

	(19) 대한민국특허청(KR) (12) 공개특허공보(A)	(11) 공개번호 10-2016-0076355 (43) 공개일자 2016년06월30일
(51) 국제특허분류(Int. Cl.) C09K 11/06 (2006.01) C07D 209/82 (2006.01) H01L 51/50 (2006.01)		(71) 출원인 주식회사 두산 서울특별시 중구 장충단로 275 (을지로6가, 두산타워)
(21) 출원번호	10-2014-0186464	(72) 발명자 김홍석 경기도 성남시 분당구 정자일로 55, 101동 1601호 라종규 경기도 안산시 단원구 광덕2로 74, 1205동 702호
(22) 출원일자	2014년12월22일	(74) 대리인 특허법인한벗
심사청구일자	없음	

전체 청구항 수 : 총 8 항

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

(57) 요약

본 발명은 발광능이 우수한 신규 화합물 및 상기 화합물을 하나 이상의 유기물층에 포함함으로써 발광효율, 구동 전압, 수명 등의 특성이 향상된 유기 전계 발광 소자에 관한 것이다.

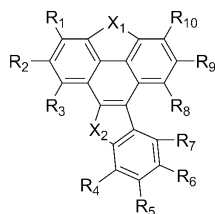
명세서

청구범위

청구항 1

하기 화학식 1로 표시되는 화합물:

[화학식 1]



상기 화학식 1에서,

X_1 및 X_2 는 각각 독립적으로 O, S, $N(Ar_1)$, 및 $C(Ar_2)(Ar_3)$ 로 구성된 군으로부터 선택되고;

R_1 내지 R_{10} 은 서로 같거나 또는 상이하며, 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 시아노기, 니트로기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_2\sim C_{40}$ 의 알케닐기, $C_2\sim C_{40}$ 의 알키닐기, $C_3\sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬옥시기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴옥시기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬실릴기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴실릴기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬보론기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴보론기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴포스핀기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴포스핀옥사이드기 및 $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택되고,

여기서, 상기 R_1 과 R_2 , R_2 와 R_3 , R_4 와 R_5 , R_5 와 R_6 , R_6 와 R_7 , 및 R_9 와 R_{10} 중 하나는 서로 결합하여 N, O, S, Si 중 하나 이상을 포함하는 축합 헤테로 방향족환 또는 축합 방향족환을 형성할 수 있으며,

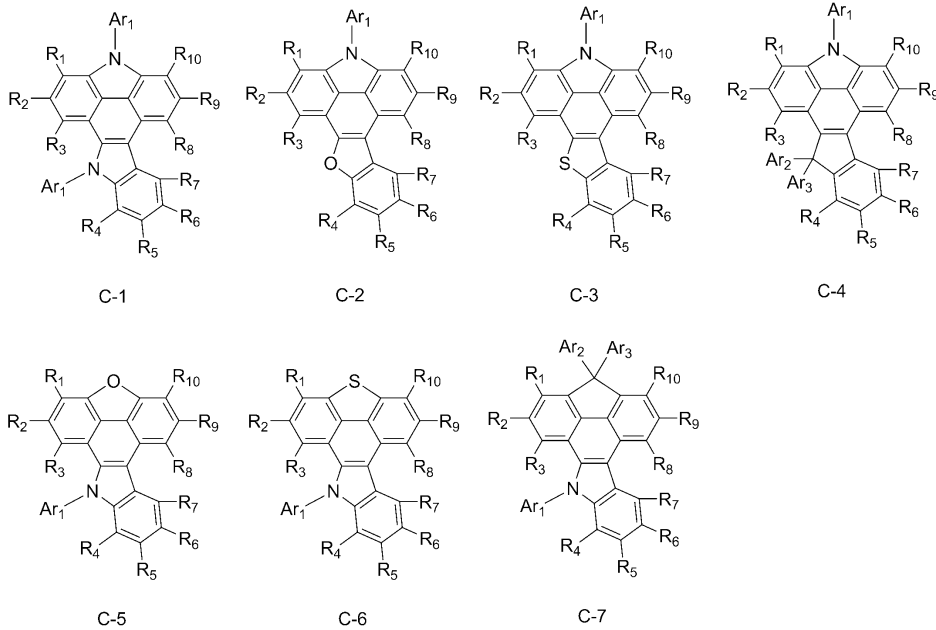
Ar_1 내지 Ar_3 는 서로 같거나 또는 상이하며, 각각 독립적으로 $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_2\sim C_{40}$ 의 알케닐기, $C_2\sim C_{40}$ 의 알키닐기, $C_3\sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬옥시기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴옥시기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬실릴기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴실릴기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬보론기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴보론기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴포스핀기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴포스핀옥사이드기 및 $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택되고,

상기 Ar_1 내지 Ar_3 , R_1 내지 R_{10} 에서, 알킬기, 시클로알킬기, 헤테로시클로알킬기, 아릴기, 헤테로아릴기, 알킬옥시기, 아릴옥시기, 알킬실릴기, 아릴실릴기, 알킬보론기, 아릴보론기, 아릴포스핀기, 아릴포스핀옥사이드기 및 아릴아민기는, 각각 독립적으로 $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_2\sim C_{40}$ 의 알케닐기, $C_2\sim C_{40}$ 의 알키닐기, $C_3\sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬옥시기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴옥시기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬실릴기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴실릴기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬보론기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴보론기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴포스핀기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴포스핀옥사이드기 및 $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택된 1 종 이상으로 치환될 수 있으며, 이때 복수 개의 치환기로 치환될 경우 이들은 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

청구항 2

제1항에 있어서,

상기 화학식 1의 화합물은 하기 화학식 C-1 내지 화학식 C-7중 어느 하나로 표시되는 것을 특징으로 하는 화합물:



상기 C-1 내지 C-7로 표시되는 화합물에서,

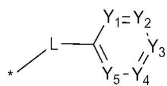
Ar₁ 내지 Ar₃, R₁ 내지 R₁₀은 제1항에서 정의된 바와 동일하다.

청구항 3

제2항에 있어서,

상기 Ar₁ 중 적어도 하나는 하기 화학식 2로 표시되는 치환체인 것을 특징으로 하는 화합물:

[화학식 2]



상기 화학식 2에서,

*는 상기 화학식 1에 결합되는 부분을 의미하고;

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

Y₁ 내지 Y₅는 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 N 또는 C(R₁₁)이며, 다만 Y₁ 내지 Y₅ 중 적어도 하나는 N이고, 이때 R₁₁이 복수인 경우, 이들은 서로 동일하거나 또는 상이하며;

R₁₁은 수소, 중수소, 할로젠, 시아노기, 니트로기, C₁~C₄₀의 알킬기, C₂~C₄₀의 알케닐기, C₂~C₄₀의 알키닐기, C₆~C₄₀의 아릴기, 핵원자수 5 내지 40의 헤테로아릴기, C₆~C₄₀의 아릴옥시기, C₁~C₄₀의 알킬옥시기, C₃~C₄₀의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, C₆~C₄₀의 아릴아민기, C₁~C₄₀의 알킬실릴기, C₁~C₄₀의 알킬보론기, C₆~C₄₀의 아릴보론기, C₆~C₄₀의 아릴포스핀기, C₆~C₄₀의 아릴포스핀옥사이드기 및 C₆~C₄₀의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택되거나, 또는 인접하는 기와 결합하여 축합 고리를 형성할 수 있으며;

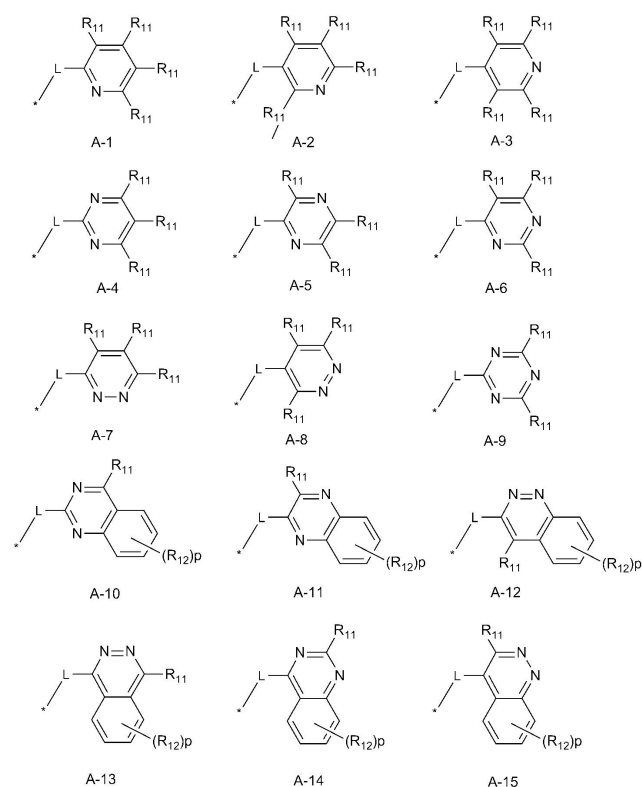
상기 R₁₁에서, 알킬기, 알케닐기, 알키닐기, 아릴기, 헤테로아릴기, 아릴옥시기, 알킬옥시기, 시클로알킬기, 헤테로시클로알킬기, 아릴아민기, 알킬실릴기, 알킬보론기, 아릴보론기, 아릴포스핀기, 아릴포스핀옥사이드기 및 아릴실릴기는 각각 독립적으로 중수소, 할로젠, 시아노기, 니트로기, C₁~C₄₀의 알킬기, C₂~C₄₀의 알케닐기, C₂~C₄₀의 알키닐기, C₆~C₄₀의 아릴기, 핵원자수 5 내지 40의 헤테로아릴기, C₆~C₄₀의 아릴옥시기, C₁~C₄₀의 알킬옥시기,

C₆~C₄₀의 아릴아민기, C₃~C₄₀의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, C₁~C₄₀의 알킬실릴기, C₁~C₄₀의 알킬보론기, C₆~C₄₀의 아릴보론기, C₆~C₄₀의 아릴포스핀기, C₆~C₄₀의 아릴포스핀옥사이드기 및 C₆~C₄₀의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상의 치환기로 치환될 수 있으며, 이때 상기 치환기가 복수인 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

청구항 4

제 2항에 있어서,

상기 Ar₁ 중 적어도 하나는 하기 A-1 내지 A-15중 어느 하나로 표시되는 치환체인 것을 특징으로 하는 화합물.



상기 A-1 내지 A-15에서,

L 및 R₁₁은 각각 상기 화학식 2에서 정의된 바와 같고,

p는 0 내지 4의 정수이며,

R₁₂는 중수소, 할로젠, 시아노기, 니트로기, C₁~C₄₀의 알킬기, C₂~C₄₀의 알케닐기, C₂~C₄₀의 알키닐기, C₃~C₄₀의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, C₆~C₄₀의 아릴기, 핵원자수 5 내지 40의 헤테로아릴기, C₆~C₄₀의 아릴옥시기, C₁~C₄₀의 알킬옥시기, C₆~C₄₀의 아릴아민기, C₁~C₄₀의 알킬실릴기, C₁~C₄₀의 알킬보론기, C₆~C₄₀의 아릴보론기, C₆~C₄₀의 아릴포스핀기, C₆~C₄₀의 아릴포스핀옥사이드기 및 C₆~C₄₀의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택되거나, 또는 인접하는 기와 결합하여 축합 고리를 형성할 수 있으며, 이때 R₁₂가 복수인 경우, 이들은 서로 동일하거나 또는 상이하하며;

상기 R₁₂에서, 알킬기, 알케닐기, 알키닐기, 시클로알킬기, 헤테로시클로알킬기, 아릴기, 헤테로아릴기, 아릴옥시기, 알킬옥시기, 아릴아민기, 알킬실릴기, 알킬보론기, 아릴보론기, 아릴포스핀기, 아릴포스핀옥사이드기 및 아릴실릴기는 각각 독립적으로 중수소, 할로젠, 시아노기, 니트로기, C₁~C₄₀의 알킬기, C₂~C₄₀의 알케닐기, C₂~C₄₀의 알키닐기, C₃~C₄₀의 시클로알킬기, 핵원자수 5 내지 40의 헤테로아릴기, C₆~C₄₀의 아릴옥시기, C₁~C₄₀의 알킬옥시기, C₆~C₄₀의 아릴아민기, C₃~C₄₀의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, C₁~C₄₀의 알킬실릴기, C₁~C₄₀의 알킬보론기, C₆~C₄₀의 아릴보론기, C₆~C₄₀의 아릴포스핀기, C₆~C₄₀의 아릴포스핀옥사이드기 및 C₆~C₄₀의 아

릴릴기로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상의 치환기로 치환될 수 있으며, 이때 상기 치환기가 복수 개인 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

청구항 5

제1항에 있어서,

상기 X_1 및 X_2 는 모두 $N(Ar_1)$ 이며,

Ar_1 은 각각 독립적으로 $C_6 \sim C_{60}$ 의 아릴기, 또는 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴기이며,

상기 아릴기와 헤테로아릴기는 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 알킬닐기, $C_6 \sim C_{40}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 40의 헤테로아릴기, $C_6 \sim C_{40}$ 의 아릴옥시기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬옥시기, $C_6 \sim C_{40}$ 의 아릴아민기, $C_3 \sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬실릴기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬보론기, $C_6 \sim C_{40}$ 의 아릴보론기, $C_6 \sim C_{40}$ 의 아릴포스핀기, $C_6 \sim C_{40}$ 의 아릴포스핀옥사이드기 및 $C_6 \sim C_{40}$ 의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상의 치환기로 치환되거나 또는 비치환되는 것을 특징으로 하는 화합물.

청구항 6

양극, 음극, 및 상기 양극과 음극 사이에 개재(介在)된 1층 이상의 유기물층을 포함하는 유기 전계 발광 소자로서,

상기 1층 이상의 유기물층 중에서 적어도 하나는 제1항 내지 제5항 중 어느 한 항에 기재된 화학식 1의 화합물을 포함하는 것을 특징으로 하는 유기 전계 발광 소자.

청구항 7

제6항에 있어서, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 발광층의 인광 호스트로 사용되는 것을 특징으로 하는 유기 전계 발광 소자.

청구항 8

제6항에 있어서, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하는 1층 이상의 유기물층은 발광층, 발광보조층, 정공수송층 및 전자주입층으로 이루어진 군에서 선택되는 것을 특징으로 하는 유기 전계 발광 소자.

발명의 설명

기술 분야

[0001] 본 발명은 신규한 유기 발광 화합물 및 이를 이용한 유기 전계 발광 소자에 관한 것으로, 보다 상세하게는 정공 주입 및 수송능, 발광능 등이 우수한 신규한 축합 벤조카바졸계 화합물 및 이를 하나 이상의 유기물층에 포함함으로써 발광효율, 구동 전압, 수명 등의 특성이 향상된 유기 전계 발광 소자에 관한 것이다.

배경 기술

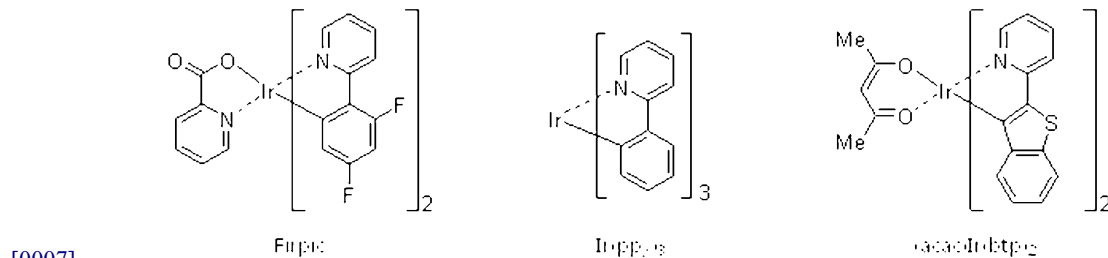
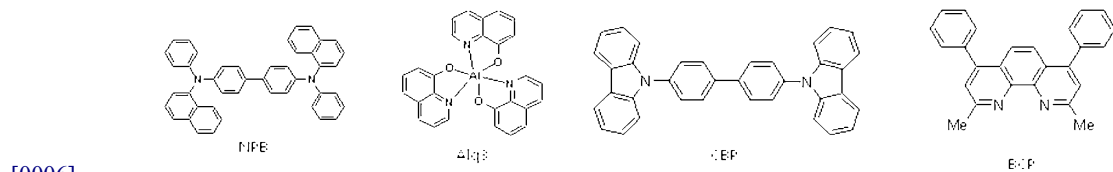
[0002] 1950년대 Bernanose의 유기 박막 발광 관측을 시점으로 1965년 안트라센 단결정을 이용한 청색 전기발광으로 이어진 유기 전계 발광 (electroluminescent, EL) 소자(이하, 간단히 '유기 EL 소자'로 칭함)에 대한 연구는 1987년 탕(Tang)에 의하여 정공층과 발광층의 기능층으로 나눈 적층구조의 유기 EL 소자가 제시되었다. 이후 고효율, 고수명의 유기 EL 소자를 만들기 위하여, 소자 내 각각의 특징적인 유기물 층을 도입하는 형태로 발전하여 왔으며, 이에 사용되는 특화된 물질의 개발로 이어졌다.

[0003] 유기 전계 발광 소자는 두 전극 사이에 전압을 걸어 주면 양극에서는 정공이 주입되고, 음극에서는 전자가 유기물층으로 주입된다. 주입된 정공과 전자가 만났을 때 엑시톤(exciton)이 형성되며, 이 엑시톤이 바닥상태로 떨어질 때 빛이 나게 된다. 이때 유기물층으로 사용되는 물질은 그 기능에 따라, 발광 물질, 정공 주입 물질, 정공 수송 물질, 전자 수송 물질, 전자 주입 물질 등으로 분류될 수 있다.

[0004] 유기 EL 소자의 발광층 형성재료는 발광색에 따라 청색, 녹색, 적색 발광 재료로 구분될 수 있다. 그밖에, 보

다 나은 천연색을 구현하기 위한 발광재료로 노란색 및 주황색 발광재료도 사용된다. 또한, 색순도의 증가와 에너지 전이를 통한 발광 효율을 증가시키기 위하여, 발광 재료로서 호스트/도펀트 계를 사용할 수 있다. 도펀트 물질은 유기 물질을 사용하는 형광 도펀트와 Ir, Pt 등의 중원자(heavy atoms)가 포함된 금속 착체 화합물을 사용하는 인광 도펀트로 나눌 수 있다. 이러한 인광 재료의 개발은 이론적으로 형광에 비해 4배까지의 발광 효율을 향상시킬 수 있어 인광 도펀트 뿐만 아니라 인광 호스트 재료들에 대해 관심이 집중되고 있다.

[0005] 현재까지 정공 주입층, 정공 수송층, 정공 차단층, 전자 수송층으로는, 하기 화학식으로 표현된 NPB, BCP, Alq₃ 등이 널리 알려져 있고, 발광 재료는 안트라센 유도체들이 형광 도펀트/호스트 재료로서 보고되고 있다. 특히 발광재료 중 효율 향상 측면에서 큰 장점을 가지고 있는 인광 재료로서는 Firpic, Ir(ppy)₃, (acac)Ir(btp)₂ 등과 같은 Ir을 포함하는 금속 착체 화합물이 청색, 녹색, 적색 도펀트 재료로 사용되고 있다. 현재까지는 CBP가 인광 호스트 재료로 우수한 특성을 나타내고 있다.



[0008] 그러나 기존의 재료들은 발광 특성 측면에서는 유리한 면이 있으나, 유리전이온도가 낮고 열적 안정성이 매우 좋지 않아 유기 EL 소자에서의 수명 측면에서 만족할만한 수준이 되지 못하고 있다.

선행기술문헌

특허문헌

[0009] (특허문헌 0001) 대한민국 공개특허 2011-0066763

발명의 내용

해결하려는 과제

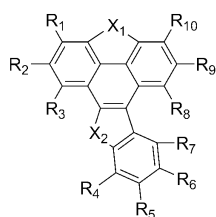
[0010] 본 발명은 유기 전계 발광 소자에 적용할 수 있으며, 발광능이 우수한 신규 유기 화합물을 제공하는 것을 목적으로 한다.

[0011] 또한 본 발명은 상기 신규 유기 화합물을 포함하여 낮은 구동전압과 높은 발광효율을 나타내며 수명이 향상되는 유기 전계 발광 소자를 제공하는 것을 또 다른 목적으로 한다.

과제의 해결 수단

[0012] 상기 목적을 달성하기 위하여, 본 발명은 하기 화학식 1로 표시되는 화합물을 제공한다.

화학식 1



[0013]

[0014]

상기 화학식 1에서,

[0015]

X_1 및 X_2 는 각각 독립적으로 O, S, N(Ar₁), 및 C(Ar₂)(Ar₃)로 구성된 군으로부터 선택되고;

[0016]

R₁ 내지 R₁₀은 서로 같거나 또는 상이하며, 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 시아노기, 니트로기, C₁~C₄₀의 알킬기, C₂~C₄₀의 알케닐기, C₂~C₄₀의 알키닐기, C₃~C₄₀의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, C₆~C₆₀의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴기, C₁~C₄₀의 알킬옥시기, C₆~C₆₀의 아릴옥시기, C₁~C₄₀의 알킬실릴기, C₆~C₆₀의 아릴실릴기, C₁~C₄₀의 알킬보론기, C₆~C₆₀의 아릴보론기, C₆~C₆₀의 아릴포스핀기, C₆~C₆₀의 아릴포스핀옥사이드기 및 C₆~C₆₀의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택되고,

[0017]

여기서, 상기 R₁과 R₂, R₂와 R₃, R₄와 R₅, R₅와 R₆, R₆와 R₇, 및 R₉와 R₁₀ 중 하나는 서로 결합하여 N, O, S, Si 중 하나 이상을 포함하는 축합 헤테로 방향족환 또는 축합 방향족환을 형성할 수 있으며,

[0018]

Ar₁ 내지 Ar₃는 서로 같거나 또는 상이하며, 각각 독립적으로 C₁~C₄₀의 알킬기, C₂~C₄₀의 알케닐기, C₂~C₄₀의 알키닐기, C₃~C₄₀의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, C₆~C₆₀의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴기, C₁~C₄₀의 알킬옥시기, C₆~C₆₀의 아릴옥시기, C₁~C₄₀의 알킬실릴기, C₆~C₆₀의 아릴실릴기, C₁~C₄₀의 알킬보론기, C₆~C₆₀의 아릴보론기, C₆~C₆₀의 아릴포스핀기, C₆~C₆₀의 아릴포스핀옥사이드기 및 C₆~C₆₀의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택되고,

[0019]

상기 Ar₁ 내지 Ar₃, R₁ 내지 R₁₀에서, 알킬기, 시클로알킬기, 헤테로시클로알킬기, 아릴기, 헤테로아릴기, 알킬옥시기, 아릴옥시기, 알킬실릴기, 아릴실릴기, 알킬보론기, 아릴보론기, 아릴포스핀기, 아릴포스핀옥사이드기 및 아릴아민기는, 각각 독립적으로 C₁~C₄₀의 알킬기, C₂~C₄₀의 알케닐기, C₂~C₄₀의 알키닐기, C₃~C₄₀의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, C₆~C₆₀의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴기, C₁~C₄₀의 알킬옥시기, C₆~C₆₀의 아릴옥시기, C₁~C₄₀의 알킬실릴기, C₆~C₆₀의 아릴실릴기, C₁~C₄₀의 알킬보론기, C₆~C₆₀의 아릴보론기, C₆~C₆₀의 아릴포스핀기, C₆~C₆₀의 아릴포스핀옥사이드기 및 C₆~C₆₀의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상으로 치환될 수 있으며, 이때 복수 개의 치환기로 치환될 경우 이들은 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

[0020]

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 1로 표시되는 화합물을 포함하는 것을 특징으로 하는 유기 전계 발광 소자를 제공한다.

[0021]

여기서, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 발광층의 인광 호스트로 사용될 수 있다. 또한 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하는 1층 이상의 유기물층은 발광층, 발광보조층, 정공수송층 및 전자수송층으로 이루어진 군에서 선택될 수 있다.

발명의 효과

[0022]

본 발명의 화학식 1로 표시되는 화합물은 열적 안정성 및 발광 특성이 우수하기 때문에 유기 전계 발광 소자의 유기물층의 재료로 사용될 수 있다.

[0023]

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.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

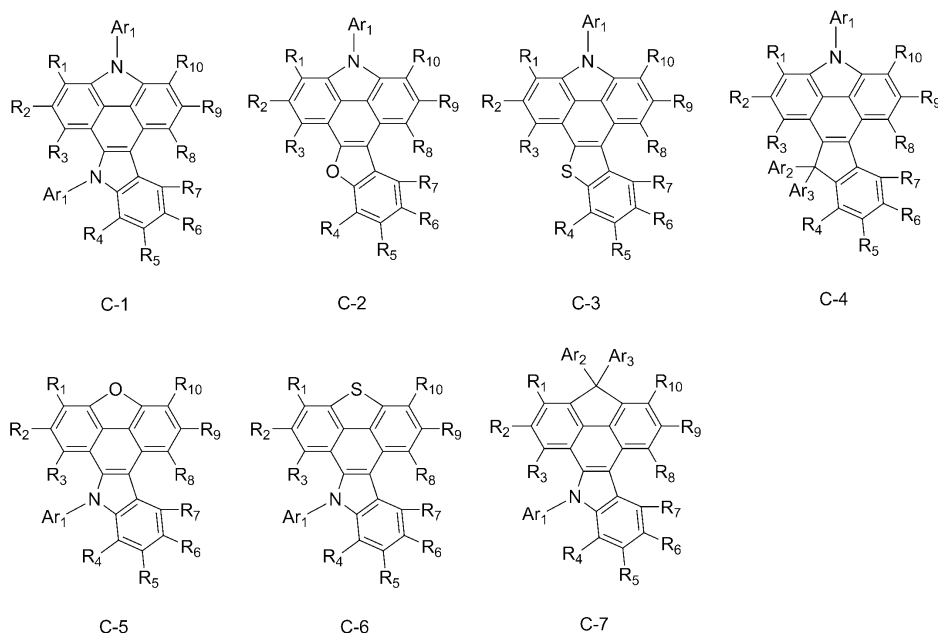
- [0024] 이하, 본 발명을 상세히 설명한다.
- [0025] <신규 유기 화합물>
- [0026] 본 발명은 종래 유기 EL 소자용 재료 [예: 4,4-dicarbazolybiphenyl (이하 CBP로 표시함)] 보다 높은 분자량을 가지면서, 우수한 구동 전압 특성과 효율을 갖는 상기 화학식 1로 표시되는 신규 축합벤조카바졸계 화합물을 제공한다.
- [0027] 6H-benzo[def]carbazole은 9H-carbazole과 에너지 준위가 유사하다. 이러한 6H-benzo[def]carbazole에 축합 환이 형성된 본 발명의 신규 화합물은 기존의 인광 호스트와 에너지 준위가 유사하여 에너지 밴드 갭이 넓고, 높은 삼중항 에너지 준위를 가진다.
- [0028] 또한 본 발명의 화학식 1로 표시되는 축합벤조카바졸계 화합물은, 삼중항 에너지가 높고 화학적으로 안정한 벤조카바졸 구조를 기본으로 하여 좋은 인광 발광 효율 특성을 가질 수 있으며, 이러한 기본 구조에 다양한 기능을 갖는 작용기가 도입됨에 따라 다양한 에너지 밴드갭 및 화학적 특성을 가질 수 있다. 또한 기존 호스트 재료에 비해 높은 분자량을 가져 상대적으로 열안정성이 강해져 재료의 수명특성이 뛰어나 소자의 구동 수명이 매우 우수할 뿐만 아니라 전력 효율의 상승을 유도하여 소비전력이 개선된 OLED소자를 제조할 수 있는 장점이 있다.
- [0029] 본 발명의 화학식 1로 표시되는 화합물에서는, 아릴기(예, 페닐, 비페닐, 터페닐, 트리페닐렌, 나프탈렌, 안트라센), 아릴아민기 등의 우수한 정공수송성을 갖는 작용기가 도입됨에 따라, 전체적으로 넓은 밴드 갭과 우수한 정공 주입, 수송성을 가지므로 정공수송층, 발광보조층 등으로 사용될 수 있다.
- [0030] 한편 본 발명에 따른 화학식 1로 표시되는 화합물에, 함질소 헤테로환, (예, 피리딘, 피리미딘, 피라진, 트리아진, 이미다졸, 피롤, 퀴놀린, 퀴나졸린 등), 포스핀 옥사이드, 시아노기 등의 우수한 전자주입, 수송성을 갖는 작용기가 도입될 경우 전체적으로 우수한 전자 주입 및 수송성을 가지므로 전자주입층, 전자수송층, 정공장벽층 등으로 사용될 수 있다.
- [0031] 본 발명에 따라 화학식 1로 표시되는 화합물에서, X_1 및 X_2 는 서로 동일하거나 또는 상이하며, 각각 독립적으로 O, S, $N(Ar_1)$, 및 $C(Ar_2)(Ar_3)$ 로 구성된 군으로부터 선택된다. 보다 구체적으로, X_1 및 X_2 중 적어도 하나는 $N(Ar_1)$ 이며, 더욱 바람직하게는 X_1 및 X_2 모두 $N(Ar_1)$ 이다. 이때 각각의 Ar_1 은 동일하거나 상이할 수 있다.
- [0032] 또한 R_1 내지 R_{10} 은 서로 같거나 또는 상이하며, 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 시아노기, 니트로기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_2\sim C_{40}$ 의 알케닐기, $C_2\sim C_{40}$ 의 알킬닐기, $C_3\sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬옥시기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴옥시기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬실릴기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴실릴기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬보론기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴보론기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴포스핀기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴포스핀옥사이드기 및 $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택된다. 여기서, 상기 R_1 과 R_2 , R_2 와 R_3 , R_4 와 R_5 , R_5 와 R_6 , R_6 와 R_7 , 및 R_9 와 R_{10} 중 하나는 서로 결합하여 N, O, S, Si 중 하나 이상을 포함하는 축합 헤테로 방향족환 또는 축합 방향족환을 형성할 수 있다.
- [0033] 본 발명에서, R_1 내지 R_{10} 은 서로 같거나 또는 상이하며, 각각 독립적으로 수소, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴기, 및 $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택되는 것이 바람직하다.
- [0034] 상기 화학식 1에서, Ar_1 내지 Ar_3 는 서로 같거나 또는 상이하며, 각각 독립적으로 $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_2\sim C_{40}$ 의 알케닐기, $C_2\sim C_{40}$ 의 알킬닐기, $C_3\sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬옥시기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴옥시기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬실릴기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴실릴기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬보론기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴보론기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴포스핀기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴포스핀옥사이드기

및 C₆~C₆₀의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택된다.

[0035] 보다 구체적으로, 상기 Ar₁ 내지 Ar₃는 서로 같거나 또는 상이하며, 각각 독립적으로 C₆~C₆₀의 아릴기, 또는 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴기인 것이 바람직하다. 일례로, 상기 C₆~C₆₀의 아릴기는 페닐기, 비페닐기, 나프틸기, 페난트렌기, 파이렌기, 트리페닐렌기, 플루오렌기 등에서 선택될 수 있으며, 상기 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴기는 피리딘, 피리미딘, 트리아진, 퀴나졸린, 카바졸, 디벤조퓨란, 디벤조싸이오펜 등에서 선택될 수 있다.

[0036] 상기 Ar₁ 내지 Ar₃, R₁ 내지 R₁₀에서, 알킬기, 시클로알킬기, 헤테로시클로알킬기, 아릴기, 헤테로아릴기, 알킬옥시기, 아릴옥시기, 알킬실릴기, 아릴실릴기, 알킬보론기, 아릴보론기, 아릴포스핀기, 아릴포스핀옥사이드기 및 아릴아민기는, 각각 독립적으로 C₁~C₄₀의 알킬기, C₂~C₄₀의 알케닐기, C₂~C₄₀의 알키닐기, C₃~C₄₀의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, C₆~C₆₀의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴기, C₁~C₄₀의 알킬옥시기, C₆~C₆₀의 아릴옥시기, C₁~C₄₀의 알킬실릴기, C₆~C₆₀의 아릴실릴기, C₁~C₄₀의 알킬보론기, C₆~C₆₀의 아릴보론기, C₆~C₆₀의 아릴포스핀기, C₆~C₆₀의 아릴포스핀옥사이드기 및 C₆~C₆₀의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택된 1 종 이상으로 치환될 수 있으며, 이때 복수 개의 치환기로 치환될 경우 이들은 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

[0037] 본 발명에 따른 화학식 1로 표시되는 화합물은 하기 C-1 내지 C-7 중 어느 하나로 보다 구체화될 수 있다.



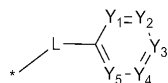
[0038]

[0039] 상기 C-1 내지 C-7로 표시되는 화합물에서, Ar₁ 내지 Ar₃, R₁ 내지 R₁₀은 각각 화학식 1에서 정의된 바와 동일하다.

[0040] 특히, 본 발명에서 Ar₁ 위치에 방향족 환 또는 헤테로 방향족 환이 치환기로 도입될 경우, 전자이동성을 향상시켜 발광층에서의 정공과 전자의 균형을 맞추고, 열적 안정한 구조로 효율 특성을 극대화 할 수 있는 인광 호스트 재료로서의 장점이 있다.

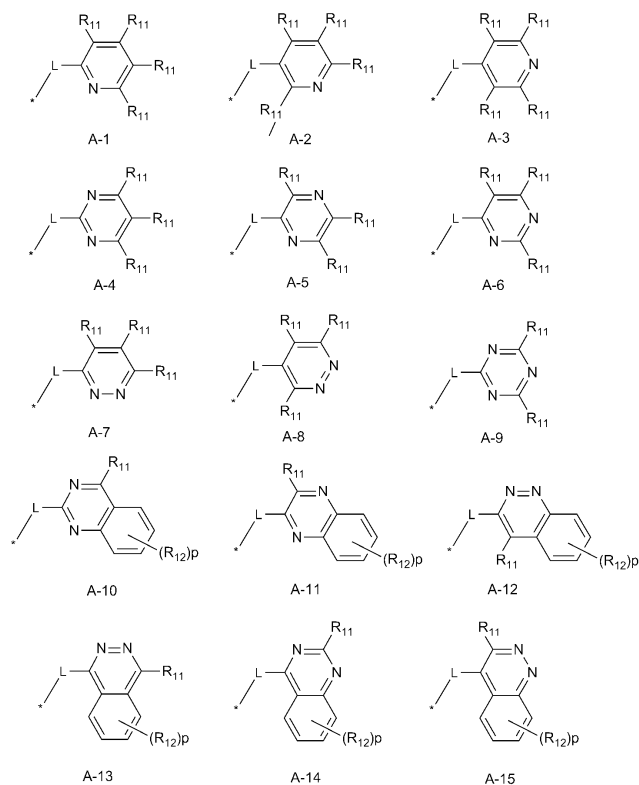
[0041] 본 발명의 바람직한 일례에 따르면, 상기 Ar₁은 하기 화학식 2로 표시되는 치환체이거나 또는 페닐기일 수 있다.

화학식 2



[0042]

- [0043] 상기 화학식 2에서,
- [0044] *는 상기 화학식 1에 결합되는 부분을 의미하고;
- [0045] L은 단일결합이거나, 또는 C₆~C₁₈의 아릴렌기 및 핵원자수 5 내지 18의 헤테로아릴렌기로 이루어진 군에서 선택되고, 바람직하게 단일결합이거나, 페닐렌기 또는 비페닐렌기일 수 있다.
- [0046] Y₁ 내지 Y₅는 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 N 또는 C(R₁₁)이며, 다만 Y₁ 내지 Y₅ 중 적어도 하나는 N이고, 이때 Y₁ 내지 Y₅ 중 2 이상이 C(R₁₁)인 경우, 복수 개의 R₁₁은 동일하게 표기되더라도 서로 동일하거나 상이하며,
- [0047] R₁₁은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 시아노기, 니트로기, C₁~C₄₀의 알킬기, C₂~C₄₀의 알케닐기, C₂~C₄₀의 알키닐기, C₆~C₄₀의 아릴기, 핵원자수 5 내지 40의 헤테로아릴기, C₆~C₄₀의 아릴옥시기, C₁~C₄₀의 알킬옥시기, C₃~C₄₀의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, C₆~C₄₀의 아릴아민기, C₁~C₄₀의 알킬실릴기, C₁~C₄₀의 알킬보론기, C₆~C₄₀의 아릴보론기, C₆~C₄₀의 아릴포스핀기, C₆~C₄₀의 아릴포스핀옥사이드기 및 C₆~C₄₀의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택되거나, 또는 인접하는 기(예컨대, L, 인접하는 다른 R₁₁)와 결합하여 축합 고리를 형성할 수 있다.
- [0048] 이때 상기 R₁₁에서, 알킬기, 알케닐기, 알키닐기, 아릴기, 헤테로아릴기, 아릴옥시기, 알킬옥시기, 시클로알킬기, 헤테로시클로알킬기, 아릴아민기, 알킬실릴기, 알킬보론기, 아릴보론기, 아릴포스핀기, 아릴포스핀옥사이드기 및 아릴실릴기는 각각 독립적으로 중수소, 할로젠, 시아노기, 니트로기, C₁~C₄₀의 알킬기, C₂~C₄₀의 알케닐기, C₂~C₄₀의 알키닐기, C₆~C₄₀의 아릴기, 핵원자수 5 내지 40의 헤테로아릴기, C₆~C₄₀의 아릴옥시기, C₁~C₄₀의 알킬옥시기, C₆~C₄₀의 아릴아민기, C₃~C₄₀의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, C₁~C₄₀의 알킬실릴기, C₁~C₄₀의 알킬보론기, C₆~C₄₀의 아릴보론기, C₆~C₄₀의 아릴포스핀기, C₆~C₄₀의 아릴포스핀옥사이드기 및 C₆~C₄₀의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상의 치환기로 치환되거나 또는 비치환될 수 있다. 또한 상기 치환기가 복수인 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이할 수 있다.
- [0049] 본 발명에 따라, 상기 화학식 2로 표시되는 치환체는 하기 A-1 내지 A-15 치환체 중 어느 하나로 보다 구체화될 수 있다. 그러나 이에 특별히 한정되지 않는다.



[0050]

[0051]

[0052]

[0053]

[0054]

[0055]

[0056]

[0057]

상기 A-1 내지 A-15에서,

L 및 R₁₁은 각각 상기 화학식 2에서 정의한 바와 같고,

p는 0 내지 4의 정수로서, 상기 n이 0인 경우, 수소가 치환기 R₁₂로 치환되지 않는 것을 의미하고, 상기 n이 1 내지 4의 정수인 경우 수소가 R₁₂로 치환되되, 이때 R₁₂가 복수 개인 경우, 이들은 서로 동일하거나 또는 상이하며,

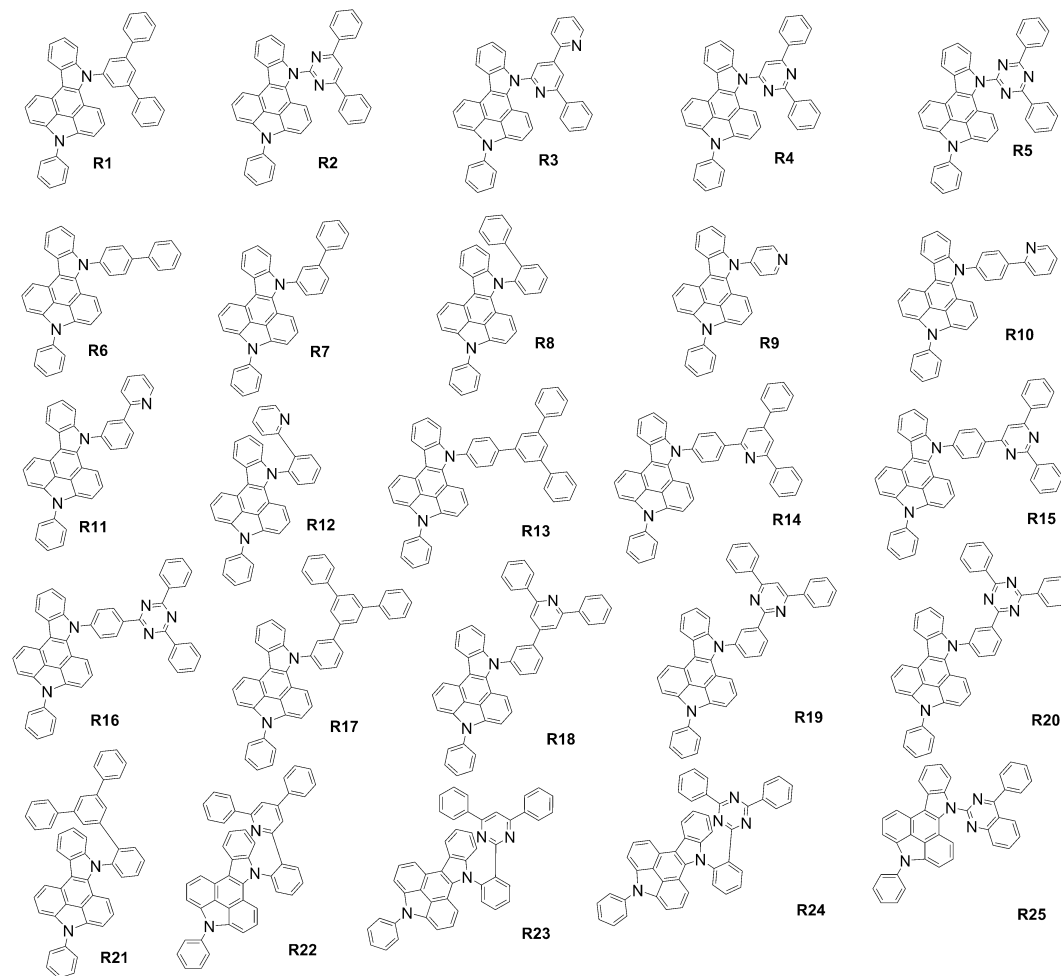
R₁₂는 각각 독립적으로 중수소, 할로젠, 시아노기, 니트로기, C₁~C₄₀의 알킬기, C₂~C₄₀의 알케닐기, C₂~C₄₀의 알키닐기, C₃~C₄₀의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, C₆~C₄₀의 아릴기, 핵원자수 5 내지 40의 헤테로아릴기, C₆~C₄₀의 아릴옥시기 C₁~C₄₀의 알킬옥시기, C₆~C₄₀의 아릴아민기, C₁~C₄₀의 알킬실릴기, C₁~C₄₀의 알킬보론기, C₆~C₄₀의 아릴보론기, C₆~C₄₀의 아릴포스핀기, C₆~C₄₀의 아릴포스핀옥사이드기 및 C₆~C₄₀의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택되거나, 또는 인접하는 기(예컨대, L, R₁₁또는 다른 R₁₂등)와 결합하여 축합 고리를 형성할 수 있다.

상기 R₁₂에서, 알킬기, 알케닐기, 알키닐기, 시클로알킬기, 헤테로시클로알킬기, 아릴기, 헤테로아릴기, 아릴옥시기, 알킬옥시기, 아릴아민기, 알킬실릴기, 알킬보론기, 아릴보론기, 아릴포스핀기, 아릴포스핀옥사이드기 및 아릴실릴기는 각각 독립적으로 중수소, 할로젠, 시아노기, 니트로기, C₁~C₄₀의 알킬기, C₂~C₄₀의 알케닐기, C₂~C₄₀의 알키닐기, C₆~C₄₀의 아릴기, 핵원자수 5 내지 40의 헤테로아릴기, C₆~C₄₀의 아릴옥시기, C₁~C₄₀의 알킬옥시기, C₆~C₄₀의 아릴아민기, C₃~C₄₀의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, C₁~C₄₀의 알킬실릴기, C₁~C₄₀의 알킬보론기, C₆~C₄₀의 아릴보론기, C₆~C₄₀의 아릴포스핀기, C₆~C₄₀의 아릴포스핀옥사이드기 및 C₆~C₄₀의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상의 치환기로 치환되거나 또는 비치환되고, 이때 상기 치환기가 복수 개인 경우 이들은 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

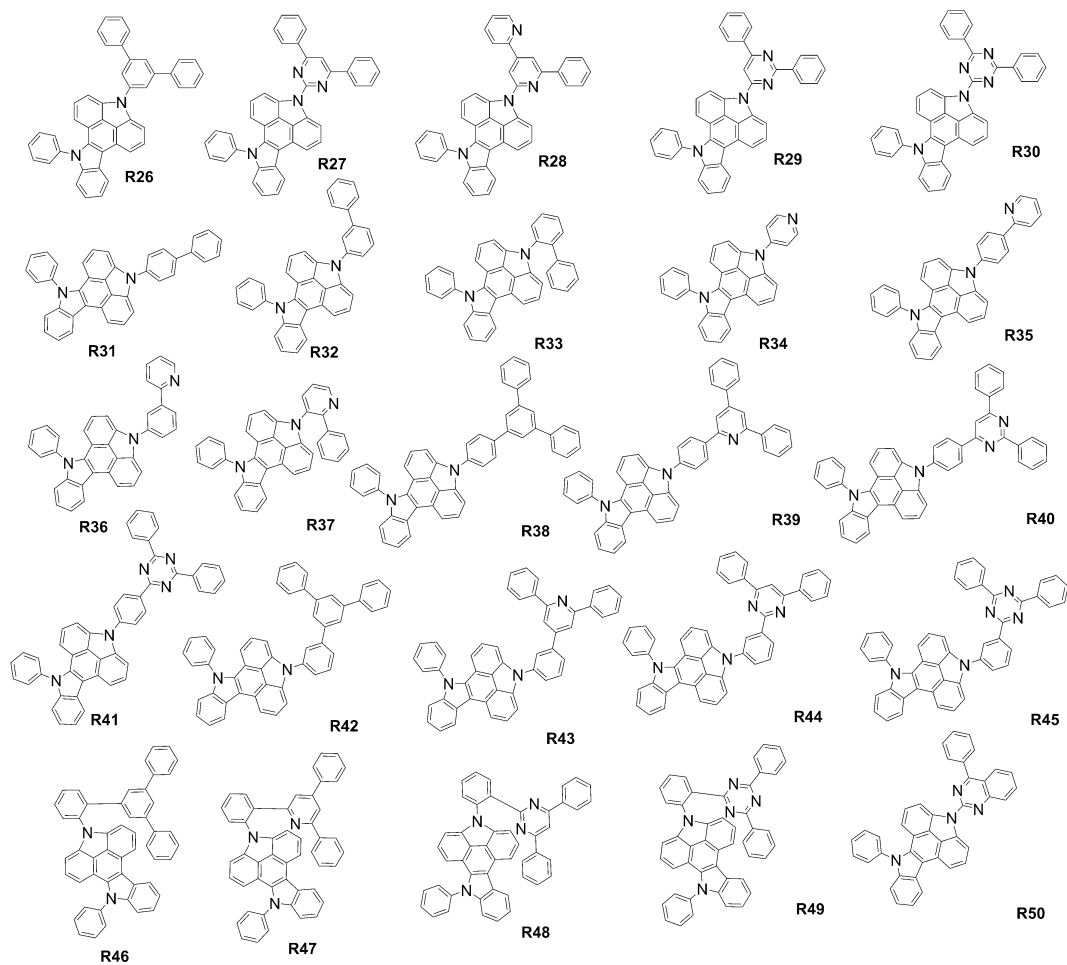
본 발명의 바람직한 일례에 따르면, X₁ 및 X₂ 모두 N(Ar₁)이며, 이때 Ar₁ 중 적어도 하나는 화학식 2로 표시되는 치환기인 경우가 바람직하다.

이상에서 설명한 본 발명의 화합물은 하기 예시되는 화학식 R1 내지 화학식 R250 중 어느 하나로 표시되는 화합물로 보다 구체화될 수 있다. 그러나 본 발명의 화학식 1로 표시되는 화합물이 하기 예시된 것들에 의해 한정되

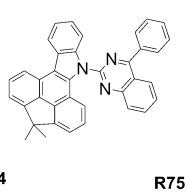
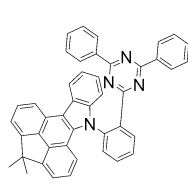
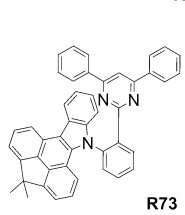
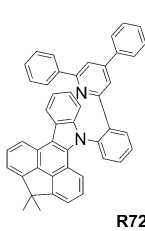
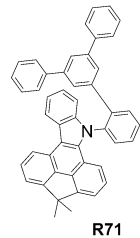
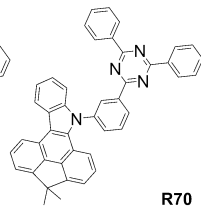
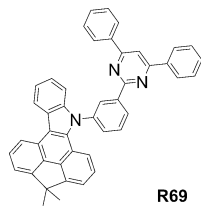
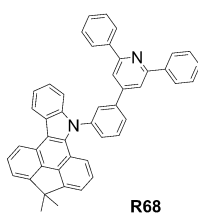
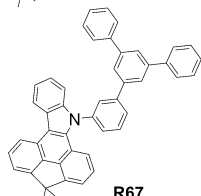
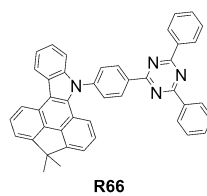
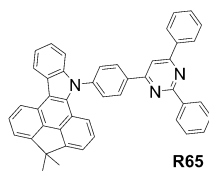
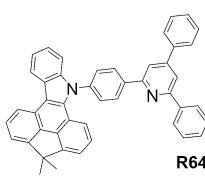
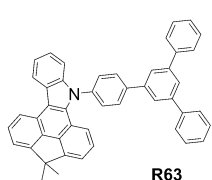
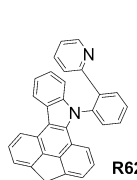
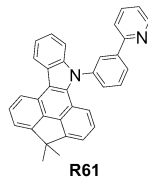
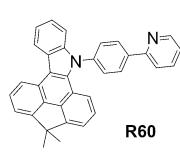
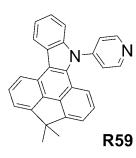
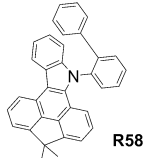
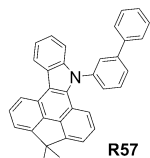
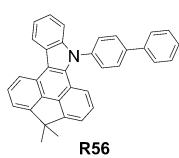
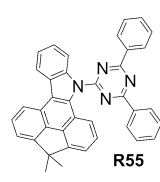
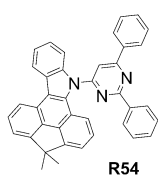
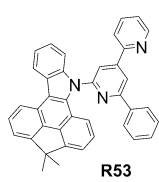
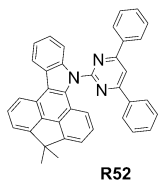
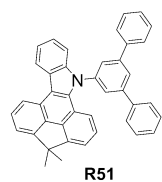
는 것은 아니다.



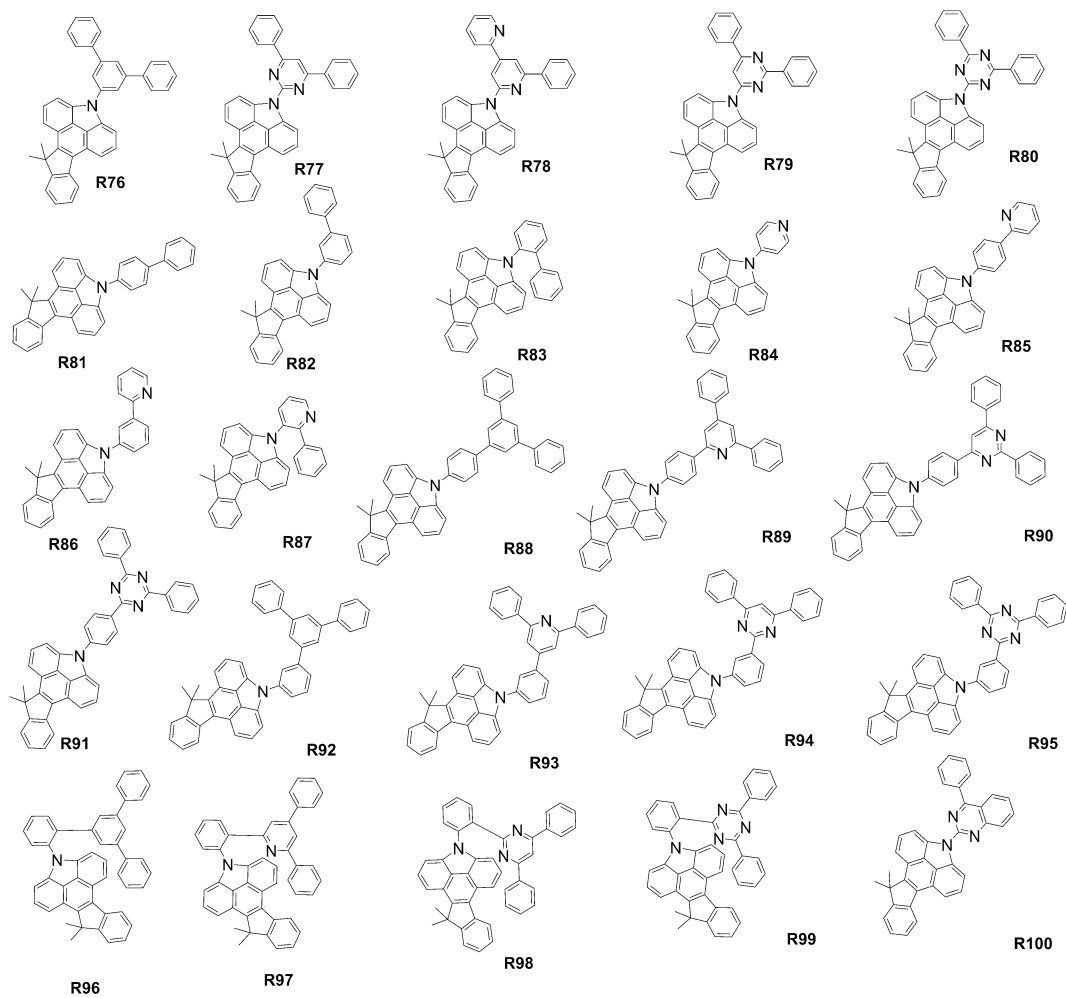
[0058]



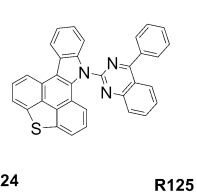
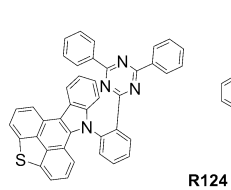
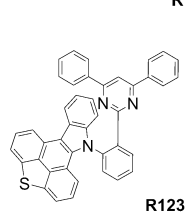
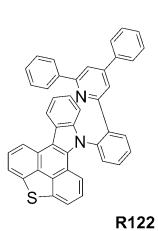
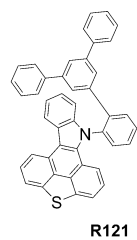
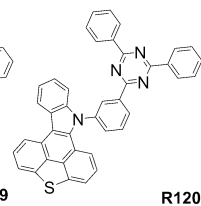
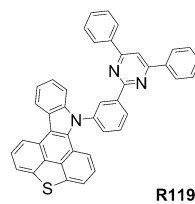
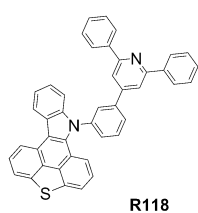
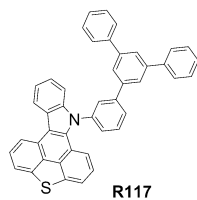
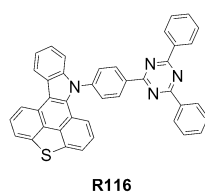
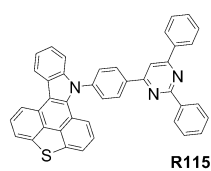
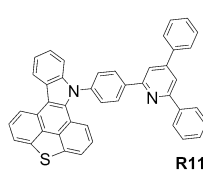
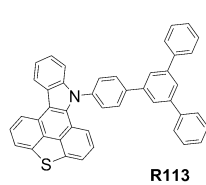
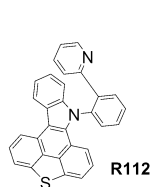
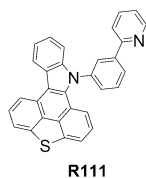
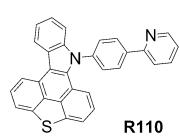
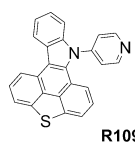
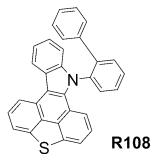
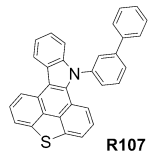
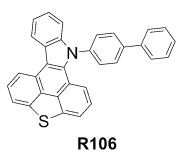
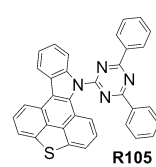
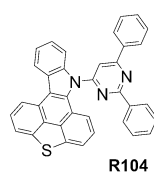
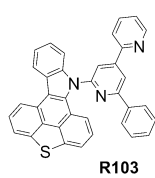
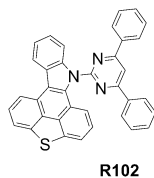
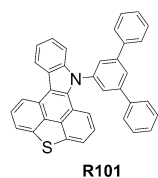
[0059]



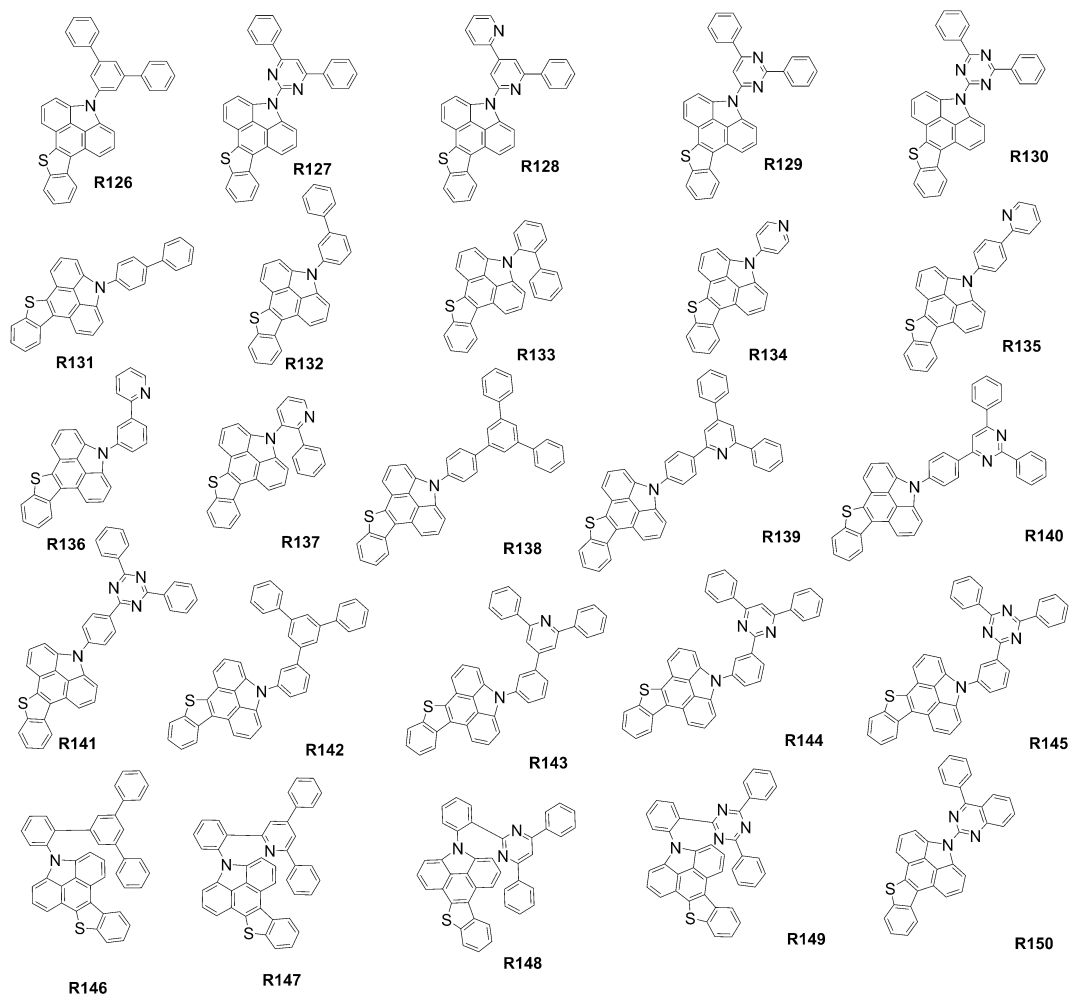
[0060]



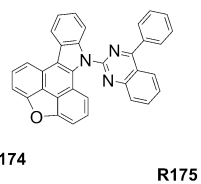
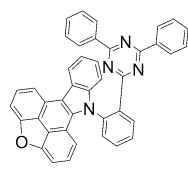
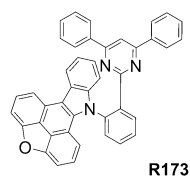
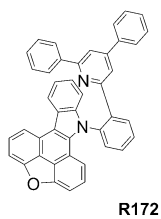
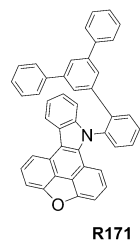
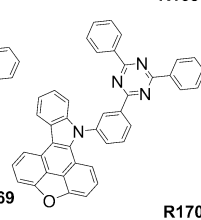
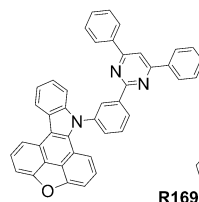
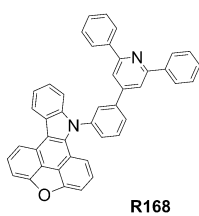
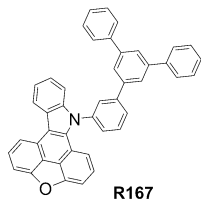
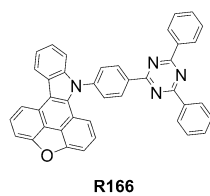
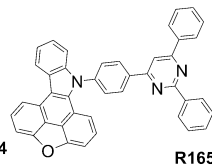
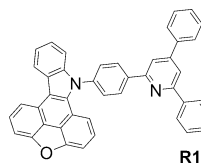
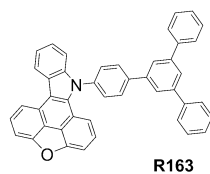
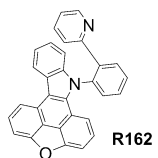
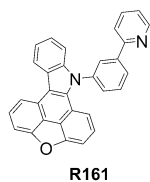
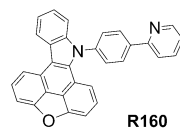
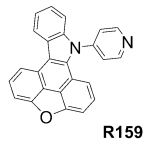
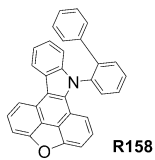
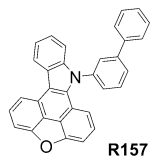
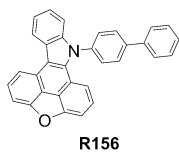
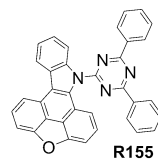
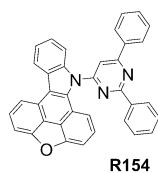
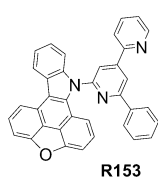
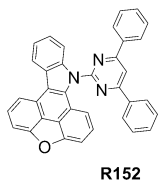
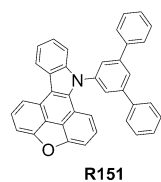
[0061]



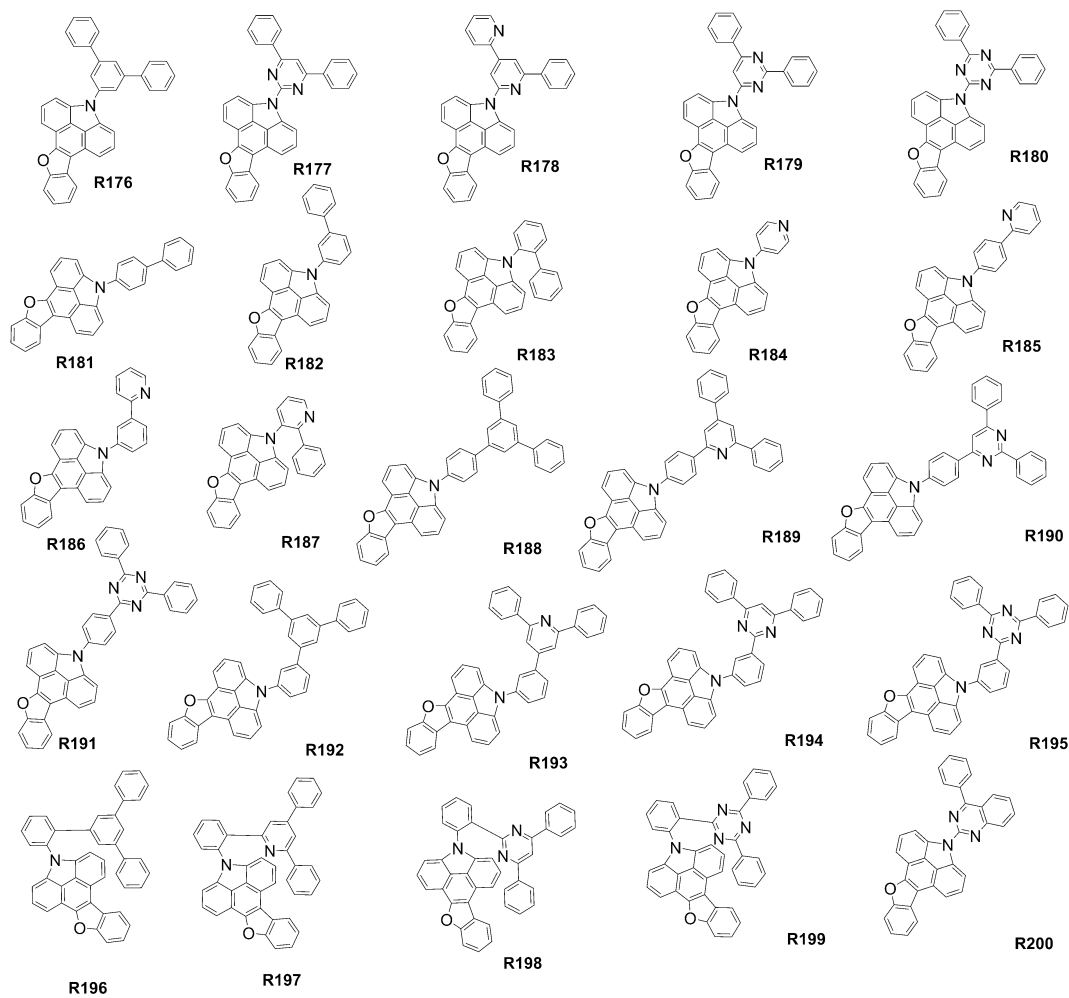
[0062]



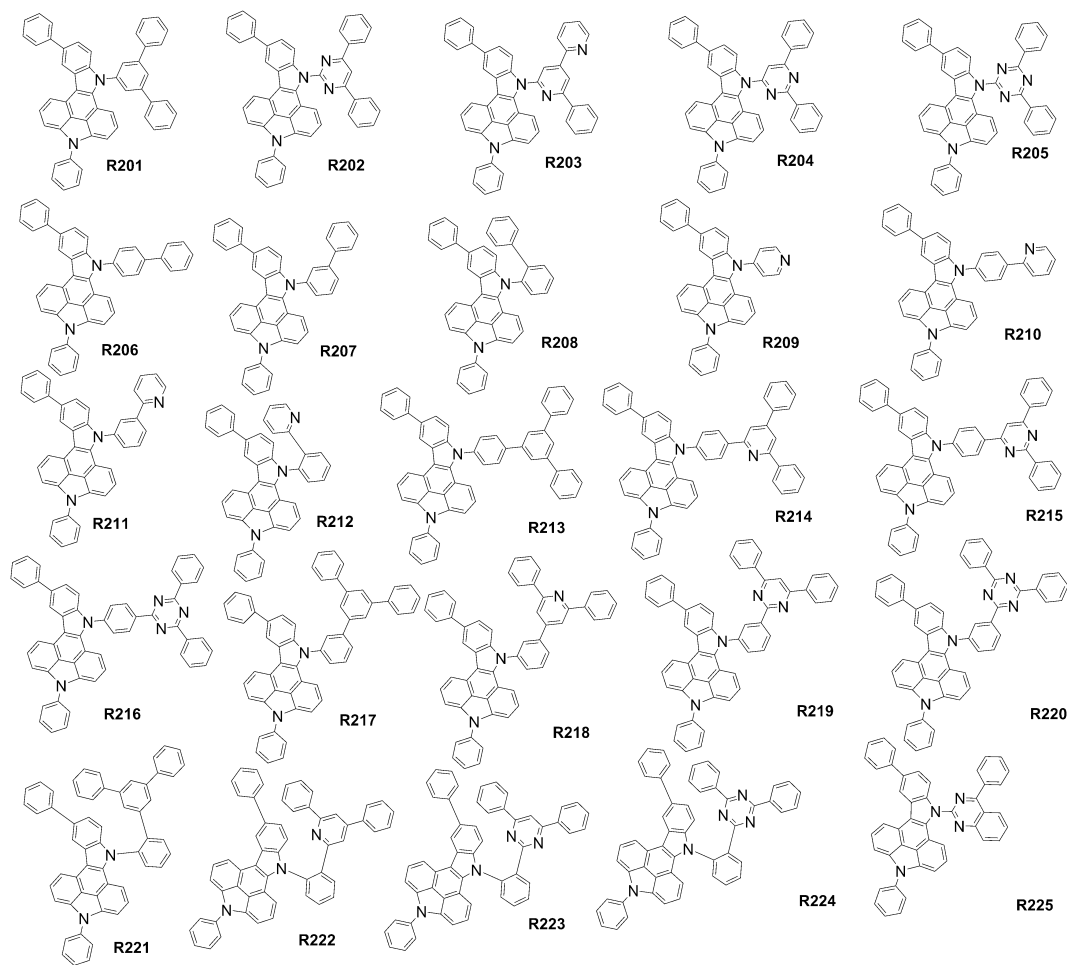
[0063]



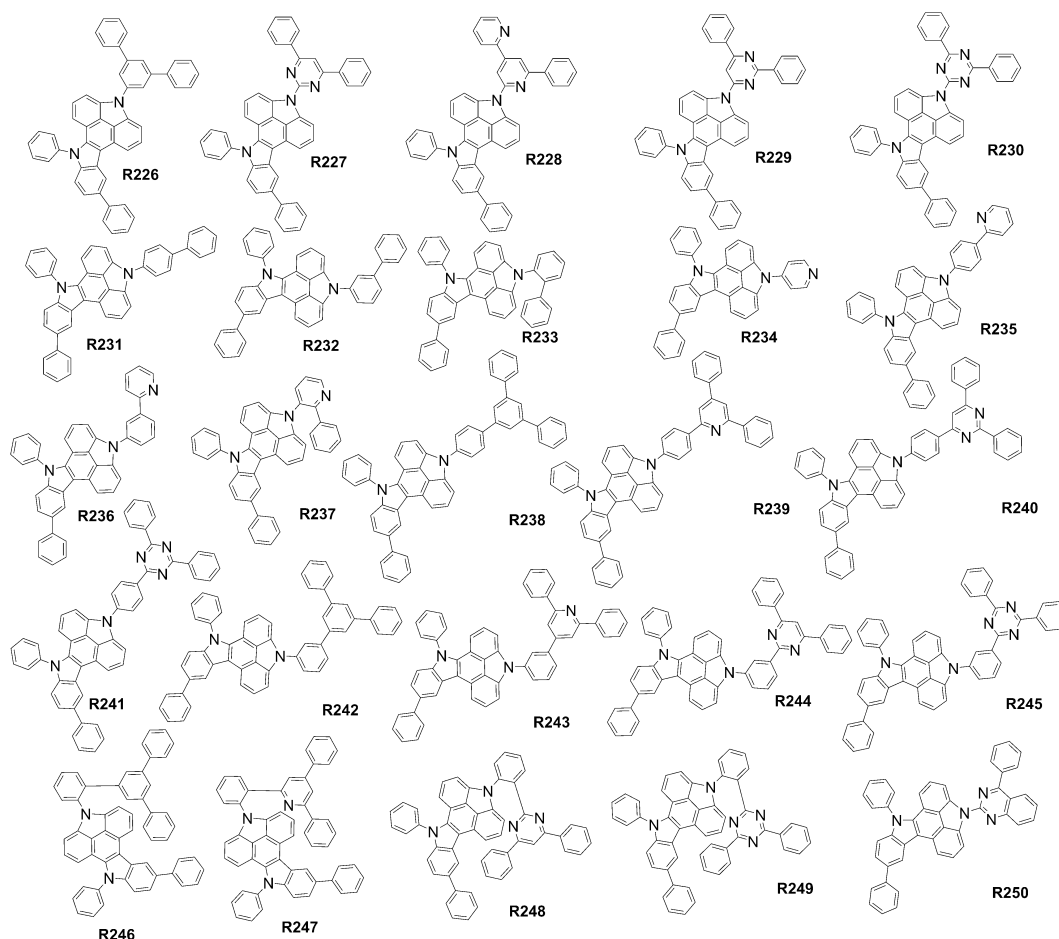
[0064]



[0065]



[0066]



[0067]

[0068]

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

[0069]

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.

[0070]

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.

[0071]

본 발명에서 "아릴"은 단독 고리 또는 2이상의 고리가 조합된 탄소수 6 내지 40의 방향족 탄화수소로부터 유래된 1가의 치환기를 의미한다. 또한, 2 이상의 고리가 서로 단순 부착(pendant)되거나 축합된 형태도 포함될 수 있다. 이러한 아릴의 예로는 페닐, 나프틸, 페난트릴, 안트릴 등을 들 수 있으나, 이에 한정되지는 않는다.

[0072]

본 발명에서 "헤테로아릴"은 핵원자수 5 내지 40의 모노헤테로사이클릭 또는 폴리헤테로사이클릭 방향족 탄화수소로부터 유래된 1가의 치환기를 의미한다. 이때, 고리 중 하나 이상의 탄소, 바람직하게는 1 내지 3개의 탄소가 N, O, S 또는 Se와 같은 헤테로원자로 치환된다. 또한, 2 이상의 고리가 서로 단순 부착(pendant)되거나 축합된 형태도 포함될 수 있고, 나아가 아릴기와의 축합된 형태도 포함될 수 있다. 이러한 헤테로아릴의 예로는 피리딜, 피라지닐, 피리미디닐, 피리다지닐, 트리아지닐과 같은 6-원 모노사이클릭 고리, 페녹사티에닐(phenoxathieryl), 인돌리지닐(indoliziny), 인돌릴(indolyl), 퓨리닐(puriny), 퀴놀릴(quinoly), 벤조티아졸(benzothiazole), 카바졸릴(carbazolyl)과 같은 폴리사이클릭 고리 및 2-푸라닐, N-이미다졸릴, 2-이속사졸릴, 2-피리디닐, 2-피리미디닐 등을 들 수 있으나, 이에 한정되지는 않는다.

[0073]

본 발명에서 "아릴옥시"는 RO-로 표시되는 1가의 치환기로, 상기 R은 탄소수 5 내지 40의 아릴을 의미한다. 이

러한 아릴옥시의 예로는 페닐옥시, 나프틸옥시, 디페닐옥시 등을 들 수 있으나, 이에 한정되지는 않는다.

[0074] 본 발명에서 "알킬옥시"는 R'O-로 표시되는 1가의 치환기로, 상기 R'는 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.

[0075] 본 발명에서 "아릴아민"은 탄소수 6 내지 40의 아릴로 치환된 아민을 의미한다.

[0076] 본 발명에서 "시클로알킬"은 탄소수 3 내지 40의 모노사이클릭 또는 폴리사이클릭 비-방향족 탄화수소로부터 유래된 1가의 치환기를 의미한다. 이러한 사이클로알킬의 예로는 사이클로프로필, 사이클로펜틸, 사이클로헥실, 노르보닐(norbornyl), 아다만틴(adamantine) 등을 들 수 있으나, 이에 한정되지는 않는다.

[0077] 본 발명에서 "헤테로시클로알킬"은 핵원자수 3 내지 40의 비-방향족 탄화수소로부터 유래된 1가의 치환기를 의미하며, 고리 중 하나 이상의 탄소, 바람직하게는 1 내지 3개의 탄소가 N, O, S 또는 Se와 같은 헤테로 원자로 치환된다. 이러한 헤테로시클로알킬의 예로는 모르폴린, 피페라진 등을 들 수 있으나, 이에 한정되지는 않는다.

[0078] 본 발명에서 "알킬실릴"은 탄소수 1 내지 40의 알킬로 치환된 실릴이고, "아릴실릴"은 탄소수 5 내지 40의 아릴로 치환된 실릴을 의미한다.

[0079] 본 발명에서 "축합고리"는 축합 지방족 고리, 축합 방향족 고리, 축합 헤테로지방족 고리, 축합 헤테로방향족 고리 또는 이들의 조합된 형태를 의미한다.

[0080] <유기 전계 발광 소자>

[0081] 한편, 본 발명의 다른 측면은 상기한 본 발명에 따른 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하는 유기 전계 발광 소자(유기 EL 소자)에 관한 것이다.

[0082] 보다 구체적으로, 본 발명에 따른 유기 전계 발광 소자는 양극(anode), 음극(cathode) 및 상기 양극과 음극 사이에 개재(介在)된 1층 이상의 유기물층을 포함하며, 상기 1층 이상의 유기물층 중 적어도 하나는 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함한다. 이때, 상기 화합물은 단독으로 사용되거나, 또는 2 이상이 혼합되어 사용될 수 있다.

[0083] 상기 1층 이상의 유기물층은 정공주입층, 정공수송층, 발광보조층, 발광층, 전자수송층 및 전자주입층 중 어느 하나 이상일 수 있고, 이 중에서 적어도 하나의 유기물층은 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함할 수 있다. 보다 구체적으로, 상기 화학식 1의 화합물을 포함하는 유기물층은 발광층, 전자수송층, 정공수송층인 것이 바람직하다.

[0084] 본 발명의 유기 전계 발광 소자의 발광층은 호스트 재료를 포함할 수 있는데, 이때 호스트 재료로서 상기 화학식 1의 화합물을 포함할 수 있다. 또한 본 발명의 유기 전계 발광 소자의 발광층은 상기 화학식 1의 화합물 이외의 화합물을 호스트로 포함할 수 있다.

[0085] 이러한 본 발명의 유기 전계 발광 소자의 구조는 특별히 한정되지 않으나, 기판, 양극, 정공주입층, 정공수송층, 발광보조층, 발광층, 전자수송층 및 음극이 순차적으로 적층된 구조일 수 있다. 이때, 상기 정공주입층, 정공수송층, 발광보조층, 발광층, 전자수송층 및 전자주입층 중 하나 이상은 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함할 수 있고, 바람직하게는 정공수송층, 전자저지층, 발광보조층이 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함할 수 있다. 한편 상기 전자수송층 위에는 전자주입층이 추가로 적층될 수 있다.

[0086] 본 발명의 유기 전계 발광 소자의 구조는 전극과 유기물층 계면에 절연층 또는 접착층이 삽입된 구조일 수 있다.

[0087] 본 발명의 유기 전계 발광 소자는 상기 유기물층 중 1층 이상이 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하는 것을 제외하고는, 당 업계에 공지된 재료 및 방법으로 유기물층 및 전극을 형성하여 제조할 수 있다.

[0088] 상기 유기물층은 진공 증착법이나 용액 도포법에 의하여 형성될 수 있다. 상기 용액 도포법의 예로는 스핀 코팅, 딥코팅, 닥터 블레이딩, 잉크젯 프린팅 또는 열 전사법 등이 있으나, 이에 한정되지는 않는다.

[0089] 본 발명의 유기 전계 발광 소자 제조 시 사용되는 기판은 특별히 한정되지 않으나, 실리콘 웨이퍼, 석영, 유리판, 금속판, 플라스틱 필름 및 시트 등을 사용할 수 있다.

[0090] 또, 양극 물질로는 바나듐, 크롬, 구리, 아연, 금과 같은 금속 또는 이들의 합금; 아연산화물, 인듐산화물, 인듐 주석 산화물(ITO), 인듐 아연 산화물(IZO)과 같은 금속 산화물; ZnO:Al 또는 SnO₂:Sb와 같은 금속과 산화물의 조합; 폴리티오펜, 폴리(3-메틸티오펜), 폴리[3,4-(에틸렌-1,2-디옥시)티오펜](PEDT), 폴리피롤 또는 폴리아닐린과 같은 전도성 고분자; 및 카본블랙 등을 들 수 있으나, 이에 한정되지는 않는다.

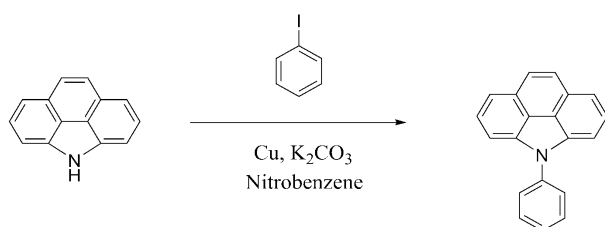
[0091] 또, 음극 물질로는 마그네슘, 칼슘, 나트륨, 칼륨, 타이타늄, 인듐, 이트륨, 리튬, 가돌리늄, 알루미늄, 은, 주석, 또는 납과 같은 금속 또는 이들의 합금; 및 LiF/Al 또는 LiO₂/Al과 같은 다층 구조 물질 등을 들 수 있으나, 이에 한정되지는 않는다.

[0092] 또한, 정공 주입층, 정공 수송층, 전자 주입층 및 전자 수송층은 특별히 한정되는 것은 아니며, 당 업계에 알려진 통상의 물질을 사용할 수 있다.

[0093] 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.

[0094] [준비예 1] A4의 합성

[0095] <단계 1> A1의 합성



[0096]

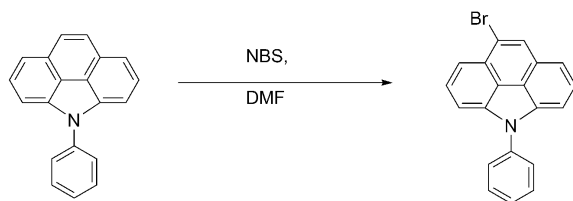
[0097] 질소 기류 하에서 6H-benzo[def]carbazole 7.7g(40.0 mmol), iodobenzene, 24.5g (120.0 mmol), Cu powder, 1.8g(28.0 mmol), K₂CO₃, 11.1g(80.0 mmol), nitrobenzene 60 ml을 혼합하고 200 °C에서 12시간 동안 교반하였다.

[0098] 반응 종결 후 nitrobenzene을 제거하고 메틸렌클로라이드로 유기층을 분리하여 MgSO₄를 사용하여 물을 제거하였다. 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 A1 (9.0g, 33.6 mmol, 수율 84 %)을 얻었다.

[0099] GC-Mass (이론치: 267.32g/mol, 측정치: 267g/mol)

[0100] ¹H-NMR: δ 7.46~7.55(m, 5H), 7.70(s, 2H), 7.83~7.88(m, 4H), 8.12(d, 2H)

[0101] <단계 2> A2의 합성



[0102]

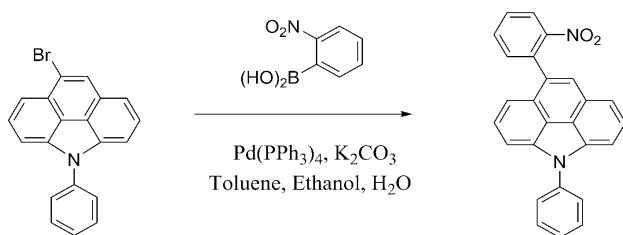
[0103] 질소 기류 하에서 A1 9.0g(33.6 mmol), NBS(N-bromosuccinimide), 6.0g (33.6 mmol), DMF 90 ml을 혼합하고 60 °C에서 3시간 동안 교반하였다.

[0104] 반응 종결 후 DMF를 제거하고 메틸렌클로라이드로 유기층을 분리하여 MgSO₄를 사용하여 물을 제거하였다. 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 A2 (3.7g, 10.8mmol, 수율 32%)을 얻었다.

[0105] GC-Mass (이론치: 346.22g/mol, 측정치: 346g/mol)

[0106] ¹H-NMR: δ 7.45~7.54(m, 5H), 7.83~7.88(m, 5H), 8.12(d, 2H)

[0107] <단계 3> A3의 합성



[0108]

[0109]

질소 기류 하에서 A2, 3.7g, (10.8 mmol), 2-nitrophenylboronic acid, 1.3g (10.8 mmol), 0.6g (5 mol%)의 $\text{Pd}(\text{PPh}_3)_4$, 및 potassium carbonate, 4.5g (32.3 mmol)와 80ml/40ml/40ml의 Toluene/ H_2O /Ethanol를 넣고 110℃에서 3시간 동안 교반하였다.

[0110]

반응 종료 후, 메틸렌클로라이드를 이용하여 유기층을 분리하고 MgSO_4 를 사용하여 물을 제거하였다. 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 A3 (3.4g, 8.7mmol, 수율 81%)을 얻었다.

[0111]

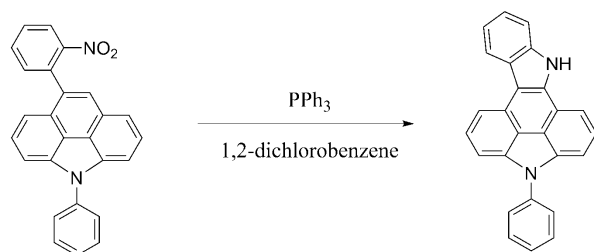
GC-Mass (이론치: 388.42g/mol, 측정치: 388g/mol)

[0112]

$^1\text{H-NMR}$: δ 7.45~7.65(m, 6H), 7.82~8.05(m, 8H), 8.12(d, 2H)

[0113]

<단계 4> A4의 합성



[0114]

[0115]

질소 기류 하에서 A3 3.4g(8.7 mmol)과 triphenylphosphine, 5.7g (21.8 mmol), 1,2-dichlorobenzene 40 ml를 넣은 후 12시간 교반하였다. 반응 종료 후 1,2-dichlorobenzene를 제거하고 메틸렌클로라이드를 이용하여 유기층을 분리하고 MgSO_4 를 사용하여 물을 제거하였다. 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 A4, (2.3g, 6.4 mmol, 수율 74%)을 얻었다.

[0116]

GC-Mass (이론치: 356.42g/mol, 측정치: 356g/mol)

[0117]

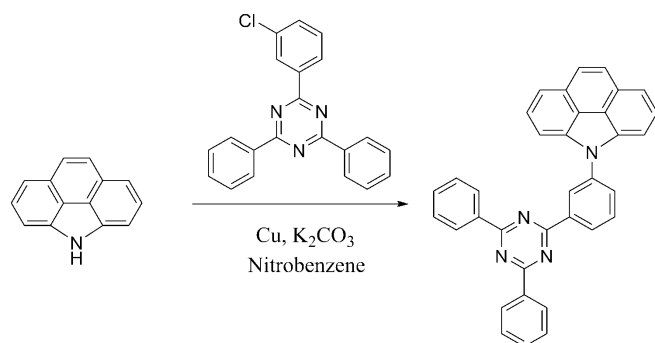
$^1\text{H-NMR}$: δ 7.25(m, 1H), 7.45~7.64(m, 7H), 7.82~7.87(m, 4H), 8.10~8.12(m, 3H), 10.0(s, 1H)

[0118]

[준비예 2] B4의 합성

[0119]

<단계 1> B1의 합성



[0120]

[0121]

질소 기류 하에서 6H-benzo[def]carbazole 7.7g(40.0 mmol), 2-(3-chlorophenyl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine, 41.3g (120.0 mmol), Cu powder, 1.8g(28.0 mmol), K_2CO_3 , 11.1g(80.0 mmol), nitrobenzene 60 ml을

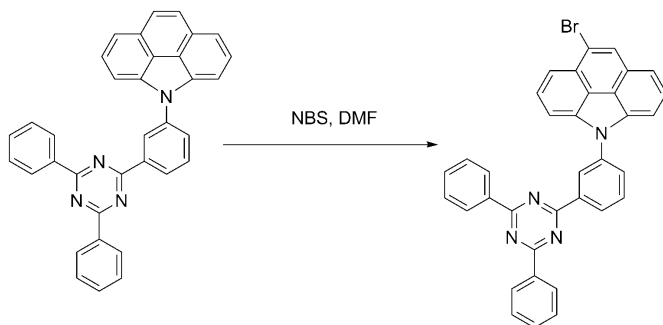
혼합하고 200℃에서 12시간 동안 교반하였다.

[0122] 반응 종결 후 nitrobenzene을 제거하고 메틸렌클로라이드로 유기층을 분리하여 $MgSO_4$ 를 사용하여 물을 제거하였다. 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 B1, (8.8g, 32.8 mmol, 수율 82%)을 얻었다.

[0123] GC-Mass (이론치: 498.58g/mol, 측정치: 498g/mol)

[0124] 1H -NMR: δ 7.41~5.0(m, 8H), 7.71(s, 2H), 7.82~7.87(m, 4H), 8.09~8.11(m, 3H), 8.25~8.27(m, 5H)

[0125] <단계 2> B2의 합성



[0126]

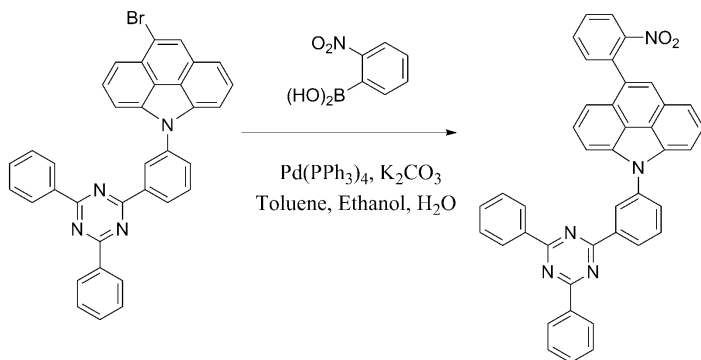
[0127] 질소 기류 하에서 B1 8.8g (32.8 mmol), NBS(N-bromosuccinimide), 5.8g (32.8 mmol), DMF 90 ml을 혼합하고 60℃에서 3시간 동안 교반하였다.

[0128] 반응 종결 후 DMF를 제거하고 메틸렌클로라이드로 유기층을 분리하여 $MgSO_4$ 를 사용하여 물을 제거하였다. 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 B2, (4.0g, 6.9mmol, 수율 21%)을 얻었다.

[0129] GC-Mass (이론치: 577.47g/mol, 측정치: 577g/mol)

[0130] 1H -NMR: δ 7.41~5.0(m, 8H), 7.82~7.86(m, 5H), 8.09~8.11(m, 3H), 8.24~8.26(m, 5H)

[0131] <단계 3> B3의 합성



[0132]

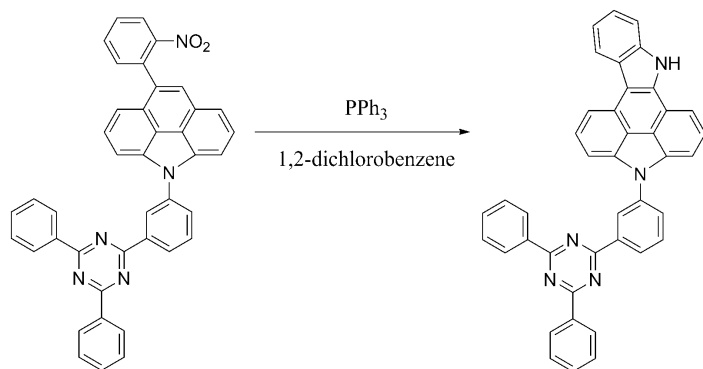
[0133] 질소 기류 하에서 B2, 4.0g, (6.9 mmol), 2-nitrophenylboronic acid, 0.8g (6.9 mmol), 0.4g (5 mol%)의 $Pd(PPh_3)_4$, 및 potassium carbonate, 2.9g (20.7 mmol)와 80ml/40ml/40ml의 Toluene/ H_2O /Ethanol를 넣고 110℃에서 3시간 동안 교반하였다.

[0134] 반응 종료 후, 메틸렌클로라이드를 이용하여 유기층을 분리하고 $MgSO_4$ 를 사용하여 물을 제거하였다. 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 B3, (3.5g, 5.6 mmol, 수율 81%)을 얻었다.

[0135] GC-Mass (이론치: 619.67g/mol, 측정치: 619g/mol)

[0136] 1H -NMR: δ 7.41~5.0(m, 8H), 7.65(m, 1H), 7.82~7.89(m, 6H), 8.00~8.11(m, 5H), 8.23~8.25(m, 5H)

[0137] <단계 4> B4의 합성



[0138]

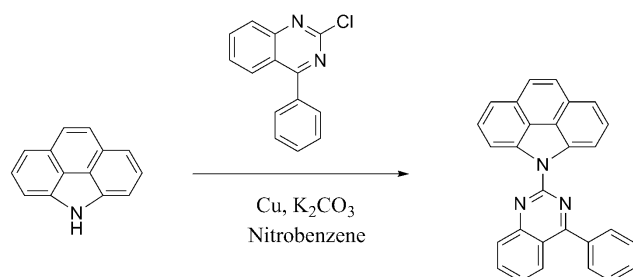
[0139] 질소 기류 하에서 B3 3.5g(5.6 mmol)과 triphenylphosphine, 3.7g (13.9 mmol), 1,2-dichlorobenzene 40 ml를 넣은 후 12시간 교반하였다. 반응 종료 후 1,2-dichlorobenzene를 제거하고 메틸렌클로라이드를 이용하여 유기층을 분리하고 MgSO₄를 사용하여 물을 제거하였다. 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 B4, (2.6g, 3.3 mmol, 수율 78%)을 얻었다.

[0140] GC-Mass (이론치: 587.67g/mol, 측정치: 587g/mol)

[0141] ¹H-NMR: δ 7.28(m, 1H), 7.41~4.9(m, 9H), 7.60(m, 1H), 7.82~7.88(m, 4H), 8.09~8.12(m, 4H), 8.23~8.25(m, 5H), 10.0(s, 1H)

[0142] [준비예 3] C4의 합성

[0143] <단계 1> C1의 합성



[0144]

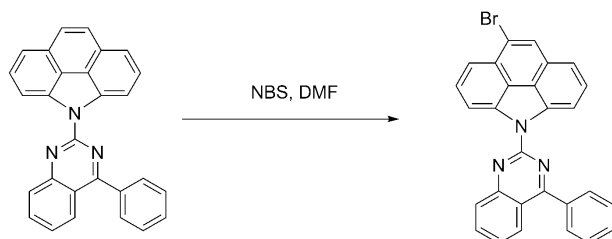
[0145] 질소 기류 하에서 6H-benzo[def]carbazole 7.7g(40.0 mmol), 2-chloro-4-phenylquinazoline, 28.9g (120.0 mmol), Cu powder, 1.8g(28.0 mmol), K₂CO₃, 11.1g(80.0 mmol), nitrobenzene 60 ml을 혼합하고 200 °C에서 12시간 동안 교반하였다.

[0146] 반응 종결 후 nitrobenzene을 제거하고 메틸렌클로라이드로 유기층을 분리하여 MgSO₄를 사용하여 물을 제거하였다. 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 C1, (9.0g, 33.6 mmol, 수율 84%)을 얻었다.

[0147] GC-Mass (이론치: 395.45g/mol, 측정치: 395g/mol)

[0148] ¹H-NMR: δ 7.41~5.0(m, 3H), 7.71(s, 2H), 7.80~7.87(m, 7H), 8.05~8.11(m, 5H)

[0149] <단계 2> C2의 합성



[0150]

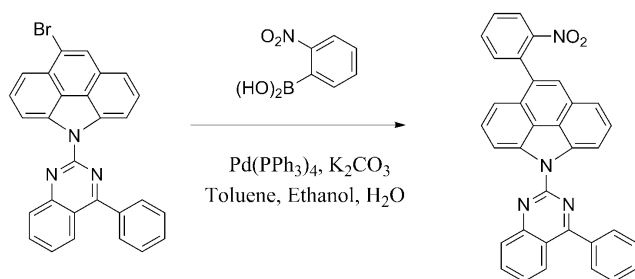
[0151] 질소 기류 하에서 C1 9.0g (33.6 mmol), NBS(N-bromosuccinimide), 5.8g (32.8 mmol), DMF 90 ml을 혼합하고 60 °C에서 3시간 동안 교반하였다.

[0152] 반응 종결 후 DMF를 제거하고 메틸렌클로라이드로 유기층을 분리하여 $MgSO_4$ 를 사용하여 물을 제거하였다. 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 C2, (3.7g, 7.7mmol, 수율 23%)을 얻었다.

[0153] GC-Mass (이론치: 474.35g/mol, 측정치: 474g/mol)

[0154] 1H -NMR: δ 7.41~5.0(m, 3H), 7.80~7.88(m, 8H), 8.05~8.10(m, 5H)

[0155] <단계 3> C3의 합성



[0156]

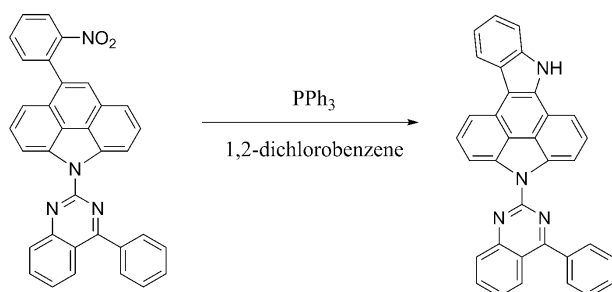
[0157] 질소 기류 하에서 C2, 3.7g, (7.7 mmol), 2-nitrophenylboronic acid, 0.9g (7.7 mmol), 0.4g (5 mol%)의 $Pd(PPh_3)_4$, 및 potassium carbonate, 3.2g (23.2 mmol)와 80ml/40ml/40ml의 Toluene/ H_2O /Ethanol을 넣고 110°C에서 3시간 동안 교반하였다.

[0158] 반응 종료 후, 메틸렌클로라이드를 이용하여 유기층을 분리하고 $MgSO_4$ 를 사용하여 물을 제거하였다. 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 C3, (3.2g, 4.0 mmol, 수율 79%)을 얻었다.

[0159] GC-Mass (이론치: 516.55g/mol, 측정치: 516g/mol)

[0160] 1H -NMR: δ 7.41~4.9(m, 3H), 7.65(m, 1H), 7.80~8.09(m, 16H)

[0161] <단계 4> C4의 합성



[0162]

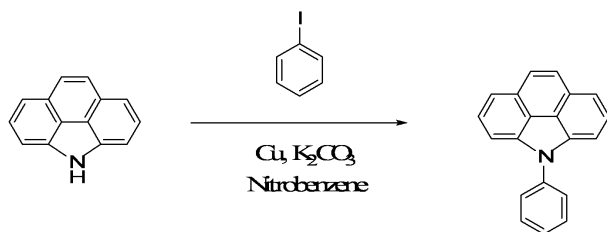
[0163] 질소 기류 하에서 C3 3.2g(6.1 mmol)과 triphenylphosphine, 4.0g (15.3 mmol), 1,2-dichlorobenzene 30 ml를 넣은 후 12시간 교반하였다. 반응 종료 후 1,2-dichlorobenzene를 제거하고 메틸렌클로라이드를 이용하여 유기층을 분리하고 $MgSO_4$ 를 사용하여 물을 제거하였다. 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 C4, (2.2g, 4.6 mmol, 수율 76%)을 얻었다.

[0164] GC-Mass (이론치: 484.55g/mol, 측정치: 484g/mol)

[0165] $^1\text{H-NMR}$: δ 7.28(m, 1H), 7.41~7.50(m, 4H), 7.63(m, 1H), 7.80~8.83(m, 7H), 8.03~8.10(m, 6H), 10.0(s, 1H)

[0166] **[준비에 4] D3의 합성**

[0167] <단계 1> A1의 합성



[0168]

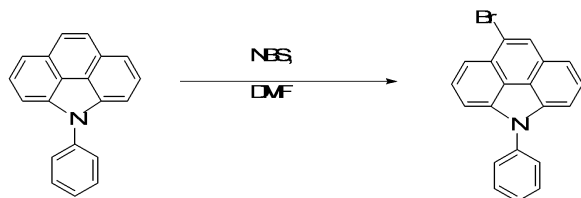
[0169] 질소 기류 하에서 6H-benzo[def]carbazole 7.7g(40.0 mmol), iodobenzene, 24.5g (120.0 mmol), Cu powder, 1.8g(28.0 mmol), K_2CO_3 , 11.1g(80.0 mmol), nitrobenzene 60 ml을 혼합하고 200℃에서 12시간 동안 교반하였다.

[0170] 반응 종결 후 nitrobenzene을 제거하고 메틸렌클로라이드로 유기층을 분리하여 MgSO_4 를 사용하여 물을 제거하였다. 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 A1, (9.0g, 33.6 mmol, 수율 84%)을 얻었다.

[0171] GC-Mass (이론치: 267.32g/mol, 측정치: 267g/mol)

[0172] $^1\text{H-NMR}$: δ 7.46~7.55(m, 5H), 7.70(s, 2H), 7.83~7.88(m, 4H), 8.12(d, 2H)

[0173] <단계 2> A2의 합성



[0174]

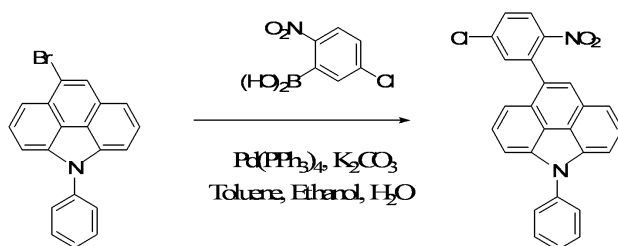
[0175] 질소 기류 하에서 A1 9.0g (33.6 mmol), NBS(N-bromosuccinimide), 6.0g (33.6 mmol), DMF 90 ml을 혼합하고 60℃에서 3시간 동안 교반하였다.

[0176] 반응 종결 후 DMF를 제거하고 메틸렌클로라이드로 유기층을 분리하여 MgSO_4 를 사용하여 물을 제거하였다. 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 A2, (3.7g, 10.8mmol, 수율 32%)을 얻었다.

[0177] GC-Mass (이론치: 346.22g/mol, 측정치: 346g/mol)

[0178] $^1\text{H-NMR}$: δ 7.45~7.54(m, 5H), 7.83~7.88(m, 5H), 8.12(d, 2H)

[0179] <단계 3> D1의 합성



[0180]

[0181] 질소 기류 하에서 A2, 3.7g, (10.8 mmol), 5-chloro-2-nitrophenylboronic acid, 2.2g (10.8 mmol), 0.6g (5

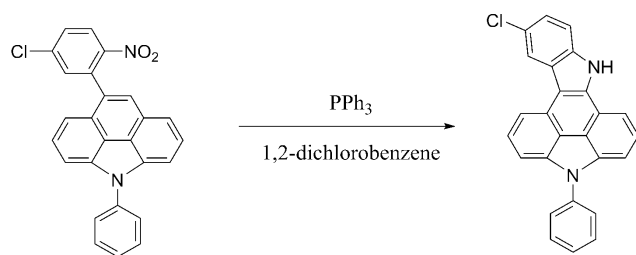
mol%)의 $\text{Pd}(\text{PPh}_3)_4$, 및 potassium carbonate, 4.5g (32.3 mmol)와 80ml/40ml/40ml의 Toluene/ H_2O /Ethanol를 넣고 110℃에서 3시간 동안 교반하였다.

[0182] 반응 종료 후, 메틸렌클로라이드를 이용하여 유기층을 분리하고 MgSO_4 를 사용하여 물을 제거하였다. 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 D1, (3.7g, 8.7mmol, 수율 81%)을 얻었다.

[0183] GC-Mass (이론치: 422.86g/mol, 측정치: 422g/mol)

[0184] $^1\text{H-NMR}$: δ 7.44~7.56(m, 5H), 7.71(d, 1H), 7.82~8.87(m, 5H), 8.11(d, 2H), 8.25(d, 1H), 8.27(s, 1H)

[0185] <단계 4> D2의 합성



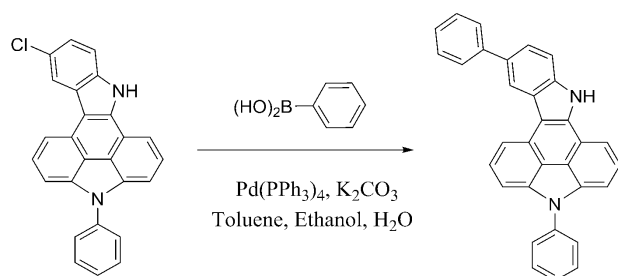
[0186]

[0187] 질소 기류 하에서 D1 3.7g(8.7 mmol)과 triphenylphosphine, 5.7g (21.8 mmol), 1,2-dichlorobenzene 40 ml를 넣은 후 12시간 교반하였다. 반응 종료 후 1,2-dichlorobenzene를 제거하고 메틸렌클로라이드를 이용하여 유기층을 분리하고 MgSO_4 를 사용하여 물을 제거하였다. 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 D2, (2.5g, 6.4 mmol, 수율 74%)을 얻었다.

[0188] GC-Mass (이론치: 390.86g/mol, 측정치: 390g/mol)

[0189] $^1\text{H-NMR}$: δ 7.08(s, 1H), 7.44~7.57(m, 7H), 7.82~8.84(m, 4H), 8.11(d, 2H), 10.1(s, 1H)

[0190] <단계 5> D3의 합성



[0191]

[0192] 질소 기류 하에서 D2, 2.5g, (6.4 mmol), phenylboronic acid, 0.8g (6.4 mmol), 0.4g (5 mol%)의 $\text{Pd}(\text{PPh}_3)_4$, 및 potassium carbonate, 2.7g (19.3 mmol)와 80ml/40ml/40ml의 Toluene/ H_2O /Ethanol를 넣고 110℃에서 3시간 동안 교반하였다.

[0193] 반응 종료 후, 메틸렌클로라이드를 이용하여 유기층을 분리하고 MgSO_4 를 사용하여 물을 제거하였다. 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 D3, (2.3g, 5.2mmol, 수율 81%)을 얻었다.

[0194] GC-Mass (이론치: 432.51g/mol, 측정치: 432g/mol)

[0195] $^1\text{H-NMR}$: δ 7.44~7.57(m, 10H), 7.69(d, 1H), 7.77~7.88(m, 6H), 8.11(d, 2H), 10.1(s, 1H)

[0196] [준비예 5] E4의 합성

[0197] <단계 1> E2의 합성



[0198]

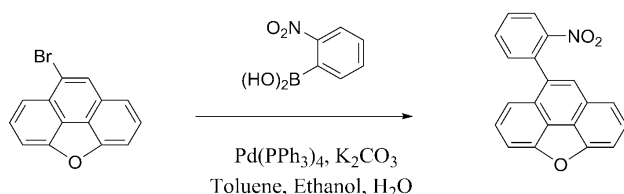
[0199] 질소 기류 하에서 E1 6.5g(33.6 mmol), NBS(N-bromosuccinimide), 6.0g (33.6 mmol), DMF 90 ml을 혼합하고 60 °C에서 3시간 동안 교반하였다.

[0200] 반응 종결 후 DMF를 제거하고 메틸렌클로라이드로 유기층을 분리하여 MgSO₄를 사용하여 물을 제거하였다. 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 E2 (2.9g, 10.8mmol, 수율 32%)을 얻었다.

[0201] GC-Mass (이론치: 271.11g/mol, 측정치: 271g/mol)

[0202] ¹H-NMR: δ 7.83~7.88(m, 5H), 8.10(d, 2H)

[0203] <단계 2> E3의 합성



[0204]

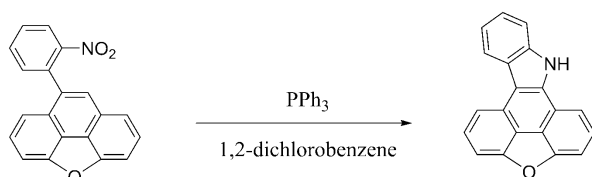
[0205] 질소 기류 하에서 E2, 2.9g, (10.8 mmol), 2-nitrophenylboronic acid, 1.3g (10.8 mmol), 0.6g (5 mol%)의 Pd(PPh₃)₄, 및 potassium carbonate, 4.5g (32.3 mmol)와 80ml/40ml/40ml의 Toluene/H₂O/Ethanol을 넣고 110 °C에서 3시간 동안 교반하였다.

[0206] 반응 종료 후, 메틸렌클로라이드를 이용하여 유기층을 분리하고 MgSO₄를 사용하여 물을 제거하였다. 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 E3 (2.7g, 8.7mmol, 수율 81%)을 얻었다.

[0207] GC-Mass (이론치: 313.31g/mol, 측정치: 313g/mol)

[0208] ¹H-NMR: δ 7.65(m, 1H), 7.79~8.05(m, 8H), 8.10(d, 2H)

[0209] <단계 3> E4의 합성



[0210]

[0211] 질소 기류 하에서 E3 2.7g(8.7 mmol)과 triphenylphosphine, 5.7g (21.8 mmol), 1,2-dichlorobenzene 40 ml를 넣은 후 12시간 교반하였다. 반응 종료 후 1,2-dichlorobenzene를 제거하고 메틸렌클로라이드를 이용하여 유기층을 분리하고 MgSO₄를 사용하여 물을 제거하였다. 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 E4, (1.8g, 6.4 mmol, 수율 74%)을 얻었다.

[0212] GC-Mass (이론치: 281.31g/mol, 측정치: 281g/mol)

[0213] ¹H-NMR: δ 7.27(m, 1H), 7.51(m, 1H), 7.63(d, 1H), 7.83~8.88(m, 4H), 8.10(d, 3H), 10.0(s, 1H)

[0214] [준비예 6] F4의 합성

[0215] <단계 1> F2의 합성



[0216]

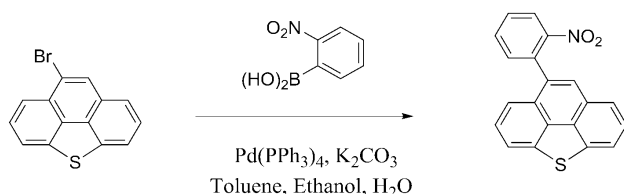
[0217] 질소 기류 하에서 F1 7.0g(33.6 mmol), NBS(N-bromosuccinimide), 6.0g (33.6 mmol), DMF 90 ml을 혼합하고 60℃에서 3시간 동안 교반하였다.

[0218] 반응 종결 후 DMF를 제거하고 메틸렌클로라이드로 유기층을 분리하여 $MgSO_4$ 를 사용하여 물을 제거하였다. 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 F2 (3.1g, 10.8mmol, 수율 32%)을 얻었다.

[0219] GC-Mass (이론치: 287.17g/mol, 측정치: 287g/mol)

[0220] 1H -NMR: δ 7.83~7.91(m, 5H), 8.10(d, 2H)

[0221] <단계 2> F3의 합성



[0222]

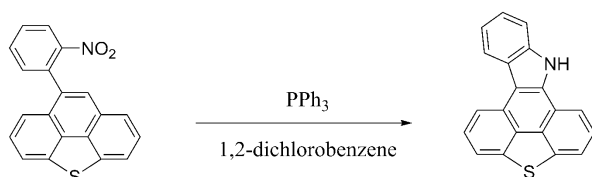
[0223] 질소 기류 하에서 F2, 3.1g, (10.8 mmol), 2-nitrophenylboronic acid, 1.3g (10.8 mmol), 0.6g (5 mol%)의 $Pd(PPh_3)_4$, 및 potassium carbonate, 4.5g (32.3 mmol)와 80ml/40ml/40ml의 Toluene/ H_2O /Ethanol을 넣고 110℃에서 3시간 동안 교반하였다.

[0224] 반응 종료 후, 메틸렌클로라이드를 이용하여 유기층을 분리하고 $MgSO_4$ 를 사용하여 물을 제거하였다. 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 F3 (2.8g, 8.5mmol, 수율 79%)을 얻었다.

[0225] GC-Mass (이론치: 329.37g/mol, 측정치: 329g/mol)

[0226] 1H -NMR: δ 7.58(m, 1H), 7.77~8.02(m, 8H), 8.10(d, 2H)

[0227] <단계 3> F4의 합성



[0228]

[0229] 질소 기류 하에서 F3 2.8g(8.5 mmol)과 triphenylphosphine, 5.6g (21.2 mmol), 1,2-dichlorobenzene 30 ml를 넣은 후 12시간 교반하였다. 반응 종료 후 1,2-dichlorobenzene를 제거하고 메틸렌클로라이드를 이용하여 유기층을 분리하고 $MgSO_4$ 를 사용하여 물을 제거하였다. 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 F4, (2.0g, 6.6 mmol, 수율 78%)을 얻었다.

[0230] GC-Mass (이론치: 298.37g/mol, 측정치: 298g/mol)

[0231] 1H -NMR: δ 7.24(m, 1H), 7.48(m, 1H), 7.60(d, 1H), 7.80~8.85(m, 4H), 8.08(d, 3H), 10.0(s, 1H)

[0232] [준비예 7] G4의 합성

[0233] <단계 1> FG2의 합성



[0234]

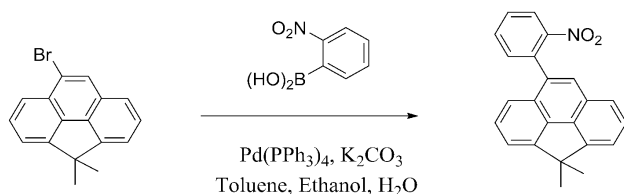
[0235] 질소 기류 하에서 G1 7.3g(33.6 mmol), NBS(N-bromosuccinimide), 6.0g (33.6 mmol), DMF 90 ml을 혼합하고 60℃에서 3시간 동안 교반하였다.

[0236] 반응 종결 후 DMF를 제거하고 메틸렌클로라이드로 유기층을 분리하여 $MgSO_4$ 를 사용하여 물을 제거하였다. 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 G2 (2.3g, 7.7mmol, 수율 23%)을 얻었다.

[0237] GC-Mass (이론치: 297.19g/mol, 측정치: 297g/mol)

[0238] 1H -NMR: δ 1.99(s, 6H), 7.82~7.90(m, 5H), 8.11(d, 2H)

[0239] <단계 2> F3의 합성



[0240]

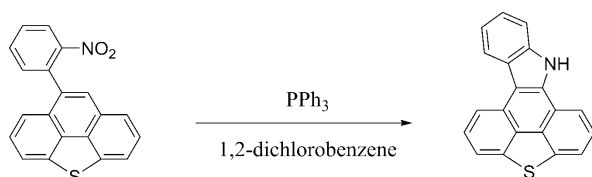
[0241] 질소 기류 하에서 F2, 2.3g, (7.7 mmol), 2-nitrophenylboronic acid, 0.9g (7.7 mmol), 0.4g (5 mol%)의 $Pd(PPh_3)_4$, 및 potassium carbonate, 3.2g (23.2 mmol)와 80ml/40ml/40ml의 Toluene/ H_2O /Ethanol를 넣고 110℃에서 3시간 동안 교반하였다.

[0242] 반응 종료 후, 메틸렌클로라이드를 이용하여 유기층을 분리하고 $MgSO_4$ 를 사용하여 물을 제거하였다. 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 G3 (2.1g, 6.1mmol, 수율 79%)을 얻었다.

[0243] GC-Mass (이론치: 339.39g/mol, 측정치: 339g/mol)

[0244] 1H -NMR: δ 1.99(s, 6H), 7.55(m, 1H), 7.76~8.01(m, 8H), 8.08(d, 2H)

[0245] <단계 3> F4의 합성



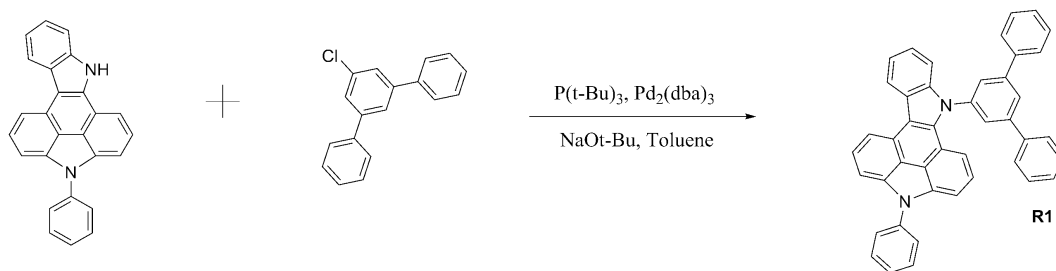
[0246]

[0247] 질소 기류 하에서 F3 2.1g(6.1 mmol)과 triphenylphosphine, 4.0g (15.3 mmol), 1,2-dichlorobenzene 20 ml를 넣은 후 12시간 교반하였다. 반응 종료 후 1,2-dichlorobenzene를 제거하고 메틸렌클로라이드를 이용하여 유기층을 분리하고 $MgSO_4$ 를 사용하여 물을 제거하였다. 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 G4, (1.4g, 4.6 mmol, 수율 76%)을 얻었다.

[0248] GC-Mass (이론치: 307.39g/mol, 측정치: 307g/mol)

[0249] 1H -NMR: δ 1.99(s, 6H), 7.22(m, 1H), 7.45(m, 1H), 7.57(d, 1H), 7.78~8.82(m, 4H), 8.06(d, 3H), 10.0(s, 1H)

[0250] **[합성예 1] R1의 합성**



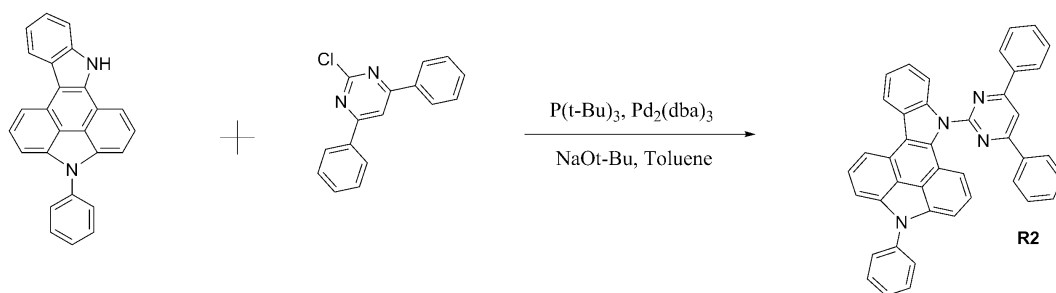
[0251]

[0252] 질소 기류 하에서 A4, 2.3g(6.4mmol), 5'-chloro-1,1':3',1''-Terphenyl, 1.9g(7.1mmol), 0.3g (5 mol%)의 $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$, tri-*tert*-butylphosphine, 0.1g(0.3mmol) 및 Sodium *tert*-butoxide, 19.9g(19.3mmol)와 50ml의 Toluene를 넣고 110℃에서 4시간 동안 교반하였다.

[0253] 반응이 종결된 후 메틸렌클로라이드로 유기층을 분리한 다음 MgSO_4 를 사용하여 물을 제거하였다. 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 R1, 2.4g(4.1mmol, 수율 63%)을 얻었다.

[0254] GC-Mass (이론치: 584.71g/mol, 측정치: 584g/mol)

[0255] **[합성예 2] R2의 합성**



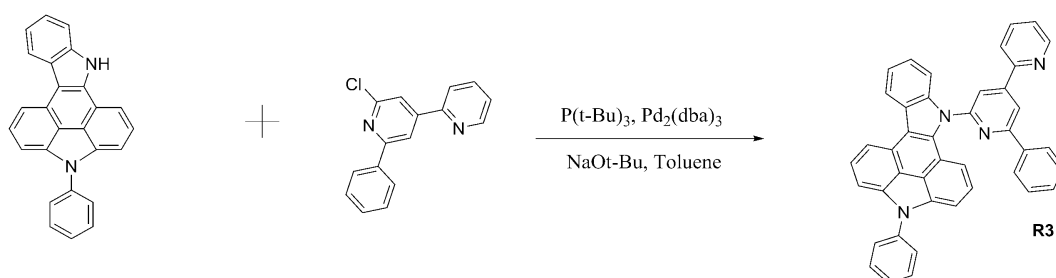
[0256]

[0257] 질소 기류 하에서 A4, 2.3g(6.4mmol), 2-chloro-4,6-diphenylpyrimidine, 1.9g(7.1mmol), 0.3g (5 mol%)의 $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$, tri-*tert*-butylphosphine, 0.1g(0.3mmol) 및 Sodium *tert*-butoxide, 1.9g(19.3mmol)와 50ml의 Toluene를 넣고 110℃에서 4시간 동안 교반하였다.

[0258] 반응이 종결된 후 메틸렌클로라이드로 유기층을 분리한 다음 MgSO_4 를 사용하여 물을 제거하였다. 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 R2, 2.3g(4.0mmol, 수율 62%)을 얻었다.

[0259] GC-Mass (이론치: 586.68g/mol, 측정치: 586g/mol)

[0260] **[합성예 3] R3의 합성**



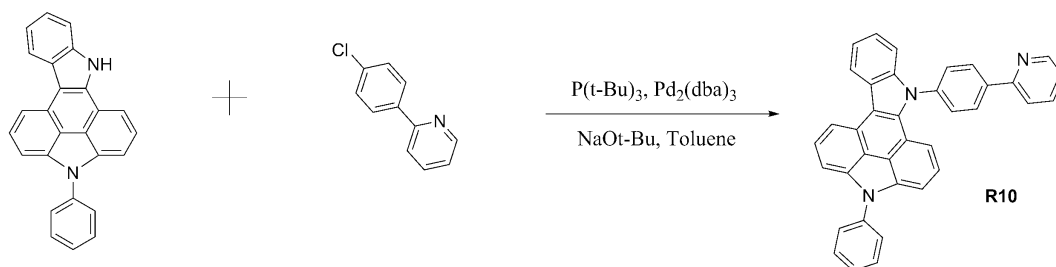
[0261]

[0262] 질소 기류 하에서 A4, 2.3g(6.4mmol), 2'-chloro-6'-phenyl-2,4'-bipyridine, 1.9g(7.1mmol), 0.3g (5 mol%)의 $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$, tri-*tert*-butylphosphine, 0.1g(0.3mmol) 및 Sodium *tert*-butoxide, 1.9g(19.3mmol)와 50ml의 Toluene를 넣고 110℃에서 4시간 동안 교반하였다.

[0263] 반응이 종결된 후 메틸렌클로라이드로 유기층을 분리한 다음 MgSO_4 를 사용하여 물을 제거하였다. 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 R3, 2.5g(4.3mmol, 수율 67%)을 얻었다.

[0264] GC-Mass (이론치: 586.68g/mol, 측정치: 586g/mol)

[0265] **[합성예 4] R10의 합성**



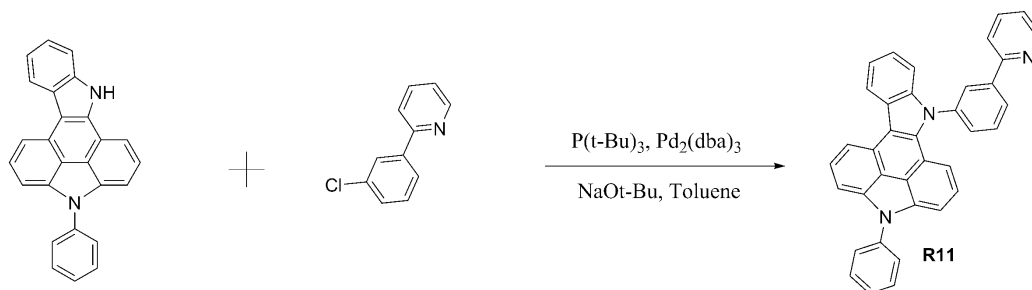
[0266]

[0267] 질소 기류 하에서 A4, 2.3g(6.4mmol), 2-(4-chlorophenyl)pyridine, 1.3g(7.1mmol), 0.3g (5 mol%)의 $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$, tri-*tert*-butylphosphine, 0.1g(0.3mmol) 및 Sodium *tert*-butoxide, 1.9g(19.3mmol)와 50ml의 Toluene를 넣고 110℃에서 4시간 동안 교반하였다.

[0268] 반응이 종결된 후 메틸렌클로라이드로 유기층을 분리한 다음 MgSO_4 를 사용하여 물을 제거하였다. 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 R10, 2.0g(3.9mmol, 수율 61%)을 얻었다.

[0269] GC-Mass (이론치: 509.60g/mol, 측정치: 509g/mol)

[0270] **[합성예 5] R11의 합성**



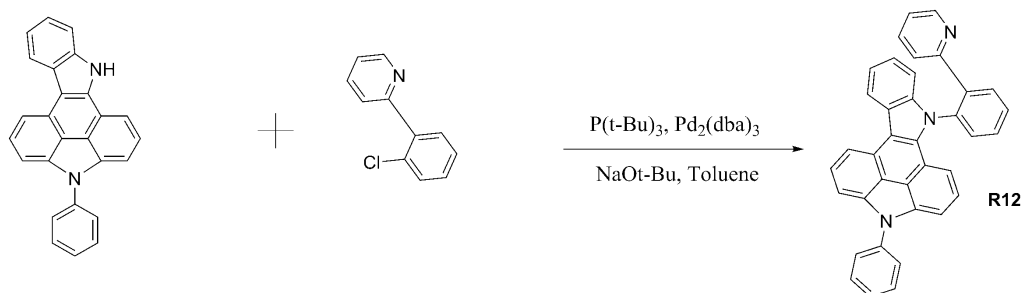
[0271]

[0272] 질소 기류 하에서 A4, 2.3g(6.4mmol), 2-(3-chlorophenyl)pyridine, 1.3g(7.1mmol), 0.3g (5 mol%)의 $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$, tri-*tert*-butylphosphine, 0.1g(0.3mmol) 및 Sodium *tert*-butoxide, 1.9g(19.3mmol)와 50ml의 Toluene를 넣고 110℃에서 4시간 동안 교반하였다.

[0273] 반응이 종결된 후 메틸렌클로라이드로 유기층을 분리한 다음 MgSO_4 를 사용하여 물을 제거하였다. 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 R11, 2.1g(4.1mmol, 수율 64%)을 얻었다.

[0274] GC-Mass (이론치: 509.60g/mol, 측정치: 509g/mol)

[0275] **[합성예 6] R12의 합성**



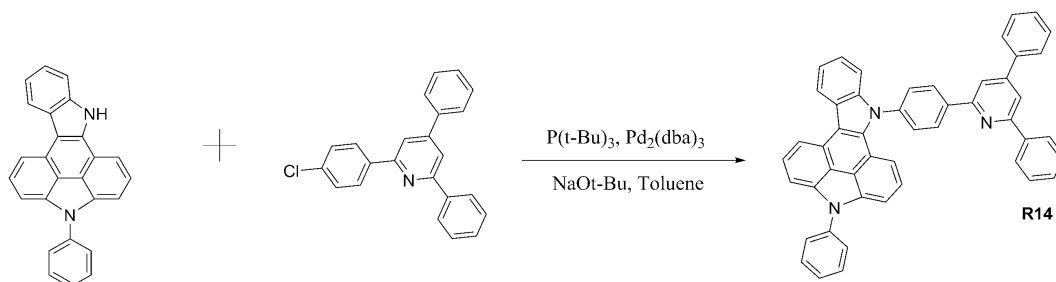
[0276]

[0277] 질소 기류 하에서 A4, 2.3g(6.4mmol), 2-(2-chlorophenyl)pyridine, 1.3g(7.1mmol), 0.3g (5 mol%)의 $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$, tri-*tert*-butylphosphine, 0.1g(0.3mmol) 및 Sodium *tert*-butoxide, 1.9g(19.3mmol)와 50ml의 Toluene를 넣고 110℃에서 4시간 동안 교반하였다.

[0278] 반응이 종결된 후 메틸렌클로라이드로 유기층을 분리한 다음 MgSO_4 를 사용하여 물을 제거하였다. 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 R12, 2.1g(4.1mmol, 수율 63%)을 얻었다.

[0279] GC-Mass (이론치: 509.60g/mol, 측정치: 509g/mol)

[0280] **[합성예 7] R14의 합성**



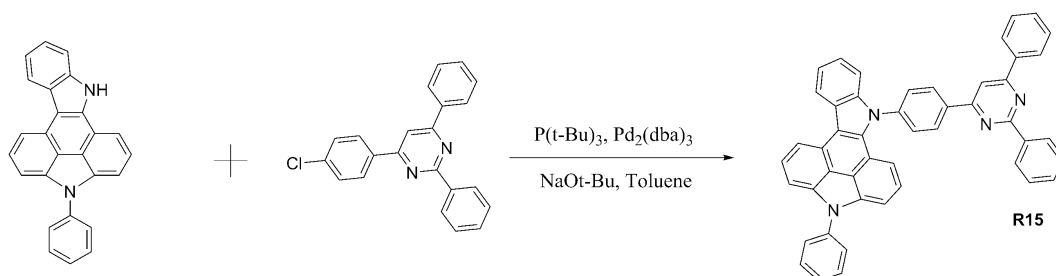
[0281]

[0282] 질소 기류 하에서 A4, 2.3g(6.4mmol), 2-(4-chlorophenyl)-4,6-diphenylpyridine, 2.4g(7.1mmol), 0.3g (5 mol%)의 $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$, tri-*tert*-butylphosphine, 0.1g(0.3mmol) 및 Sodium *tert*-butoxide, 1.9g(19.3mmol)와 50ml의 Toluene를 넣고 110℃에서 4시간 동안 교반하였다.

[0283] 반응이 종결된 후 메틸렌클로라이드로 유기층을 분리한 다음 MgSO_4 를 사용하여 물을 제거하였다. 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 R14, 3.0g(4.6mmol, 수율 71%)을 얻었다.

[0284] GC-Mass (이론치: 661.79g/mol, 측정치: 661g/mol)

[0285] **[합성예 8] R15의 합성**



[0286]

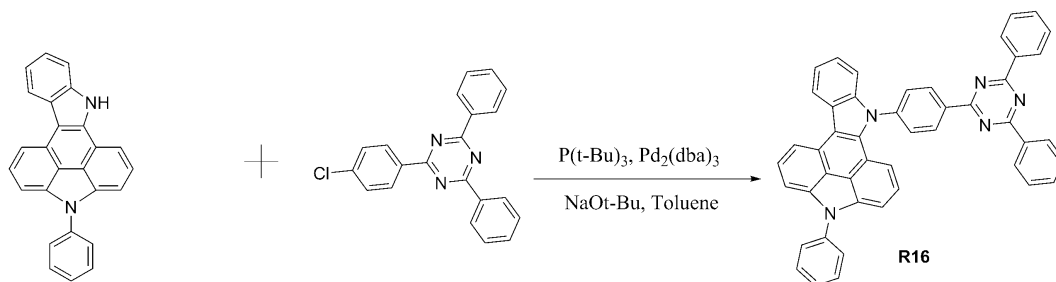
[0287] 질소 기류 하에서 A4, 2.3g(6.4mmol), 4-(4-chlorophenyl)-2,6-diphenylpyrimidine, 2.4g(7.1mmol), 0.3g (5 mol%)의 $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$, tri-*tert*-butylphosphine, 0.1g(0.3mmol) 및 Sodium *tert*-butoxide, 1.9g(19.3mmol)와

50ml의 Toluene를 넣고 110℃에서 4시간 동안 교반하였다.

[0288] 반응이 종결된 후 메틸렌클로라이드로 유기층을 분리한 다음 $MgSO_4$ 를 사용하여 물을 제거하였다. 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 R15, 3.1g(4.7mmol, 수율 73%)을 얻었다.

[0289] GC-Mass (이론치: 661.79g/mol, 측정치: 661g/mol)

[0290] **[합성예 9] R16의 합성**



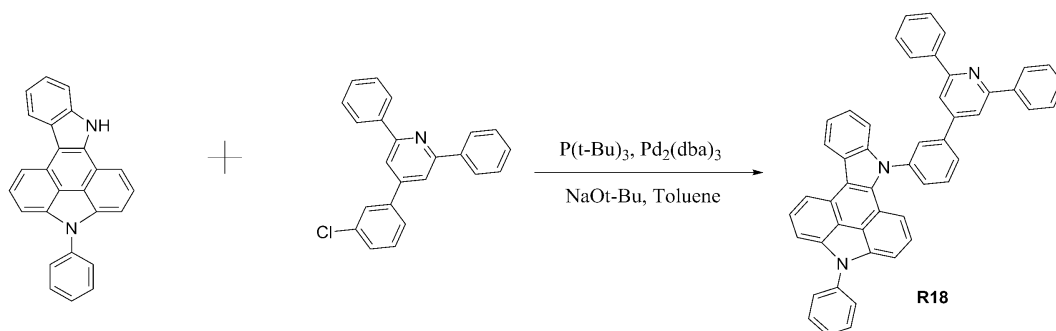
[0291]

[0292] 질소 기류 하에서 A4, 2.3g(6.4mmol), 2-(4-chlorophenyl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine, 2.4g(7.1mmol), 0.3g (5 mol%)의 $Pd_2(dba)_3$, tri-*tert*-butylphosphine, 0.1g(0.3mmol) 및 Sodium *tert*-butoxide, 1.9g(19.3mmol)와 50ml의 Toluene를 넣고 110℃에서 4시간 동안 교반하였다.

[0293] 반응이 종결된 후 메틸렌클로라이드로 유기층을 분리한 다음 $MgSO_4$ 를 사용하여 물을 제거하였다. 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 R16, 3.1g(4.7mmol, 수율 72%)을 얻었다.

[0294] GC-Mass (이론치: 661.79g/mol, 측정치: 661g/mol)

[0295] **[합성예 10] R18의 합성**



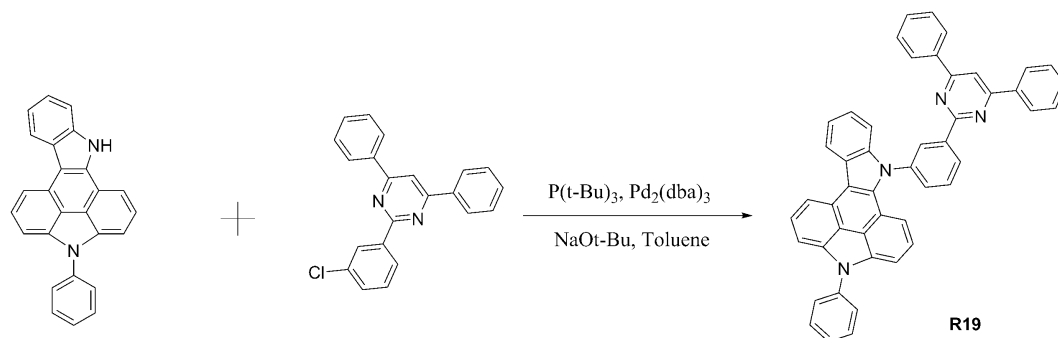
[0296]

[0297] 질소 기류 하에서 A4, 2.3g(6.4mmol), 4-(3-chlorophenyl)-2,6-diphenylpyridine, 2.4g(7.1mmol), 0.3g (5 mol%)의 $Pd_2(dba)_3$, tri-*tert*-butylphosphine, 0.1g(0.3mmol) 및 Sodium *tert*-butoxide, 1.9g(19.3mmol)와 50ml의 Toluene를 넣고 110℃에서 4시간 동안 교반하였다.

[0298] 반응이 종결된 후 메틸렌클로라이드로 유기층을 분리한 다음 $MgSO_4$ 를 사용하여 물을 제거하였다. 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 R18, 3.0g(4.5mmol, 수율 70%)을 얻었다.

[0299] GC-Mass (이론치: 661.79g/mol, 측정치: 661g/mol)

[0300] [합성예 11] R19의 합성



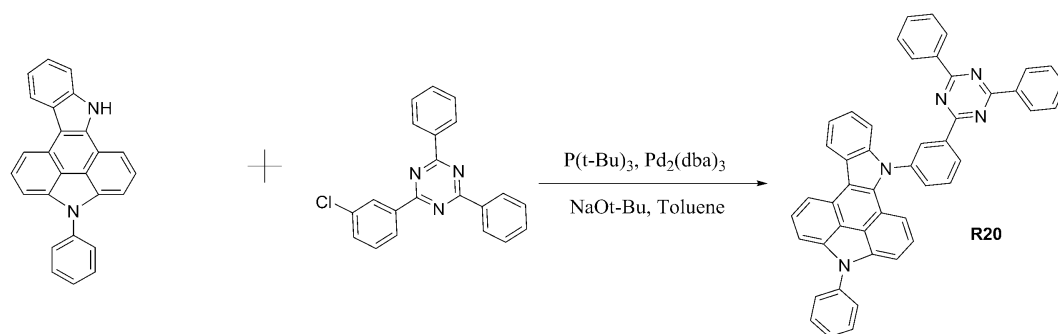
[0301]

[0302] 질소 기류 하에서 A4, 2.3g(6.4mmol), 2-(3-chlorophenyl)-4,6-diphenylpyrimidine, 2.4g(7.1mmol), 0.3g (5 mol%)의 $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$, tri-*tert*-butylphosphine, 0.1g(0.3mmol) 및 Sodium *tert*-butoxide, 1.9g(19.3mmol)와 50ml의 Toluene를 넣고 110℃에서 4시간 동안 교반하였다.

[0303] 반응이 종결된 후 메틸렌클로라이드로 유기층을 분리한 다음 MgSO_4 를 사용하여 물을 제거하였다. 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 R19, 3.0g(4.5mmol, 수율 70%)을 얻었다.

[0304] GC-Mass (이론치: 662.78g/mol, 측정치: 662g/mol)

[0305] [합성예 12] R20의 합성



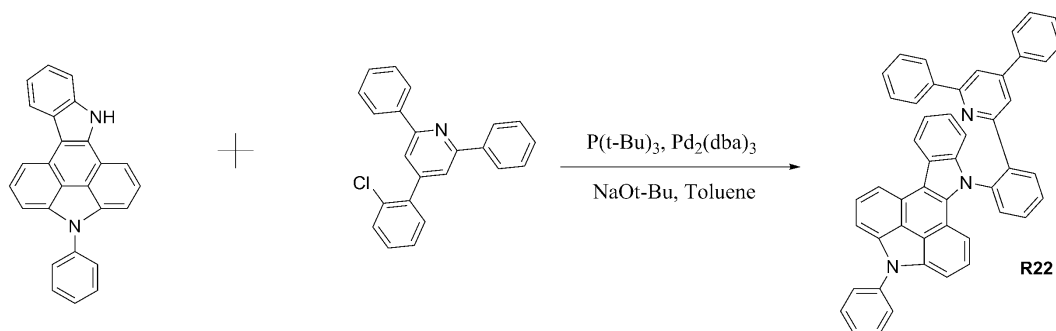
[0306]

[0307] 질소 기류 하에서 A4, 2.3g(6.4mmol), 2-(3-chlorophenyl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine, 2.4g(7.1mmol), 0.3g (5 mol%)의 $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$, tri-*tert*-butylphosphine, 0.1g(0.3mmol) 및 Sodium *tert*-butoxide, 1.9g(19.3mmol)와 50ml의 Toluene를 넣고 110℃에서 4시간 동안 교반하였다.

[0308] 반응이 종결된 후 메틸렌클로라이드로 유기층을 분리한 다음 MgSO_4 를 사용하여 물을 제거하였다. 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 R20, 3.1g(4.6mmol, 수율 72%)을 얻었다.

[0309] GC-Mass (이론치: 663.77g/mol, 측정치: 663g/mol)

[0310] [합성예 13] R22의 합성



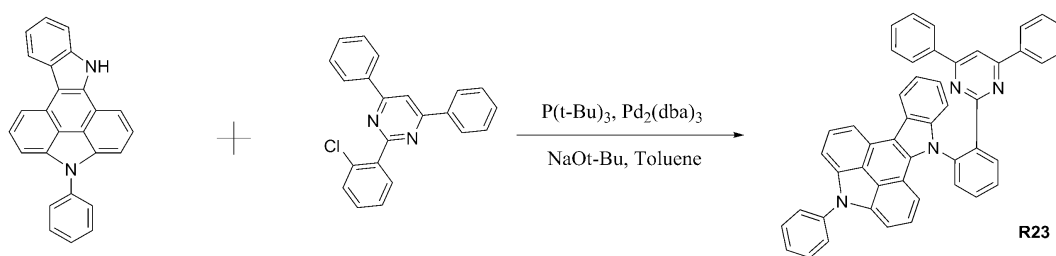
[0311]

[0312] 질소 기류 하에서 A4, 2.3g(6.4mmol), 4-(3-chlorophenyl)-2,6-diphenylpyridine, 2.4g(7.1mmol), 0.3g (5 mol%)의 $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$, tri-*tert*-butylphosphine, 0.1g(0.3mmol) 및 Sodium *tert*-butoxide, 1.9g(19.3mmol)와 50ml의 Toluene를 넣고 110℃에서 4시간 동안 교반하였다.

[0313] 반응이 종결된 후 메틸렌클로라이드로 유기층을 분리한 다음 MgSO_4 를 사용하여 물을 제거하였다. 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 R22, 3.0g(4.1mmol, 수율 64%)을 얻었다.

[0314] GC-Mass (이론치: 661.79g/mol, 측정치: 661g/mol)

[0315] [합성예 14] R23의 합성



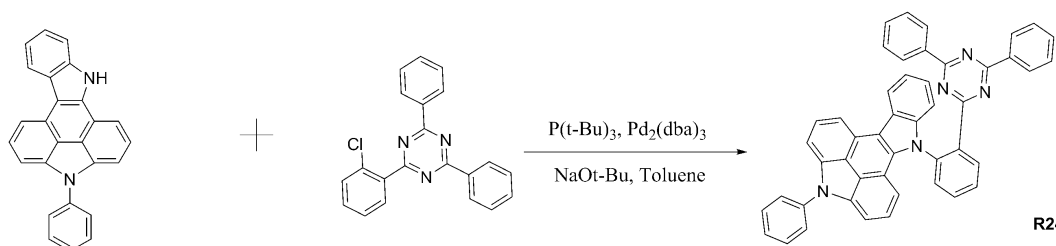
[0316]

[0317] 질소 기류 하에서 A4, 2.3g(6.4mmol), 2-(2-chlorophenyl)-4,6-diphenylpyrimidine, 2.4g(7.1mmol), 0.3g (5 mol%)의 $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$, tri-*tert*-butylphosphine, 0.1g(0.3mmol) 및 Sodium *tert*-butoxide, 1.9g(19.3mmol)와 50ml의 Toluene를 넣고 110℃에서 4시간 동안 교반하였다.

[0318] 반응이 종결된 후 메틸렌클로라이드로 유기층을 분리한 다음 MgSO_4 를 사용하여 물을 제거하였다. 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 R19, 2.6g(4.0mmol, 수율 62%)을 얻었다.

[0319] GC-Mass (이론치: 662.78g/mol, 측정치: 662g/mol)

[0320] [합성예 15] R24의 합성



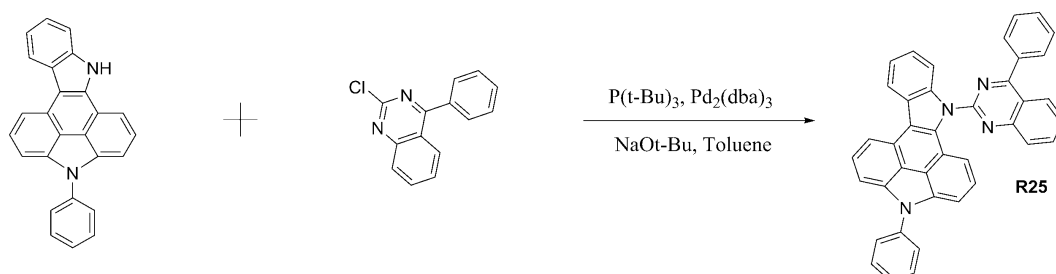
[0321]

[0322] 질소 기류 하에서 A4, 2.3g(6.4mmol), 2-(2-chlorophenyl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine, 2.4g(7.1mmol), 0.3g (5 mol%)의 $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$, tri-*tert*-butylphosphine, 0.1g(0.3mmol) 및 Sodium *tert*-butoxide, 1.9g(19.3mmol)와 50ml의 Toluene를 넣고 110℃에서 4시간 동안 교반하였다.

[0323] 반응이 종결된 후 메틸렌클로라이드로 유기층을 분리한 다음 MgSO_4 를 사용하여 물을 제거하였다. 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 R24, 2.8g(4.3mmol, 수율 66%)을 얻었다.

[0324] GC-Mass (이론치: 663.77g/mol, 측정치: 663g/mol)

[0325] **[합성예 16] R25의 합성**



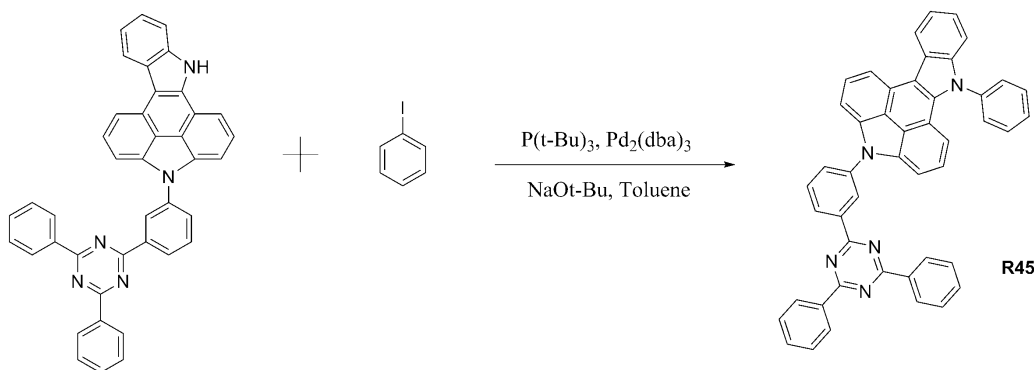
[0326]

[0327] 질소 기류 하에서 A4, 2.3g(6.4mmol), 2-chloro-4-phenylquinazoline, 1.7g(7.1mmol), 0.3g (5 mol%)의 $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$, tri-*tert*-butylphosphine, 0.1g(0.3mmol) 및 Sodium *tert*-butoxide, 1.9g(19.3mmol)와 50ml의 Toluene를 넣고 110℃에서 4시간 동안 교반하였다.

[0328] 반응이 종결된 후 메틸렌클로라이드로 유기층을 분리한 다음 MgSO_4 를 사용하여 물을 제거하였다. 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 R25, 2.5g(4.4mmol, 수율 69%)을 얻었다.

[0329] GC-Mass (이론치: 560.65g/mol, 측정치: 560g/mol)

[0330] **[합성예 17] R45의 합성**



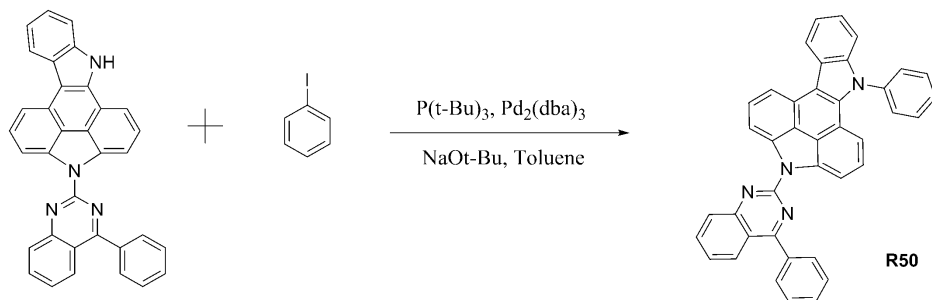
[0331]

[0332] 질소 기류 하에서 B4, 2.6g(4.4mmol), iodobenzene, 1.0g(4.8mmol), 0.2g (5 mol%)의 $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$, tri-*tert*-butylphosphine, 0.1g(0.2mmol) 및 Sodium *tert*-butoxide, 1.3g(13.1mmol)와 50ml의 Toluene를 넣고 110℃에서 4시간 동안 교반하였다.

[0333] 반응이 종결된 후 메틸렌클로라이드로 유기층을 분리한 다음 MgSO_4 를 사용하여 물을 제거하였다. 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 R45, 2.2g(3.3mmol, 수율 75%)을 얻었다.

[0334] GC-Mass (이론치: 395.49g/mol, 측정치: 395g/mol)

[0335] **[합성예 18] R50의 합성**



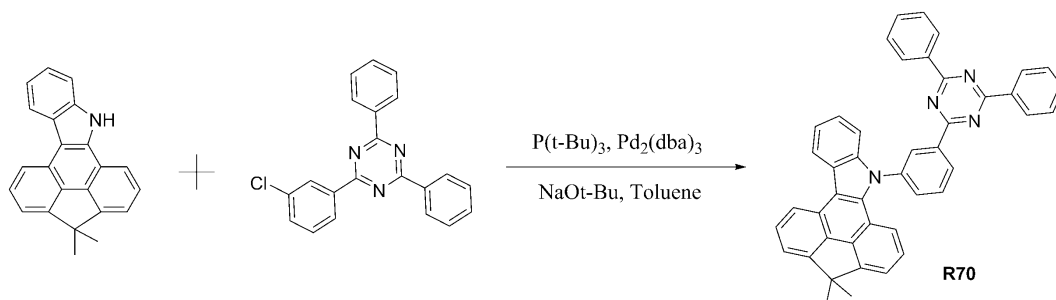
[0336]

[0337] 질소 기류 하에서 C4, 2.2g(4.6mmol), iodobenzene, 1.0g(5.1mmol), 0.2g (5 mol%)의 $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$, tri-*tert*-butylphosphine, 0.2g(0.2mmol) 및 Sodium *tert*-butoxide, 1.3g(13.9mmol)와 50ml의 Toluene를 넣고 110℃에서 4시간 동안 교반하였다.

[0338] 반응이 종결된 후 메틸렌클로라이드로 유기층을 분리한 다음 MgSO_4 를 사용하여 물을 제거하였다. 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 R50, 1.9g(3.4mmol, 수율 74%)을 얻었다.

[0339] GC-Mass (이론치: 560.65g/mol, 측정치: 560g/mol)

[0340] **[합성예 19] R70의 합성**



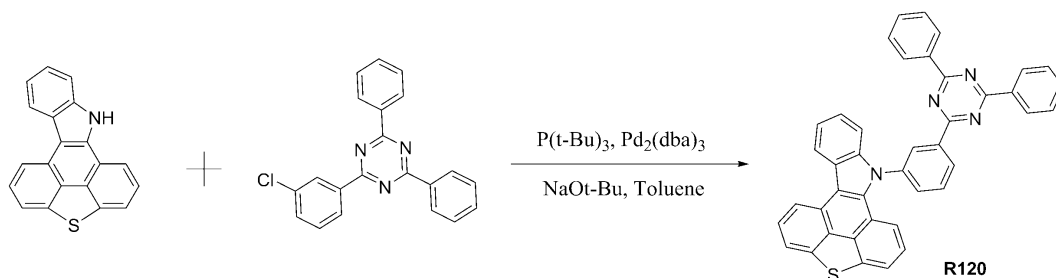
[0341]

[0342] 질소 기류 하에서 E4, 1.8g(6.4mmol), 2-(3-chlorophenyl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine, 2.4g(7.1mmol), 0.3g (5 mol%)의 $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$, tri-*tert*-butylphosphine, 0.1g(0.3mmol) 및 Sodium *tert*-butoxide, 1.9g(19.3mmol)와 50ml의 Toluene를 넣고 110℃에서 4시간 동안 교반하였다.

[0343] 반응이 종결된 후 메틸렌클로라이드로 유기층을 분리한 다음 MgSO_4 를 사용하여 물을 제거하였다. 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 R70, 2.9g(2.9mmol, 수율 72%)을 얻었다.

[0344] GC-Mass (이론치: 614.74g/mol, 측정치: 614g/mol)

[0345] **[합성예 20] R120의 합성**



[0346]

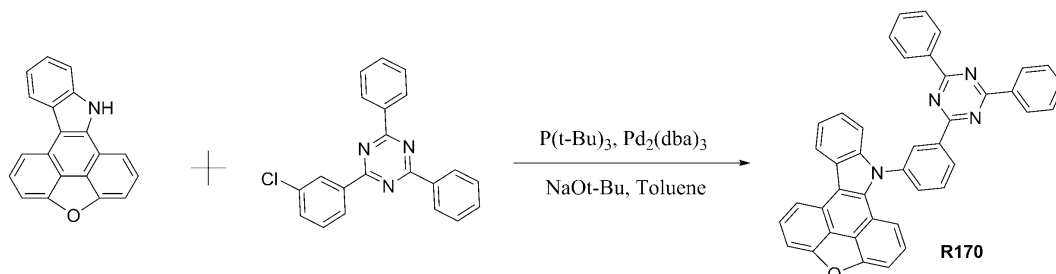
[0347] 질소 기류 하에서 F4, 2.0g(6.4mmol), 2-(3-chlorophenyl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine, 2.4g(7.1mmol), 0.3g (5 mol%)의 $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$, tri-*tert*-butylphosphine, 0.1g(0.3mmol) 및 Sodium *tert*-butoxide,

1.9g(19.3mmol)와 50ml의 Toluene를 넣고 110℃에서 4시간 동안 교반하였다.

[0348] 반응이 종결된 후 메틸렌클로라이드로 유기층을 분리한 다음 $MgSO_4$ 를 사용하여 물을 제거하였다. 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 R120, 2.8g(3.1mmol, 수율 72%)을 얻었다.

[0349] GC-Mass (이론치: 604.72g/mol, 측정치: 604g/mol)

[0350] **[합성예 21] R170의 합성**



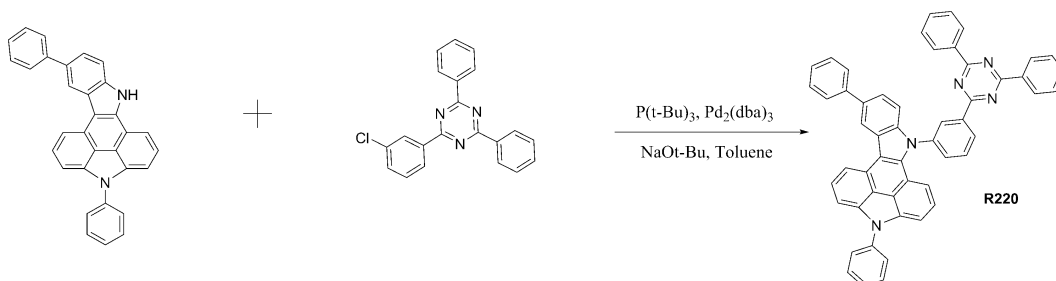
[0351]

[0352] 질소 기류 하에서 G4, 1.4g(4.6mmol), 2-(3-chlorophenyl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine, 1.8g(5.1mmol), 0.2g (5 mol%)의 $Pd_2(dba)_3$, tri-*tert*-butylphosphine, 0.1g(0.2mmol) 및 Sodium *tert*-butoxide, 1.3g(13.9mmol)와 50ml의 Toluene를 넣고 110℃에서 4시간 동안 교반하였다.

[0353] 반응이 종결된 후 메틸렌클로라이드로 유기층을 분리한 다음 $MgSO_4$ 를 사용하여 물을 제거하였다. 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 R170, 2.0g(2.2mmol, 수율 72%)을 얻었다.

[0354] GC-Mass (이론치: 588.66g/mol, 측정치: 588g/mol)

[0355] **[합성예 22] R220의 합성**



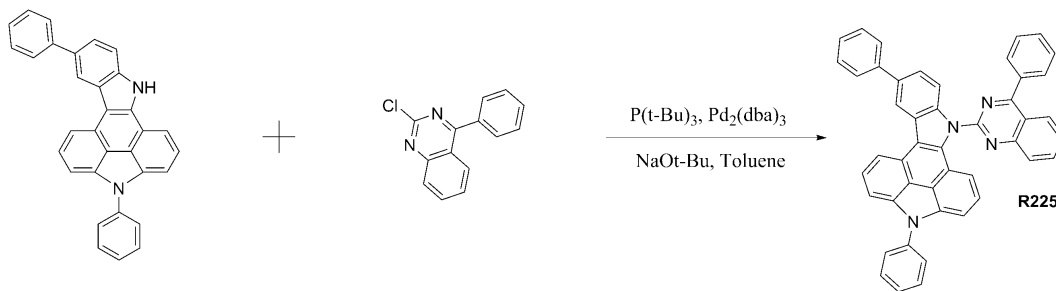
[0356]

[0357] 질소 기류 하에서 D3, 2.3g(5.2mmol), 2-(3-chlorophenyl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine, 1.4g(5.7mmol), 0.2g (5 mol%)의 $Pd_2(dba)_3$, tri-*tert*-butylphosphine, 0.1g(0.3mmol) 및 Sodium *tert*-butoxide, 1.5g(15.7mmol)와 50ml의 Toluene를 넣고 110℃에서 4시간 동안 교반하였다.

[0358] 반응이 종결된 후 메틸렌클로라이드로 유기층을 분리한 다음 $MgSO_4$ 를 사용하여 물을 제거하였다. 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 R220, 2.7g(3.6mmol, 수율 69%)을 얻었다.

[0359] GC-Mass (이론치: 739.86g/mol, 측정치: 739g/mol)

[0360] **[합성예 23] R225의 합성**



[0361]

[0362] 질소 기류 하에서 D3, 2.3g(5.2mmol), 2-chloro-4-phenylquinazoline, 1.4g(5.7mmol), 0.2g (5 mol%)의 $\text{Pd}_2(\text{dba})_3$, tri-*tert*-butylphosphine, 0.2g(0.3mmol) 및 Sodium *tert*-butoxide, 1.5g(15.7mmol)와 50ml의 Toluene을 넣고 110℃에서 4시간 동안 교반하였다.

[0363] 반응이 종결된 후 메틸렌클로라이드로 유기층을 분리한 다음 MgSO_4 를 사용하여 물을 제거하였다. 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 R225, 2.3g(3.6mmol, 수율 69%)을 얻었다.

[0364] GC-Mass (이론치: 636.74g/mol, 측정치: 636g/mol)

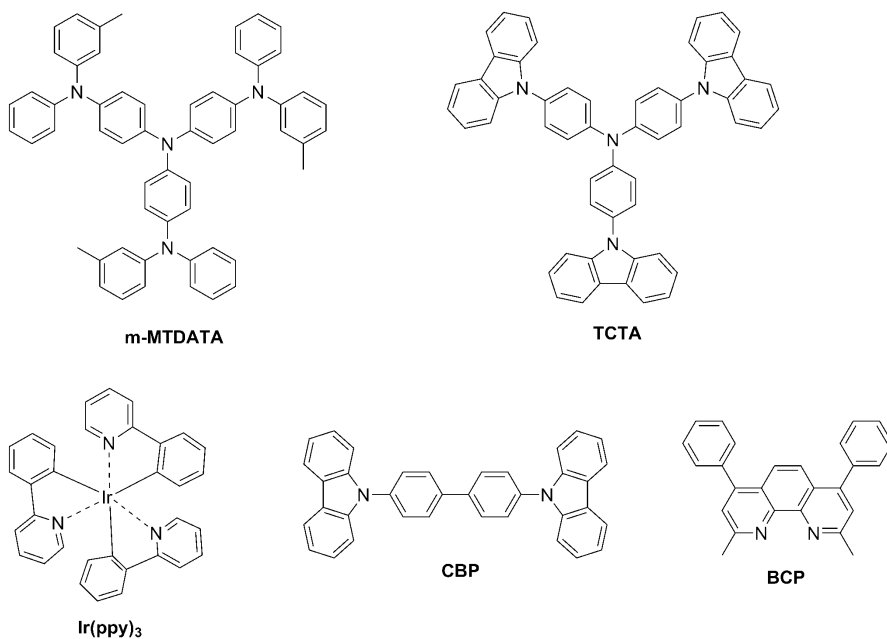
[0365] **[실시예 1 ~ 17] 녹색 유기 EL 소자의 제작**

[0366] 합성예에서 합성된 화합물을 통상적으로 알려진 방법으로 고순도 승화정제를 한 후 아래의 과정에 따라 녹색 유기 EL 소자를 제작하였다.

[0367] 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.

[0368] 이렇게 준비된 ITO 투명 전극 위에 m-MTDATA (60 nm)/TCTA (80 nm)/ R1, R10, R11, R12, R15, R16, R18, R19, R20, R22, R23, R24, R45, R70, R120, R170, R220의 각각의 화합물 + 10 % $\text{Ir}(\text{ppy})_3$ (30nm)/BCP (10 nm)/ Alq_3 (30 nm)/LiF (1 nm)/Al (200 nm) 순으로 적층하여 유기 EL 소자를 제작하였다.

[0369] m-MTDATA, TCTA, $\text{Ir}(\text{ppy})_3$, CBP 및 BCP의 구조는 하기와 같다.



[0371]

[0372] **[비교예 1] 녹색 유기 EL 소자의 제작**

[0373] 발광층 형성시 발광 호스트 물질로서 화합물 R1 대신 CBP를 사용하는 것을 제외하고는 실시예 1과 동일한 과정으로 녹색 유기 EL 소자를 제작하였다.

[0374] **[평가예 1]**

[0375] 실시예 1 ~ 17 및 비교예 1에서 제작한 각각의 녹색 유기 EL 소자에 대하여 전류밀도 (10) mA/cm²에서의 구동전압, 전류효율 및 발광 피크를 측정하고, 그 결과를 하기 표 1에 나타내었다.

표 1

[0376]

샘플	호스트	구동 전압 (V)	EL 피크 (nm)	전류효율 (cd/A)
실시예 1	R1	5.9	515	41.2
실시예 2	R10	6.1	515	42.1
실시예 3	R11	6.0	514	41.2
실시예 4	R12	5.8	515	41.4
실시예 5	R15	6.6	514	40.2
실시예 6	R16	6.4	515	40.3
실시예 7	R18	6.0	515	40.7
실시예 8	R19	6.2	515	42.3
실시예 9	R20	5.8	515	44.0
실시예 10	R22	5.5	515	42.5
실시예 11	R23	6.8	514	41.3
실시예 12	R24	5.7	515	43.6
실시예 13	R45	5.6	515	43.8
실시예 14	R70	6.0	515	44.5
실시예 15	R120	5.0	515	40.1
실시예 16	R170	4.5	515	39.5
실시예 17	R220	5.5	515	43.1
비교예 1	CBP	7.2	517	36.1

[0377] 상기 표 1에 나타난 바와 같이, 본 발명에 따른 화합물(R1, R10, R11, R12, R15, R16, R18, R19, R20, R22, R23, R24, R45, R70, R1120, R170, R220)을 발광층으로 사용하는 실시예 1-17의 녹색 유기 EL 소자는, 종래 CBP를 사용한 녹색 유기 EL 소자(비교예 1)와 비교해 볼 때 효율 및 구동전압 면에서 보다 우수한 성능을 나타내는 것을 알 수 있다.

[0378] **[실시예 18 ~ 23] 적색 유기 EL 소자의 제작**

[0379] 합성예에서 합성된 화합물을 통상적으로 알려진 방법으로 고순도 승화정제를 한 후 아래의 과정에 따라 적색 유기 전계 발광 소자를 제작하였다.

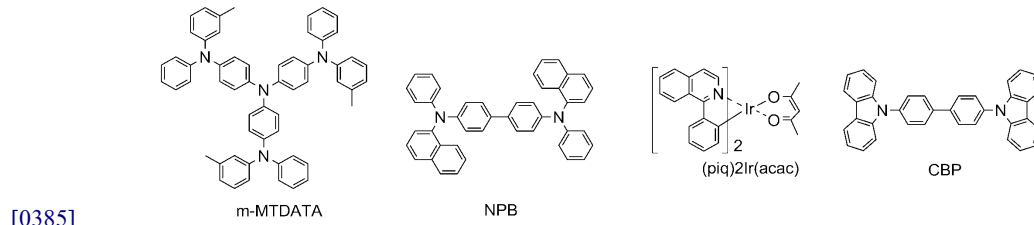
[0380] 먼저, ITO (Indium tin oxide)가 1500Å 두께로 박막 코팅된 유리 기판을 증류수 초음파로 세척하였다. 증류수 세척이 끝나면 이소프로필 알코올, 아세톤, 메탄올 등의 용제로 초음파 세척을 하고 건조시킨 후 UV OZONE 세정기 (Power sonic 405, 화신테크)로 이송시킨 다음 UV를 이용하여 상기 기판을 5분간 세정하고 진공 증착기로 기판을 이송하였다.

[0381] 이렇게 준비된 ITO 투명 전극 위에 m-MTDATA (60 nm)/TCTA (80 nm)/ R2, R3, R14, R25, R50, R225의 화합물 + 10 % (piq)₂Ir(acac) (30nm)/BCP (10 nm)/Alq₃ (30 nm)/LiF (1 nm)/Al (200 nm) 순으로 적층하여 유기 전계 발광 소자를 제작하였다.

[0382] [비교예 2]

[0383] 발광층 형성시 발광 호스트 물질로서 상기 합성에 2의 화합물 대신 CBP를 사용하는 것을 제외하고는 상기 실시예 1과 동일한 과정으로 적색 유기 전계 발광 소자를 제작하였다.

[0384] 상기 실시예 18 ~ 23 및 비교예 2에서 사용된 m-MTDATA, (piq)₂Ir(acac), CBP 및 BCP의 구조는 하기와 같다.



[0386] [평가예 2]

[0387] 실시예 18 ~ 23 및 비교예 2에서 제작한 각각의 유기 전계 발광 소자에 대하여 전류밀도 10 mA/cm²에서의 구동 전압 및 전류효율을 측정하고, 그 결과를 하기 표 2에 나타내었다.

표 2

[0388]

샘플	호스트	구동 전압 (V)	EL 피크 (nm)	전류효율 (cd/A)
실시예 18	R2	4.1	621	12.7
실시예 19	R3	4.4	621	11.5
실시예 20	R14	4.4	620	10.9
실시예 21	R25	3.8	621	13.7
실시예 22	R50	3.5	621	13.2
실시예 23	R225	3.5	621	12.8
비교예 2	CBP	5.5	622	9.1

[0389] 상기 표 2에 나타난 바와 같이, 본 발명에 따른 화합물을 발광층의 재료로 사용하는 실시예 18~23의 적색 유기 전계 발광 소자는, 종래 CBP를 발광층의 재료로 사용한 적색 유기 전계 발광 소자(비교예 2)와 비교해 볼 때 효율 및 구동전압 면에서 우수한 성능을 나타내는 것을 알 수 있었다.

专利名称(译)	标题：有机发光化合物和使用其的有机电致发光器件		
公开(公告)号	KR1020160076355A	公开(公告)日	2016-06-30
申请号	KR1020140186464	申请日	2014-12-22
[标]申请(专利权)人(译)	株式会社斗山		
申请(专利权)人(译)	斗山公司		
当前申请(专利权)人(译)	斗山公司		
[标]发明人	KIM HONGSUK 김홍석 LA JONGGYU 라종규		
发明人	김홍석 라종규		
IPC分类号	C09K11/06 H01L51/50 C07D209/82		
CPC分类号	C09K11/06 C07D209/82 H01L51/50 Y10S428/917		
外部链接	Espacenet		

摘要(译)

本发明涉及性能改进的有机电致发光器件，其包括辐射能力是优异的新型化合物和发光效率，驱动电压，寿命等，该化合物包含在至少一个有机层中。

