

(12) 특허협력조약에 의하여 공개된 국제출원

(19) 세계지식재산권기구
국제사무국

(43) 국제공개일
2017년 6월 8일 (08.06.2017)



(10) 국제공개번호
WO 2017/095084 A1

- (51) 국제특허분류:
C07D 209/82 (2006.01) C09K 11/06 (2006.01)
C07D 403/04 (2006.01) H01L 51/00 (2006.01)
C07C 15/38 (2006.01) H01L 51/50 (2006.01)
C07D 403/10 (2006.01)
- (21) 국제출원번호: PCT/KR2016/013716
- (22) 국제출원일: 2016년 11월 25일 (25.11.2016)
- (25) 출원언어: 한국어
- (26) 공개언어: 한국어
- (30) 우선권정보:
10-2015-0171530 2015년 12월 3일 (03.12.2015) KR
- (71) 출원인: 주식회사 두산 (DOOSAN CORPORATION)
[KR/KR]; 04563 서울시 중구 장충단로 275, Seoul (KR).
- (72) 발명자: 배형찬 (BAE, Hyungchan); 16936 경기도 용인시 수지구 상현로 88, 285 동 304 호, Gyeonggi-do (KR). 김태형 (KIM, Taehyung); 13611 경기도 성남시 분당구 내정로 55, 326 동 1201 호, Gyeonggi-do (KR). 김영배 (KIM, Youngbae); 16316 경기도 수원시 장안구 정자천로 188 번길 64, 101 동 106 호, Gyeonggi-do (KR). 김희문 (KIM, Hoemoon); 16438 경기도 수원시 팔달구 화양로 50 번길 30, 119 동 1402 호, Gyeonggi-do (KR).

(74) 대리인: 특허법인 한벳 (HANBEOT PATENT & LAW FIRM); 03737 서울시 서대문구 충정로 7 구세군빌딩 15층, Seoul (KR).

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

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

공개:

— 국제조사보고서와 함께 (조약 제 21 조(3))



WO 2017/095084 A1

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

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

(57) Abstract: The present invention relates to a novel organic electroluminescent compound and an organic electroluminescent element using the same and, more specifically, to a novel compound having an excellent light-emitting ability, and an organic electroluminescent element which contains the novel compound in at least one organic material layer, thereby having improved properties such as high luminous efficiency, a low driving voltage, and a long lifespan .

(57) 요약서: 본 발명은 신규한 유기 전계 발광 화합물 및 이를 이용한 유기 전계 발광 소자에 관한 것으로, 보다 상세하게는 발광능이 우수한 신규 화합물 및 이를 하나 이상의 유기물층에 포함함으로써, 높은 발광효율, 낮은 구동전압, 긴 수명 등의 특성이 향상된 유기 전계 발광 소자에 관한 것이다.

명세서

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

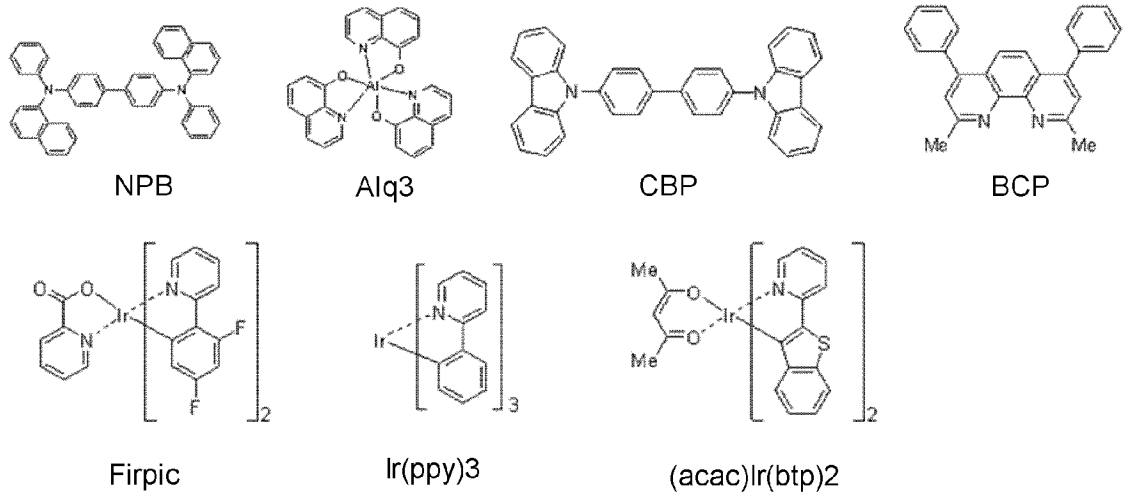
- [1] 본 발명은 신규한 유기 발광 화합물 및 이를 이용한 유기 전계 발광 소자에 관한 것으로, 보다 상세하게는 발광능이 우수한 화합물 및 이를 하나 이상의 유기물층에 포함함으로써, 발광효율, 구동전압, 수명 등의 특성이 향상된 유기 전계 발광 소자에 관한 것이다.

배경기술

- [2] 1950년대 Bernanose의 유기 박막 발광 관측을 시점으로 1965년 안트라센 단결정을 이용한 청색 전기발광으로 이어진 유기 전계 발광(electroluminescent, EL) 소자(이하, 간단히 '유기 EL 소자'로 칭함)에 대한 연구는 1987년 탕(Tang)에 의하여 정공층과 발광층의 기능층으로 나눈 적층구조의 유기 EL 소자가 제시되었다. 이후, 고효율, 고수명의 유기 EL 소자를 만들기 위하여, 소자 내 각각의 특징적인 유기물층을 도입하는 형태로 발전하여 왔으며, 이에 사용되는 특화된 물질의 개발로 이어졌다.
- [3] 유기 전계 발광 소자에서는 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.
- [4] 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.
- [5] 도펀트 물질은 유기 물질을 사용하는 형광 도펀트와 Ir, Pt 등의 중원자(heavy atoms)가 포함된 금속 착체 화합물을 사용하는 인광 도펀트로 나눌 수 있다. 이러한 인광 재료의 개발은 이론적으로 형광에 비해 4배까지의 발광 효율을 향상시킬 수 있어 인광 도펀트 뿐만 아니라 인광 호스트 재료들에 대해 관심이 집중되고 있다.
- [6] 현재까지 정공 주입층, 정공 수송층, 정공 차단층, 전자 수송층으로 사용되는 물질은, 하기 화학식으로 표현된 NPB, BCP, Alq₃ 등이 널리 알려져 있고, 발광 물질로는 안트라센 유도체들이 형광 도펀트/호스트 재료로서 보고되고 있다. 특히 발광재료 중 효율 향상 측면에서 큰 장점을 가지고 있는 인광 도펀트 재료로서는 Firpic, Ir(ppy)₃, (acac)Ir(btp)₂ 등과 같은 Ir을 포함하는 금속 착체

화합물이 청색, 녹색, 적색 도판트 재료로 사용되고 있다. 현재까지는 CBP가 인광 호스트 재료로 우수한 특성을 나타내고 있다.

[7]



[8] 그러나, 종래 발광 물질들은 발광 특성 측면에서는 유리한 면이 있으나, 유리전이온도가 낮고 열적 안정성이 매우 좋지 않기 때문에, 유기 EL 소자에서의 수명 측면에서 만족할만한 수준이 되지 못하고 있다. 따라서, 우수한 성능을 가지는 발광 물질의 개발이 요구되고 있다.

발명의 상세한 설명

기술적 과제

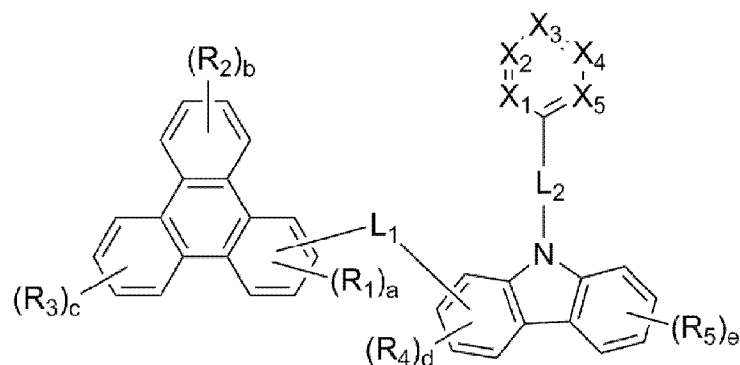
[9] 상기한 문제점을 해결하기 위해, 본 발명은 유기 전계 발광 소자에 적용할 수 있으며, 발광능이 우수한 신규 유기 화합물을 제공하는 것을 목적으로 한다.

[10] 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.

과제 해결 수단

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

[12] [화학식1]



[13] 상기 화학식 1에서,

- [14] L_1 및 L_2 는 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 단일 결합이거나, 혹은 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴렌기 및 치환 또는 비치환된 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴렌기로 이루어진 군에서 선택되고,
- [15] a 및 d는 0 내지 3의 정수이고,
- [16] b, c 및 e는 0 내지 4의 정수이고,
- [17] R_1 내지 R_5 는 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소, 중수소(D), 할로젠, 시아노, 치환 또는 비치환된 $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬기, 치환 또는 비치환된 $C_2\sim C_{40}$ 의 알케닐기, 치환 또는 비치환된 $C_2\sim C_{40}$ 의 알키닐기, 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴기, 치환 또는 비치환된 핵원자수 5 내지 40의 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬옥시기, 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴아민기, 치환 또는 비치환된 $C_3\sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬실릴기, 치환 또는 비치환된 $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬보론기, 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴보론기, 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴포스핀기, 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴포스핀옥사이드기 및 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택되며, 다만 상기 R_1 내지 R_5 가 각각 복수인 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이하고,
- [18] X_1 내지 X_5 는 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 N 또는 $C(R_6)$ 이며, 다만 X_1 내지 X_5 중 적어도 하나는 N이고, 상기 R_6 이 복수인 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이하고,
- [19] R_6 은 수소, 중수소(D), 할로젠, 시아노, 치환 또는 비치환된 $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬기, 치환 또는 비치환된 $C_2\sim C_{40}$ 의 알케닐기, 치환 또는 비치환된 $C_2\sim C_{40}$ 의 알키닐기, 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴기, 치환 또는 비치환된 핵원자수 5 내지 40의 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬옥시기, 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴아민기, 치환 또는 비치환된 $C_3\sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬실릴기, 치환 또는 비치환된 $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬보론기, 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴보론기, 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴포스핀기, 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴포스핀옥사이드기 및 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택되거나, 혹은 인접한 기와 결합하여 축합 고리를 형성할 수 있으며,
- [20] 상기 L_1, L_2 의 아릴렌기 및 헤테로아릴렌기와, R_1 내지 R_6 의 알킬기, 알케닐기, 알키닐기, 아릴기, 헤테로아릴기, 아릴옥시기, 알킬옥시기, 아릴아민기, 시클로알킬기, 헤테로시클로알킬기, 알킬실릴기, 알킬보론기, 아릴보론기, 아릴포스핀기, 아릴포스핀옥사이드기 및 아릴실릴기는 각각 독립적으로 중수소(D), 할로젠, 시아노, 치환 또는 비치환된 $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬기, 치환 또는 비치환된 $C_2\sim C_{40}$ 의 알케닐기, 치환 또는 비치환된 $C_2\sim C_{40}$ 의 알키닐기, 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴기, 치환 또는 비치환된 핵원자수 5 내지 40의

헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 $C_6 \sim C_{40}$ 의 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬옥시기, 치환 또는 비치환된 $C_6 \sim C_{40}$ 의 아릴아민기, 치환 또는 비치환된 $C_3 \sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬실릴기, 치환 또는 비치환된 $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬보론기, 치환 또는 비치환된 $C_6 \sim C_{40}$ 의 아릴보론기, 치환 또는 비치환된 $C_6 \sim C_{40}$ 의 아릴포스핀기, 치환 또는 비치환된 $C_6 \sim C_{40}$ 의 아릴포스핀옥사이드기 및 치환 또는 비치환된 $C_6 \sim C_{40}$ 의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상의 치환기로 치환될 수 있고, 이때 상기 치환기가 복수인 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

[21] 또한, 본 발명은 (i) 양극, (ii) 음극, 및 (iii) 상기 양극과 음극 사이에 개재(介在)된 1층 이상의 유기물층을 포함하는 유기 전계 발광 소자로서, 상기 1층 이상의 유기물층 중 적어도 하나는 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하는 것을 특징으로 하는 유기 전계 발광 소자를 제공한다.

[22] 여기서, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하는 1층 이상의 유기물층은 정공 주입층, 정공 수송층, 발광 보조층, 발광층, 전자 수송층 및 전자 주입층으로 이루어진 군에서 선택될 수 있다. 이때, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 발광층의 인광 호스트로 사용될 수 있다.

발명의 효과

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

[24] 특히, 본 발명의 화학식 1로 표시되는 화합물을 인광 호스트 재료로 사용할 경우, 종래의 호스트 재료에 비해 낮은 구동전압, 높은 효율 및 긴 수명을 갖는 유기 전계 발광 소자를 제조할 수 있고, 나아가 성능 및 수명이 향상된 풀 칼라 디스플레이 패널도 제조할 수 있다.

발명의 실시를 위한 형태

[25] 이하, 본 발명을 상세히 설명한다.

[26]

[27] 1. 신규 유기 화합물

[28] 본 발명에 따른 신규 유기 화합물은 트리페닐렌에 카바졸이 링커(예컨대, 아릴렌기, 헤테로아릴렌기)를 통해 결합되어 기본 골격을 이루며, 이러한 기본 골격에 다양한 치환체가 도입되어 상기 화학식 1로 표시되는 것을 특징으로 한다.

[29] 보다 구체적으로, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 트리페닐렌과 카바졸이 결합된 기본 골격에서 카바졸의 N 위치에 헤테로아릴기와 같이 전자 흡수성이 큰 전자 끌개기(EWG)가 도입된 구조를 가지는 것을 특징으로 한다.

[30] 이러한 화학식 1로 표시되는 화합물은 종래 유기 전계 발광 소자용 재료[예: 4,4-dicarbazolybiphenyl (이하, 'CBP'라 함)]에 비해 높은 분자량을 갖기 때문에,

유리전이온도가 높아 열적 안정성이 우수할 뿐만 아니라 발광능이 우수하다. 따라서, 상기 화학식 1의 화합물을 유기 전계 발광 소자의 유기물층에 적용할 경우에는 소자의 구동전압, 효율, 수명 등이 향상될 수 있다.

[31] 일반적으로 유기 전계 발광 소자의 인광 발광층에서는 호스트 물질의 삼중항 에너지 갭이 도펀트 물질의 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. 따라서, 상기 화학식 1의 화합물은 삼중항 에너지가 높고, 넓은 일중항 에너지 준위와 높은 삼중항 에너지 준위를 가지는 트리페닐렌과 카바졸이 결합되어 있는 기본 골격에 특정의 치환기(예컨대, 헤테로아릴기)가 도입됨으로써, 에너지 준위가 도펀트보다 높게 조절될 수 있어 호스트 물질로 사용될 수 있다. 이와 같이, 본 발명에 따른 화학식 1의 화합물은 유기 전계 발광 소자의 유기물층 재료로 사용될 수 있으며, 바람직하게는 발광층 재료(청색, 녹색 및/또는 적색의 인광 호스트 재료)로 사용될 수 있다.

[32] 또한, 상기 화학식 1의 화합물은 트리페닐렌에 카바졸이 링커(예컨대, 헤테로아릴렌기)를 통해 결합되어 화합물의 분자량이 유의적으로 증대됨으로써, 유리전이온도가 향상될 수 있고, 이로 인해 종래의 발광 재료(예를 들어, CBP) 또는 트리페닐렌과 카바졸이 직접 연결된 종래의 발광 재료(예를 들어, 9-(3-(4,6-diphenyl-1,3,5-triazin-2-yl)phenyl)-3-(triphenylen-2-yl)-9H-carbazole(이하 'A1'이라 함))에 비해 높은 열적 안정성을 가질 수 있다. 또한, 상기 화학식 1의 화합물은 유기물층의 결정화 억제에도 효과가 있다.

[33] 또한, 상기 화학식 1의 화합물은 상기 기본 골격에서 카바졸의 N 위치에 전자끌개기(EWG)인 질소 함유 헤테로아릴기(피리미딘, 트리아진 등)가 도입되어 바이폴라 전하이동(Bipolar charge transport) 특성을 가지므로, 전하 균형(Charge balance)이 향상된다. 이로 인해, 상기 기본 골격에서 카바졸의 N 위치에 알킬기 또는 아릴기가 도입된 종래의 발광 재료(예를 들어, 9-phenyl-3-(3-(triphenylen-2-yl)phenyl)-9H-carbazole(이하, 'A2'이라 함)) 또는 상기 기본 골격에서 카바졸의 N 위치에 다른 카바졸이 도입된 종래의 발광 재료(예를 들어, 9-phenyl-3'-(3-(triphenylen-2-yl)phenyl)-9H-3,9'-bicarbazole(이하, 'A3'라 함)에 비해 높은 효율 특성을 가질 수 있다.

[34] 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.

[35]

[36] 본 발명에 따른 신규 화합물은 트리페닐렌에 카바졸이 링커를 통해 결합되면서 다양한 치환체가 도입되는 것으로, 상기 화학식 1로 표시된다.

[37] 구체적으로, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물에서, L_1 및 L_2 는 서로

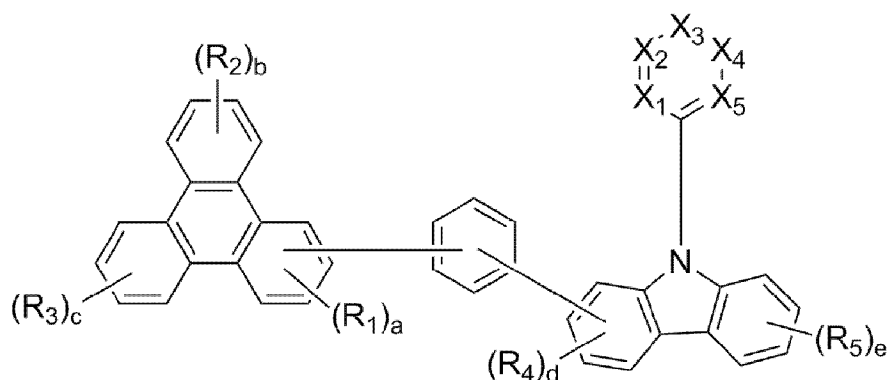
- 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 단일 결합이거나, 혹은 2가의 연결기(linker)로서 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴렌기 및 치환 또는 비치환된 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴렌기로 이루어진 군에서 선택된다.
- [38] 상기 아릴렌기 및 헤테로아릴렌기의 비제한적인 예로는 페닐렌기, 비페닐렌기, 나프틸렌기, 안트라세닐렌기, 인데닐렌기, 피란트레닐렌기, 카르바졸릴렌기, 티오펜릴렌기, 인돌릴렌기, 푸리닐렌기, 퀴놀리닐렌기, 피롤릴렌기, 이미다졸릴렌기, 옥사졸릴렌기, 티아졸릴렌기, 트리아졸릴렌기, 피리디닐렌기, 피리미디닐렌기 등이 있다.
- [39] 이때, 상기 L_1 는 바람직하게 2가의 연결기일 수 있고, 더욱 바람직하게는 페닐렌기 또는 비페닐렌기일 수 있다.
- [40] 또한, 상기 L_2 는 바람직하게 단일 결합이거나, 혹은 2가의 연결기일 수 있고, 더욱 바람직하게는 단일 결합, 페닐렌기 또는 비페닐렌기일 수 있다.
- [41] a 및 d는 0 내지 3의 정수이고, b, c 및 e는 0 내지 4의 정수이다. 이때, a 내지 e가 0일 경우, 수소가 각각의 치환기 R_1 내지 R_5 로 치환되지 않은 것을 의미한다.
- [42] 상기 a 및 d가 1 내지 3의 정수이고, b, c 및 e가 1 내지 4의 정수일 경우, R_1 내지 R_5 는 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 중수소(D), 할로젠, 시아노, 치환 또는 비치환된 $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬기, 치환 또는 비치환된 $C_2\sim C_{40}$ 의 알케닐기, 치환 또는 비치환된 $C_2\sim C_{40}$ 의 알키닐기, 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴기, 치환 또는 비치환된 핵원자수 5 내지 40의 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬옥시기, 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴아민기, 치환 또는 비치환된 $C_3\sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬실릴기, 치환 또는 비치환된 $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬보론기, 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴보론기, 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴포스핀기, 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴포스핀옥사이드기 및 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택된다. 다만, 상기 R_1 내지 R_5 가 각각 복수인 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이하다.
- [43] X_1 내지 X_5 는 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 N 또는 $C(R_6)$ 이다. 다만, X_1 내지 X_5 중 적어도 하나는 N이고, 상기 R_6 이 복수인 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이하다.
- [44] 이때, 바람직하게는, 상기 X_1 내지 X_5 중 두 개 이상은 N이고, 나머지는 $C(R_6)$ 일 수 있다.
- [45] R_6 은 수소, 중수소(D), 할로젠, 시아노, 치환 또는 비치환된 $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬기, 치환 또는 비치환된 $C_2\sim C_{40}$ 의 알케닐기, 치환 또는 비치환된 $C_2\sim C_{40}$ 의 알키닐기, 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴기, 치환 또는 비치환된 핵원자수 5 내지 40의 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬옥시기, 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴아민기, 치환 또는 비치환된 $C_3\sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 핵원자수 3 내지 40의

헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬실릴기, 치환 또는 비치환된 $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬보론기, 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴보론기, 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴포스핀기, 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴포스핀옥사이드기 및 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택되거나, 혹은 인접한 기와 결합하여 축합 고리를 형성할 수 있다.

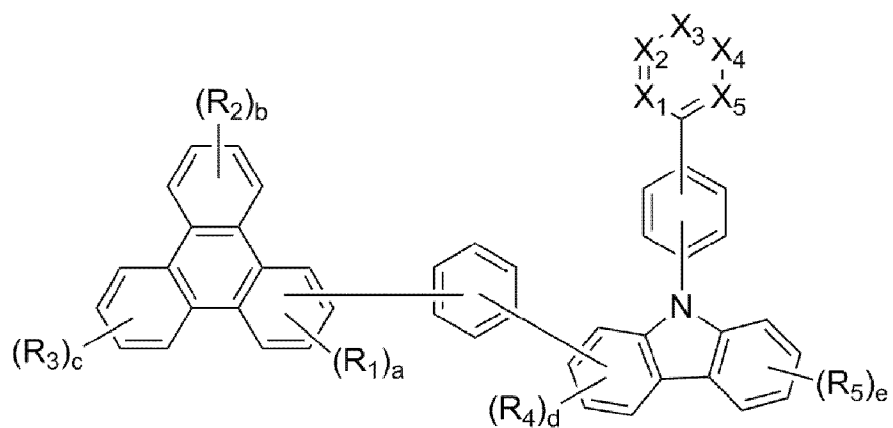
- [46] 이때, 상기 L_1, L_2 의 아릴렌기 및 헤테로아릴렌기와, R_1 내지 R_6 의 알킬기, 알케닐기, 알키닐기, 아릴기, 헤테로아릴기, 아릴옥시기, 알킬옥시기, 아릴아민기, 시클로알킬기, 헤테로시클로알킬기, 알킬실릴기, 알킬보론기, 아릴보론기, 아릴포스핀기, 아릴포스핀옥사이드기 및 아릴실릴기는 각각 독립적으로 중수소(D), 할로젠, 시아노, 치환 또는 비치환된 $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬기, 치환 또는 비치환된 $C_2\sim C_{40}$ 의 알케닐기, 치환 또는 비치환된 $C_2\sim C_{40}$ 의 알키닐기, 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴기, 치환 또는 비치환된 핵원자수 5 내지 40의 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬옥시기, 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴아민기, 치환 또는 비치환된 $C_3\sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬실릴기, 치환 또는 비치환된 $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬보론기, 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴보론기, 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴포스핀기, 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴포스핀옥사이드기 및 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상의 치환기로 치환될 수 있고, 이때 상기 치환기가 복수인 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

- [47] 이러한 화학식 1로 표시되는 화합물은 하기 화학식 2 내지 7 중 어느 하나로 보다 구체화될 수 있다. 그러나, 이에 특별히 한정되지 않는다.

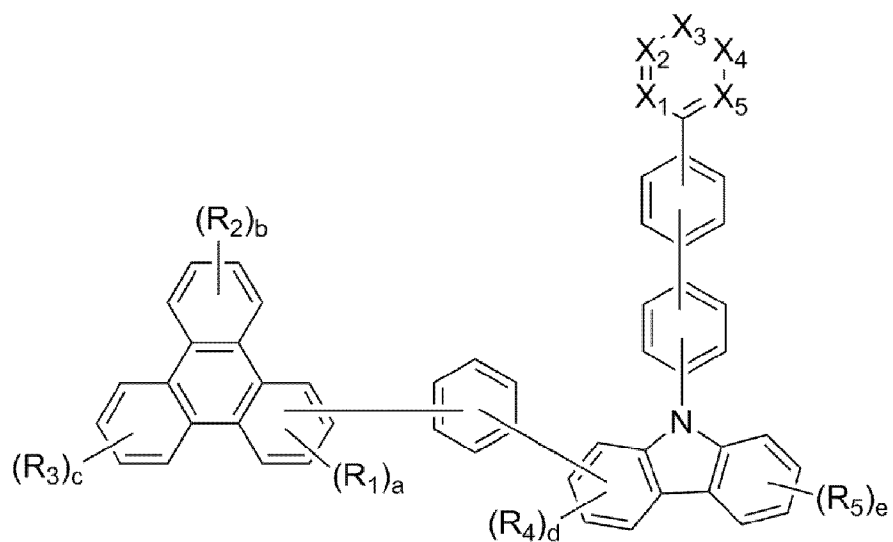
- [48] [화학식2]



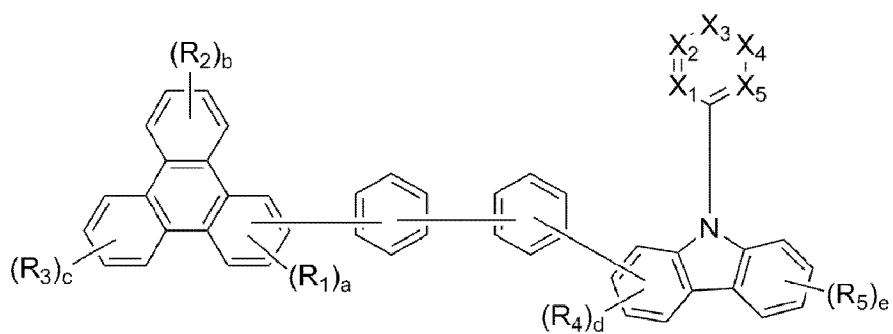
[49] [화학식3]



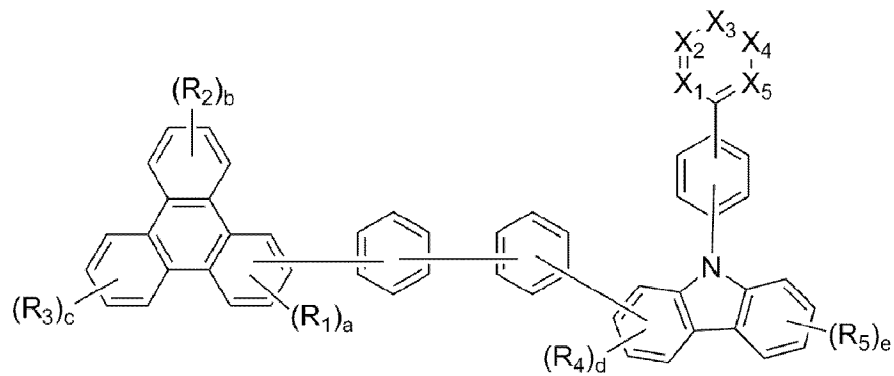
[50] [화학식4]



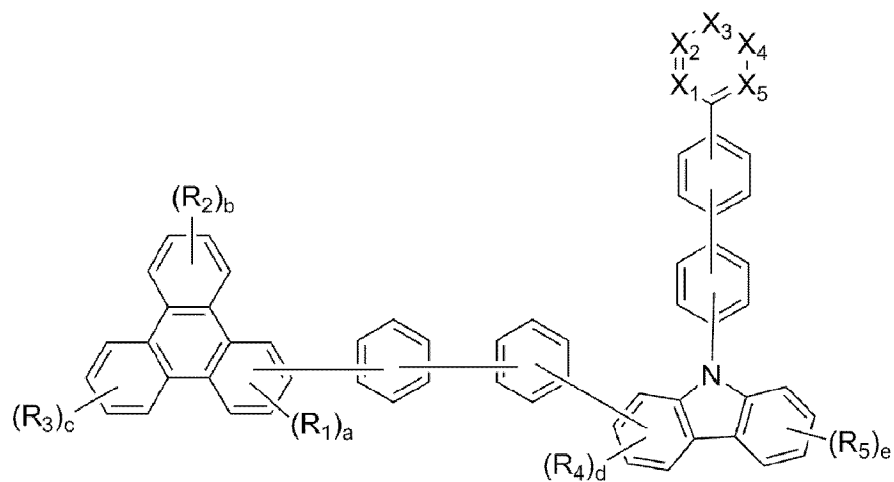
[51] [화학식5]



[52] [화학식6]



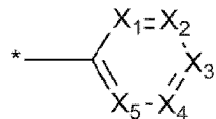
[53] [화학식7]



[54] 상기 화학식 2 내지 7에서,

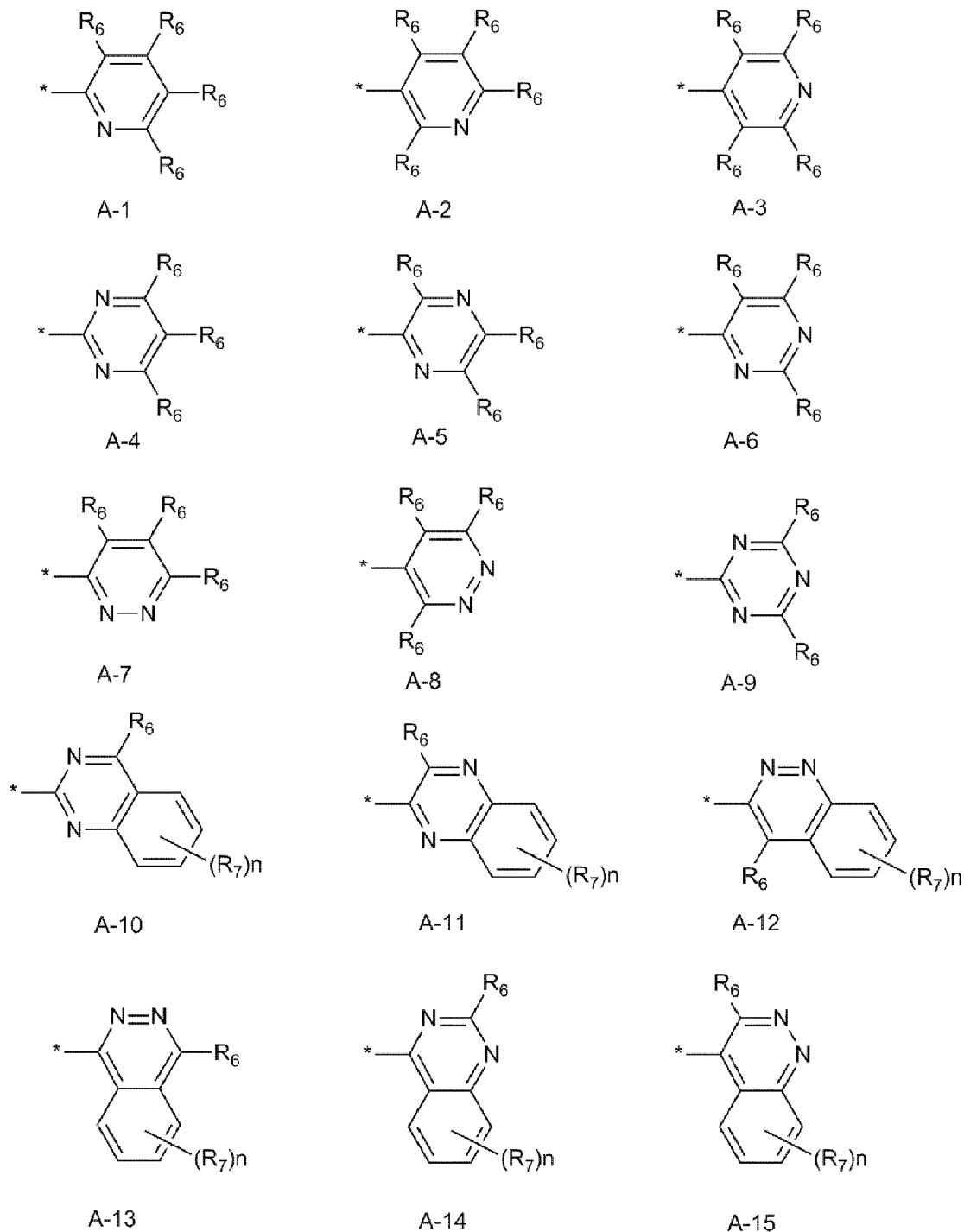
[55] a 내지 e, R₁ 내지 R₅, X₁ 내지 X₅는 각각 상기 화학식 1에서 정의한 바와 같다.

[56] 이때, 상기 화학식 1에서



(*는 L₂와 결합이 이루어지는 부위)로 표시되는 구조(치환체)는 하기 화학식 A-1 내지 A-15 중 어느 하나로 보다 구체화될 수 있다. 그러나, 이에 특별히 한정되지 않는다. 이러한 치환체를 포함하는 상기 화학식 1의 화합물은 유기 전계 발광 소자의 발광층에 적용되어 효율 및 수명을 더 향상시킬 수 있다.

[57]



[58] 상기 화학식 A-1 내지 A-15에서, R_6 은 각각 상기 화학식 1에서 정의한 바와 같다.

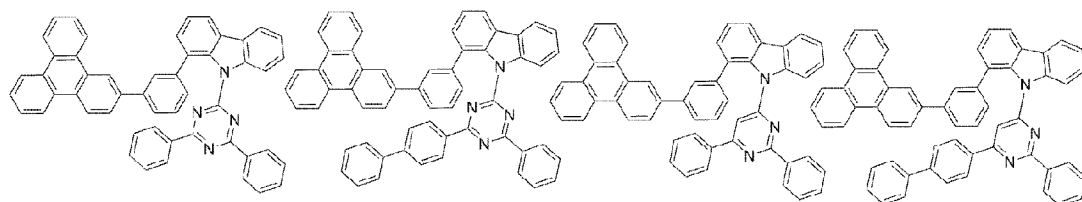
[59] n 은 0 내지 4의 정수이고, 상기 n 이 0이면 수소가 치환기 R_7 로 치환되지 않는 것을 의미한다.

[60] 상기 n 이 1 내지 4인 경우, R_7 은 중수소(D), 할로젠, 시아노, 치환 또는 비치환된 $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬기, 치환 또는 비치환된 $C_2 \sim C_{40}$ 의 알케닐기, 치환 또는 비치환된 $C_2 \sim C_{40}$ 의 알키닐기, 치환 또는 비치환된 $C_6 \sim C_{40}$ 의 아릴기, 치환 또는 비치환된

핵원자수 5 내지 40의 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬옥시기, 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴아민기, 치환 또는 비치환된 $C_3\sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬실릴기, 치환 또는 비치환된 $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬보론기, 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴보론기, 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴포스핀기, 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴포스핀옥사이드기 및 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택되거나, 혹은 인접한 기와 결합하여 축합 고리를 형성할 수 있다. 다만, 상기 R_7 이 복수인 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이하다.

- [61] 상기 R_7 의 알킬기, 알케닐기, 알키닐기, 아릴기, 헤테로아릴기, 아릴옥시기, 알킬옥시기, 아릴아민기, 시클로알킬기, 헤테로시클로알킬기, 알킬실릴기, 알킬보론기, 아릴보론기, 아릴포스핀기, 아릴포스핀옥사이드기 및 아릴실릴기는 각각 독립적으로 중수소(D), 할로젠, 시아노, 치환 또는 비치환된 $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬기, 치환 또는 비치환된 $C_2\sim C_{40}$ 의 알케닐기, 치환 또는 비치환된 $C_2\sim C_{40}$ 의 알키닐기, 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴기, 치환 또는 비치환된 핵원자수 5 내지 40의 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬옥시기, 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴아민기, 치환 또는 비치환된 $C_3\sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬실릴기, 치환 또는 비치환된 $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬보론기, 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴보론기, 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴포스핀기, 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴포스핀옥사이드기 및 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상의 치환기로 치환될 수 있고, 이때 상기 치환기가 복수인 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이할 수 있다.
- [62] 본 발명의 화학식 1로 표시되는 화합물은 하기 예시되는 화합물들로 보다 구체화될 수 있다. 그러나, 상기 화학식 1의 화합물이 하기 예시된 것들에 의해 한정되는 것은 아니다.

[63]

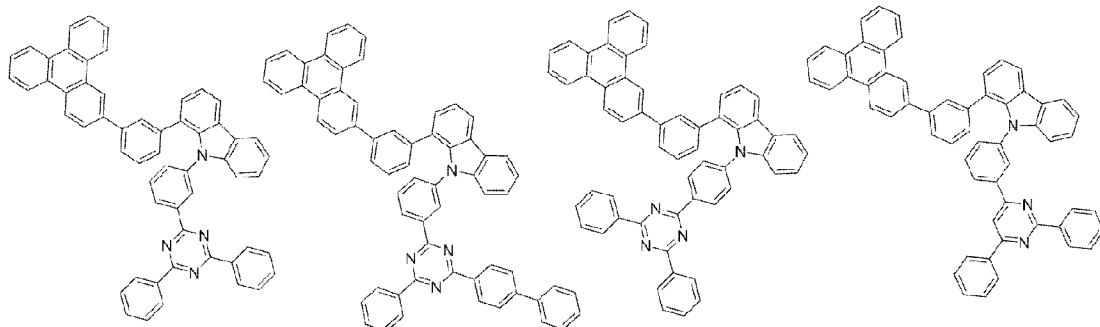


Inv1

Inv2

Inv3

Inv4

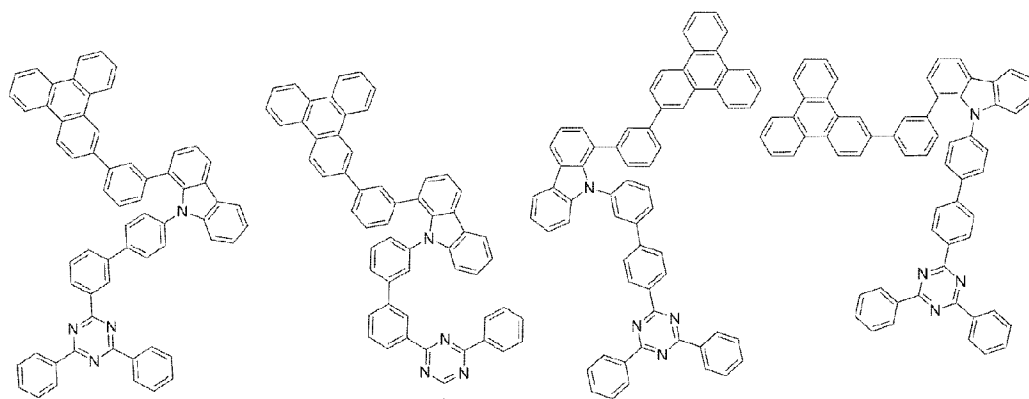


Inv5

Inv6

Inv7

Inv8



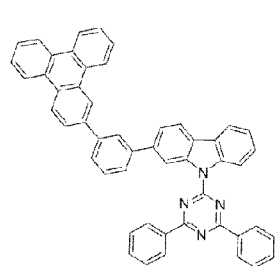
Inv9

Inv10

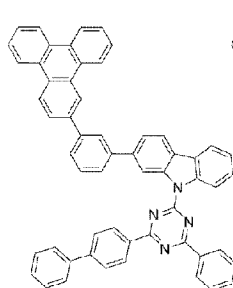
Inv11

Inv12

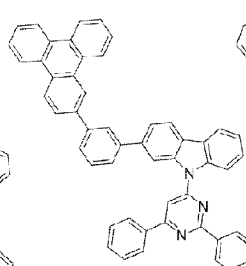
[64]



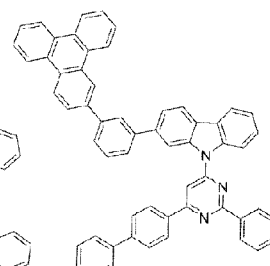
Inv13



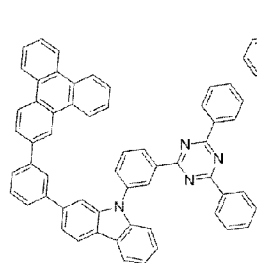
Inv14



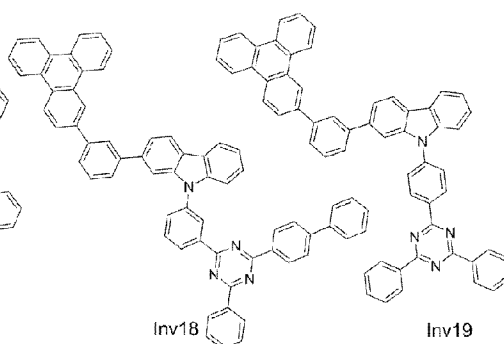
Inv15



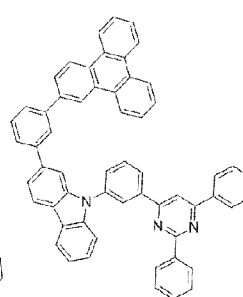
Inv16



Inv17

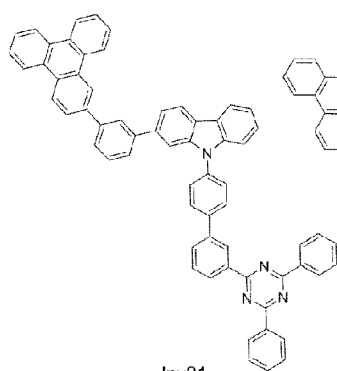


Inv18

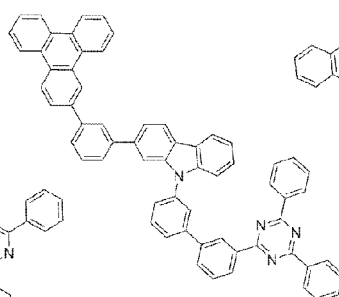


Inv19

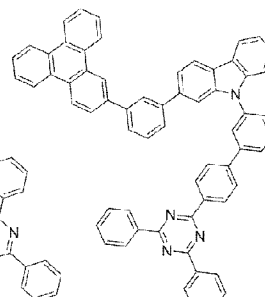
Inv20



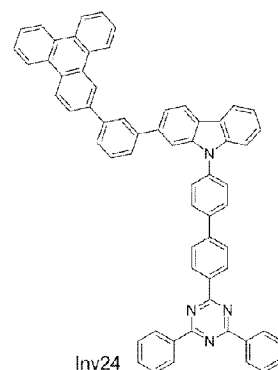
Inv21



Inv22

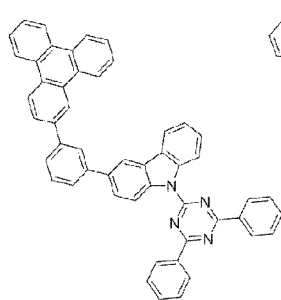


Inv23

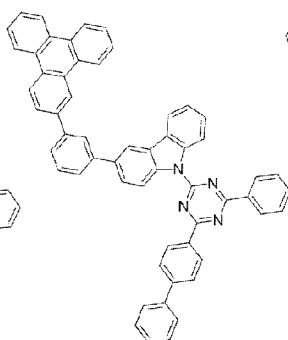


Inv24

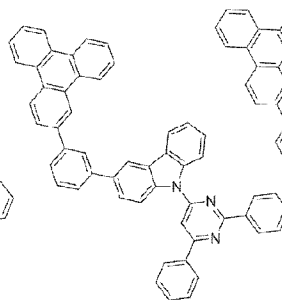
[65]



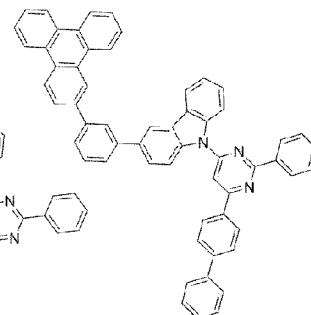
Inv25



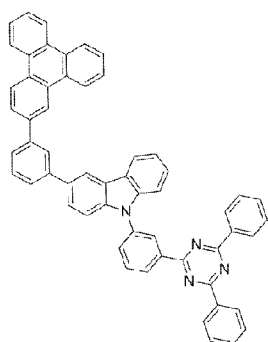
Inv26



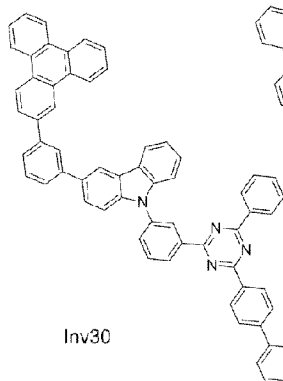
Inv27



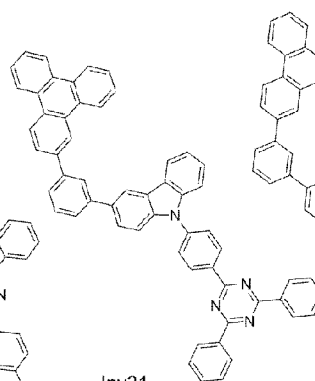
Inv28



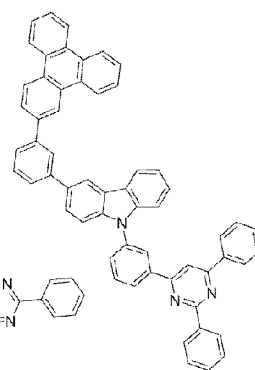
Inv29



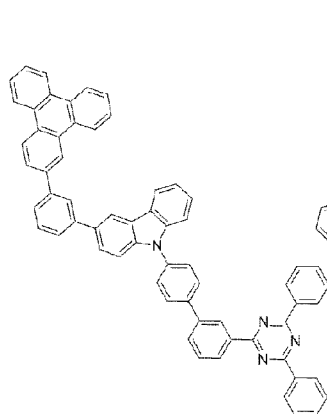
Inv30



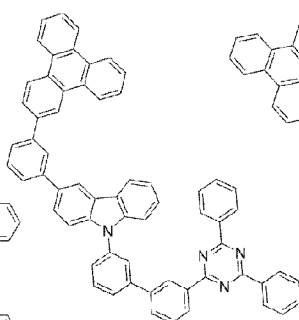
Inv31



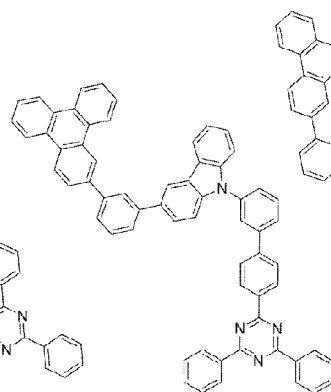
Inv32



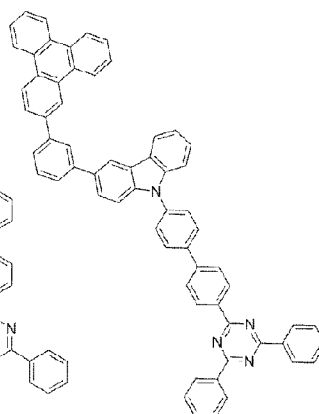
Inv33



Inv34

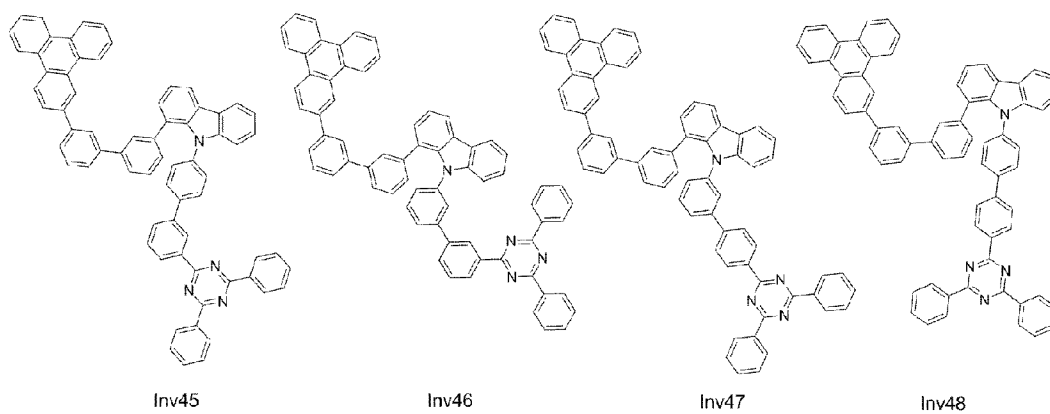
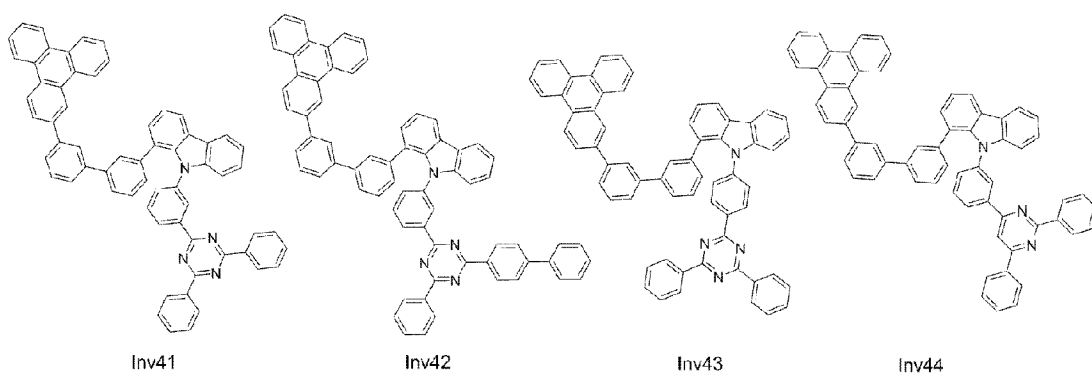
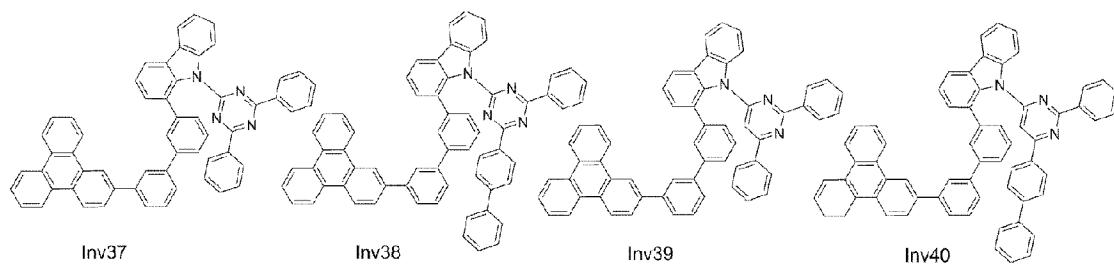


Inv35

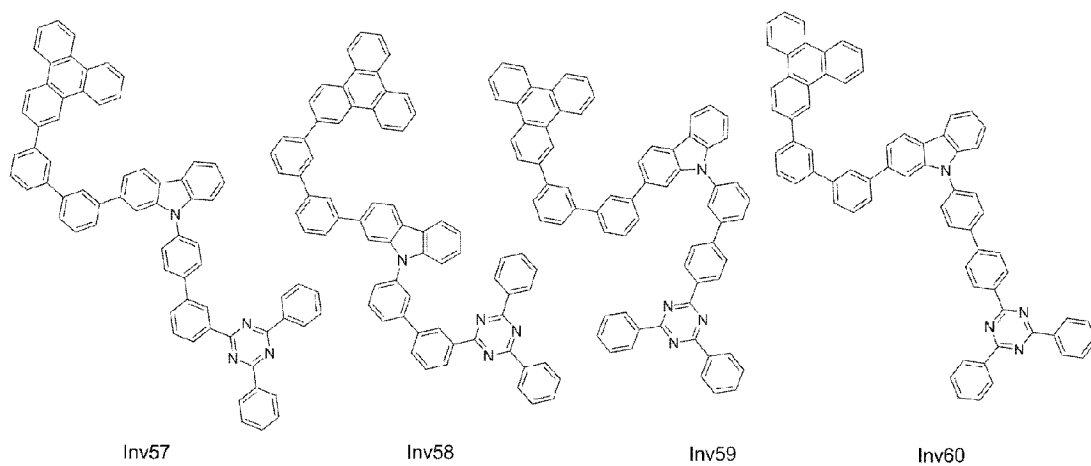
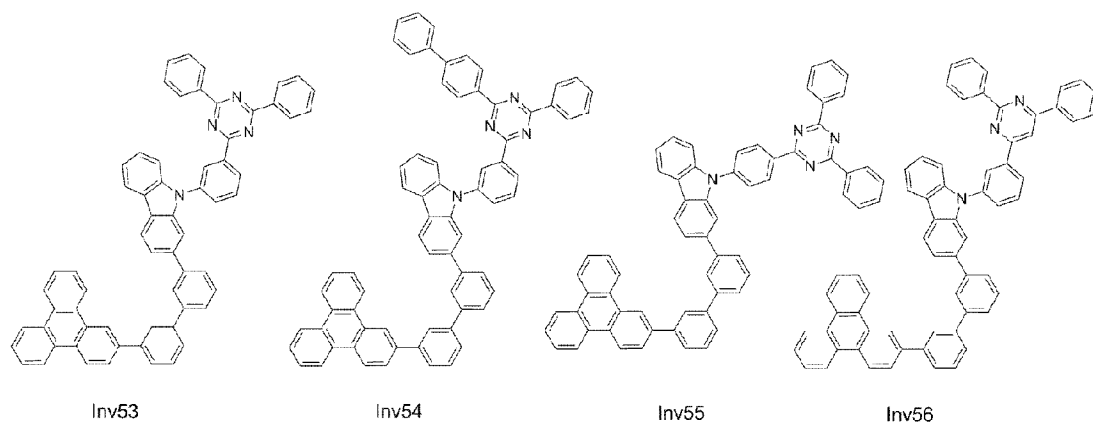
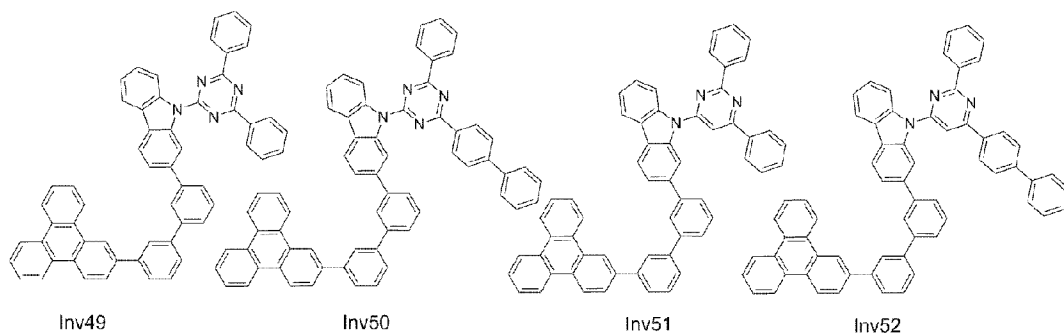


Inv36

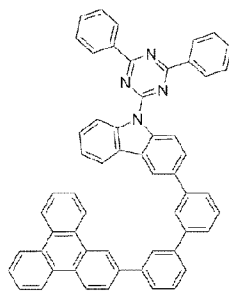
[66]



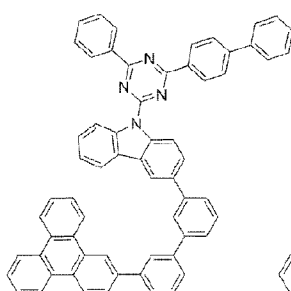
[67]



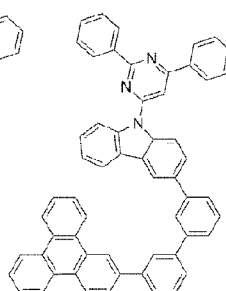
[68]



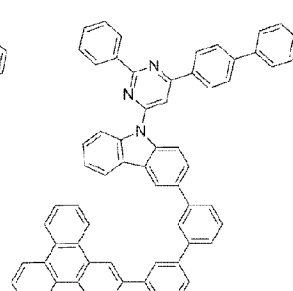
Inv61



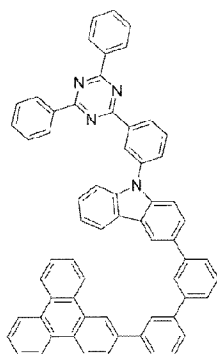
Inv62



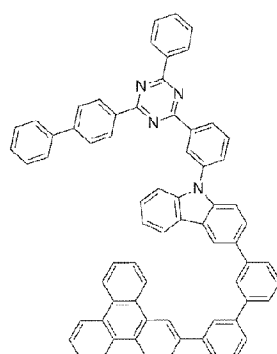
Inv63



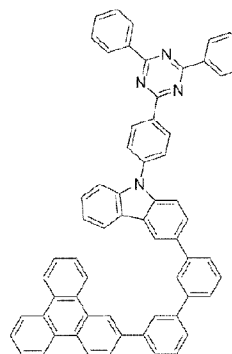
Inv64



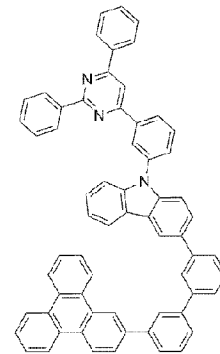
Inv65



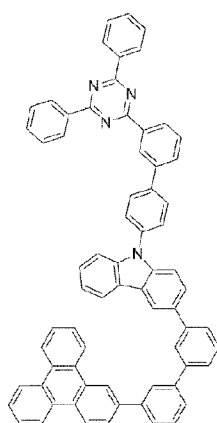
Inv66



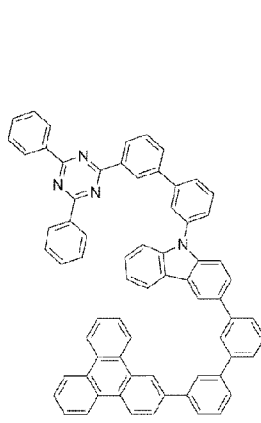
Inv67



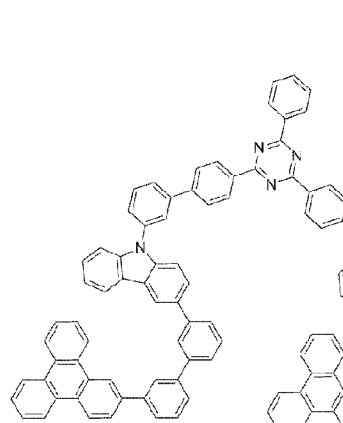
Inv68



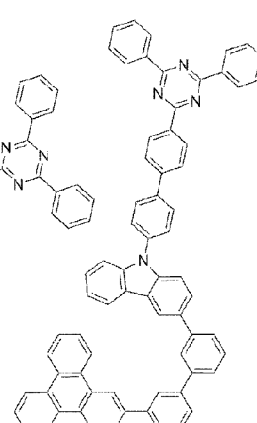
Inv69



Inv70

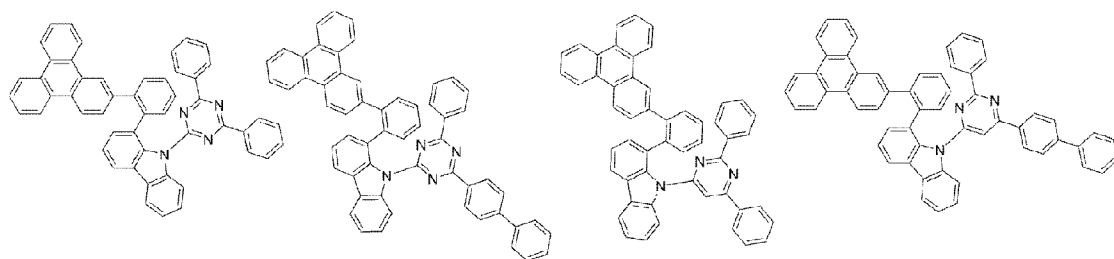


Inv71



Inv72

[69]

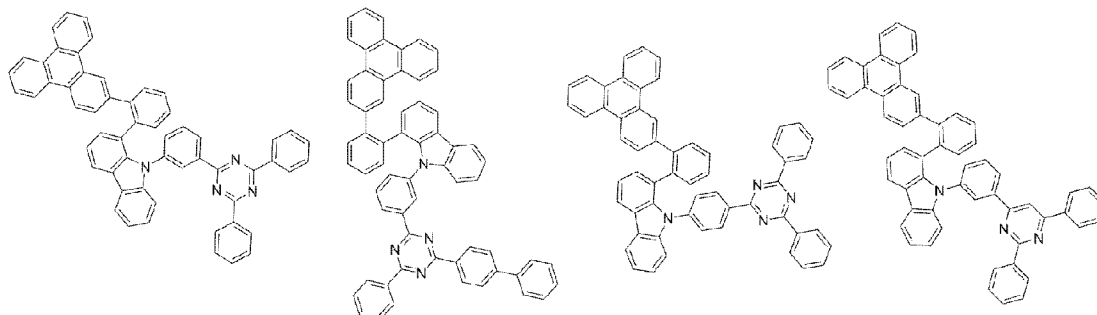


Inv73

Inv74

Inv75

Inv76

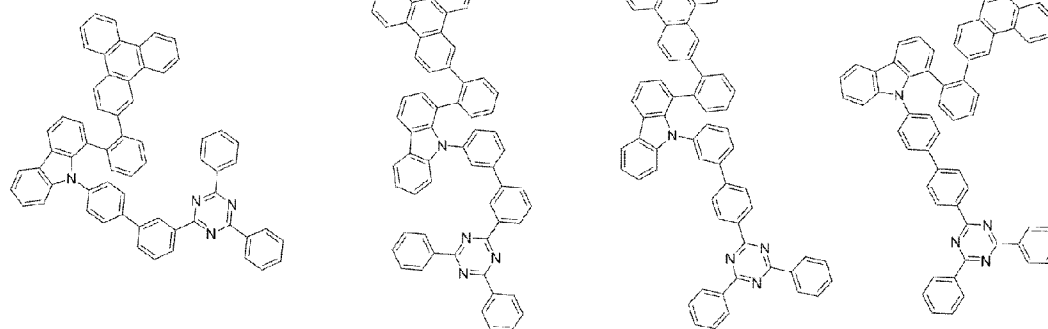


Inv77

Inv78

Inv79

Inv80



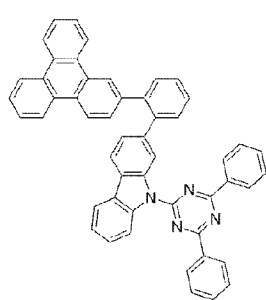
Inv81

Inv82

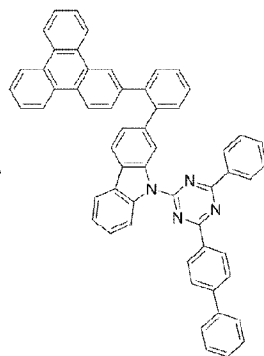
Inv83

Inv84

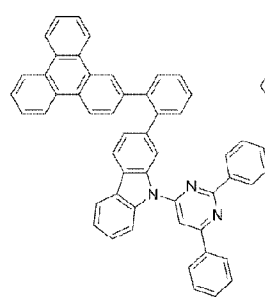
[70]



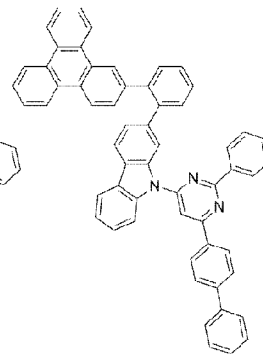
Inv85



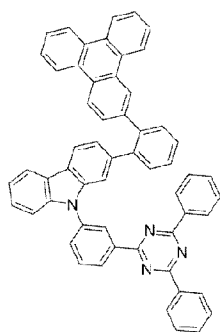
Inv86



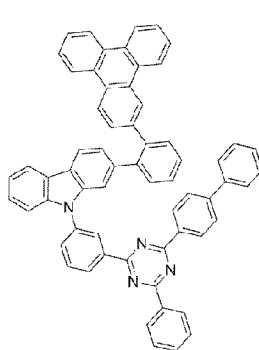
Inv87



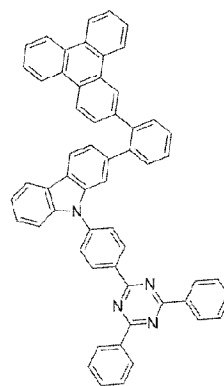
Inv88



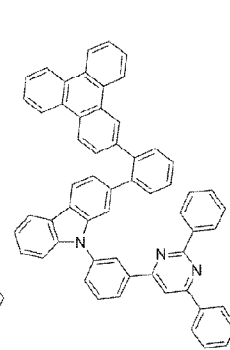
Inv89



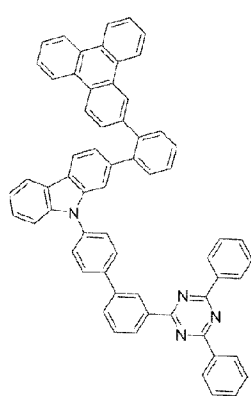
Inv90



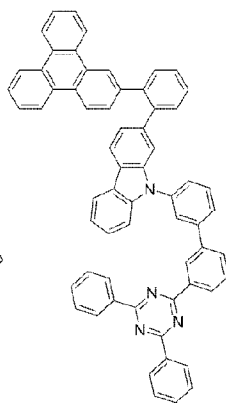
Inv91



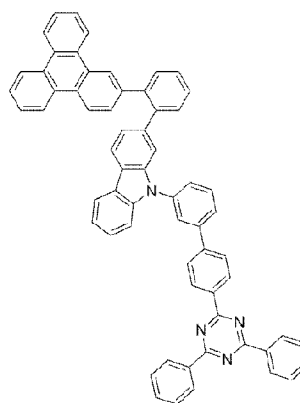
Inv92



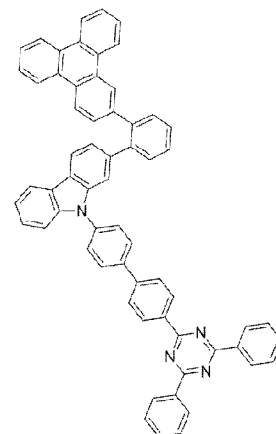
Inv93



Inv94

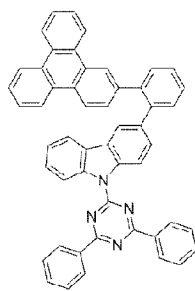


Inv95

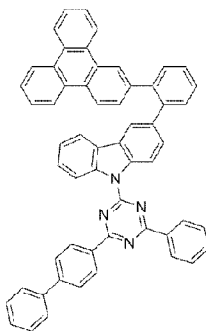


Inv96

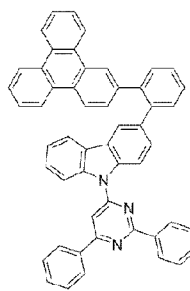
[71]



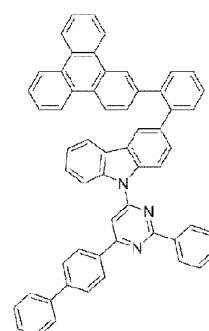
Inv97



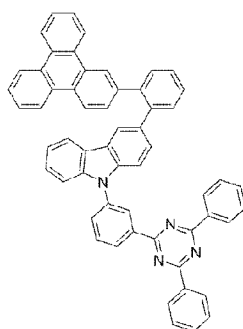
Inv98



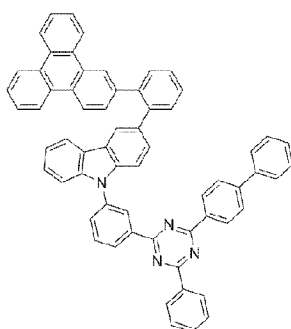
Inv99



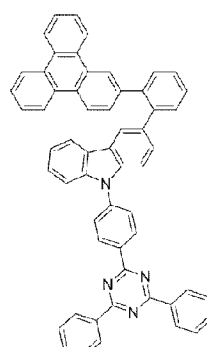
Inv100



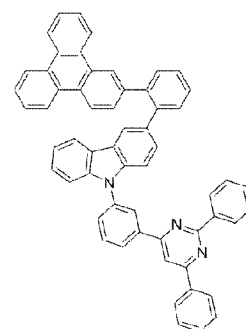
Inv101



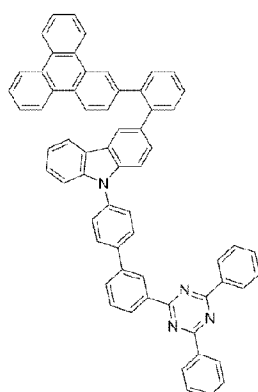
Inv102



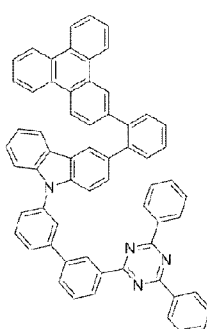
Inv103



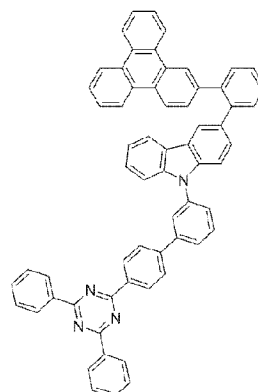
Inv104



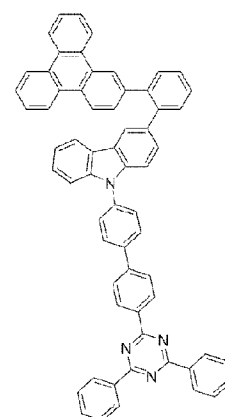
Inv105



Inv106

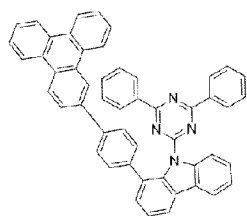


Inv107

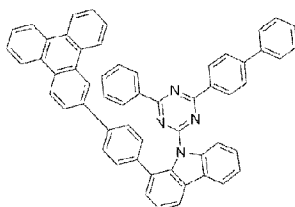


Inv108

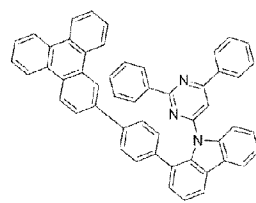
[72]



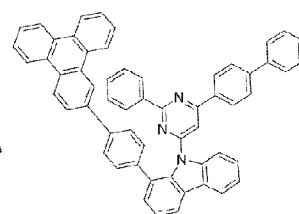
Inv109



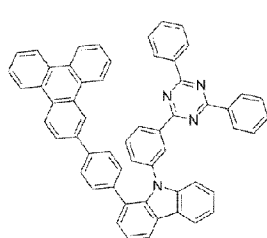
Inv110



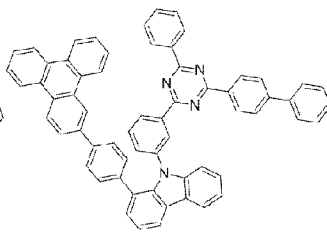
Inv111



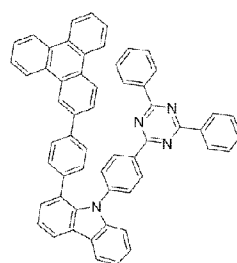
Inv112



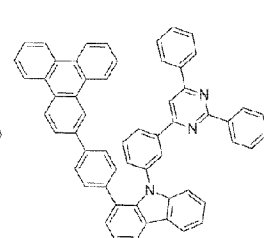
Inv113



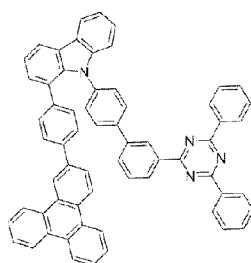
Inv114



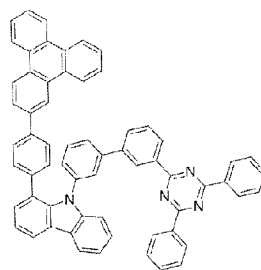
Inv115



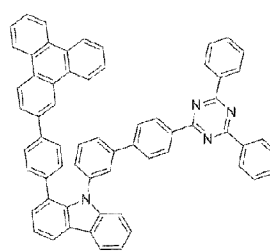
Inv116



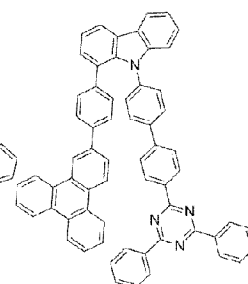
Inv117



Inv118

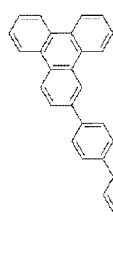


Inv119

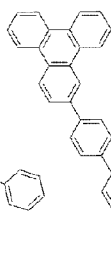


Inv120

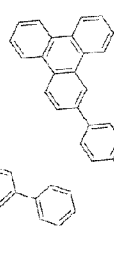
[73]



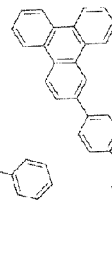
Inv121



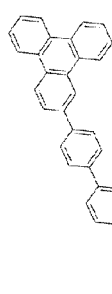
Inv122



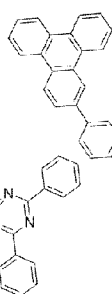
Inv123



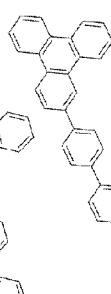
Inv124



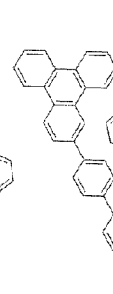
Inv125



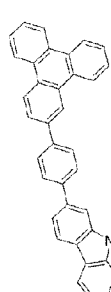
Inv126



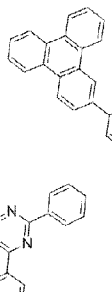
Inv127



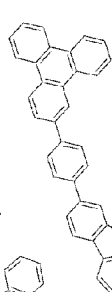
Inv128



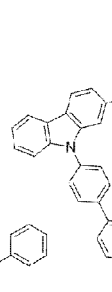
Inv129



Inv130

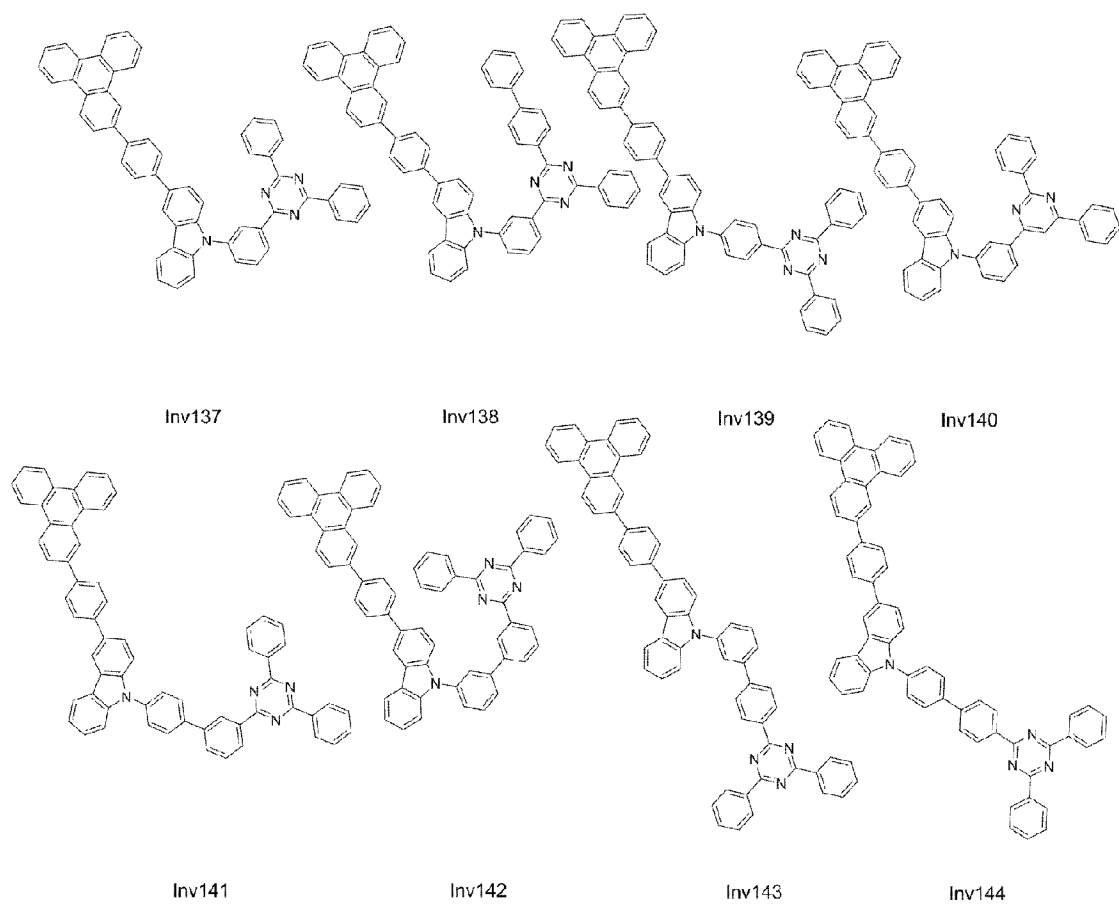
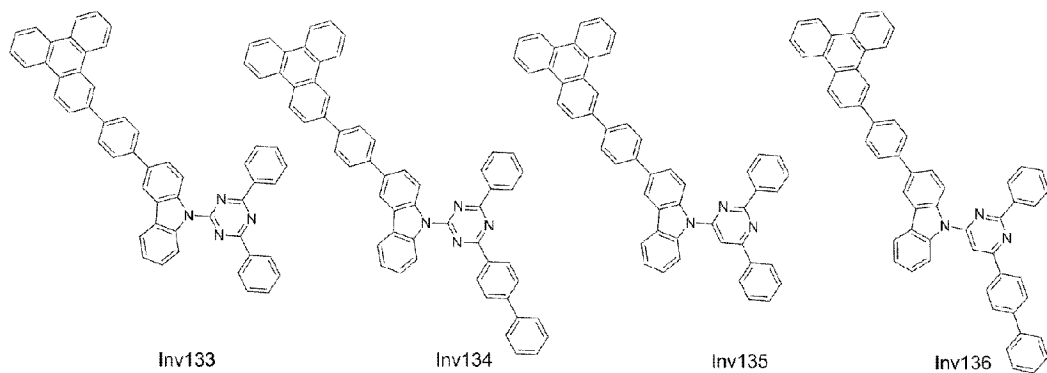


Inv131

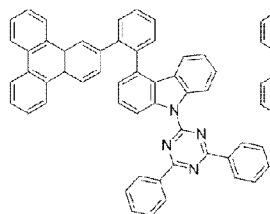


Inv132

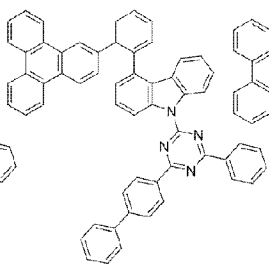
[74]



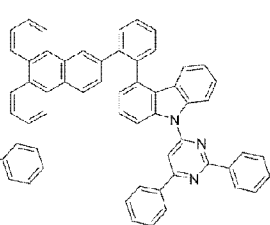
[75]



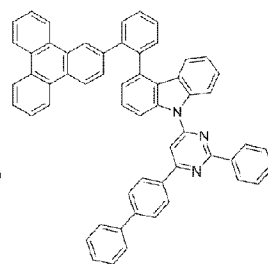
Inv145



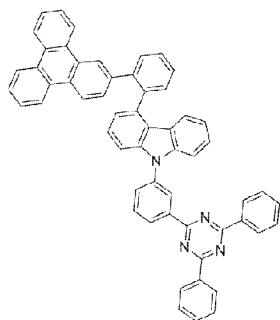
Inv146



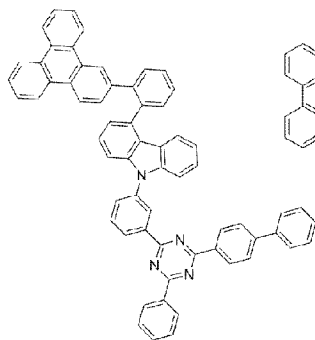
Inv147



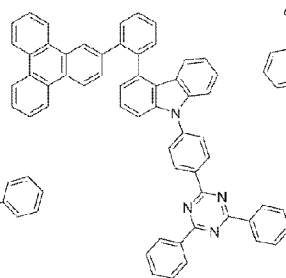
Inv148



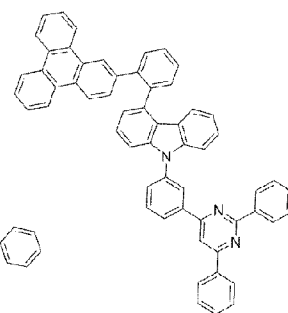
Inv149



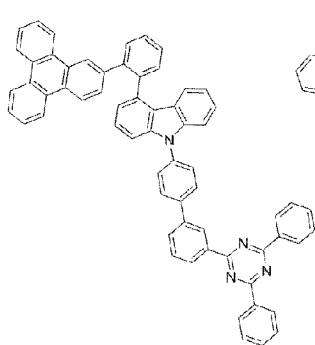
Inv150



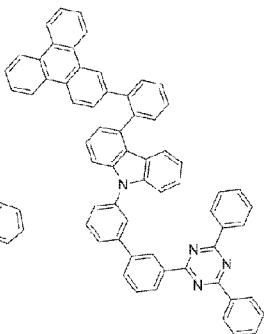
Inv151



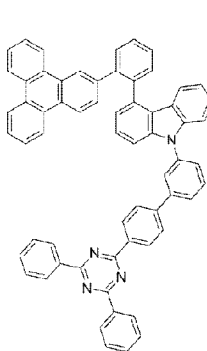
Inv152



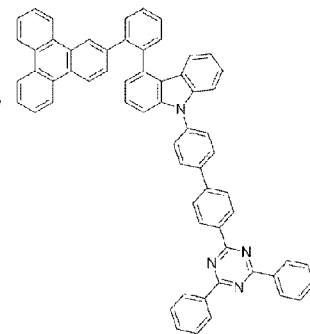
Inv153



Inv154

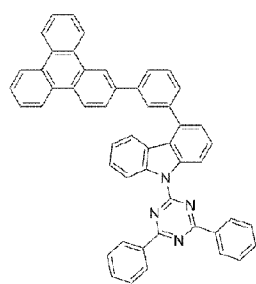


Inv155

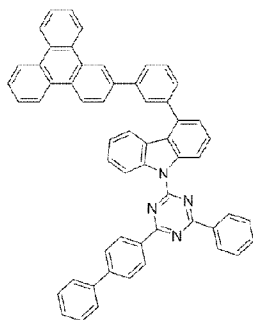


Inv156

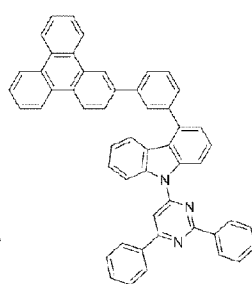
[76]



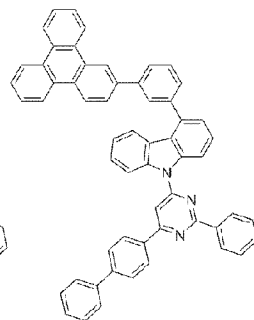
Inv157



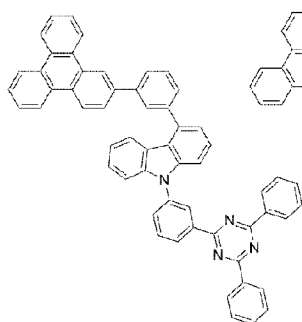
Inv158



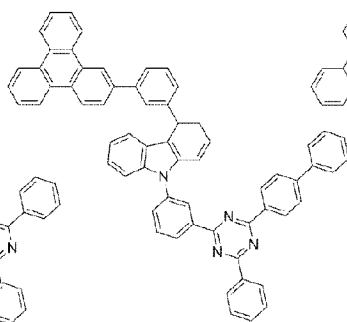
Inv159



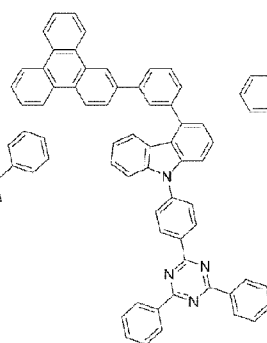
Inv160



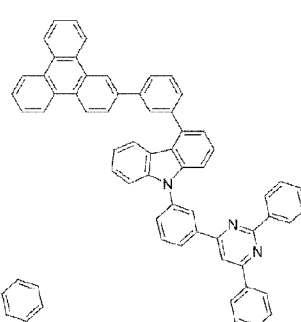
Inv161



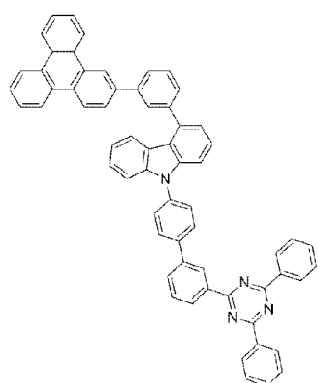
Inv162



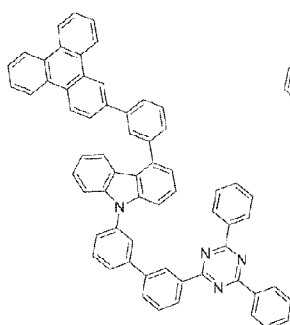
Inv163



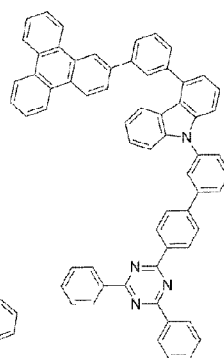
Inv164



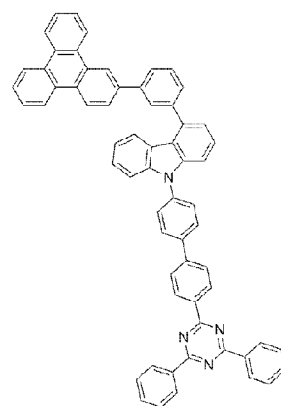
Inv165



Inv166

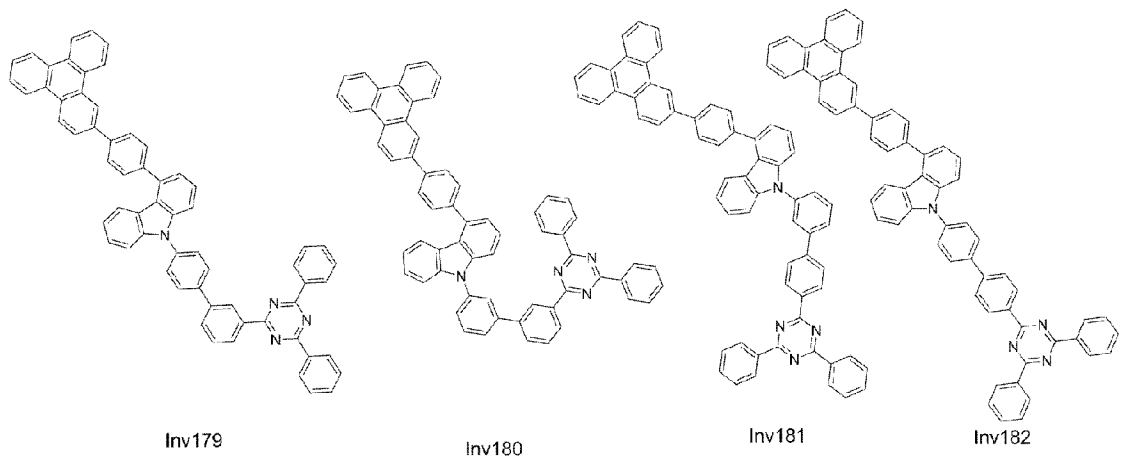
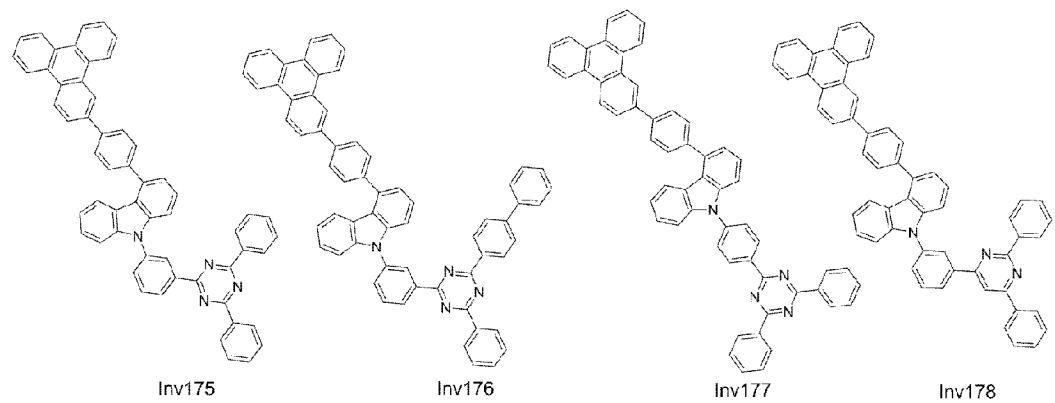
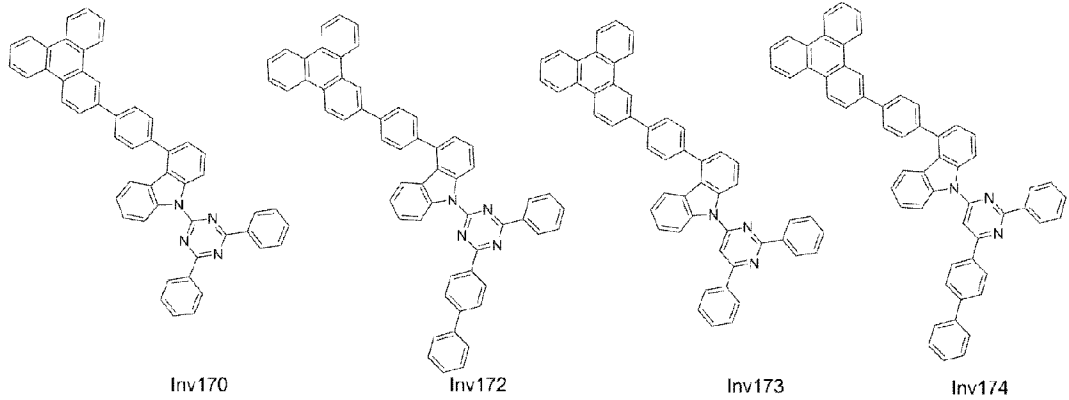


Inv168



Inv169

[77]



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

[79] 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. 이러한 알케닐의 예로는 비닐(vinyl), 알릴(allyl), 이소프로펜일(isopropenyl), 2-부텐일(2-butenyl) 등을 들 수 있으나, 이에 한정되지는 않는다.

- [80] 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. 이러한 알키닐의 예로는 에티닐(ethynyl), 2-프로파닐(2-propynyl) 등을 들 수 있으나, 이에 한정되지는 않는다.
- [81] 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.
- [82] 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(phenoxathienyl), 인돌리지닐(indoliziny), 인돌릴(indolyl), 퓨리닐(puriny), 퀴놀릴(quinolyl), 벤조티아졸(benzothiazole), 카바졸릴(carbazolyl)과 같은 폴리사이클릭 고리; 및 2-푸라닐; N-이미다졸릴; 2-이속사졸릴; 2-피리디닐; 2-피리미디닐 등을 들 수 있으나, 이에 한정되지는 않는다.
- [83] 본 발명에서 “아릴옥시”는 RO-로 표시되는 1가의 치환기로, 상기 R은 탄소수 6 내지 40의 아릴을 의미한다. 이러한 아릴옥시의 예로는 페닐옥시, 나프틸옥시, 디페닐옥시 등을 들 수 있으나, 이에 한정되지는 않는다.
- [84] 본 발명에서 “알킬옥시”는 R'O-로 표시되는 1가의 치환기로, 상기 R'은 탄소수 1 내지 40의 알킬을 의미한다. 이러한 알킬옥시는 직쇄(linear), 측쇄(branched) 또는 사이클릭(cyclic) 구조를 포함할 수 있고, 예로는 메톡시, 에톡시, n-프로폭시, 1-프로폭시, t-부톡시, n-부톡시, 펜톡시 등을 들 수 있으나, 이에 한정되지는 않는다.
- [85] 본 발명에서 “아릴아민”은 탄소수 6 내지 40의 아릴로 치환된 아민을 의미한다.
- [86] 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.
- [87] 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.

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

[89] 본 발명에서 “축합고리”는 축합 지방족 고리, 축합 방향족 고리, 축합 헤테로지방족 고리, 축합 헤테로방향족 고리 또는 이들의 조합된 형태를 의미한다.

[90]

[91] 이와 같은 본 발명의 화학식 1로 표시되는 화합물은 하기 실시예의 합성과정을 참고하여 다양하게 합성할 수 있다.

[92]

[93] 2. 유기 전계 발광 소자

[94] 본 발명은 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하는 유기 전계 발광 소자를 제공한다.

[95] 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.

[96] 상기 1층 이상의 유기물층은 정공 주입층, 정공 수송층, 발광 보조층, 발광층, 전자 수송층 및 전자 주입층 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 발광층인 것이 바람직하다.

[97] 본 발명의 유기 전계 발광 소자의 발광층은 호스트 재료(바람직하게는, 인광 호스트 재료)를 포함할 수 있다. 또한, 본 발명의 유기 전계 발광 소자의 발광층은 상기 화학식 1의 화합물 이외의 화합물을 호스트로 포함할 수 있다.

[98] 이러한 본 발명의 유기 전계 발광 소자의 구조는 특별히 한정되지 않으나, 비제한적인 예로 기판, 양극, 정공 주입층, 정공 수송층, 발광 보조층, 발광층, 전자 수송층 및 음극이 순차적으로 적층된 구조일 수 있다. 이때, 상기 정공 주입층, 정공 수송층, 발광 보조층, 발광층, 전자 수송층 및 전자 주입층 중 하나 이상은 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함할 수 있고, 바람직하게는 발광층이 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함할 수 있다. 여기서, 상기 전자 수송층 위에는 전자 주입층이 추가로 적층될 수 있다. 또한, 본 발명의 유기 전계 발광 소자의 구조는 전극과 유기물층 계면에 절연층 또는 접착층이 삽입된 구조일 수 있다.

[99] 한편, 본 발명의 유기 전계 발광 소자는 상기 유기물층 중 1층 이상이 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하는 것을 제외하고는, 당업계에 공지된

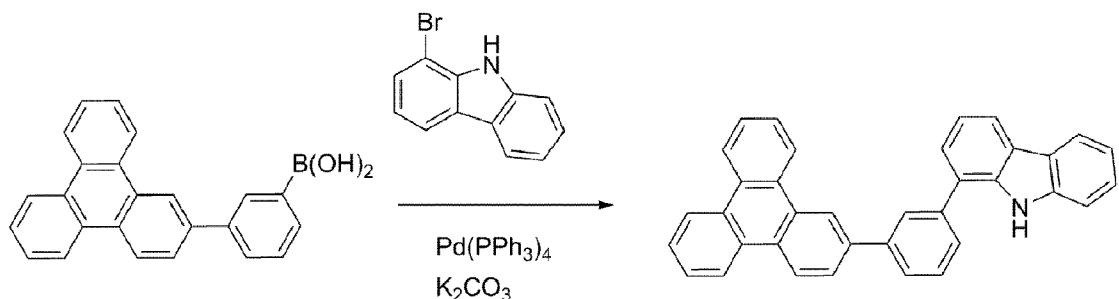
재료 및 방법으로 유기물층 및 전극을 형성하여 제조할 수 있다.

- [100] 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.
- [101] 본 발명의 유기 전계 발광 소자 제조시 사용되는 기판은 특별히 한정되지 않으나, 실리콘 웨이퍼, 석영, 유리판, 금속판, 플라스틱 필름 및 시트 등을 사용할 수 있다.
- [102] 또한, 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.
- [103] 또한, 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.
- [104] 또한, 정공 주입층, 정공 수송층, 전자 주입층 및 전자 수송층은 특별히 한정되는 것은 아니며, 당 업계에 알려진 통상의 물질을 사용할 수 있다.
- [105]
- [106] 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.

[107]

[108] [준비예 1] Core1의 합성

[109]



- [110] 질소 기류 하에서 1-bromo-9H-carbazole (20 g, 81.26 mmol), (3-(Triphenyl-2-yl)phenyl)boronic acid (28.3 g, 81.26 mmol), K₂CO₃ (33.7 g, 243mmol) 및 THF/H₂O (400 ml/100 ml)를 혼합한 다음, Pd(PPh₃)₄ (2.81 g, 2.43 mmol)를 넣고 80°C에서 12시간 동안 교반하였다. 반응 종결 후 메틸렌클로라이드로 추출하고 MgSO₄를 넣고 여과하였다. 얻어진 유기층에서 용매를 제거한 후 컬럼 크로마토그래피 (Hexane:MC = 1:1 (v/v))로 정제하여

Core1 (22.9 g, 수율 60%)을 얻었다.

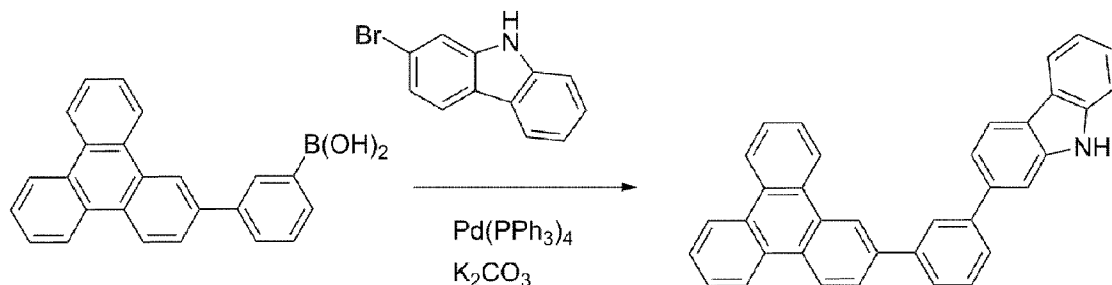
[111]

[112] H-NMR : δ 7.2(t, 1H), 7.50-7.72(m, 12H), 7.94(s, 1H), 8.08(d, 1H), 8.33(m, 4H), 9.28(s, 1H), 9.64(d, 1H), 11.2(s, 1H)

[113]

[114] [준비예 2] Core2 의 합성

[115]



[116] 1-bromo-9H-carbazole 대신 2-bromo-9H-carbazole (20 g, 81.26mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 상기 준비예 1과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 Core2 (19.8 g, 수율 52%)를 얻었다.

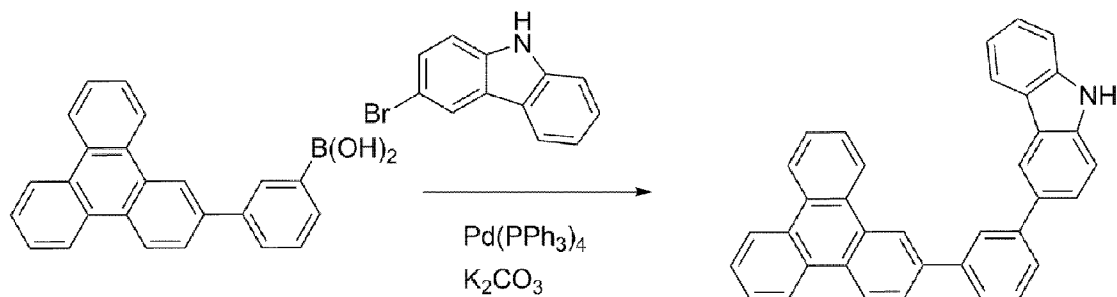
[117]

[118] H-NMR : δ 7.18(t, 1H), 7.48-7.75(m, 12H), 7.93(m, 2H), 8.22(d, 1H), 8.35(m, 4H), 9.28(s, 1H), 9.60(d, 1H), 10.8(s, 1H)

[119]

[120] [준비예 3] Core3 의 합성

[121]



[122] 1-bromo-9H-carbazole 대신 3-bromo-9H-carbazole (20 g, 81.26mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 상기 준비예 1과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 Core3 (25.2 g, 수율 66%)를 얻었다.

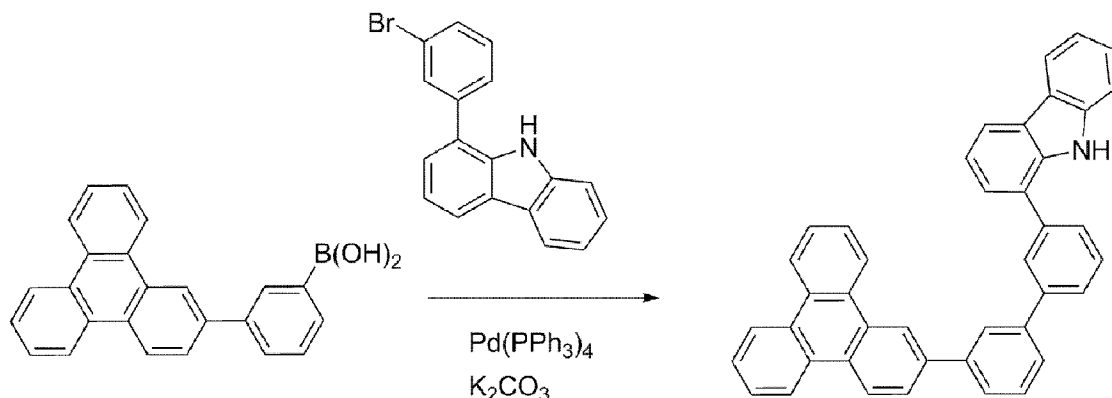
[123]

[124] H-NMR : δ 7.29(t, 1H), 7.48-7.88(m, 13H), 8.04-8.18(m, 5H), 8.93(d, 2H), 9.15(s, 1H), 10.1(s, 1H)

[125]

[126] [준비예 4] Core4 의 합성

[127]



[128] 1-bromo-9H-carbazole 대신 1-(3-bromophenyl)-9H-carbazole (20 g, 62.07mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 상기 준비예 1과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 Core4 (17.9 g, 수율 53%)를 얻었다.

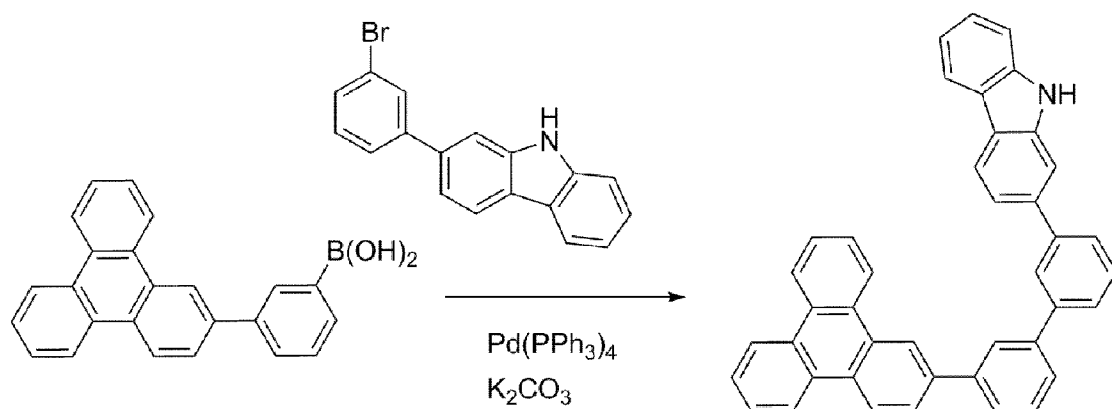
[129]

[130] H-NMR : δ 7.21(t, 1H), 7.48-7.72(m, 15H), 7.92(m, 2H), 8.08(d, 1H), 8.17(d, 1H), 8.33(m, 4H), 9.31(s, 1H), 9.58(d, 1H), 10.8(s, 1H)

[131]

[132] [준비예 5] Core5 의 합성

[133]



[134] 1-bromo-9H-carbazole 대신 2-(3-bromophenyl)-9H-carbazole (20 g, 62.07mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 상기 준비예 1과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 Core5 (19.3 g, 수율 57%)를 얻었다.

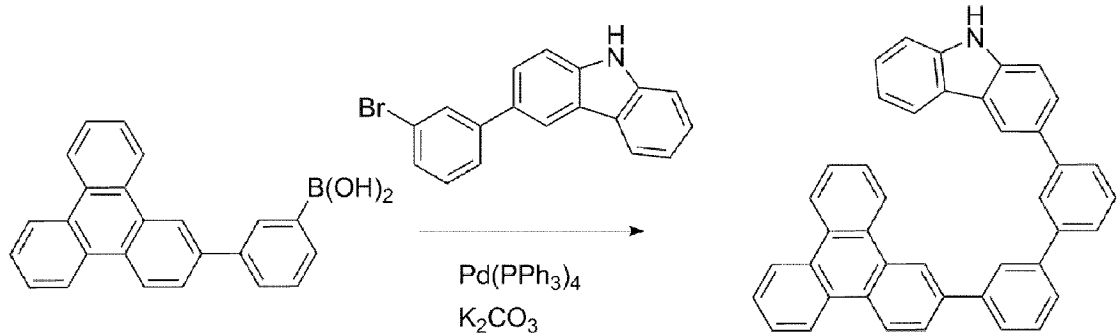
[135]

[136] H-NMR : δ 7.22(t, 1H), 7.50-7.74(m, 15H), 7.92(m, 3H), 8.19(d, 1H), 8.35(m, 4H), 9.32(s, 1H), 9.61(d, 1H), 11.12(s, 1H)

[137]

[138] [준비예 6] Core6 의 합성

[139]



[140] 1-bromo-9H-carbazole 대신 3-(3-bromophenyl)-9H-carbazole (20 g, 62.07mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 상기 준비예 1과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 Core6 (21.65 g, 수율 64%)를 얻었다.

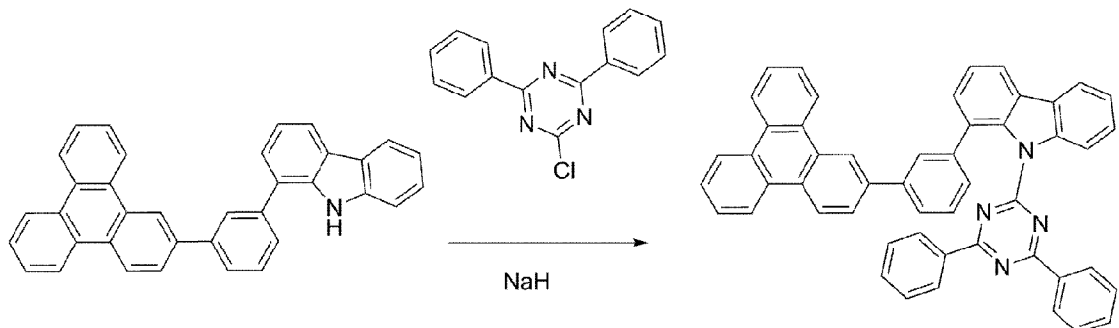
[141]

[142] $^1\text{H-NMR}$: δ 7.22(t, 1H), 7.50-7.74(m, 15H), 7.92(m, 3H), 8.19(d, 1H), 8.35(m, 4H), 9.32(s, 1H), 9.61(d, 1H), 11.12(s, 1H)

[143]

[144] [합성예 1] Inv 1의 합성

[145]



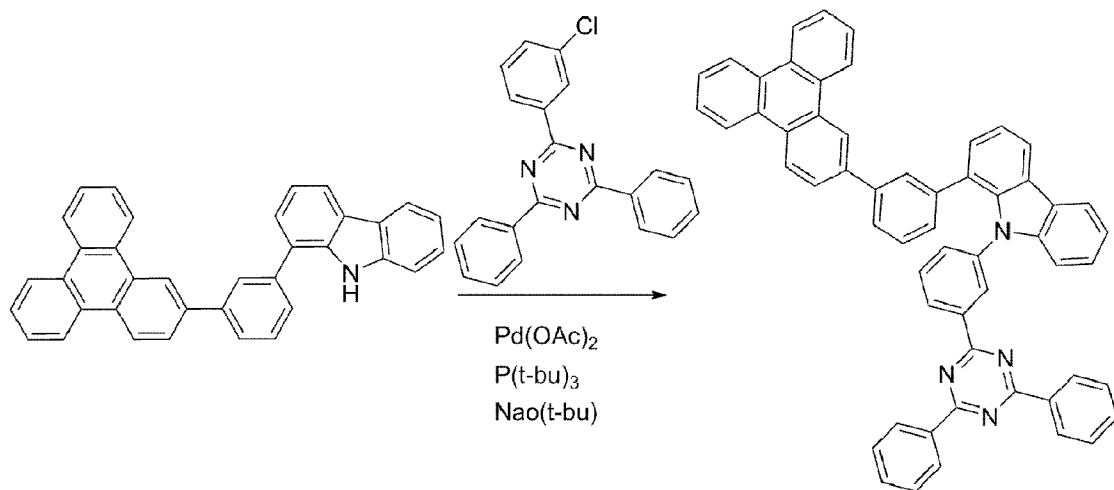
[146] 질소 기류 하에서 Core1 (3.0 g, 6.38 mmol), 2-chloro-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine (2.0 g, 7.66 mmol), NaH (0.15 g, 6.38 mmol) 및 DMF(80 ml)를 혼합하고 상온에서 3시간 동안 교반하였다. 반응이 종결된 후 물을 넣고 고체 화합물을 여과한 후, 컬럼 크로마토그래피 (Hexane:MC = 2:1 (v/v))로 정제하여 목적 화합물인 Inv 1 (3.0 g, 수율 67%)를 얻었다.

[147] GC-Mass (이론치: 700.85 g/mol, 측정치: 700 g/mol)

[148]

[149] [합성예 2] Inv 5의 합성

[150]



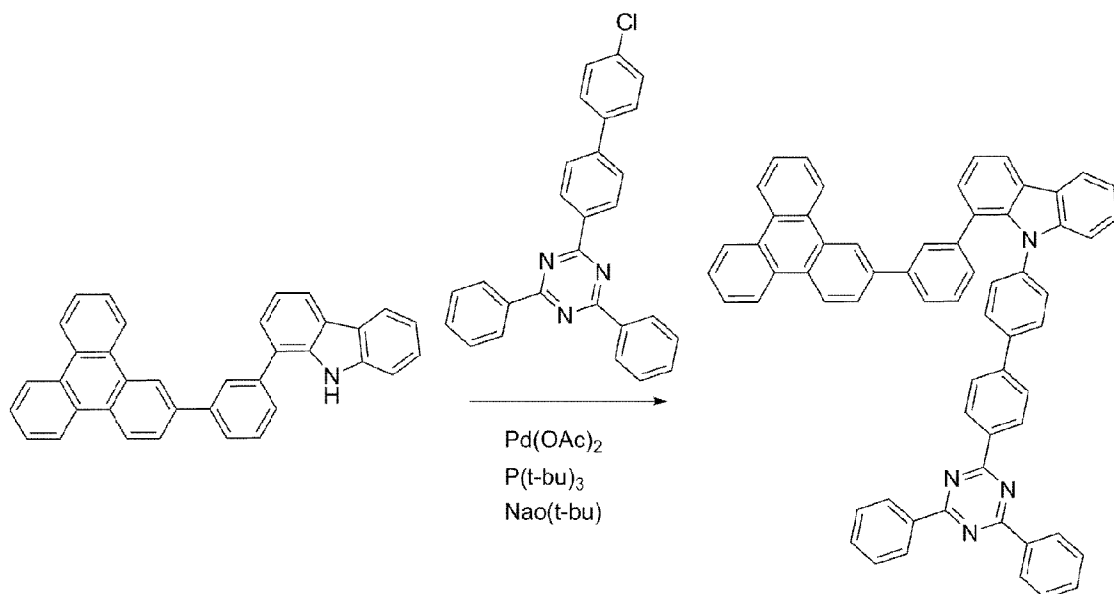
[151] 질소 기류 하에서 Core1(3.0 g, 6.38 mmol), 2-(3-chlorophenyl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine (2.69 g, 7.65 mmol), Pd(OAc)₂ (0.07 g, 0.32mmol), NaO(t-bu) (1.84 g, 19.14 mmol), P(t-bu)₃ (0.26 g, 1.27 mmol) 및 Toluene (80 ml)을 혼합한 다음, 110 °C에서 12시간 동안 교반하였다. 반응이 종결된 후 에틸아세테이트로 추출한 다음, MgSO₄로 수분을 제거하고, 컬럼크로마토그래피 (Hexane:MC = 3:1 (v/v)) 로 정제하여 목적화합물인 Inv 5 (3.1 g, 수율 64%)을 얻었다.

[152] GC-Mass (이론치: 776.94 g/mol, 측정치: 776 g/mol)

[153]

[154] [합성예 3] Inv12 의 합성

[155]



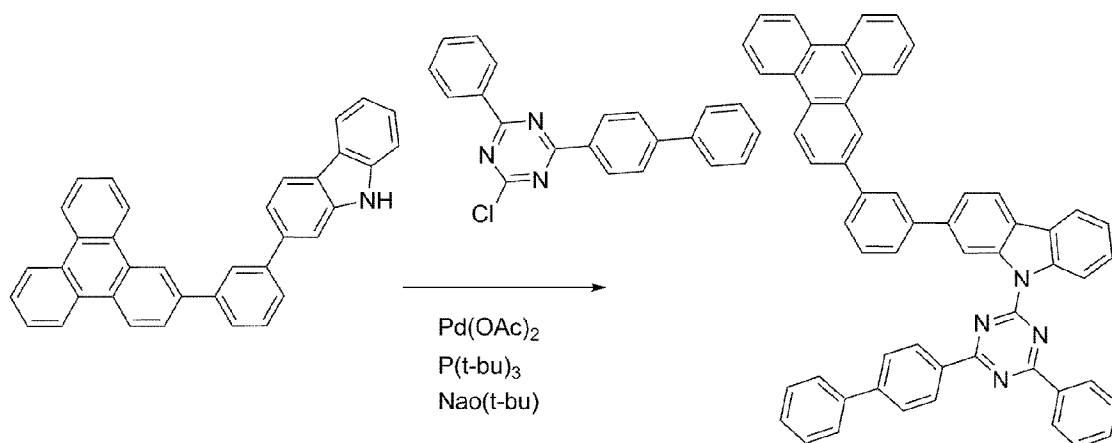
[156] 2-(3-chlorophenyl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine 대신 2-(4'-chloro-[1,1'-biphenyl]-4-yl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine (3.2 g, 7.65 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 상기 합성예 2와 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 Inv12 (3 g, 수율 55%)를 얻었다.

[157] Mass (이론치: 853.04 g/mol, 측정치: 853 g/mol)

[158]

[159] [합성예 4] Inv 14의 합성

[160]



[161] Core1 대신 Core2 (3.0 g, 6.38 mmol)를 사용하고

2-(3-chlorophenyl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine 대신

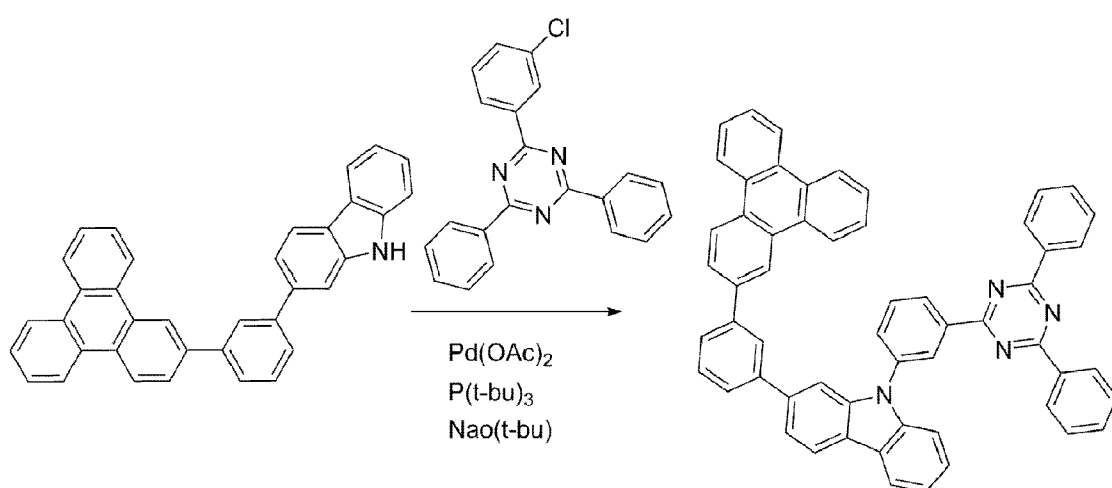
2-([1,1'-biphenyl]-4-yl)-4-chloro-6-phenyl-1,3,5-triazine (2.6 g, 7.65 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 상기 합성에 2와 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 Inv14 (3.0 g, 수율 62%)를 얻었다.

[162] Mass (이론치: 776.94 g/mol, 측정치: 776 g/mol)

[163]

[164] [합성예 5] Inv 17의 합성

[165]



[166] 2-([1,1'-biphenyl]-4-yl)-4-chloro-6-phenyl-1,3,5-triazine 대신

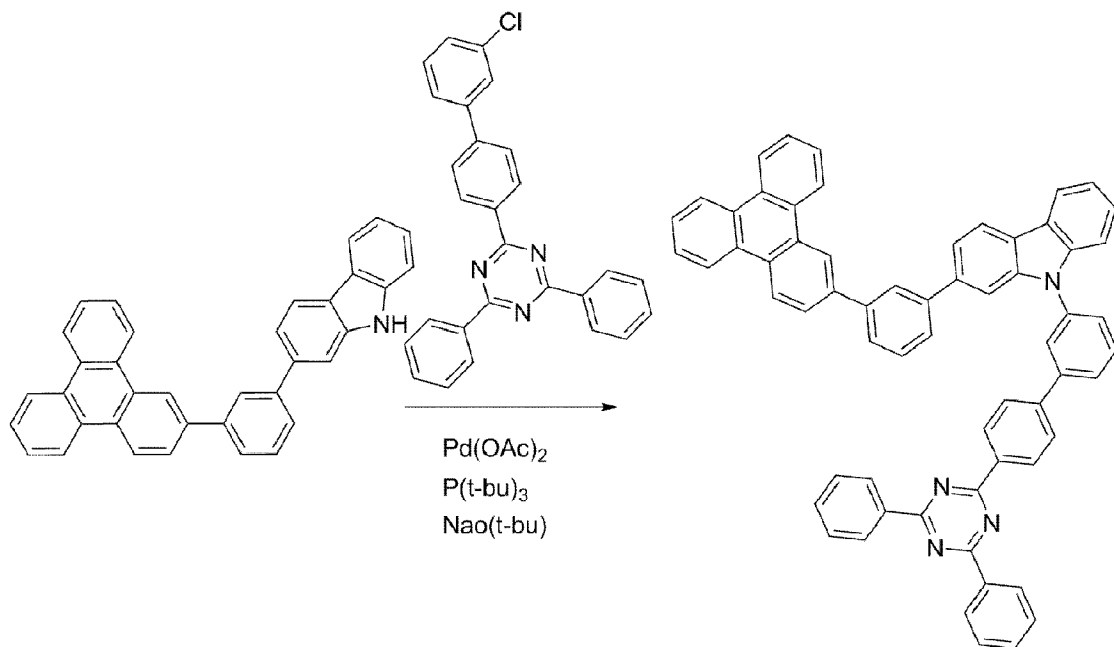
2-(3-chlorophenyl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine (2.6 g, 7.65 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 상기 합성에 4와 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 Inv17 (4.0 g, 수율 68%)을 얻었다.

[167] Mass (이론치: 776.94 g/mol, 측정치: 776 g/mol)

[168]

[169] [합성예 6] Inv 23의 합성

[170]



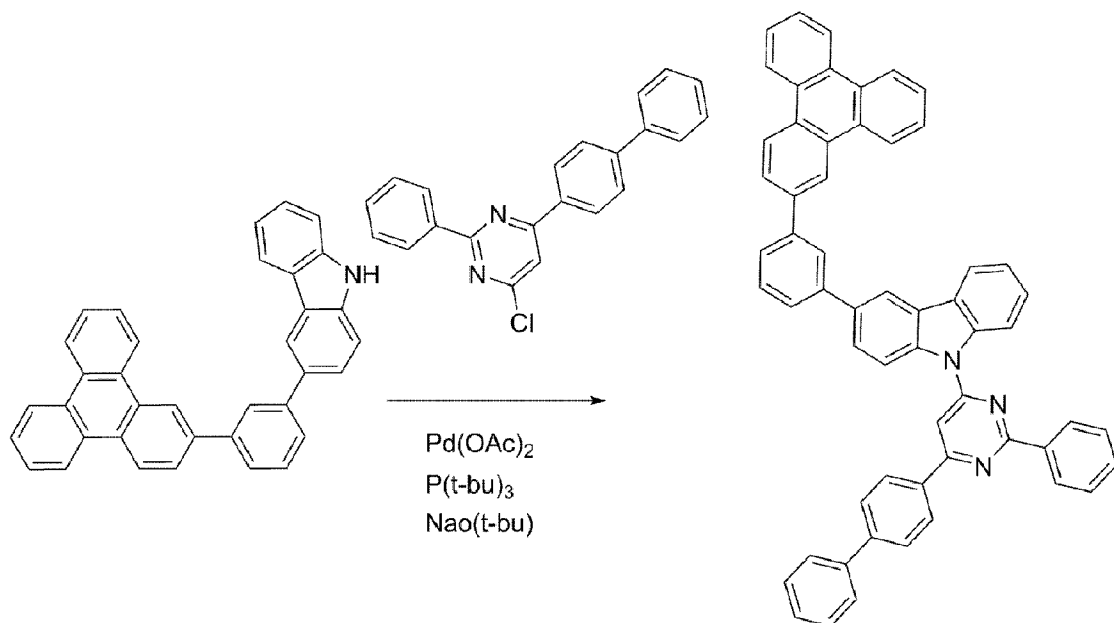
[171] 2-([1,1'-biphenyl]-4-yl)-4-chloro-6-phenyl-1,3,5-triazine 대신
2-(3'-chloro-[1,1'-biphenyl]-4-yl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine (3.21 g, 76.5 mmol)을
사용하는 것을 제외하고는, 상기 합성에 4와 동일한 과정을 수행하여 목적
화합물인 Inv23 (3.35 g, 수율 64%)를 얻었다.

[172] Mass (이론치: 853.04 g/mol, 측정치: 853 g/mol)

[173]

[174] [합성예 7] Inv 28의 합성

[175]



[176] Core1 대신 Core3 (3.0 g, 6.38 mmol)를 사용하고
2-(3-chlorophenyl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine 대신
4-([1,1'-biphenyl]-4-yl)-6-chloro-2-phenylpyrimidine (2.62 g, 7.65 mmol)을 사용하는

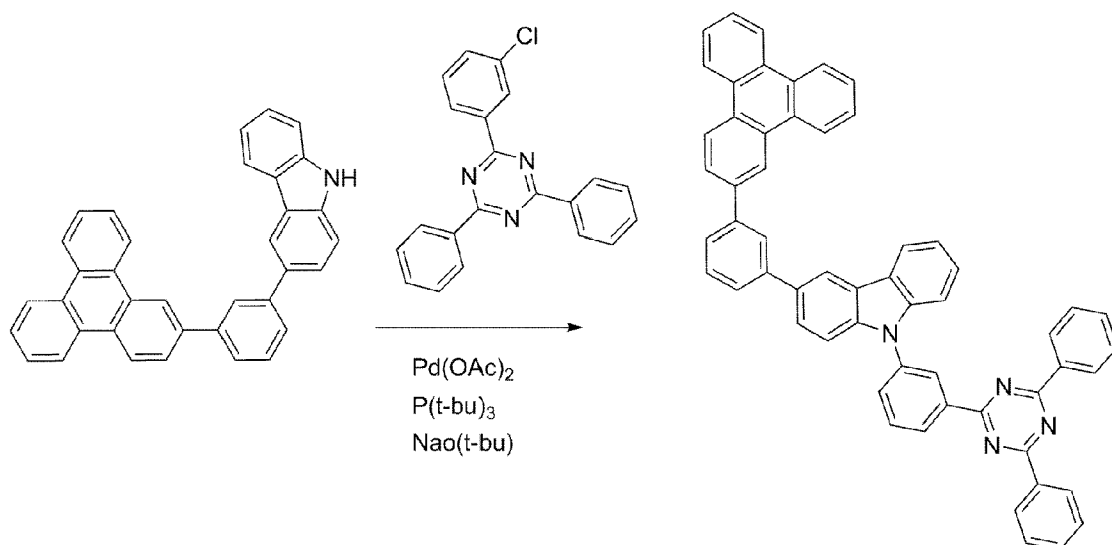
것을 제외하고는, 상기 합성에 2와 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 Inv28 (2.86 g, 수율 58%)를 얻었다.

[177] Mass (이론치: 775.96 g/mol, 측정치: 775 g/mol)

[178]

[179] [합성예 8] Inv 29의 합성

[180]



[181] 4-([1,1'-biphenyl]-4-yl)-6-chloro-2-phenylpyrimidine 대신

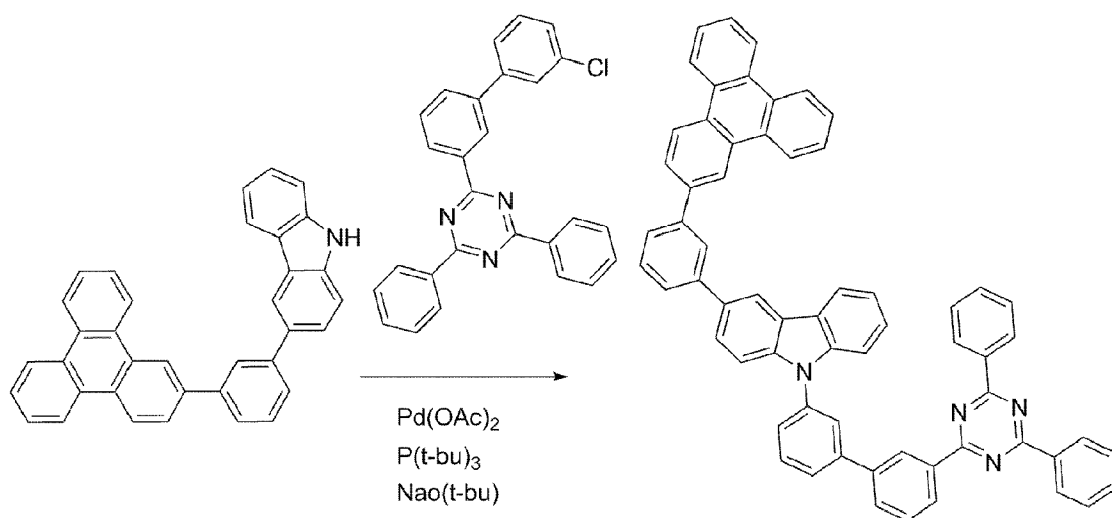
2-(3-chlorophenyl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine (2.6 g, 7.65 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 상기 합성에 7과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 Inv 29 (3.36 g, 수율 68%)를 얻었다.

[182] Mass (이론치: 776.94 g/mol, 측정치: 776 g/mol)

[183]

[184] [합성예 9] Inv 34의 합성

[185]



[186] 4-([1,1'-biphenyl]-4-yl)-6-chloro-2-phenylpyrimidine 대신

2-(3'-chloro-[1,1'-biphenyl]-3-yl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine (3.21 g, 7.65 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 상기 합성에 7과 동일한 과정을 수행하여 목적

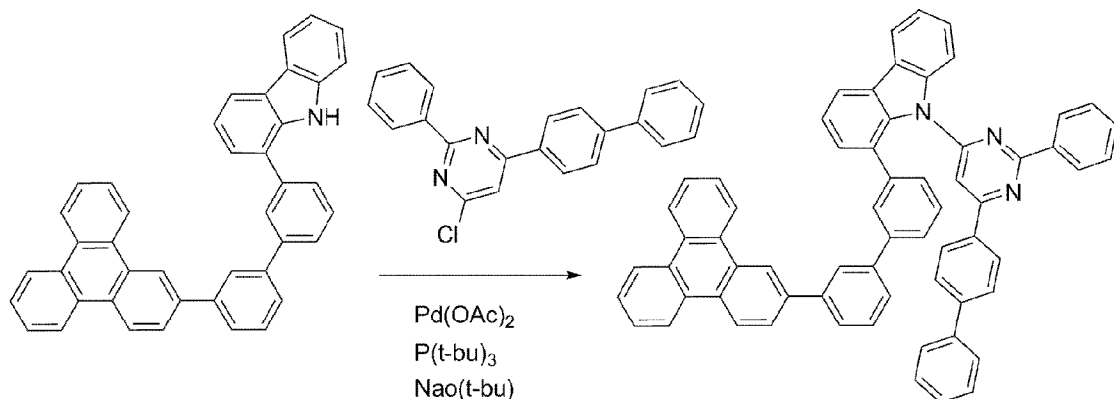
화합물인 Inv 34 (3.54 g, 수율 65%)를 얻었다.

[187] Mass (이론치: 853.04 g/mol, 측정치: 853 g/mol)

[188]

[189] [합성 예 10] Inv 40의 합성

[190]



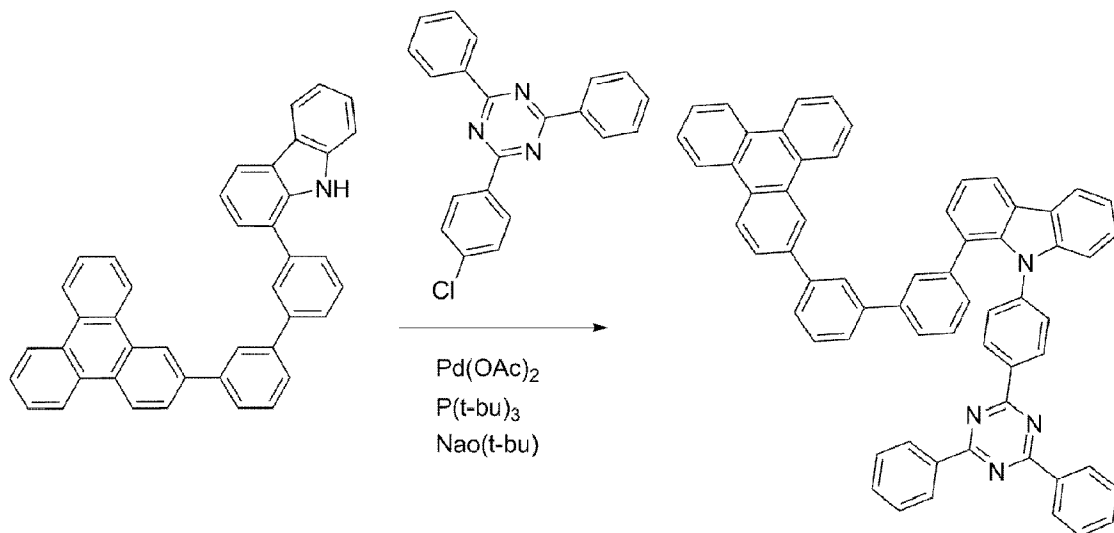
[191] Core3 대신 Core4 (3.0 g, 5.50 mmol)를 사용하는 것을 제외하고는, 상기 합성에 7과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 Inv40 (2.43 g, 수율 52%)를 얻었다.

[192] Mass (이론치: 852.05 g/mol, 측정치: 852 g/mol)

[193]

[194] [합성 예 11] Inv 43의 합성

[195]



[196] 4-([1,1'-biphenyl]-4-yl)-6-chloro-2-phenylpyrimidine 대신

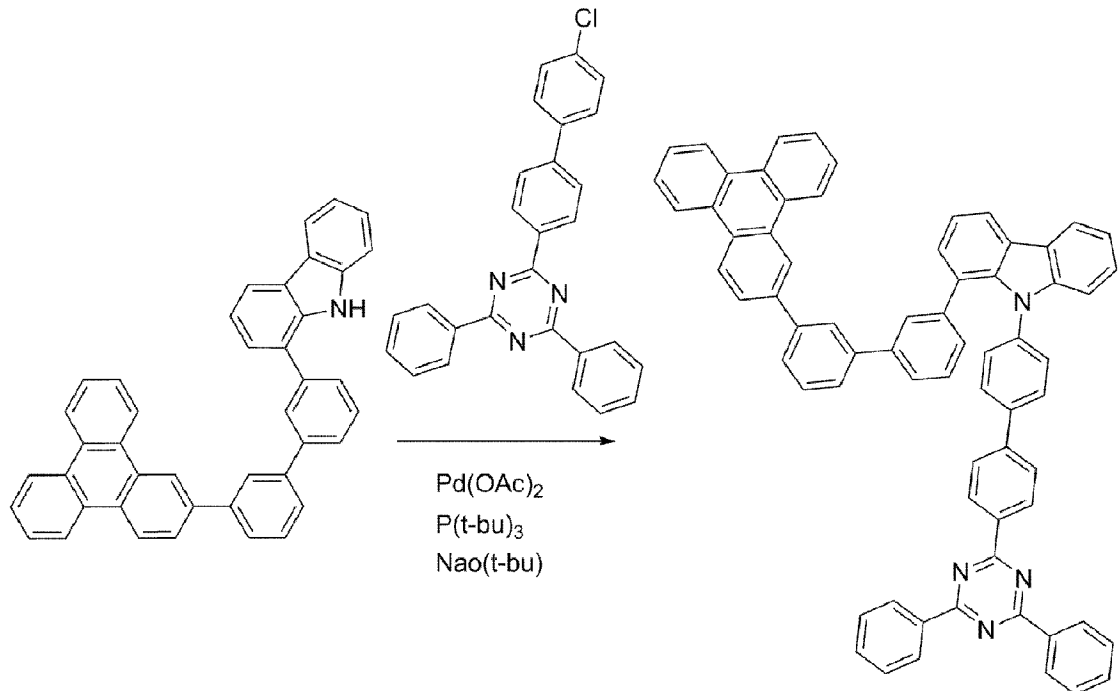
2-(4-chlorophenyl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine (2.27 g, 6.6 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 상기 합성에 10과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 Inv 43 (2.53 g, 수율 54%)를 얻었다.

[197] Mass (이론치: 853.04 g/mol, 측정치: 853 g/mol)

[198]

[199] [합성 예 12] Inv 48의 합성

[200]



[201] 4-([1,1'-biphenyl]-4-yl)-6-chloro-2-phenylpyrimidine 대신

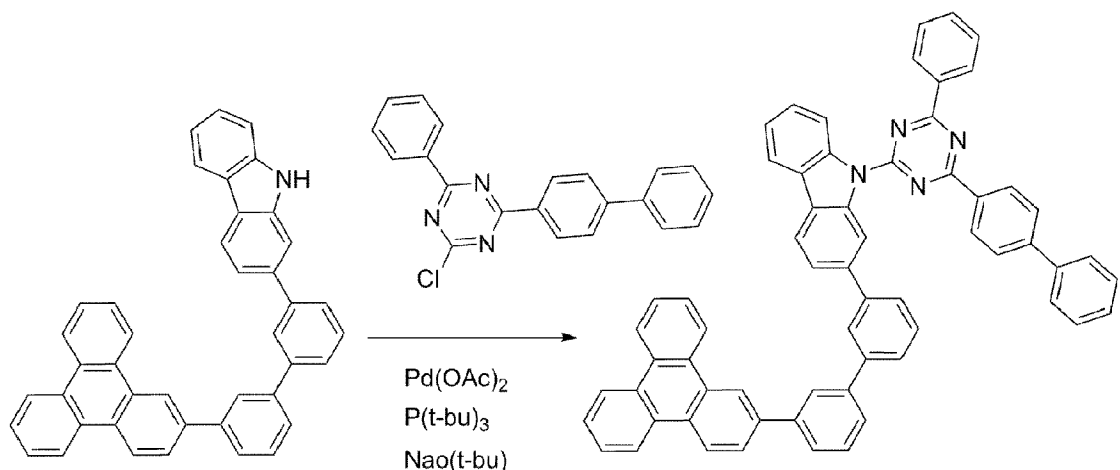
2-(4'-chloro-[1,1'-biphenyl]-4-yl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine (2.77 g, 6.6 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 상기 합성에 10과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 Inv 48 (2.45 g, 수율 48%)를 얻었다.

[202] Mass (이론치: 929.14 g/mol, 측정치: 929 g/mol)

[203]

[204] [합성 예 13] Inv 50의 합성

[205]



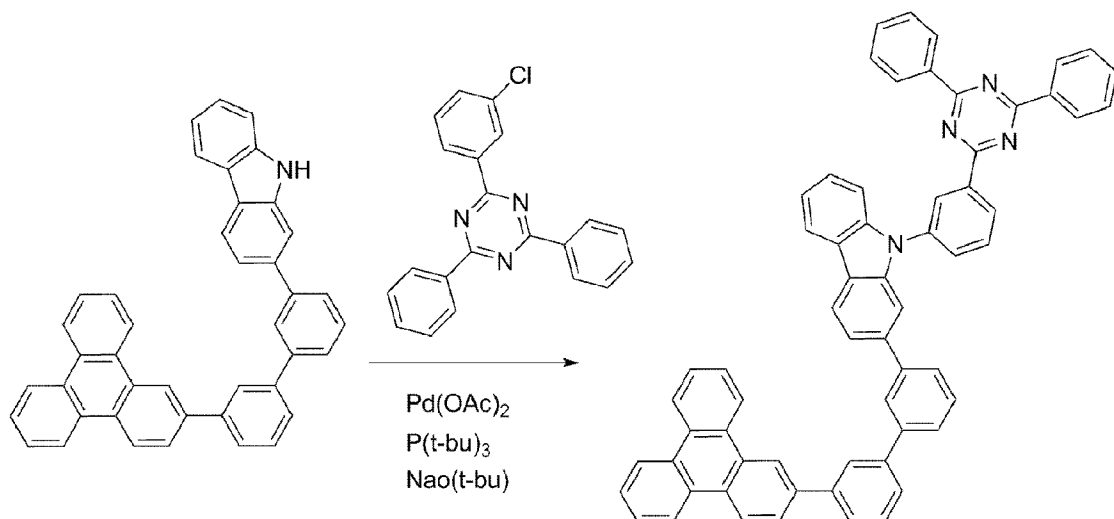
[206] Core2 대신 Core5 (3.0 g, 5.5 mmol)를 사용하는 것을 제외하고는, 상기 합성에 4와 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 Inv 50 (2.58 g, 수율 55%)를 얻었다.

[207] Mass (이론치: 853.04 g/mol, 측정치: 853 g/mol)

[208]

[209] [합성 예 14] Inv 53의 합성

[210]



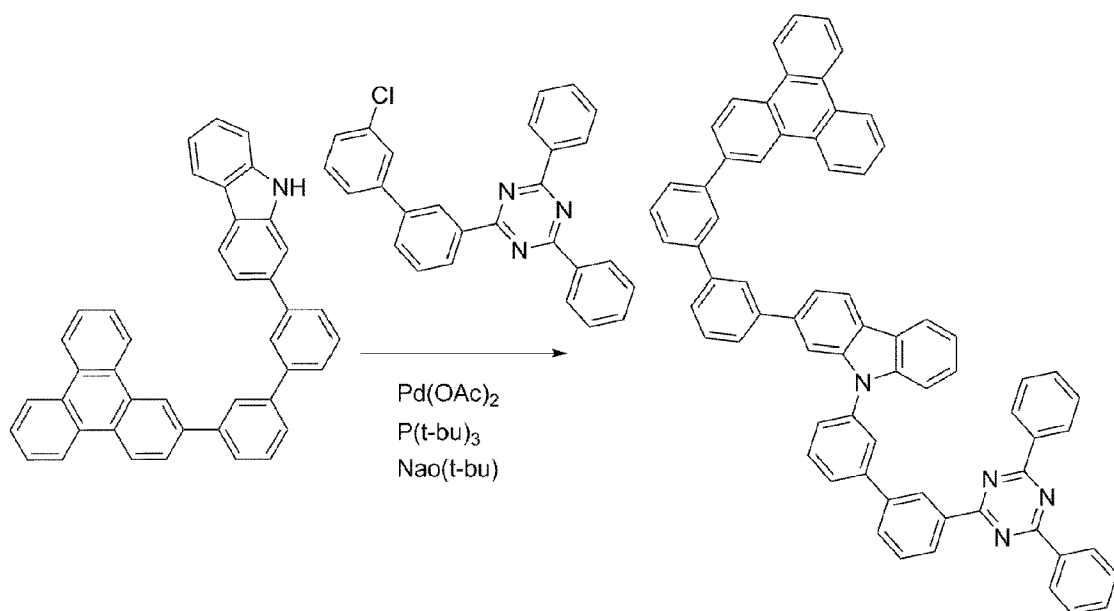
[211] 2-([1,1'-biphenyl]-4-yl)-4-chloro-6-phenyl-1,3,5-triazine 대신 2-(3-chlorophenyl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine (2.27 g, 6.6 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 상기 합성에 13과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 Inv 53 (3.28 g, 수율 70%)를 얻었다.

[212] Mass (이론치: 853.04 g/mol, 측정치: 853 g/mol)

[213]

[214] [합성예 15] Inv 58의 합성

[215]



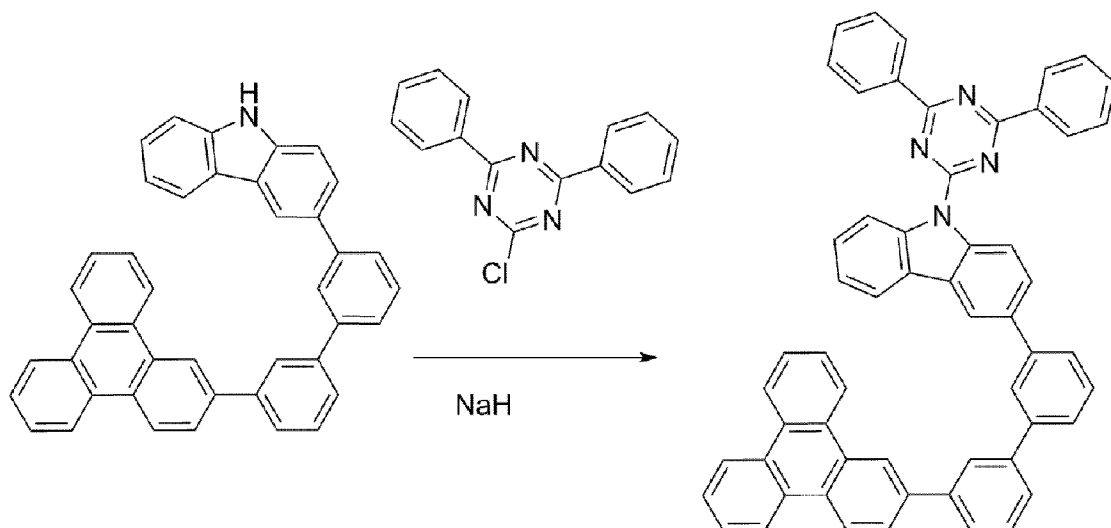
[216] 2-([1,1'-biphenyl]-4-yl)-4-chloro-6-phenyl-1,3,5-triazine 대신 2-(3'-chloro-[1,1'-biphenyl]-3-yl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine (2.77 g, 6.6 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 상기 합성에 13과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 Inv 58 (2.86 g, 수율 56%)를 얻었다.

[217] Mass (이론치: 929.14 g/mol, 측정치: 929 g/mol)

[218]

[219] [합성예 16] Inv 61의 합성

[220]



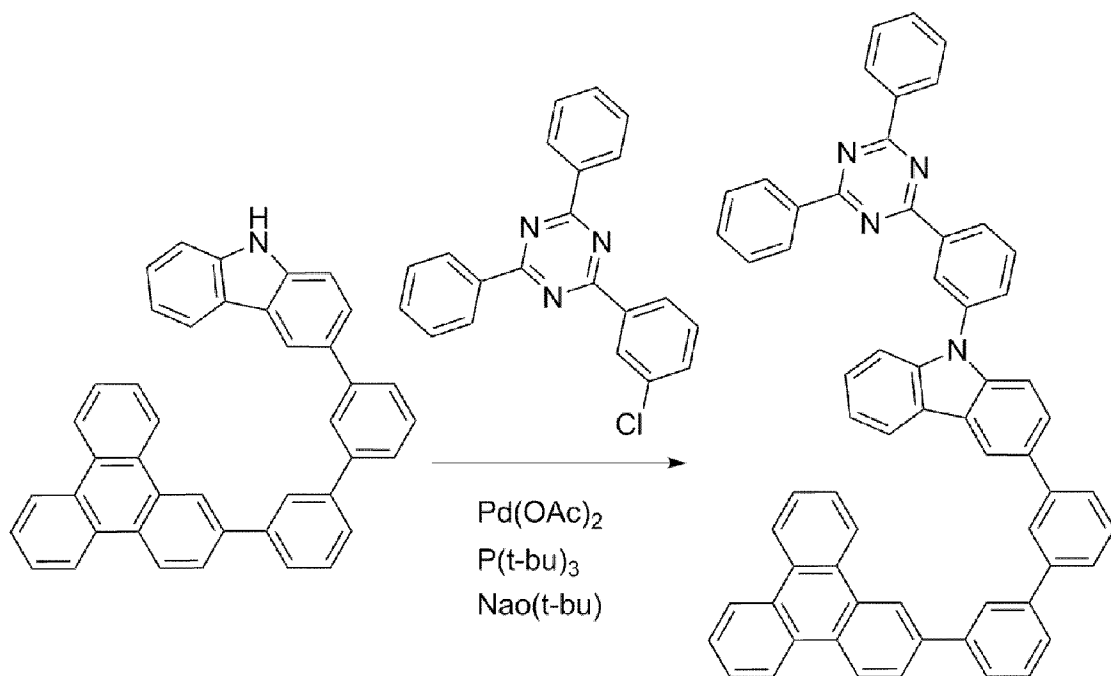
[221] Core1 대신 Core6 (3.0 g, 5.5 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 상기 합성예 1과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 Inv 61 (3.0 g, 수율 72%)를 얻었다.

[222] Mass (이론치: 776.94 g/mol, 측정치: 776 g/mol)

[223]

[224] [합성예 17] Inv 65의 합성

[225]



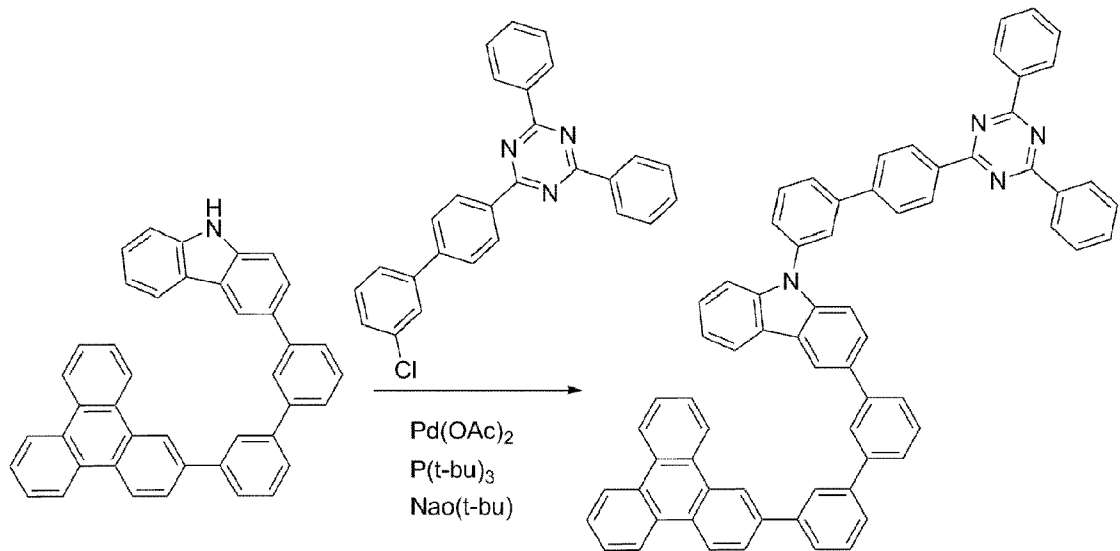
[226] Core1 대신 Core6 (3.0 g, 5.5 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 상기 합성예 2와 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 Inv 65 (3.2 g, 수율 68%)를 얻었다.

[227] Mass (이론치: 853.04 g/mol, 측정치: 853 g/mol)

[228]

[229] [합성예 18] Inv 71의 합성

[230]



[231] 2-(3-chlorophenyl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine 대신

2-(3'-chloro-[1,1'-biphenyl]-4-yl)-4,6-diphenyl-1,3,5-triazine (2.77 g, 6.6 mmol)을 사용하는 것을 제외하고는, 상기 합성에 17과 동일한 과정을 수행하여 목적 화합물인 Inv 71 (3.37 g, 수율 66%)를 얻었다.

[232] Mass (이론치: 929.14 g/mol, 측정치: 929 g/mol)

[233]

[234] [실시예 1 내지 18] 녹색 유기 전계 발광 소자의 제작

[235] 합성에 1 내지 18에서 합성한 화합물 Inv 1, Inv 5, Inv 12, Inv 14, Inv 17, Inv 23, Inv 28, Inv 29, Inv 34, Inv 40, Inv 43, Inv 48, Inv 50, Inv 53, Inv 58, Inv 61, Inv 65, Inv 71을 통상적으로 알려진 방법으로 고순도 승화정제를 한 후 아래의 과정에 따라 녹색 유기 전계 발광 소자를 제작하였다.

[236] 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.

[237] 이렇게 준비된 ITO 투명 전극 위에 m-MTDATA (60 nm)/TCTA (80 nm)/ 90% 각각의 화합물 Inv 1, Inv 5, Inv 12, Inv 14, Inv 17, Inv 23, Inv 28, Inv 29, Inv 34, Inv 40, Inv 43, Inv 48, Inv 50, Inv 53, Inv 58, Inv 61, Inv 65, Inv 71 + 10% Ir(ppy)₃ (30nm)/BCP (10 nm)/Alq₃ (30 nm)/LiF (1 nm)/Al (200 nm) 순으로 적층하여 유기 전계 발광 소자를 제작하였다.

[238]

[239] [비교예 1] 녹색 유기 전계 발광 소자의 제작

[240] 발광층 형성시 발광 호스트 물질로서 화합물 Inv 1 대신 CBP를 사용하는 것을 제외하고는 실시예 1과 동일한 과정으로 녹색 유기 전계 발광 소자를 제작하였다.

[241]

[242] **[비교예 2] 녹색 유기 전계 발광 소자의 제작**

[243] 발광층 형성시 발광 호스트 물질로서 화합물 Inv 1 대신 A1을 사용하는 것을 제외하고는 실시예 1과 동일한 과정으로 녹색 유기 전계 발광 소자를 제작하였다.

[244]

[245] **[비교예 3] 녹색 유기 전계 발광 소자의 제작**

[246] 발광층 형성시 발광 호스트 물질로서 화합물 Inv 1 대신 A2를 사용하는 것을 제외하고는 실시예 1과 동일한 과정으로 녹색 유기 전계 발광 소자를 제작하였다.

[247]

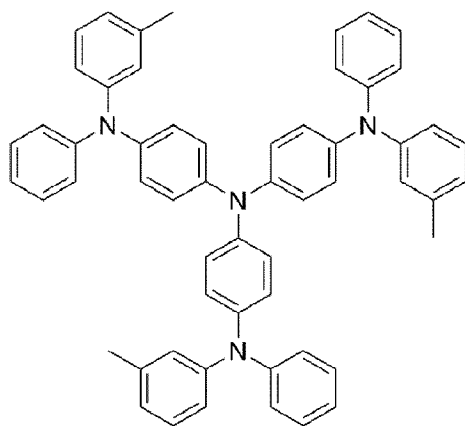
[248] **[비교예 4] 녹색 유기 전계 발광 소자의 제작**

[249] 발광층 형성시 발광 호스트 물질로서 화합물 Inv 1 대신 A3를 사용하는 것을 제외하고는 실시예 1과 동일한 과정으로 녹색 유기 전계 발광 소자를 제작하였다.

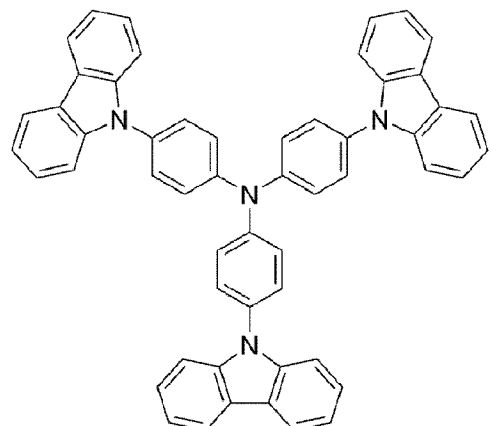
[250]

[251] 상기 실시예 1 내지 18 및 비교예 1 내지 4에서 사용된 m-MTDATA, TCTA, Ir(ppy)₃, CBP, A1, A2, A3 및 BCP의 구조는 하기와 같다.

[252]

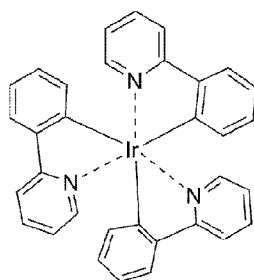
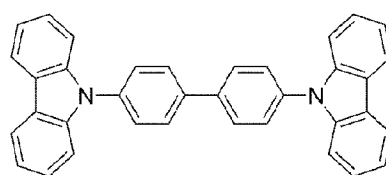


m-MTDATA

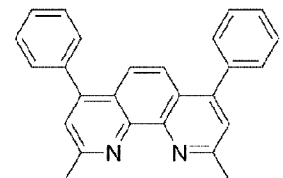


TCTA

[253]

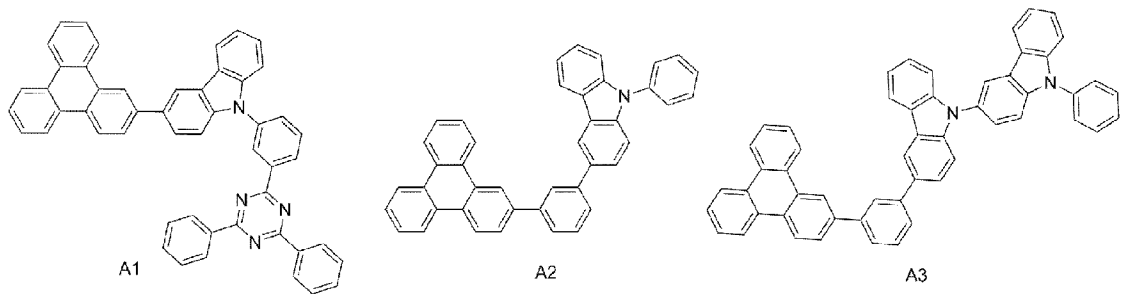
Ir(ppy)₃

CBP



BCP

[254]



[255]

[256] [평가예 1]

[257] 실시예 1 내지 18 및 비교예 1 내지 4에서 제작한 각각의 녹색 유기 전계 발광 소자에 대하여 전류밀도 10 mA/cm^2 에서의 구동전압, 전류효율 및 발광 피크를 측정하고, 그 결과를 하기 표 1에 나타내었다.

[258] [표1]

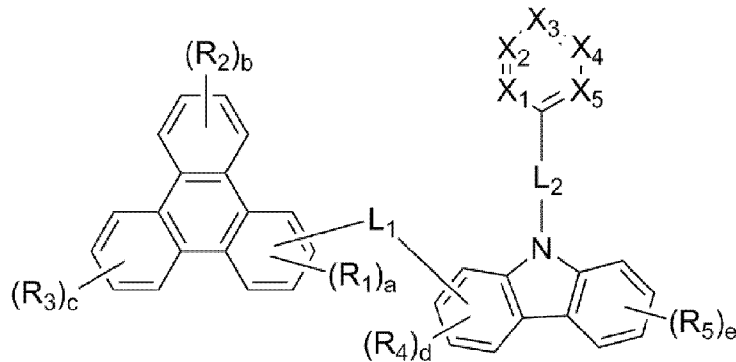
샘플	호스트	구동전압 (V)	발광피크 (nm)	전류효율 (cd/A)
실시예 1	Inv 1	6.48	517	40.7
실시예 2	Inv 5	6.48	515	41.6
실시예 3	Inv 12	6.86	518	40.2
실시예 4	Inv 14	6.48	518	40.6
실시예 5	Inv 17	6.48	517	43.2
실시예 6	Inv 23	6.86	515	41.3
실시예 7	Inv 28	6.77	518	42.6
실시예 8	Inv 29	6.66	518	45.8
실시예 9	Inv 34	6.65	517	40.8
실시예 10	Inv 40	6.77	515	41.3
실시예 11	Inv 43	6.66	518	42.6
실시예 12	Inv 48	6.66	518	40.9
실시예 13	Inv 50	6.81	517	42.1
실시예 14	Inv 53	6.68	515	43.3
실시예 15	Inv 58	6.66	518	41.3
실시예 16	Inv 61	6.70	518	45.2
실시예 17	Inv 65	6.70	517	42.2
실시예 18	Inv 71	6.51	515	42.5
비교예 1	CBP	6.93	516	36.8
비교예 2	A1	6.88	515	39.5
비교예 3	A2	6.94	518	38.8
비교예 4	A3	6.92	517	38.6

[259] 상기 표 1에 나타낸 바와 같이, 본 발명에 따른 화합물을 발광층에 사용한 녹색 유기 전계 발광 소자(실시예 1 내지 18)는 종래 CBP, A1, A2 및 A3를 발광층에 사용한 녹색 유기 전계 발광 소자(비교예 1 내지 4)에 비해 전류효율 및 구동전압 면에서 보다 우수한 성능을 나타내는 것을 알 수 있었다.

청구범위

[청구항 1] 하기 화학식 1로 표시되는 화합물:

[화학식 1]



상기 화학식 1에서,

L_1 및 L_2 는 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 단일 결합이거나, 혹은 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{60}$ 의 아릴렌기 및 치환 또는 비치환된 핵원자수 5 내지 60의 헤테로아릴렌기로 이루어진 군에서 선택되고, a 및 d 는 0 내지 3의 정수이고,

b , c 및 e 는 0 내지 4의 정수이고,

R_1 내지 R_5 는 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소, 중수소(D), 할로젠, 시아노, 치환 또는 비치환된 $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬기, 치환 또는 비치환된 $C_2\sim C_{40}$ 의 알케닐기, 치환 또는 비치환된 $C_2\sim C_{40}$ 의 알키닐기, 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴기, 치환 또는 비치환된 핵원자수 5 내지 40의 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬옥시기, 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴아민기, 치환 또는 비치환된 $C_3\sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬실릴기, 치환 또는 비치환된 $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬보론기, 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴보론기, 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴포스핀기, 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴포스핀옥사이드기 및 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택되며, 다만 상기 R_1 내지 R_5 가 각각 복수인 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이하고,

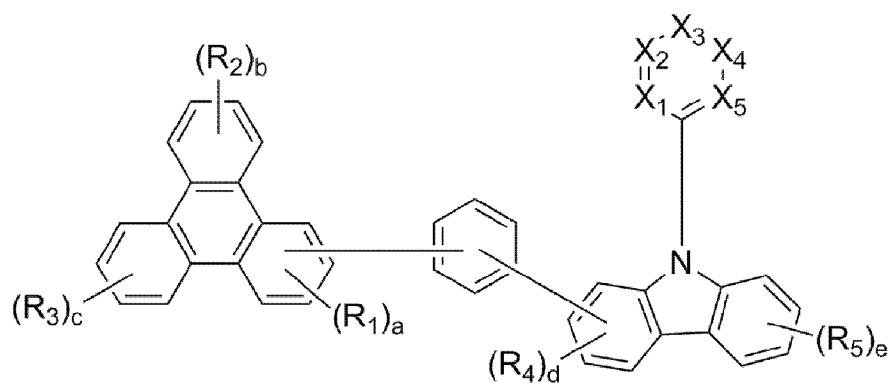
X_1 내지 X_5 는 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 N 또는 $C(R_6)$ 이며, 다만 X_1 내지 X_5 중 적어도 하나는 N이고, 상기 R_6 이 복수인 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이하고,

R_6 은 수소, 중수소(D), 할로젠, 시아노, 치환 또는 비치환된 $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬기, 치환 또는 비치환된 $C_2\sim C_{40}$ 의 알케닐기, 치환 또는 비치환된 $C_2\sim C_{40}$ 의 알키닐기, 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴기, 치환 또는 비치환된

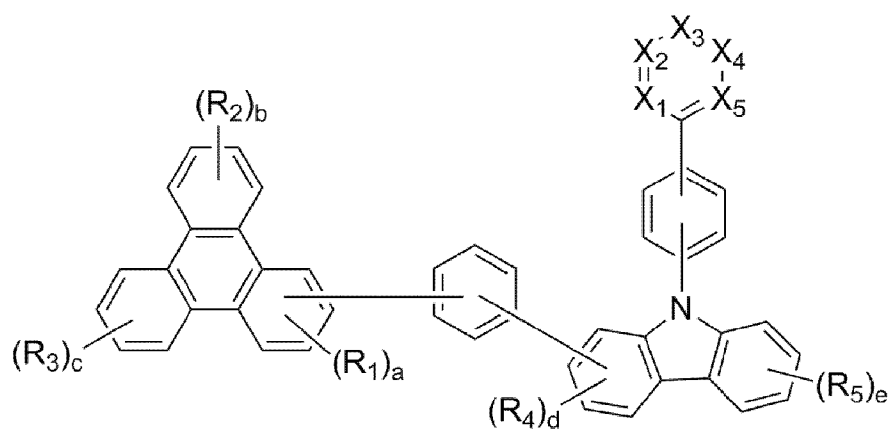
핵원자수 5 내지 40의 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{40}$ 의
 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬옥시기, 치환 또는
 비치환된 $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴아민기, 치환 또는 비치환된 $C_3\sim C_{40}$ 의
 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 핵원자수 3 내지 40의
 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬실릴기, 치환
 또는 비치환된 $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬보론기, 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{40}$ 의
 아릴보론기, 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴포스핀기, 치환 또는
 비치환된 $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴포스핀옥사이드기 및 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{40}$
 의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택되거나, 혹은 인접한 기와
 결합하여 축합 고리를 형성할 수 있으며,
 상기 L_1, L_2 의 아릴렌기 및 헤테로아릴렌기와, R_1 내지 R_6 의 알킬기,
 알케닐기, 알키닐기, 아릴기, 헤테로아릴기, 아릴옥시기, 알킬옥시기,
 아릴아민기, 시클로알킬기, 헤테로시클로알킬기, 알킬실릴기,
 알킬보론기, 아릴보론기, 아릴포스핀기, 아릴포스핀옥사이드기 및
 아릴실릴기는 각각 독립적으로 중수소(D), 할로젠, 시아노, 치환 또는
 비치환된 $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬기, 치환 또는 비치환된 $C_2\sim C_{40}$ 의 알케닐기, 치환
 또는 비치환된 $C_2\sim C_{40}$ 의 알키닐기, 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴기,
 치환 또는 비치환된 핵원자수 5 내지 40의 헤테로아릴기, 치환 또는
 비치환된 $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬옥시기,
 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴아민기, 치환 또는 비치환된 $C_3\sim C_{40}$ 의
 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 핵원자수 3 내지 40의
 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬실릴기, 치환
 또는 비치환된 $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬보론기, 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{40}$ 의
 아릴보론기, 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴포스핀기, 치환 또는
 비치환된 $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴포스핀옥사이드기 및 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{40}$
 의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상의 치환기로 치환될 수
 있고, 이때 상기 치환기가 복수인 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이할
 수 있다.

[청구항 2] 제1항에 있어서,
 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 하기 화학식 2 내지 7 중 어느 하나로
 표시되는 것을 특징으로 하는 화합물.

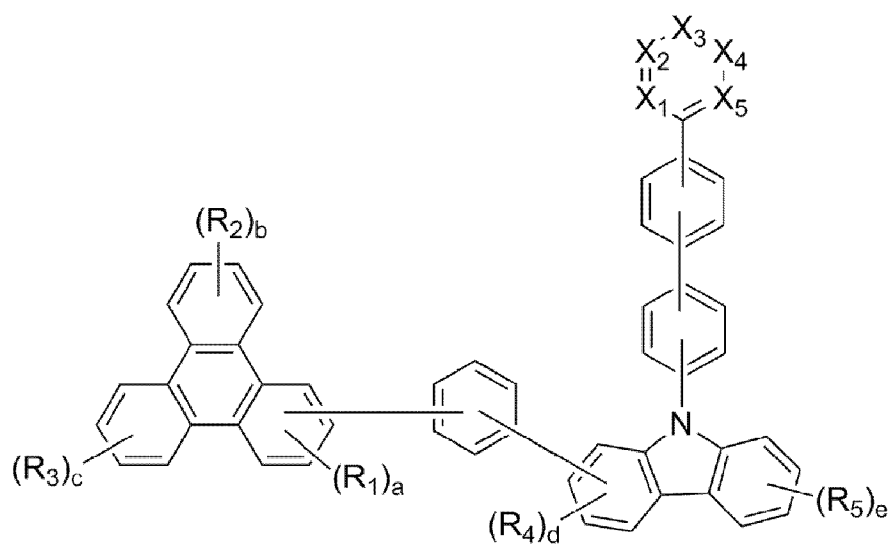
[화학식 2]



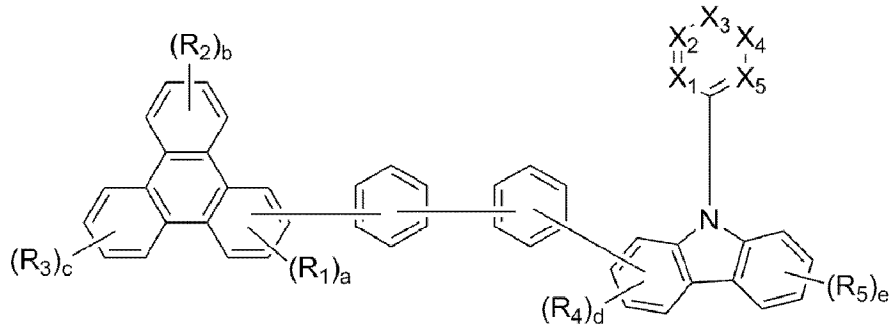
[화학식 3]



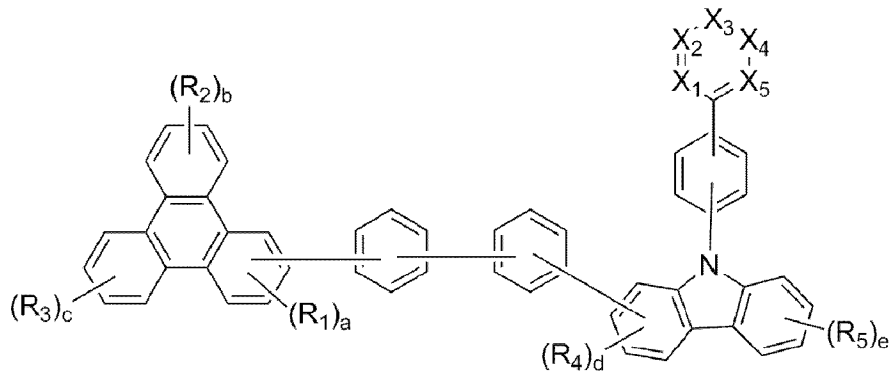
[화학식 4]



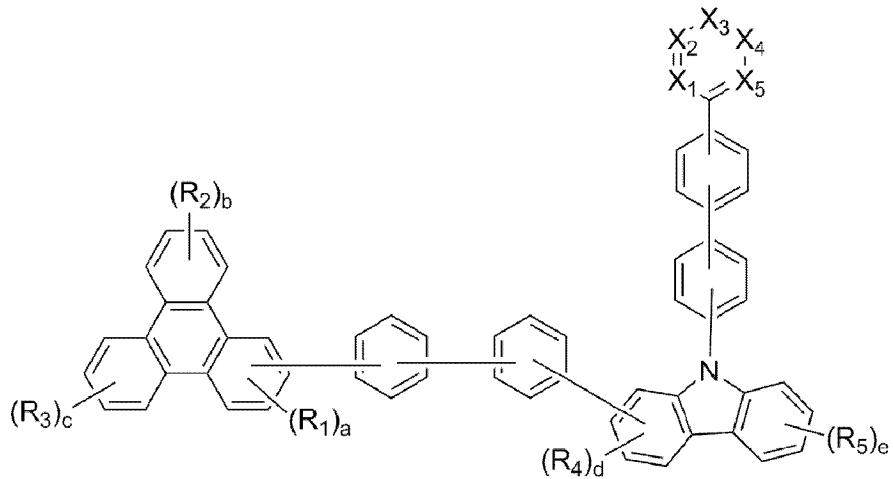
[화학식 5]



[화학식 6]



[화학식 7]



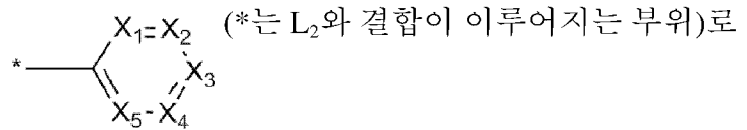
상기 화학식 2 내지 7에서,

a 내지 e, R₁ 내지 R₅, X₁ 내지 X₅는 각각 제1항에서 정의한 바와 같다.

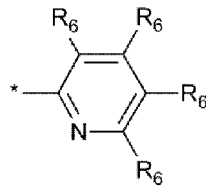
[청구항 3]

제1항에 있어서,

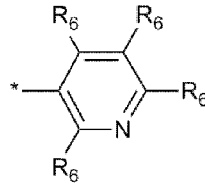
상기 화학식 1에서



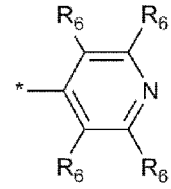
표시되는 구조(치환체)는 하기 화학식 A-1 내지 A-15 중 어느 하나로 표시되는 것을 특징으로 하는 화합물.



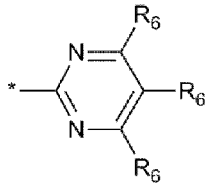
A-1



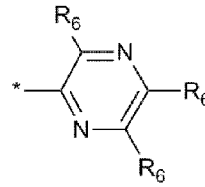
A-2



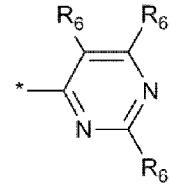
A-3



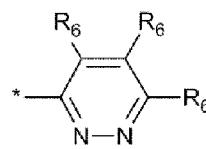
A-4



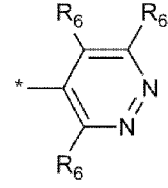
A-5



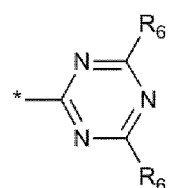
A-6



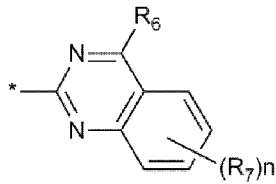
A-7



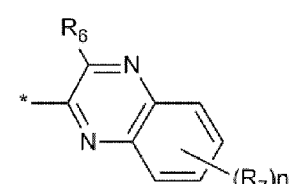
A-8



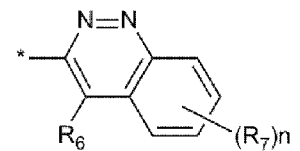
A-9



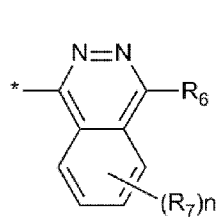
A-10



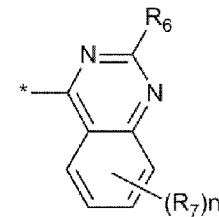
A-11



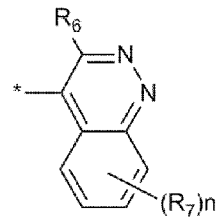
A-12



A-13



A-14



A-15

상기 화학식 A-1 내지 A-15에서,

R_6 은 각각 제1항에서 정의한 바와 같고,

n 은 0 내지 4의 정수이고,

R_7 은 각각 독립적으로 수소, 중수소(D), 할로젠, 시아노, 치환 또는

비치환된 $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬기, 치환 또는 비치환된 $C_2 \sim C_{40}$ 의 알케닐기, 치환

또는 비치환된 $C_2 \sim C_{40}$ 의 알키닐기, 치환 또는 비치환된 $C_6 \sim C_{40}$ 의 아릴기,

치환 또는 비치환된 핵원자수 5 내지 40의 헤테로아릴기, 치환 또는

비치환된 $C_6 \sim C_{40}$ 의 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 $C_1 \sim C_{40}$ 의 알킬옥시기,

치환 또는 비치환된 $C_6 \sim C_{40}$ 의 아릴아민기, 치환 또는 비치환된 $C_3 \sim C_{40}$ 의

시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 핵원자수 3 내지 40의

헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬실릴기, 치환 또는 비치환된 $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬보론기, 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴보론기, 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴포스핀기, 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴포스핀옥사이드기 및 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택되거나, 혹은 인접한 기와 결합하여 축합 고리를 형성할 수 있으며, 다만 상기 R_7 이 복수인 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이하고, 상기 R_7 의 알킬기, 알케닐기, 알키닐기, 아릴기, 헤테로아릴기, 아릴옥시기, 알킬옥시기, 아릴아민기, 시클로알킬기, 헤테로시클로알킬기, 알킬실릴기, 알킬보론기, 아릴보론기, 아릴포스핀기, 아릴포스핀옥사이드기 및 아릴실릴기는 각각 독립적으로 중수소(D), 할로젠, 시아노, 치환 또는 비치환된 $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬기, 치환 또는 비치환된 $C_2\sim C_{40}$ 의 알케닐기, 치환 또는 비치환된 $C_2\sim C_{40}$ 의 알키닐기, 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴기, 치환 또는 비치환된 핵원자수 5 내지 40의 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴옥시기, 치환 또는 비치환된 $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬옥시기, 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴아민기, 치환 또는 비치환된 $C_3\sim C_{40}$ 의 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 핵원자수 3 내지 40의 헤테로시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬실릴기, 치환 또는 비치환된 $C_1\sim C_{40}$ 의 알킬보론기, 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴보론기, 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴포스핀기, 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴포스핀옥사이드기 및 치환 또는 비치환된 $C_6\sim C_{40}$ 의 아릴실릴기로 이루어진 군에서 선택된 1종 이상의 치환기로 치환될 수 있고, 이때 상기 치환기가 복수인 경우, 이들은 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

[청구항 4] (i) 양극, (ii) 음극, 및 (iii) 상기 양극과 음극 사이에 개재(介在)된 1층 이상의 유기물층을 포함하며, 상기 1층 이상의 유기물층 중에서 적어도 하나는 제1항 내지 제3항 중 어느 한 항에 기재된 화합물을 포함하는 유기 전계 발광 소자.

[청구항 5] 제4항에 있어서, 상기 화합물을 포함하는 1층 이상의 유기물층은 정공 주입층, 정공 수송층, 발광 보조층, 발광층, 전자 수송층 및 전자 주입층으로 이루어진 군에서 선택되는 것을 특징으로 하는 유기 전계 발광 소자.

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/KR2016/013716

A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER

C07D 209/82(2006.01)i, C07D 403/04(2006.01)i, C07C 15/38(2006.01)i, C07D 403/10(2006.01)i, C09K 11/06(2006.01)i, H01L 51/00(2006.01)i, H01L 51/50(2006.01)i

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

B. FIELDS SEARCHED

Minimum documentation searched (classification system followed by classification symbols)

C07D 209/82; C07D 403/14; H01L 51/54; H01L 51/00; C09K 11/06; H01L 51/50; C07D 403/04; C07C 15/38; C07D 403/10

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

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

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

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

eKOMPASS (KIPO internal), STN Express(Registry, CAplus), Google & Keywords: organic electroluminescence diode, triphenylene, carbazole

C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
X	KR 10-2011-0122051 A (CHEIL INDUSTRIES INC.) 09 November 2011 See abstract; and claims 1, 7, 12, 20-23.	1-5
X	KR 10-2013-0108265 A (UNIVERSAL DISPLAY CORPORATION) 02 October 2013 See abstract; claims 7, 16, 19; and paragraph [0069].	1-5
X	US 2014-0131665 A1 (UNIVERSAL DISPLAY CORPORATION) 15 May 2014 See abstract; and claims 1, 9.	1-5
A	KR 10-1506999 B1 (CHEIL INDUSTRIES INC.) 31 March 2015 See the entire document.	1-5
PX	KR 10-2015-0141047 A (DOOSAN CORP.) 17 December 2015 See the entire document.	1-5



Further documents are listed in the continuation of Box C.



See patent family annex.

* Special categories of cited documents:

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

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

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

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

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

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

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

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

“&” document member of the same patent family

Date of the actual completion of the international search

10 MARCH 2017 (10.03.2017)

Date of mailing of the international search report

10 MARCH 2017 (10.03.2017)

Name and mailing address of the ISA/KR



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

Facsimile No. 82-42-472-7140

Authorized officer

Telephone No.

INTERNATIONAL SEARCH REPORT
Information on patent family members

International application No.

PCT/KR2016/013716

Patent document cited in search report	Publication date	Patent family member	Publication date
KR 10-2011-0122051 A	09/11/2011	CN 102971395 A	13/03/2013
		CN 102971395 B	05/10/2016
		EP 2568030 A2	13/03/2013
		EP 2568030 A4	26/11/2014
		JP 2013-533604 A	22/08/2013
		JP 5938397 B2	22/06/2016
		US 2013-0056720 A1	07/03/2013
		US 9543530 B2	10/01/2017
		WO 2011-139055 A2	10/11/2011
		WO 2011-139055 A3	19/04/2012
KR 10-2013-0108265 A	02/10/2013	JP 2013-536196 A	19/09/2013
		JP 5770289 B2	26/08/2015
		TW 201226407 A	01/07/2012
		TW 1530496 B	21/04/2016
		US 2013-0140549 A1	06/06/2013
		WO 2012-023947 A1	23/02/2012
US 2014-0131665 A1	15/05/2014	JP 2014-096586 A	22/05/2014
		TW 201425310 A	01/07/2014
KR 10-1506999 B1	31/03/2015	CN 102597158 A	18/07/2012
		CN 105670610 A	15/06/2016
		EP 2497811 A2	12/09/2012
		EP 2497811 A4	11/09/2013
		JP 2013-510141 A	21/03/2013
		KR 10-2011-0048840 A	12/05/2011
		US 2012-0211736 A1	23/08/2012
		US 2012-0305900 A1	06/12/2012
		US 2014-0231779 A1	21/08/2014
		US 2015-0069368 A1	12/03/2015
		US 8828561 B2	09/09/2014
		US 9450193 B2	20/09/2016
		US 9478755 B2	25/10/2016
		WO 2011-055934 A2	12/05/2011
		WO 2011-055934 A3	03/11/2011
		WO 2011-055934 A9	26/10/2012
KR 10-2015-0141047 A	17/12/2015	KR 10-2016-0111351 A	26/09/2016

A. 발명이 속하는 기술분류(국제특허분류(IPC))

C07D 209/82(2006.01)i, C07D 403/04(2006.01)i, C07C 15/38(2006.01)i, C07D 403/10(2006.01)i, C09K 11/06(2006.01)i, H01L 51/00(2006.01)i, H01L 51/50(2006.01)i

B. 조사된 분야

조사된 최소문헌(국제특허분류를 기재)

C07D 209/82; C07D 403/14; H01L 51/54; H01L 51/00; C09K 11/06; H01L 51/50; C07D 403/04; C07C 15/38; C07D 403/10

조사된 기술분야에 속하는 최소문헌 이외의 문헌

한국등록실용신안공보 및 한국공개실용신안공보: 조사된 최소문헌란에 기재된 IPC
일본등록실용신안공보 및 일본공개실용신안공보: 조사된 최소문헌란에 기재된 IPC

국제조사에 이용된 전산 데이터베이스(데이터베이스의 명칭 및 검색어(해당하는 경우))

eKOMPASS(특허청 내부 검색시스템), STN Express(Registry, Cplus), Google& 키워드: 유기 전계 발광 소자, 트리페닐렌, 카바졸

C. 관련 문헌

카테고리*	인용문헌명 및 관련 구절(해당하는 경우)의 기재	관련 청구항
X	KR 10-2011-0122051 A (제일모직주식회사) 2011.11.09 요약; 및 청구항 1, 7, 12, 20-23 참조.	1-5
X	KR 10-2013-0108265 A (유니버설 디스플레이 코퍼레이션) 2013.10.02 요약; 청구항 7, 16, 19; 및 단락 [0069] 참조.	1-5
X	US 2014-0131665 A1 (UNIVERSAL DISPLAY CORPORATION) 2014.05.15 요약; 및 청구항 1, 9 참조.	1-5
A	KR 10-1506999 B1 (제일모직 주식회사) 2015.03.31 전체 문헌 참조.	1-5
PX	KR 10-2015-0141047 A (주식회사 두산) 2015.12.17 전체 문헌 참조.	1-5

☐ 추가 문헌이 C(계속)에 기재되어 있습니다.

☒ 대응특허에 관한 별지를 참조하십시오.

* 인용된 문헌의 특별 카테고리:

“A” 특별히 관련이 없는 것으로 보이는 일반적인 기술수준을 정의한 문헌

“T” 국제출원일 또는 우선일 후에 공개된 문헌으로, 출원과 상충하지 않으며 발명의 기초가 되는 원리나 이론을 이해하기 위해 인용된 문헌

“E” 국제출원일보다 빠른 출원일 또는 우선일을 가지나 국제출원일 이후에 공개된 선출원 또는 특허 문헌

“X” 특별한 관련이 있는 문헌. 해당 문헌 하나만으로 청구된 발명의 신규성 또는 진보성이 없는 것으로 본다.

“L” 우선권 주장에 의문을 제기하는 문헌 또는 다른 인용문헌의 공개일 또는 다른 특별한 이유(이유를 명시)를 밝히기 위하여 인용된 문헌

“Y” 특별한 관련이 있는 문헌. 해당 문헌이 하나 이상의 다른 문헌과 조합하는 경우로 그 조합이 당업자에게 자명한 경우 청구된 발명은 진보성이 없는 것으로 본다.

“O” 구두 개시, 사용, 전시 또는 기타 수단을 언급하고 있는 문헌

“&” 동일한 대응특허문헌에 속하는 문헌

“P” 우선일 이후에 공개되었으나 국제출원일 이전에 공개된 문헌

국제조사의 실제 완료일

2017년 03월 10일 (10.03.2017)

국제조사보고서 발송일

2017년 03월 10일 (10.03.2017)

ISA/KR의 명칭 및 우편주소



대한민국 특허청
(35208) 대전광역시 서구 청사로 189,
4동 (둔산동, 정부대전청사)

팩스 번호 +82-42-481-8578

심사관

이기철

전화번호 +82-42-481-3353



국제조사보고서에서 인용된 특허문헌	공개일	대응특허문헌	공개일
KR 10-2011-0122051 A	2011/11/09	CN 102971395 A CN 102971395 B EP 2568030 A2 EP 2568030 A4 JP 2013-533604 A JP 5938397 B2 US 2013-0056720 A1 US 9543530 B2 WO 2011-139055 A2 WO 2011-139055 A3	2013/03/13 2016/10/05 2013/03/13 2014/11/26 2013/08/22 2016/06/22 2013/03/07 2017/01/10 2011/11/10 2012/04/19
KR 10-2013-0108265 A	2013/10/02	JP 2013-536196 A JP 5770289 B2 TW 201226407 A TW I530496 B US 2013-0140549 A1 WO 2012-023947 A1	2013/09/19 2015/08/26 2012/07/01 2016/04/21 2013/06/06 2012/02/23
US 2014-0131665 A1	2014/05/15	JP 2014-096586 A TW 201425310 A	2014/05/22 2014/07/01
KR 10-1506999 B1	2015/03/31	CN 102597158 A CN 105670610 A EP 2497811 A2 EP 2497811 A4 JP 2013-510141 A KR 10-2011-0048840 A US 2012-0211736 A1 US 2012-0305900 A1 US 2014-0231779 A1 US 2015-0069368 A1 US 8828561 B2 US 9450193 B2 US 9478755 B2 WO 2011-055934 A2 WO 2011-055934 A3 WO 2011-055934 A9	2012/07/18 2016/06/15 2012/09/12 2013/09/11 2013/03/21 2011/05/12 2012/08/23 2012/12/06 2014/08/21 2015/03/12 2014/09/09 2016/09/20 2016/10/25 2011/05/12 2011/11/03 2012/10/26
KR 10-2015-0141047 A	2015/12/17	KR 10-2016-0111351 A	2016/09/26