

	(19) 대한민국특허청(KR) (12) 공개특허공보(A)	(11) 공개번호 10-2016-0075246 (43) 공개일자 2016년06월29일
(51) 국제특허분류(Int. Cl.) C09K 11/06 (2006.01) C07D 487/04 (2006.01) H01L 51/50 (2006.01)		(71) 출원인 주식회사 두산 서울특별시 중구 장충단로 275 (을지로6가, 두산타워)
(21) 출원번호	10-2014-0184994	(72) 발명자 김재미 경기도 용인시 수지구 성북동 심곡로 87 수지제일아이조움 1040호
(22) 출원일자	2014년12월19일	김성무 경기도 용인시 수지구 풍덕천로 75 707동 1302호
심사청구일자	없음	(74) 대리인 특허법인한벗

전체 청구항 수 : 총 9 항

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

(57) 요약

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

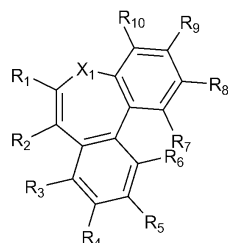
명세서

청구범위

청구항 1

하기 화학식 1로 표시되는 것을 특징으로 하는 화합물:

[화학식 1]

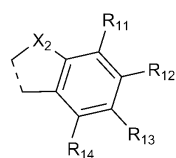


상기 화학식 1에서,

X₁은 O, S 및 N(Ar₁)으로 이루어진 군에서 선택되고,

R₃과 R₄, R₄와 R₅, R₅과 R₆, R₇과 R₈, R₈과 R₉, 및 R₉과 R₁₀ 중 하나는 하기 화학식 2와 축합 환을 형성하고;

[화학식 2]



상기 화학식 2에서,

점선은 축합이 이루어지는 부분이고;

X₂는 O, S, Se, N(Ar₁), C(Ar₂)(Ar₃) 및 Si(Ar₄)(Ar₅)로 구성된 군으로부터 선택되며;

Ar₁ 내지 Ar₅는 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,

축합 환을 비(非)형성하는 R₁ 내지 R₁₄는 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 선택되며, 이때 인접한 각각의 R₁ 내지 R₁₄는 서로 결합하여 축합 방향족환 또는 축합 헤테로방향족환을 형성할 수 있으며,

상기 Ar₁ 내지 Ar₅, R₁ 내지 R₁₄의 알킬기, 알케닐기, 알키닐기, 시클로알킬기, 헤테로시클로알킬기, 아릴기, 헤테로아릴기, 알킬옥시기, 아릴옥시기, 알킬실릴기, 아릴실릴기, 알킬보론기, 아릴보론기, 아릴포스핀기, 아릴포스핀옥사이드기 및 아릴아민기는, 각각 독립적으로 중수소, 할로젠, 시아노기, 니트로기, C₁~C₄₀의 알킬기, C₂~C₄₀의 알케닐기, C₂~C₄₀의 알키닐기, C₃~C₄₀의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, C₆~C₆₀

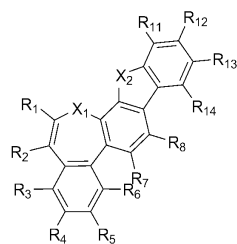
의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴기, C₁~C₄₀의 알킬옥시기, C₆~C₆₀의 아릴옥시기, C₁~C₄₀의 알킬실릴기, C₆~C₆₀의 아릴실릴기, C₁~C₄₀의 알킬보론기, C₆~C₆₀의 아릴보론기, C₆~C₆₀의 아릴포스핀기, C₆~C₆₀의 아릴포스핀옥사이드기 및 C₆~C₆₀의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상으로 치환될 수 있으며, 이때 복수 개의 치환기로 치환될 경우 이들은 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

청구항 2

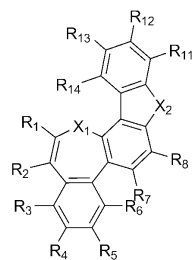
제1항에 있어서,

상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 하기 화학식 1a 내지 화학식 1f 중 어느 하나로 표시되는 것을 특징으로 하는 화합물.

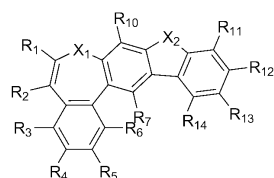
[화학식 1a]



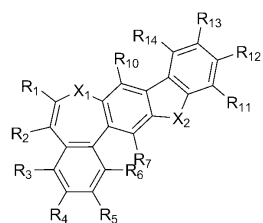
[화학식 1b]



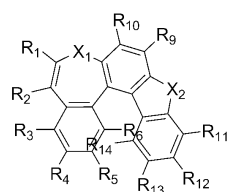
[화학식 1c]



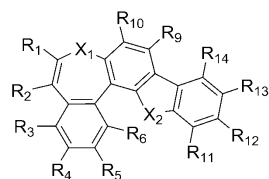
[화학식 1d]



[화학식 1e]



[화학식 1f]



상기 식에서,

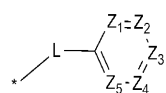
$X_1 \sim X_2$, $R_1 \sim R_{14}$ 는 각각 제1항에서 정의된 바와 같다.

청구항 3

제1항에 있어서,

상기 R_1 내지 R_{14} 및 Ar_1 내지 Ar_5 중 적어도 하나는 하기 화학식 3으로 표시되는 치환체인 것을 특징으로 하는 화합물:

[화학식 3]



상기 화학식 3에서,

*는 상기 화학식 1 또는 화학식 2에 결합되는 부분을 의미하고;

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

Z_1 내지 Z_5 는 서로 동일하거나 상이하며, 각각 독립적으로 N 또는 $C(R_{21})$ 이며, 다만 Z_1 내지 Z_5 중 적어도 하나는 N이고, 이때 R_{21} 이 복수인 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이하며;

R_{21} 은 수소, 중수소, 할로젠, 시아노기, 니트로기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_2 \sim C_{40}$ 의 알케닐기, $C_2 \sim C_{40}$ 의 알키닐기, $C_6 \sim C_{40}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 40의 헤테로아릴기, $C_6 \sim C_{40}$ 의 아릴옥시기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬옥시기, $C_3 \sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, $C_6 \sim C_{40}$ 의 아릴아민기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬실릴기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬보론기, $C_6 \sim C_{40}$ 의 아릴보론기, $C_6 \sim C_{40}$ 의 아릴포스핀기, $C_6 \sim C_{40}$ 의 아릴포스핀옥사이드기 및 $C_6 \sim C_{40}$ 의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택되거나, 또는 인접한 각각의 R_{21} 은 결합하여 축합 고리를 형성할 수 있으며,

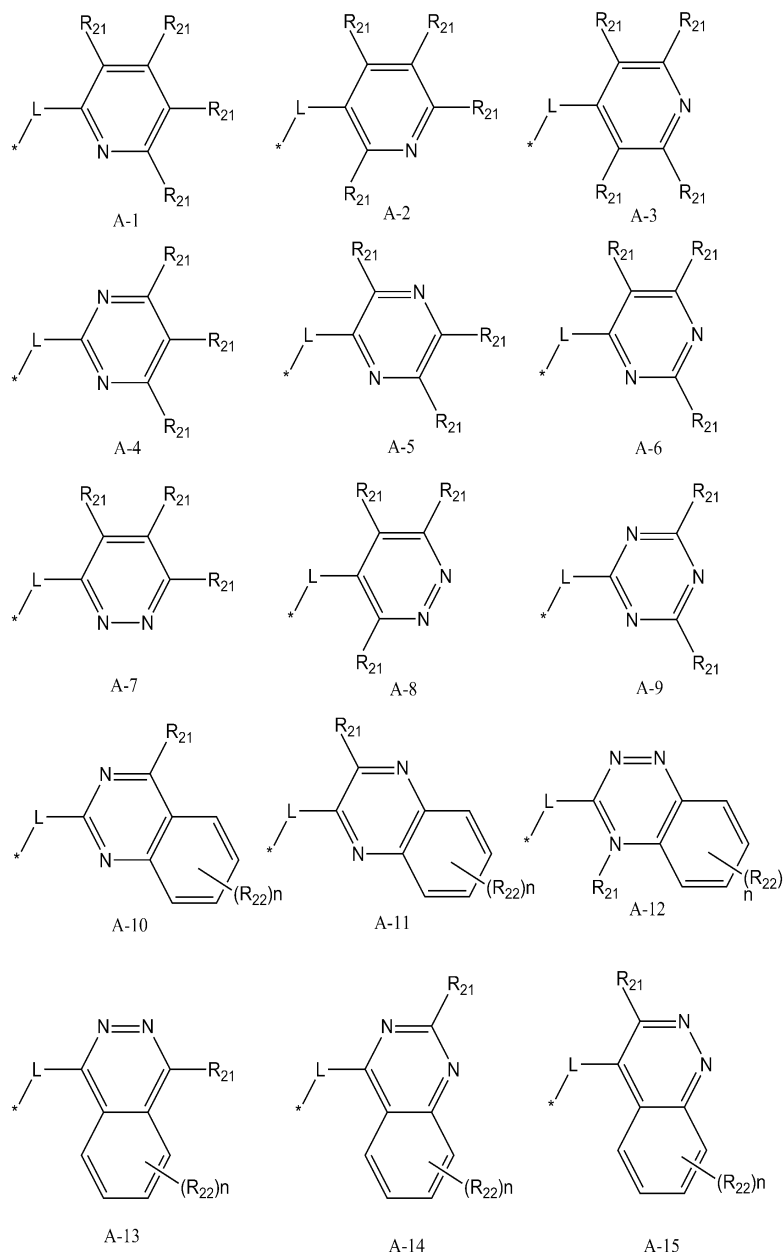
상기 L 및 R_{21} 에서, 아릴렌기, 헤테로아릴렌기, 알킬기, 알케닐기, 알키닐기, 아릴기, 헤테로아릴기, 아릴옥시기, 알킬옥시기, 시클로알킬기, 헤테로시클로알킬기, 아릴아민기, 알킬실릴기, 알킬보론기, 아릴보론기, 아릴포스핀기, 아릴포스핀옥사이드기 및 아릴실릴기는 각각 독립적으로 중수소, 할로젠, 시아노기, 니트로기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_2 \sim C_{40}$ 의 알케닐기, $C_2 \sim C_{40}$ 의 알키닐기, $C_6 \sim C_{40}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 40의 헤테로아릴기, $C_6 \sim C_{40}$ 의 아릴옥시기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬옥시기, $C_6 \sim C_{40}$ 의 아릴아민기, $C_3 \sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬실릴기, $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬보론기, $C_6 \sim C_{40}$ 의 아릴보론기, $C_6 \sim C_{40}$ 의 아릴포스핀기, $C_6 \sim C_{40}$ 의 아릴포스핀옥사이드기 및 $C_6 \sim C_{40}$ 의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상의 치환기로 치환되거나 비치환되고, 이때 상기 치환기가 복수인 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

청구항 4

제 3항에 있어서,

상기 화학식 3의 치환체는 하기 A-1 내지 A-15로 표시되는 치환체로 이루어진 군에서 선택되는 것을 특징으로

하는 화합물.



상기 A-1 내지 A-15에서,

L 및 R_{21} 은 상기 화학식 3에서 정의된 바와 같고,

n 은 0 내지 4의 정수이며,

R_{22} 는 각각 독립적으로 중수소, 할로젠, 시아노기, 니트로기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_2\sim C_{40}$ 의 알케닐기, $C_2\sim C_{40}$ 의 알키닐기, $C_3\sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 40의 헤테로아릴기, $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴옥시기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬옥시기, $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴아민기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬실릴기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬보론기, $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴보론기, $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴포스핀기, $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴포스핀옥사이드기 및 $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택되거나, 또는 인접하는 기와 결합하여 축합 고리를 형성할 수 있으며, 이때 R_{22} 가 복수개인 경우, 이들은 서로 동일하거나 또는 상이하며;

상기 L 및 $R_{21}\sim R_{22}$ 에서 아릴렌기, 헤테로아릴렌기, 알킬기, 알케닐기, 알키닐기, 시클로알킬기, 헤테로시클로알킬기, 아릴기, 헤테로아릴기, 아릴옥시기, 알킬옥시기, 아릴아민기, 알킬실릴기, 알킬보론기, 아릴보론기, 아릴포스핀기, 아릴포스핀옥사이드기 및 아릴실릴기는 각각 독립적으로 중수소, 할로젠, 시아노기, 니트로기, $C_1\sim C_{40}$ 의

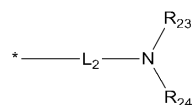
알킬기, C₂~C₄₀의 알케닐기, C₂~C₄₀의 알키닐기, C₆~C₄₀의 아릴기, 핵원자수 5 내지 40의 헤테로아릴기, C₆~C₄₀의 아릴옥시기, C₁~C₄₀의 알킬옥시기, C₆~C₄₀의 아릴아민기, C₃~C₄₀의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, C₁~C₄₀의 알킬실릴기, C₁~C₄₀의 알킬보론기, C₆~C₄₀의 아릴보론기, C₆~C₄₀의 아릴포스핀기, C₆~C₄₀의 아릴포스핀옥사이드기 및 C₆~C₄₀의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상의 치환기로 치환되거나 비치환되고, 상기 치환기가 복수인 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

청구항 5

제 1항에 있어서,

상기 R₁ 내지 R₁₄ 및 Ar₁ 내지 Ar₅ 중 적어도 하나는 하기 화학식 4로 표시되는 치환체인 것을 특징으로 하는 화합물.

[화학식 4]



상기 화학식4에서,

*는 상기 화학식 1 또는 화학식 2에 결합되는 부분을 의미하고;

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

R₂₃ 및 R₂₄는 서로 같거나 또는 상이하며, 각각 독립적으로 C₁~C₄₀의 알킬기, C₆~C₄₀의 아릴기, 핵원자수 5 내지 40의 헤테로아릴기 및 C₆~C₆₀의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택되거나, 또는 R₂₃ 및 R₂₄가 결합하여 축합 고리를 형성할 수 있으며;

상기 L₂ 및 R₂₃-R₂₄에서, 아릴렌기, 헤테로아릴렌기, 알킬기, 아릴기, 헤테로아릴기 및 아릴아민기는 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 비치환되고, 이때 상기 치환기가 복수인 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

청구항 6

제1항에 있어서,

상기 Ar₁ 내지 Ar₅는 서로 같거나 또는 상이하며, 각각 독립적으로 C₁~C₄₀의 알킬기, C₆~C₆₀의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴기 및 C₆~C₄₀의 아릴아민기로 구성된 군으로부터 선택되며,

R₁ 내지 R₁₄은 서로 같거나 또는 상이하며, 각각 독립적으로 수소, C₁~C₄₀의 알킬기, C₆~C₆₀의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴기, 및 C₆~C₄₀의 아릴아민기로 이루어진 군으로부터 선택되며,

상기 알킬기, 아릴기, 헤테로아릴기와 아릴아민기는 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

나 또는 비치환되는 것을 특징으로 하는 화합물.

청구항 7

양극, 음극, 및 상기 양극과 음극 사이에 개재(介在)된 1층 이상의 유기물층을 포함하며,

상기 1층 이상의 유기물층 중에서 적어도 하나는 제1항 내지 제6항 중 어느 한 항에 기재된 화학식 1의 화합물을 포함하는 것을 특징으로 하는 유기 전계 발광 소자.

청구항 8

제 7항에 있어서, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 발광층의 인광 호스트로 사용되는 것을 특징으로 하는 유기 전계 발광 소자.

청구항 9

제 7항에 있어서,

상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하는 1층 이상의 유기물층은 발광층, 발광보조층, 전자수송층 및 정공수송층으로 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 전자주입 및 수송능, 발광능 등이 우수한 신규한 아제핀계 화합물 및 이를 하나 이상의 유기물층에 포함함으로써 발광효율, 구동 전압, 수명 등의 특성이 향상된 유기 전계 발광 소자에 관한 것이다.

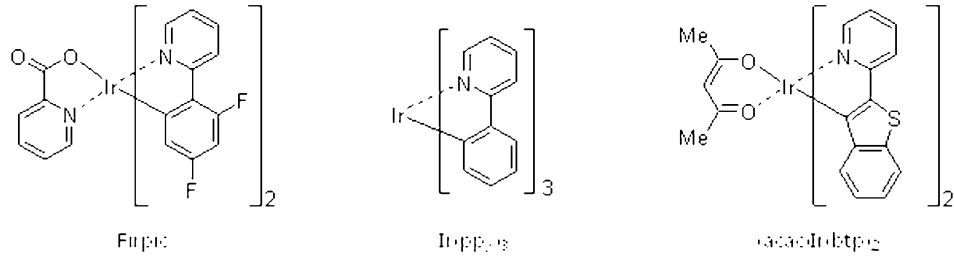
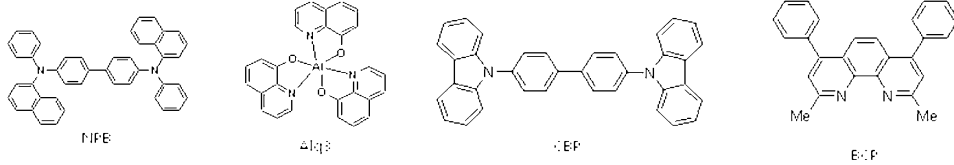
배경 기술

[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 적층 구조의 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, 보다 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.



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

(특허문헌 0001) 대한민국 공개특허 2011-0066763

발명의 내용

해결하려는 과제

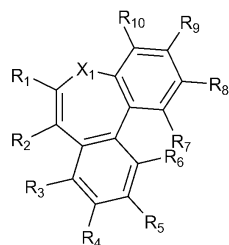
본 발명은 유기 전계 발광 소자에 적용할 수 있으며, 전자 주입 및 수송능, 발광능 등이 모두 우수한 신규 유기 화합물을 제공하는 것을 목적으로 한다.

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

상기 목적을 달성하기 위하여, 본 발명은 하기 화학식 1로 표시되는 것을 특징으로 하는 화합물을 제공한다.

화학식 1



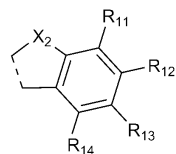
상기 화학식 1에서,

X₁은 O, S 및 N(Ar₁)으로 이루어진 군에서 선택되고,

R₃과 R₄, R₄와 R₅, R₅과 R₆, R₇과 R₈, R₈과 R₉, 및 R₉과 R₁₀ 중 하나는 서로 결합하여 하기 화학식 2와 축합 환을

형성하고;

화학식 2



[0017]

상기 화학식 2에서,

[0018]

접선은 축합이 이루어지는 부분이고;

[0019]

X_2 는 O, S, Se, $N(Ar_1)$, $C(Ar_2)(Ar_3)$ 및 $Si(Ar_4)(Ar_5)$ 로 구성된 군으로부터 선택되며;

[0020]

Ar_1 내지 Ar_5 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,

[0021]

축합 환을 비(非)형성하는 R_1 내지 R_{14} 는 서로 같거나 또는 상이하며, 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 시아노기, 니트로기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_2\sim C_{40}$ 의 알케닐기, $C_2\sim C_{40}$ 의 알키닐기, $C_3\sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬옥시기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴옥시기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬실릴기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴실릴기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬보론기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴보론기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴포스핀기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴포스핀옥사이드기 및 $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택되며, 이때 인접한 각각의 R_1 내지 R_{14} 는 서로 결합하여 축합 방향족환 또는 축합 헤테로방향족환을 형성할 수 있으며,

[0022]

Ar_1 내지 Ar_5 , R_1 내지 R_{14} 의 알킬기, 알케닐기, 알키닐기, 시클로알킬기, 헤테로시클로알킬기, 아릴기, 헤테로아릴기, 알킬옥시기, 아릴옥시기, 알킬실릴기, 아릴실릴기, 알킬보론기, 아릴보론기, 아릴포스핀기, 아릴포스핀옥사이드기 및 아릴아민기는, 각각 독립적으로 중수소, 할로젠, 시아노기, 니트로기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_2\sim C_{40}$ 의 알케닐기, $C_2\sim C_{40}$ 의 알키닐기, $C_3\sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬옥시기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴옥시기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬실릴기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴실릴기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬보론기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴보론기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴포스핀기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴포스핀옥사이드기 및 $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상으로 치환될 수 있으며, 이때, 복수 개의 치환기로 치환될 경우 이들은 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

[0023]

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.

[0024]

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.

[0025]

발명의 효과

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

[0026]

특히, 본 발명의 화학식 1로 표시되는 화합물을 인광 호스트 재료로 사용할 경우, 종래의 호스트 재료에 비해

[0027]

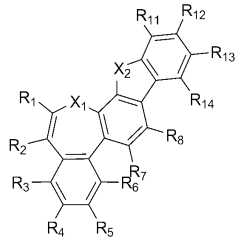
발광 성능이 우수하고, 낮은 구동전압, 높은 효율과 긴 수명을 가지는 유기 전계 발광 소자를 제조할 수 있고, 나아가 성능 및 수명이 향상된 풀 칼라 디스플레이 패널도 제조할 수 있다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

- [0028] 이하, 본 발명을 상세히 설명한다.
- [0029] <신규 유기 화합물>
- [0030] 본 발명에 따른 신규 유기 화합물은 디벤조아제핀, 디벤조옥세핀 또는 디벤조싸이에핀에 벤젠이 축합된 5원 헤테로방향족환 모이어티, 인덴 모이어티(indene moiety), 또는 인돌 모이어티(indole moiety)가 축합되어 기본 골격을 이루고, 이러한 기본 골격에 다양한 치환체가 도입되어 상기 화학식 1로 표시되는 것을 특징으로 한다.
- [0031] 이러한 화학식 1로 표시되는 화합물은 높은 분자량을 가져 유리전이온도가 높아 열적 안정성이 우수하며, 발광층, 캐리어 수송층으로서 효과적인 특성을 보인다. 따라서 상기 화학식 1의 화합물을 유기 전계 발광 소자가 포함할 경우, 소자의 향상된 구동전압, 효율, 수명 등을 보일 수 있다.
- [0032] 보다 구체적으로, 유기 전계 발광 소자의 인광 발광층에서, 호스트 물질의 삼중항 에너지 갭은 일반적으로 도펀트의 삼중항 에너지 갭보다 높아야 한다. 즉, 호스트의 가장 낮은 여기 상태가 도펀트의 가장 낮은 방출 상태보다 에너지가 더 높은 경우, 인광 발광 효율이 향상될 수 있다. 이러한 관점에서 본 발명의 화학식 1로 표시되는 화합물은 삼중항 에너지가 높고, 넓은 일중항 에너지 준위와 높은 삼중항 에너지 준위를 가지는 인돌 유도체가 축합되어 있는 기본 골격에 특정 치환체가 도입됨으로써, 에너지 준위가 도펀트보다 높게 조절될 수 있어 호스트 물질로 유용하게 사용될 수 있다.
- [0033] 또한, 상기 화학식 1의 화합물은 상기 기본 골격에 도입되는 치환체의 종류에 따라 HOMO 및 LUMO 에너지 레벨을 조절할 수 있어, 넓은 밴드갭을 가질 수 있고, 높은 캐리어 수송성을 가질 수 있다. 예를 들어, 상기 화합물은 상기 기본 골격에 질소-함유 헤테로환(예컨대, 피리딘기, 피리미딘기, 트리아진기 등)과 같이 전자 흡수성이 큰 전자 끌개기(EWG)가 결합될 경우, 분자 전체가 바이폴라(bipolar) 특성을 갖기 때문에, 정공과 전자의 결합력을 높일 수 있다. 이와 같이, 상기 기본 골격에 EWG가 도입된 상기 화학식 1의 화합물은 우수한 캐리어 수송성 및 발광 특성이 우수하기 때문에, 유기 전계 발광 소자의 발광층 재료 이외, 전자주입/수송층 재료, 또는 수명 개선층 재료로도 사용될 수 있다.
- [0034] 한편, 상기 화학식 1의 화합물이 상기 기본 골격에 아릴아민기, 카바졸기, 터페닐기, 트리페닐렌기 등과 같이 전자 공여성이 큰 전자 주개기(EDG)가 결합될 경우, 정공의 주입 및 수송이 원활하게 이루어지기 때문에, 발광층 재료 이외에 정공주입/수송층 또는 발광 보조층 재료로도 유용하게 사용될 수 있다. 상기와 같이 본 발명의 화학식 1로 표시되는 화합물은 유기 전계 발광 소자의 발광 특성을 향상시킴과 동시에, 정공 주입/수송 능력, 전자 주입/수송 능력, 발광 효율, 구동 전압, 수명 특성 등을 향상시킬 수 있으므로, 유기 전계 발광 소자의 유기물층 재료, 바람직하게는 발광층 재료(청색, 녹색 및/또는 적색의 인광 호스트 재료), 전자 수송/주입층 재료 및 정공 수송/주입층 재료, 발광보조층 재료, 수명개선층 재료로 사용되는 것이 바람직하다. 더욱 바람직하게는 발광층 재료, 전자 주입층 재료, 발광보조층 재료, 수명 개선층 재료로 사용되는 것이다.
- [0035] 또한, 상기 화학식 1의 화합물은 상기 기본 골격에 다양한 치환체, 특히 아릴기 및/또는 헤테로아릴기가 도입되어 화합물의 분자량이 유의적으로 증대됨으로써, 유리 전이온도가 향상될 수 있고, 이로 인해 종래의 발광 재료(예를 들어, CBP) 보다 높은 열적 안정성을 가질 수 있다. 또한, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 유기물층의 결정화 억제에도 효과가 있다. 따라서, 본 발명에 따른 화학식 1의 화합물을 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.
- [0036] 본 발명에 따른 신규 아제핀 계열 화합물은 상기 화학식 1로 표시되는 화합물과 화학식 2가 결합하여 형성되되, 이때 화학식 2는 화학식 1의 R₃과 R₄, R₄와 R₅, R₅과 R₆, R₇과 R₈, R₈과 R₉, 및 R₉과 R₁₀ 중 하나와 결합하여 축합환을 형성한다.
- [0037] 상기 화합물에서, X₁은 O, S, 및 N(Ar₁)로 구성된 군으로부터 선택된다.

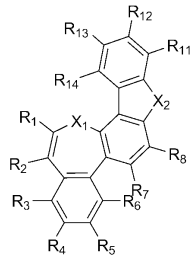
- [0038] 보다 구체적으로, 상기 X_1 이 $N(Ar_1)$ 일 경우 디벤조아제핀 계열 기본 골격이며, X_1 이 0인 경우 디벤조옥세핀 계열 기본 골격이며, X_1 이 S인 경우 디벤조싸이오펜 계열 기본 골격을 가질 수 있다.
- [0039] 또한 X_2 는 O, S, Se, $N(Ar_1)$, $C(Ar_2)(Ar_3)$ 및 $Si(Ar_4)(Ar_5)$ 로 구성된 군으로부터 선택된다. 이때 X_1 과 X_2 가 모두 $N(Ar_1)$ 인 경우, 복수의 Ar_1 은 서로 같거나 또는 상이할 수 있다.
- [0040] Ar_1 내지 Ar_5 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 선택된다.
- [0041] 보다 구체적으로, 상기 Ar_1 내지 Ar_5 는 서로 같거나 또는 상이하며, 각각 독립적으로 $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴기 또는 $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴아민기인 것이 바람직하다. 일례로, 상기 $C_6\sim C_{60}$ 의 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.
- [0042] 또한 축합 환을 비(非)형성하는 R_1 내지 R_{14} 는 서로 같거나 또는 상이하며, 각각 독립적으로 수소, 중수소, 할로젠, 시아노기, 니트로기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_2\sim C_{40}$ 의 알케닐기, $C_2\sim C_{40}$ 의 알키닐기, $C_3\sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬옥시기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴옥시기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬실릴기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴실릴기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬보론기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴보론기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴포스핀기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴포스핀옥사이드기 및 $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택되며, 이때 인접한 각각의 R_1 내지 R_{14} 는 서로 결합하여 축합 방향족환 또는 축합 헤테로방향족환을 형성할 수 있다.
- [0043] 본 발명에서, 상기 R_1 내지 R_{14} 는 서로 같거나 또는 상이하며, 각각 독립적으로 수소, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴기 및 $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택되는 것이 바람직하다.
- [0044] 상기 Ar_1 내지 Ar_5 , R_1 내지 R_{14} 의 알킬기, 알케닐기, 알키닐기, 시클로알킬기, 헤테로시클로알킬기, 아릴기, 헤테로아릴기, 알킬옥시기, 아릴옥시기, 알킬실릴기, 아릴실릴기, 알킬보론기, 아릴보론기, 아릴포스핀기, 아릴포스핀옥사이드기 및 아릴아민기는, 각각 독립적으로 중수소, 할로젠, 시아노기, 니트로기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_2\sim C_{40}$ 의 알케닐기, $C_2\sim C_{40}$ 의 알키닐기, $C_3\sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬옥시기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴옥시기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬실릴기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴실릴기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬보론기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴보론기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴포스핀기, $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴포스핀옥사이드기 및 $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상으로 치환될 수 있으며, 이때 복수 개의 치환기로 치환될 경우 이들은 서로 동일하거나 상이할 수 있다.
- [0045] 본 발명에 따른 화학식 1로 표시되는 화합물은 하기 화학식 1a 내지 화학식 1f 중 어느 하나로 보다 구체화될 수 있다.

[0046] [화학식 1a]



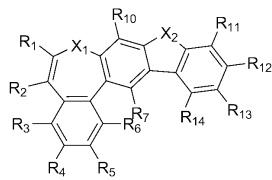
[0047]

[0048] [화학식 1b]



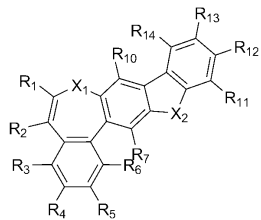
[0049]

[0050] [화학식 1c]



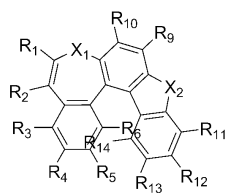
[0051]

[0052] [화학식 1d]



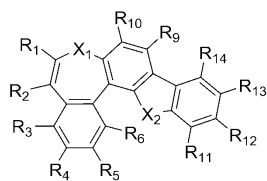
[0053]

[0054] [화학식 1e]



[0055]

[0056] [화학식 1f]



[0057]

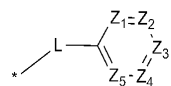
[0058] 상기 화학식 1a 내지 화학식 1f에서,

[0059] $X_1 \sim X_2$, $R_1 \sim R_{14}$ 는 각각 화학식 1 및 화학식 2에서 정의된 바와 같다.

[0060] 특히, 본 발명에서 X_1 과 X_2 가 $N(Ar_1)$ 이고, Ar_1 위치에 방향족 환 또는 헤테로 방향족 환이 치환기로 도입될 경우, 전자이동성을 향상시켜 발광층에서의 정공과 전자의 균형을 맞추고, 열적 안정한 구조로 효율 특성을 극대화할 수 있는 인광 호스트 재료로서의 장점이 있다.

[0061] 본 발명의 바람직한 일례에 따르면, 상기 R_1 내지 R_{14} 및 Ar_1 내지 Ar_5 중 적어도 하나는 하기 화학식 3으로 표시되는 치환체일 수 있다.

화학식 3



[0062]

[0063] 상기 화학식 3에서,

[0064] *는 상기 화학식 1 또는 화학식 2에 결합되는 부분을 의미하고;

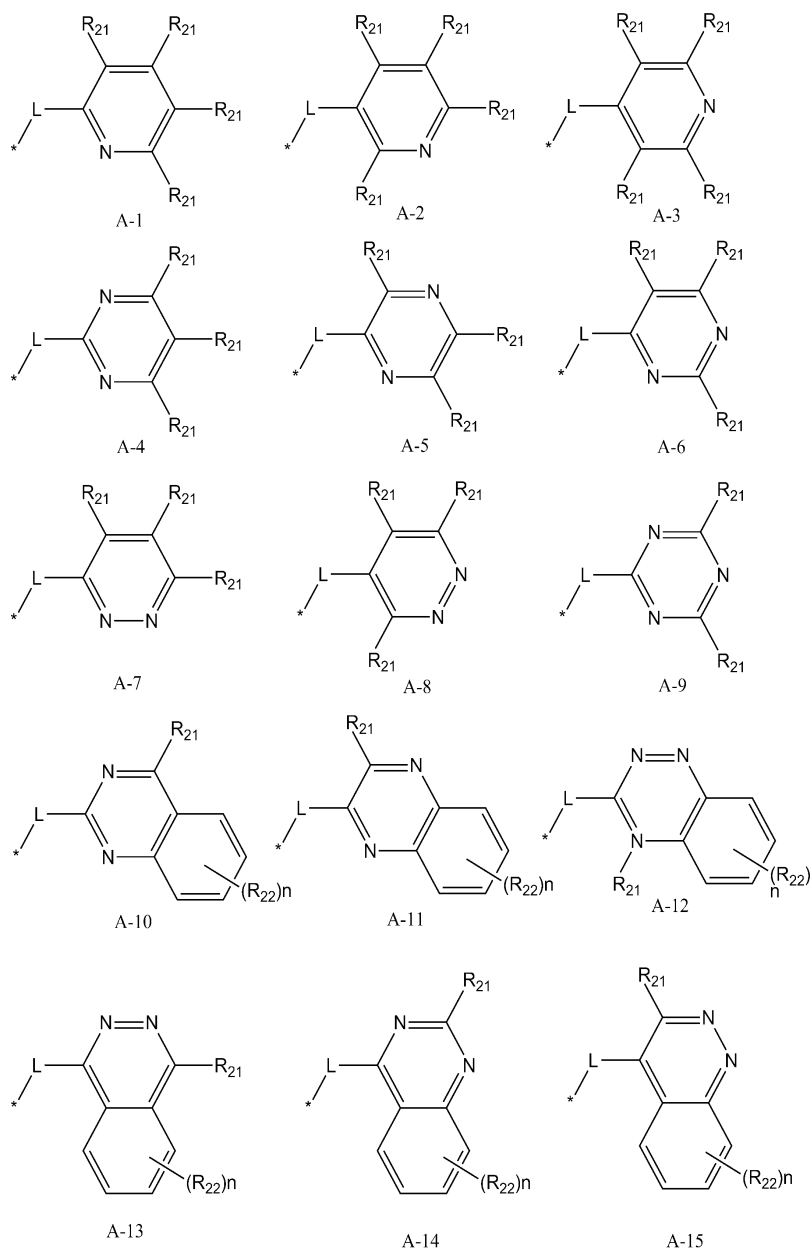
[0065] L은 단일결합이거나, 또는 $C_6\sim C_{18}$ 의 아릴렌기 및 핵원자수 5 내지 18의 헤테로아릴렌기로 이루어진 군에서 선택되고; 바람직하게는 단일결합이거나 페닐렌기 또는 비페닐렌기일 수 있다.

[0066] Z_1 내지 Z_5 는 서로 동일하거나 상이하며, 각각 독립적으로 N 또는 C(R_{21})이며, 다만 Z_1 내지 Z_5 중 적어도 하나는 N이고, 이때 Z_1 내지 Z_5 중 2 이상이 C(R_{21})인 경우, 복수 개의 R_{21} 은 동일하게 표기되더라도 서로 동일하거나 상이하며;

[0067] R_{21} 은 수소, 중수소, 할로젠, 시아노기, 니트로기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_2\sim C_{40}$ 의 알케닐기, $C_2\sim C_{40}$ 의 알키닐기, $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 40의 헤테로아릴기, $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴옥시기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬옥시기, $C_3\sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴아민기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬실릴기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬보론기, $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴보론기, $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴포스핀기, $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴포스핀옥사이드기 및 $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택되거나, 또는 인접하는 기(예컨대, L, 및/또는 인접하는 각각의 다른 R_{21})와 결합하여 축합 고리를 형성할 수 있으며,

[0068] 상기 L 및 R_{21} 에서, 아릴렌기, 헤테로아릴렌기, 알킬기, 알케닐기, 알키닐기, 아릴기, 헤테로아릴기, 아릴옥시기, 알킬옥시기, 시클로알킬기, 헤테로시클로알킬기, 아릴아민기, 알킬실릴기, 알킬보론기, 아릴보론기, 아릴포스핀기, 아릴포스핀옥사이드기 및 아릴실릴기는, 각각 독립적으로 중수소, 할로젠, 시아노기, 니트로기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_2\sim C_{40}$ 의 알케닐기, $C_2\sim C_{40}$ 의 알키닐기, $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 40의 헤테로아릴기, $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴옥시기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬옥시기, $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴아민기, $C_3\sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬실릴기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬보론기, $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴보론기, $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴포스핀기, $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴포스핀옥사이드기 및 $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상의 치환기로 치환되거나 비치환될 수 있다. 이때 상기 치환기가 복수인 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

[0069] 본 발명에 따라, 상기 화학식 3으로 표시되는 치환체는 하기 A-1 내지 A-15로 표시되는 치환체 중 어느 하나로 보다 구체화될 수 있다. 그러나 이에 특별히 한정되지 않는다.



[0070]

[0071]

[0072]

[0073]

[0074]

[0075]

상기 A-1 내지 A-15에서,

L 및 R_{21} 은 상기 화학식 10에서 정의된 바와 같고,

n 은 0 내지 4의 정수이며, 이때 n 이 0인 경우 모두 수소인 것을 의미하며, 상기 n 이 1 내지 4인 경우, 수소의 일부가 치환기 R_{22} 로 치환된 것을 의미한다. 상기 n 이 1 내지 4의 정수인 경우 수소가 R_{22} 로 치환되되, 이때 R_{22} 가 복수 개인 경우, 이들은 서로 동일하거나 또는 상이하며,

R_{22} 는 각각 독립적으로 중수소, 할로젠, 시아노기, 니트로기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬기, $C_2\sim C_{40}$ 의 알케닐기, $C_2\sim C_{40}$ 의 알키닐기, $C_3\sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴기, 핵원자수 5 내지 40의 헤테로아릴기, $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴옥시기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬옥시기, $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴아민기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬실릴기, $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬보론기, $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴보론기, $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴포스핀기, $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴포스핀옥사이드기 및 $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택되거나, 또는 인접하는 기와 결합하여 축합 고리를 형성할 수 있으며, 이때 R_{22} 가 복수인 경우, 이들은 서로 동일하거나 또는 상이하며;

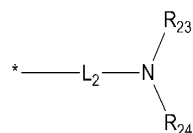
상기 L 및 $R_{21}\sim R_{22}$ 에서 아릴렌기, 헤테로아릴렌기, 알킬기, 알케닐기, 알키닐기, 시클로알킬기, 헤테로시클로알킬기, 아릴기, 헤테로아릴기, 아릴옥시기, 알킬옥시기, 아릴아민기, 알킬실릴기, 알킬보론기, 아릴보론기, 아릴포

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

[0076] 상기 화학식 1로 표시되는 화합물에서, R₁ 내지 R₁₄ 및 Ar₁ 내지 Ar₅ 중 적어도 하나가 상기 화학식 3으로 표시되는 치환체일 수 있으며, 보다 구체적으로 상기 X₁, X₂, 또는 이들 모두가 N(Ar₁)인 경우, 이러한 Ar₁이 화학식 3으로 표시되는 치환체인 경우가 바람직하다. 이때 Ar₁이 복수 개인 경우 이들은 서로 같거나 또는 동일할 수 있다.

[0077] 본 발명의 바람직한 또 다른 일례에 따르면, 상기 R₁ 내지 R₁₄ 및 Ar₁ 내지 Ar₅ 중 적어도 하나는 하기 화학식 4로 표시되는 치환체일 수 있다.

화학식 4



[0078]

[0079] 상기 화학식 4에서,

[0080] *는 상기 화학식 1 또는 화학식 2에 결합되는 부분을 의미하고;

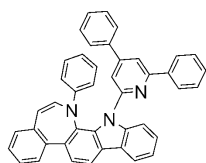
[0081] L₂은 단일결합이거나, 또는 C₆~C₁₈의 아릴렌기 및 핵원자수 5 내지 18의 헤테로아릴렌기로 이루어진 군에서 선택되고, 바람직하게는 단일결합이거나 페닐렌기 또는 비페닐렌기일 수 있다.

[0082] R₂₃ 및 R₂₄는 서로 동일하거나 또는 상이하며, 각각 독립적으로 C₁~C₄₀의 알킬기, C₆~C₄₀의 아릴기, 핵원자수 5 내지 40의 헤테로아릴기 및 C₆~C₆₀의 아릴아민기로 이루어진 군에서 선택되거나, 또는 상기 R₂₃ 및 R₂₄가 결합하여 축합 고리를 형성할 수 있으며;

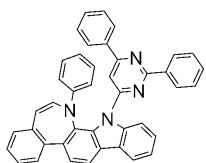
[0083] 상기 L₂ 및 R₂₃ ~ R₂₄에서, 아릴렌기, 헤테로아릴렌기, 알킬기, 아릴기, 헤테로아릴기 및 아릴아민기는 각각 독립적으로 중수소, 할로젠, 시아노기, 니트로기, C₁~C₄₀의 알킬기, C₂~C₄₀의 알케닐기, C₂~C₄₀의 알키닐기, C₆~C₄₀의 아릴기, 핵원자수 5 내지 40의 헤테로아릴기, C₆~C₄₀의 아릴옥시기, C₁~C₄₀의 알킬옥시기, C₆~C₄₀의 아릴아민기, C₃~C₄₀의 시클로알킬기, 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, C₁~C₄₀의 알킬실릴기, C₁~C₄₀의 알킬보론기, C₆~C₄₀의 아릴보론기, C₆~C₄₀의 아릴포스핀기, C₆~C₄₀의 아릴포스핀옥사이드기 및 C₆~C₄₀의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상의 치환기로 치환되거나 또는 비치환될 수 있으며, 이때 상기 치환기가 복수인 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

[0084] 상기 화학식 1로 표시되는 화합물에서, R₁ 내지 R₁₄ 및 Ar₁ 내지 Ar₅ 중 적어도 하나가 상기 화학식 4로 표시되는 치환체일 수 있으며, 보다 구체적으로 상기 X₁, X₂, 또는 이들 모두가 N(Ar₁)인 경우, 이러한 Ar₁이 화학식 4로 표시되는 치환체인 경우가 바람직하다. 이때 Ar₁이 복수 개인 경우 이들은 서로 같거나 또는 동일할 수 있다.

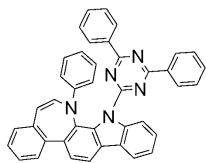
[0085] 이상에서 설명한 본 발명의 화합물은 하기 예시되는 화학식 A-1 내지 화학식 G-36 중 어느 하나로 표시되는 화합물로 보다 구체화될 수 있다. 그러나 본 발명의 화학식 1로 표시되는 화합물이 하기 예시된 것들에 의해 한정되는 것은 아니다.



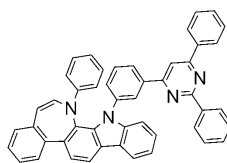
A-1



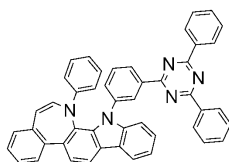
A-2



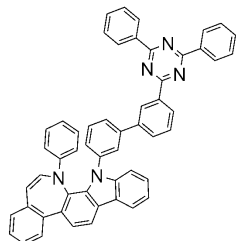
A-3



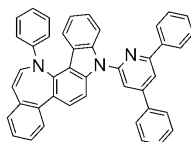
A-4



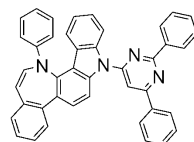
A-5



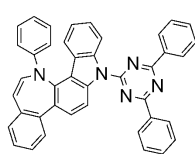
A-6



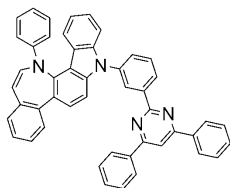
A-7



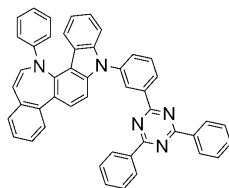
A-8



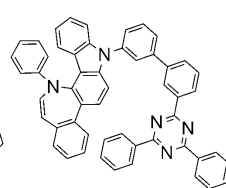
A-9



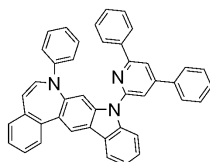
A-10



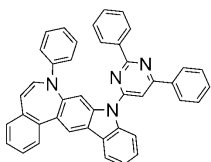
A-11



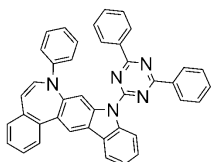
A-12



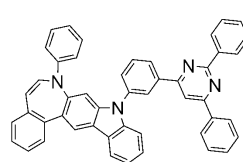
A-13



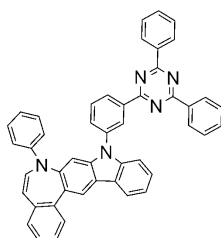
A-14



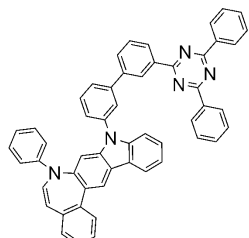
A-15



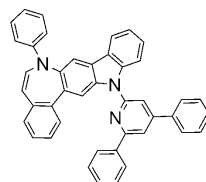
A-16



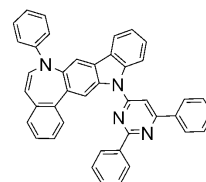
A-17



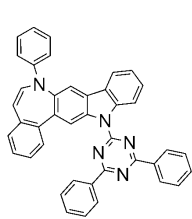
A-18



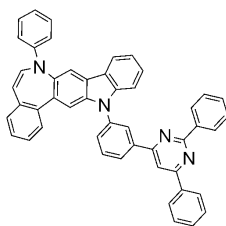
A-19



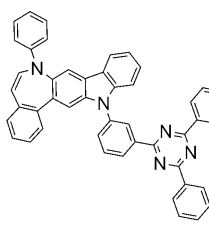
A-20



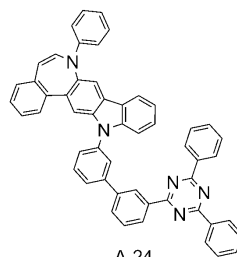
A-21



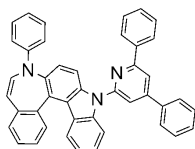
A-22



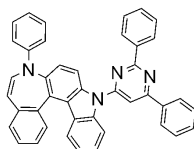
A-23



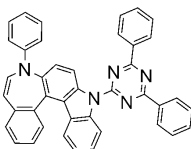
A-24



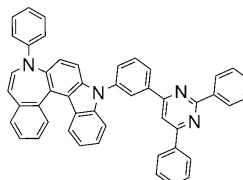
A-25



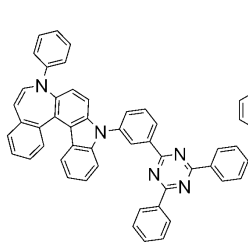
A-26



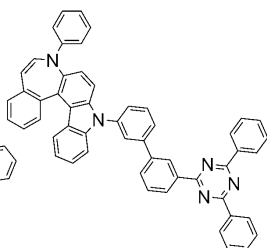
A-27



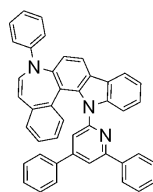
A-28



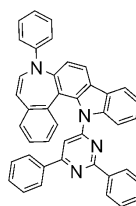
A-29



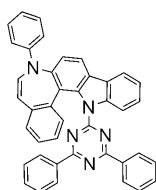
A-30



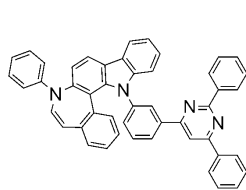
A-31



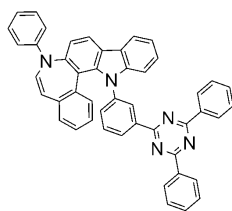
A-32



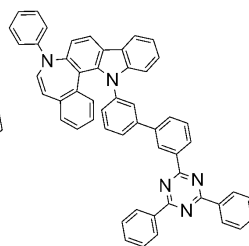
A-33



A-34

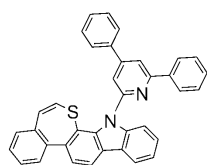


A-35

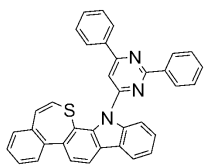


A-36

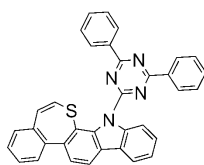
[0087]



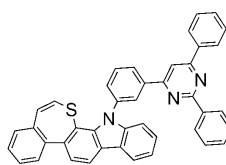
B-1



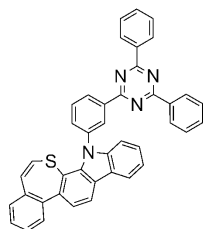
B-2



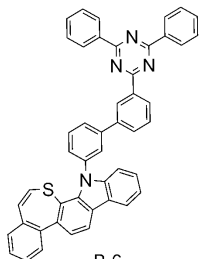
B-3



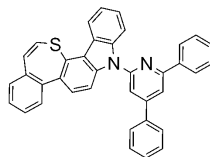
B-4



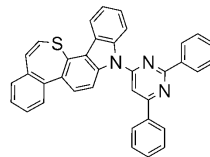
B-5



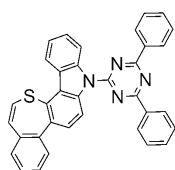
B-6



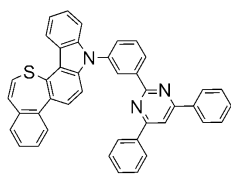
B-7



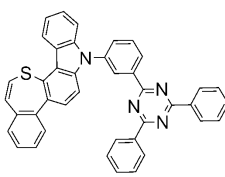
B-8



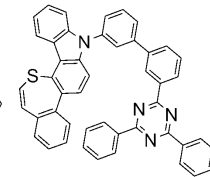
B-9



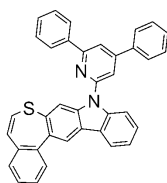
B-10



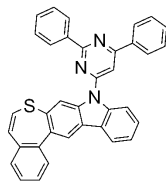
B-11



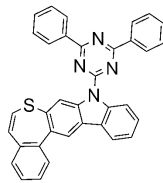
B-12



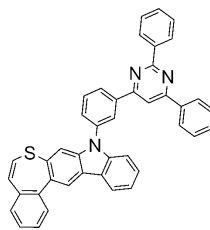
B-13



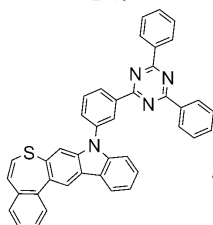
B-14



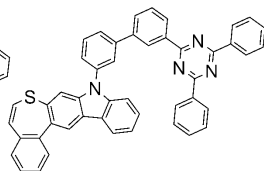
B-15



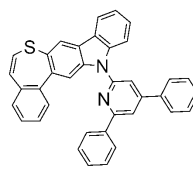
B-16



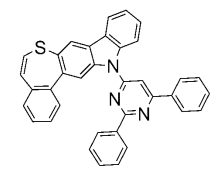
B-17



B-18

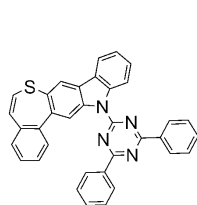


B-19

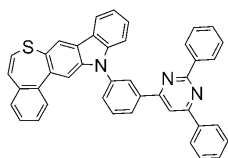


B-20

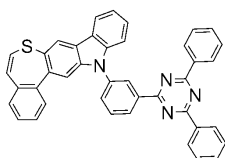
[0088]



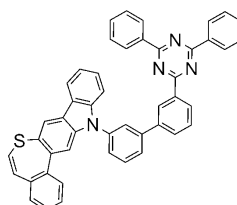
B-21



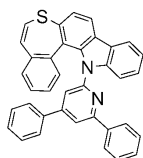
B-22



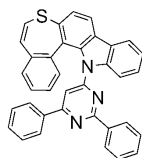
B-23



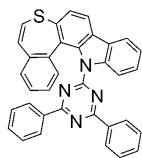
B-24



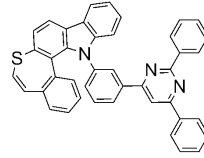
B-25



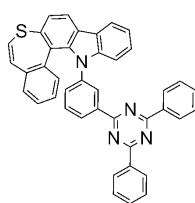
B-26



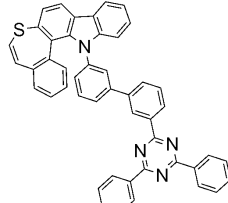
B-27



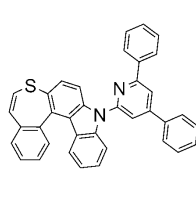
B-28



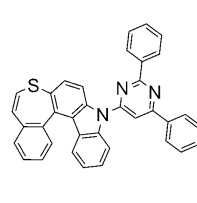
B-29



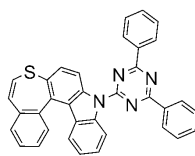
B-30



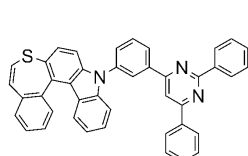
B-31



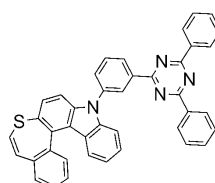
B-32



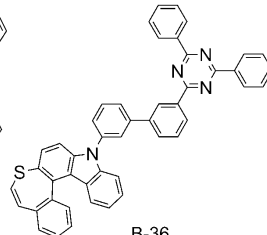
B-33



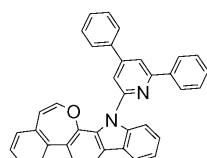
B-34



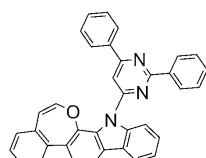
B-35



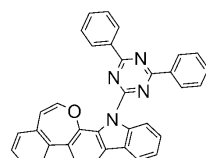
B-36



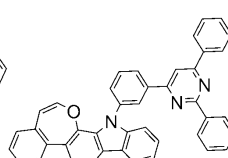
C-1



C-2

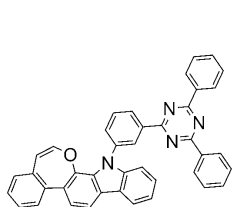


C-3

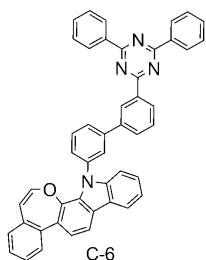


C-4

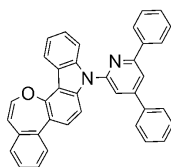
[0089]



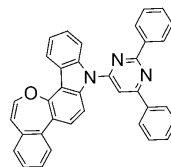
C-5



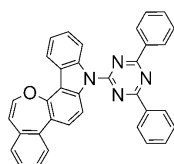
C-6



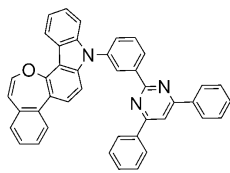
C-7



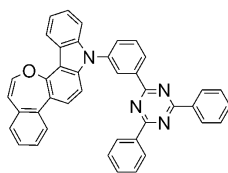
C-8



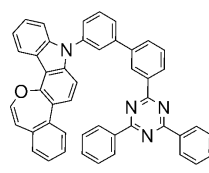
C-9



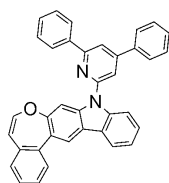
C-10



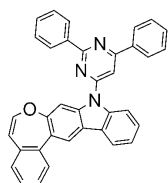
C-11



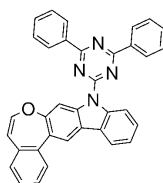
C-12



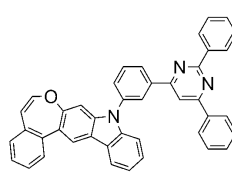
C-13



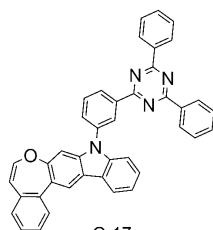
C-14



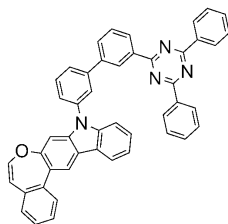
C-15



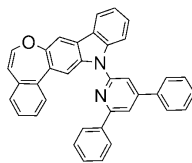
C-16



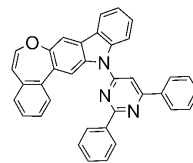
C-17



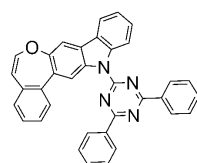
C-18



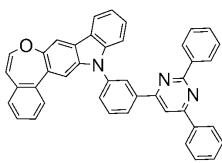
C-19



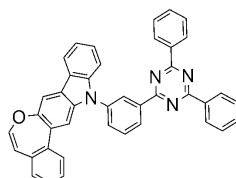
C-20



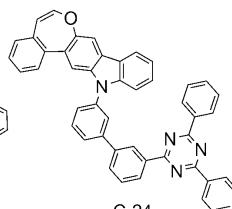
C-21



C-22

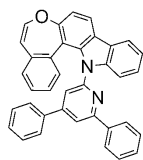


C-23

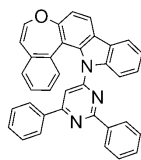


C-24

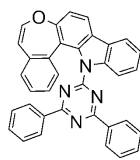
[0090]



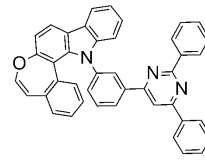
C-25



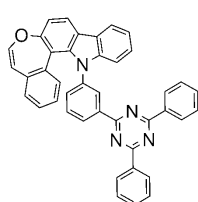
C-26



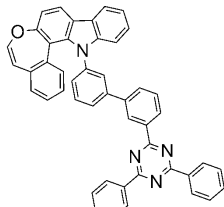
C-27



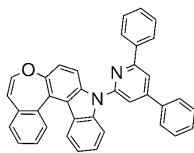
C-28



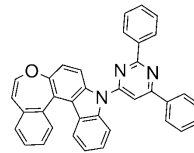
C-29



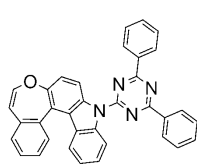
C-30



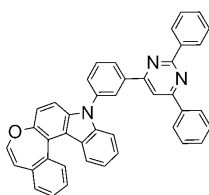
C-31



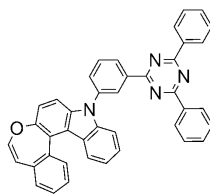
C-32



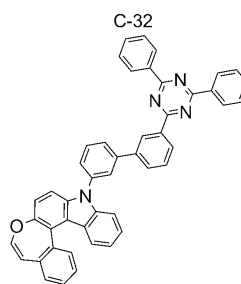
C-33



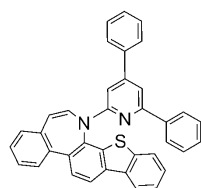
C-34



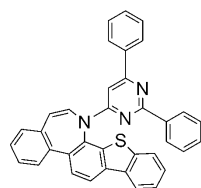
C-35



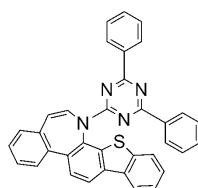
C-36



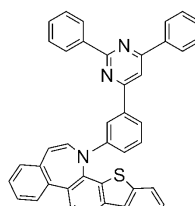
D-1



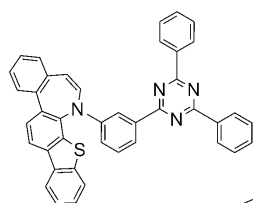
D-2



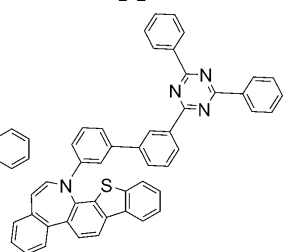
D-3



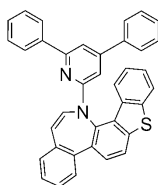
D-4



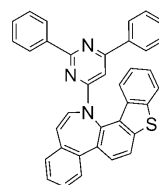
D-5



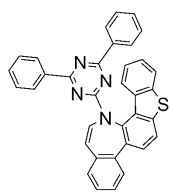
D-6



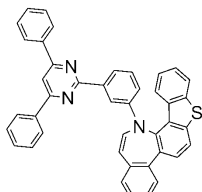
D-7



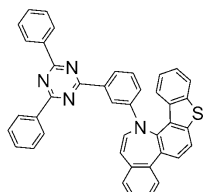
D-8



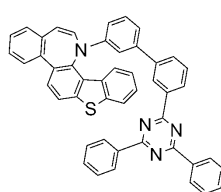
D-9



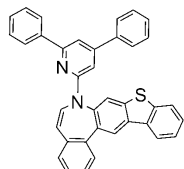
D-10



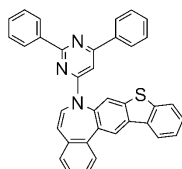
D-11



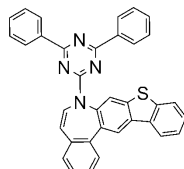
D-12



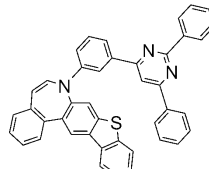
D-13



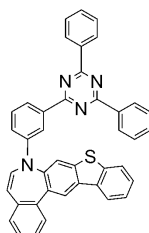
D-14



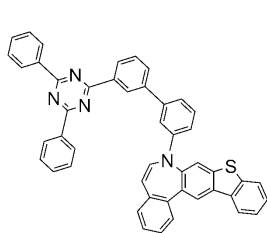
D-15



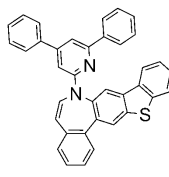
D-16



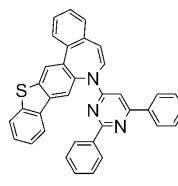
D-17



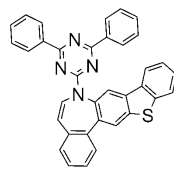
D-18



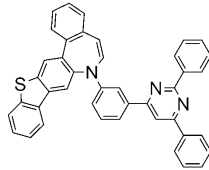
D-19



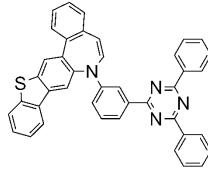
D-20



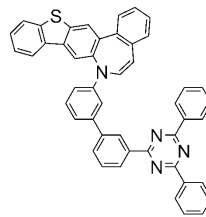
D-21



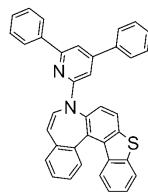
D-22



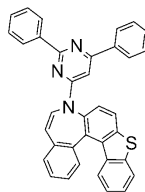
D-23



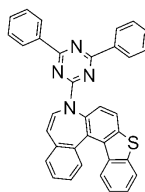
D-24



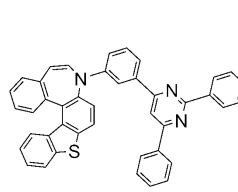
D-25



D-26

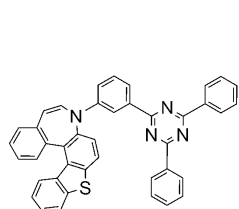


D-27

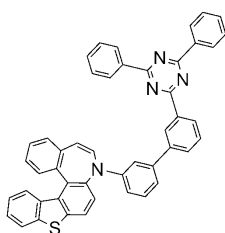


D-28

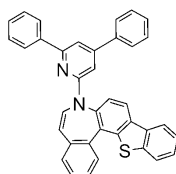
[0092]



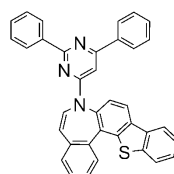
D-29



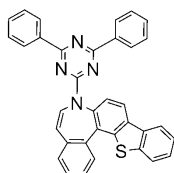
D-30



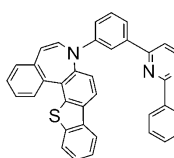
D-31



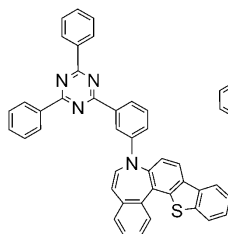
D-32



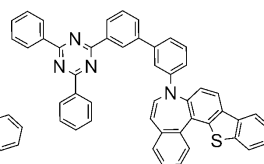
D-33



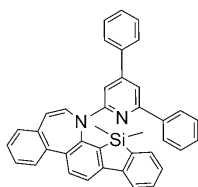
D-34



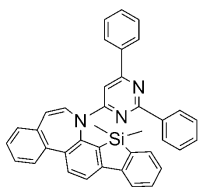
D-35



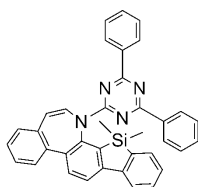
D-36



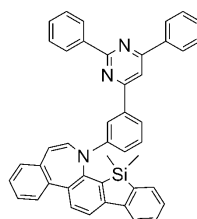
E-1



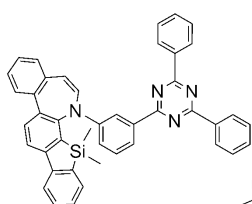
E-2



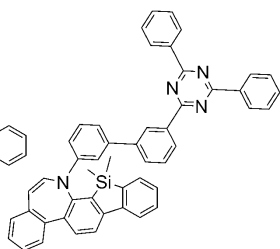
E-3



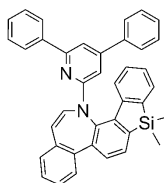
E-4



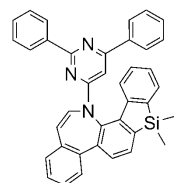
E-5



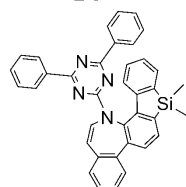
E-6



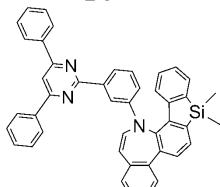
E-7



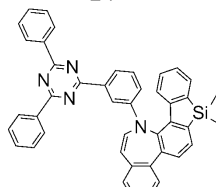
E-8



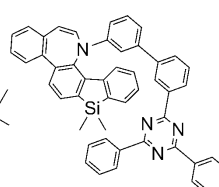
E-9



E-10

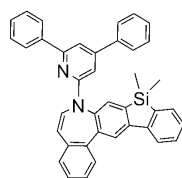


E-11

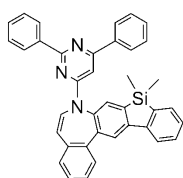


E-12

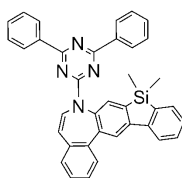
[0093]



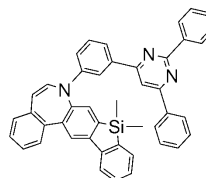
E-13



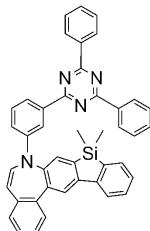
E-14



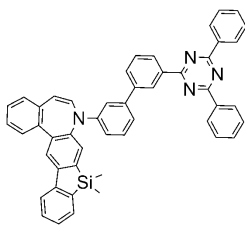
E-15



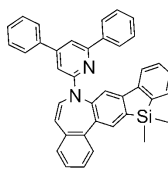
E-16



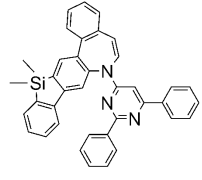
E-17



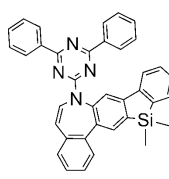
E-18



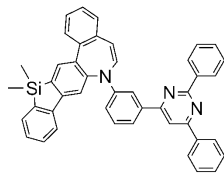
E-19



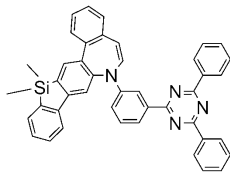
E-20



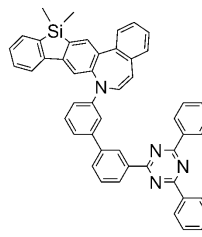
E-21



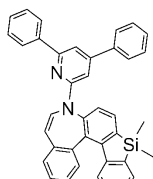
E-22



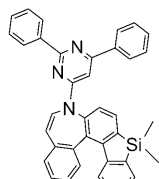
E-23



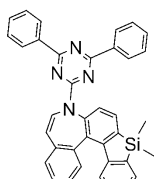
E-24



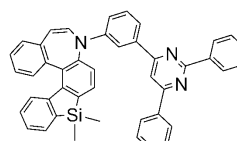
E-25



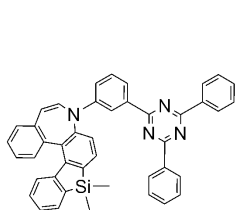
E-26



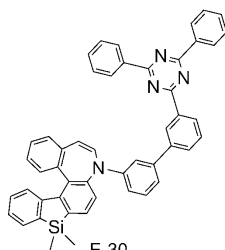
E-27



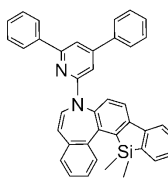
E-28



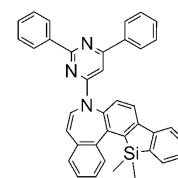
E-29



E-30

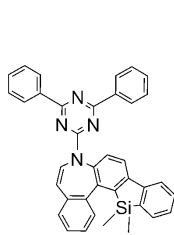


E-31

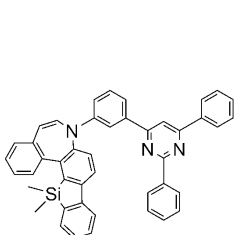


E-32

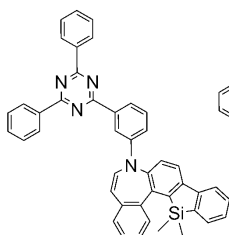
[0094]



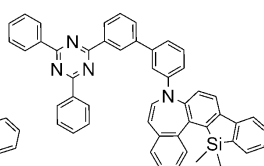
E-33



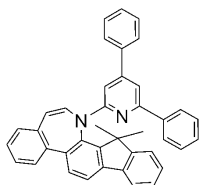
E-34



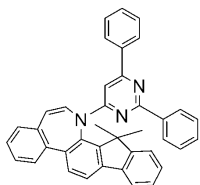
E-35



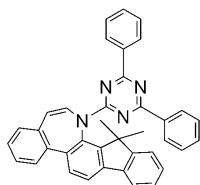
E-36



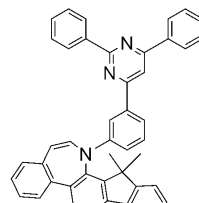
F-1



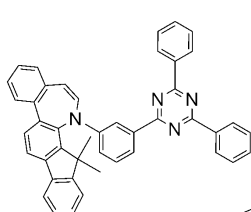
F-2



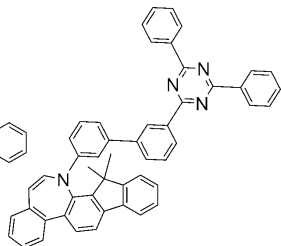
F-3



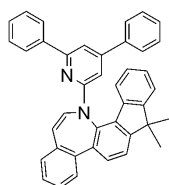
F-4



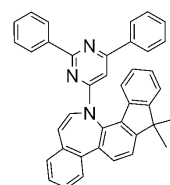
F-5



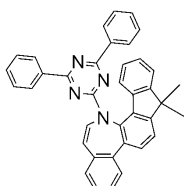
F-6



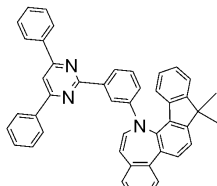
F-7



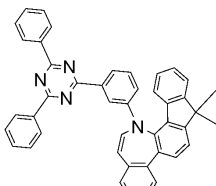
F-8



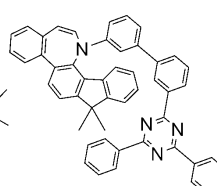
F-9



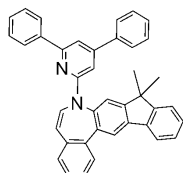
F-10



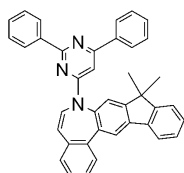
F-11



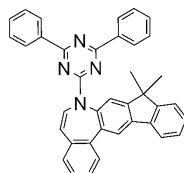
F-12



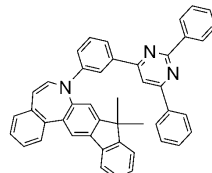
F-13



F-14

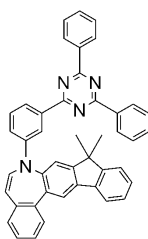


F-15

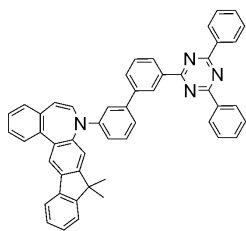


F-16

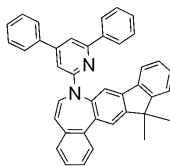
[0095]



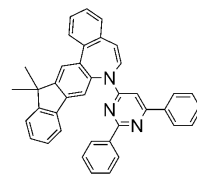
F-17



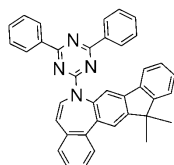
F-18



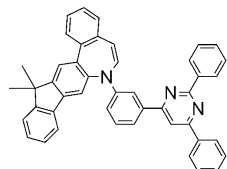
F-19



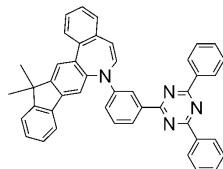
F-20



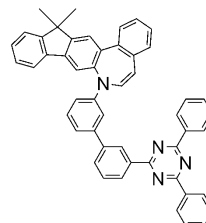
F-21



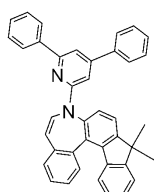
F-22



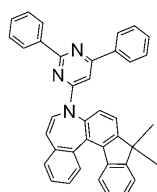
F-23



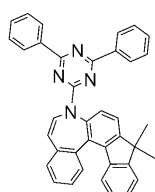
F-24



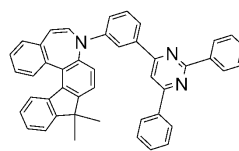
F-25



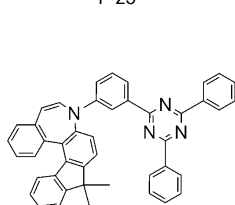
F-26



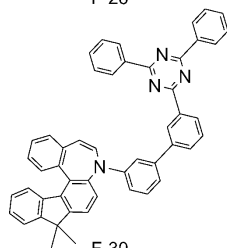
F-27



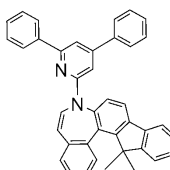
F-28



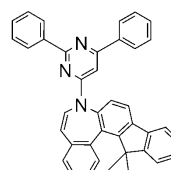
F-29



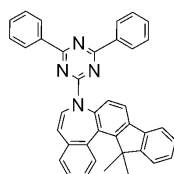
F-30



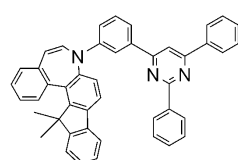
F-31



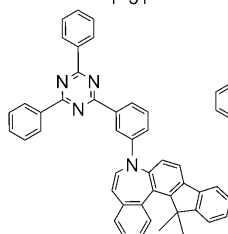
F-32



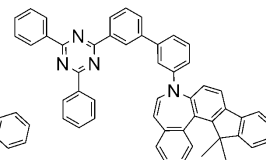
F-33



F-34

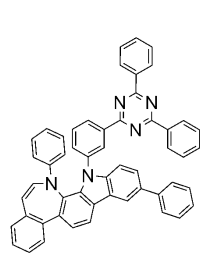


F-35

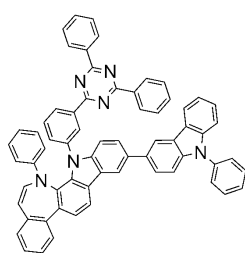


F-36

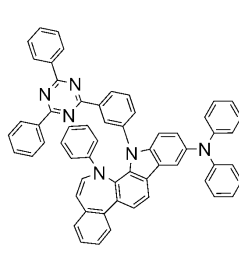
[0096]



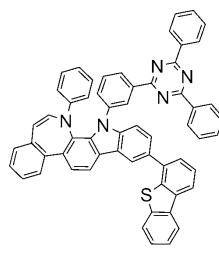
G-1



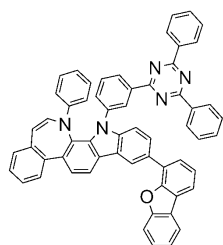
G-2



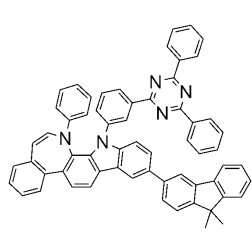
G-3



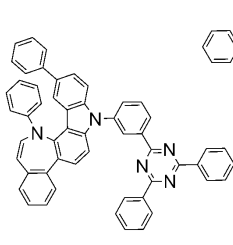
G-4



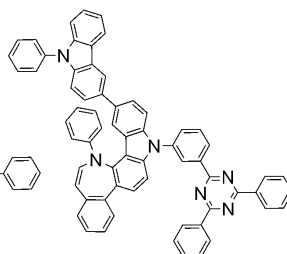
G-5



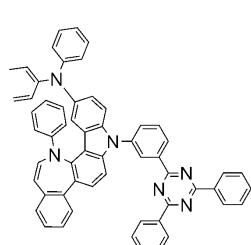
G-6



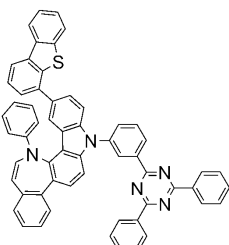
G-7



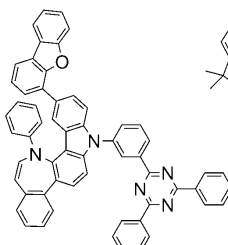
G-8



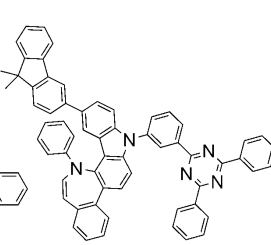
G-9



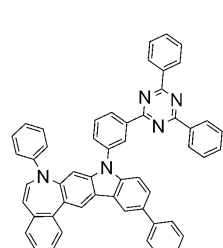
G-10



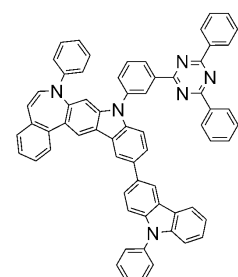
G-11



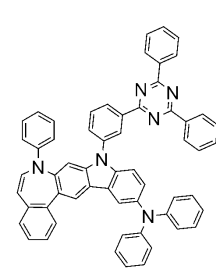
G-12



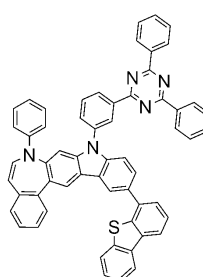
G-13



G-14

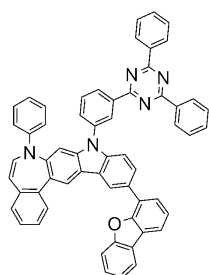


G-15

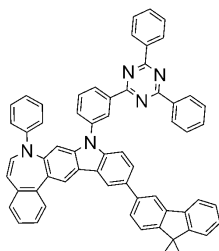


G-16

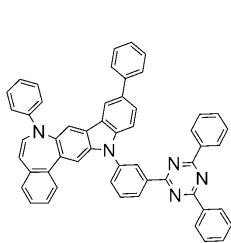
[0097]



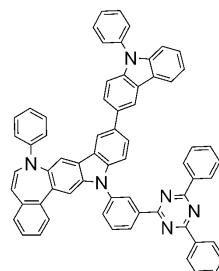
G-17



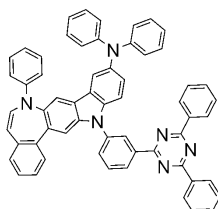
G-18



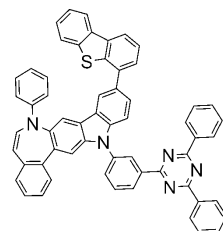
G-19



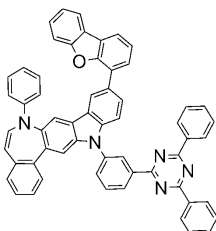
G-20



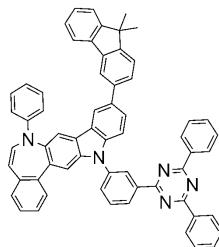
G-21



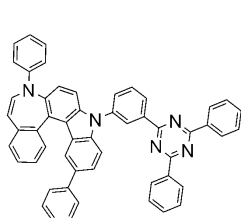
G-22



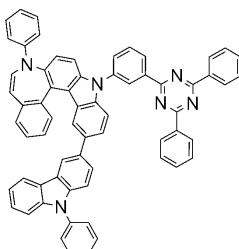
G-23



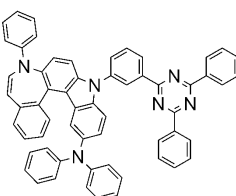
G-24



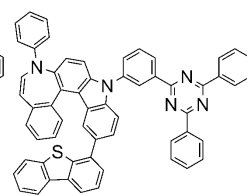
G-25



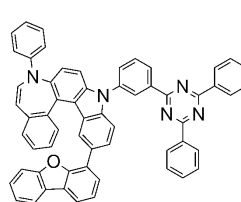
G-26



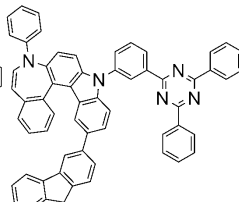
G-27



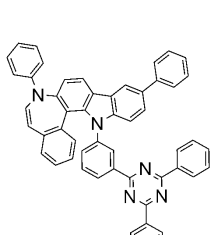
G-28



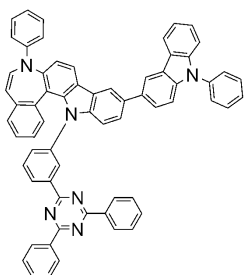
G-29



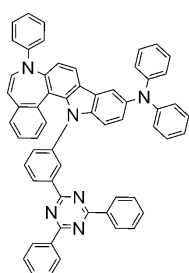
G-30



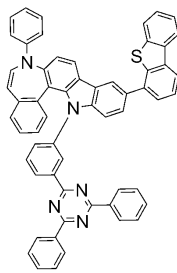
G-31



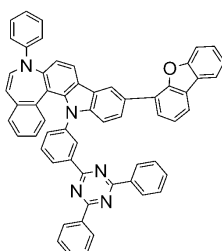
G-32



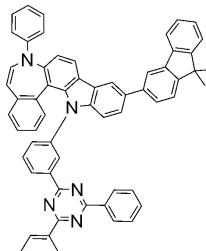
G-33



G-34



G-35



G-36

[0098]

[0099]

[0100]

[0101]

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.

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.

- [0102] 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.
- [0103] 본 발명에서 "아릴"은 단독 고리 또는 2 이상의 고리가 조합된 탄소수 6 내지 40의 방향족 탄화수소로부터 유래된 1가의 치환기를 의미한다. 또한, 2 이상의 고리가 서로 단순 부착(pendant)되거나 축합된 형태도 포함될 수 있다. 이러한 아릴의 예로는 페닐, 나프틸, 페난트릴, 안트릴 등을 들 수 있으나, 이에 한정되지는 않는다.
- [0104] 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(quinolyl), 벤조티아졸(benzothiazole), 카바졸릴(carbazolyl)과 같은 폴리사이클릭 고리 및 2-퓨라닐, N-이미다졸릴, 2-이속사졸릴, 2-피리디닐, 2-피리미디닐 등을 들 수 있으나, 이에 한정되지는 않는다.
- [0105] 본 발명에서 "아릴옥시"는 R⁰-로 표시되는 1가의 치환기로, 상기 R은 탄소수 5 내지 40의 아릴을 의미한다. 이러한 아릴옥시의 예로는 페닐옥시, 나프틸옥시, 디페닐옥시 등을 들 수 있으나, 이에 한정되지는 않는다.
- [0106] 본 발명에서 "알킬옥시"는 R'⁰-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.
- [0107] 본 발명에서 "아릴아민"은 탄소수 6 내지 40의 아릴로 치환된 아민을 의미한다.
- [0108] 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.
- [0109] 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.
- [0110] 본 발명에서 "알킬실릴"은 탄소수 1 내지 40의 알킬로 치환된 실릴이고, "아릴실릴"은 탄소수 5 내지 40의 아릴로 치환된 실릴을 의미한다.
- [0111] 본 발명에서 "축합고리"는 축합 지방족 고리, 축합 방향족 고리, 축합 헤테로지방족 고리, 축합 헤테로방향족 고리 또는 이들의 조합된 형태를 의미한다.
- [0112] 본 발명에 따라 화학식 1로 표시되는 화합물은 일반적인 합성방법에 따라 합성될 수 있다. 본 발명의 화합물에 대한 상세한 합성 과정은 후술하는 합성예에서 구체적으로 기술하도록 한다.
- [0113] <유기 전계 발광 소자>
- [0114] 한편, 본 발명의 다른 측면은 상기한 본 발명에 따른 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하는 유기 전계 발광 소자(유기 EL 소자)에 관한 것이다.
- [0115] 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.
- [0116] 상기 1층 이상의 유기물층은 발광보조층, 발광층, 전자수송층 및 전자주입층 중 어느 하나 이상일 수 있고, 이 중에서 적어도 하나의 유기물층은 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함할 수 있다. 구체적으로 상기 화학식 1의 화합물을 포함하는 유기물층은 발광층, 전자수송층인 것이 바람직하다.
- [0117] 본 발명의 유기 전계 발광 소자의 발광층은 호스트 재료를 포함할 수 있는데, 이때 호스트 재료로서 상기 화학

식 1의 화합물을 포함할 수 있다. 또한 본 발명의 유기 전계 발광 소자의 발광층은 상기 화학식 1의 화합물 이외의 화합물을 호스트로 포함할 수 있다.

[0118] 이러한 본 발명의 유기 전계 발광 소자의 구조는 특별히 한정되지 않으나, 기관, 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.

[0119] 본 발명의 유기 전계 발광 소자의 구조는 전극과 유기물층 계면에 절연층 또는 접착층이 삽입된 구조일 수 있다.

[0120] 본 발명의 유기 전계 발광 소자는 상기 유기물층 중 1층 이상이 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하는 것을 제외하고는, 당업계에 공지된 재료 및 방법으로 유기물층 및 전극을 형성하여 제조할 수 있다.

[0121] 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.

[0122] 본 발명의 유기 전계 발광 소자 제조 시 사용되는 기관은 특별히 한정되지 않으나, 실리콘 웨이퍼, 석영, 유리판, 금속판, 플라스틱 필름 및 시트 등을 사용할 수 있다.

[0123] 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.

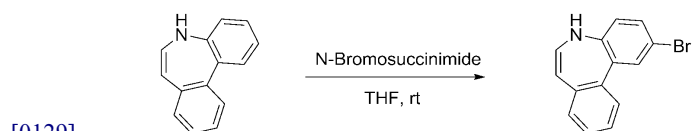
[0124] 또, 음극 물질로는 마그네슘, 칼슘, 나트륨, 칼륨, 타이타늄, 인듐, 이트륨, 리튬, 가돌리늄, 알루미늄, 은, 주석, 또는 납과 같은 금속 또는 이들의 합금; 및 LiF/Al 또는 LiO₂/Al과 같은 다층 구조 물질 등을 들 수 있으나, 이에 한정되지는 않는다.

[0125] 또한, 정공 주입층, 정공 수송층, 전자 주입층 및 전자 수송층은 특별히 한정되는 것은 아니며, 당 업계에 알려진 통상의 물질을 사용할 수 있다.

[0126] 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.

[준비예 1] DBA 1-3 & DBA 1-6의 합성

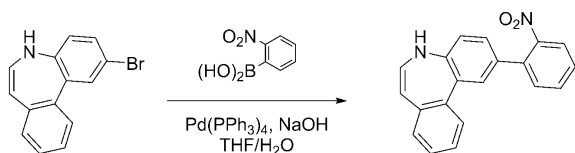
<단계 1> 2-bromo-5H-dibenzo[b,d]azepine의 합성



[0130] 상온에서 15.0 g (77.6 mmol)의 5H-dibenzo[b,d]azepine, 16.6 g (93.1 mmol)의 N-Bromosuccinimide 500 ml의 THF를 넣고 5시간 동안 교반하였다. 반응 종결 후 메틸렌클로라이드로 추출하고 MgSO₄를 넣고 필터하였다. 필터된 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피를 이용하여 목적 화합물인 2-bromo-5H-dibenzo[b,d]azepine (15.6 g, 57.4 mmol, 수율 74 %)을 획득하였다.

[0131] ¹H-NMR : δ 4.0 (s, 1H), 5.91 (d, 1H), 6.55 (m, 2H), 7.21 (s, 1H), 7.31 (d, 1H), 7.39 (m, 3H), 8.29 (d, 1H)

[0132] <단계 2> 2-(2-nitrophenyl)-5H-dibenzo[b,d]azepine의 합성

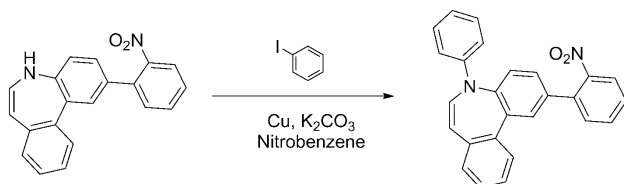


[0133]

[0134] 질소 기류 하에서 17.6 g (57.4 mmol)의 2-bromo-5H-dibenzo[b,d]azepine, 11.5 g (68.9 mmol)의 2-nitrophenylboronic acid, 6.9g (172.2 mmol)의 NaOH과 1000 ml / 500 ml의 THF/H₂O를 넣고 교반하였다. 40℃에서 5.1 g (5 mol%)의 Pd(PPh₃)₄를 넣고 80℃에서 12시간 동안 교반하였다. 반응 종결 후 메틸렌클로라이드로 추출하고 MgSO₄를 넣고 필터하였다. 필터된 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피를 이용하여 목적 화합물인 2-(2-nitrophenyl)-5H-dibenzo[b,d]azepine (14.3 g, 45.3 mmol, 수율 79 %)을 획득하였다.

[0135] ¹H-NMR : δ 4.0 (s, 1H), 5.91 (d, 1H), 6.51 (d, 1H), 6.75 (d, 1H), 7.44 (m, 5H), 7.67 (t, 1H), 7.90 (t, 1H), 8.02 (m, 2H), 8.29 (d, 1H), 10.12 (s, 1H)

[0136] <단계 3> 2-(2-nitrophenyl)-5-phenyl-5H-dibenzo[b,d]azepine의 합성



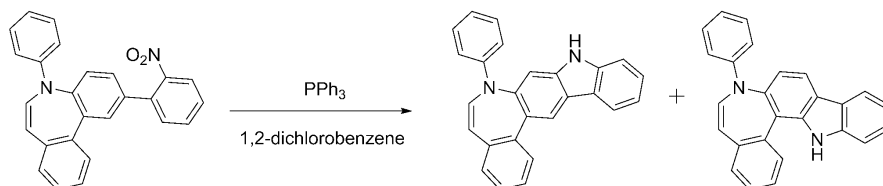
[0137]

[0138] 질소 기류 하에서 2-(2-nitrophenyl)-5H-dibenzo[b,d]azepine (14.3 g, 57.4 mmol), iodobenzene (7.71 ml, 68.9 mmol), Cu powder(1.86 g, 29.3 mmol), K₂CO₃(16.2 g, 117.0 mmol) 및 nitrobenzene(200 ml)를 혼합하고 190℃에서 12시간 동안 교반하였다.

[0139] 반응이 종결된 후 nitrobenzene을 제거하고 메틸렌클로라이드로 유기층을 분리한 다음 MgSO₄를 사용하여 물을 제거하였다. 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 2-(2-nitrophenyl)-5-phenyl-5H-dibenzo[b,d]azepine (14.6 g, 37.3 mmol, 수율 65%)을 얻었다.

[0140] ¹H-NMR : δ 5.91 (d, 1H), 6.29 (m, 2H), 6.51 (d, 1H), 6.77 (m, 2H), 7.20 (m, 2H), 7.44 (m, 5H), 7.67 (t, 2H), 7.90 (t, 1H), 8.03 (m, 2H), 8.29 (d, 1H)

[0141] <단계 4> DBA 1-3 & DBA 1-5 의 합성



[0142]

[0143] 질소 기류 하에서 2-(2-nitrophenyl)-5-phenyl-5H-dibenzo[b,d]azepine 14.6 g (37.3 mmol)과 triphenylphosphine 24.4 g (93.25 mmol), 1,2-dichlorobenzene 150 ml를 넣은 후 12시간 교반하였다. 반응 종료 후 1,2-dichlorobenzene를 제거하고 디클로로메탄으로 추출하였다. 추출된 유기층은 MgSO₄로 물을 제거하고 여과하였다. 컬럼크로마토그래피를 이용하여 목적 화합물인 DBA 1-3 (4.7 g, 13.1 mmol, 수율 35 %), 화합물 DBA 1-6 (4.7 g, 13.1 mmol, 수율 35 %)을 획득하였다.

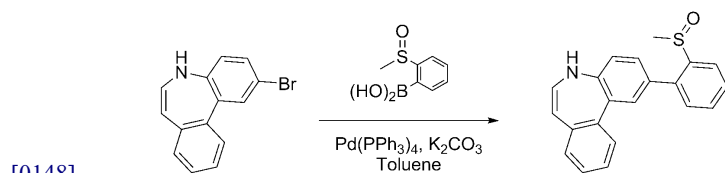
[0144] DBA 1-3의 ¹H-NMR : δ 5.91(d, 1H), 6.29 (m, 2H), 6.51 (d, 1H), 6.73 (s, 1H), 6.81 (m, 1H), 7.20 (m,

2H), 7.29 (t, 1H), 7.37 (m, 2H), 7.44 (d, 1H), 7.51 (m, 2H)

[0145] DBA 1-6의 $^1\text{H-NMR}$: δ 5.91 (d, 1H), 6.29 (m, 2H), 6.51 (d, 1H), 6.75 (d, 1H), 6.81 (m, 1H), 7.20 (m, 2H), 7.40 (m, 4H), 7.64 (d, 1H), 7.99 (d, 1H), 8.12 (d, 1H), 8.29 (d, 1H), 10.1 (s, 1H)

[0146] [준비예 2] DBA 2-3 & DBA 2-6의 합성

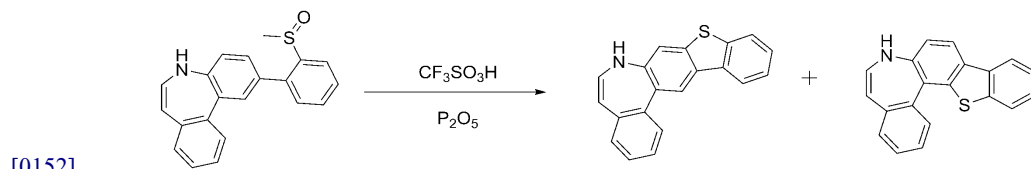
[0147] <단계 1> 2-(2-(methylsulfinyl)phenyl)-5H-dibenzo[b,d]azepine의 합성



[0149] 질소 기류 하에서 15.0 g (55.1 mmol)의 2-bromo-5H-dibenzo[b,d]azepine, 12.2 g (66.1 mmol)의 1-bromo-2-(methylsulfinyl)benzene을 톨루엔 200ml에 녹인 후 2M K_2CO_3 (40 ml)를 넣고 가스를 제거한 다음, 3.59 g (5 mol%)의 $\text{Pd}(\text{PPh}_3)_4$ 를 넣고 90°C 에서 12시간 동안 교반하였다. 반응 종결 후 메틸렌클로라이드로 추출하고 MgSO_4 를 넣고 필터하였다. 필터된 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피를 이용하여 목적 화합물인 2-(2-(methylsulfinyl)phenyl)-5H-dibenzo[b,d]azepine (12.4 g, 37.5 mmol, 수율 68 %)을 획득하였다.

[0150] $^1\text{H-NMR}$: δ 2.64 (s, 3H), 4.0 (s, 1H), 5.91 (d, 1H), 6.51 (d, 1H), 6.75 (d, 1H), 7.45 (m, 7H), 7.64 (d, 1H), 8.01 (d, 1H), 8.29 (d, 1H)

[0151] <단계 2> DBA 2-3 & DBA 2-6의 합성



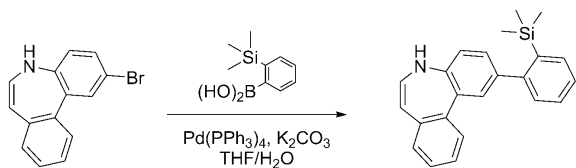
[0153] 질소 기류 하에서 2-(2-(methylsulfinyl)phenyl)-5H-dibenzo[b,d]azepine (12.4 g, 37.5 mmol)과 phosphorus pentoxide 1.93 g (4.9 mmol), $\text{CF}_3\text{SO}_3\text{H}$ 300 ml를 플라스크에 넣은 후 상온에서 72시간 교반하였다. Ice-water 500 ml를 플라스크에 넣고 침전물을 필터 후 건조하였다. Pyridine 500 ml에 건조된 물질을 넣고 12시간 reflux한 다음, 온도를 내리고 디클로로메탄으로 추출하였다. 추출된 유기층은 MgSO_4 로 물을 제거하고 여과하였다. 컬럼크로마토그래피를 이용하여 목적 화합물인 DBA 2-3 (3.9 g, 13.13 mmol, 수율 35 %), 화합물 DBA 2-6 (2.8 g, 9.4 mmol, 수율 25 %)을 획득하였다.

[0154] DBA 2-3의 $^1\text{H-NMR}$: δ 4.0 (s, 1H), 5.91(d, 1H), 6.51 (d, 1H), 6.81 (t, 1H), 7.12 (s, 1H), 7.44 (m, 5H), 7.75 (s, 1H), 7.98 (d, 1H), 8.29 (d, 1H), 8.45 (d, 1H)

[0155] DBA 2-6의 $^1\text{H-NMR}$: δ 4.0 (s, 1H), 5.91(d, 1H), 6.51 (d, 1H), 6.94 (d, 1H), 7.44 (m, 5H), 7.76 (d, 1H), 7.98 (d, 1H), 8.29 (d, 1H), 8.45 (d, 1H)

[0156] [준비예 3] DBA 3-3 & DBA 3-6의 합성

[0157] <단계 1> 2-(2-(trimethylsilyl)phenyl)-5H-dibenzo[b,d]azepine의 합성

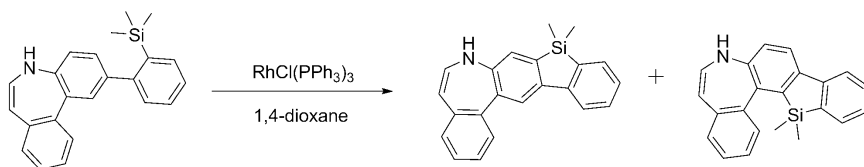


[0158]

[0159] 질소 기류 하에서 15.0 g (55.1 mmol)의 2-(2-(trimethylsilyl)phenyl)-5H-dibenzo[b,d]azepine, 12.8 g (66.1 mmol)의 (2-(trimethylsilyl)phenyl)boronic acid을 THF/중류수 (300 ml/100 ml)에 녹인 후 2M K₂CO₃ (40 ml)를 넣고 가스를 제거한 다음, 3.59 g (5 mol%)의 Pd(PPh₃)₄를 넣고 90℃에서 12시간 동안 교반하였다. 반응 종결 후 메틸렌클로라이드로 추출하고 MgSO₄를 넣고 필터하였다. 필터된 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피를 이용하여 목적 화합물인 2-(2-(trimethylsilyl)phenyl)-5H-dibenzo[b,d]azepine (12.8 g, 37.5 mmol, 수율 68 %)을 획득하였다.

[0160] ¹H-NMR : δ 0.25 (s, 9H), 4.0 (s, 1H), 5.91 (d, 1H), 6.51 (d, 1H), 6.75 (d, 1H), 7.21 (m, 1H), 7.45 (m, 7H), 7.77 (d, 1H), 8.01 (d, 1H), 8.29 (d, 1H)

[0161] <단계 2> DBA 3-3 & DBA 3-6 의 합성



[0162]

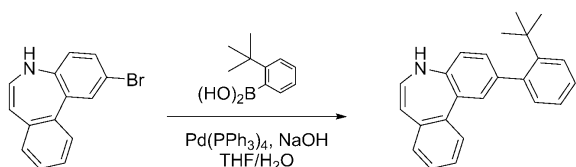
[0163] 질소 기류 하에서 2-(2-(trimethylsilyl)phenyl)-5H-dibenzo[b,d]azepine (12.8 g, 37.5 mmol)과 RhCl(PPh₃)₃ 31.3 g (0.034 mmol)를 300 ml 1,4-dioxane에 녹인 후 135℃에서 1시간 교반하였다. 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피를 이용하여 목적 화합물인 DBA 3-3 (4.6 g, 14.3 mmol, 수율 38 %), 화합물 DBA 3-6 (2.9 g, 9.0 mmol, 수율 24 %)을 획득하였다.

[0164] DBA 3-3의 ¹H-NMR : δ 0.66 (s, 6H), 4.0 (s, 1H), 5.91 (d, 1H), 6.51 (d, 1H), 6.81 (s, 1H), 7.39 (m, 4H), 7.55 (m, 3H), 7.89 (d, 1H), 8.29 (d, 1H)

[0165] DBA 3-6의 ¹H-NMR : δ 0.66 (s, 6H), 4.0 (s, 1H), 5.91 (d, 1H), 6.51 (d, 1H), 6.85 (d, 1H), 7.39 (m, 4H), 7.60 (m, 2H), 7.89 (d, 1H), 8.29 (d, 1H)

[0166] [준비에 4] DBA 4-3 & DBA 4-6 의 합성

[0167] <단계 1> 2-(2-(tert-butyl)phenyl)-5H-dibenzo[b,d]azepine의 합성



[0168]

[0169] 질소 기류 하에서 15.0 g (55.1 mmol)의 2-(2-(trimethylsilyl)phenyl)-5H-dibenzo[b,d]azepine, 11.7 g (66.1 mmol)의 (2-(tert-butyl)phenyl)boronic acid을 THF/중류수 (300 ml/100 ml)에 녹인 후 NaOH 6.6 g (165.3 mmol), 3.59 g (5 mol%)의 Pd(PPh₃)₄를 넣고 90℃에서 12시간 동안 교반하였다. 반응 종결 후 메틸렌클로라이드로 추출하고 MgSO₄를 넣고 필터하였다. 필터된 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피를 이용하여 목적 화합물인 2-(2-(tert-butyl)phenyl)-5H-dibenzo[b,d]azepine (13.4 g, 41.3 mmol, 수율 75 %)을 획득

하였다.

[0170] $^1\text{H-NMR}$: δ 1.35 (s, 9H), 4.0 (s, 1H), 5.91 (d, 1H), 6.51 (d, 1H), 6.75 (d, 1H), 7.40 (m, 8H), 7.71 (d, 1H), 8.29 (d, 1H)

[0171] <단계 2> DBA 4-3 & DBA 4-6 의 합성

[0172]

[0173] 질소 기류 하에서 2-(2-(tert-butyl)phenyl)-5H-dibenzo[b,d]azepine (13.4 g, 41.3 mmol)과 $\text{RhCl}(\text{PPh}_3)_3$ 31.3 g (0.034 mmol)를 300 ml 1,4-dioxane에 녹인 후 135°C에서 1시간 교반하였다. 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피를 이용하여 목적 화합물인 DBA 4-3 (4.5 g, 14.5 mmol, 수율 35 %), 화합물 DBA 4-6 (3.6 g, 11.6 mmol, 수율 28 %)을 획득하였다.

[0174] DBA 4-3의 $^1\text{H-NMR}$: δ 1.72 (s, 6H), 4.0 (s, 1H), 5.91 (d, 1H), 6.51 (d, 1H), 6.81 (s, 1H), 7.39 (m, 5H), 7.81 (s, 1H), 7.87 (d, 1H), 8.29 (d, 1H)

[0175] DBA 4-6의 $^1\text{H-NMR}$: δ 1.72 (s, 6H), 4.0 (s, 1H), 5.91 (d, 1H), 6.51 (d, 1H), 6.64 (d, 1H), 7.36 (m, 5H), 7.56 (m, 2H), 7.87 (d, 1H), 8.29 (d, 1H)

[0176] [준비에 5] DBA 5-3 & DBA 5-6 의 합성

[0177] <단계 1> 2-bromodibenzo[b,d]oxepine의 합성

[0178]

[0179] 상온에서 15.0 g (77.2 mmol)의 dibenzo[b,d]oxepine, 16.5 g (92.64 mmol)의 N-Bromosuccinimide 500 ml의 THF를 넣고 5시간 동안 교반하였다. 반응 종결 후 메틸렌클로라이드로 추출하고 MgSO_4 를 넣고 필터하였다. 필터된 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피를 이용하여 목적 화합물인 2-bromodibenzo[b,d]oxepine (16.4 g, 60.2 mmol, 수율 78 %)을 획득하였다.

[0180] $^1\text{H-NMR}$: δ 6.05 (d, 1H), 6.73 (d, 1H), 6.90 (d, 1H), 7.29 (s, 1H), 7.39 (m, 4H), 8.29 (d, 1H)

[0181] <단계 2> 2-(2-nitrophenyl)dibenzo[b,d]oxepine의 합성

[0182]

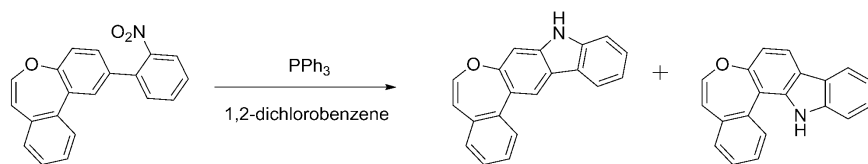
[0183] 질소 기류 하에서 16.4 g (60.2 mmol)의 2-bromodibenzo[b,d]oxepine, 12.1 g (72.2 mmol)의 2-nitrophenylboronic acid, 7.2 g (180.6 mmol)의 NaOH과 1000 ml / 500 ml의 THF/ H_2O 를 넣고 교반하였다. 40°C에서 5.1 g (5 mol%)의 $\text{Pd}(\text{PPh}_3)_4$ 를 넣고 80°C에서 12시간 동안 교반하였다. 반응 종결 후 메틸렌클로라이드로 추출하고 MgSO_4 를 넣고 필터하였다. 필터된 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피를 이용하여 목적 화

합물인 2-(2-nitrophenyl)dibenzo[b,d]oxepine (14.2 g, 45.2 mmol, 수율 75 %)을 획득하였다.

[0184] $^1\text{H-NMR}$: δ 6.05 (d, 1H), 6.73 (d, 1H), 7.07 (d, 1H), 7.38 (m, 2H), 7.44 (d, 1H), 7.55 (m, 2H), 7.67 (t, 2H), 7.90 (t, 1H), 8.02 (m, 2H) 8.29 (d, 1H)

[0185] <단계 3> DBA 5-3 & DBA 5-6 의 합성

[0186]



[0187] 질소 기류 하에서 2-(2-nitrophenyl)dibenzo[b,d]oxepine (14.2 g, 45.2 mmol)과 triphenylphosphine 29.6 g (113 mmol), 1,2-dichlorobenzene 150 ml를 넣은 후 12시간 교반하였다. 반응 종료 후 1,2-dichlorobenzene를 제거하고 디클로로메탄으로 추출하였다. 추출된 유기층은 MgSO_4 로 물을 제거하고 여과하였다. 컬럼크로마토그래피를 이용하여 목적 화합물인 DBA 5-3 (4.5 g, 15.8 mmol, 수율 35 %), 화합물 DBA 5-6 (4.5 g, 15.8 mmol, 수율 35 %)을 획득하였다.

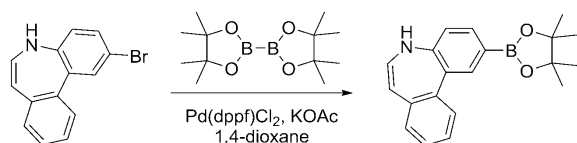
[0188] DBA 5-3의 $^1\text{H-NMR}$: δ 6.05 (d, 1H), 6.73 (d, 1H), 6.93 (s, 1H), 7.39 (m, 5H), 7.62 (m, 2H), 8.12 (d, 1H), 8.29 (d, 1H), 10.1 (s, 1H)

[0189] DBA 5-6의 $^1\text{H-NMR}$: δ 6.05 (d, 1H), 6.73 (d, 1H), 7.14 (d, 1H), 7.39 (m, 5H), 7.91 (d, 1H), 8.12 (d, 1H), 8.29 (d, 1H), 10.1 (s, 1H)

[0190] [준비예 6] DBA 6-3 & DBA 6-6 의 합성

[0191] <단계 1> 2-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-5H-dibenzo[b,d]azepine 의 합성

[0192]

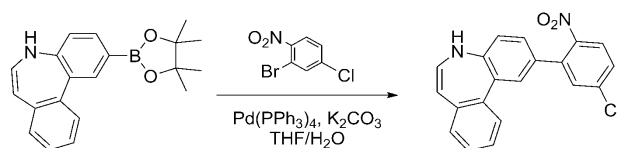


[0193] 질소 기류 하에서 15.0 g (77.6 mmol)의 5H-dibenzo[b,d]azepine, 4,4,4',4',5,5,5',5'-octamethyl-2,2'-bi(1,3,2-dioxaborolane) (21.7 g, 85.36 mmol), Pd(dppf)Cl_2 (5.0 g, 5.9 mmol), KOAc (22.1 g, 232.8 mmol) 및 500 ml의 1,4-dioxane를 넣고 130°C 에서 12시간 동안 교반하였다. 반응 종결 후 메틸렌클로라이드로 추출하고 MgSO_4 를 넣고 필터하였다. 필터된 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피를 이용하여 목적 화합물인 2-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-5H-dibenzo[b,d]azepine (15.4 g, 48.1 mmol, 수율 62 %)을 획득하였다.

[0194] $^1\text{H-NMR}$: δ 1.24 (s, 12H), 4.0 (s, 1H), 5.91 (d, 1H), 6.51 (d, 1H), 6.69 (d, 1H), 7.39 (m, 5H), 8.29 (d, 1H)

[0195] <단계 2> 2-(5-chloro-2-nitrophenyl)-5H-dibenzo[b,d]azepine 의 합성

[0196]

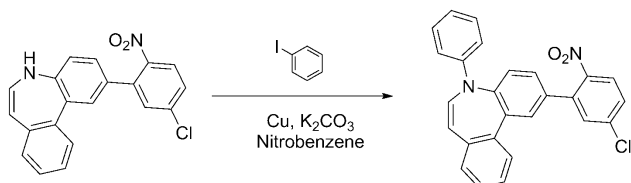


[0197] 질소 기류 하에서 2-(4,4,5,5-tetramethyl-1,3,2-dioxaborolan-2-yl)-5H-dibenzo[b,d]azepine (15.4 g, 48.1

mmol), 33.3 g (240.5 mmol)의 K_2CO_3 , 5.1 g (5 mol%)의 $Pd(PPh_3)_4$ 450 ml / 100 ml의 THF/ H_2O 를 넣고 교반하였다. 80℃에서 12시간 동안 교반하였다. 반응 종결 후 메틸렌클로라이드로 추출하고 $MgSO_4$ 를 넣고 필터하였다. 필터된 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피를 이용하여 목적 화합물인 2-(5-chloro-2-nitrophenyl)-5H-dibenzo[b,d]azepine (10.2 g, 29.3 mmol, 수율 61 %)을 획득하였다.

[0198] 1H -NMR : δ 4.0 (s, 1H), 5.91 (d, 1H), 6.51 (d, 1H), 6.75 (d, 1H), 7.44 (m, 5H), 7.71 (d, 1H), 8.27 (m, 1H)

[0199] <단계 3> 2-(2-nitrophenyl)-5-phenyl-5H-dibenzo[b,d]azepine의 합성



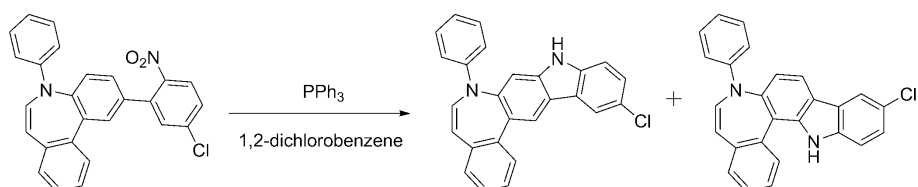
[0200]

[0201] 질소 기류 하에서 2-(5-chloro-2-nitrophenyl)-5H-dibenzo[b,d]azepine (10.2 g, 29.3 mmol), iodobenzene (7.71 ml, 68.9 mmol), Cu powder (1.86 g, 29.3 mmol), K_2CO_3 (16.2 g, 117.0 mmol) 및 nitrobenzene (200 ml)를 혼합하고 190℃에서 12시간 동안 교반하였다.

[0202] 반응이 종결된 후 nitrobenzene을 제거하고 메틸렌클로라이드로 유기층을 분리한 다음 $MgSO_4$ 를 사용하여 물을 제거하였다. 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 2-(5-chloro-2-nitrophenyl)-5-phenyl-5H-dibenzo[b,d]azepine (7.4 g, 17.3 mmol, 수율 59%)을 얻었다.

[0203] 1H -NMR : δ 5.91 (d, 1H), 6.29 (m, 2H), 6.51 (d, 1H), 6.77 (m, 2H), 7.20 (m, 2H), 7.44 (m, 5H), 7.71 (d, 1H), 8.27 (m, 3H)

[0204] <단계 4> DBA 6-3 & DBA 6-6 의 합성



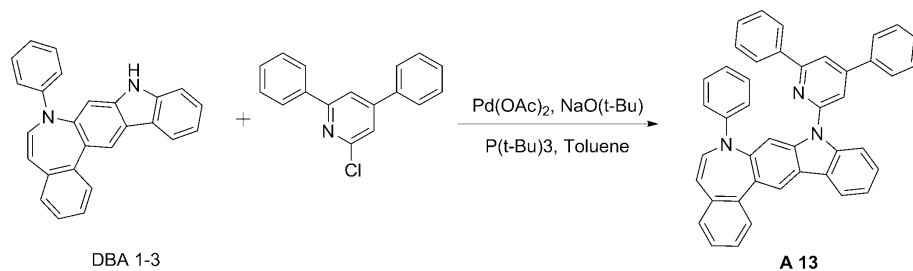
[0205]

[0206] 질소 기류 하에서 2-(5-chloro-2-nitrophenyl)-5-phenyl-5H-dibenzo[b,d]azepine (7.4 g, 17.3 mmol)과 triphenylphosphine 24.4 g (93.25 mmol), 1,2-dichlorobenzene 150 ml를 넣은 후 12시간 교반하였다. 반응 종료 후 1,2-dichlorobenzene를 제거하고 디클로로메탄으로 추출하였다. 추출된 유기층은 $MgSO_4$ 로 물을 제거하고 여과하였다. 컬럼크로마토그래피를 이용하여 목적 화합물인 DBA 6-3 (2.2 g, 5.7 mmol, 수율 33 %), 화합물 DBA 6-6 (2.1 g, 5.4 mmol, 수율 31 %)을 획득하였다.

[0207] DBA 6-3의 1H -NMR : δ 5.91(d, 1H), 6.29 (m, 2H), 6.51 (d, 1H), 6.73 (s, 1H), 6.81 (m, 1H), 7.09 (d, 1H), 7.20 (m, 2H), 7.44 (m, 6H), 8.29 (d, 1H), 10.1 (s, 1H)

[0208] DBA 6-3의 1H -NMR : δ 5.91 (d, 1H), 6.29 (m, 2H), 6.77 (m, 2H), 7.09 (d, 1H), 7.20 (m, 2H), 7.40 (m, 3H), 7.56 (m, 2H), 7.99 (d, 1H), 8.29 (d, 1H), 10.1 (s, 1H)

[0209] **[합성예 1] A-13의 합성**

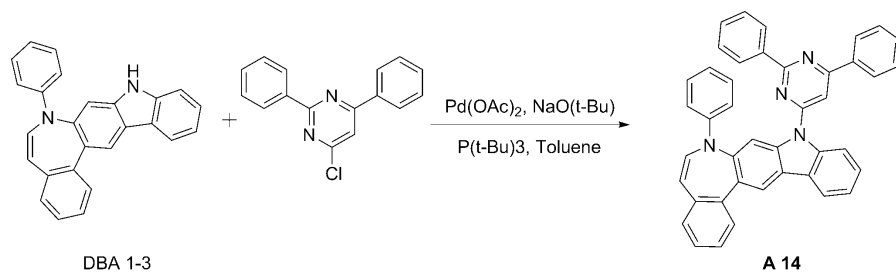


[0210]

[0211] 질소 기류 하에서 DBA 1-3 (3.5 g, 9.76 mmol), 2-chloro-4,6-diphenylpyridine (3.1 g, 11.7 mmol), NaO(t-Bu) (1.9 g, 19.5 mmol), P(t-Bu)₃ (50wt%) (395 mg, 0.976 mmol) 및 Toluene (50 ml)를 혼합하고 110 ℃에서 12시간 동안 교반하였다. 반응이 종결된 후 물을 넣고 고체 화합물을 필터링한 후, 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 A-13 (5.47 g, 수율 93%)를 얻었다.

[0212] GC-Mass (이론치: 587.24 g/mol, 측정치: 587 g/mol)

[0213] **[합성예 2] A-14의 합성**

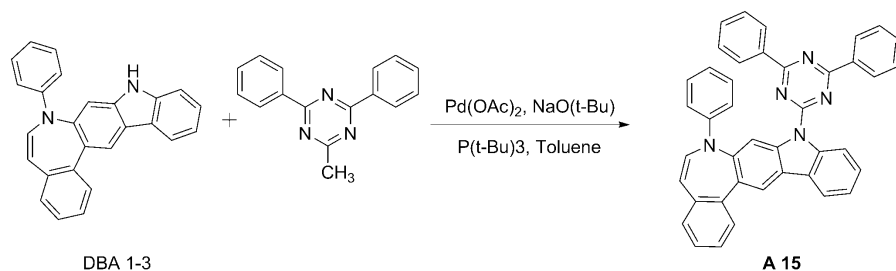


[0214]

[0215] 2-chloro-4,6-diphenylpyridine 대신 2-chloro-4,6-diphenylpyrimidine (3.1 g, 11.7 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 상기 합성예 1과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 A-14 (4.1 g, 수율 71%)을 얻었다.

[0216] GC-Mass (이론치: 586.71 g/mol, 측정치: 586 g/mol)

[0217] **[합성예 3] A-15의 합성**

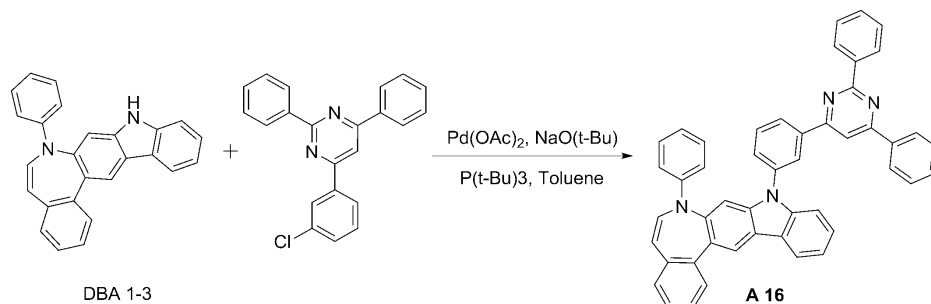


[0218]

[0219] 2-chloro-4,6-diphenylpyridine 대신 2-chloro-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine (3.1 g, 11.7 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 상기 합성예 1과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 A-15 (4.5 g, 수율 78%)을 얻었다.

[0220] GC-Mass (이론치: 589.69 g/mol, 측정치: 589 g/mol)

[0221] [합성예 4] A-16의 합성

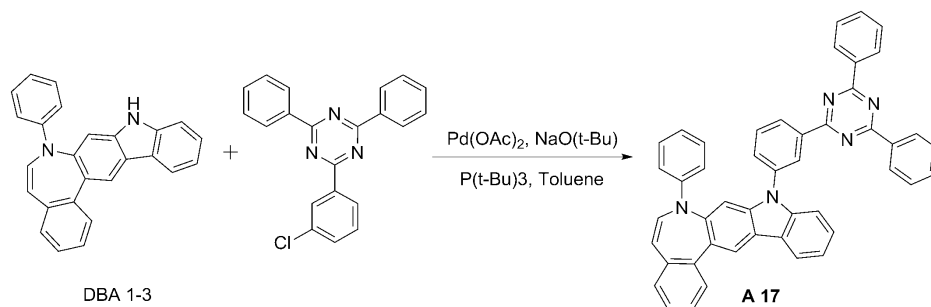


[0222]

[0223] 2-chloro-4,6-diphenylpyridine 대신 4-(3-chlorophenyl)-2,6-diphenylpyrimidine (4.0 g, 11.7 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 상기 합성예 1과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 A-16 (4.1 g, 수율 63%)를 얻었다.

[0224] GC-Mass (이론치: 664.79 g/mol, 측정치: 664 g/mol)

[0225] [합성예 5] A-17의 합성

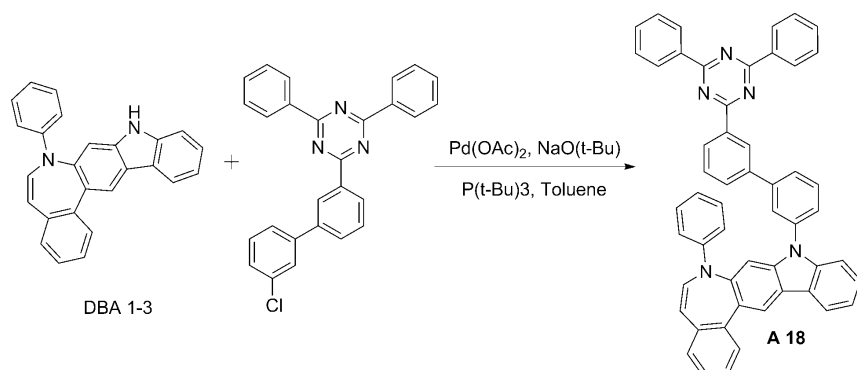


[0226]

[0227] 2-chloro-4,6-diphenylpyridine 대신 2-(3-chlorophenyl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine (4.0 g, 11.7 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 상기 합성예 1과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 A-17 (3.9 g, 수율 60%)를 얻었다.

[0228] GC-Mass (이론치: 665.26 g/mol, 측정치: 665 g/mol)

[0229] [합성예 6] A-18의 합성

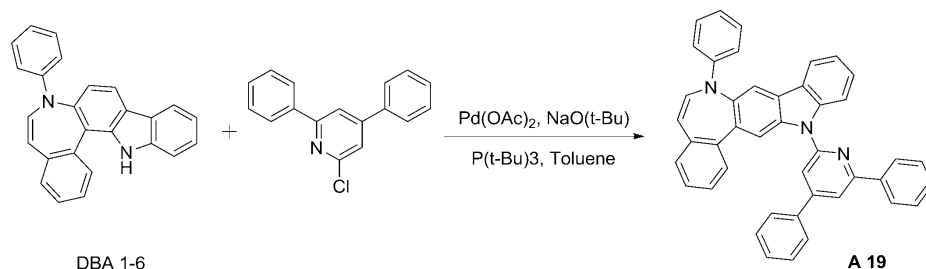


[0230]

[0231] 2-(3-bromophenyl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine 대신 2-(3'-chloro-[1,1'-biphenyl]-3-yl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine (4.9 g, 11.7 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 상기 합성예 1과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 A-18 (4.9 g, 수율 68%)를 얻었다.

[0232] GC-Mass (이론치: 741.29 g/mol, 측정치: 741 g/mol)

[0233] **[합성예 7] A-19의 합성**

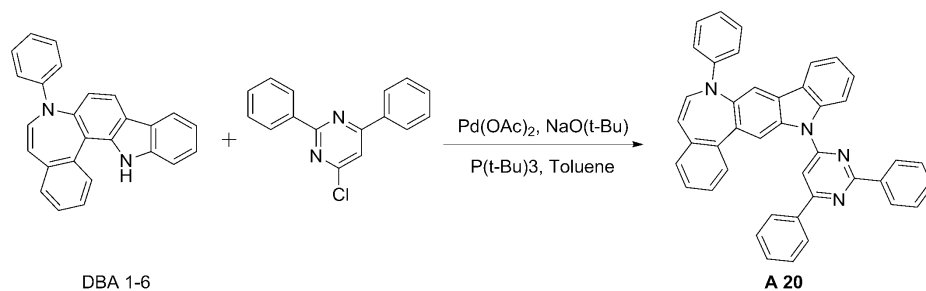


[0234]

[0235] 질소 기류 하에서 DBA 1-6 (3.5 g, 9.76 mmol), 2-chloro-4,6-diphenylpyridine (3.1 g, 11.7 mmol), NaO(t-Bu) (1.9 g, 19.5 mmol), P(t-Bu)3 (50wt%) (395 mg, 0.976 mmol) 및 Toluene (50 ml)를 혼합하고 110 °C에서 12시간 동안 교반하였다. 반응이 종결된 후 물을 넣고 고체 화합물을 필터링한 후, 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 A-19 (5.47 g, 수율 93%)를 얻었다.

[0236] GC-Mass (이론치: 587.24 g/mol, 측정치: 587 g/mol)

[0237] **[합성예 8] A-20의 합성**

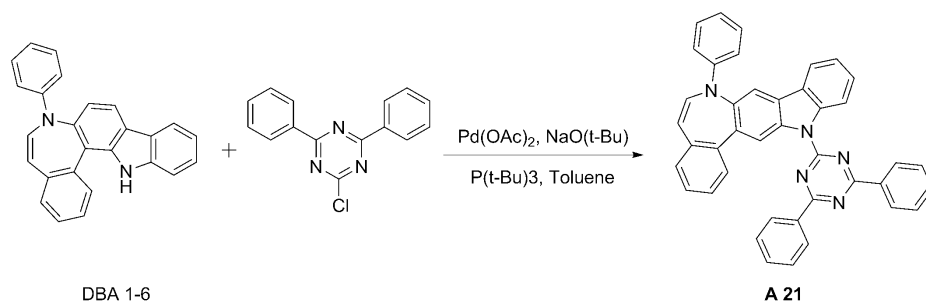


[0238]

[0239] 2-chloro-4,6-diphenylpyridine 대신 2-chloro-4,6-diphenylpyrimidine (3.1 g, 11.7 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 상기 합성예 7과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 A-20 (4.1 g, 수율 71%)을 얻었다.

[0240] GC-Mass (이론치: 586.71 g/mol, 측정치: 586 g/mol)

[0241] **[합성예 9] A-21의 합성**

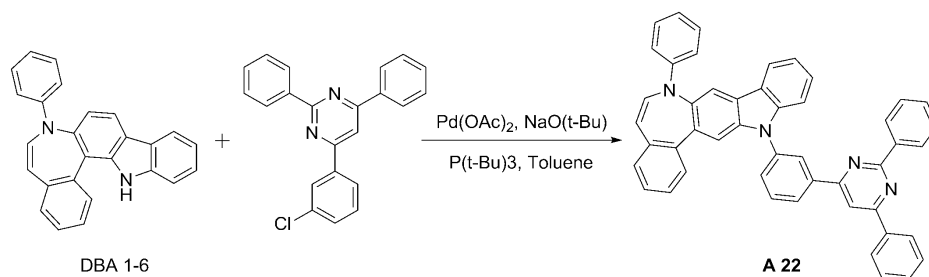


[0242]

[0243] 2-chloro-4,6-diphenylpyridine 대신 2-chloro-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine (3.1 g, 11.7 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 상기 합성예 7과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 A-21 (4.5 g, 수율 78%)을 얻었다.

[0244] GC-Mass (이론치: 589.69 g/mol, 측정치: 589 g/mol)

[0245] **[합성예 10] A-22의 합성**

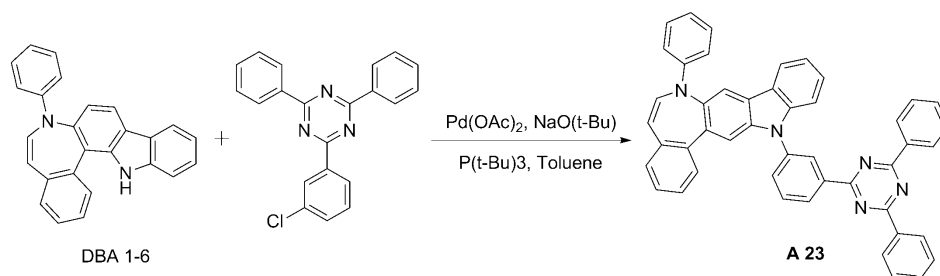


[0246]

[0247] 2-chloro-4,6-diphenylpyridine 대신 4-(3-chlorophenyl)-2,6-diphenylpyrimidine (4.0 g, 11.7 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 상기 합성예 7과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 A-22 (4.1 g, 수율 63%)를 얻었다.

[0248] GC-Mass (이론치: 664.79 g/mol, 측정치: 664 g/mol)

[0249] **[합성예 11] A-23의 합성**

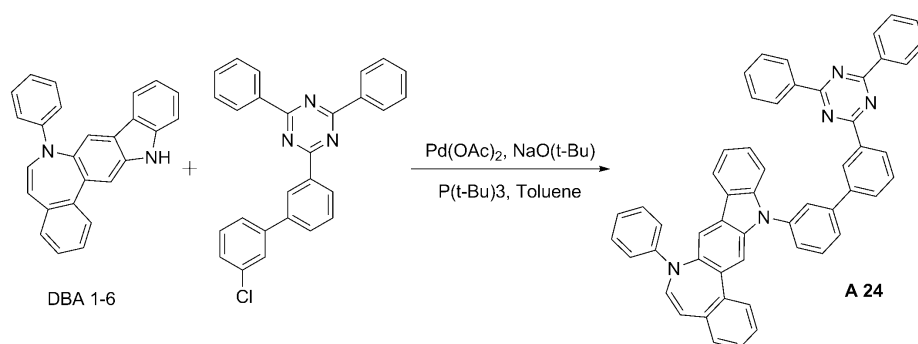


[0250]

[0251] 2-chloro-4,6-diphenylpyridine 대신 2-(3-chlorophenyl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine (4.0 g, 11.7 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 상기 합성예 7과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 A-23 (3.9 g, 수율 60%)를 얻었다.

[0252] GC-Mass (이론치: 665.26 g/mol, 측정치: 665 g/mol)

[0253] **[합성예 12] A-24의 합성**

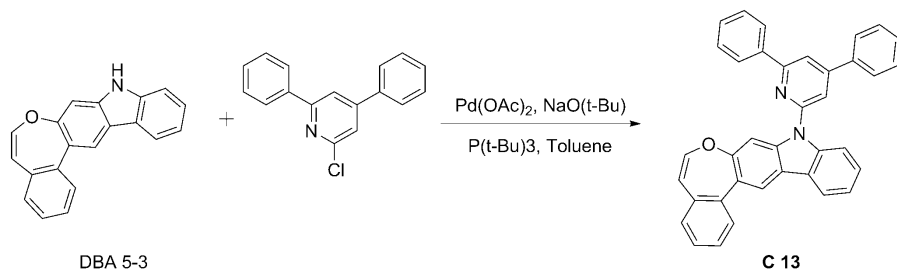


[0254]

[0255] 2-(3-bromophenyl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine 대신 2-(3'-chloro-[1,1'-biphenyl]-3-yl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine (4.9 g, 11.7 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 상기 합성예 7과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 A-24 (4.9 g, 수율 68%)를 얻었다.

[0256] GC-Mass (이론치: 741.29 g/mol, 측정치: 741 g/mol)

[0257] **[합성예 13] C-13의 합성**

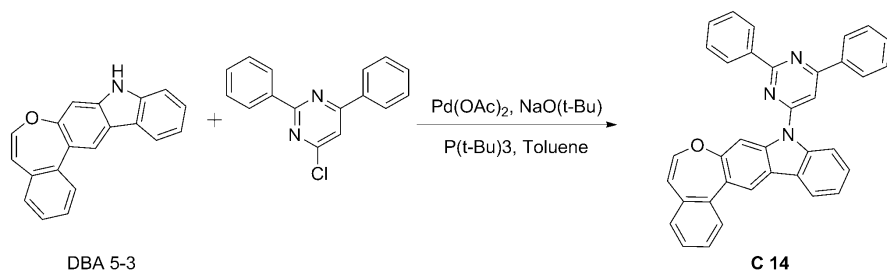


[0258]

[0259] 질소 기류 하에서 DBA 5-3 (3.5 g, 9.76 mmol), 2-chloro-4,6-diphenylpyridine (3.1 g, 11.7 mmol), NaO(t-Bu) (1.9 g, 19.5 mmol), P(t-Bu)₃ (50wt%) (395 mg, 0.976 mmol) 및 Toluene (50 ml)를 혼합하고 110 °C에서 12시간 동안 교반하였다. 반응이 종결된 후 물을 넣고 고체 화합물을 필터링한 후, 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 C-13 (3.7 g, 수율 65%)를 얻었다.

[0260] GC-Mass (이론치: 512.19 g/mol, 측정치: 512 g/mol)

[0261] **[합성예 14] C-14의 합성**

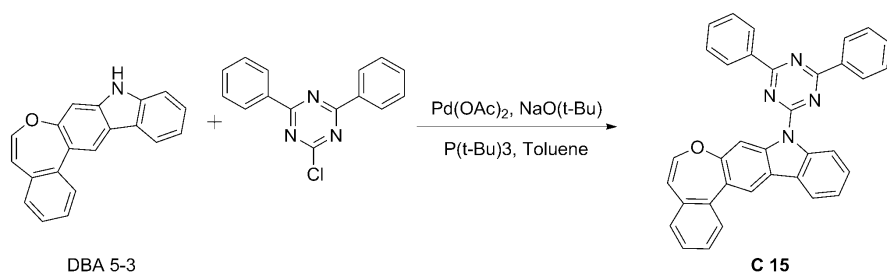


[0262]

[0263] 2-chloro-4,6-diphenylpyridine 대신 2-chloro-4,6-diphenylpyrimidine (3.1 g, 11.7 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 상기 합성예 13과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 C-14 (4.1 g, 수율 71%)을 얻었다.

[0264] GC-Mass (이론치: 513.18 g/mol, 측정치: 513 g/mol)

[0265] **[합성예 15] C-15의 합성**

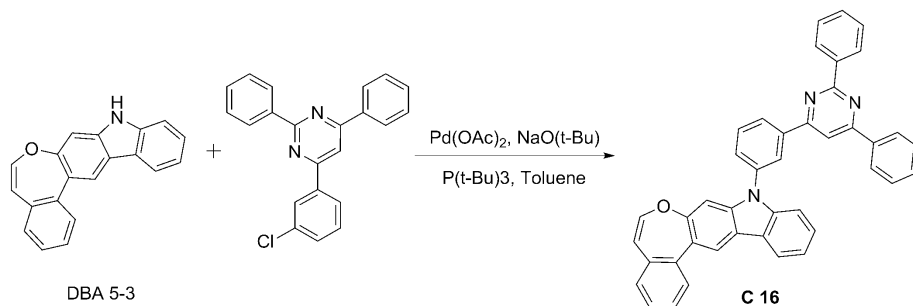


[0266]

[0267] 2-chloro-4,6-diphenylpyridine 대신 2-chloro-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine (3.1 g, 11.7 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 상기 합성예 13과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 C-15 (4.5 g, 수율 78%)을 얻었다.

[0268] GC-Mass (이론치: 514.18 g/mol, 측정치: 514 g/mol)

[0269] [합성예 16] C-16의 합성

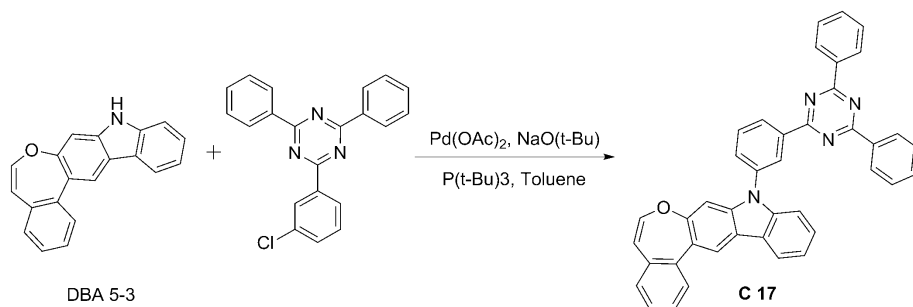


[0270]

[0271] 2-chloro-4,6-diphenylpyridine 대신 4-(3-chlorophenyl)-2,6-diphenylpyrimidine (4.0 g, 11.7 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 상기 합성예 13과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 C-16 (3.9 g, 수율 60%)를 얻었다.

[0272] GC-Mass (이론치: 589.22 g/mol, 측정치: 589 g/mol)

[0273] [합성예 17] C-17의 합성

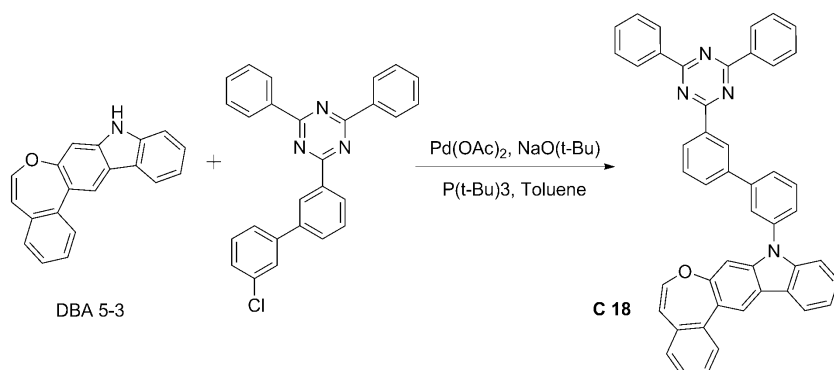


[0274]

[0275] 2-chloro-4,6-diphenylpyridine 대신 2-(3-chlorophenyl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine (4.0 g, 11.7 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 상기 합성예 13과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 C-17 (3.9 g, 수율 60%)를 얻었다.

[0276] GC-Mass (이론치: 590.21 g/mol, 측정치: 590 g/mol)

[0277] [합성예 18] C-18의 합성

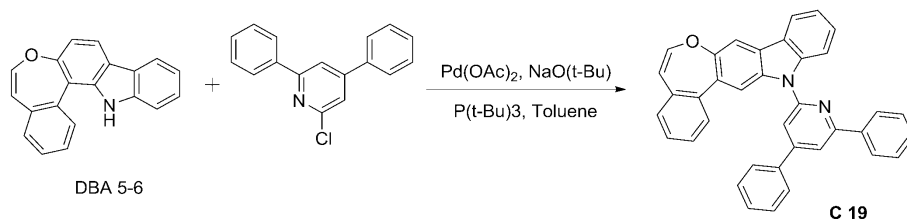


[0278]

[0279] 2-(3-bromophenyl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine 대신 2-(3'-chloro-[1,1'-biphenyl]-3-yl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine (4.9 g, 11.7 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 상기 합성예 13과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 C-18 (5.3 g, 수율 73%)를 얻었다.

[0280] GC-Mass (이론치: 666.24 g/mol, 측정치: 666 g/mol)

[0281] **[합성예 19] C-19의 합성**

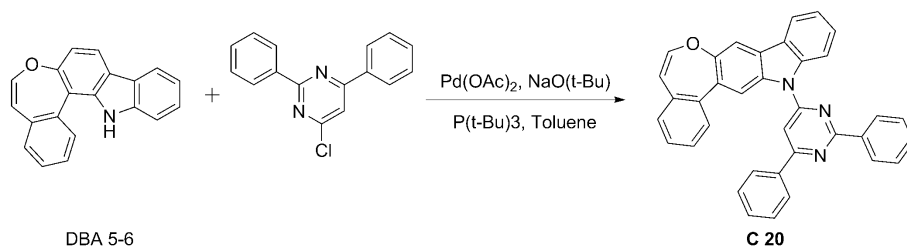


[0282]

[0283] 질소 기류 하에서 DBA 5-6 (3.5 g, 9.76 mmol), 2-chloro-4,6-diphenylpyridine (3.1 g, 11.7 mmol), NaO(t-Bu) (1.9 g, 19.5 mmol), P(t-Bu)₃ (50wt%) (395 mg, 0.976 mmol) 및 Toluene (50 ml)를 혼합하고 110 °C에서 12시간 동안 교반하였다. 반응이 종결된 후 물을 넣고 고체 화합물을 필터링한 후, 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 C-19 (3.7 g, 수율 65%)를 얻었다.

[0284] GC-Mass (이론치: 512.19 g/mol, 측정치: 512 g/mol)

[0285] **[합성예 20] C-20의 합성**

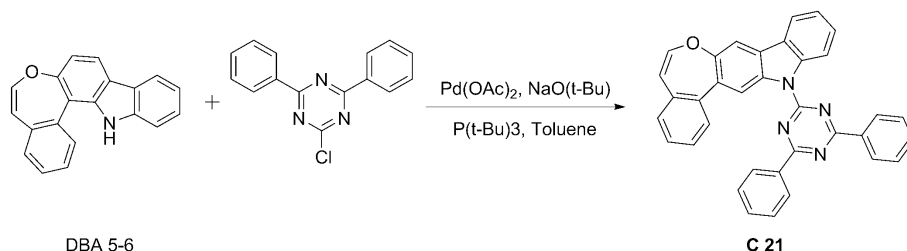


[0286]

[0287] 2-chloro-4,6-diphenylpyridine 대신 2-chloro-4,6-diphenylpyrimidine (3.1 g, 11.7 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 상기 합성예 19과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 C-20 (4.1 g, 수율 71%)을 얻었다.

[0288] GC-Mass (이론치: 513.18 g/mol, 측정치: 513 g/mol)

[0289] **[합성예 21] C-21의 합성**

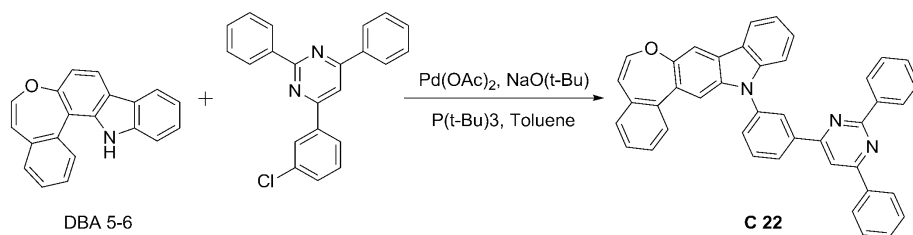


[0290]

[0291] 2-chloro-4,6-diphenylpyridine 대신 2-chloro-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine (3.1 g, 11.7 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 상기 합성예 19과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 C-21 (4.5 g, 수율 78%)을 얻었다.

[0292] GC-Mass (이론치: 514.18 g/mol, 측정치: 514 g/mol)

[0293] **[합성예 22] C-22의 합성**

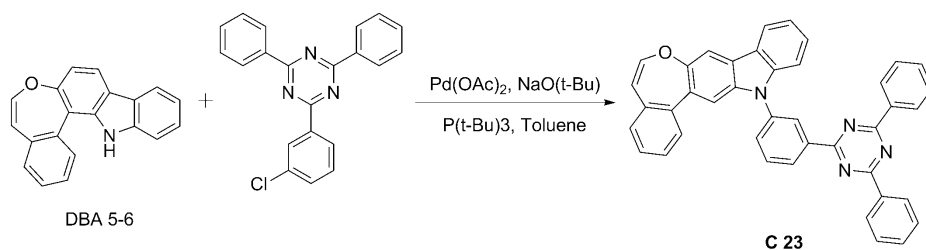


[0294]

[0295] 2-chloro-4,6-diphenylpyridine 대신 4-(3-chlorophenyl)-2,6-diphenylpyrimidine (4.0 g, 11.7 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 상기 합성예 19과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 C-22 (4.1 g, 수율 63%)를 얻었다.

[0296] GC-Mass (이론치: 689.22 g/mol, 측정치: 589 g/mol)

[0297] **[합성예 23] C-23의 합성**

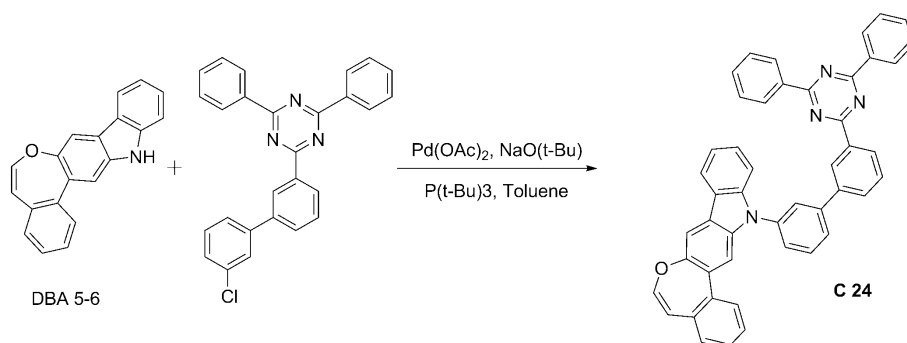


[0298]

[0299] 2-chloro-4,6-diphenylpyridine 대신 2-(3-chlorophenyl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine (4.0 g, 11.7 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 상기 합성예 19과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 C-23 (3.9 g, 수율 60%)를 얻었다.

[0300] GC-Mass (이론치: 590.21 g/mol, 측정치: 590 g/mol)

[0301] **[합성예 24] C-24의 합성**

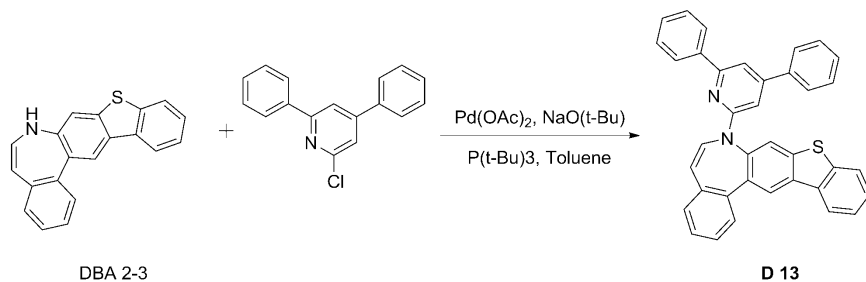


[0302]

[0303] 2-(3-bromophenyl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine 대신 2-(3'-chloro-[1,1'-biphenyl]-3-yl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine (4.9 g, 11.7 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 상기 합성예 19과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 C-24 (4.9 g, 수율 68%)를 얻었다.

[0304] GC-Mass (이론치: 666.24 g/mol, 측정치: 666 g/mol)

[0305] **[합성예 25] D-13의 합성**



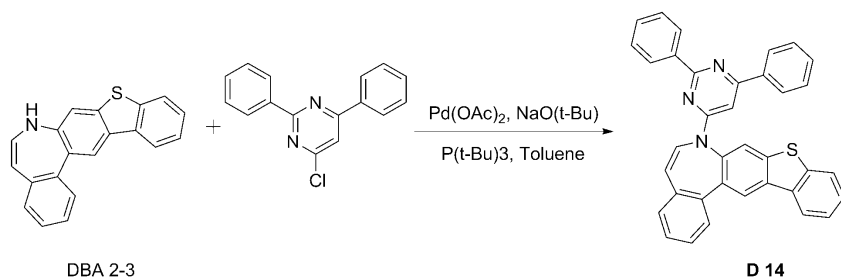
[0306]

[0307] 질소 기류 하에서 DBA 2-3 (3.0 g, 9.76 mmol), 2-chloro-4,6-diphenylpyridine (3.1 g, 11.7 mmol), NaO(t-Bu) (1.9 g, 19.5 mmol), P(t-Bu)3 (50wt%) (395 mg, 0.976 mmol) 및 Toluene (50 ml)를 혼합하고 110 °C에서 12시간 동안 교반하였다. 반응이 종결된 후 물을 넣고 고체 화합물을 필터링한 후, 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 D-13 (3.7 g, 수율 65%)를 얻었다.

[0308]

GC-Mass (이론치: 528.17 g/mol, 측정치: 528 g/mol)

[0309] **[합성예 26] D-14의 합성**



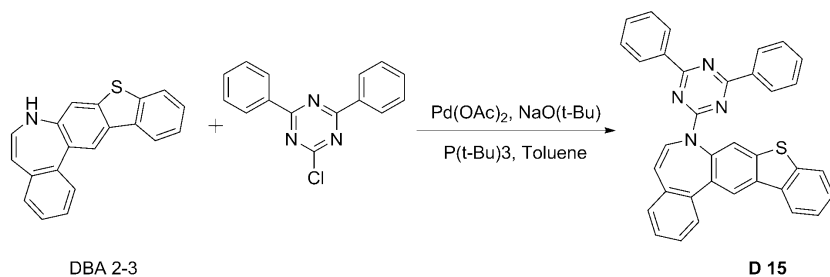
[0310]

[0311] 2-chloro-4,6-diphenylpyridine 대신 2-chloro-4,6-diphenylpyrimidine (3.1 g, 11.7 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 상기 합성예 25와 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 D-14 (4.1 g, 수율 71%)을 얻었다.

[0312]

GC-Mass (이론치: 529.16 g/mol, 측정치: 529 g/mol)

[0313] **[합성예 27] D-15의 합성**



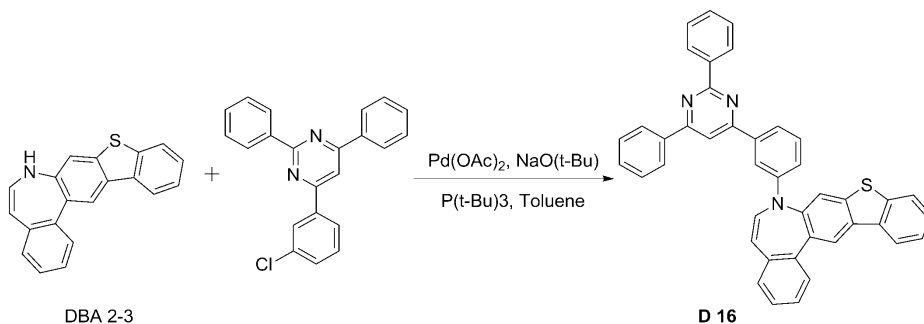
[0314]

[0315] 2-chloro-4,6-diphenylpyridine 대신 2-chloro-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine (3.1 g, 11.7 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 상기 합성예 25와 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 D-15 (4.5 g, 수율 78%)을 얻었다.

[0316]

GC-Mass (이론치: 530.16 g/mol, 측정치: 530 g/mol)

[0317] **[합성예 28] D-16의 합성**

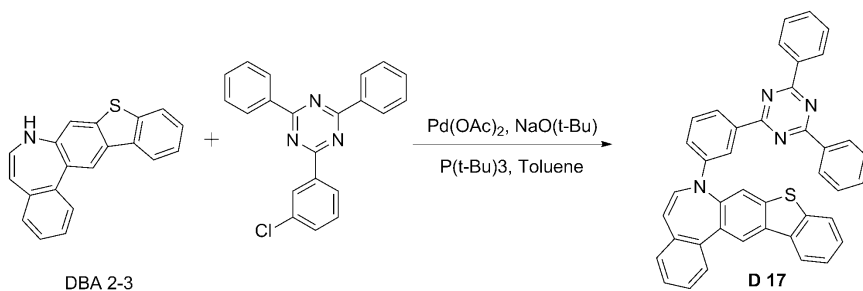


[0318]

[0319] 2-chloro-4,6-diphenylpyridine 대신 4-(3-chlorophenyl)-2,6-diphenylpyrimidine (4.0 g, 11.7 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 상기 합성예 25과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 D-16 (3.9 g, 수율 60%)를 얻었다.

[0320] GC-Mass (이론치: 605.19 g/mol, 측정치: 605 g/mol)

[0321] **[합성예 29] D-17의 합성**

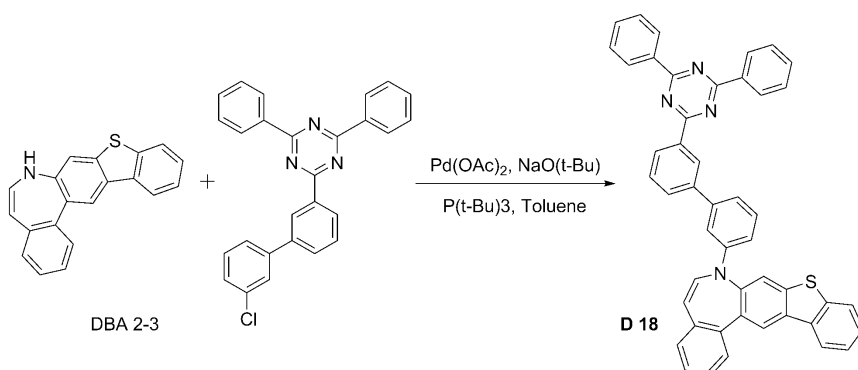


[0322]

[0323] 2-chloro-4,6-diphenylpyridine 대신 2-(3-chlorophenyl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine (4.0 g, 11.7 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 상기 합성예 25과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 D-17 (3.9 g, 수율 60%)를 얻었다.

[0324] GC-Mass (이론치: 606.19 g/mol, 측정치: 606 g/mol)

[0325] **[합성예 30] D-18의 합성**

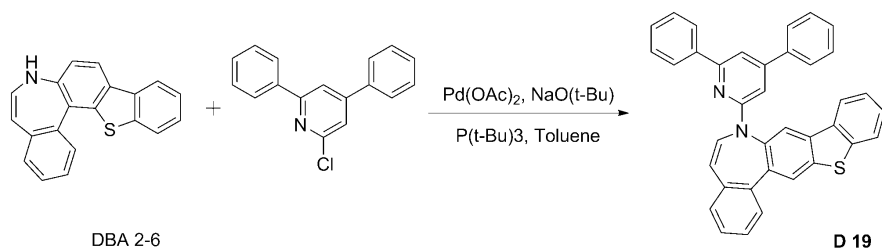


[0326]

[0327] 2-(3-bromophenyl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine 대신 2-(3'-chloro-[1,1'-biphenyl]-3-yl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine (4.9 g, 11.7 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 상기 합성예 25과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 D-18 (5.3 g, 수율 73%)를 얻었다.

[0328] GC-Mass (이론치: 682.22 g/mol, 측정치: 682 g/mol)

[0329] **[합성예 31] D-19의 합성**

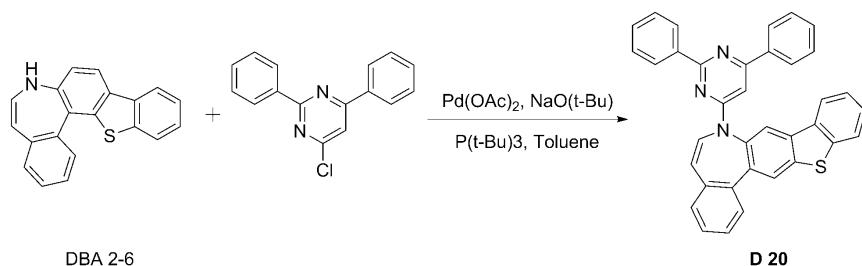


[0330]

[0331] 질소 기류 하에서 DBA 2-6 (3.0 g, 9.76 mmol), 2-chloro-4,6-diphenylpyridine (3.1 g, 11.7 mmol), NaO(t-Bu) (1.9 g, 19.5 mmol), P(t-Bu)₃ (50wt%) (395 mg, 0.976 mmol) 및 Toluene (50 ml)를 혼합하고 110 °C에서 12시간 동안 교반하였다. 반응이 종결된 후 물을 넣고 고체 화합물을 필터링한 후, 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 D-19 (3.7 g, 수율 65%)를 얻었다.

[0332] GC-Mass (이론치: 528.17 g/mol, 측정치: 528 g/mol)

[0333] **[합성예 32] D-20의 합성**

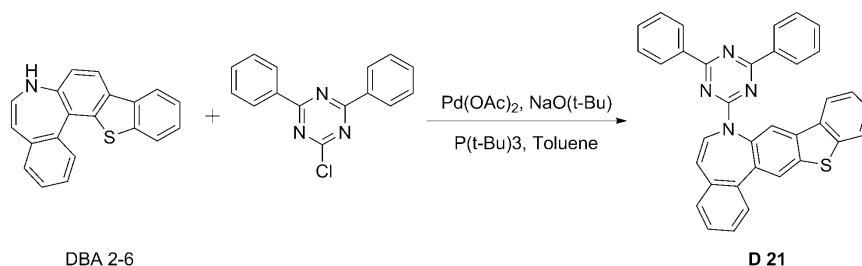


[0334]

[0335] 2-chloro-4,6-diphenylpyridine 대신 2-chloro-4,6-diphenylpyrimidine (3.1 g, 11.7 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 상기 합성예 32와 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 D-20 (4.1 g, 수율 71%)을 얻었다.

[0336] GC-Mass (이론치: 529.16 g/mol, 측정치: 529 g/mol)

[0337] **[합성예 33] D-21의 합성**

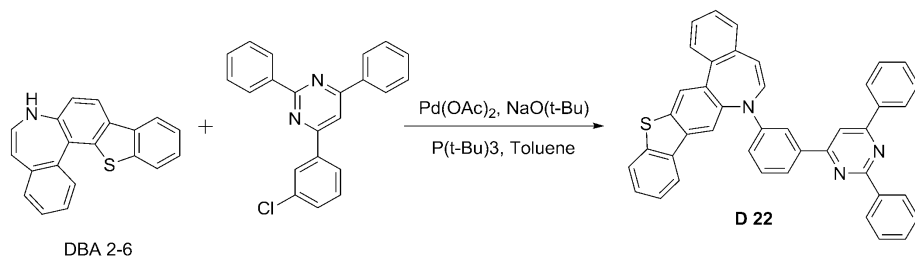


[0338]

[0339] 2-chloro-4,6-diphenylpyridine 대신 2-chloro-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine (3.1 g, 11.7 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 상기 합성예 32와 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 D-21 (4.5 g, 수율 78%)을 얻었다.

[0340] GC-Mass (이론치: 530.16 g/mol, 측정치: 530 g/mol)

[0341] **[합성예 34] D-22의 합성**

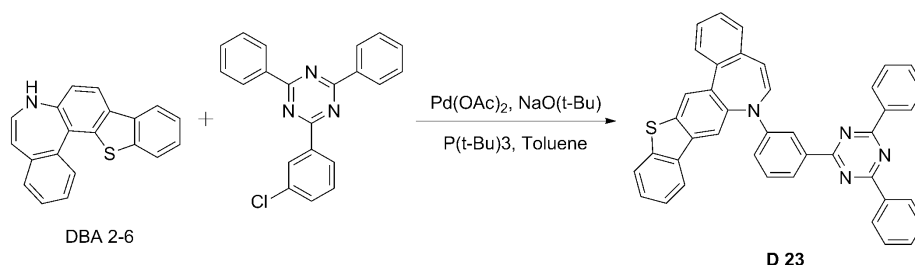


[0342]

[0343] 2-chloro-4,6-diphenylpyridine 대신 4-(3-chlorophenyl)-2,6-diphenylpyrimidine (4.0 g, 11.7 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 상기 합성예 32와 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 D-22 (4.1 g, 수율 63%)를 얻었다.

[0344] GC-Mass (이론치: 605.19 g/mol, 측정치: 605 g/mol)

[0345] **[합성예 35] D-23의 합성**

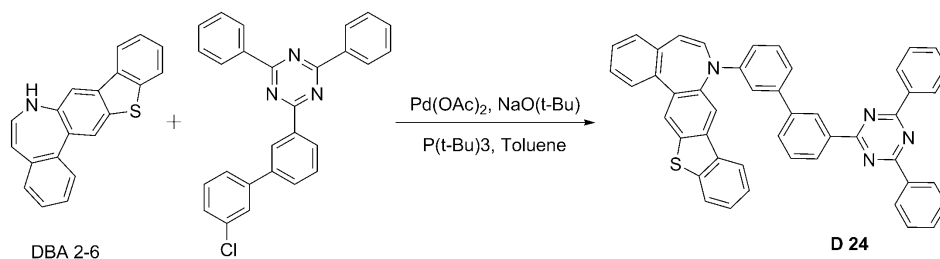


[0346]

[0347] 2-chloro-4,6-diphenylpyridine 대신 2-(3-chlorophenyl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine (4.0 g, 11.7 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 상기 합성예 32와 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 D-23 (3.9 g, 수율 60%)를 얻었다.

[0348] GC-Mass (이론치: 606.19 g/mol, 측정치: 606 g/mol)

[0349] **[합성예 36] D-24의 합성**

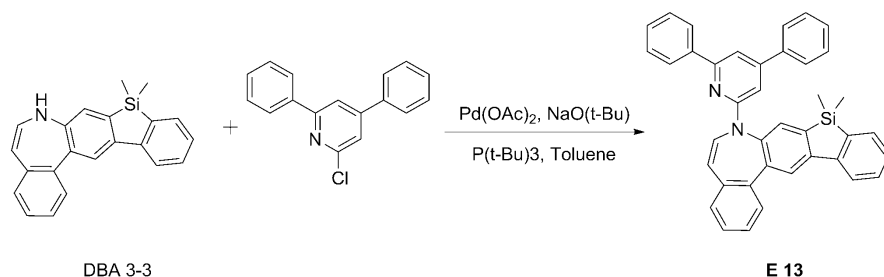


[0350]

[0351] 2-(3-bromophenyl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine 대신 2-(3'-chloro-[1,1'-biphenyl]-3-yl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine (4.9 g, 11.7 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 상기 합성예 32와 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 D-24 (4.9 g, 수율 68%)를 얻었다.

[0352] GC-Mass (이론치: 682.22 g/mol, 측정치: 682 g/mol)

[0353] [합성예 37] E-13의 합성



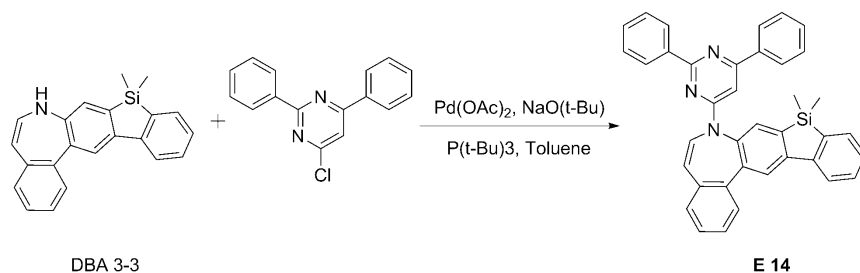
[0354]

[0355] 질소 기류 하에서 DBA 3-3 (3.2 g, 9.76 mmol), 2-chloro-4,6-diphenylpyridine (3.1 g, 11.7 mmol), NaO(t-Bu) (1.9 g, 19.5 mmol), P(t-Bu)₃ (50wt%) (395 mg, 0.976 mmol) 및 Toluene (50 ml)를 혼합하고 110 °C에서 12시간 동안 교반하였다. 반응이 종결된 후 물을 넣고 고체 화합물을 필터링한 후, 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 E-13 (3.7 g, 수율 65%)를 얻었다.

[0356]

GC-Mass (이론치: 554.22 g/mol, 측정치: 554 g/mol)

[0357] [합성예 38] E-14의 합성



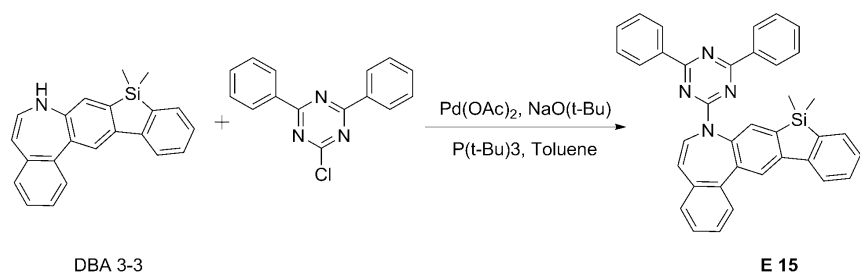
[0358]

[0359] 2-chloro-4,6-diphenylpyridine 대신 2-chloro-4,6-diphenylpyrimidine (3.1 g, 11.7 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 상기 합성예 37과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 E-14 (4.1 g, 수율 71%)을 얻었다.

[0360]

GC-Mass (이론치: 555.21 g/mol, 측정치: 555 g/mol)

[0361] [합성예 39] E-15의 합성



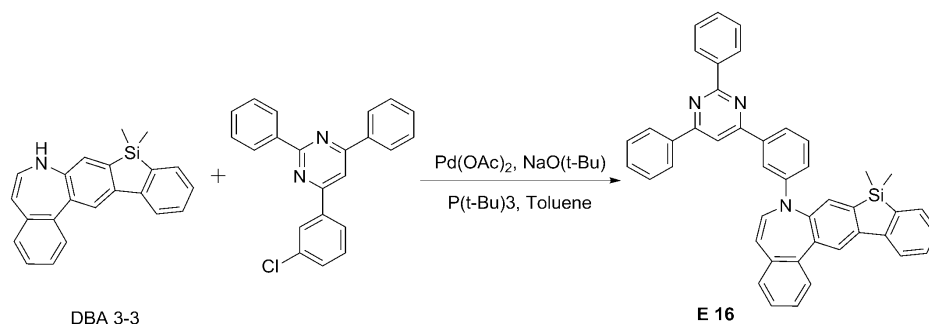
[0362]

[0363] 2-chloro-4,6-diphenylpyridine 대신 2-chloro-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine (3.1 g, 11.7 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 상기 합성예 37과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 E-15 (4.5 g, 수율 78%)을 얻었다.

[0364]

GC-Mass (이론치: 556.21 g/mol, 측정치: 556 g/mol)

[0365] [합성예 40] E-16의 합성

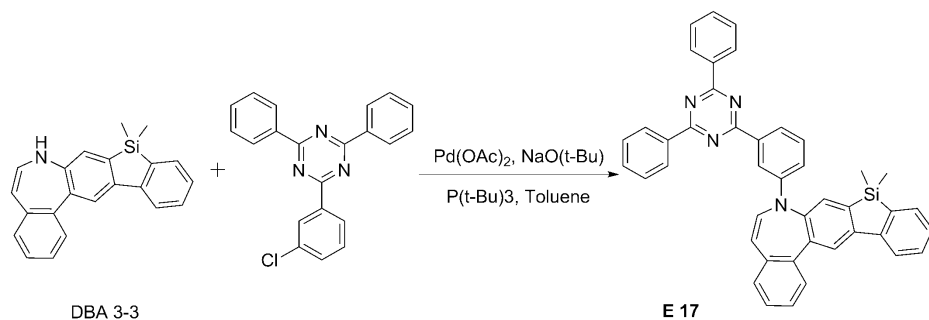


[0366]

[0367] 2-chloro-4,6-diphenylpyridine 대신 4-(3-chlorophenyl)-2,6-diphenylpyrimidine (4.0 g, 11.7 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 상기 합성예 37과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 E-16 (3.9 g, 수율 60%)를 얻었다.

[0368] GC-Mass (이론치: 631.24 g/mol, 측정치: 631 g/mol)

[0369] [합성예 41] E-17의 합성

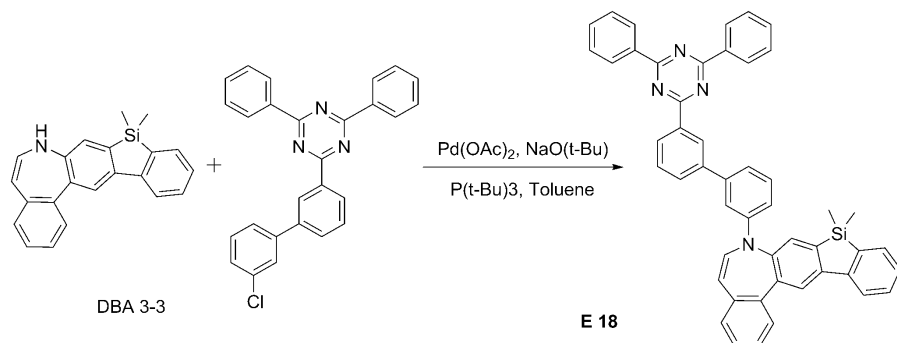


[0370]

[0371] 2-chloro-4,6-diphenylpyridine 대신 2-(3-chlorophenyl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine (4.0 g, 11.7 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 상기 합성예 37과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 E-17 (3.9 g, 수율 60%)를 얻었다.

[0372] GC-Mass (이론치: 632.24 g/mol, 측정치: 632 g/mol)

[0373] [합성예 42] E-18의 합성

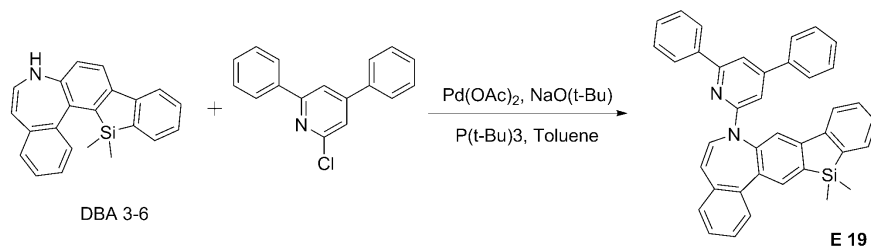


[0374]

[0375] 2-(3-bromophenyl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine 대신 2-(3'-chloro-[1,1'-biphenyl]-3-yl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine (4.9 g, 11.7 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 상기 합성예 37과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 E-18 (5.3 g, 수율 73%)를 얻었다.

[0376] GC-Mass (이론치: 708.22 g/mol, 측정치: 708 g/mol)

[0377] **[합성예 43] E-19의 합성**

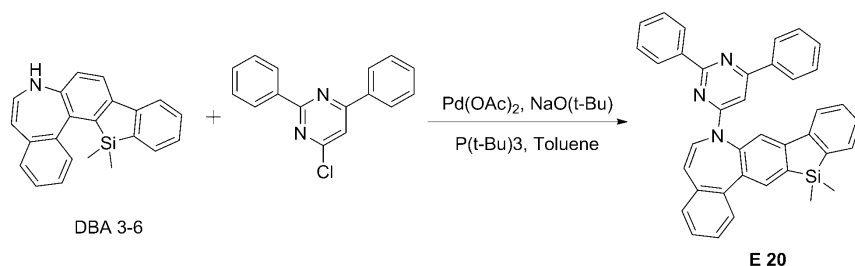


[0378]

[0379] 질소 기류 하에서 DBA 3-6 (3.2 g, 9.76 mmol), 2-chloro-4,6-diphenylpyridine (3.1 g, 11.7 mmol), NaO(t-Bu) (1.9 g, 19.5 mmol), P(t-Bu)₃ (50wt%) (395 mg, 0.976 mmol) 및 Toluene (50 ml)를 혼합하고 110 °C에서 12시간 동안 교반하였다. 반응이 종결된 후 물을 넣고 고체 화합물을 필터링한 후, 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 E-19 (3.7 g, 수율 65%)를 얻었다.

[0380] GC-Mass (이론치: 554.22 g/mol, 측정치: 554 g/mol)

[0381] **[합성예 44] E-20의 합성**

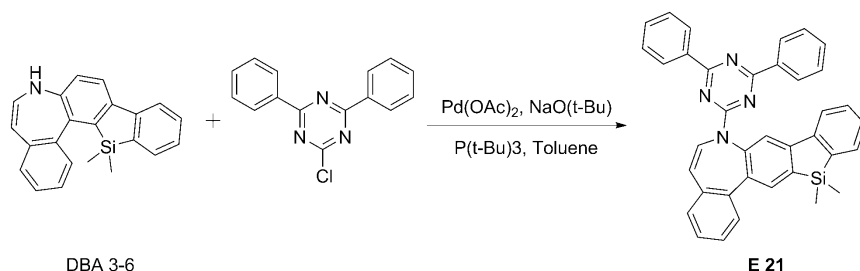


[0382]

[0383] 2-chloro-4,6-diphenylpyridine 대신 2-chloro-4,6-diphenylpyrimidine (3.1 g, 11.7 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 상기 합성예 43과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 E-20 (4.1 g, 수율 71%)을 얻었다.

[0384] GC-Mass (이론치: 555.21 g/mol, 측정치: 555 g/mol)

[0385] **[합성예 45] E-21의 합성**

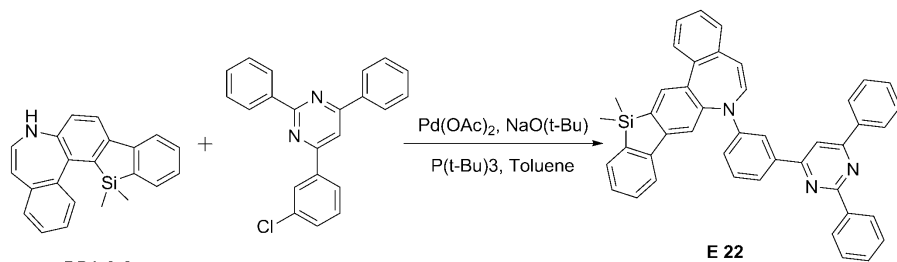


[0386]

[0387] 2-chloro-4,6-diphenylpyridine 대신 2-chloro-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine (3.1 g, 11.7 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 상기 합성예 43과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 E-21 (4.5 g, 수율 78%)을 얻었다.

[0388] GC-Mass (이론치: 556.21 g/mol, 측정치: 556 g/mol)

[0389] **[합성예 46] E-22의 합성**

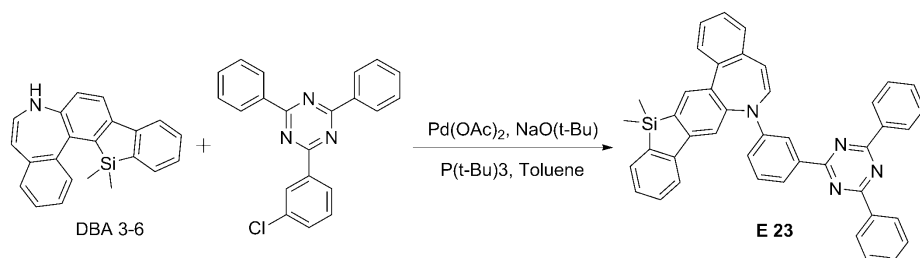


[0390]

[0391] 2-chloro-4,6-diphenylpyridine 대신 4-(3-chlorophenyl)-2,6-diphenylpyrimidine (4.0 g, 11.7 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 상기 합성예 43과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 E-22 (4.1 g, 수율 63%)를 얻었다.

[0392] GC-Mass (이론치: 631.24 g/mol, 측정치: 631 g/mol)

[0393] **[합성예 47] E-23의 합성**

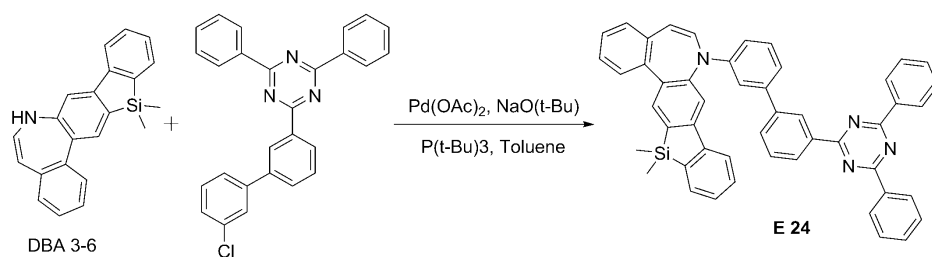


[0394]

[0395] 2-chloro-4,6-diphenylpyridine 대신 2-(3-chlorophenyl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine (4.0 g, 11.7 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 상기 합성예 43과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 E-23 (3.9 g, 수율 60%)를 얻었다.

[0396] GC-Mass (이론치: 632.24 g/mol, 측정치: 632 g/mol)

[0397] **[합성예 48] E-24의 합성**

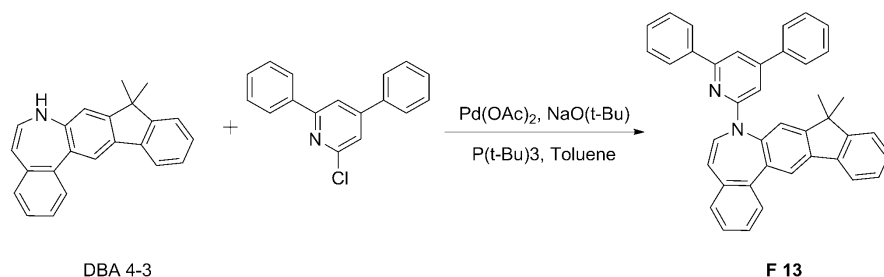


[0398]

[0399] 2-(3-bromophenyl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine 대신 2-(3'-chloro-[1,1'-biphenyl]-3-yl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine (4.9 g, 11.7 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 상기 합성예 43과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 E-24 (4.9 g, 수율 68%)를 얻었다.

[0400] GC-Mass (이론치: 708.27 g/mol, 측정치: 708 g/mol)

[0401] **[합성예 49] F-13의 합성**



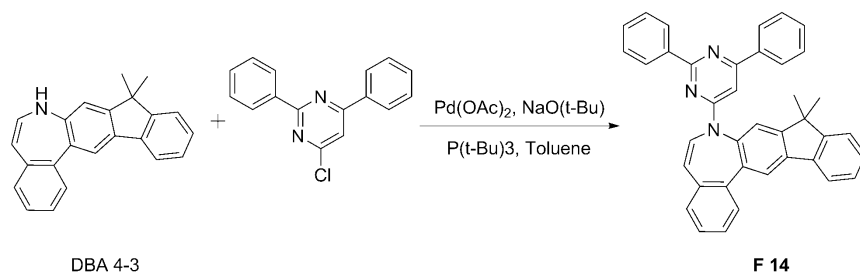
[0402]

[0403] 질소 기류 하에서 DBA 4-3 (3.0 g, 9.76 mmol), 2-chloro-4,6-diphenylpyridine (3.1 g, 11.7 mmol), NaO(t-Bu) (1.9 g, 19.5 mmol), P(t-Bu)₃ (50wt%) (395 mg, 0.976 mmol) 및 Toluene (50 ml)를 혼합하고 110 °C에서 12시간 동안 교반하였다. 반응이 종결된 후 물을 넣고 고체 화합물을 필터링한 후, 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 F-13 (3.7 g, 수율 65%)를 얻었다.

[0404]

GC-Mass (이론치: 538.24 g/mol, 측정치: 538 g/mol)

[0405] **[합성예 50] F-14의 합성**



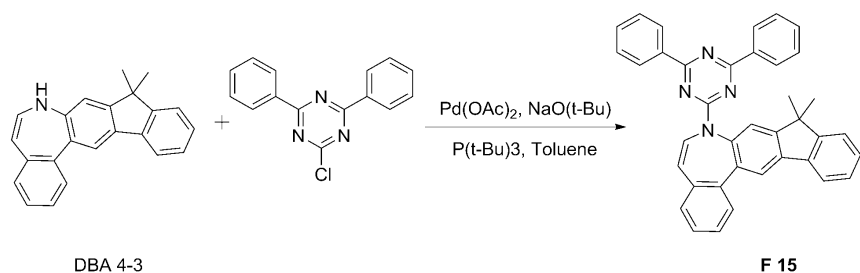
[0406]

[0407] 2-chloro-4,6-diphenylpyridine 대신 2-chloro-4,6-diphenylpyrimidine (3.1 g, 11.7 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 상기 합성예 49와 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 F-14 (4.1 g, 수율 71%)을 얻었다.

[0408]

GC-Mass (이론치: 539.24 g/mol, 측정치: 539 g/mol)

[0409] **[합성예 51] F-15의 합성**



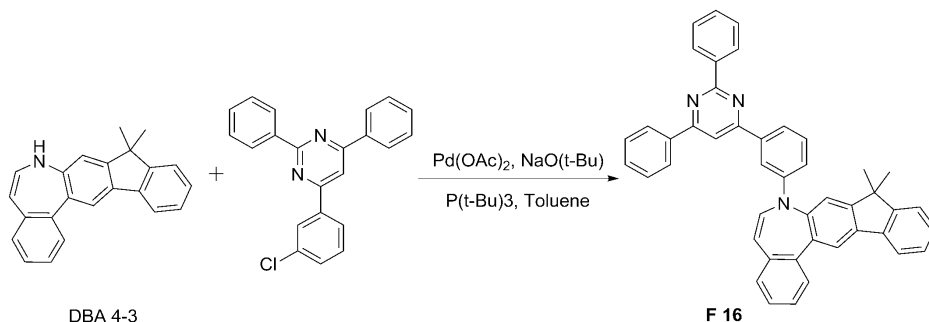
[0410]

[0411] 2-chloro-4,6-diphenylpyridine 대신 2-chloro-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine (3.1 g, 11.7 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 상기 합성예 49와 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 F-15 (4.5 g, 수율 78%)을 얻었다.

[0412]

GC-Mass (이론치: 540.23 g/mol, 측정치: 540 g/mol)

[0413] [합성예 52] F-16의 합성

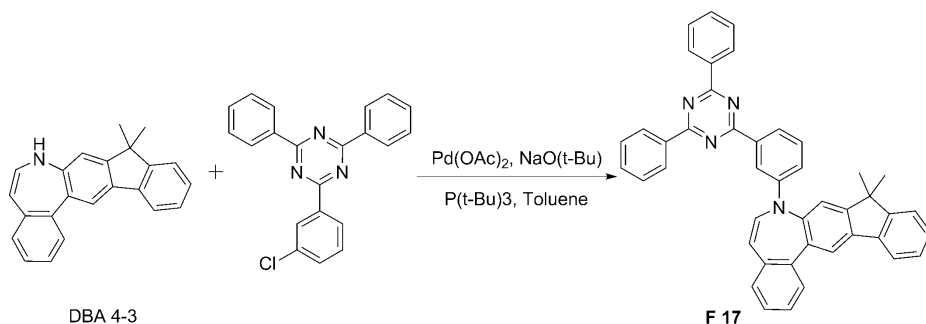


[0414]

[0415] 2-chloro-4,6-diphenylpyridine 대신 4-(3-chlorophenyl)-2,6-diphenylpyrimidine (4.0 g, 11.7 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 상기 합성예 49와 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 F-16 (3.9 g, 수율 60%)를 얻었다.

[0416] GC-Mass (이론치: 615.27 g/mol, 측정치: 615 g/mol)

[0417] [합성예 53] F-17의 합성

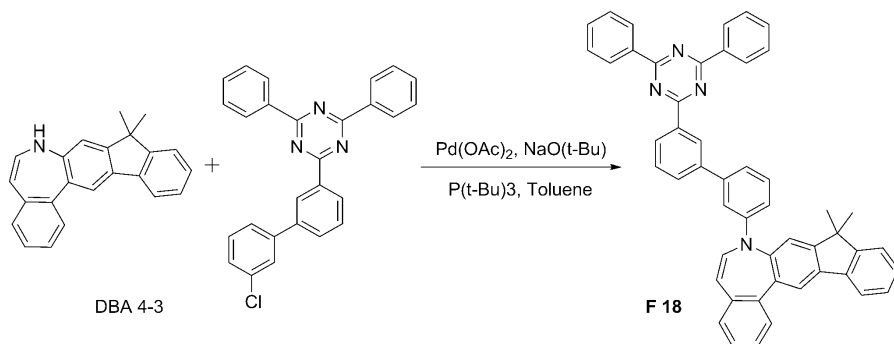


[0418]

[0419] 2-chloro-4,6-diphenylpyridine 대신 2-(3-chlorophenyl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine (4.0 g, 11.7 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 상기 합성예 49와 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 F-17 (3.9 g, 수율 60%)를 얻었다.

[0420] GC-Mass (이론치: 616.26 g/mol, 측정치: 616 g/mol)

[0421] [합성예 54] F-18의 합성

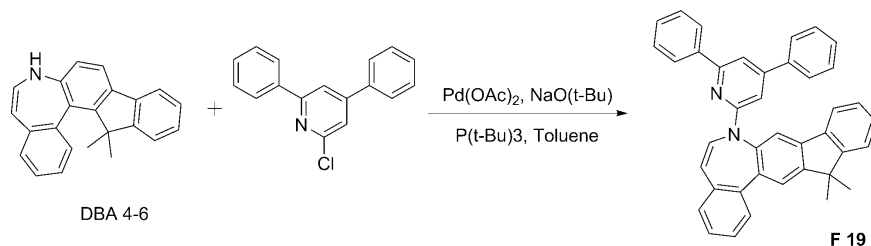


[0422]

[0423] 2-(3-bromophenyl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine 대신 2-(3'-chloro-[1,1'-biphenyl]-3-yl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine (4.9 g, 11.7 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 상기 합성예 49와 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 F-18 (5.3 g, 수율 73%)를 얻었다.

[0424] GC-Mass (이론치: 692.29 g/mol, 측정치: 692 g/mol)

[0425] **[합성예 55] F-19의 합성**

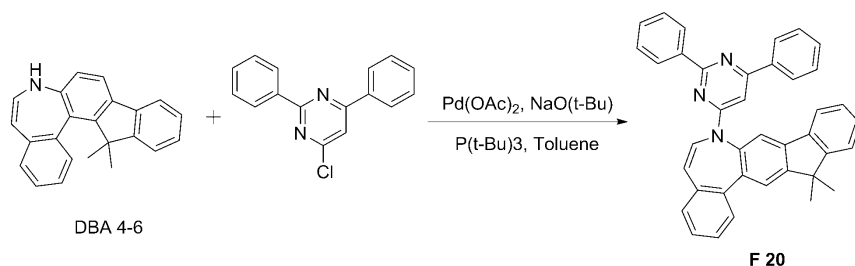


[0426]

[0427] 질소 기류 하에서 DBA 4-6 (3.0 g, 9.76 mmol), 2-chloro-4,6-diphenylpyridine (3.1 g, 11.7 mmol), NaO(t-Bu) (1.9 g, 19.5 mmol), P(t-Bu)3 (50wt%) (395 mg, 0.976 mmol) 및 Toluene (50 ml)를 혼합하고 110 °C에서 12시간 동안 교반하였다. 반응이 종결된 후 물을 넣고 고체 화합물을 필터링한 후, 컬럼 크로마토그래피로 정제하여 목적 화합물인 F-19 (3.7 g, 수율 65%)를 얻었다.

[0428] GC-Mass (이론치: 538.24 g/mol, 측정치: 538 g/mol)

[0429] **[합성예 56] F-20의 합성**

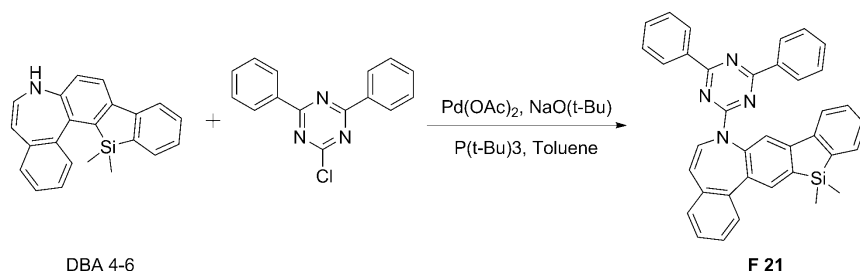


[0430]

[0431] 2-chloro-4,6-diphenylpyridine 대신 2-chloro-4,6-diphenylpyrimidine (3.1 g, 11.7 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 상기 합성예 55와 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 F-20 (4.1 g, 수율 71%)을 얻었다.

[0432] GC-Mass (이론치: 539.24 g/mol, 측정치: 539 g/mol)

[0433] **[합성예 57] F-21의 합성**

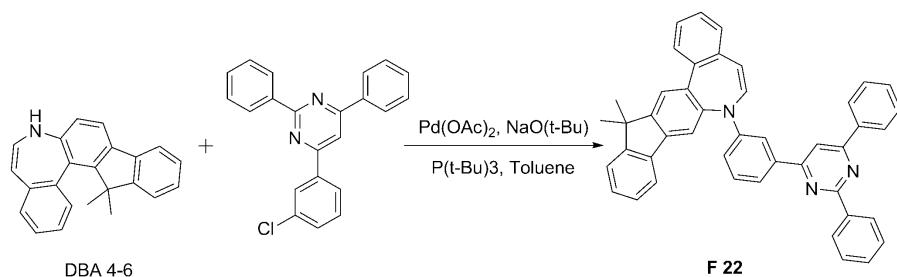


[0434]

[0435] 2-chloro-4,6-diphenylpyridine 대신 2-chloro-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine (3.1 g, 11.7 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 상기 합성예 55와 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 F 21 (4.5 g, 수율 78%)을 얻었다.

[0436] GC-Mass (이론치: 556.21 g/mol, 측정치: 556 g/mol)

[0437] **[합성예 58] F-22의 합성**

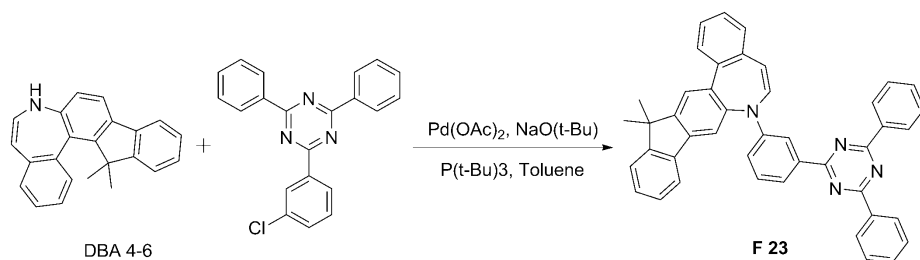


[0438]

[0439] 2-chloro-4,6-diphenylpyridine 대신 4-(3-chlorophenyl)-2,6-diphenylpyrimidine (4.0 g, 11.7 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 상기 합성예 55와 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 F-22 (4.1 g, 수율 63%)를 얻었다.

[0440] GC-Mass (이론치: 615.27 g/mol, 측정치: 615 g/mol)

[0441] **[합성예 59] F-23의 합성**

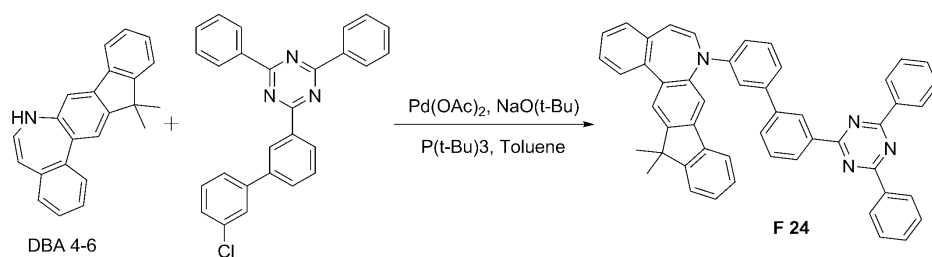


[0442]

[0443] 2-chloro-4,6-diphenylpyridine 대신 2-(3-chlorophenyl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine (4.0 g, 11.7 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 상기 합성예 55와 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 F-23 (3.9 g, 수율 60%)를 얻었다.

[0444] GC-Mass (이론치: 616.26 g/mol, 측정치: 616 g/mol)

[0445] **[합성예 60] F-24의 합성**

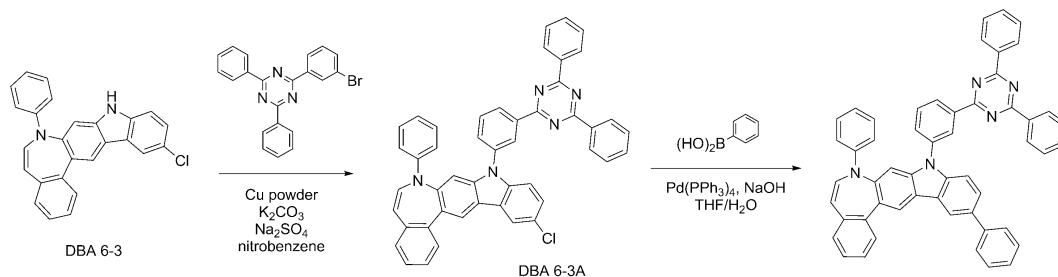


[0446]

[0447] 2-(3-bromophenyl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine 대신 2-(3'-chloro-[1,1'-biphenyl]-3-yl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine (4.9 g, 11.7 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 상기 합성예 55와 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 F-24 (4.9 g, 수율 68%)를 얻었다.

[0448] GC-Mass (이론치: 692.29 g/mol, 측정치: 692 g/mol)

[0449] **[합성예 61] G-13의 합성**



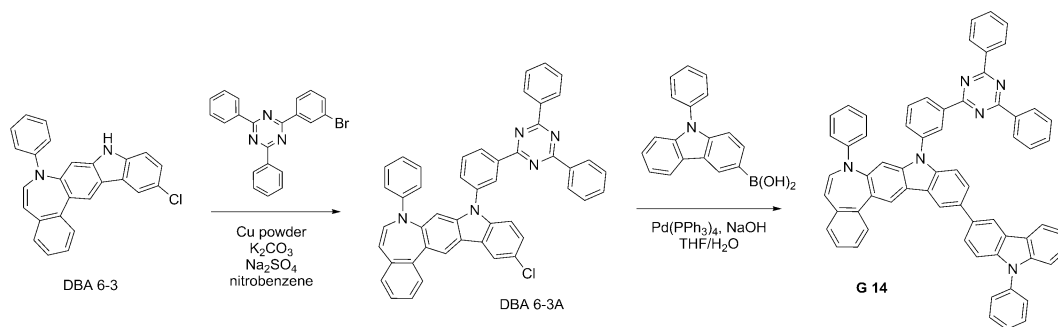
[0450]

[0451] DBA 1-3 대신 DBA 6-3 (3.91 g, 10.00 mmol)를 사용하는 것을 제외하고는, 상기 합성예 3과 동일한 과정을 수행하여 중간 화합물인 IPT-6-3A (5.3 g, 수율 77%)을 얻었다.

[0452] 질소 기류 하에서 5.38 g (7.70 mmol)의 4-bromo-1H-indole, 1.18 g (9.67 mmol)의 phenylboronic acid, 1.06 g (26.4 mmol)의 NaOH과 100 ml / 50 ml의 THF/H₂O를 넣고 교반하였다. 40℃에서 0.51 g (5 mol%)의 Pd(PPh₃)₄를 넣고 80℃에서 12시간 동안 교반하였다. 반응 종결 후 메틸렌클로라이드로 추출하고 MgSO₄를 넣고 필터하였다. 필터된 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피를 이용하여 목적 화합물인 G-13 (4.73 g, 6.39 mmol, 수율 83 %)를 얻었다.

[0453] GC-Mass (이론치: 741.29 g/mol, 측정치: 741 g/mol)

[0454] **[합성예 62] G-14의 합성**

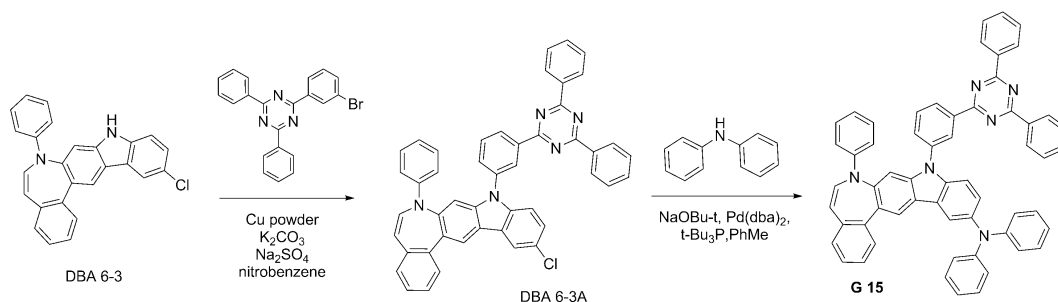


[0455]

[0456] phenylboronic acid 대신 9-phenyl-9H-carbazol-3-ylboronic acid (2.78 g, 9.67 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 상기 합성예 61과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 G-14 (5.34 g, 전체 수율 59%)을 얻었다.

[0457] GC-Mass (이론치: 906.35 g/mol, 측정치: 906 g/mol)

[0458] **[합성예 63] G-15의 합성**



[0459]

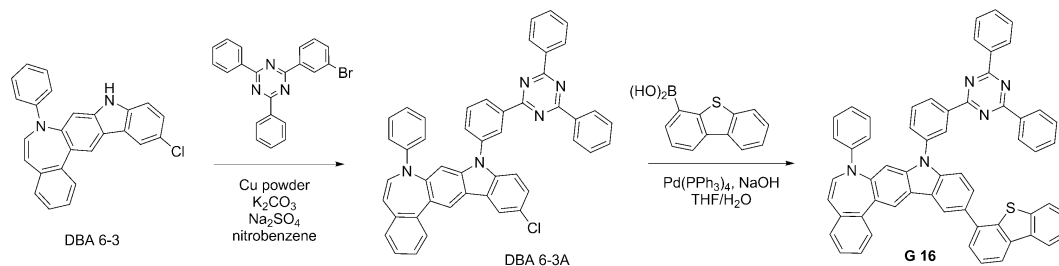
[0460] DBA 1-3 대신 DBA 6-3 (3.91 g, 10.00 mmol)를 사용하는 것을 제외하고는, 상기 합성예 3과 동일한 과정을 수행하여 중간 화합물인 DBA 6-3A (5.38 g, 수율 77%)을 얻었다.

[0461] 질소 기류 하에서 6.98 g (10.00 mmol)의 4-bromo-1H-indole, 3.55 g (21.0 mmol)의 diphenylamine, Pd(dba)₂

(0.22 g, 0.4 mmol), (t-Bu)₃P (0.12 g, 0.6 mmol), sodium tert-butoxide (2.88 g, 30.0 mmol) 을 100 ml toluene에 넣고 110℃에서 12시간 동안 교반하였다. 반응 종결 후 메틸렌클로라이드로 추출하고 MgSO₄를 넣고 필터하였다. 필터된 유기층의 용매를 제거한 후 컬럼크로마토그래피를 이용하여 목적 화합물인 G-15 (6.73 g, 8.1 mmol, 수율 81 %)를 얻었다.

[0462] GC-Mass (이론치: 832.33 g/mol, 측정치: 832 g/mol)

[0463] **[합성예 64] G-16의 합성**

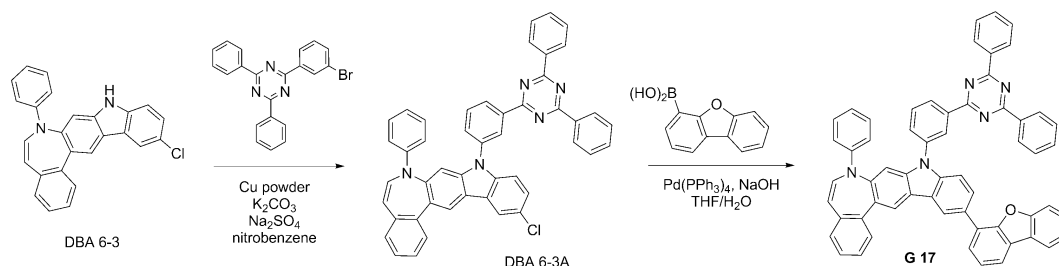


[0464]

[0465] DBA 1-3 대신 DBA 6-3 (3.91 g, 10.00 mmol)을 사용하는 것과 phenylboronic acid 대신 dibenzo[b,d]thiophen-4-ylboronic acid (2.21 g, 9.67 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 상기 합성예 61과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 G-16 (4.31 g, 전체 수율 51%)를 얻었다.

[0466] GC-Mass (이론치: 847.28 g/mol, 측정치: 847 g/mol)

[0467] **[합성예 65] G-17의 합성**



[0468]

[0469] DBA 1-3 대신 DBA 6-3 (3.91 g, 10.00 mmol)을 사용하는 것과 phenylboronic acid 대신 dibenzo[b,d]furan-4-ylboronic acid (2.07 g, 9.67 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 상기 합성예 61과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 G-17 (4.31 g, 전체 수율 51%)를 얻었다.

[0470] GC-Mass (이론치: 831.30 g/mol, 측정치: 831 g/mol)

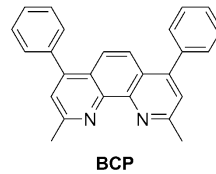
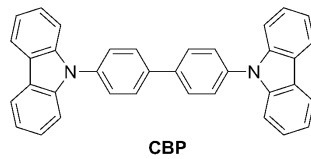
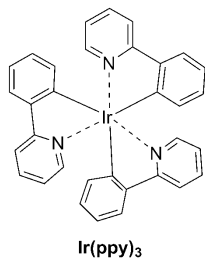
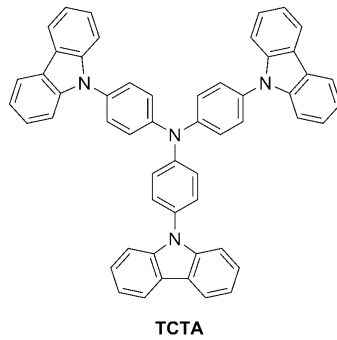
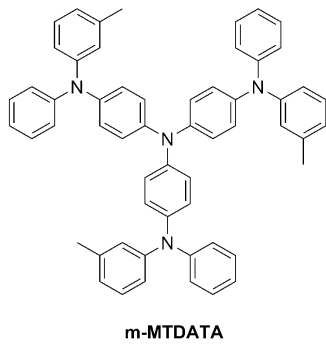
[0471] **[실시예 1 ~ 50] 녹색 유기 EL 소자의 제작**

[0472] 합성예 1~64에서 합성된 화합물 A-13 ~ G-16을 통상적으로 알려진 방법으로 고순도 승화정제를 한 후 아래의 과정에 따라 녹색 유기 EL 소자를 제작하였다.

[0473] 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.

[0474] 이렇게 준비된 ITO 투명 전극 위에 m-MTDATA (60 nm)/TCTA (80 nm)/ 각각의 화합물 (A-13~G-16) + 10 % Ir(ppy)₃ (30nm)/BCP (10 nm)/Alq₃ (30 nm)/LiF (1 nm)/Al (200 nm) 순으로 적층하여 유기 EL 소자를 제작하였다.

[0475] m-MTDATA, TCTA, Ir(ppy)₃, CBP 및 BCP의 구조는 하기와 같다.



[0477]

[0478]

[0479] **[비교예 1] 녹색 유기 EL 소자의 제작**

[0480] 발광층 형성시 발광 호스트 물질로서 화합물 A-13 대신 CBP를 사용하는 것을 제외하고는, 상기 실시예 1과 동일한 과정으로 녹색 유기 EL 소자를 제작하였다.

[0481] **[평가예]**

[0482] 실시예 1 ~ 50 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

[0483]

샘플	호스트	구동 전압 (V)	EL 피크 (nm)	전류효율 (cd/A)
실시예 1	A-13	6.67	514	42.7
실시예 2	A-14	6.54	518	43.7
실시예 3	A-16	6.48	515	41.2
실시예 4	A-17	6.50	517	42.5
실시예 5	A-18	6.65	515	42.7
실시예 6	A-20	6.49	516	43.6
실시예 7	A-21	6.70	512	42.8
실시예 8	A-22	6.68	518	43.0
실시예 9	A-23	6.45	513	41.5
실시예 10	A-24	6.71	518	43.8
실시예 11	C-13	6.43	514	40.9
실시예 12	C-14	6.55	513	41.1
실시예 13	C-15	6.63	517	41.3
실시예 14	C-16	6.42	515	43.0
실시예 15	C-18	6.57	516	42.1
실시예 16	C-19	6.75	516	42.3
실시예 17	C-21	6.73	518	42.0
실시예 18	C-22	6.66	517	40.5
실시예 19	C-24	6.62	514	39.7
실시예 20	D-13	6.64	518	41.2

실시예 21	D-14	6.45	519	41.5
실시예 22	D-15	6.66	514	42.0
실시예 23	D-17	6.48	517	41.5
실시예 24	D-18	6.53	516	43.3
실시예 25	D-20	6.70	515	41.2
실시예 26	D-22	6.52	518	41.2
실시예 27	D-23	6.66	517	41.3
실시예 28	D-24	6.51	514	40.7
실시예 29	E-14	6.46	518	41.4
실시예 30	E-15	6.65	514	42.5
실시예 31	E-16	6.49	515	41.3
실시예 32	E-17	6.57	518	41.4
실시예 33	E-19	6.49	517	41.6
실시예 34	E-20	6.72	517	40.6
실시예 35	E-21	6.64	516	41.8
실시예 36	E-23	6.49	518	42.9
실시예 37	F-14	6.52	521	42.0
실시예 38	F-15	6.57	512	41.2
실시예 39	F-16	6.49	513	41.3
실시예 40	F-17	6.50	520	43.2
실시예 41	F-18	6.55	511	43.5
실시예 42	F-19	6.70	518	41.1
실시예 43	F-20	6.72	517	42.4
실시예 44	F-21	6.76	516	41.9
실시예 45	F-22	6.70	513	42.7
실시예 46	F-24	6.70	515	42.7
실시예 47	G-13	6.68	518	42.1
실시예 48	G-14	6.71	518	44.5
실시예 49	G-15	6.77	517	43.3
실시예 50	G-16	6.77	517	43.3
비교예 1	CBP	6.93	516	38.2

[0484] 상기 표 1에 나타난 바와 같이, 본 발명에 따른 화합물(A-13 ~ G-16)을 녹색 유기 EL 소자의 발광층으로 사용하는 실시예 1~50의 녹색 유기 EL소자는, 종래 CBP를 사용한 비교예 1의 녹색 유기 EL 소자와 비교해 볼 때, 효율 및 구동전압 면에서 보다 우수한 성능을 나타내는 것을 알 수 있었다.

[0485] **[실시예 51 ~ 55] 적색 유기 EL 소자의 제조**

[0486] 합성예에서 합성된 화합물을 통상적으로 알려진 방법으로 고순도 승화정제를 한 후 아래의 과정에 따라 적색 유기 전계 발광 소자를 제작하였다.

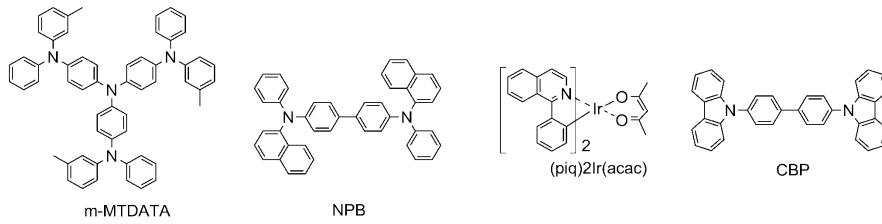
[0487] 먼저, ITO (Indium tin oxide)가 1500Å 두께로 박막 코팅된 유리 기판을 증류수 초음파로 세척하였다. 증류수 세척이 끝나면 이소프로필 알코올, 아세톤, 메탄올 등의 용제로 초음파 세척을 하고 건조시킨 후 UV OZONE 세정기 (Power sonic 405, 화신테크)로 이송시킨 다음 UV를 이용하여 상기 기판을 5분간 세정하고 진공 증착기로 기판을 이송하였다.

[0488] 이렇게 준비된 ITO 투명 전극 위에 m-MTDATA (60 nm)/TCTA (80 nm)/ 각각의 화합물 (A-19, C-20, D-21, E-22, G-17) + 10 % (piq)₂Ir(acac) (30nm)/BCP (10 nm)/Alq₃ (30 nm)/LiF (1 nm)/Al (200 nm) 순으로 적층하여 유기 전계 발광 소자를 제작하였다.

[0489] **[비교예 2]**

[0490] 발광층 형성시 발광 호스트 물질로서 CBP를 사용하는 것을 제외하고는, 상기 실시예 51과 동일한 과정으로 적색 유기 전계 발광 소자를 제작하였다.

[0491] 상기 실시예 51 ~ 55 및 비교예 2 에서 사용된 m-MTDATA, (piq)₂Ir(acac), CBP 및 BCP의 구조는 하기와 같다.



[0492]

[0494] [평가예]

[0495] 실시예 51 ~ 55 및 비교예 2에서 제작한 각각의 유기 전계 발광 소자에 대하여 전류밀도 10 mA/cm²에서의 구동전압 및 전류효율을 측정하고, 그 결과를 하기 표 2에 나타내었다.

표 2

[0496]

샘플	호스트	구동 전압(V)	전류효율(cd/A)
실시예 51	A-19	4.75	12.8
실시예 52	C-20	4.72	11.5
실시예 53	D-21	4.68	13.2
실시예 54	E-22	4.70	12.6
실시예 55	G-17	4.65	12.3
비교예 2	CBP	5.25	8.2

[0497] 상기 표 2에 나타난 바와 같이, 본 발명에 따른 화합물(A-19, C-20, D-21, E-22, G-17)을 적색 유기 전계 발광 소자의 발광층의 재료로 사용하는 실시예 51-55의 적색 유기 전계 발광 소자는, 종래 CBP를 발광층의 재료로 사용한 비교예 2의 적색 유기 전계 발광 소자와 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	KR1020160075246A	公开(公告)日	2016-06-29
申请号	KR1020140184994	申请日	2014-12-19
[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 JAEMEE 김재미 KIM SUNG MOO 김성무		
发明人	김재미 김성무		
IPC分类号	C09K11/06 H01L51/50 C07D487/04		
CPC分类号	C09K11/06 C07D487/04 H01L51/50 Y10S428/917		
外部链接	Espacenet		

摘要(译)

本发明涉及性能是改进的有机电致发光器件，其包括辐射能力是优异的新化合物和发光效率，驱动电压，寿命等，这包括在至少一个有机层中。

