7.1	517	37.0

[382] 상기 표 1에 나타낸 바와 같이, 본 발명의 화합물을 녹색 유기 전계 발광 소자의 발광층에 사용한 경우(실시예 1 내지 18)가 종래 CBP를 녹색 유기 전계 발광 소자의 발광층에 사용한 경우(비교예 1)보다 효율 및 구동전압이 우수한 것을 확인할 수 있었다.

[383]

[384] [실시예 19 내지 30] 적색 유기 전계 발광 소자의 제조

[385] 합성예에서 합성한 화합물을 통상적으로 알려진 방법으로 고순도 승화정제를 한 후 아래의 과정에 따라 소자를 제조하였다.

[386] 먼저, ITO (Indium tin oxide)가 1500Å 두께로 박막 코팅된 유리 기판을 증류수로 초음파 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.

[387] 이렇게 준비된 ITO 투명 전극 위에 m-MTDATA (60 nm)/TCTA (80 nm)/ 90% 하기 표 2의 호스트 각각의 화합물 + 10 % (piq)₂Ir(acac) (30nm)/BCP (10 nm)/Alq₃ (30 nm)/LiF (1 nm)/Al (200 nm) 순으로 적층하여 소자를 제조하였다.

[388]

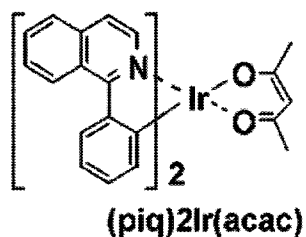
[389] **[비교예 2]**

[390] 발광층 형성시 발광 호스트 물질로서 R2 화합물 대신 CBP를 사용하는 것을 제외하고는 상기 실시예 19과 동일한 과정으로 소자를 제조하였다.

[391]

[392] 상기 실시예 19 내지 30 및 비교예 2에서 사용된 m-MTDATA, TCTA, BCP 및 CBP의 구조는 상기와 같고, (piq)₂Ir(acac)의 구조는 하기와 같다.

[393]



[394]

[395] **[평가예 2]**

[396] 실시예 19 내지 30 및 비교예 2에서 제조한 각각의 적색 유기 전계 발광 소자에 대하여 전류밀도 10 mA/cm²에서의 구동전압, 발광피크 및 전류효율을 측정하고, 그 결과를 하기 표 2에 나타내었다.

[397] 표 2

[Table 2]

샘플	호스트	구동전압(V)	발광피크(nm)	전류효율(cd/A)
실시예 19	R2	4.4	621	12.4
실시예 20	R25	4.3	621	11.2
실시예 21	R27	4.1	620	12.1
실시예 22	R50	4.1	621	11.9
실시예 23	R52	4.4	621	12.4
실시예 24	R75	4.2	621	12.4
실시예 25	R77	4.1	621	11.2
실시예 26	R100	4.0	620	12.1
실시예 27	R102	4.2	621	11.9
실시예 28	R125	4.3	621	12.4
실시예 29	R127	4.8	622	11.4
실시예 30	R150	4.4	620	12.3
비교예 2	CBP	5.5	622	9.1

[398] 상기 표 2에 나타난 바와 같이, 본 발명의 화합물을 적색 유기 전계 발광 소자의 발광층에 사용한 경우(실시예 19 내지 30)가 종래 CBP를 적색 유기 전계 발광 소자의 발광층에 사용한 경우(비교예 2)보다 효율 및 구동전압이 우수한 것을 확인할 수 있었다.

산업상 이용가능성

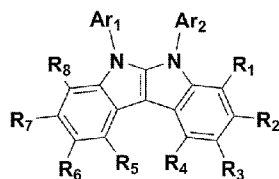
[399] 본 발명의 화학식 1 또는 2로 표시되는 화합물은 열적 안정성 및 발광 특성이 우수하기 때문에 유기 전계 발광 소자의 유기물층의 재료로 사용될 수 있다. 특히, 본 발명의 화학식 1로 표시되는 화합물을 인광 호스트 재료로 사용할 경우, 종래의 호스트 재료에 비해 우수한 발광 성능, 낮은 구동전압, 높은 효율 및 장수명을 갖는 유기 전계 발광 소자를 제조할 수 있고, 나아가 성능 및 수명이 향상된 풀 칼라 디스플레이 패널도 제조할 수 있다.

청구범위

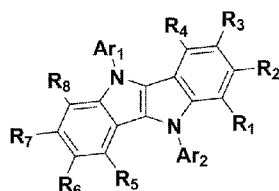
[청구항 1]

하기 화학식 1 또는 2로 표시되는 화합물:

[화학식 1]



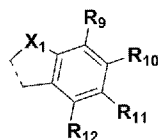
[화학식 2]



상기 화학식 1 또는 2에서,

R₁과 R₂, R₂와 R₃, R₃과 R₄, R₅와 R₆, R₆과 R₇ 또는 R₇와 R₈ 중 적어도 하나는 하기 화학식 3으로 표시되는 축합 고리를 형성하고,

[화학식 3]



상기 화학식 3에서,

점선은 상기 화학식 1 또는 2와 축합이 이루어지는 부분이고,

X₁은 C(Ar₃)(Ar₄), N(Ar₅), O, S 및 Si(Ar₆)(Ar₇)로 이루어진 군에서 선택되며,

R₁ 내지 R₁₂는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 시아노기, 니트로기, C₁~C₄₀의 알킬기, C₂~C₄₀의 알케닐기, C₂~C₄₀의 알키닐기, C₃~C₄₀의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40의

헤테로시클로알킬기, C₆~C₆₀의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60의

헤테로아릴기, C₁~C₄₀의 알킬옥시기, C₆~C₆₀의 아릴옥시기, C₃~C₄₀의

알킬실릴기, C₆~C₆₀의 아릴실릴기, C₁~C₄₀의 알킬보론기, C₆~C₆₀의

아릴보론기, C₆~C₆₀의 아릴포스핀기, C₆~C₆₀의

아릴포스핀옥사이드기 및 C₆~C₆₀의 아릴아민기로 이루어진

군에서 선택되거나, 인접한 기와 결합하여 축합 고리를 형성하며,

Ar₁ 내지 Ar₇은 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, C₃

$\sim C_{40}$ 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,

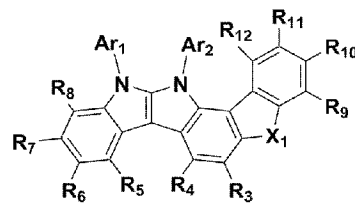
상기 R_1 내지 R_{12} 및 Ar_1 내지 Ar_7 의 알킬기, 알케닐기, 알키닐기, 시클로알킬기, 헤테로시클로알킬기, 아릴기, 헤테로아릴기, 알킬옥시기, 아릴옥시기, 알킬실릴기, 아릴실릴기, 알킬보론기, 아릴보론기, 아릴포스핀기, 아릴포스핀옥사이드기 및 아릴아민기는 각각 독립적으로, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_2 \sim C_{40}$ 의 알케닐기, $C_2 \sim C_{40}$ 의 알키닐기, $C_3 \sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬옥시기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴옥시기, $C_3 \sim C_{40}$ 의 알킬실릴기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴실릴기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬보론기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴보론기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴포스핀기, $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴포스핀옥사이드기 및 $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상으로 치환 또는 비치환된다.

[청구항 2]

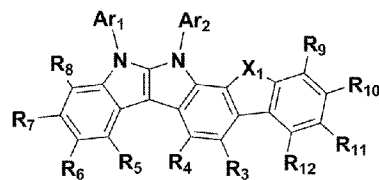
제1항에 있어서,

상기 화학식 1로 표시되는 화합물이 하기 화학식 4 내지 9로 표시되는 화합물로 이루어진 군에서 선택되는 화합물.

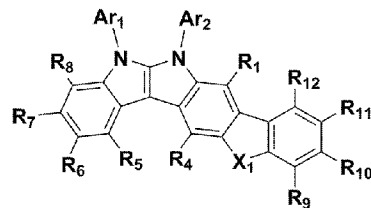
[화학식 4]



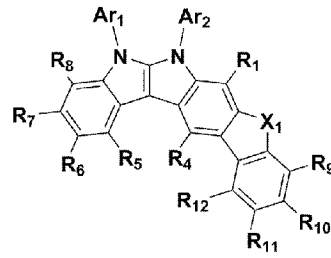
[화학식 5]



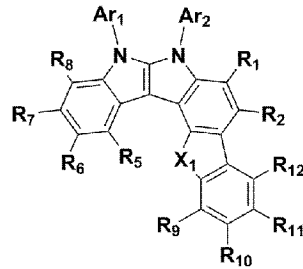
[화학식 6]



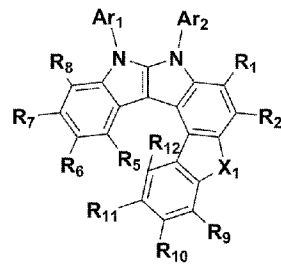
[화학식 7]



[화학식 8]



[화학식 9]



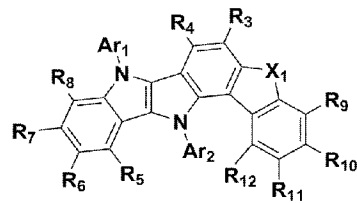
상기 화학식 4 내지 9에서,

Ar₁, Ar₂, X₁ 및 R₁ 내지 R₁₂는 제1항에서 정의한 바와 동일하다.

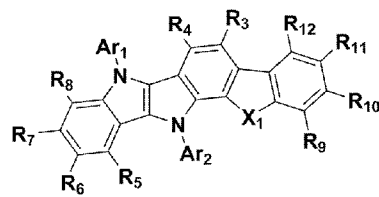
제1항에 있어서,

상기 화학식 2로 표시되는 화합물이 하기 화학식 10 내지 15로 표시되는 화합물로 이루어진 군에서 선택되는 화합물.

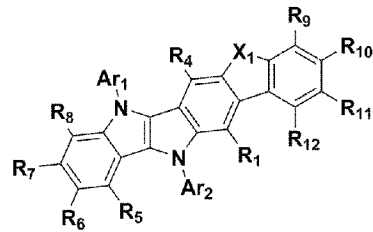
[화학식 10]



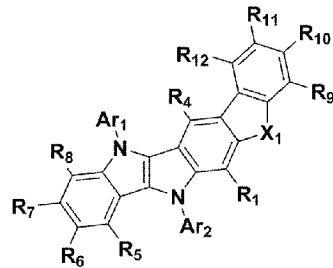
[화학식 11]



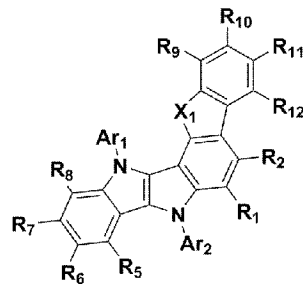
[화학식 12]



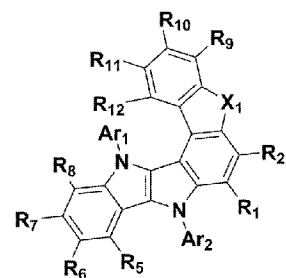
[화학식 13]



[화학식 14]



[화학식 15]



상기 화학식 10 내지 15에서,

Ar₁, Ar₂, X₁ 및 R₁ 내지 R₁₂는 제1항에서 정의한 바와 동일하다.

[청구항 4]

제1항에 있어서,

상기 X₁이 N(Ar₅)인 화합물.

[청구항 5]

제4항에 있어서,

상기 Ar₅가 C₆~C₆₀의 아릴기 또는 핵원자수 5 내지 60의
헤테로아릴기인 화합물.

[청구항 6]

제1항에 있어서,

상기 Ar₁ 및 Ar₂가 각각 독립적으로 C₆~C₆₀의 아릴기 또는 핵원자수
5 내지 60의 헤테로아릴기인 화합물.

[청구항 7]

양극, 음극 및 상기 양극과 음극 사이에 개재(介在)된 1층 이상의

[청구항 8]

유기물층을 포함하는 유기 전계 발광 소자로서,
상기 1층 이상의 유기물층 중 적어도 하나는 제1항 내지 제6항 중
어느 한 항에 기재된 화합물을 포함하는 유기 전계 발광 소자.
제7항에 있어서,
상기 화합물을 포함하는 유기물층이 정공 주입층, 정공 수송층,
전자 수송층 및 발광층으로 이루어진 군에서 선택되는 유기 전계
발광 소자.

[청구항 9]

제8항에 있어서,
상기 화합물을 포함하는 유기물층은 발광층이며,
상기 화합물이 상기 발광층의 인광 호스트인 유기 전계 발광 소자.