

(12) 특허협력조약에 의하여 공개된 국제출원

(19) 세계지식재산권기구
국제사무국



(10) 국제공개번호

(43) 국제공개일
2019년 10월 3일 (03.10.2019) WIPO | PCT

WO 2019/190223 A1

- (51) 국제특허분류: C07D 403/14 (2006.01) C09K 11/06 (2006.01)
C07D 413/14 (2006.01) H01L 51/00 (2006.01)
C07D 251/24 (2006.01) H01L 51/50 (2006.01)
C07D 209/82 (2006.01)
- (21) 국제출원번호: PCT/KR2019/003641
- (22) 국제출원일: 2019년 3월 28일 (28.03.2019)
- (25) 출원언어: 한국어
- (26) 공개언어: 한국어
- (30) 우선권정보: 10-2018-0035819 2018년 3월 28일 (28.03.2018) KR
- (71) 출원인: 주식회사 엘지화학 (LG CHEM, LTD.) [KR/KR]; 07336 서울시 영등포구 여의대로 128, Seoul (KR).
성균관대학교산학협력단 (RESEARCH BUSINESS FOUNDATION SUNGKYUNKWAN UNIVERSITY) [KR/KR]; 16419 경기도 수원시 장안구 서부로 2066, Gyeonggi-do (KR).
- (72) 발명자: 강유진 (KANG, Yujin); 34122 대전시 유성구 문지로 188 LG화학 기술연구원, Daejeon (KR). 이준엽 (LEE, Jun Yeob); 13613 경기도 성남시 분당구 정자일로 55 105동 304호, Gyeonggi-do (KR). 이호중 (LEE, Ho Jung); 34122 대전시 유성구 문지로 188 LG화학 기술연구원, Daejeon (KR). 홍완표 (HONG, Wanpyo); 34122 대전시 유성구 문지로 188 LG화학 기술연구원, Daejeon (KR). 윤홍식 (YOON, Hongsik); 34122 대전시 유성구 문지로 188 LG화학 기술연구원, Daejeon (KR).
- (74) 대리인: 정순성 (CHUNG, Soon-Sung); 06253 서울시 강남구 강남대로 318, 타워837 빌딩, 6층, 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, JO, JP, KE, KG, KH, 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 제21조(3))

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

(54) 발명의 명칭: 화합물 및 이를 포함하는 유기 발광 소자

(57) Abstract: The present application relates to a compound of chemical formula 1 and an organic light-emitting device comprising same.

(57) 요약서: 본 출원은 화학식 1의 화합물 및 이를 포함하는 유기 발광 소자에 관한 것이다.

4
3
2
1

WO 2019/190223 A1

명세서

발명의 명칭: 화합물 및 이를 포함하는 유기 발광 소자

기술분야

- [1] 본 명세서는 화합물 및 이를 포함하는 유기 발광 소자에 관한 것이다.
- [2] 본 명세서는 2018년 3월 28일에 한국특허청에 제출된 한국특허출원 제10-2018-0035819호의 출원일의 이익을 주장하며, 그 내용은 전부 본 명세서에 포함된다.

배경기술

- [3] 일반적으로 유기 발광 현상이란 유기 물질을 이용하여 전기에너지를 빛에너지로 전환시켜주는 현상을 말한다. 유기 발광 현상을 이용하는 유기 발광 소자는 통상 양극과 음극 및 이 사이에 유기물층을 포함하는 구조를 가진다. 여기서 유기물층은 유기 발광 소자의 효율과 안정성을 높이기 위하여 각기 다른 물질로 구성된 다층의 구조로 이루어진 경우가 많으며, 예컨대 정공주입층, 정공수송층, 발광층, 전자수송층, 전자주입층 등으로 이루어 질 수 있다. 이러한 유기 발광 소자의 구조에서 두 전극 사이에 전압을 걸어주게 되면 양극에서는 정공이, 음극에서는 전자가 유기물층에 주입되게 되고, 주입된 정공과 전자가 만났을 때 엑시톤(exciton)이 형성되며, 이 엑시톤이 다시 바닥상태로 떨어질 때 빛이 나게 된다.
- [4] 상기와 같은 유기 발광 소자를 위한 새로운 재료의 개발이 계속 요구되고 있다.

발명의 상세한 설명

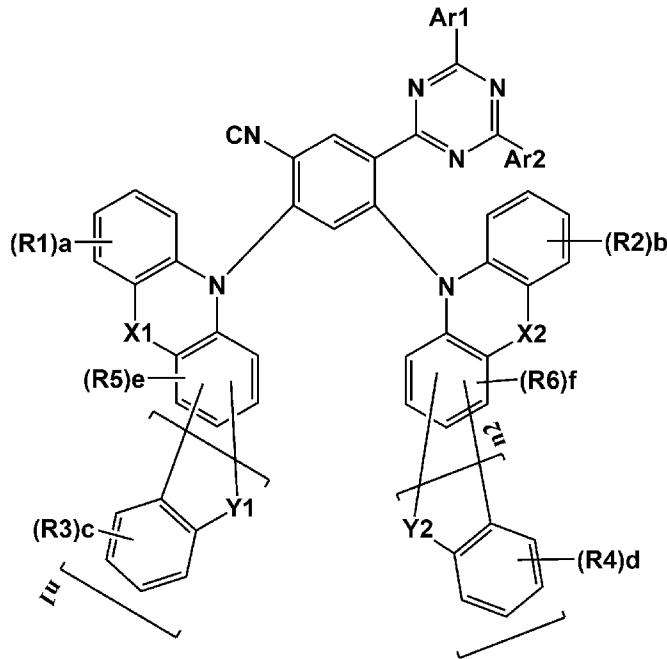
기술적 과제

- [5] 본 명세서는 화합물 및 이를 포함하는 유기 발광 소자를 제공한다.

과제 해결 수단

- [6] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면 하기 화학식 1로 표시되는 화합물을 제공한다.
- [7] [화학식 1]

[8]



[9] 상기 화학식 1에 있어서,

[10] X1 및 X2는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 직접결합; O; S 또는 CRR'이고,

[11] Y1 및 Y2는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 NRa; S 또는 CRbRc이며, n1 및 n2는 각각 0 또는 1이고,

[12] Ar1 및 Ar2는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 아릴기; 또는 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기이며,

[13] R1 내지 R6, Ra 내지 Rc, R 및 R'는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; 중수소; 니트릴기; 치환 또는 비치환된 알킬기; 치환 또는 비치환된 시클로알킬기; 치환 또는 비치환된 알콕시기; 치환 또는 비치환된 아릴옥시기; 치환 또는 비치환된 알케닐기; 치환 또는 비치환된 실릴기; 치환 또는 비치환된 아민기; 치환 또는 비치환된 아릴기; 또는 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기이며,

[14] a 내지 d는 각각 0 내지 4의 정수이고, e 및 f는 각각 0 내지 4의 정수이며, e+n1은 3이하이고, f+n2는 3이하이고, a 내지 f가 복수일 때의 괄호안의 치환기는 서로 같거나 상이하다.

[15] 또한, 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 제1 전극; 상기 제1 전극에 대향하여 구비된 제2 전극; 및 상기 제1 전극과 제2 전극 사이에 구비된 1층 이상의 유기물층을 포함하는 유기 발광 소자로서, 상기 유기물층 중 1층 이상은 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하는 것인 유기 발광 소자를 제공한다.

발명의 효과

[16] 본 명세서의 일 실시상태에 따른 화합물은 유기 발광 소자의 유기물층의 재료로서 사용될 수 있고, 이를 사용함으로써 유기 발광 소자에서 효율의 향상,

낮은 구동전압 및/또는 수명 특성의 향상이 가능하다.

도면의 간단한 설명

- [17] 도 1은 본 명세서의 일 실시상태에 따르는 유기 발광 소자를 도시한 것이다.
- [18] 도 2 및 3은 본 명세서의 또 하나의 실시상태에 따르는 유기 발광 소자를 도시한 것이다.
- [19] [부호의 설명]
- [20] 1: 기관
- [21] 2: 양극
- [22] 3: 발광층
- [23] 4: 음극
- [24] 5: 정공주입층
- [25] 6: 정공수송층
- [26] 7: 전자수송층
- [27] 8: 전자저지층
- [28] 9: 정공저지층
- [29] 10: 전자주입 및 수송층

발명의 실시를 위한 최선의 형태

- [30] 이하, 본 명세서에 대하여 더욱 상세하게 설명한다.
- [31] 본 명세서의 일 실시상태는 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 제공한다.
- [32] 본 명세서의 일 실시상태에 따른 상기 화학식 1의 화합물은 ΔE_{st} 0.2eV 미만의 지연형광 특성을 가질 수 있다. 상기 ΔE_{st} 는 일중항과 삼중항의 에너지를 각각 측정한 뒤 그 차이를 구한 값이며, 일중항 및 삼중항의 에너지 값은 형광기기를 이용하여 측정할 수 있다. 이러한 지연형광의 특성을 갖는 이유는 분자의 HOMO(highest occupied molecular orbital)와 LUMO(lowest unoccupied molecular orbital)의 에너지 분포가 분리되어 있으며, 일중항과 삼중항의 에너지 차가 적어 역계간전이(Reverse Intersystem Crossing)에 의해 삼중항에서 일중항으로의 엑시톤 이동이 일어나기 때문이다.
- [33] 본 명세서에 있어서, 어떤 부분이 어떤 구성요소를 "포함" 한다고 할 때, 이는 특별히 반대되는 기재가 없는 한 다른 구성요소를 제외하는 것이 아니라 다른 구성 요소를 더 포함할 수 있는 것을 의미한다.
- [34] 본 명세서에 있어서, 어떤 부재가 다른 부재 "상에" 위치하고 있다고 할 때, 이는 어떤 부재가 다른 부재에 접해 있는 경우뿐 아니라 두 부재 사이에 또 다른 부재가 존재하는 경우도 포함한다.
- [35] 본 명세서에 있어서 치환기의 예시들은 아래에서 설명하나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [36] 상기 "치환"이라는 용어는 화합물의 탄소 원자에 결합된 수소 원자가 다른 치환기로 바뀌는 것을 의미하며, 치환되는 위치는 수소 원자가 치환되는 위치,

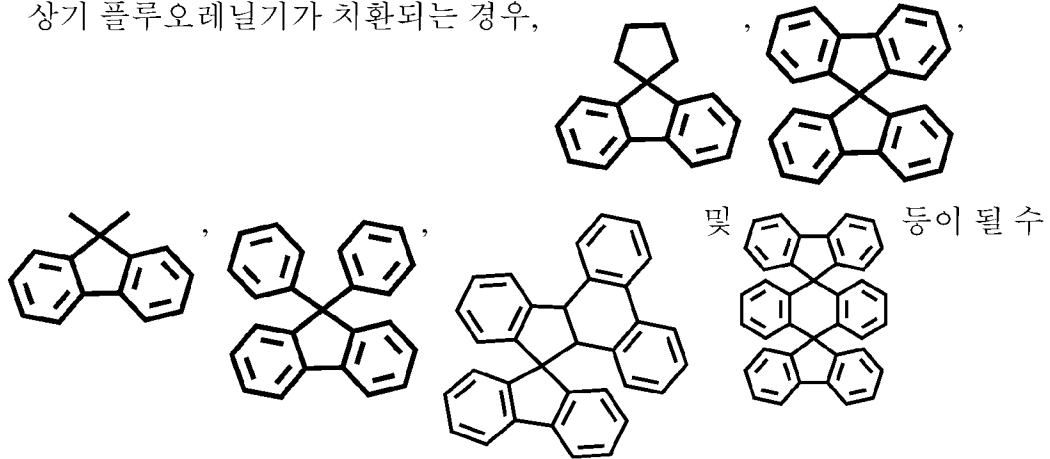
즉 치환기가 치환 가능한 위치라면 한정하지 않으며, 2 이상 치환되는 경우, 2 이상의 치환기는 서로 동일하거나 상이할 수 있다.

- [37] 본 명세서에서 "치환 또는 비치환된"이라는 용어는 수소; 중수소; 니트릴기; 치환 또는 비치환된 알킬기; 치환 또는 비치환된 시클로알킬기; 치환 또는 비치환된 알콕시기; 치환 또는 비치환된 아릴옥시기; 치환 또는 비치환된 알케닐기; 치환 또는 비치환된 실릴기; 치환 또는 비치환된 붕소기; 치환 또는 비치환된 아민기; 치환 또는 비치환된 아릴기; 및 치환 또는 비치환된 헤테로고리기로 이루어진 군에서 선택된 1 또는 2 이상의 치환기로 치환되었거나 상기 예시된 치환기 중 2 이상의 치환기가 연결된 치환기로 치환되거나, 또는 어떠한 치환기도 갖지 않는 것을 의미한다. 예컨대, "2 이상의 치환기가 연결된 치환기"는 아릴기로 치환된 아릴기, 헤테로아릴기로 치환된 아릴기, 아릴기로 치환된 헤테로고리, 알킬기로 치환된 아릴기 등일 수 있다.
- [38] 본 명세서에 있어서, 상기 알킬기는 직쇄 또는 분지쇄일 수 있고, 탄소수는 특별히 한정되지 않으나 1 내지 30인 것이 바람직하다. 구체적인 예로는 메틸, 에틸, 프로필, n-프로필, 이소프로필, 부틸, n-부틸, 이소부틸, tert-부틸, sec-부틸, 1-메틸-부틸, 1-에틸-부틸, 펜틸, n-펜틸, 이소펜틸, 네오펜틸, tert-펜틸, 헥실, n-헥실, 1-메틸펜틸, 2-메틸펜틸, 4-메틸-2-펜틸, 3,3-디메틸부틸, 2-에틸부틸, 헵틸, n-헵틸, 1-메틸헥실, 시클로펜틸메틸, 시클로헥실메틸, 옥틸, n-옥틸, tert-옥틸, 1-메틸헵틸, 2-에틸헥실, 2-프로필펜틸, n-노닐, 2,2-디메틸헵틸, 1-에틸-프로필, 1,1-디메틸-프로필, 이소헥실, 2-메틸펜틸, 4-메틸헥실, 5-메틸헥실 등이 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [39] 본 명세서에 있어서, 시클로알킬기는 특별히 한정되지 않으나, 탄소수 3 내지 30인 것이 바람직하며, 구체적으로 시클로프로필, 시클로부틸, 시클로펜틸, 3-메틸시클로펜틸, 2,3-디메틸시클로펜틸, 시클로헥실, 3-메틸시클로헥실, 4-메틸시클로헥실, 2,3-디메틸시클로헥실, 3,4,5-트리메틸시클로헥실, 4-tert-부틸시클로헥실, 시클로헵틸, 시클로옥틸 등이 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [40] 본 명세서에 있어서, 상기 알콕시기는 직쇄, 분지쇄 또는 고리쇄일 수 있다. 알콕시기의 탄소수는 특별히 한정되지 않으나, 탄소수 1 내지 30인 것이 바람직하다. 구체적으로, 메톡시, 에톡시, n-프로폭시, 이소프로폭시, n-부톡시, 이소부톡시, tert-부톡시, sec-부톡시, n-펜틸옥시, 네오펜틸옥시, 이소펜틸옥시, n-헥실옥시, 3,3-디메틸부틸옥시, 2-에틸부틸옥시, n-옥틸옥시, n-노닐옥시, n-데실옥시, 벤질옥시, p-메틸벤질옥시 등이 될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [41] 본 명세서에 있어서, 아민기는 -NH₂; 알킬아민기; N-알킬아릴아민기; 아릴아민기; N-아릴헤테로아릴아민기; N-알킬헤테로아릴아민기 및 헤테로아릴아민기로 이루어진 군으로부터 선택될 수 있으며, 탄소수는 특별히 한정되지 않으나, 1 내지 30인 것이 바람직하다. 아민기의 구체적인 예로는

메틸아민기, 디메틸아민기, 에틸아민기, 디에틸아민기, 페닐아민기, 나프틸아민기, 바이페닐아민기, 안트라세닐아민기, 9-메틸-안트라세닐아민기, 디페닐아민기, N-페닐나프틸아민기, 디톨릴아민기, N-페닐톨릴아민기, 트리페닐아민기, N-페닐바이페닐아민기; N-페닐나프틸아민기; N-바이페닐나프틸아민기; N-나프틸플루오레닐아민기; N-페닐페난트레닐아민기; N-바이페닐페난트레닐아민기; N-페닐플루오레닐아민기; N-페닐터페닐아민기; N-페난트레닐플루오레닐아민기; N-바이페닐플루오레닐아민기 등이 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

- [42] 본 명세서에 있어서, 아릴아민기는 아민기의 N에 아릴기가 치환된 아민기로서, 1개 또는 2개의 아릴기로 치환된 아민기를 의미한다. 아릴아민기는 -NRR'로 표시될 수 있고, R 및 R' 중 적어도 하나는 아릴기이고, 나머지는 수소, 알킬기 또는 아릴기 일 수 있다. 여기서, 알킬기 및 아릴기 본 명세서에 예시된 것들일 수 있다.
- [43] 본 명세서에 있어서, N-알킬아릴아민기는 아민기의 N에 알킬기 및 아릴기가 치환된 아민기를 의미한다.
- [44] 본 명세서에 있어서, N-아릴헤테로아릴아민기는 아민기의 N에 아릴기 및 헤테로아릴기가 치환된 아민기를 의미한다.
- [45] 본 명세서에 있어서, N-알킬헤테로아릴아민기는 아민기의 N에 알킬기 및 헤테로아릴아민기가 치환된 아민기를 의미한다.
- [46] 본 명세서에 있어서, 알킬아민기, N-아릴알킬아민기, 알킬티옥시기, 알킬술폭시기, N-알킬헤테로아릴아민기 중의 알킬기는 전술한 알킬기의 예시와 같다.
- [47] 본 명세서에 있어서, 상기 알케닐기는 직쇄 또는 분지쇄일 수 있고, 탄소수는 특별히 한정되지 않으나, 2 내지 30인 것이 바람직하다. 구체적인 예로는 비닐, 1-프로페닐, 이소프로페닐, 1-부테닐, 2-부테닐, 3-부테닐, 1-펜테닐, 2-펜테닐, 3-펜테닐, 3-메틸-1-부테닐, 1,3-부타디에닐, 알릴, 1-페닐비닐-1-일, 2-페닐비닐-1-일, 2,2-디페닐비닐-1-일, 2-페닐-2-(나프틸-1-일)비닐-1-일, 2,2-비스(디페닐-1-일)비닐-1-일, 스틸베닐기, 스티레닐기 등이 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [48] 본 명세서에 있어서, 실릴기는 구체적으로 트리메틸실릴기, 트리에틸실릴기, t-부틸디메틸실릴기, 비닐디메틸실릴기, 프로필디메틸실릴기, 트리페닐실릴기, 디페닐실릴기, 페닐실릴기 등이 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [49] 본 명세서에 있어서, 아릴기는 특별히 한정되지 않으나, 탄소수 6 내지 30인 것이 바람직하며, 상기 아릴기는 단환식 또는 다환식일 수 있다.
- [50] 상기 아릴기가 단환식 아릴기인 경우 탄소수는 특별히 한정되지 않으나, 탄소수 6 내지 30인 것이 바람직하다. 구체적으로 단환식 아릴기로는 페닐기, 바이페닐기, 터페닐기 등이 될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

- [51] 상기 아릴기가 다환식 아릴기인 경우 탄소수는 특별히 한정되지 않으나, 탄소수 10 내지 30인 것이 바람직하다. 구체적으로 다환식 아릴기로는 나프틸기, 안트라세닐기, 페난트릴기, 트리페닐기, 파이레닐기, 페날레닐기, 페릴레닐기, 크라이세닐기, 플루오레닐기 등이 될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [52] 본 명세서에 있어서, 상기 플루오레닐기는 치환될 수 있으며, 인접한 기들이 서로 결합하여 고리를 형성할 수 있다.
- [53] 상기 플루오레닐기가 치환되는 경우,



있다. 다만, 이에 한정되는 것은 아니다.

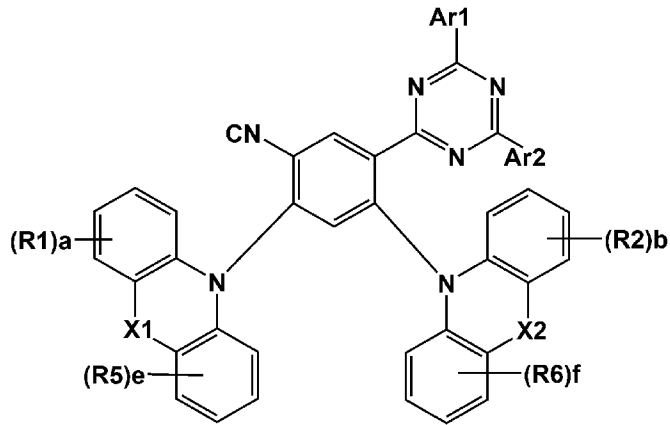
- [54] 본 명세서에 있어서, 아릴옥시기, N-아릴알킬아민기, 및 N-아릴헤테로아릴아민기 중의 아릴기는 전술한 아릴기의 예시와 같다. 구체적으로 아릴옥시기로는 페녹시기, p-토릴옥시기, m-토릴옥시기, 3,5-디메틸-페녹시기, 2,4,6-트리메틸페녹시기, p-tert-부틸페녹시기, 3-바이페닐옥시기, 4-바이페닐옥시기, 1-나프틸옥시기, 2-나프틸옥시기, 4-메틸-1-나프틸옥시기, 5-메틸-2-나프틸옥시기, 1-안트릴옥시기, 2-안트릴옥시기, 9-안트릴옥시기, 1-페난트릴옥시기, 3-페난트릴옥시기, 9-페난트릴옥시기 등이 있다.
- [55] 본 명세서에 있어서, 헤테로아릴기는 탄소가 아닌 원자, 이종원자를 1 이상 포함하는 것으로서, 구체적으로 상기 이종 원자는 O, N, Se 및 S 등으로 이루어진 군에서 선택되는 원자를 1 이상 포함할 수 있다. 탄소수는 특별히 한정되지 않으나, 탄소수 2 내지 30인 것이 바람직하며, 상기 헤테로아릴기는 단환식 또는 다환식일 수 있다. 헤테로고리기의 예로는 티오펜기, 퓨란기, 피롤기, 이미다졸기, 티아졸기, 옥사졸기, 옥사디아졸기, 피리딜기, 바이피리딜기, 피리미딜기, 트리아지닐기, 트리아졸기, 아크리딜기, 피리다지닐기, 피라지닐기, 퀴놀리닐기, 퀴나졸리닐기, 퀴녹살리닐기, 프탈라지닐기, 피리도 피리미딜기, 피리도 피라지닐기, 피라지노 피라지닐기, 이소퀴놀리닐기, 인돌릴기, 카바졸기, 벤조옥사졸기, 벤조이미다졸기, 벤조티아졸기, 벤조카바졸기, 디벤조피롤기, 인돌기, 벤조티오펜기, 디벤조티오펜기, 벤조퓨란기, 벤조퀴놀릴기; 벤조나프토티오펜기, 벤조나프토티퓨란기, 페난트롤리닐기(phenanthroline), 티아졸기, 이소옥사졸기, 옥사디아졸기, 티아디아졸기, 벤조티아졸기,

페녹사진기, 페노티아진기 및 디벤조퓨란기 등이 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

- [56] 본 명세서에 있어서, 헥테로아릴아민기의 예로는 치환 또는 비치환된 모노헥테로아릴아민기, 치환 또는 비치환된 디헥테로아릴아민기, 또는 치환 또는 비치환된 트리헥테로아릴아민기가 있다. 상기 헥테로아릴기가 2 이상을 포함하는 헥테로아릴아민기는 단환식 헥테로아릴기, 다환식 헥테로아릴기, 또는 단환식 헥테로아릴기와 다환식 헥테로아릴기를 동시에 포함할 수 있다. 예컨대, 상기 헥테로아릴아민기 중의 헥테로아릴기는 전술한 헥테로아릴기의 예시 중에서 선택될 수 있다.
- [57] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 Ar1 및 Ar2는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 C6-C12 아릴기; 또는 치환 또는 비치환된 C2-C12 헥테로아릴기이다.
- [58] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 Ar1 및 Ar2는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 알킬기, 아릴기 또는 헥테로아릴기로 치환 또는 비치환된 C6-C12 아릴기; 또는 알킬기, 아릴기 또는 헥테로아릴기로 치환 또는 비치환된 C2-C12 헥테로아릴기이다.
- [59] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 Ar1 및 Ar2는 서로 같거나 상이하고, 치환 또는 비치환된 페닐기; 치환 또는 비치환된 바이페닐기; 치환 또는 비치환된 나프틸기; 치환 또는 비치환된 플루오레닐기; 치환 또는 비치환된 디벤조퓨란기; 또는 치환 또는 비치환된 디벤조티오펜기이다.
- [60] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 Ar1 및 Ar2는 서로 같거나 상이하고, 알킬기, 또는 아릴기로 치환 또는 비치환된 페닐기; 알킬기, 또는 아릴기로 치환 또는 비치환된 바이페닐기; 알킬기, 또는 아릴기로 치환 또는 비치환된 나프틸기; 알킬기, 또는 아릴기로 치환 또는 비치환된 플루오레닐기; 알킬기, 또는 아릴기로 치환 또는 비치환된 디벤조퓨란기; 또는 알킬기, 또는 아릴기로 치환 또는 비치환된 디벤조티오펜기이다.
- [61] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 Ar1 및 Ar2는 서로 같거나 상이하고, 메틸기, 또는 페닐기로 치환 또는 비치환된 페닐기; 메틸기, 또는 페닐기로 치환 또는 비치환된 바이페닐기; 메틸기, 또는 페닐기로 치환 또는 비치환된 나프틸기; 메틸기, 또는 페닐기로 치환 또는 비치환된 플루오레닐기; 메틸기, 또는 페닐기로 치환 또는 비치환된 디벤조퓨란기; 또는 메틸기, 또는 페닐기로 치환 또는 비치환된 디벤조티오펜기이다.
- [62] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 Ar1 및 Ar2는 서로 같거나 상이하고, 페닐기; 바이페닐기; 나프틸기; 메틸기로 치환된 플루오레닐기; 디벤조퓨란기; 또는 디벤조티오펜기이다.
- [63] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 X1 및 X2는 직접결합이다.
- [64] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 X1 및 X2 중 하나는 직접결합이고, 나머지는 O, S 또는 CRR'이다.

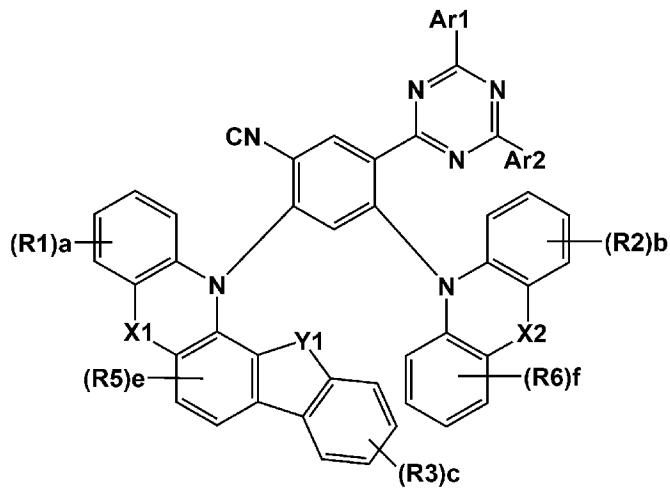
- [65] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 X1 및 X2는 각각 O, S 또는 CRR'이다.
- [66] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 Y1 및 Y2는 서로 동일하고, NRa; S 또는 CRbRc이다.
- [67] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 R 및 R'는 알킬기이다.
- [68] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 R 및 R'는 메틸기이다.
- [69] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 Rb 및 Rc는 알킬기이다.
- [70] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 Rb 및 Rc는 메틸기이다.
- [71] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 Ra는 치환 또는 비치환된 아릴기; 또는 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기이다.
- [72] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 Ra는 치환 또는 비치환된 C6-C12 아릴기; 또는 치환 또는 비치환된 C2-C12 헤테로아릴기이다.
- [73] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 Ra는 알킬기, 아릴기 또는 헤테로아릴기로 치환 또는 비치환된 C6-C12 아릴기; 또는 알킬기, 아릴기 또는 헤테로아릴기로 치환 또는 비치환된 C2-C12 헤테로아릴기이다.
- [74] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 Ra는 알킬기, 아릴기 또는 헤테로아릴기로 치환 또는 비치환된 C6-C12 아릴기이다.
- [75] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 Ra는 치환 또는 비치환된 페닐기; 치환 또는 비치환된 바이페닐기; 또는 치환 또는 비치환된 나프틸기이다.
- [76] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 Ra는 알킬기, 아릴기 또는 헤테로아릴기로 치환 또는 비치환된 페닐기; 알킬기, 아릴기 또는 헤테로아릴기로 치환 또는 비치환된 바이페닐기; 또는 알킬기, 아릴기 또는 헤테로아릴기로 치환 또는 비치환된 나프틸기이다.
- [77] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 Ra는 알킬기, 아릴기 또는 헤테로아릴기로 치환 또는 비치환된 페닐기이다.
- [78] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 Ra는 페닐기이다.
- [79] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, n1 및 n2는 0이다.
- [80] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, n1 및 n2 중 적어도 하나는 1이다.
- [81] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, n1 및 n2는 각각 1이다.
- [82] 본 발명에 있어서, n1 및 n2 중 적어도 하나가 1인 경우, 화학식 1의 3환고리에 추가의 축합고리가 결합하게 되어 화합물의 전자 수용능력이 향상된다. 또한, 추가의 축합고리가 결합하는 화합물은 내열성이 우수하여 유기 발광 소자 제작시에 적절한 증착온도를 유지할 수 있어서 유리하다. 또한, 유기 발광 소자 제조시에 증착용 성막 장치 및 유기 발광 소자의 오염을 줄이는 장점이 있다.
- [83] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 화학식 1은 하기 화학식들 중에서 선택된다.
- [84] [화학식 2]

[85]



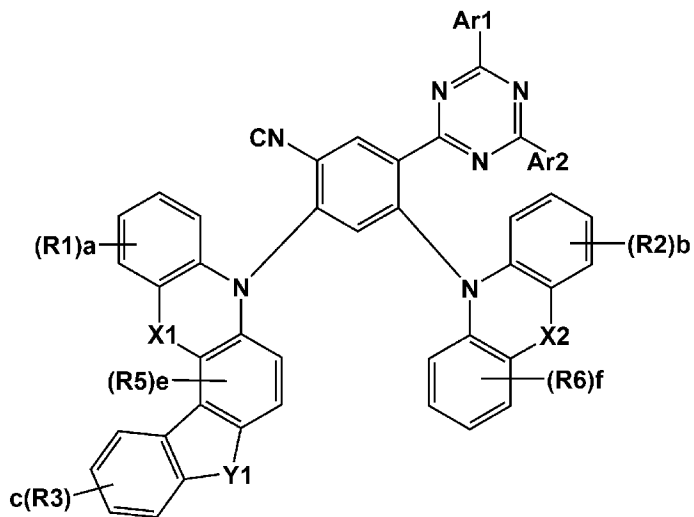
[86] [화학식 3]

[87]



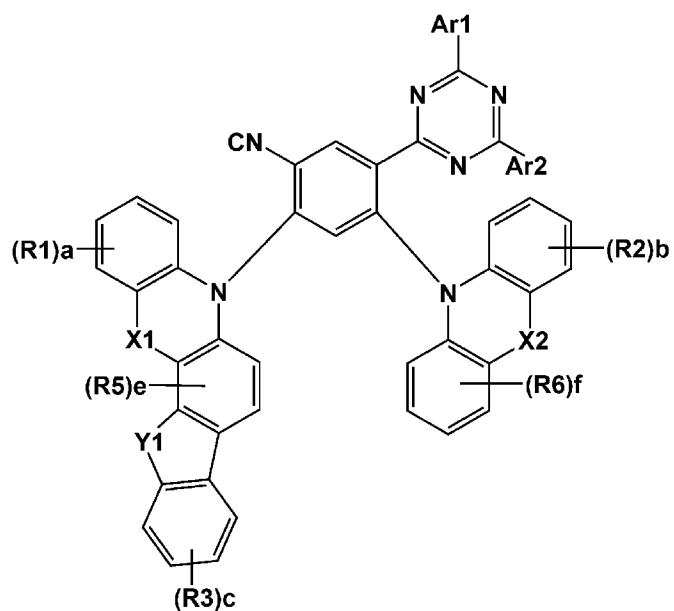
[88] [화학식 4]

[89]



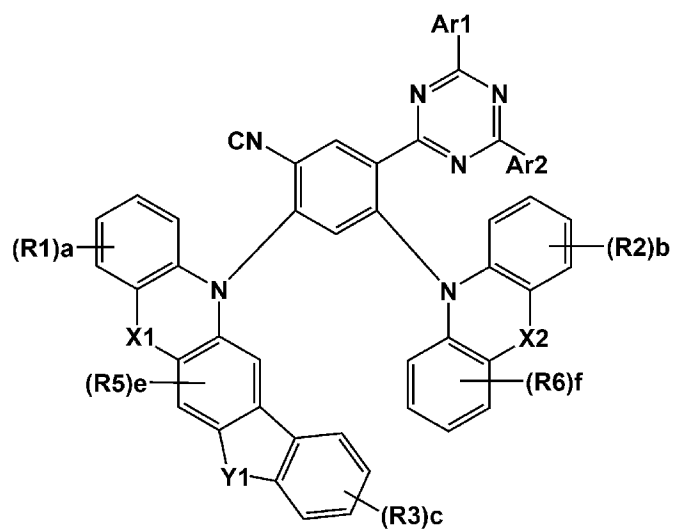
[90] [화학식 5]

[91]



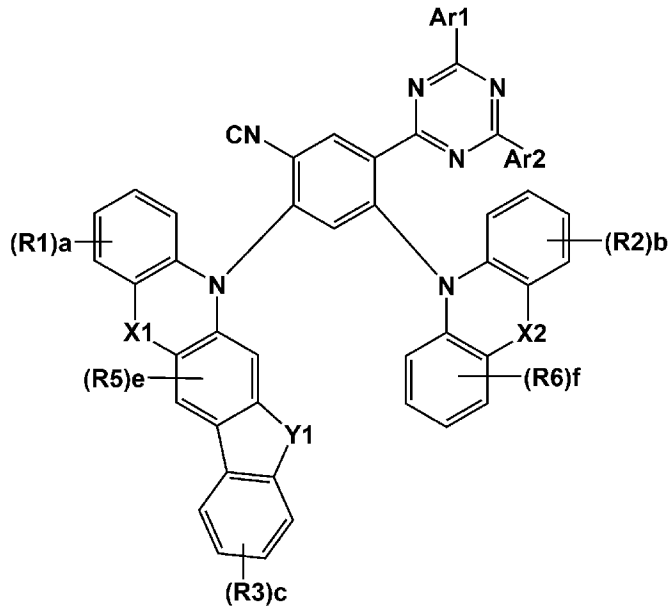
[92] [화학식 6]

[93]



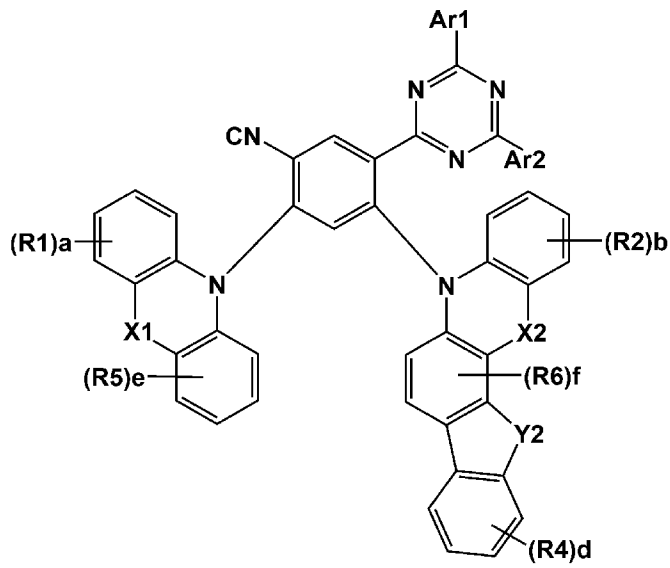
[94] [화학식 7]

[95]



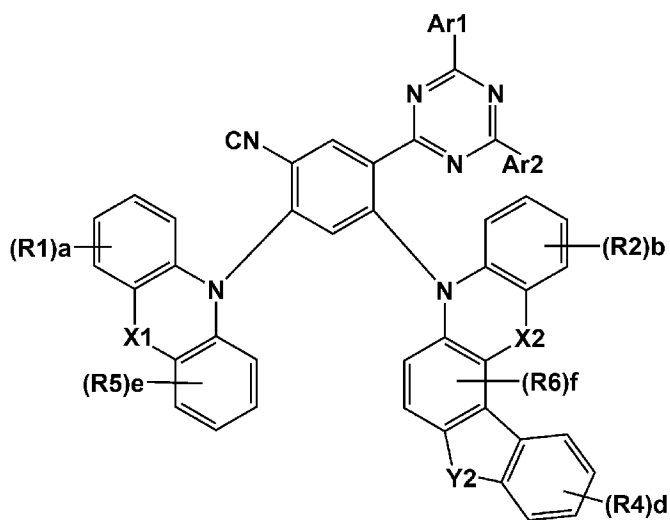
[96] [화학식 8]

[97]



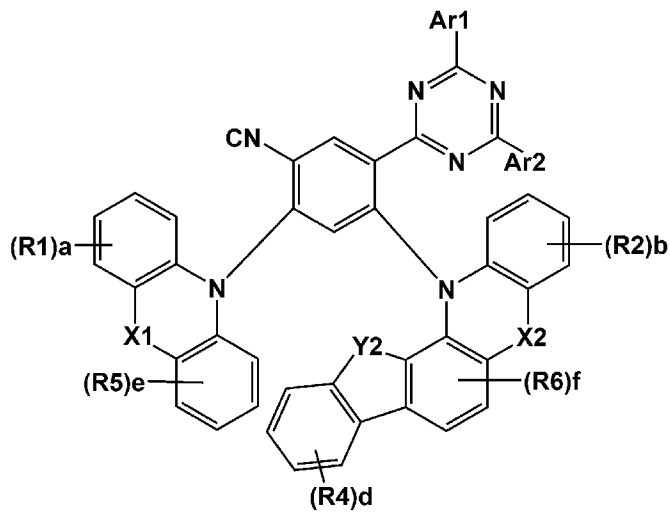
[98] [화학식 9]

[99]



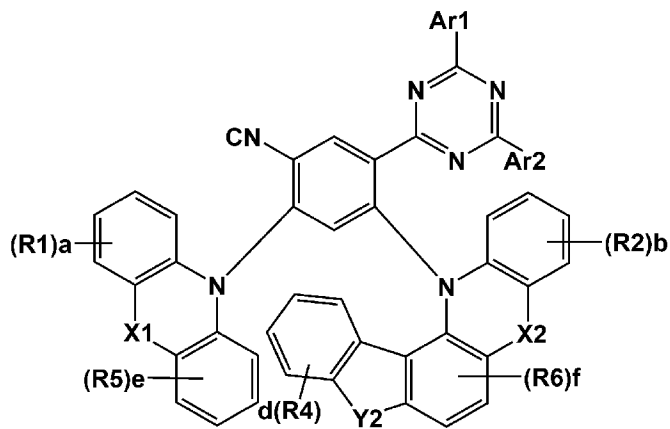
[100] [화학식 10]

[101]



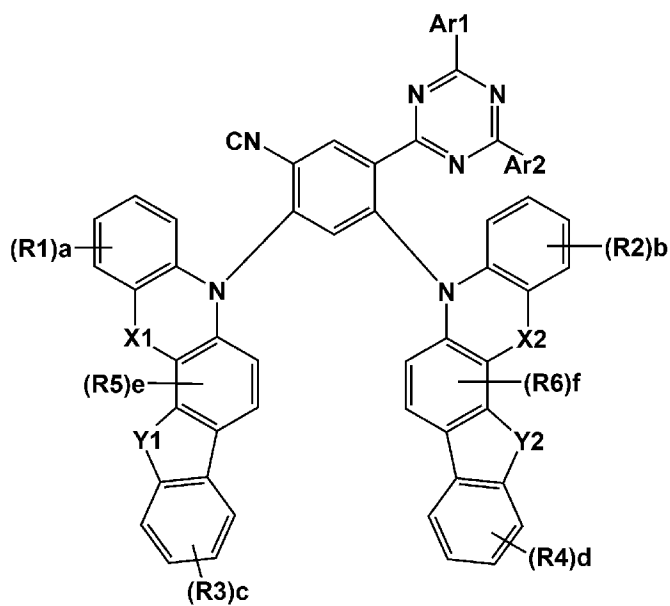
[102] [화학식 11]

[103]



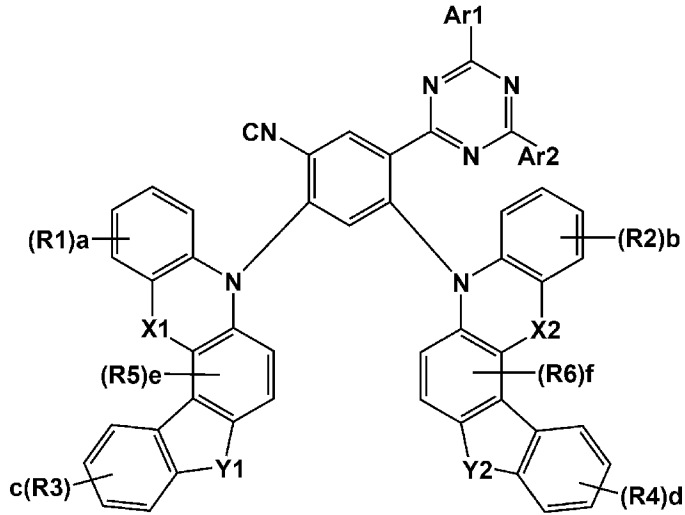
[104] [화학식 12]

[105]



[106] [화학식 13]

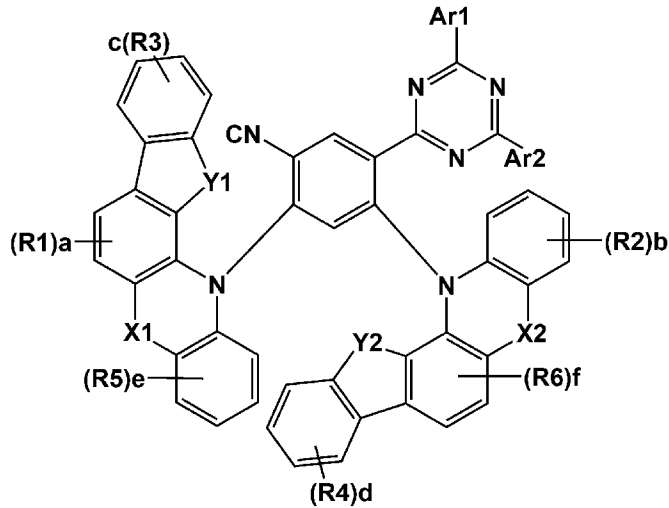
[107]



[108]

[화학식 14]

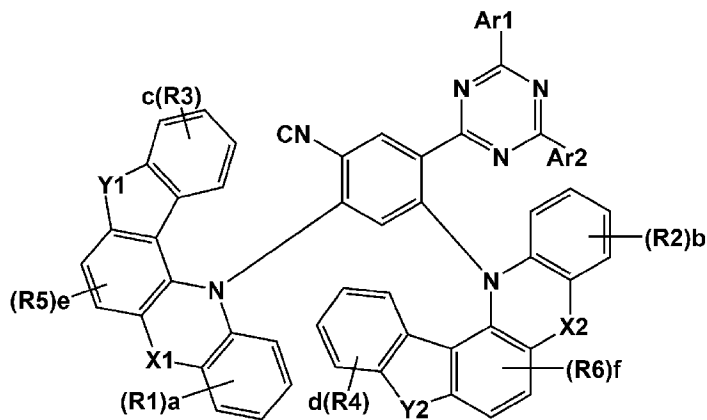
[109]



[110]

[화학식 15]

[111]



[112] 화학식 2 내지 15에 있어서, 치환기 정의는 전술한 바와 같다.

[113] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 화학식 2에 있어서, a, b, e, 및 f는 0 내지 3의 정수이다.

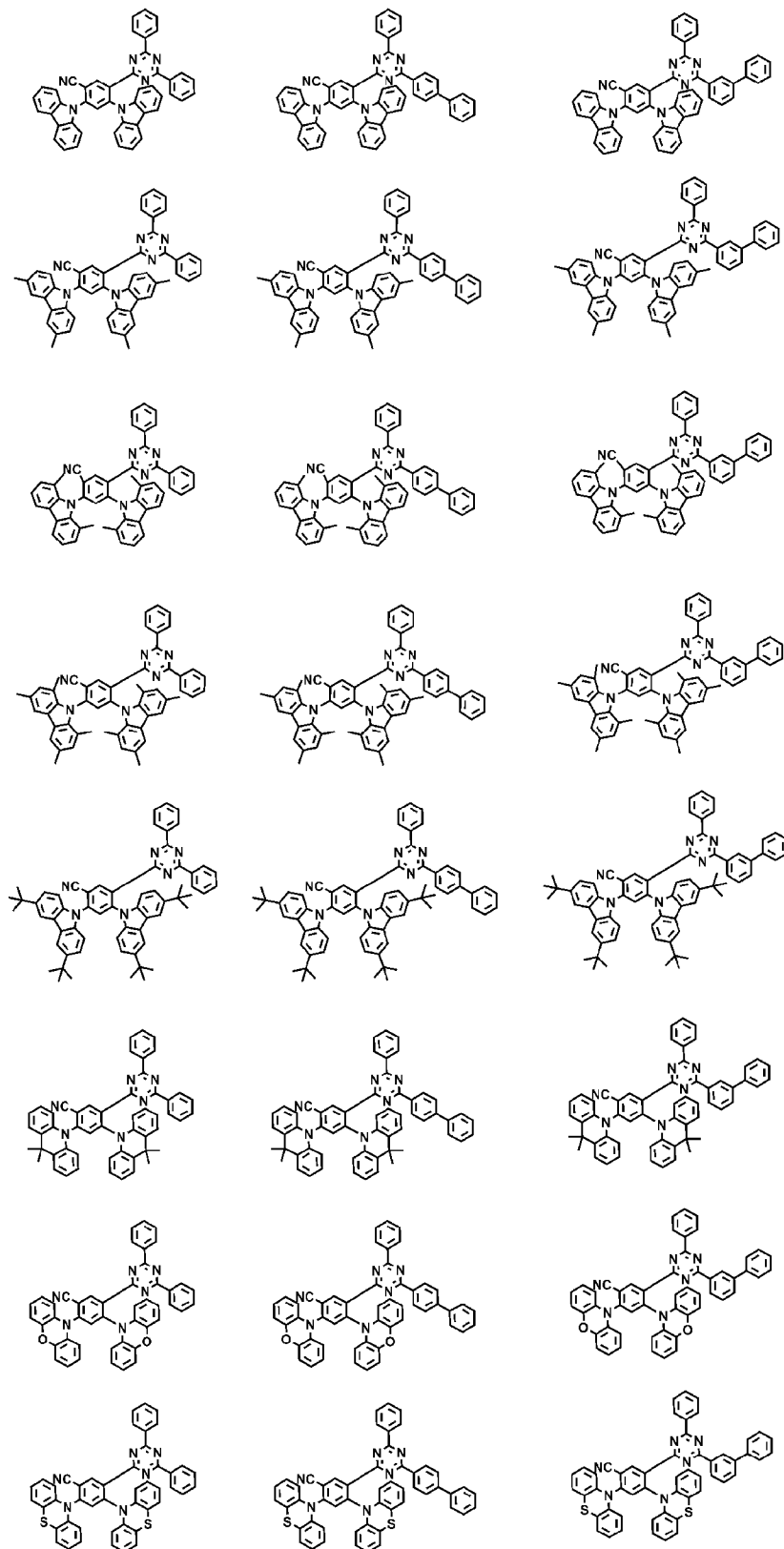
[114] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 화학식 2에 있어서, a, b, e, 및 f는 0 내지 2의 정수이다.

- [115] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 화학식 2에 있어서, R1, R2, R5 및 R6은 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; 치환 또는 비치환된 알킬기; 또는 치환 또는 비치환된 아릴기이다.
- [116] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 화학식 2에 있어서, R1, R2, R5 및 R6은 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; 또는 치환 또는 비치환된 알킬기이다.
- [117] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 화학식 2에 있어서, R1, R2, R5 및 R6은 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; 또는 알킬기이다
- [118] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 화학식 2에 있어서, R1, R2, R5 및 R6은 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; 또는 탄소수 1 내지 10의 알킬기이다
- [119] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 화학식 2에 있어서, R1, R2, R5 및 R6은 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; 메틸기; 에틸기; 부틸기; 또는 프로필기이다
- [120] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 화학식 3 내지 7에 있어서, a, e 및 c는 0이고, b 및 f는 0 내지 3의 정수이다.
- [121] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 화학식 3 내지 7에 있어서, a, e 및 c는 0이고, b 및 f는 0 내지 2의 정수이다.
- [122] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 화학식 3 내지 7에 있어서, R2 및 R6은 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; 치환 또는 비치환된 알킬기; 또는 치환 또는 비치환된 아릴기이다.
- [123] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 화학식 3 내지 7에 있어서, R2 및 R6은 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; 또는 치환 또는 비치환된 알킬기이다.
- [124] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 화학식 3 내지 7에 있어서, R2 및 R6은 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; 또는 알킬기이다
- [125] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 화학식 3 내지 7에 있어서, R2 및 R6은 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; 또는 탄소수 1 내지 10의 알킬기이다
- [126] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 화학식 3 내지 7에 있어서, R2 및 R6은 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; 메틸기; 에틸기; 부틸기; 또는 프로필기이다
- [127] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 화학식 8 내지 11에 있어서, a 및 e는 0 내지 3의 정수이고, b, d 및 f는 0이다.
- [128] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 화학식 8 내지 11에 있어서, a 및 e는 0 내지 2의 정수이고, b, d 및 f는 0이다.
- [129] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 화학식 8 내지 11에 있어서, R1 및 R5는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; 치환 또는 비치환된 알킬기;

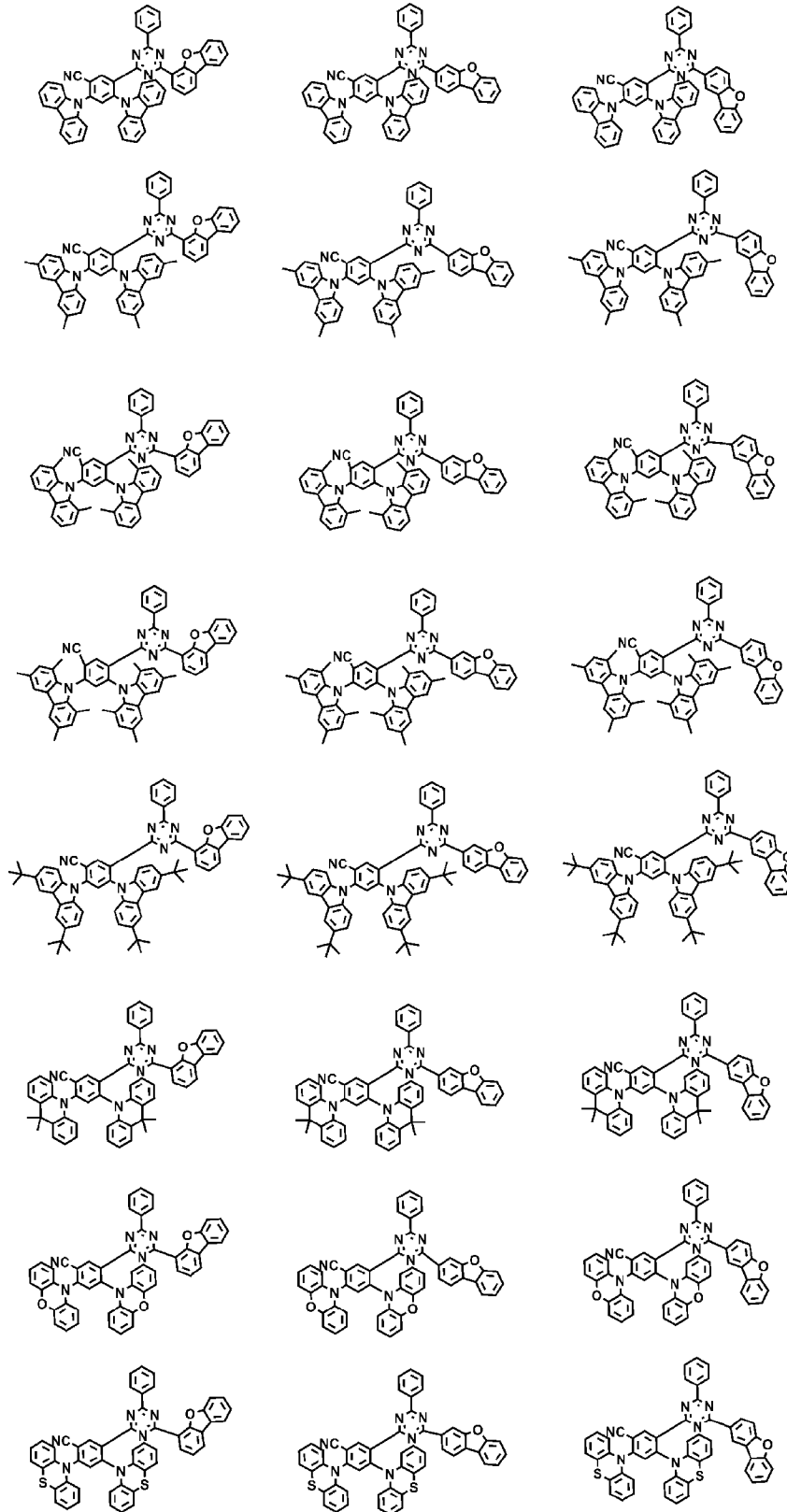
또는 치환 또는 비치환된 아릴기이다.

- [130] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 화학식 8 내지 11에 있어서, R1 및 R5는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; 또는 치환 또는 비치환된 알킬기이다.
- [131] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 화학식 8 내지 11에 있어서, R1 및 R5는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; 또는 알킬기이다
- [132] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 화학식 8 내지 11에 있어서, R1 및 R5는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; 또는 탄소수 1 내지 10의 알킬기이다
- [133] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 화학식 8 내지 11에 있어서, R1 및 R5는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; 메틸기; 에틸기; 부틸기; 또는 프로필기이다
- [134] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 화학식 12 내지 15에 있어서, a 내지 f는 0이다.
- [135] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 화학식 1은 하기 화합물 중 어느 하나이다.

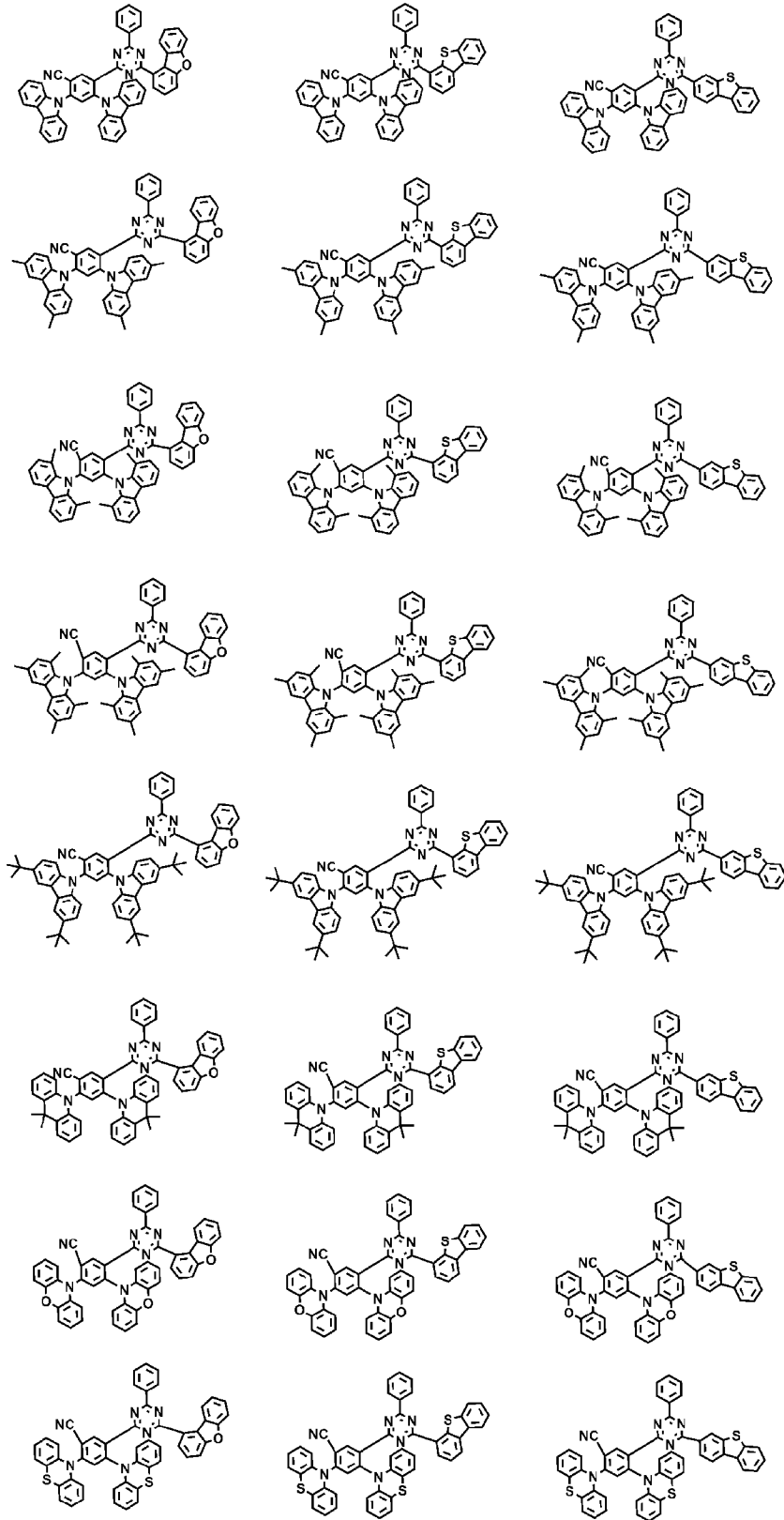
[136]



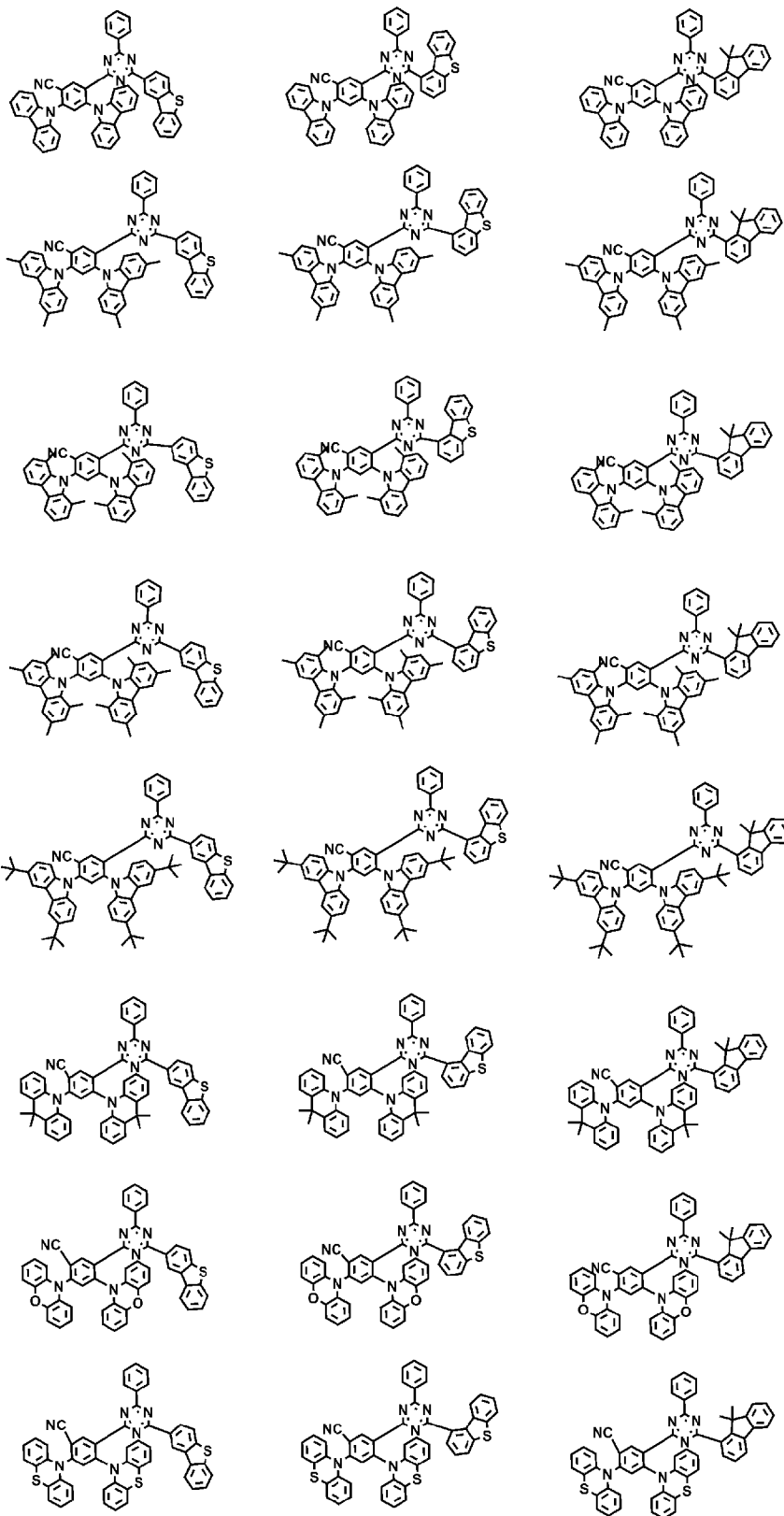
[137]



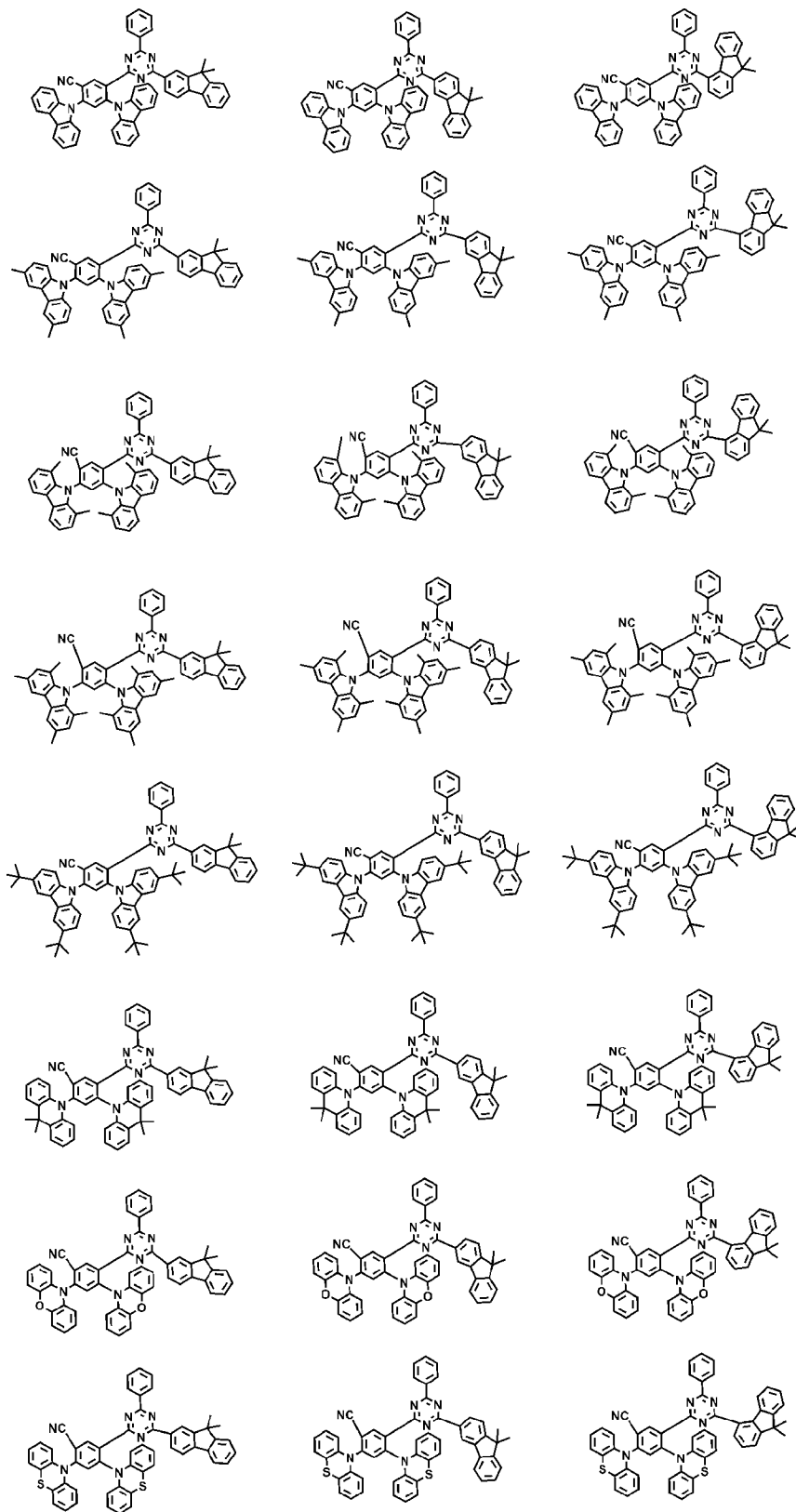
[138]



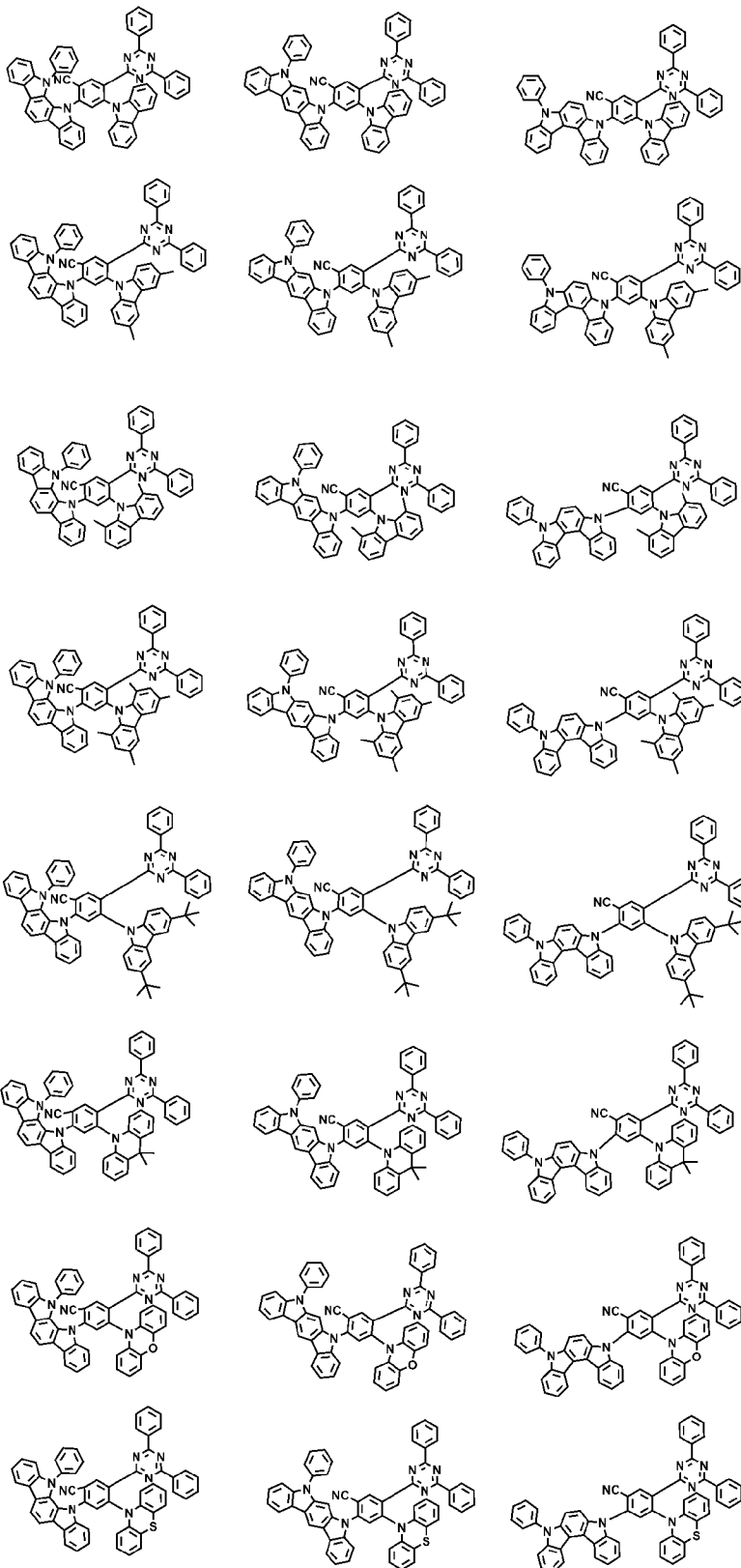
[139]



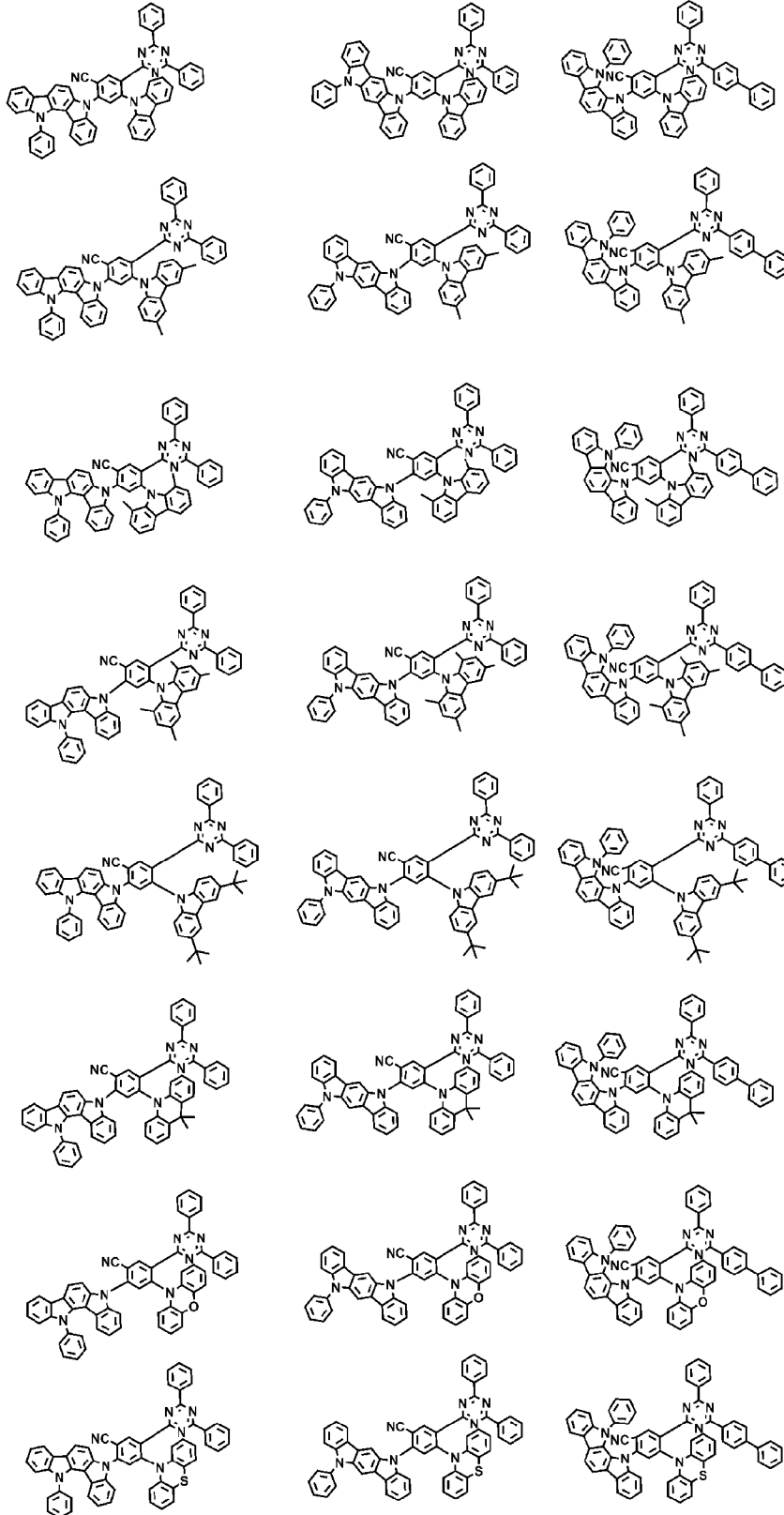
[140]



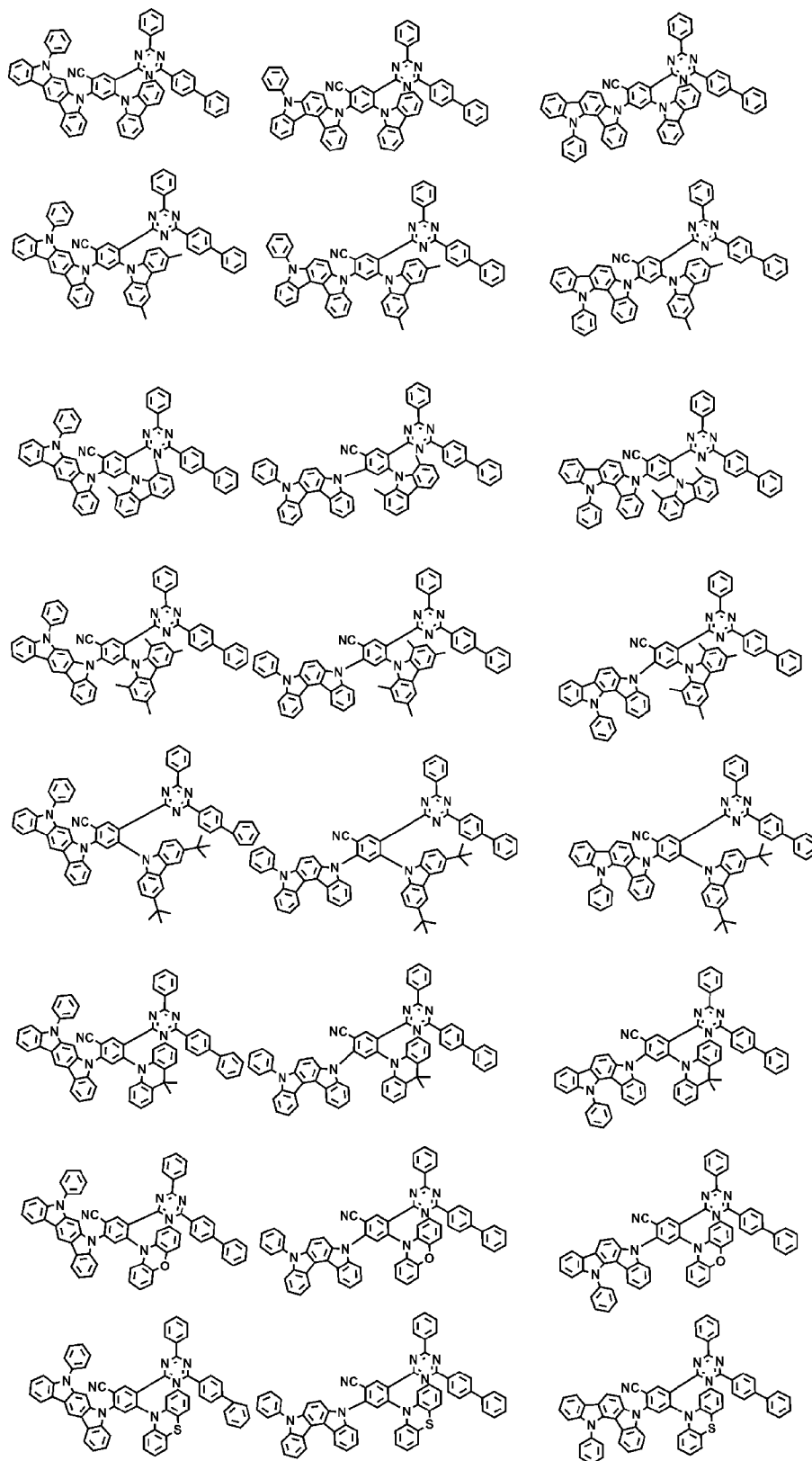
[141]



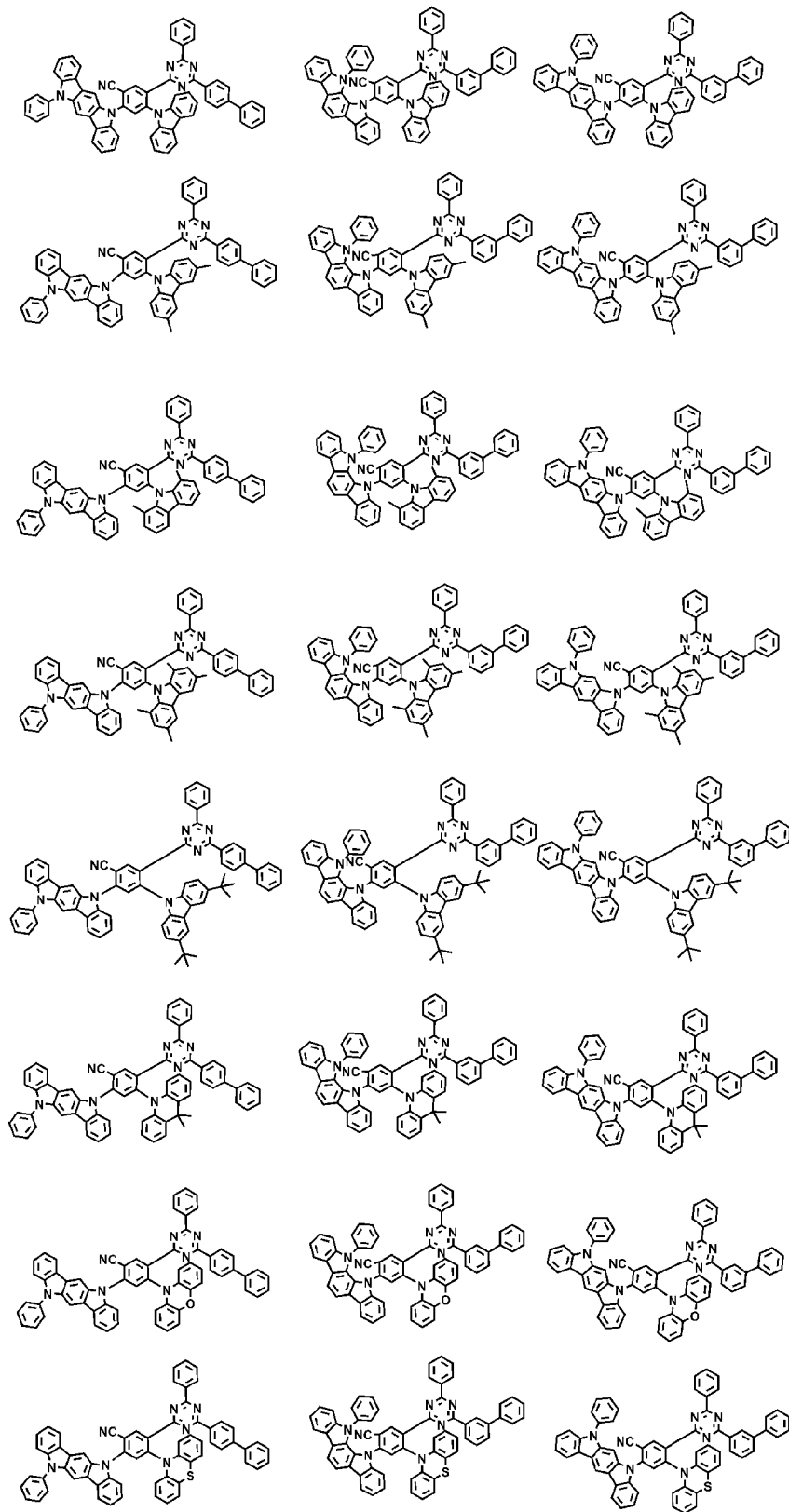
[142]



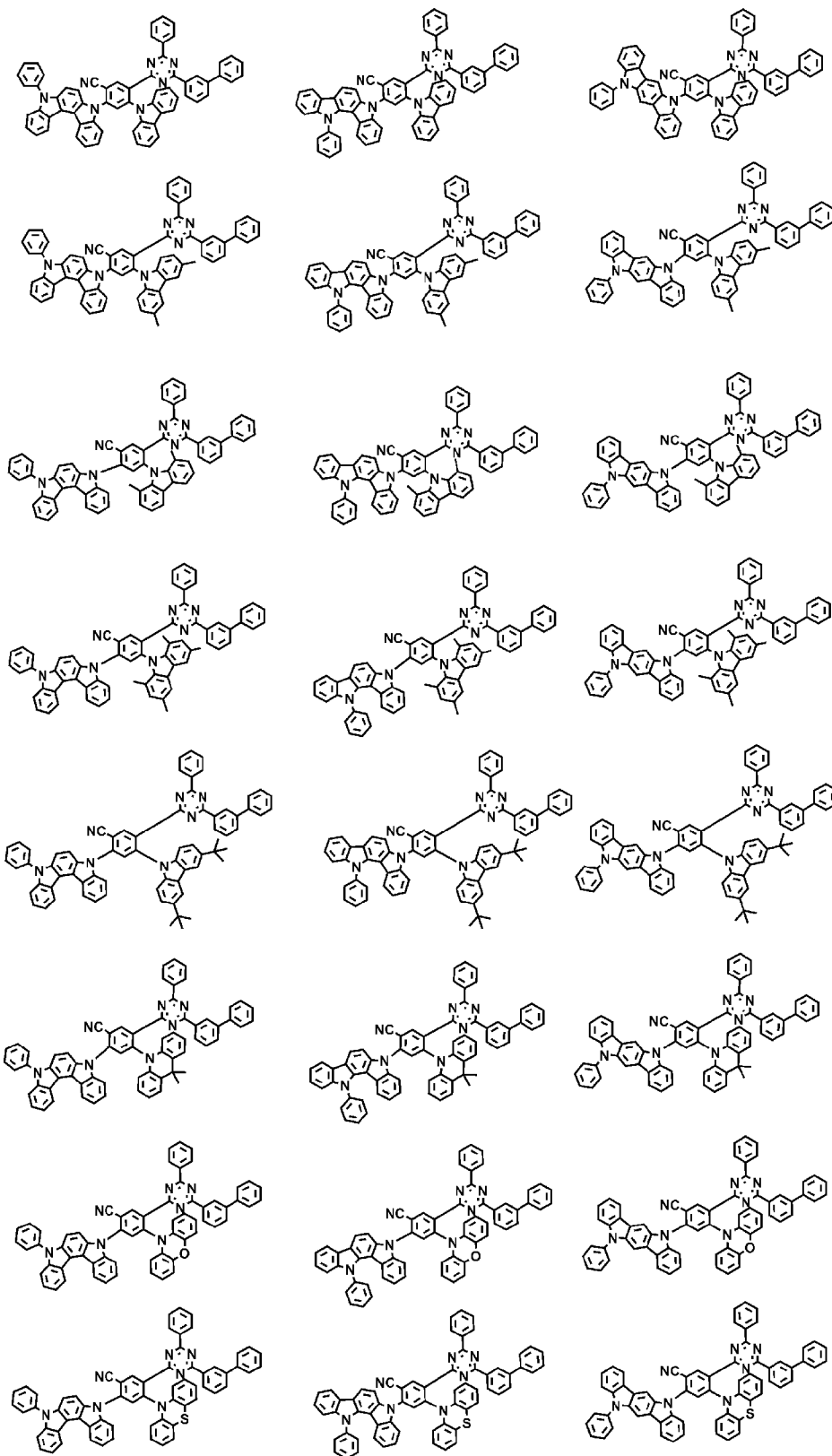
[143]



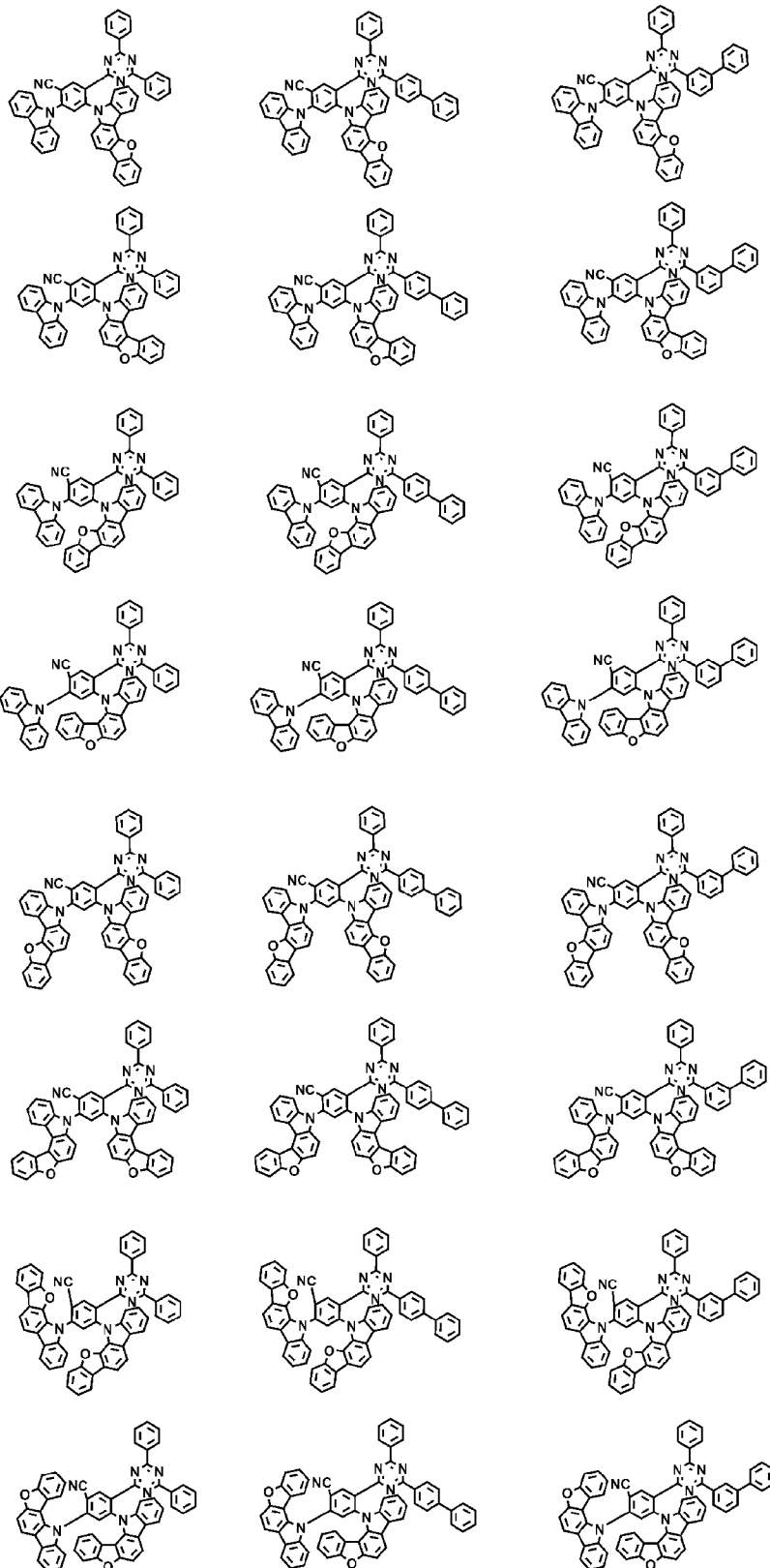
[144]



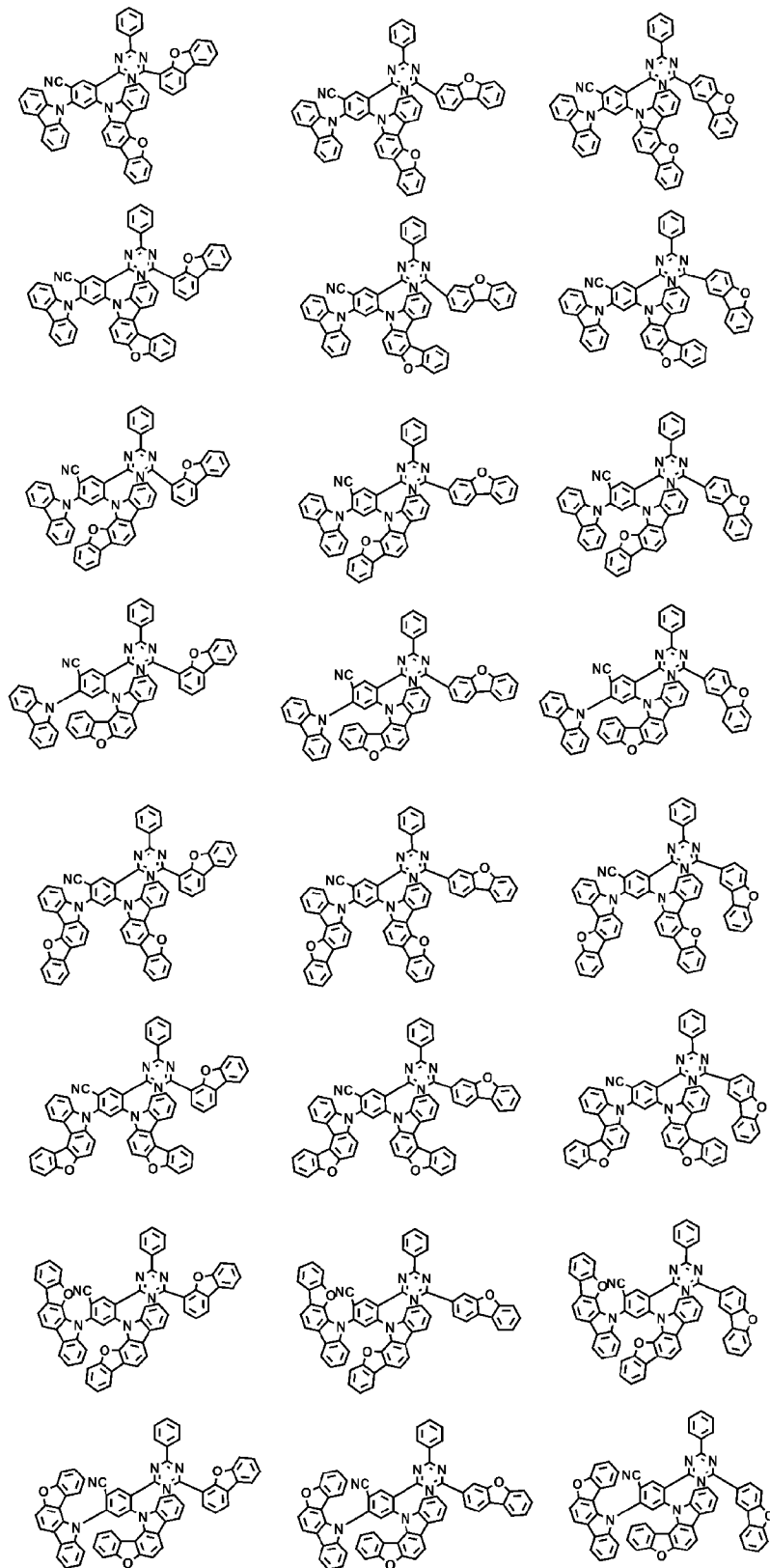
[145]



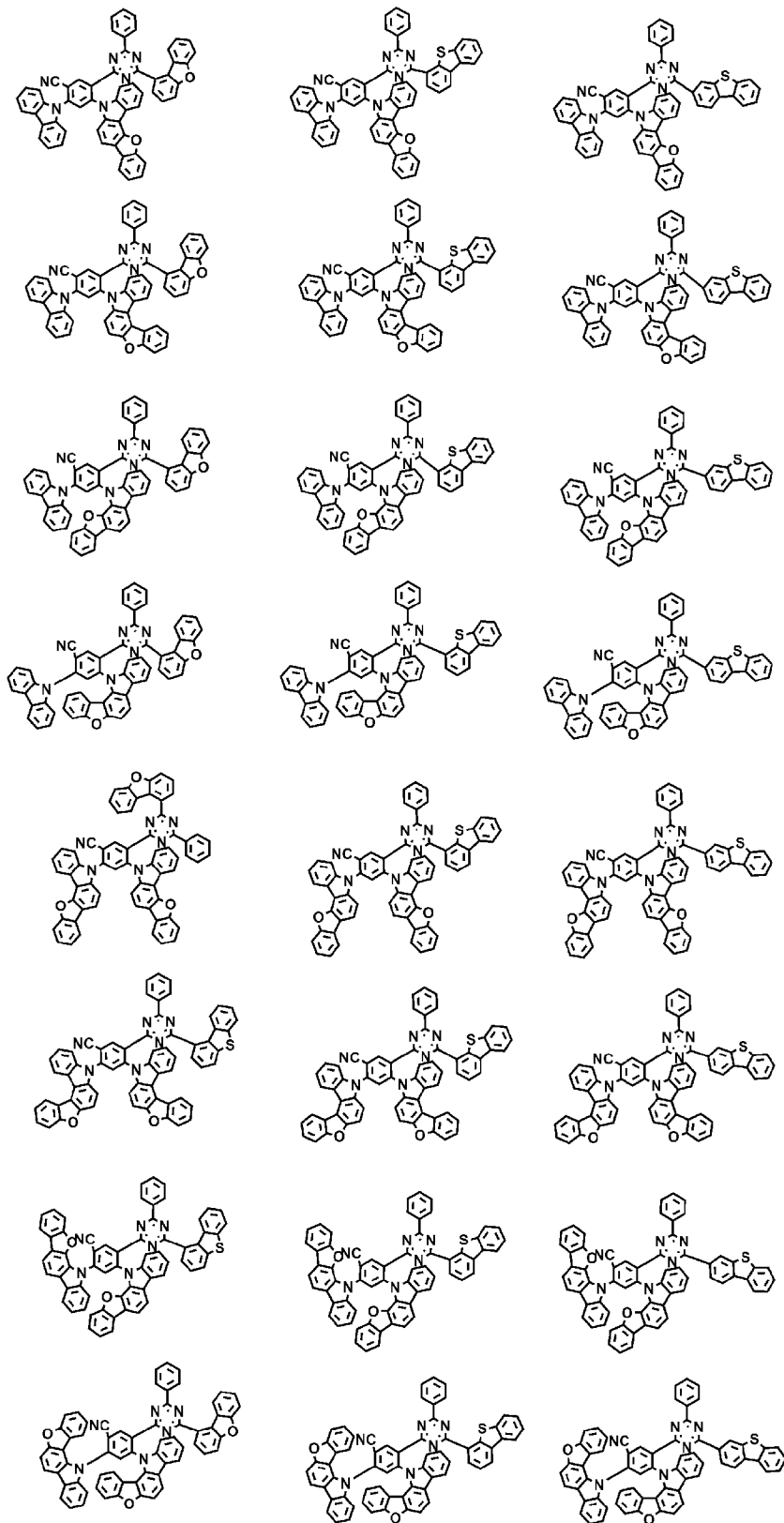
[146]



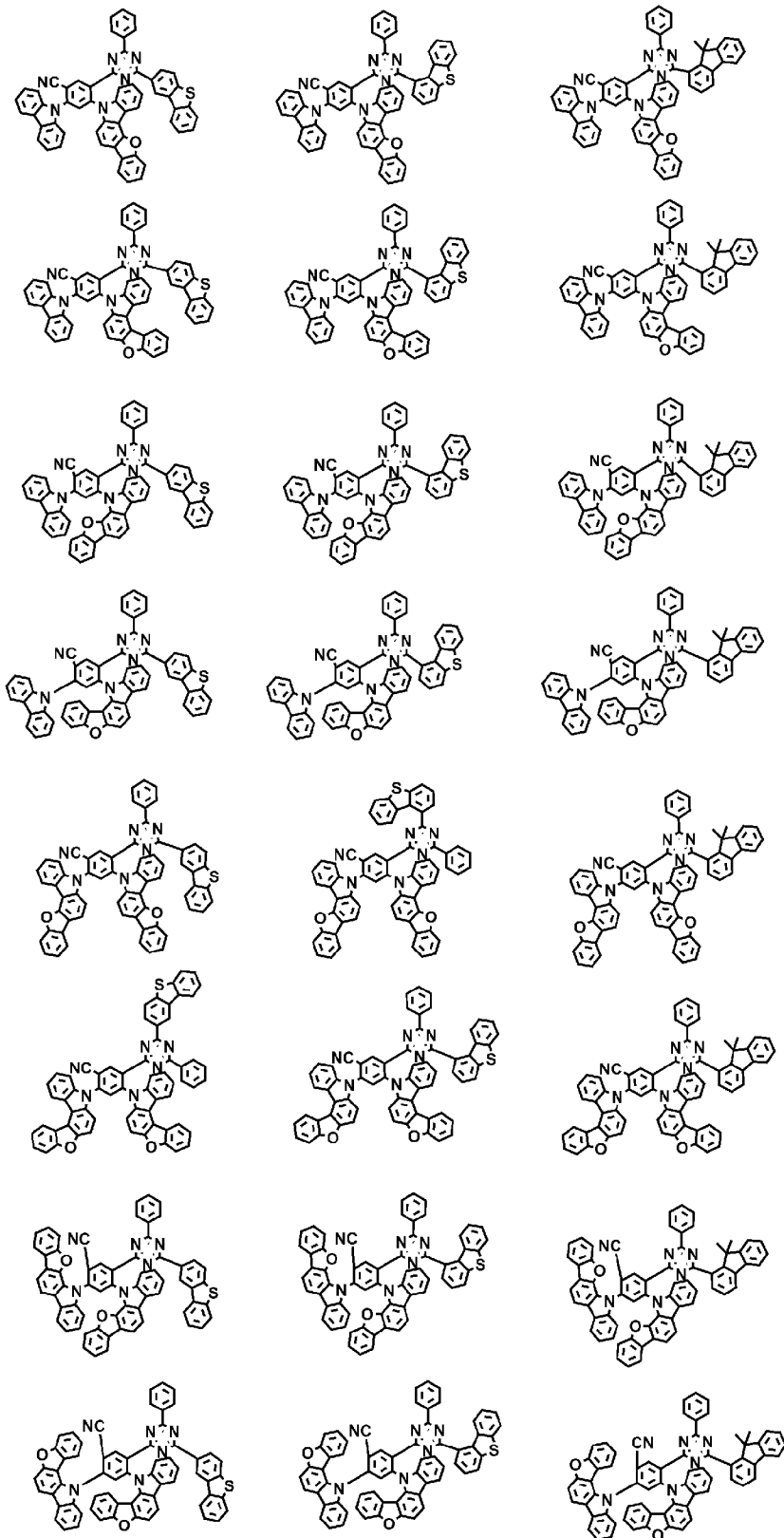
[147]



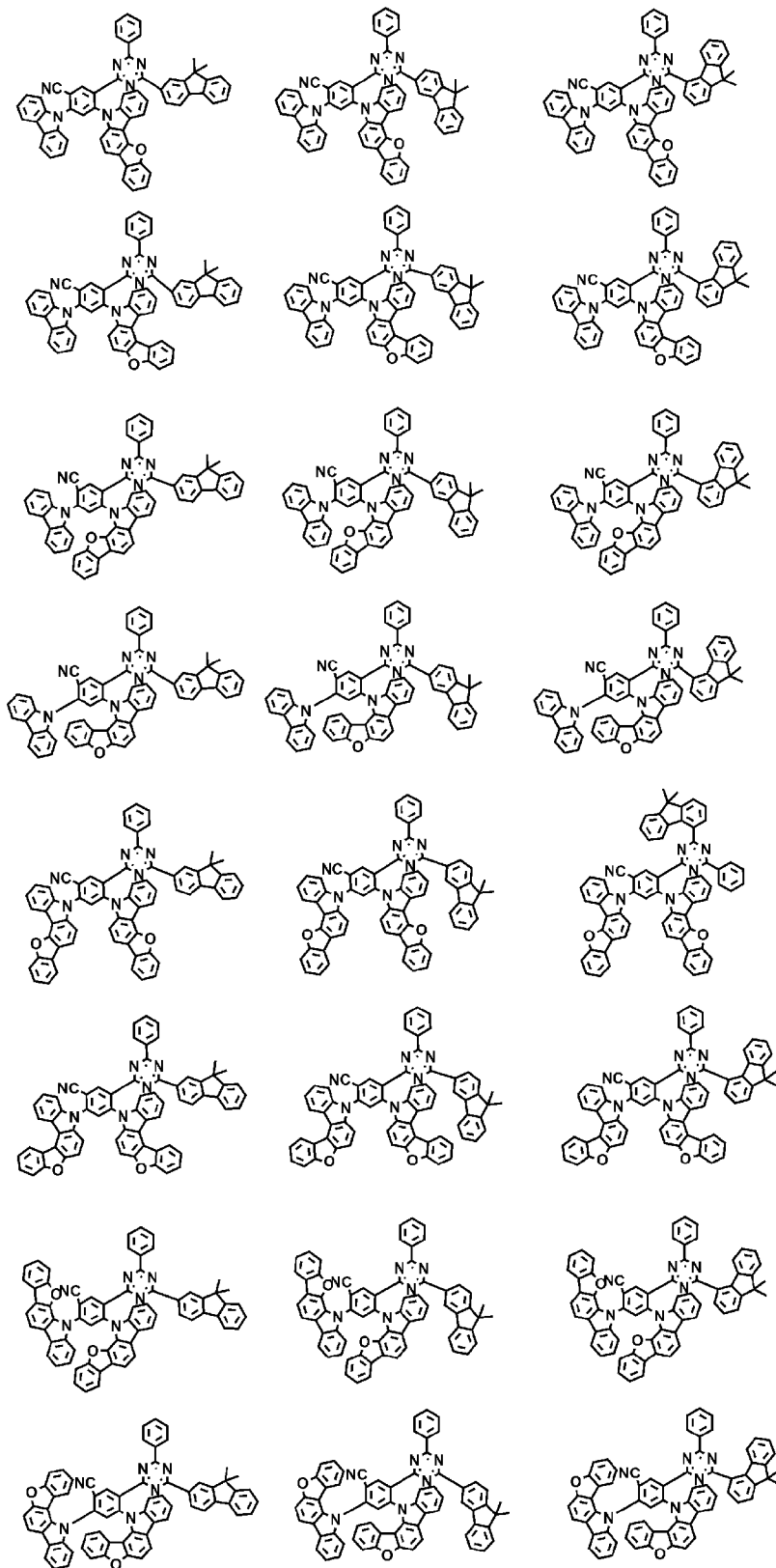
[148]



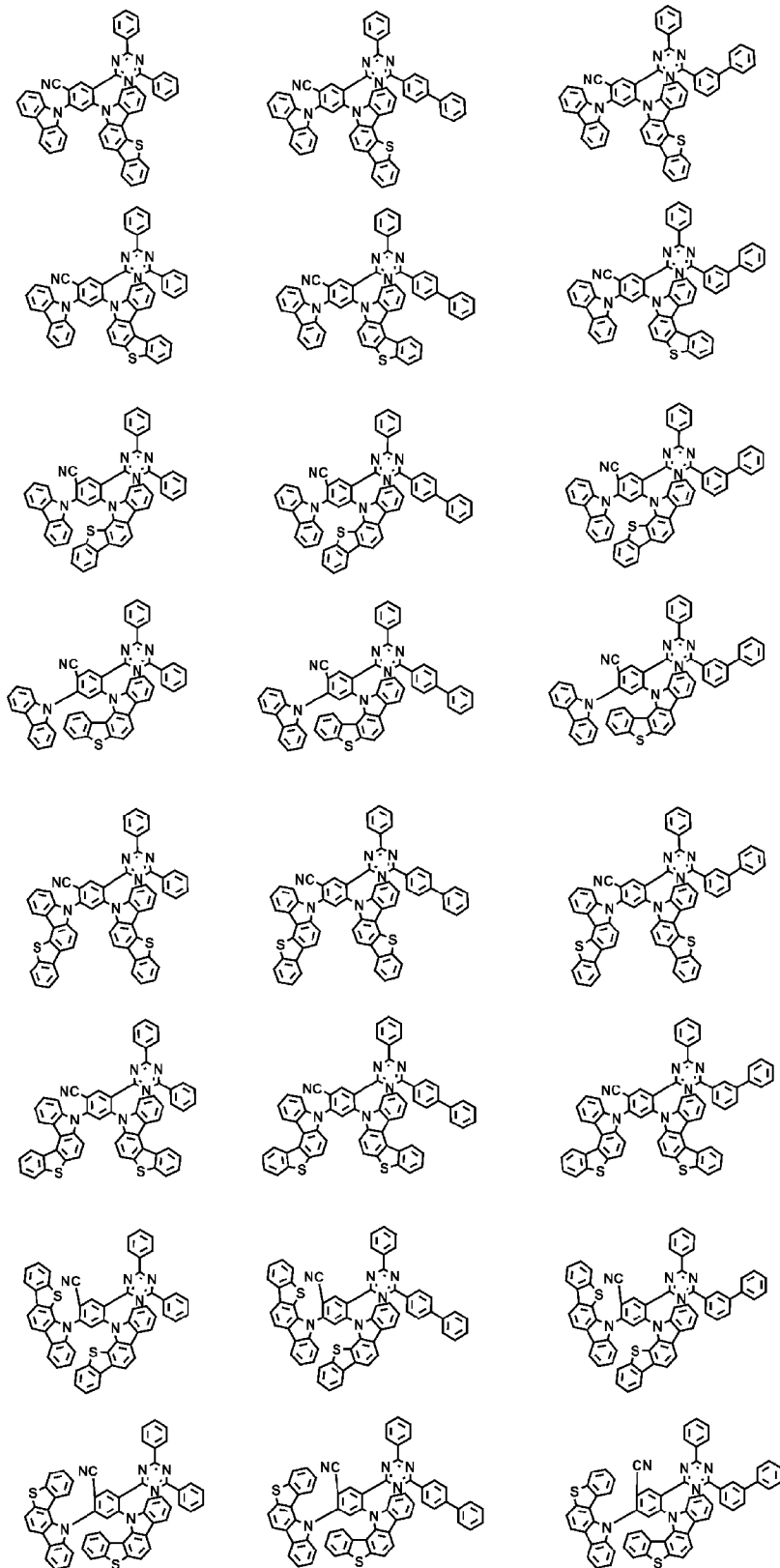
[149]



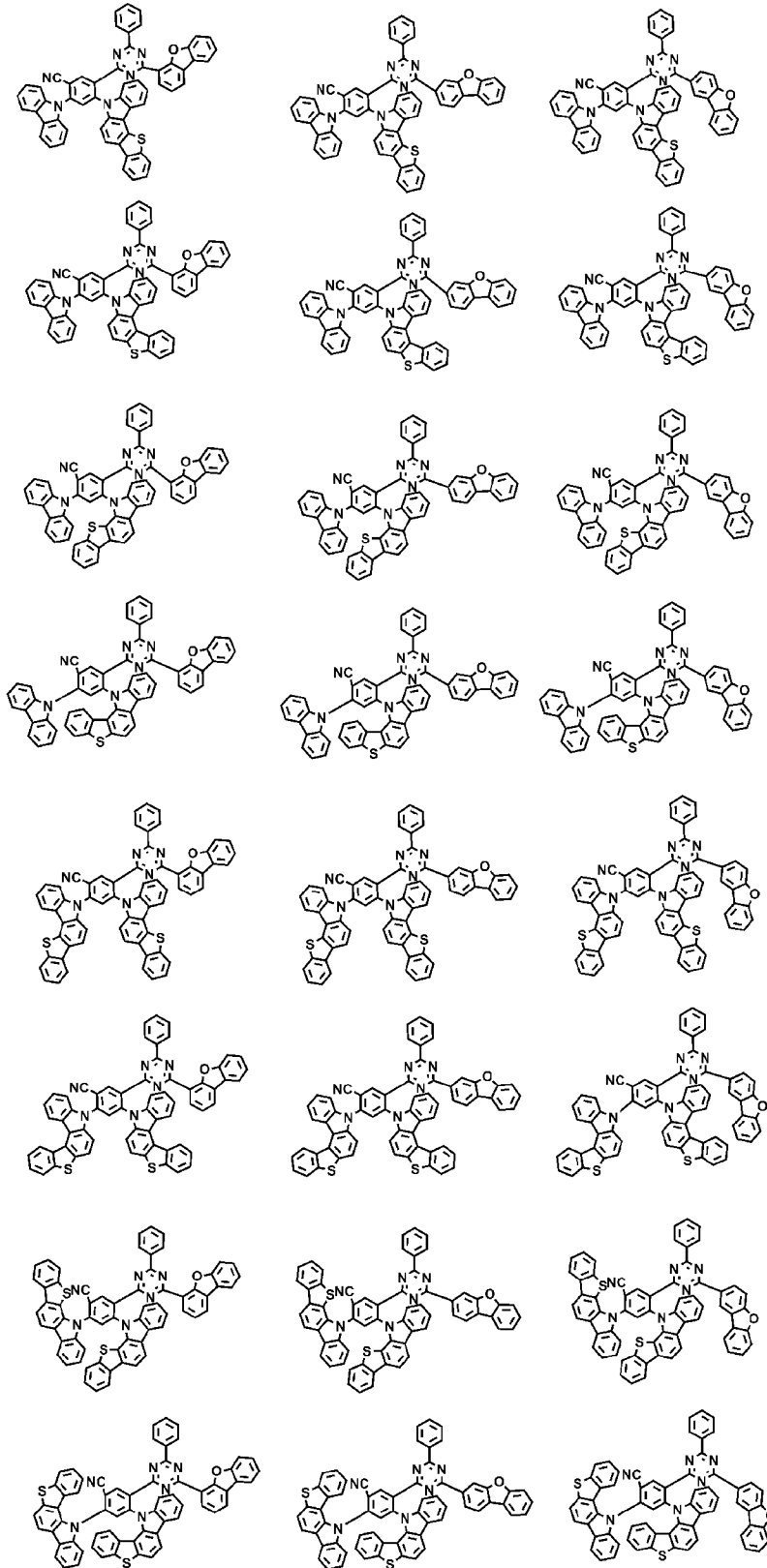
[150]



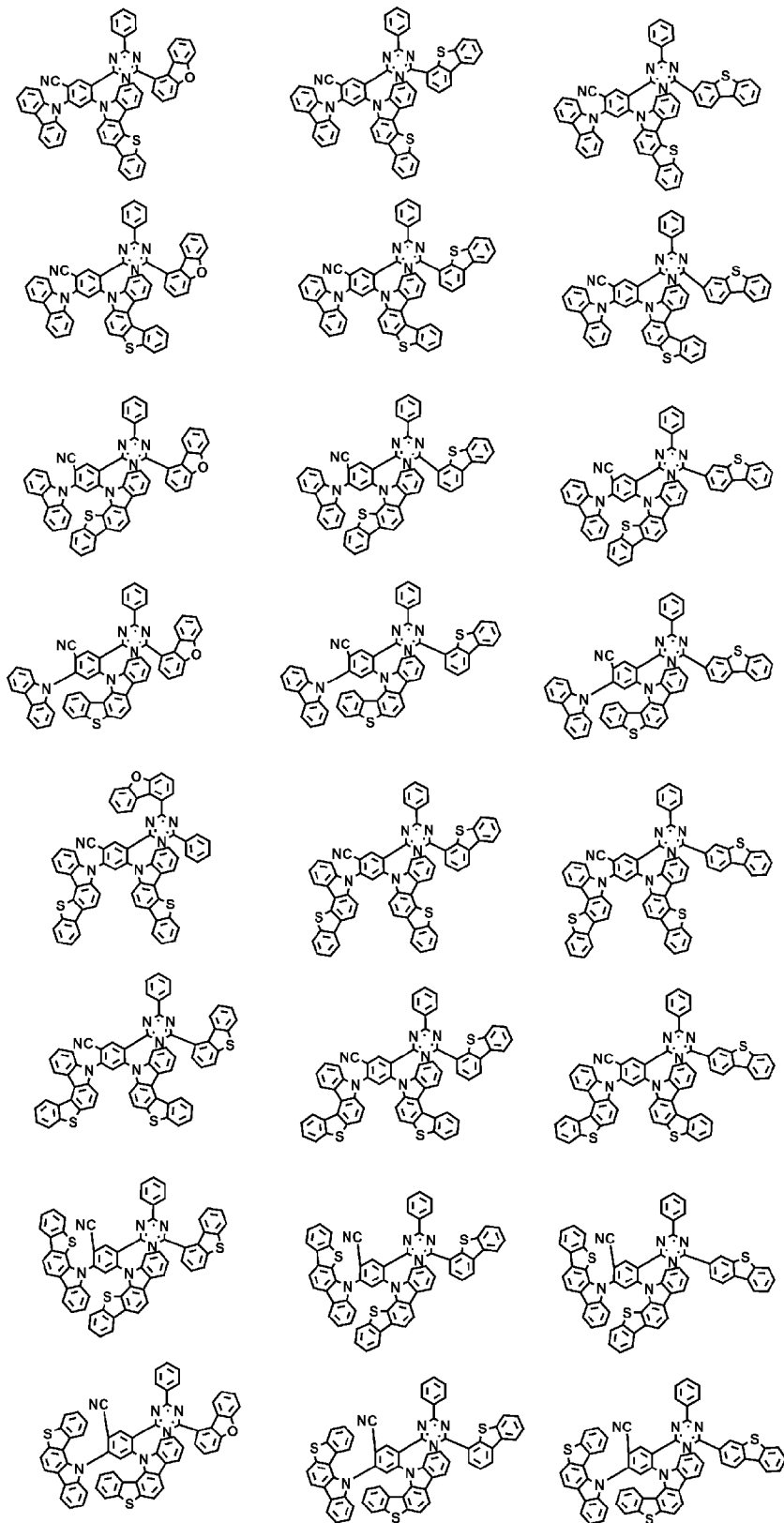
[151]



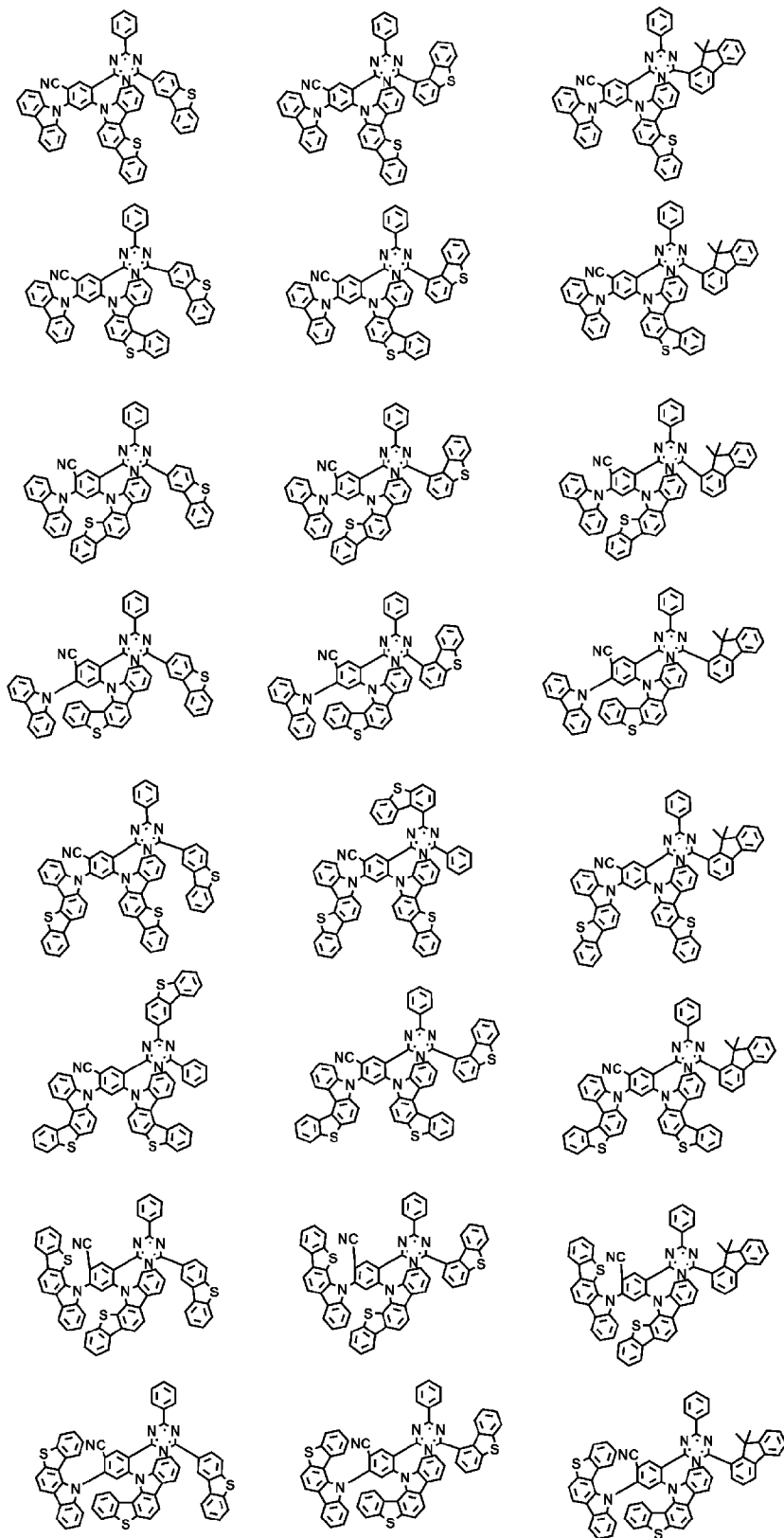
[152]



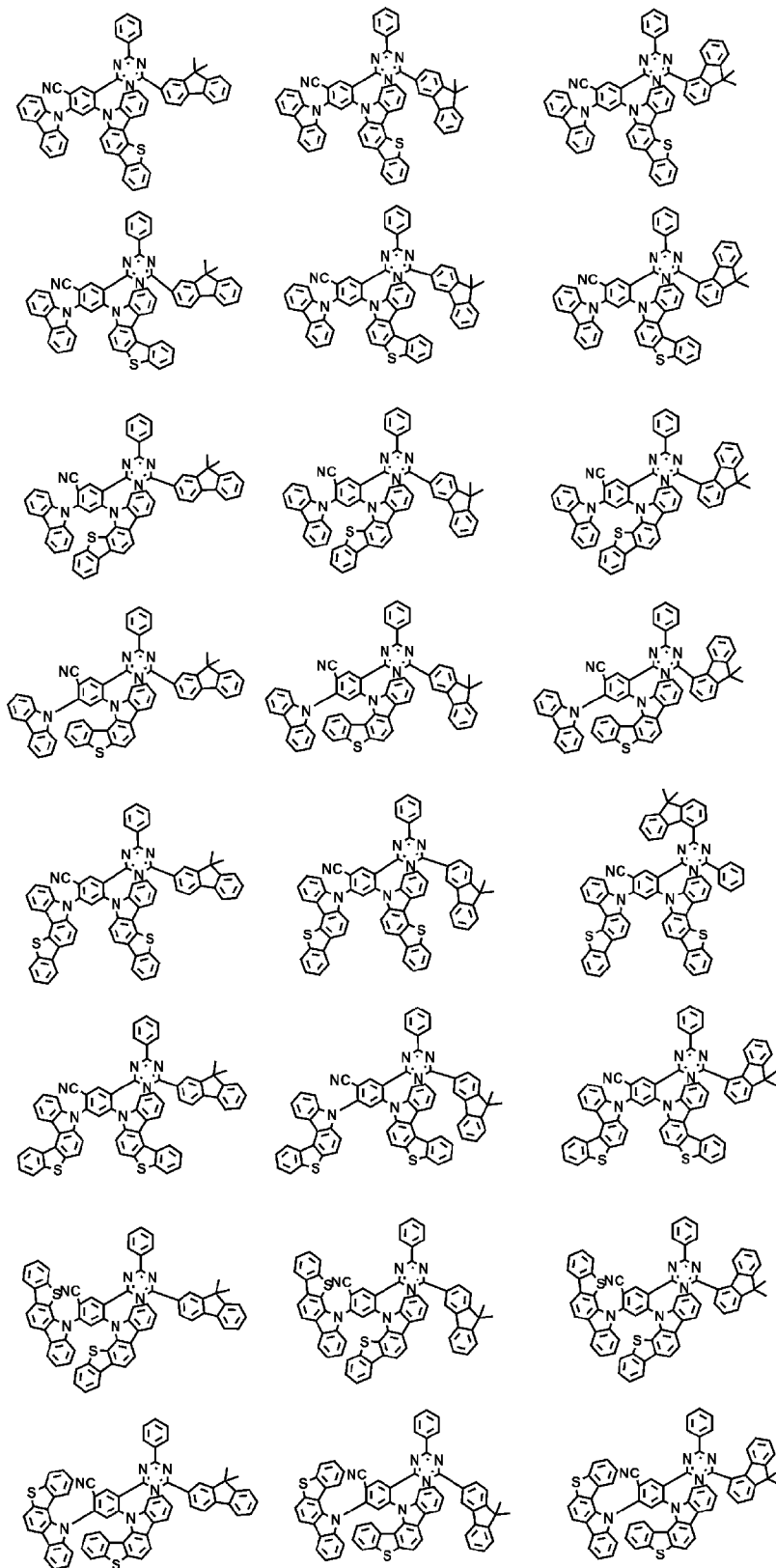
[153]



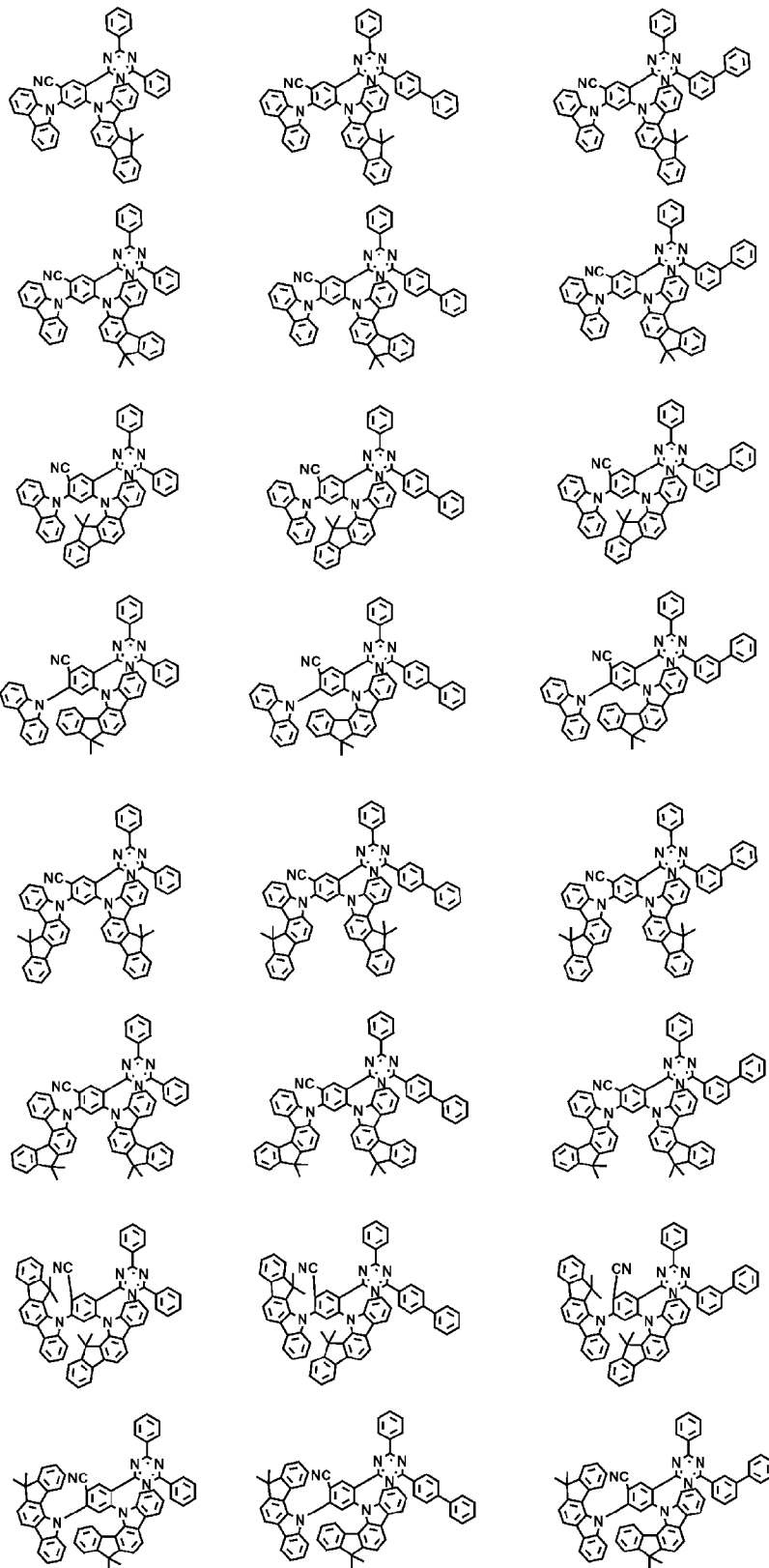
[154]



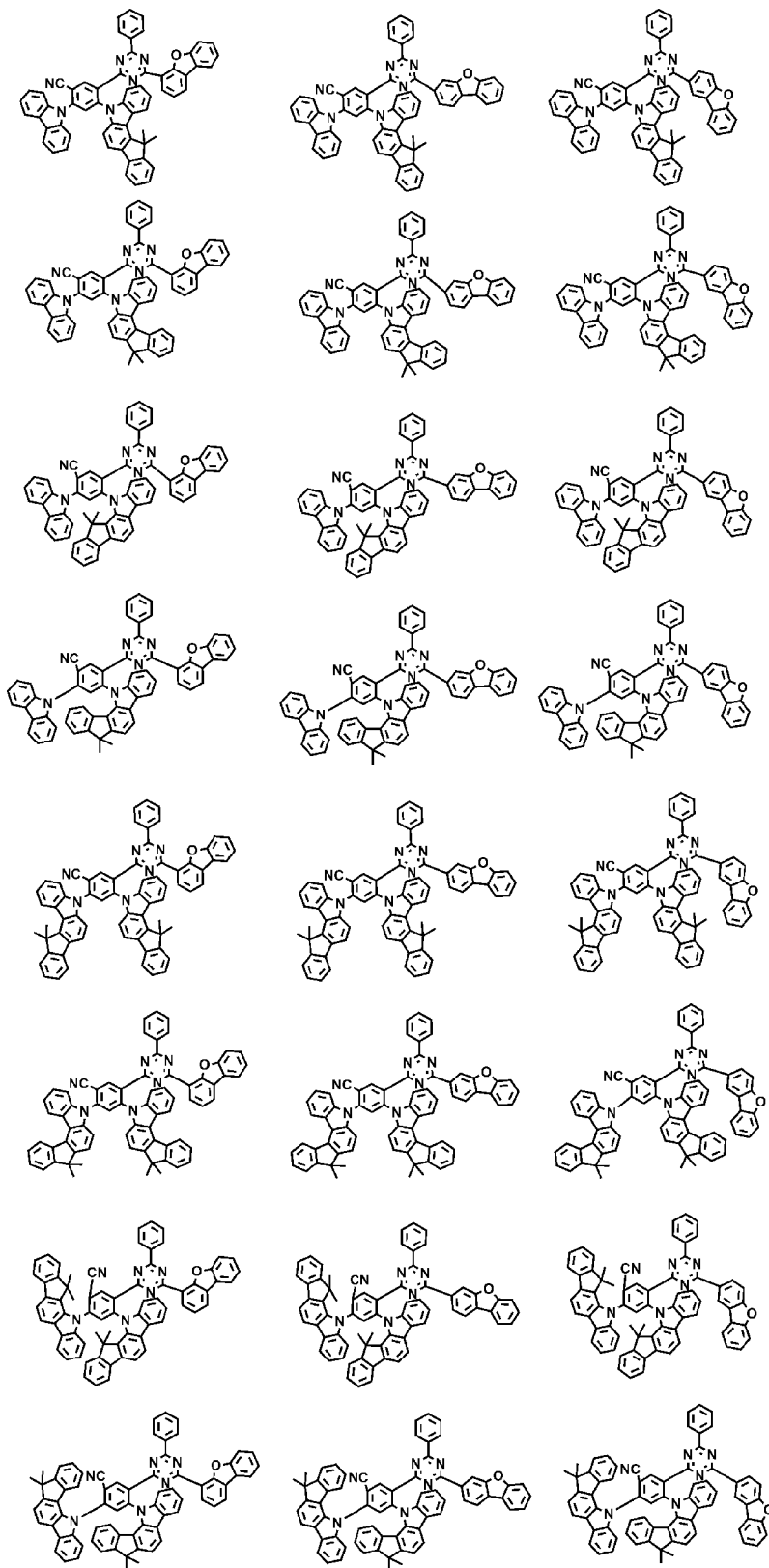
[155]



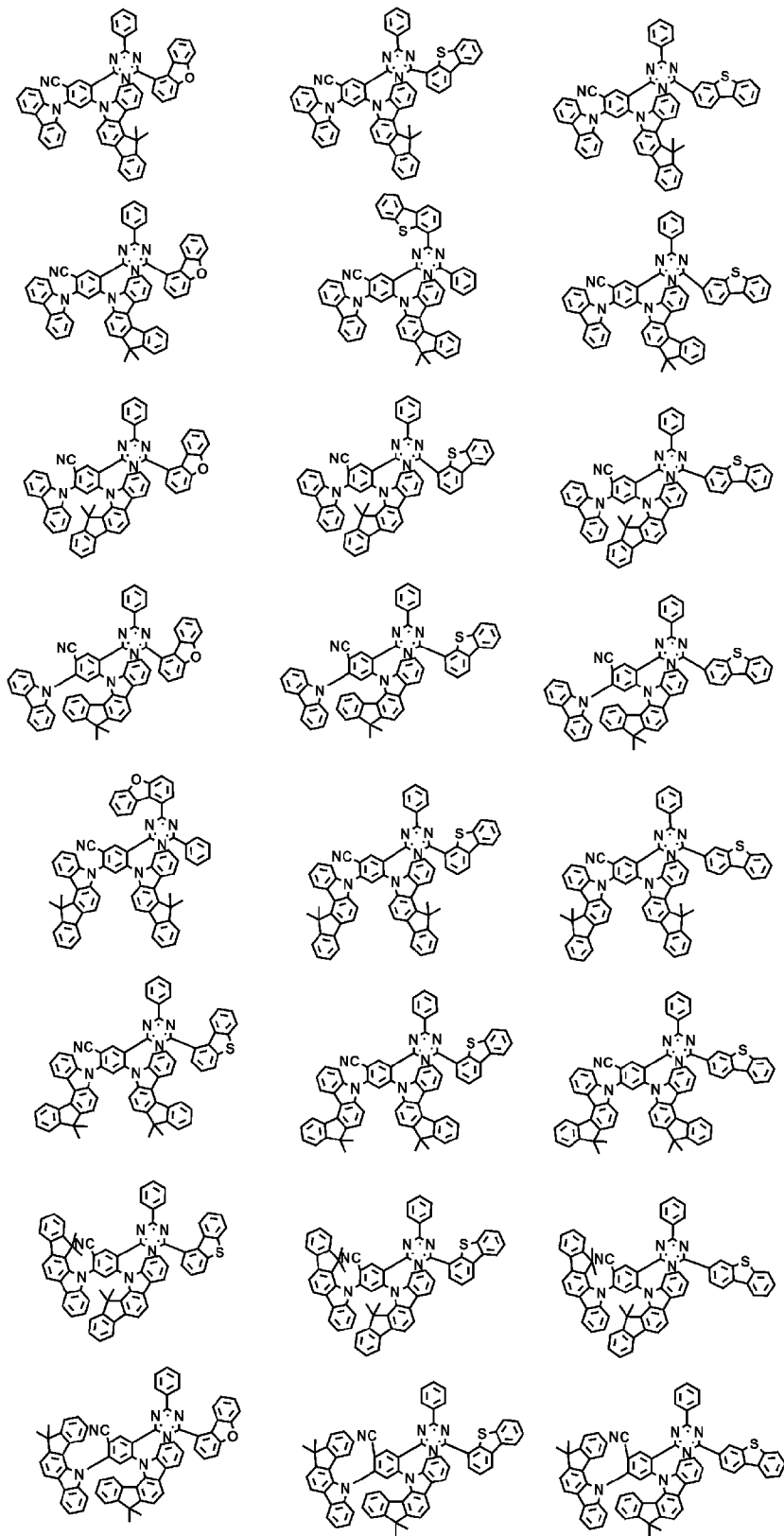
[156]



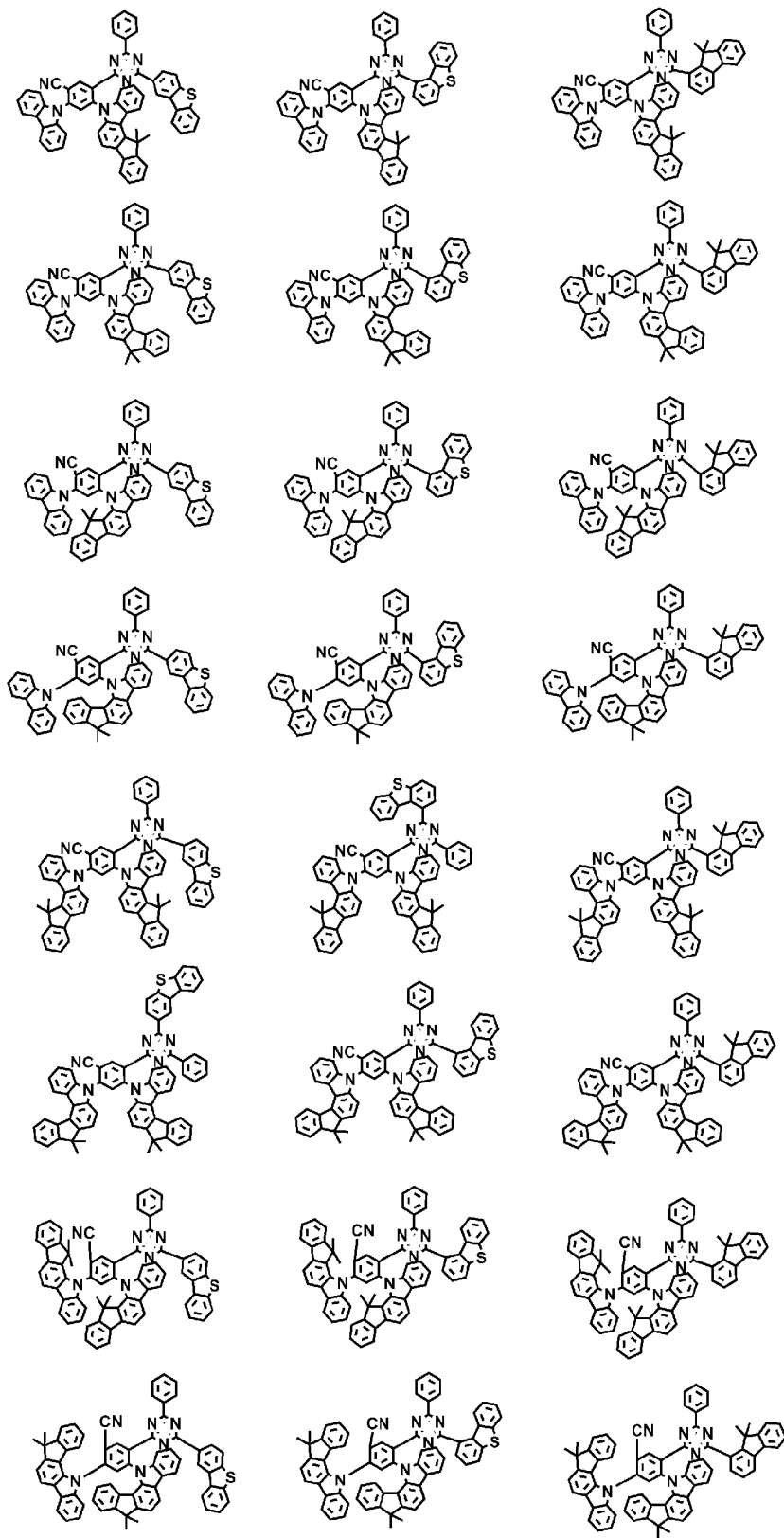
[157]



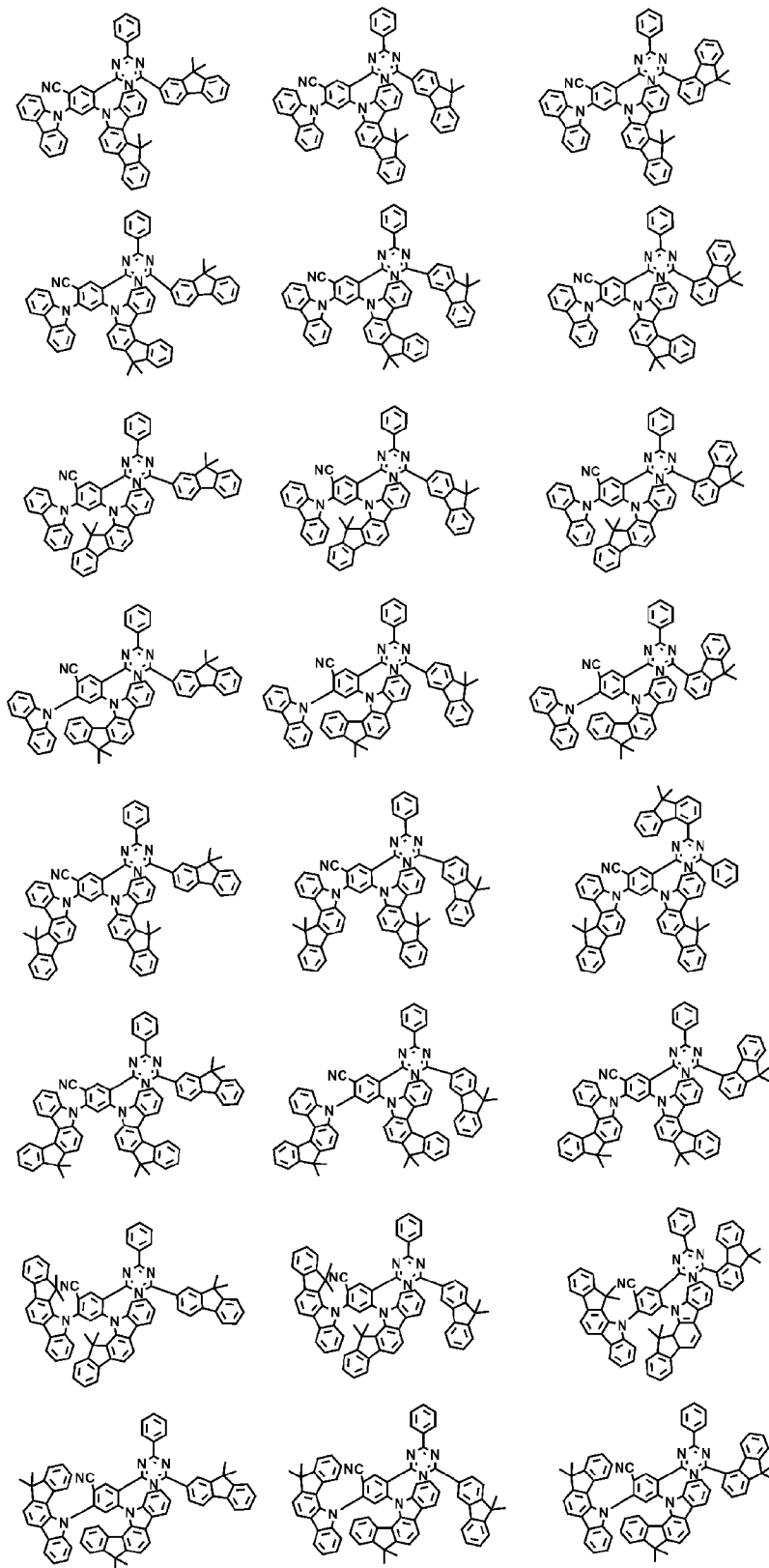
[158]



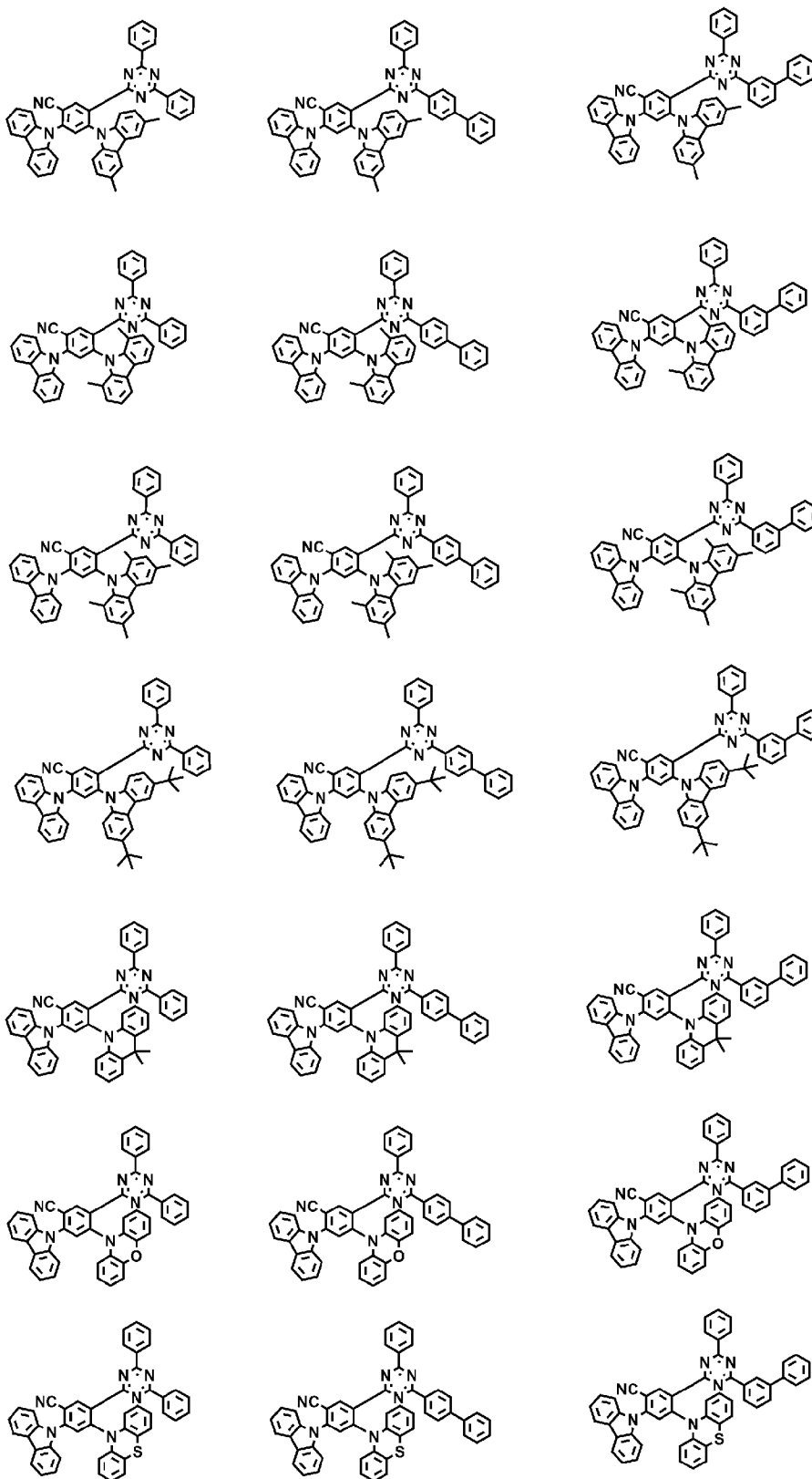
[159]



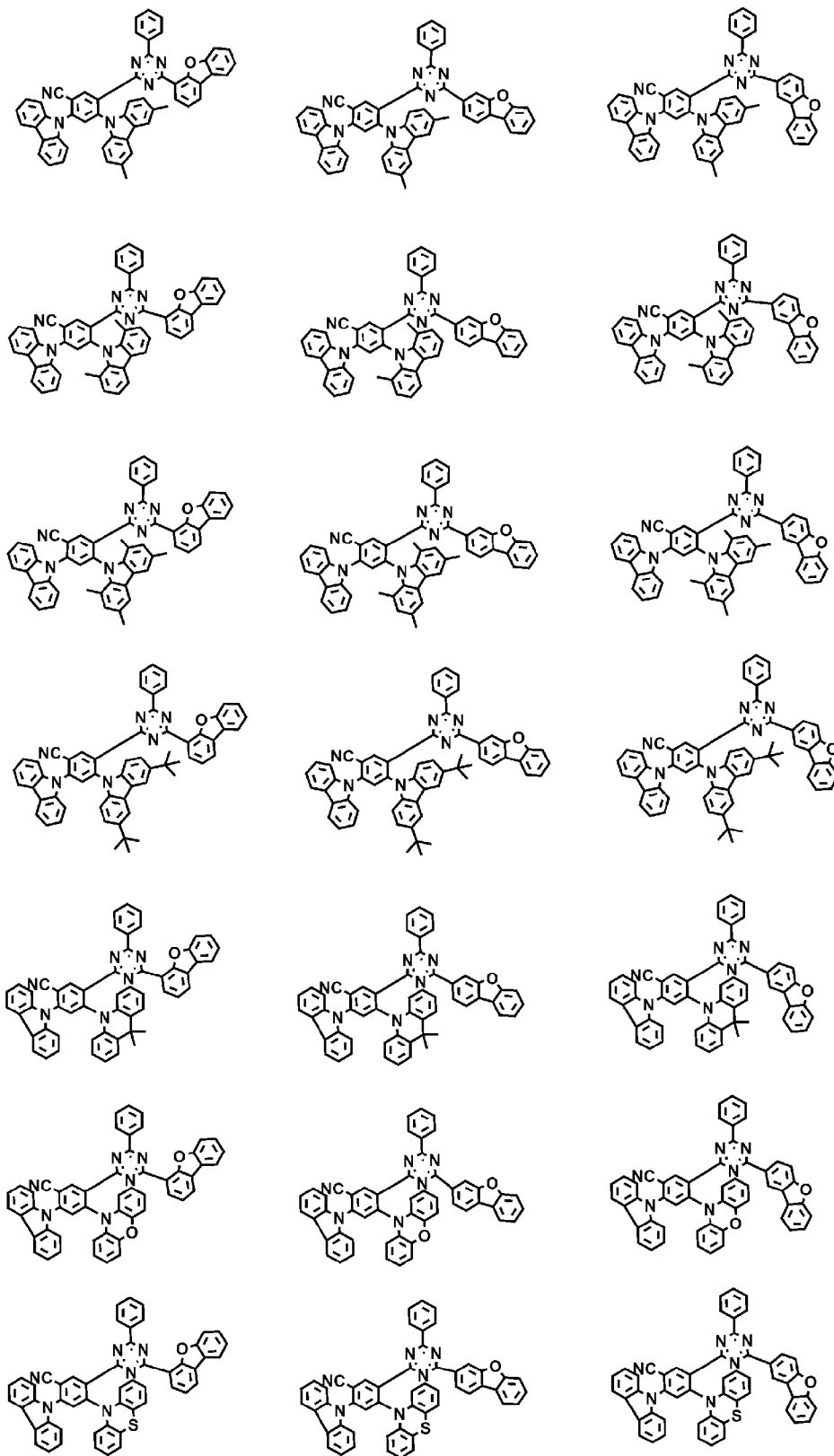
[160]



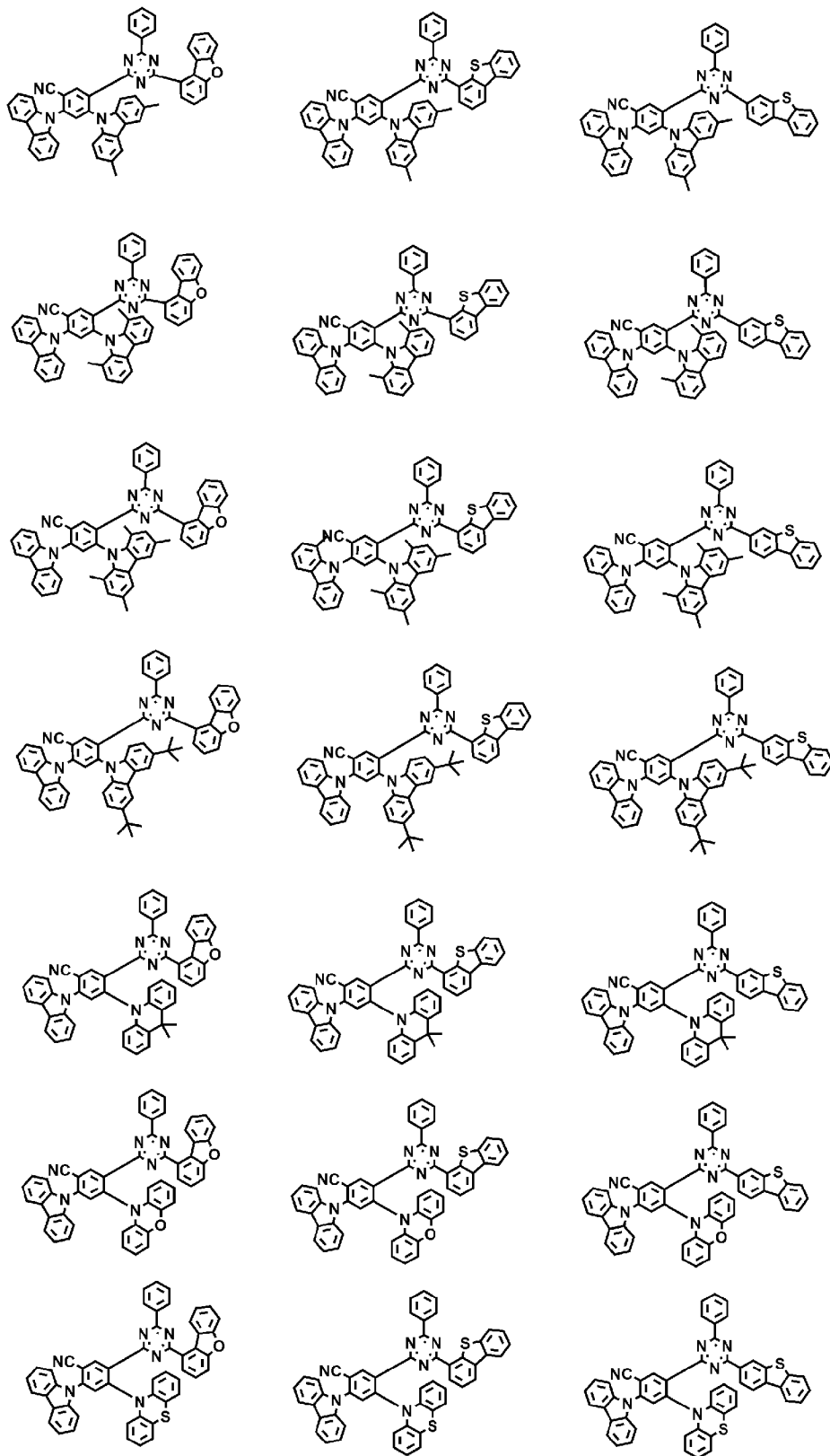
[161]



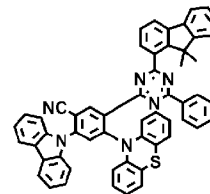
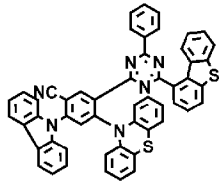
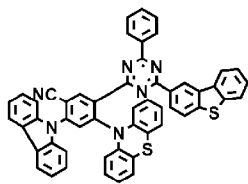
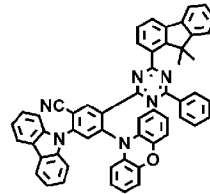
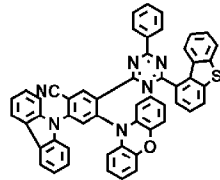
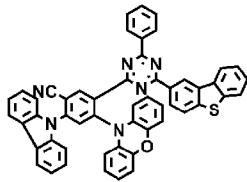
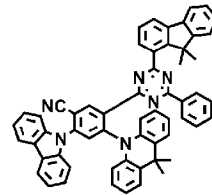
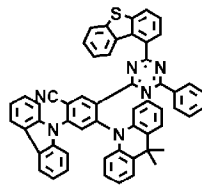
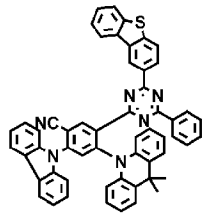
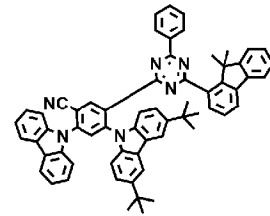
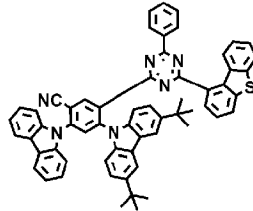
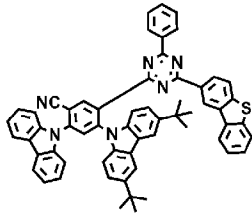
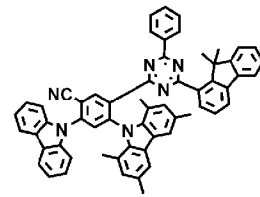
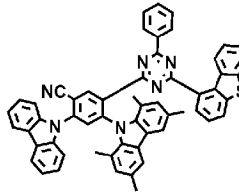
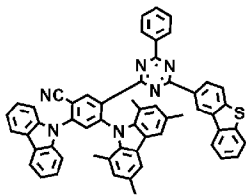
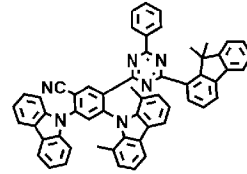
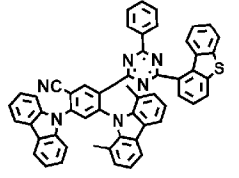
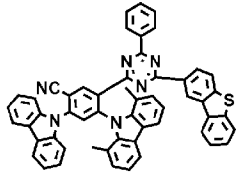
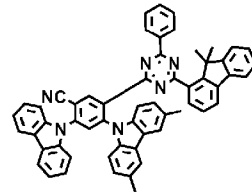
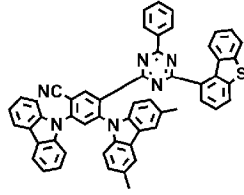
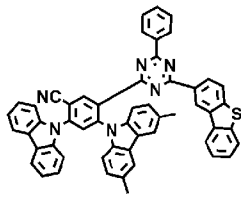
[162]



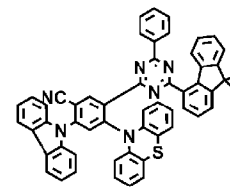
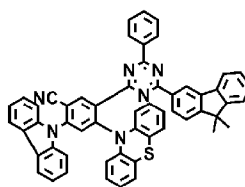
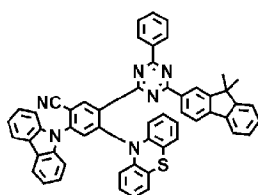
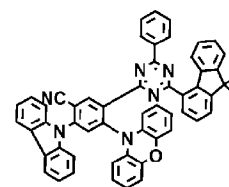
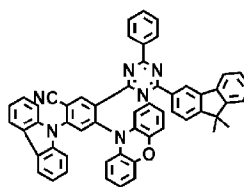
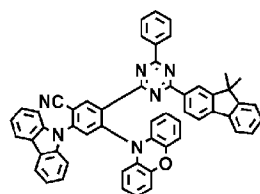
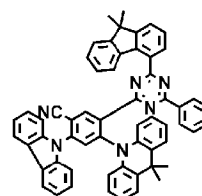
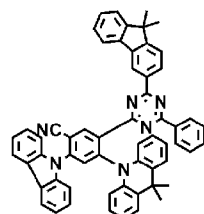
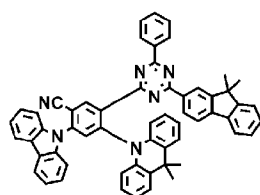
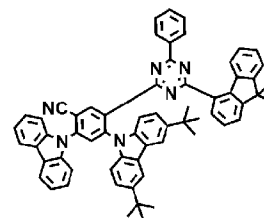
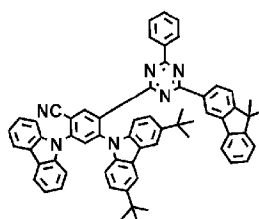
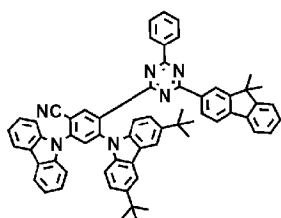
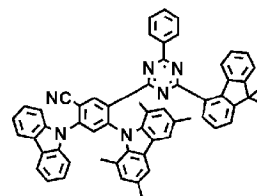
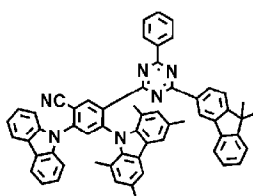
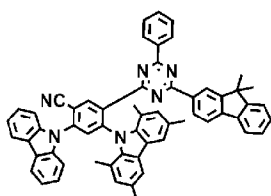
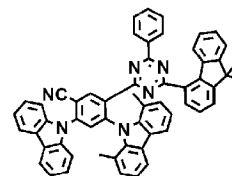
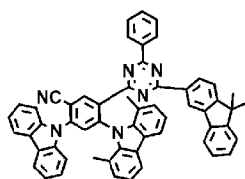
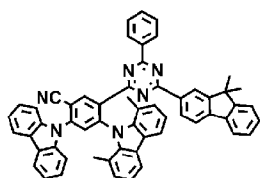
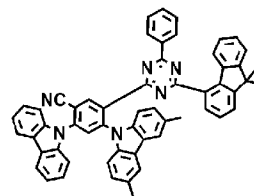
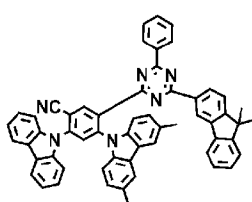
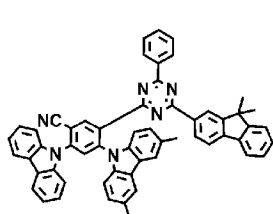
[163]



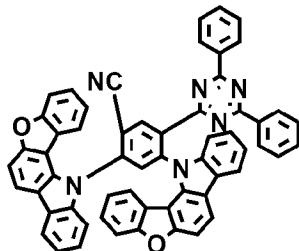
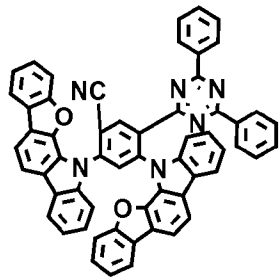
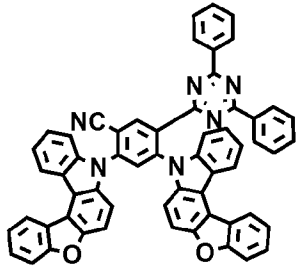
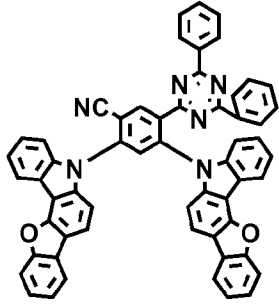
[164]



[165]



[166]



- [167] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물의 삼중항(triplet) 에너지 준위는 2.1 eV 이상 2.5 eV 이하이고, 바람직하게는 2.3 eV 이상 2.4 eV 이하일 수 있다. 상기 화학식 1로 표시되는 화합물의 삼중항(triplet) 에너지 준위가 상기 범위를 만족하는 경우, 전자 주입이 용이하게 되어 엑시톤의 형성 비율이 높아지게 되므로, 발광 효율이 상승하는 이점이 있다.
- [168] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물의 일중항(singlet) 에너지 준위와 삼중항(triplet) 에너지 준위의 차는 0 eV 이상 0.3 eV 이하이고, 바람직하게는 0 eV 이상 0.2 eV 이하이다. 상기 화학식 1로 표시되는 화합물의 일중항(singlet) 에너지 준위와 삼중항(triplet) 에너지 준위의

차가 상기 범위를 만족하는 경우, 삼중항에서 생성된 엑시톤이 역계간전이(RISC)에 의해 일중항으로 이동하는 비율 및 속도가 증가하여 삼중항에 엑시톤이 머무는 시간이 줄어들게 되므로 유기발광소자의 효율 및 수명이 증가하는 이점이 있다.

- [169] 본 명세서에 있어서, 삼중항 에너지는 형광과 인광 측정이 가능한 분광 기기를 이용하여 측정 가능하고, 측정 조건의 경우 액화질소를 이용한 극저온 상태에서 톨루엔이나 티에치에프를 용매로 하여 10^{-6} M 농도로 용액을 제조하고 용액에 물질의 흡수 파장대의 광원을 조사하여 발광하는 스펙트럼으로부터 일중항 발광을 제외하고, 삼중항에서 발광하는 스펙트럼을 분석하여 확인한다. 광원으로부터 전자가 역이되면 전자가 삼중항에 머물게 되는 시간이 일중항에 머물게되는 시간보다 훨씬 길기 때문에 극저온 상태에서 두 성분의 분리가 가능하다.
- [170] 본 명세서에 있어서, 일중항 에너지의 경우 형광기기를 이용하여 측정하며, 전술한 삼중항 에너지 측정방법과 달리 상온에서 광원을 조사한다.
- [171] 본 명세서에서는 상기 화학식 1로 표시되는 화합물의 코어 구조에 다양한 치환기를 도입함으로써 다양한 에너지 밴드갭을 갖는 화합물을 합성할 수 있다. 또한, 본 명세서에서는 상기와 같은 구조의 코어 구조에 다양한 치환기를 도입함으로써 화합물의 HOMO 및 LUMO 에너지 준위도 조절할 수 있다.
- [172] 본 명세서에서의 HOMO, LUMO의 계산값, 삼중항 에너지 및 일중항 에너지는 하기의 방법으로 측정할 수 있다.
- [173] 1) HOMO 및 LUMO 에너지 준위의 측정
- [174] 화합물의 HOMO 에너지 준위와 상기 LUMO 에너지 준위는 측정 화합물이 5mM 농도, 전해질이 0.1M 농도로 용해된 다이메틸폼아마이드(dimethylformamide, DMF) 용액의 산화, 환원 전위를 페로센 화합물을 기준으로 비교하는 순환 전압 전류법(cyclic voltammetry; CV)으로 측정하였다. 구체적인 측정 조건은 다음과 같다.
- [175] CV 기기 : Ivium Tech사의 Iviumstat
- [176] 측정 용액 : 측정 화합물이 5mM의 농도 및 전해질(KNO_3 , Aldrich 사)이 0.1M의 농도로 용해된 다이메틸폼아마이드(DMF) 용액
- [177] 작업 전극(Working Electrode) : 카본 전극
- [178] 기준 전극(Reference Electrode) : Al/AgCl 전극
- [179] 상대 전극(Counter Electrode) : 백금 전극
- [180] 측정 온도 : 25°C
- [181] Scan rate: 50mV/S
- [182] HOMO 에너지 준위($E(\text{HOMO})$) 및 LUMO 에너지 준위($E(\text{LUMO})$)는 하기의 식을 통하여 계산할 수 있다.
- [183] $E(\text{HOMO}) = [V_{\text{solvent}} - (E_{\text{onset ox}} - E_{1/2}(\text{solvent}))] \text{eV}$
- [184] $E(\text{LUMO}) = [V_{\text{solvent}} - (E_{\text{onset red}} - E_{1/2}(\text{solvent}))] \text{eV}$

[185] 상기 식에 있어서, V_{solvent} 는 용매의 에너지 준위이고, $E_{1/2}(\text{solvent})$ 는 용매의 반파 준위이고, $E_{\text{onset ox}}$ 는 산화가 시작되는 지점이고, $E_{\text{onset red}}$ 는 환원이 시작되는 지점이다.

[186] 2) 삼중항 에너지의 측정

[187] 삼중항 에너지(T1)는 수명이 긴 삼중항 엑시톤의 특성을 이용해 극저온 상태에서 측정하였다. 구체적으로, 화합물을 톨루엔 용매에 용해하여 10^{-5}M 의 농도의 시료를 제조한 후, 상기 시료를 석영 키트에 담아 77K로 냉각시키고, 300nm 광원을 인광 측정용 시료에 조사하여 파장을 변경하면서 인광 스펙트럼을 측정할 수 있다. 스펙트럼의 측정에는 분광광도계(FP-8600 spectrophotometer, JASCO사)를 이용할 수 있다.

[188] 인광 스펙트럼의 세로축은 인광 강도로, 가로축은 파장으로 한다. 인광 스펙트럼의 단파장측의 상승에 대해 접선을 긋고, 그 접선과 가로축의 교점의 파장값(λ_{edge1} (nm))을 구한 후, 이 파장값을 하기 환산식 1에 대입하여 삼중항 에너지를 산출하였다.

[189] 환산식 (F1): $T1(\text{eV}) = 1239.85/\lambda_{\text{edge1}}$

[190] 인광 스펙트럼의 단파장측의 상승에 대한 접선은 이하와 같이 긋는다. 우선, 스펙트럼의 극대값 중 가장 단파장측의 극대값을 확인한다. 이 때, 스펙트럼의 극대 피크 강도의 15% 이하의 피크 강도를 갖는 극대점은, 상기 서술한 가장 단파장측의 극대값에는 포함시키지 않는다. 인광 스펙트럼의 단파장측으로부터 상기 극대값까지의 스펙트럼 곡선 상의 각 점에 있어서의 접선을 생각한다. 이 접선 중 기울기 값이 제일 큰 접선(즉, 변곡점에 있어서의 접선)을 당해 인광 스펙트럼의 단파장측의 상승에 대한 접선으로 한다.

[191] 3) 일중항 에너지의 측정

[192] 일중항 에너지(S1)는 다음의 방법으로 측정할 수 있다.

[193] 측정 대상이 되는 화합물의 10^{-5}M 톨루엔 용액을 조제하여 석영 셀에 넣고, 상온(300K)에서 시료의 300nm 광원의 발광 스펙트럼(세로축: 발광 강도, 가로축: 파장)을 측정하였다. 이 발광 스펙트럼의 단파장측의 상승에 대해 접선을 긋고, 그 접선과 가로축의 교점의 파장값(λ_{edge2} (nm))을 하기 환산식 2에 대입하여 일중항 에너지를 산출한다. 상기 발광 스펙트럼은 JASCO사의 분광 광도계(FP-8600 spectrophotometer)를 이용하여 측정할 수 있다.

[194] 환산식 2: $S1(\text{eV}) = 1239.85/\lambda_{\text{edge2}}$

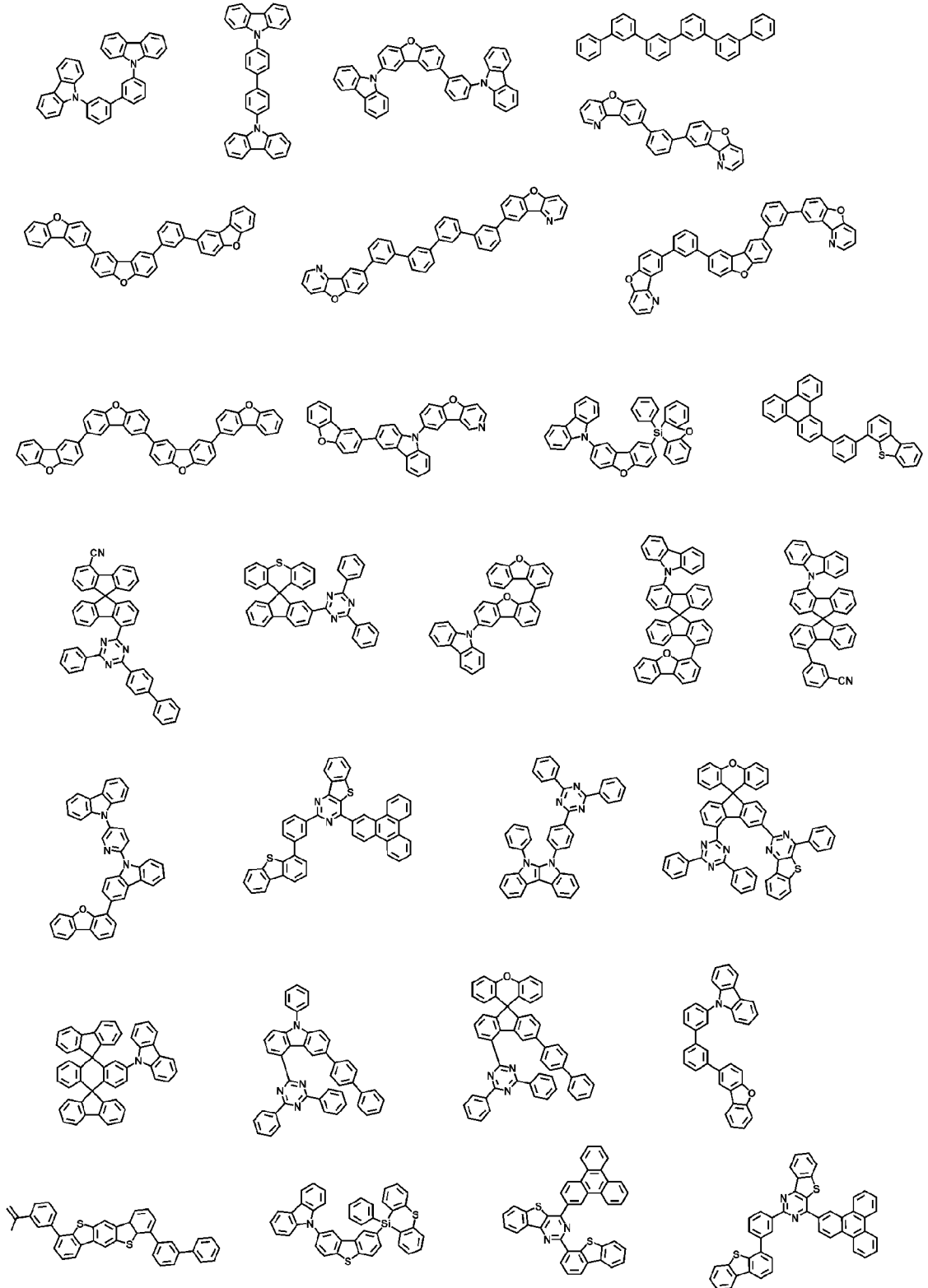
[195] 발광 스펙트럼의 단파장측의 상승에 대한 접선은 이하와 같이 긋는다. 우선, 스펙트럼의 극대값 중 가장 단파장측의 극대값을 확인한다. 발광 스펙트럼의 단파장측으로부터 상기 극대값까지의 스펙트럼 곡선 상의 각 점에 있어서의 접선을 생각한다. 이 접선 중 기울기 값이 제일 큰 접선(즉, 변곡점에 있어서의 접선)을 당해 발광 스펙트럼의 단파장측의 상승에 대한 접선으로 한다. 스펙트럼의 극대 피크 강도의 15% 이하의 피크 강도를 갖는 극대점은, 상기 서술한 가장 단파장측의 극대값에는 포함시키지 않는다.

- [196] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 제1 전극; 상기 제1 전극에 대향하여 구비된 제2 전극; 및 상기 제1 전극과 제2 전극 사이에 구비된 1층 이상의 유기물층을 포함하는 유기 발광 소자로서, 상기 유기물층 중 1층 이상은 전술한 화합물을 포함하는 것인 유기 발광 소자를 제공한다.
- [197] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 본 명세서의 유기 발광 소자의 유기물층은 단층 구조로 이루어질 수도 있으나, 2층 이상의 유기물층이 적층된 다층 구조로 이루어질 수 있다. 예컨대, 본 발명의 유기 발광 소자는 유기물층으로서 정공주입층, 정공수송층, 전자차단층, 발광층, 정공 차단층, 전자수송층, 전자전자주입층 등을 포함하는 구조를 가질 수 있다. 그러나 유기 발광 소자의 구조는 이에 한정되지 않고 더 적거나 많은 수의 유기층을 포함할 수 있다.
- [198] 예컨대, 본 명세서의 유기 발광 소자의 구조는 도 1 및 도 2에 나타난 것과 같은 구조를 가질 수 있으나 이에만 한정되는 것은 아니다.
- [199] 도 1에는 기판(1) 위에 제1 전극(2), 발광층(3) 및 제2 전극(4)이 순차적으로 적층된 유기 발광 소자의 구조가 예시 되어 있다. 상기 도 1은 본 명세서의 일 실시상태에 따른 유기 발광 소자의 예시적인 구조이며, 다른 유기물층을 더 포함할 수 있다.
- [200] 도 2에는 기판(1) 위에 제1 전극(2), 정공주입층(5), 정공수송층(6), 발광층(3), 전자수송층(7) 및 제2 전극(4)이 순차적으로 적층된 유기 발광 소자의 구조가 예시되어 있다. 상기 도 2는 본 명세서의 실시상태에 따른 예시적인 구조이며, 다른 유기물층을 더 포함할 수 있다.
- [201] 도 3에는 기판(1) 위에 제1 전극(2), 정공주입층(5), 정공수송층(6), 전자저지층(8), 발광층(3), 정공저지층(9), 전자주입 및 수송층(10) 및 제2 전극(4)이 순차적으로 적층된 유기 발광 소자의 구조가 예시되어 있다. 상기 도 3는 본 명세서의 실시상태에 따른 예시적인 구조이며, 다른 유기물층을 더 포함하거나 생략할 수 있다.
- [202] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 유기물층은 정공주입층, 정공수송층 또는 전자저지층을 포함하고, 상기 정공주입층, 정공수송층 또는 전자저지층은 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함한다.
- [203] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 유기물층은 발광층을 포함하고, 상기 발광층은 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함한다.
- [204] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 발광층의 두께는 200 Å 내지 400Å이다.
- [205] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 발광층의 두께는 300 Å이다.
- [206] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 유기물층은 발광층을 포함하고, 상기 발광층은 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 발광층의 도펀트로서 포함한다. 이 경우 도펀트는 발광층 총 중량 대비 0.001 중량% 내지 50중량%로 사용될 수 있다.
- [207] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 유기물층은 발광층을 포함하고, 상기

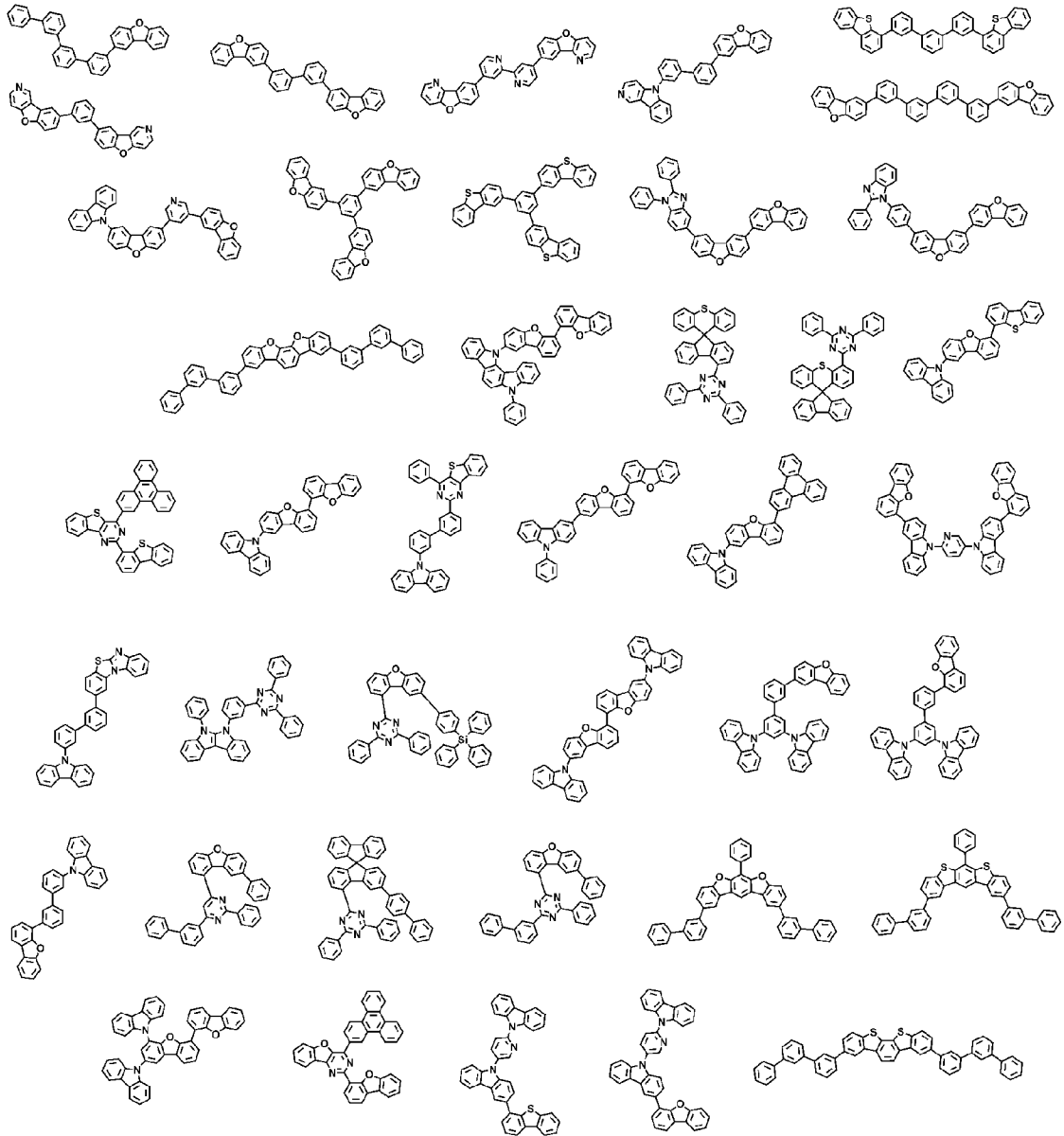
발광층은 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 발광층의 매트릭스로서 포함한다. 이 경우 도펀트는 발광층 총 중량 대비 0.001 중량% 내지 50중량%로 사용될 수 있다.

[208] 상기 화학식 1의 화합물을 발광층의 도펀트로 사용하는 경우 하기의 호스트들 중 1 이상의 화합물을 함께 사용할 수 있다.

[209]



[210]



[211] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 유기물층은 발광층을 포함하고, 상기 발광층은 상기 화합물을 발광층의 보조 도펀트 또는 증감제로 포함할 수 있다

[212] 또 하나의 일 실시상태에 따르면, 상기 유기물층은 발광층을 포함하고, 상기 발광층은 상기 화합물을 포함하며, 호스트 및 형광 도펀트를 더 포함할 수 있다. 이때, 상기 화합물은 보조 도펀트(assistant dopant), 또는 증감제(sensitizer)로 역할하게 되며, 구체적으로 상기 화합물은 호스트로부터 정공(hole)과 전자(electron)을 전달받아 엑시톤(exciton)을 형성하며, 생성된 엑시톤을 형광 도펀트로 전달해주는 역할을 하게 된다.

[213] 일반적인 유기발광소자에서 일중항과 삼중항에서 생성되는 엑시톤의 수가 25:75(일중항:삼중항)의 비율로 생성되며, 엑시톤 이동에 따른 발광 형태에 따라 형광 발광, 인광 발광 및 열활성화 지연형광 발광으로 나눌 수 있다. 상기 인광 발광의 경우 삼중항 여기 상태(excited state)의 엑시톤이 바닥 상태(ground state)로

이동하여 발광하는 것을 의미하고, 상기 형광 발광의 경우 일중항 여기 상태(excited state)의 엑시톤이 바닥 상태(ground state)로 이동하여 발광하게 되는 것을 의미하며, 상기 열활성화 지연형광 발광은 삼중항 여기 상태(excited state)로부터 일중항 여기 상태(excited state)로 역계간전이가 유도되고, 일중항 여기 상태의 엑시톤이 바닥 상태(Ground State)로 이동하여 형광 발광을 일으키는 것을 의미한다.

- [214] 본 발명의 화합물이 지연 형광 특성을 가짐으로써, 일반적으로 삼중항 여기 상태(excited state)의 엑시톤들이 일중항 여기 상태(excited state)로 역계간전이하여 그 에너지를 도펀트로 전달하여 고효율을 갖는 유기발광소자를 구현할 수 있다.
- [215] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 유기물층은 정공저지층, 전자수송층 또는 전자주입층을 포함하고, 상기 정공저지층, 전자수송층 또는 전자주입층은 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함한다.
- [216] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 전자저지층은 상기 화학식 1의 화합물을 포함한다.
- [217] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 전자수송층은 상기 화학식 1의 화합물을 포함한다.
- [218] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 유기물층은 정공주입층, 정공수송층, 발광층, 전자수송층 및 전자주입층으로 이루어진 군으로부터 선택되는 1층 이상을 더 포함할 수 있다.
- [219] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 유기물층은 정공주입층, 정공수송층, 전자저지층, 발광층, 정공저지층, 전자 주입 및 수송층으로 이루어진 군으로부터 선택되는 1층 이상을 더 포함할 수 있다.
- [220] 본 명세서의 유기 발광 소자는 유기물층 중 1층 이상이 본 명세서의 화합물, 즉, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물을 포함하는 것을 제외하고는 당 기술분야에 알려져 있는 재료와 방법으로 제조될 수 있다.
- [221] 상기 유기 발광 소자가 복수개의 유기물층을 포함하는 경우, 상기 유기물층은 동일한 물질 또는 다른 물질로 형성될 수 있다.
- [222] 예컨대, 본 명세서의 유기 발광 소자는 기판 상에 제1 전극, 유기물층 및 제2 전극을 순차적으로 적층시킴으로써 제조할 수 있다. 이 때 스퍼터링법(sputtering)이나 전자빔 증발법(e-beam evaporation)과 같은 물리 증착 방법(PVD: physical Vapor Deposition)을 이용하여, 기판 상에 금속 또는 전도성을 가지는 금속 산화물 또는 이들의 합금을 증착시켜 제1 전극을 형성하고, 그 위에 정공 주입층, 정공 수송층, 발광층 및 전자 수송층을 포함하는 유기물층을 형성한 후, 그 위에 제2 전극으로 사용할 수 있는 물질을 증착시킴으로써 제조될 수 있다. 이와 같은 방법 외에도, 기판 상에 제2 전극 물질부터 유기물층, 제1 전극 물질을 차례로 증착시켜 유기 발광 소자를 만들 수 있다. 또한, 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 유기 발광 소자의 제조시 진공 증착법 뿐만 아니라 용액

도포법에 의하여 유기물층으로 형성될 수 있다. 여기서, 용액 도포법이라 함은 스핀 코팅, 딥코팅, 닥터 블레이딩, 잉크젯프린팅, 스크린 프린팅, 스프레이법, 롤 코팅 등을 의미하지만, 이들만으로 한정되는 것은 아니다.

- [223] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 제1 전극은 양극이고, 상기 제2 전극은 음극이다.
- [224] 본 명세서의 또 하나의 실시상태에 따르면, 상기 제1 전극은 음극이고, 상기 제2 전극은 양극이다.
- [225] 상기 양극 물질로는 통상 유기물층으로 정공 주입이 원활할 수 있도록 일함수가 큰 물질이 바람직하다. 본 발명에서 사용될 수 있는 양극 물질의 구체적인 예로는 바나듐, 크롬, 구리, 아연, 금과 같은 금속 또는 이들의 합금; 아연 산화물, 인듐 산화물, 인듐주석 산화물(ITO), 인듐아연 산화물(IZO)과 같은 금속 산화물; ZnO:Al 또는 SnO₂:Sb와 같은 금속과 산화물의 조합; 폴리(3-메틸티오펜), 폴리[3,4-(에틸렌-1,2-디옥시)티오펜](PEDOT), 폴리피롤 및 폴리아닐린과 같은 전도성 고분자 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.
- [226] 상기 음극 물질로는 통상 유기물층으로 전자 주입이 용이하도록 일함수가 작은 물질인 것이 바람직하다. 음극 물질의 구체적인 예로는 마그네슘, 칼슘, 나트륨, 칼륨, 티타늄, 인듐, 이트륨, 리튬, 가돌리늄, 알루미늄, 은, 주석 및 납과 같은 금속 또는 이들의 합금; LiF/Al 또는 LiO₂/Al, Mg/Ag과 같은 다층 구조 물질 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.
- [227] 상기 정공주입층은 정공 주입 물질로는 전극으로부터 정공을 주입하는 층으로, 정공 주입 물질로는 정공을 수송하는 능력을 가져 양극에서의 정공 주입효과, 발광층 또는 발광재료에 대하여 우수한 정공 주입 효과를 갖고, 발광층에서 생성된 여기자의 전자주입층 또는 전자주입재료에의 이동을 방지하며, 또한, 박막 형성 능력이 우수한 화합물이 바람직하다. 정공 주입 물질의 HOMO(highest occupied molecular orbital)가 양극 물질의 일함수와 주변 유기물층의 HOMO 사이인 것이 바람직하다. 정공 주입 물질의 구체적인 예로는 금속 포피린(porphyrin), 올리고티오펜, 아릴아민 계열의 유기물, 헥사니트릴헥사아자트리페닐렌 계열의 유기물, 퀴나크리돈(quinacridone)계열의 유기물, 페릴렌(perylene) 계열의 유기물, 안트라퀴논 및 폴리아닐린과 폴리티오펜 계열의 전도성 고분자 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.
- [228] 상기 정공수송층은 정공주입층으로부터 정공을 수취하여 발광층까지 정공을 수송하는 층으로, 정공 수송 물질로는 양극이나 정공 주입층으로부터 정공을 수송받아 발광층으로 옮겨줄 수 있는 물질로 정공에 대한 이동성이 큰 물질이 적합하다. 구체적인 예로는 아릴아민 계열의 유기물, 전도성 고분자, 및 공액 부분과 비공액 부분이 함께 있는 블록 공중합체 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.
- [229] 상기 발광층의 발광 물질로는 정공 수송층과 전자 수송층으로부터 정공과

전자를 각각 수송받아 결합시킴으로써 가시광선 영역의 빛을 낼 수 있는 물질로서, 형광이나 인광에 대한 양자 효율이 좋은 물질이 바람직하다. 구체적인 예로는 8-히드록시-퀴놀린 알루미늄 착물(Alq_3); 카르바졸 계열 화합물; 이량체화 스티릴(dimerized styryl) 화합물; $BAlq$; 10-히드록시벤조 퀴놀린-금속 화합물; 벤조옥사졸, 벤조티아졸 및 벤조이미다졸 계열의 화합물; 폴리(p-페닐렌비닐렌)(PPV) 계열의 고분자; 스피로(spiro) 화합물; 폴리플루오렌, 루브렌 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.

- [230] 상기 발광층은 호스트 재료 및 도펀트 재료를 포함할 수 있다. 호스트 재료는 축합 방향족환 유도체 또는 헤테로 고리 함유 화합물 등이 있다. 구체적으로 축합 방향족환 유도체로는 안트라센 유도체, 피렌 유도체, 나프탈렌 유도체, 펜타센 유도체, 페난트렌 화합물, 플루오란텐 화합물 등이 있고, 헤테로 고리 함유 화합물로는 카바졸 유도체, 디벤조퓨란 유도체, 래더형 퓨란 화합물, 피리미딘 유도체 등이 있으나, 이에 한정되지 않는다.
- [231] 상기 도펀트 재료로는 방향족 아민 유도체, 스티릴아민 화합물, 붕소 착체, 플루오란텐 화합물, 금속 착체 등이 있다. 구체적으로 방향족 아민 유도체로는 치환 또는 비치환된 아릴아미노기를 갖는 축합 방향족환 유도체로서, 아릴아미노기를 갖는 피렌, 안트라센, 크리센, 페리플란텐 등이 있으며, 스티릴아민 화합물로는 치환 또는 비치환된 아릴아민에 적어도 1개의 아릴비닐기가 치환되어 있는 화합물로, 아릴기, 실릴기, 알킬기, 시클로알킬기 및 아릴아미노기로 이루어진 군에서 1 또는 2 이상 선택되는 치환기가 치환 또는 비치환된다. 구체적으로 스티릴아민, 스티릴디아민, 스티릴트리아민, 스티릴테트라아민 등이 있으나, 이에 한정되지 않는다. 또한, 금속 착체로는 이리듐 착체, 백금 착체 등이 있으나, 이에 한정되지 않는다.
- [232] 상기 전자수송층은 전자주입층으로부터 전자를 수취하여 발광층까지 전자를 수송하는 층으로 전자 수송 물질로는 음극으로부터 전자를 잘 주입 받아 발광층으로 옮겨줄 수 있는 물질로서, 전자에 대한 이동성이 큰 물질이 적합하다. 구체적인 예로는 8-히드록시퀴놀린의 Al착물; Alq_3 를 포함한 착물; 유기 라디칼 화합물; 히드록시플라본-금속 착물 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다. 전자 수송층은 종래기술에 따라 사용된 바와 같이 임의의 원하는 캐소드 물질과 함께 사용할 수 있다. 특히, 적절한 캐소드 물질의 예는 낮은 일함수를 가지고 알루미늄층 또는 실버층이 뒤따르는 통상적인 물질이다. 구체적으로 세슘, 바륨, 칼슘, 이테르븀 및 사마륨이고, 각 경우 알루미늄 층 또는 실버층이 뒤따른다.
- [233] 상기 전자주입층은 전극으로부터 전자를 주입하는 층으로, 전자를 수송하는 능력을 갖고, 음극으로부터의 전자주입 효과, 발광층 또는 발광 재료에 대하여 우수한 전자주입 효과를 가지며, 발광층에서 생성된 여기자의 정공 주입층에의 이동을 방지하고, 또한, 박막형성능력이 우수한 화합물이 바람직하다. 구체적으로는 플루오레논, 안트라퀴노다이메탄, 다이페노퀴논, 티오피란

다이옥사이드, 옥사졸, 옥사다이아졸, 트리아졸, 이미다졸, 페릴렌테트라카복실산, 프레오레닐리덴 메탄, 안트론 등과 그들의 유도체, 금속 착체 화합물 및 합질소 5원환 유도체 등이 있으나, 이에 한정되지 않는다.

- [234] 상기 금속 착체 화합물로서는 8-하이드록시퀴놀리나토 리튬, 비스(8-하이드록시퀴놀리나토)아연, 비스(8-하이드록시퀴놀리나토)구리, 비스(8-하이드록시퀴놀리나토)망간, 트리스(8-하이드록시퀴놀리나토)알루미늄, 트리스(2-메틸-8-하이드록시퀴놀리나토)알루미늄, 트리스(8-하이드록시퀴놀리나토)갈륨, 비스(10-하이드록시벤조[h]퀴놀리나토)베릴륨, 비스(10-하이드록시벤조[h]퀴놀리나토)아연, 비스(2-메틸-8-퀴놀리나토)클로로갈륨, 비스(2-메틸-8-퀴놀리나토)(o-크레졸라토)갈륨, 비스(2-메틸-8-퀴놀리나토)(1-나프톨라토)알루미늄, 비스(2-메틸-8-퀴놀리나토)(2-나프톨라토)갈륨 등이 있으나, 이에 한정되지 않는다.

- [235] 본 명세서에 따른 유기 발광 소자는 사용되는 재료에 따라 전면 발광형, 후면 발광형 또는 양면 발광형일 수 있다.

발명의 실시를 위한 형태

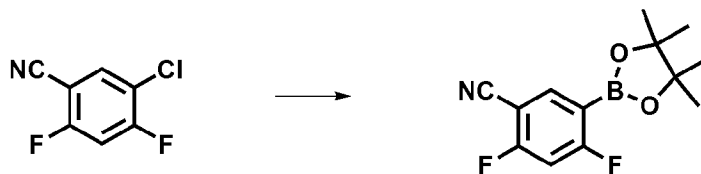
- [236] <제조예>

- [237] 상기 화학식 1로 표시되는 화합물은 하기와 같이 5-클로로-2,4-다이플루오로벤조나이트릴에 보릴레이션 후 스즈키 반응을 통해 트리아진을 도입하는 반응으로부터 제조할 수 있다. 최종적으로 합질소 화합물을 SnAr 반응으로 도입하여 하기 과정을 통하여 구체에 상의 화합물들을 합성하였다.

- [238] <제조예 1-1> 화합물 1-A의 합성

- [239] [반응식 1-1]

- [240]



1-A

- [241] 5-클로로-2,4-다이플루오로벤조나이트릴 20g(115.2mmol), 비스(피나코락토)다이보론 115.2mmol, 포타슘아세테이트 230.5mmol 및 1,4-다이옥산 200 mL를 혼합하고 100°C로 가열했다. 여기에 팔라듐아세테이트 1mmol%를 첨가하여 리플릭스 상태로 12시간 동안 교반하였다. 반응 후 실온으로 되돌린 반응용액을 물로 추출하고 유기층을 증류하여 고체를 얻었다. 얻어진 고체를 클로로포름/헥산으로 컬럼 크로마토그래피를 이용하여 정제하여

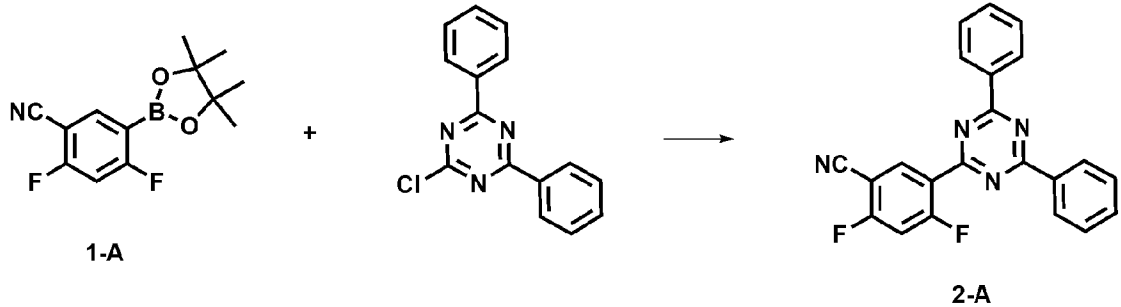
화합물 1-A 26.6g(수율 87%)을 얻었다.

[242] MS[M+H]⁺ = 266

[243] <제조예 2-1> 화합물 2-A의 합성

[244] [반응식 2-1]

[245]



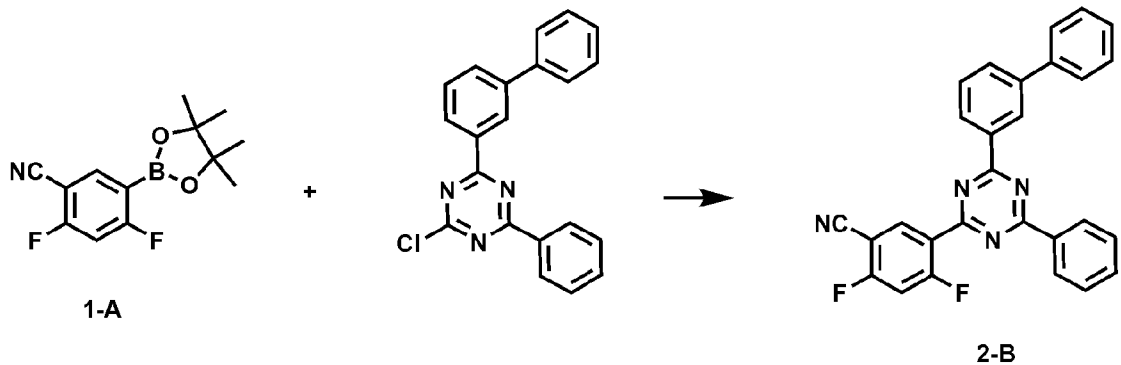
[246] 화합물 1-A 21.2g(80mmol), 2-클로로-4,6-다이페닐-1,3,5-트리아진 80mmol, 테트라하이드로퓨란 2000mL 및 물 100mL를 혼합하고 60°C로 가열했다. 여기에 포타슘카보네이트 240mmol 및 테트라키스트라이페닐포스핀팔라듐 1mmol%를 첨가하여 리플릭스 상태로 3시간 동안 교반하였다. 반응 후 실온으로 되돌린 반응용액에서 유기층을 추출한 후, 증류하였다. 클로로포름/헥산으로 컬럼 크로마토그래피를 이용하여 정제하여 화합물 2-A 26.4g(수율 89%)을 얻었다.

[247] MS[M+H]⁺ = 371

[248] <제조예 2-2> 화합물 2-B의 합성

[249] [반응식 2-2]

[250]



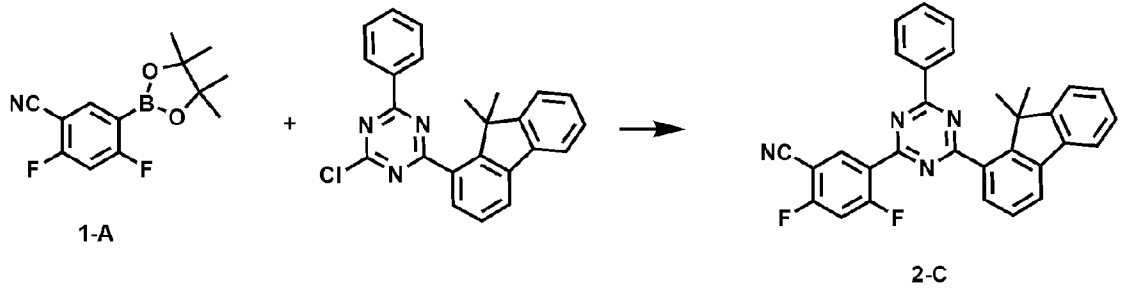
[251] 화합물 1-A 21.2g(80mmol), 2-((1,1'-바이페닐)-3-일)-4-클로로-6-페닐-1,3,5-트리아진 80mmol, 테트라하이드로퓨란 2000mL 및 물 100mL를 혼합하고 60°C로 가열했다. 여기에 포타슘카보네이트 240mmol 및 테트라키스트라이페닐포스핀팔라듐 1mmol%를 첨가하여 리플릭스 상태로 3시간 동안 교반하였다. 반응 후 실온으로 되돌린 반응용액에서 유기층을 추출한 후, 증류하였다. 클로로포름/헥산으로 컬럼 크로마토그래피를 이용하여 정제하여 화합물 2-B 30.3g(수율 85%)을 얻었다.

[252] MS[M+H]⁺ = 447

[253] <제조예 2-3> 화합물 2-C의 합성

[254] [반응식 2-3]

[255]



[256]

화합물 1-A 21.2g(80mmol),
 2-클로로-4-(9,9-다이메틸-9H-플루오렌-1-일)-6-페닐-1,3,5-트리아진 80mmol,
 테트라하이드로퓨란 2000mL 및 물 100mL를 혼합하고 60°C로 가열했다. 여기에
 포타슘카보네이트 240mmol 및 테트라키스트라이페닐포스핀팔라듐 1mmol%를
 첨가하여 리플럭스 상태로 3시간 동안 교반하였다. 반응 후 실온으로 되돌린
 반응용액에서 유기층을 추출한 후, 증류하였다. 클로로포름/헥산으로 컬럼
 크로마토그래피를 이용하여 정제하여 화합물 2-C 31.5g(수율 81%)을 얻었다.

[257]

MS[M+H]⁺ = 487

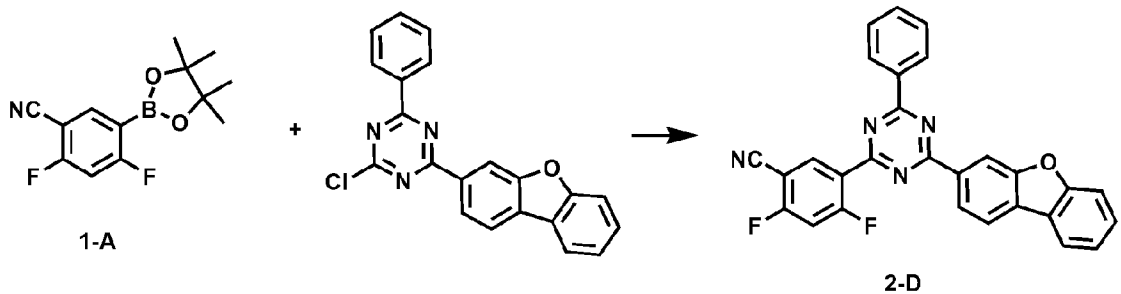
[258]

<제조예 2-4> 화합물 2-D의 합성

[259]

[반응식 2-4]

[260]



[261]

화합물 1-A 21.2g(80mmol),
 2-클로로-4-(다이벤조[b,d]퓨란-3-일)-6-페닐-1,3,5-트리아진 80mmol,
 테트라하이드로퓨란 2000mL 및 물 100mL를 혼합하고 60°C로 가열했다. 여기에
 포타슘카보네이트 240mmol 및 테트라키스트라이페닐포스핀팔라듐 1mmol%를
 첨가하여 리플럭스 상태로 3시간 동안 교반하였다. 반응 후 실온으로 되돌린
 반응용액에서 유기층을 추출한 후, 증류하였다. 클로로포름/헥산으로 컬럼
 크로마토그래피를 이용하여 정제하여 화합물 2-D 29.5g(수율 80%)을 얻었다.

[262]

MS[M+H]⁺ = 461

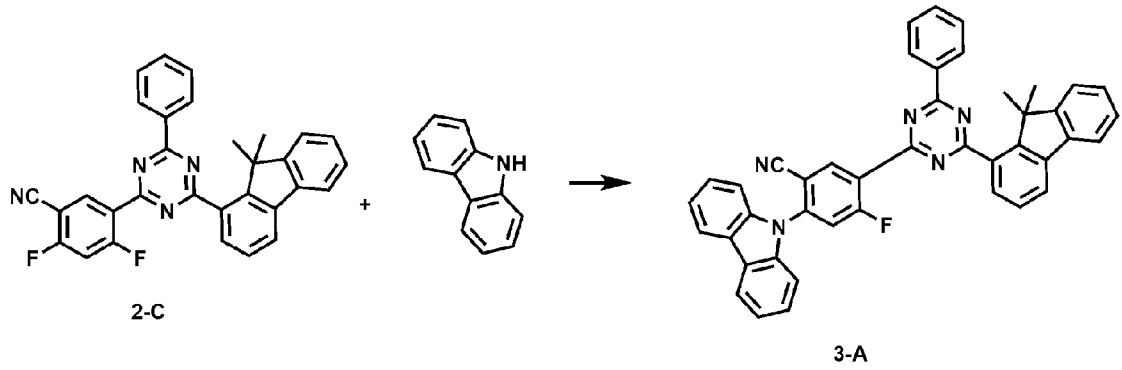
[263]

<제조예 3-1> 화합물 3-A의 합성

[264]

[반응식 3-1]

[265]

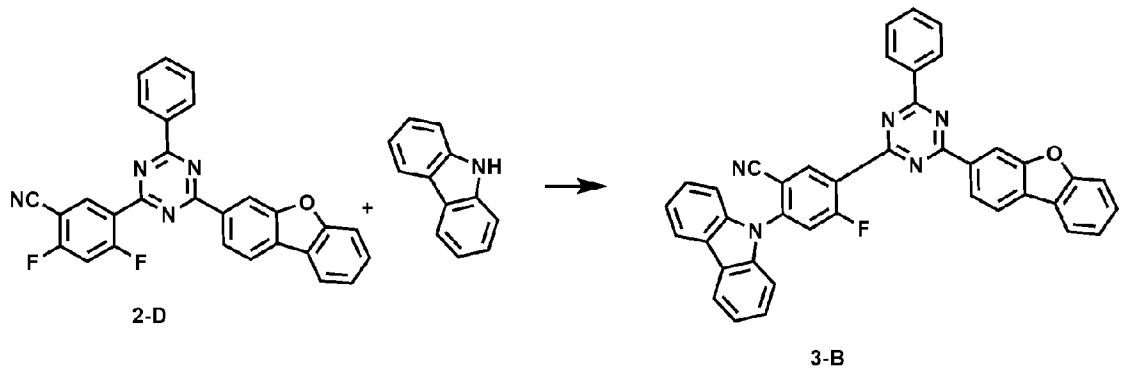


[266] 화합물 2-C 19.g(40mmol), 9H-카바졸 40mmol, 디메틸포름아아마이드 150mL 및 포타슘카보네이트 120mmol을 혼합하고 100°C로 가열하여 5시간 동안 교반하였다. 반응 후 실온으로 되돌린 반응용액을 물에 역침전하여 고체를 수득하고, 얻어진 고체를 클로로포름/헥산으로 재결정하여 화합물 3-A 21.5g(수율 85%)을 얻었다. MS[M+H]⁺ = 634

[267] <제조예 3-2> 화합물 3-B의 합성

[268] [반응식 3-2]

[269]

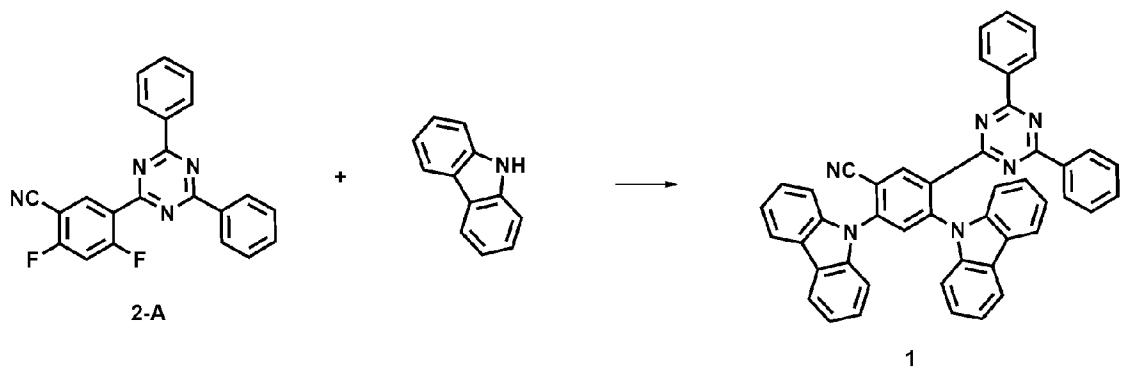


[270] 화합물 2-D 18.4g(40mmol), 9H-카바졸 40mmol, 디메틸포름아아마이드 150mL 및 포타슘카보네이트 120mmol을 혼합하고 100°C로 가열하여 5시간 동안 교반하였다. 반응 후 실온으로 되돌린 반응용액을 물에 역침전하여 고체를 수득하고, 얻어진 고체를 클로로포름/헥산으로 재결정하여 화합물 3-B 20.9g(수율 86%)을 얻었다. MS[M+H]⁺ = 608

[271] <제조예 4-1> 화합물 1의 합성

[272] [반응식 4-1]

[273]



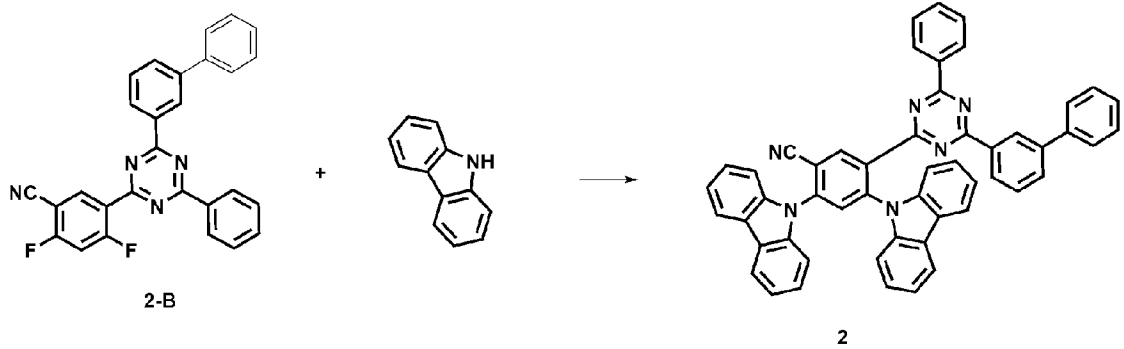
[274] 화합물 2-A 14.8g(40mmol), 9H-카바졸 80mmol, 디메틸포름아아마이드 150mL 및 포타슘카보네이트 200mmol을 혼합하고 100°C로 가열하여 5시간 동안 교반하였다. 반응 후 실온으로 되돌린 반응용액을 물에 역침전하여 고체를 수득하고, 얻어진 고체를 클로로포름/헥산으로 재결정하여 화합물 **1** 23.4g(수율 88%)을 얻었다.

[275] MS[M+H]⁺ = 665

[276] <제조예 4-2> 화합물 **2**의 합성

[277] [반응식 4-2]

[278]



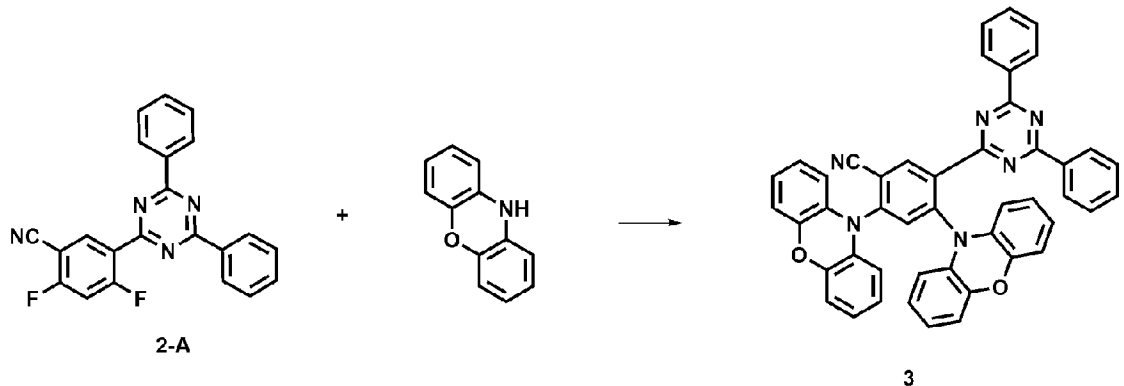
[279] 화합물 2-B 17.8g(40mmol), 9H-카바졸 80mmol, 디메틸포름아아마이드 150mL 및 포타슘카보네이트 200mmol을 혼합하고 100°C로 가열하여 5시간 동안 교반하였다. 반응 후 실온으로 되돌린 반응용액을 물에 역침전하여 고체를 수득하고, 얻어진 고체를 클로로포름/헥산으로 재결정하여 화합물 **2** 25.2g(수율 85%)을 얻었다.

[280] MS[M+H]⁺ = 741

[281] <제조예 4-3> 화합물 **3**의 합성

[282] [반응식 4-3]

[283]



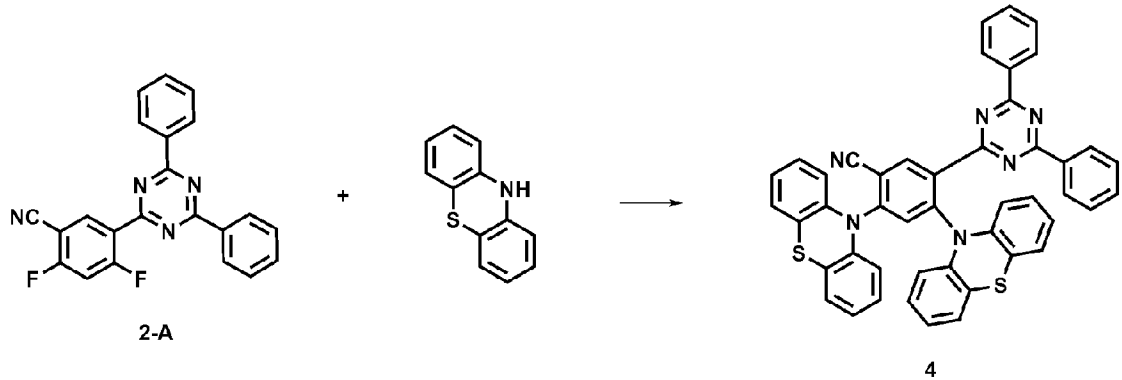
[284] 화합물 2-A 14.8g(40mmol), 10H-페녹사진 80mmol, 디메틸포름아아마이드 150mL 및 포타슘카보네이트 200mmol을 혼합하고 100°C로 가열하여 5시간 동안 교반하였다. 반응 후 실온으로 되돌린 반응용액을 물에 역침전하여 고체를 수득하고, 얻어진 고체를 클로로포름/헥산으로 재결정하여 화합물 **3** 23.1g(수율 83%)을 얻었다.

[285] MS[M+H]⁺ = 697

[286] <제조예 4-4> 화합물 **4**의 합성

[287] [반응식 4-4]

[288]



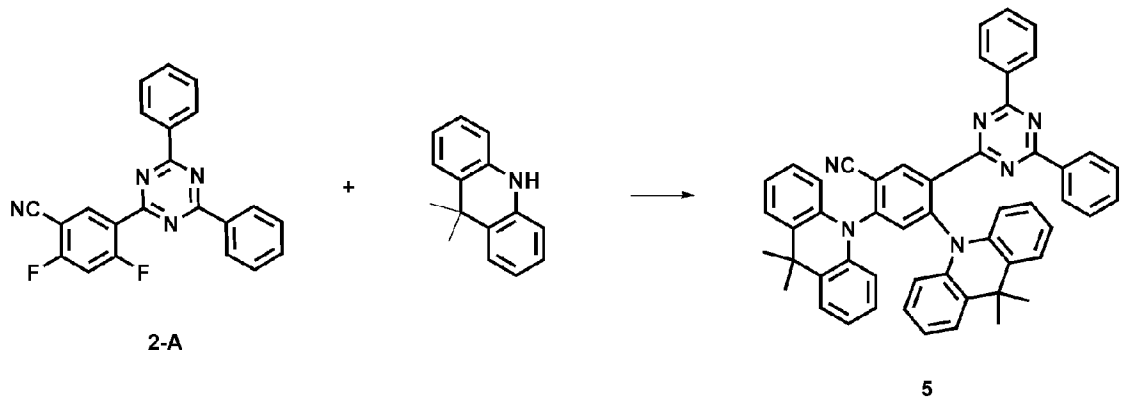
[289] 화합물 2-A 14.8g(40mmol), 10H-페녹시아진 80mmol, 디메틸포름아아마이드 150mL 및 포타슘카보네이트 200mmol을 혼합하고 100°C로 가열하여 5시간 동안 교반하였다. 반응 후 실온으로 되돌린 반응용액을 물에 역침전하여 고체를 수득하고, 얻어진 고체를 클로로포름/헥산으로 재결정하여 화합물 **4** 24.5g(수율 84%)을 얻었다.

[290] MS[M+H]⁺ = 729

[291] <제조예 4-5> 화합물 **5**의 합성

[292] [반응식 4-5]

[293]



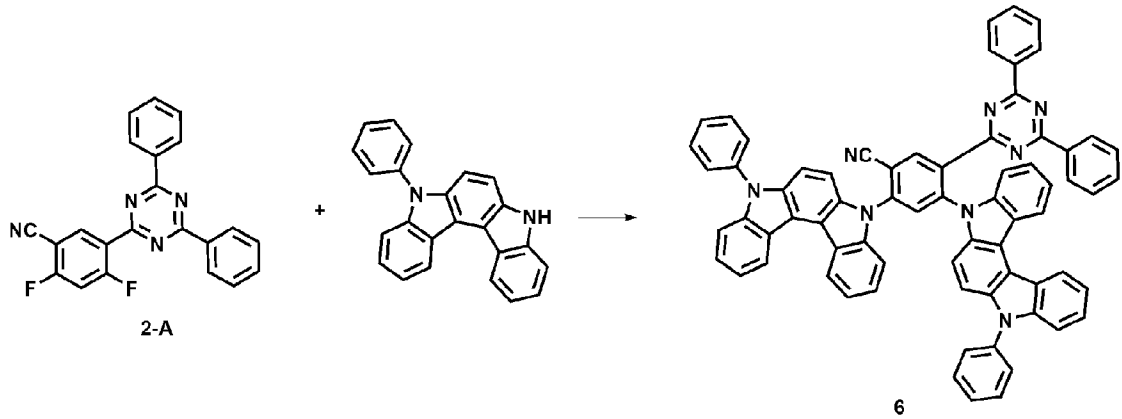
[294] 화합물 2-A 14.8g(40mmol), 9,9-다이메틸-9,10-다이하이드로아크리딘 80mmol, 디메틸포름아아마이드 150mL 및 포타슘카보네이트 200mmol을 혼합하고 100°C로 가열하여 5시간 동안 교반하였다. 반응 후 실온으로 되돌린 반응용액을 물에 역침전하여 고체를 수득하고, 얻어진 고체를 클로로포름/헥산으로 재결정하여 화합물 **5** 24.6g(수율 82%)을 얻었다.

[295] MS[M+H]⁺ = 749

[296] <제조예 4-6> 화합물 **6**의 합성

[297] [반응식 4-6]

[298]



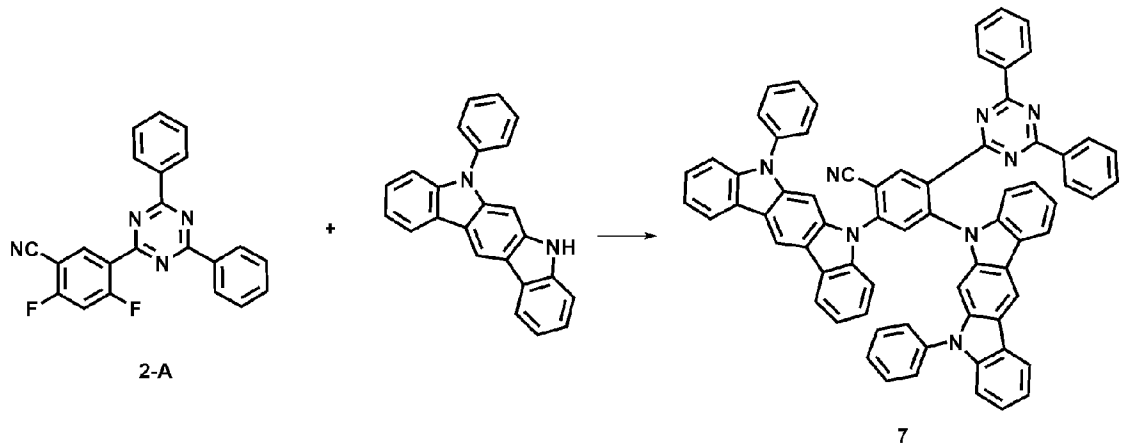
[299] 화합물 2-A 14.8g(40mmol), 5-페닐-5,8-다이하이드로인돌로[2,3-c]카바졸 80mmol, 디메틸포름아아마이드 150mL 및 포타슘카보네이트 200mmol을 혼합하고 100°C로 가열하여 5시간 동안 교반하였다. 반응 후 실온으로 되돌린 반응용액을 물에 역침전하여 고체를 수득하고, 얻어진 고체를 클로로포름/헥산으로 재결정하여 화합물 6 33.4g(수율 84%)을 얻었다.

[300] MS[M+H]⁺ = 995

[301] <제조예 4-7> 화합물 7의 합성

[302] [반응식 4-7]

[303]



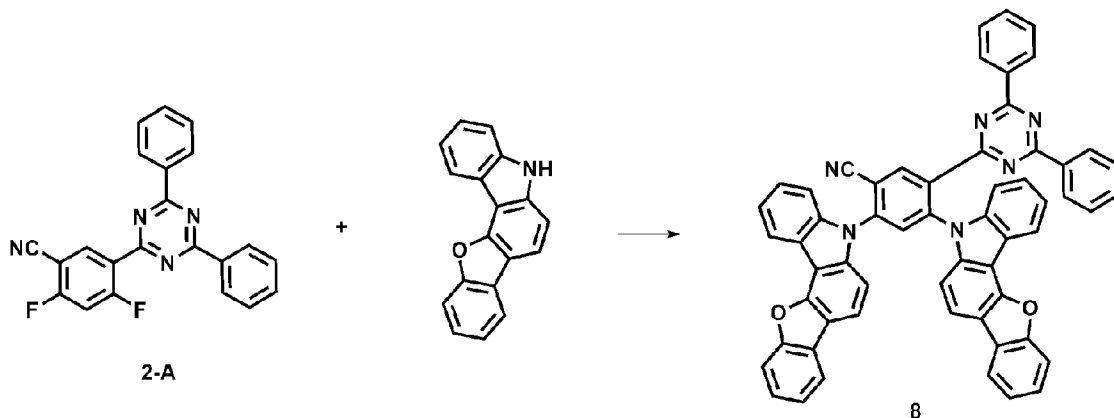
[304] 화합물 2-A 14.8g(40mmol), 5-페닐-5,7-다이하이드로인돌로[2,3-b]카바졸 80mmol, 디메틸포름아아마이드 150mL 및 포타슘카보네이트 200mmol을 혼합하고 100°C로 가열하여 5시간 동안 교반하였다. 반응 후 실온으로 되돌린 반응용액을 물에 역침전하여 고체를 수득하고, 얻어진 고체를 클로로포름/헥산으로 재결정하여 화합물 7 32.2g(수율 81%)을 얻었다.

[305] MS[M+H]⁺ = 995

[306] <제조예 4-8> 화합물 8의 합성

[307] [반응식 4-8]

[308]



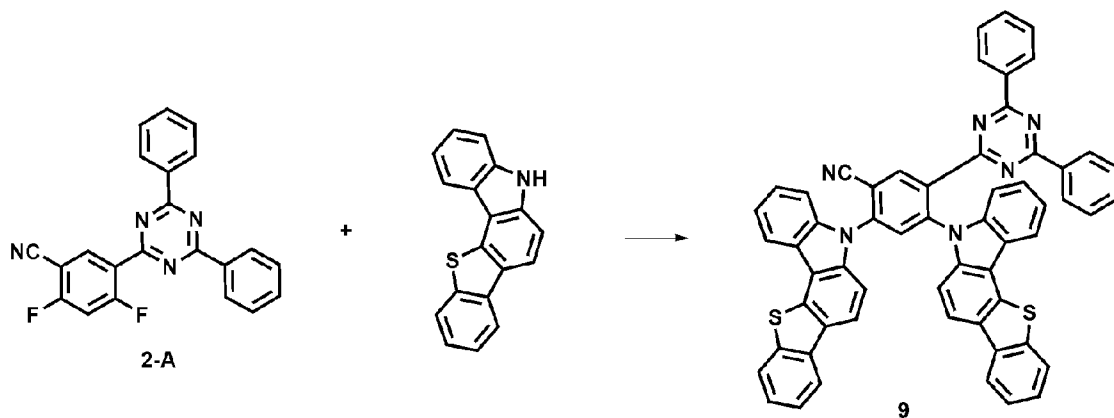
[309] 화합물 2-A 14.8g(40mmol), 5H-벤조퓨로[3,2-c]카바졸 80mmol, 디메틸포름아아마이드 150mL 및 포타슘카보네이트 200mmol을 혼합하고 100°C로 가열하여 5시간 동안 교반하였다. 반응 후 실온으로 되돌린 반응용액을 물에 역침전하여 고체를 수득하고, 얻어진 고체를 클로로포름/헥산으로 재결정하여 화합물 **8** 27.7g(수율 82%)을 얻었다.

[310] MS[M+H]⁺ = 845

[311] <제조예 4-9> 화합물 **9**의 합성

[312] [반응식 4-9]

[313]



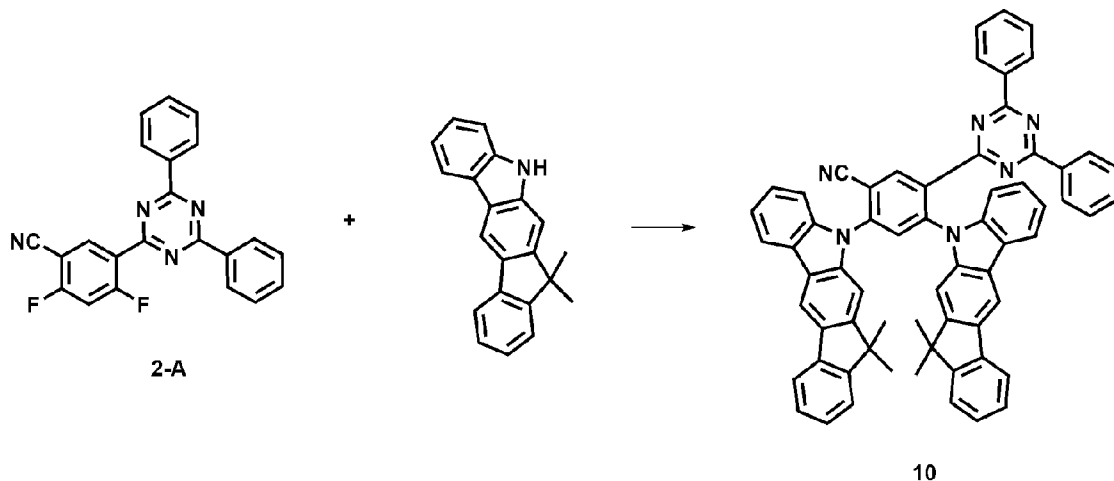
[314] 화합물 2-A 14.8g(40mmol), 5H-벤조[4,5]사이예노[3,2-c]카바졸 80mmol, 디메틸포름아아마이드 150mL 및 포타슘카보네이트 200mmol을 혼합하고 100°C로 가열하여 5시간 동안 교반하였다. 반응 후 실온으로 되돌린 반응용액을 물에 역침전하여 고체를 수득하고, 얻어진 고체를 클로로포름/헥산으로 재결정하여 화합물 **9** 28.1g(수율 80%)을 얻었다.

[315] MS[M+H]⁺ = 877

[316] <제조예 4-10> 화합물 **10**의 합성

[317] [반응식 4-10]

[318]



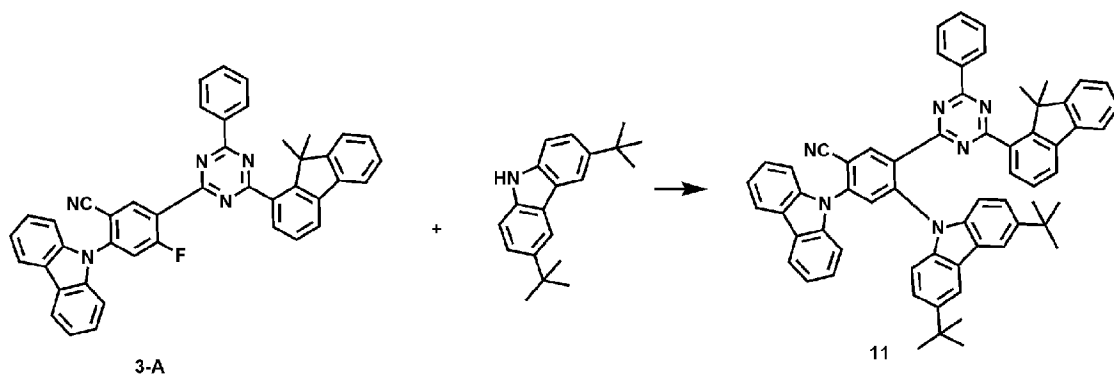
[319] 화합물 2-A 14.8g(40mmol), 7,7-다이페틸-5,7-다이하이드로인테노[2,1-b]카바졸 80mmol, 디메틸포름아아마이드 150mL 및 포타슘카보네이트 200mmol을 혼합하고 100°C로 가열하여 5시간 동안 교반하였다. 반응 후 실온으로 되돌린 반응용액을 물에 역침전하여 고체를 수득하고, 얻어진 고체를 클로로포름/헥산으로 재결정하여 화합물 **10** 28g(수율 78%)을 얻었다.

[320] MS[M+H]⁺ = 897

[321] <제조예 4-11> 화합물 11의 합성

[322] [반응식 4-11]

[323]



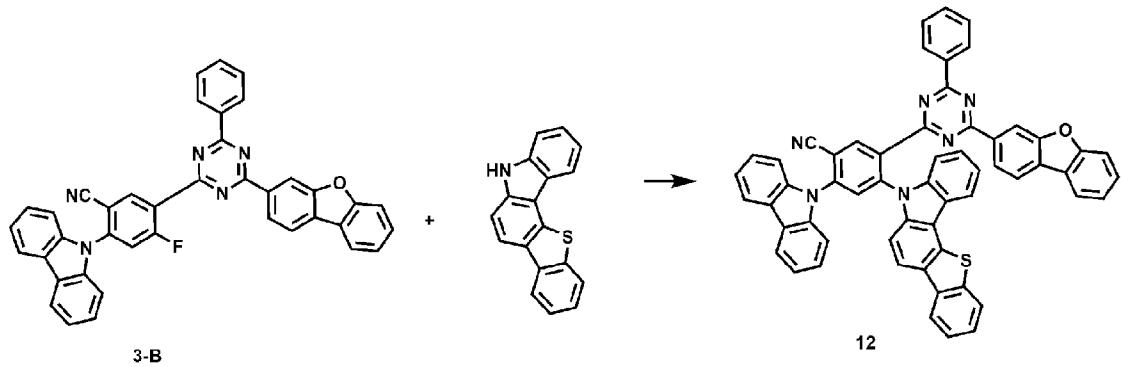
[324] 화합물 3-A 19g(30mmol), 3,6-다이-터트-부틸-9H-카바졸 30mmol, 디메틸포름아아마이드 150mL 및 포타슘카보네이트 90mmol을 혼합하고 100°C로 가열하여 5시간 동안 교반하였다. 반응 후 실온으로 되돌린 반응용액을 물에 역침전하여 고체를 수득하고, 얻어진 고체를 클로로포름/헥산으로 재결정하여 화합물 **11** 20.6g(수율 77%)을 얻었다.

[325] MS[M+H]⁺ = 893

[326] <제조예 4-12> 화합물 12의 합성

[327] [반응식 4-12]

[328]



[329] 화합물 3-B 18.2 (30mmol), 5H-벤조[4,5]사이에노[3,2-c]카바졸 30mmol, 디메틸포름아아마이드 150mL 및 포타슘카보네이트 90mmol을 혼합하고 100°C로 가열하여 5시간 동안 교반하였다. 반응 후 실온으로 되돌린 반응용액을 물에 역침전하여 고체를 수득하고, 얻어진 고체를 클로로포름/헥산으로 재결정하여 화합물 **12** 19.4g(수율 75%)을 얻었다.

[330] MS[M+H]⁺ = 861

[331] 상기 화합물 1 내지 12 이외에도, 상기 제조예와 동일한 반응을 이용하여 치환기 종류를 다양하게 도입하여 기타 화학식 1로 표시되는 화합물을 합성할 수 있다.

[332] <실시예 1>

[333] 본 명세서의 일 실시상태에 따른 화학식 1로 표시되는 화합물을 삼중항 에너지 값이 2.9eV인 호스트 재료(m-CBP)와 함께 발광층에 포함하여 유기 발광 소자를 제조하고, 특성을 평가하였다.

[334] <비교예 1>

[335] ITO(indium tin oxide)가 1,000Å의 두께로 박막 코팅된 유리 기판을 세제를 녹인 증류수에 넣고 초음파로 세척하였다. 이 때, 세제로는 피셔사(Fischer Co.) 제품을 사용하였으며, 증류수로는 밀러포어사(Millipore Co.) 제품의 필터(Filter)로 2차로 걸러진 증류수를 사용하였다. ITO를 30분간 세척한 후 증류수로 2회 반복하여 초음파 세척을 10분간 진행하였다. 증류수 세척이 끝난 후, 이소프로필알콜, 아세톤, 메탄올의 용제로 초음파 세척을 하고 건조시킨 후 플라즈마 세정기로 수송시켰다. 또한, 산소 플라즈마를 이용하여 상기 기판을 5분간 세정한 후 진공 증착기로 기판을 수송시켰다. 이렇게 준비된 ITO 투명 전극 위에 각 박막을 진공 증착법으로 진공도 5X10⁻⁴Pa로 적층하였다. 먼저, ITO 상에 하기 화합물 HAT-CN을 500Å의 두께로 열 진공 증착하여 정공 주입층을 형성하였다.

[336] 상기 정공 주입층 위에 정공을 수송하는 물질인 하기 화합물 4-4'-비스[N-(1-나프틸)-N-페닐아미노]비페닐(NPB)(300Å)를 진공 증착하여 정공 수송층을 형성하였다.

[337] 상기 정공 수송층 위에 막 두께 100Å으로 하기 화합물 N-([1,1'-비스페닐]-4-yl)-N-(4-(11-([1,1'-비페닐]-4-yl)-11H-벤조[a]카바졸-5-yl)페닐)-[1,1'-비페닐]-4-아민(EB1)(100Å)를 진공 증착하여 전자 저지층을

형성하였다.

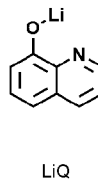
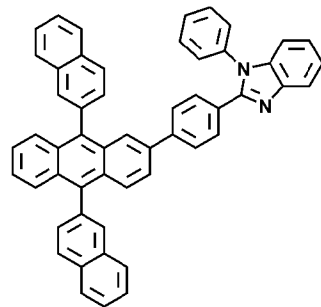
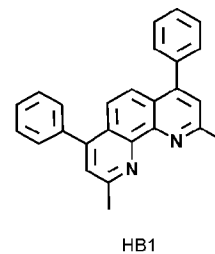
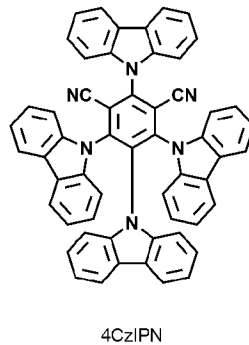
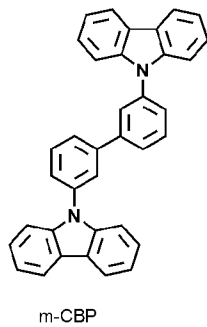
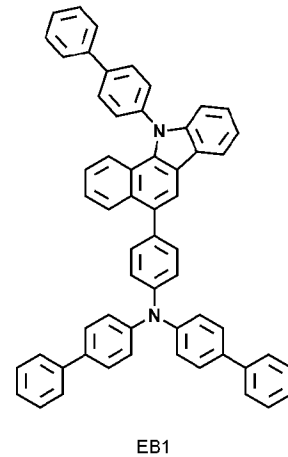
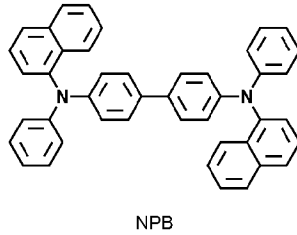
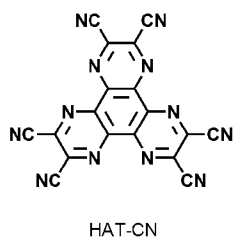
[338] 이어서, 상기 전자 저지층 위에 막 두께 300Å으로 아래와 같은 m-CBP와 화합물 4CzIPN을 70:30의 중량비로 진공 증착하여 발광층을 형성하였다.

[339] 상기 발광층 위에 막 두께 100Å으로 화합물 HB1을 진공 증착하여 정공 저지층을 형성하였다.

[340] 상기 정공 저지층 위에 하기 화합물 ET1과 화합물 LiQ(Lithium Quinolate)를 1:1의 중량비로 진공 증착하여 300Å의 두께로 전자 주입 및 수송층을 형성하였다. 상기 전자 주입 및 수송층 위에 12Å두께로 리튬플로라이드(LiF)와 2,000Å 두께로 알루미늄을 순차적으로 증착하여 음극을 형성하였다.

[341] 상기의 과정에서 유기물의 증착속도는 0.4 Å/sec 내지 0.7 Å/sec를 유지하였고, 음극의 리튬플로라이드는 0.3Å/sec, 알루미늄은 2Å/sec의 증착 속도를 유지하였으며, 증착시 진공도는 2×10^7 torr 내지 5×10^6 torr를 유지하여, 유기 발광 소자를 제작하였다.

[342]



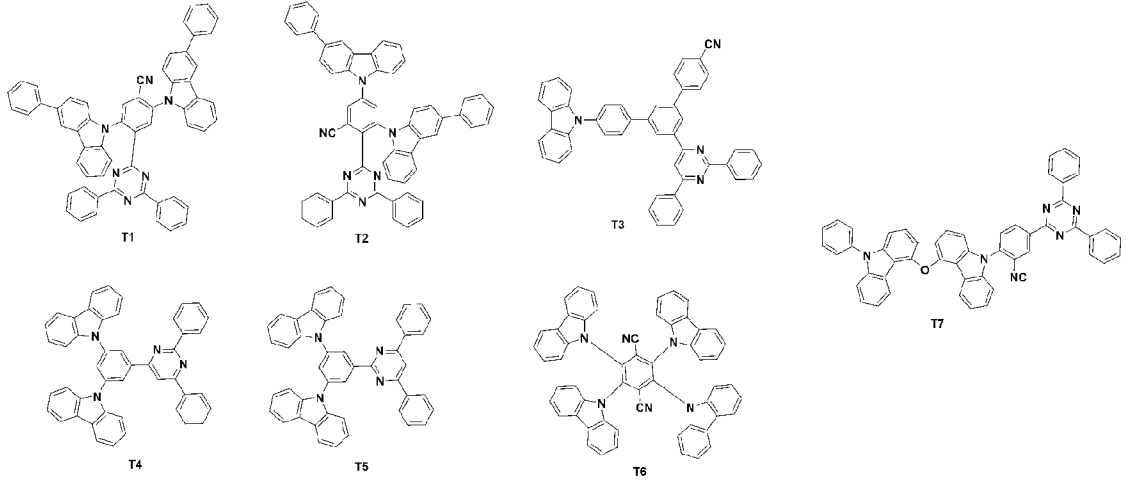
[343] <실험예 1 내지 12>

[344] 상기 비교예 1에서 화합물 4CzIPN 대신 하기 표 1의 화합물을 사용한 것을 제외하고는 비교예 1과 동일한 방법으로 유기 발광 소자를 제작하였다.

[345] <비교예 2 내지 8>

[346] 상기 비교예 1에서 화합물 4CzIPN 대신 하기 T1 내지 T7의 화합물을 사용한 것을 제외하고는 비교예 1과 동일한 방법으로 유기 발광 소자를 제작하였다.

[347]



[348] 실험예 1 내지 12, 비교예 1 내지 8에 의해 제작된 유기 발광 소자에 전류를 인가하였을 때, 하기 [표 1]의 결과를 얻었다.

[349] [표1]

구분	화합물(발광층)	전압(V@10mA/cm ²)	효율(cd/A@10mA/cm ²)	색좌표(x,y)
비교예 1	4CzIPN	4.5	13	(0.32, 0.62)
실험예 1	1	4.0	20	(0.23, 0.64)
실험예 2	2	4.0	20	(0.22, 0.63)
실험예 3	3	3.9	21	(0.23, 0.63)
실험예 4	4	4.0	19	(0.23, 0.64)
실험예 5	5	4.1	20	(0.22, 0.65)
실험예 6	6	4.0	20	(0.22, 0.64)
실험예 7	7	4.0	19	(0.22, 0.66)
실험예 8	8	4.1	21	(0.23, 0.64)
실험예 9	9	3.9	20	(0.23, 0.65)
실험예 10	10	4.0	19	(0.22, 0.64)
실험예 11	11	3.9	20	(0.22, 0.65)
실험예 12	12	4.0	19	(0.23, 0.64)
비교예 2	T1	4.2	11	(0.31, 0.61)
비교예 3	T2	4.4	10	(0.32, 0.60)
비교예 4	T3	4.5	3	(0.18, 0.38)
비교예 5	T4	4.6	2	(0.20, 0.37)
비교예 6	T5	4.5	2	(0.25, 0.40)
비교예 7	T6	4.3	10	(0.51, 0.42)
비교예 8	T7	4.2	11	(0.31, 0.60)

[350] 상기 표 1에서 보는 바와 같이, 상기 화학식 1의 구조를 코어로 하는 화합물을 사용한 실험예 1 내지 12의 소자는 모두 4CzIPN을 사용한 소자보다 전압이 낮고, 효율이 올라가는 결과를 얻었다.

[351] 또한, 비교예 2 내지 비교예 8의 소자와 본원 실시예를 비교해보면 본원 실시예들의 구조가 전압, 효율 면에서 특성이 모두 향상됨을 알 수 있었다.

[352] 상기 표 1의 결과와 같이, 본 발명에 따른 화합물은 발광 능력이 우수하고 색순도가 높아 지연형광 유기 발광 소자에 적용 가능함을 확인할 수 있었다.

[353] <실시예 2>

[354] HOMO 및 LUMO 에너지 준위는 측정 화합물을 5mM, 전해질을 0.1M 농도로

다이메틸폼아마이드(dimethylformamide, DMF)에 용해시키고 CV기기 측정을 통해 산화, 환원 전위를 확인하여 페로센 화합물을 기준으로 비교하여 확인하였다.

[355] 구체적으로 본원 명세서에 기재된 HOMO 및 LUMO 에너지 준위, 일중항 에너지 및 삼중항 에너지는 본원 명세서에서 전술한 방법으로 측정하였다.

[356] [표2]

화합물	S1(eV)	T1(eV)	HOMO(eV)	LUMO(eV)	ΔE_{ST} (eV)
1	2.43	2.37	5.68	3.08	0.06
2	2.42	2.36	5.67	3.08	0.06
3	2.43	2.36	5.68	3.07	0.07
4	2.43	2.38	5.63	3.08	0.05
5	2.42	2.37	5.66	3.06	0.05
6	2.42	2.38	5.61	3.07	0.04
7	2.43	2.39	5.62	3.05	0.04
8	2.44	2.37	5.66	3.09	0.07
9	2.42	2.38	5.65	3.06	0.04
10	2.43	2.37	5.67	3.07	0.06
11	2.42	2.37	5.68	3.03	0.05
12	2.42	2.38	5.66	3.06	0.04
T1	2.54	2.39	5.61	3.05	0.15
T2	2.55	2.40	5.63	3.07	0.15
T3	2.77	2.41	6.06	2.91	0.36
T4	2.74	2.40	5.99	2.89	0.34
T5	2.78	2.41	5.98	2.88	0.37
T6	2.24	2.20	5.45	3.00	0.04
T7	2.45	2.37	5.73	3.05	0.08
4CzIPN	2.44	2.39	5.55	3.15	0.05

[357] 본원 실시예들에 사용된 화합물 1 내지 12는 모두 ΔE_{ST} 가 0.3eV 이하로 지연 형광 물질로 적합한 것을 알 수 있다.

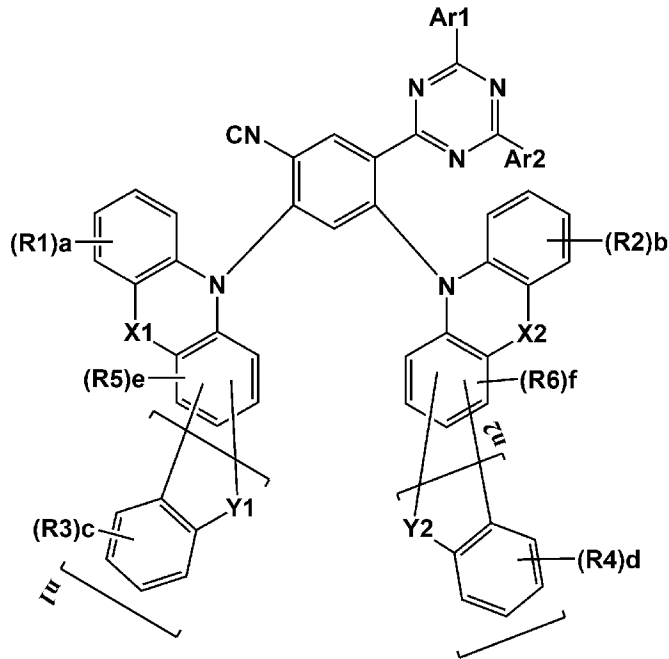
[358] 비교예로 사용된 화합물 T3 내지 T5의 경우 지연 형광 물질로 적합하지 않은 것을 확인할 수 있었고, 4CzIPN, T1, T2, T6, T7은 ΔE_{ST} 가 0.3eV 이하로 지연 형광 물질에 해당하나, 표 1 에서 살펴본 바와 같이 화합물 1 내지 12이 전압, 효율

면에서 특성이 모두 향상됨을 알 수 있었다.

- [359] 이상을 통해 본 발명의 바람직한 실험예에 대하여 설명하였지만, 본 발명은 이에 한정되는 것이 아니고 특허청구범위와 발명의 상세한 설명의 범위 안에서 여러 가지로 변형하여 실시하는 것이 가능하고 이 또한 발명의 범주에 속한다.

청구범위

[청구항 1] 하기 화학식 1로 표시되는 화합물:
[화학식 1]



상기 화학식 1에 있어서,

X1 및 X2는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 직접결합; O; S 또는 CRR'이고,

Y1 및 Y2는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 NRa; S 또는 CRbRc이며, n1 및 n2는 각각 0 또는 1이고,

Ar1 및 Ar2는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 아릴기; 또는 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기이며,

R1 내지 R6, Ra 내지 Rc, R 및 R'는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; 중수소; 니트릴기; 치환 또는 비치환된 알킬기; 치환 또는 비치환된 시클로알킬기; 치환 또는 비치환된 알콕시기; 치환 또는 비치환된 아릴옥시기; 치환 또는 비치환된 알케닐기; 치환 또는 비치환된 실릴기; 치환 또는 비치환된 아민기; 치환 또는 비치환된 아릴기; 또는 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기이며,

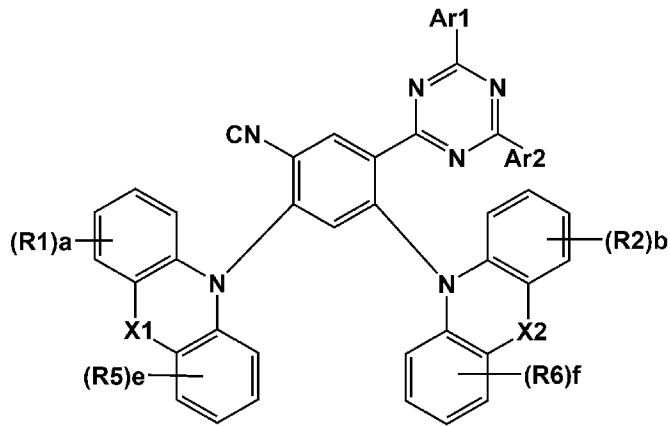
a 내지 d는 각각 0 내지 4의 정수이고, e 및 f는 각각 0 내지 4의 정수이며, e+n1은 3 이하이고, f+n2는 3 이하이고, a 내지 f가 복수일 때의 괄호 안의 치환기는 서로 같거나 상이하다.

[청구항 2] 청구항 1에 있어서, Ar1 및 Ar2는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 C6-C12 아릴기; 또는 치환 또는 비치환된 C2-C12 헤테로아릴기인 것인 화합물.

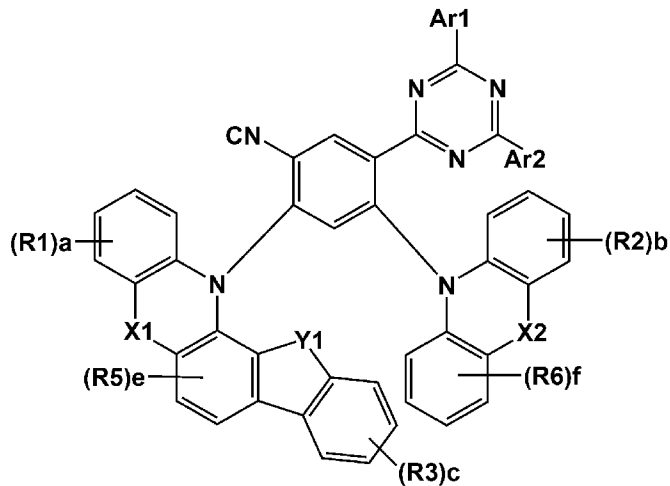
[청구항 3] 청구항 1에 있어서, n1 및 n2 중 적어도 하나는 1인 것인 화합물.

[청구항 4] 청구항 1에 있어서, 상기 화학식 1은 하기 화학식들 중에서 선택되는 것인 화합물:

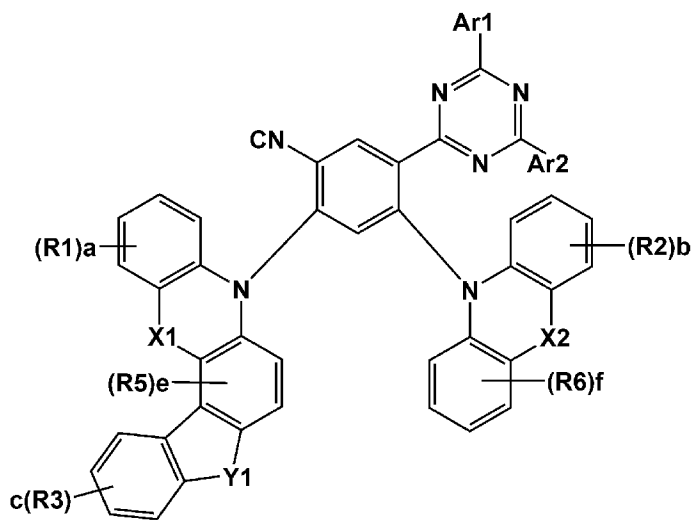
[화학식 2]



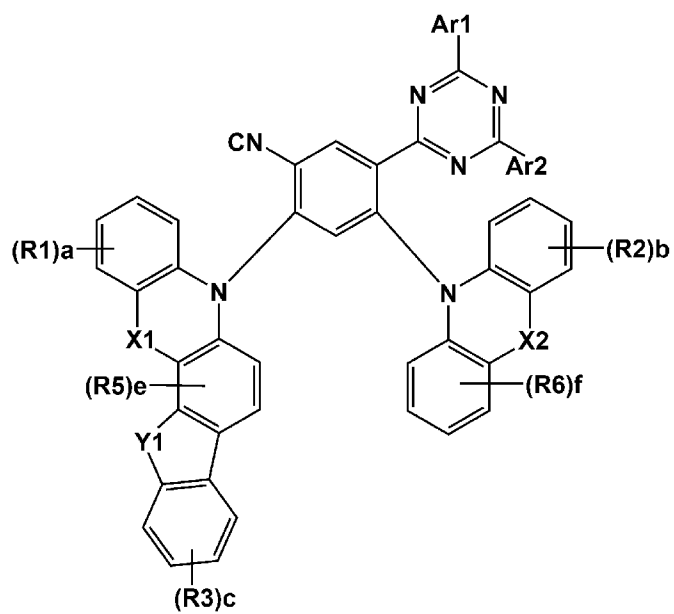
[화학식 3]



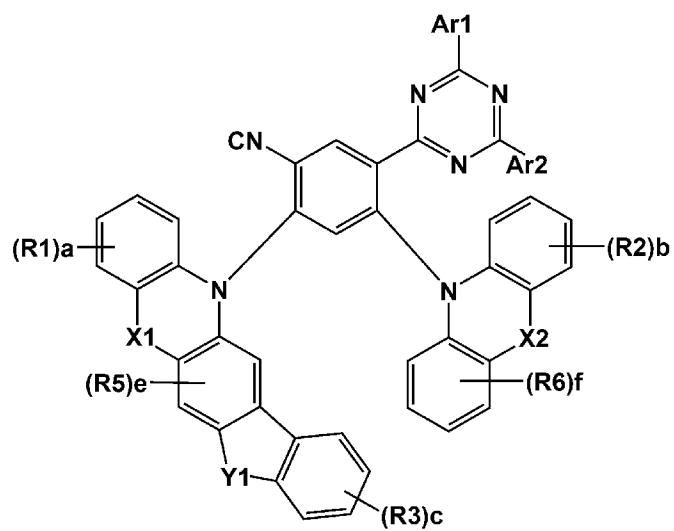
[화학식 4]



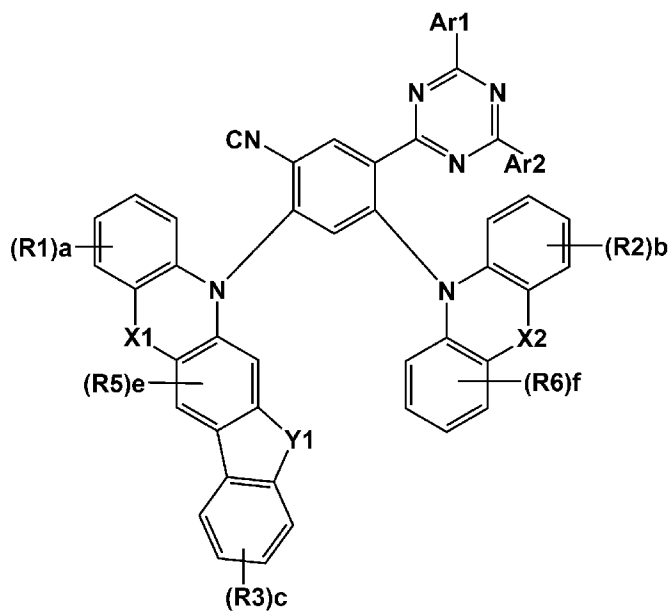
[화학식 5]



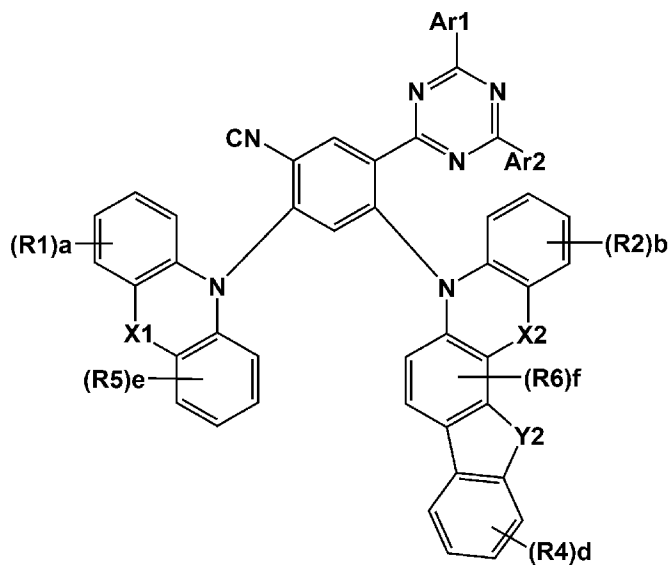
[화학식 6]



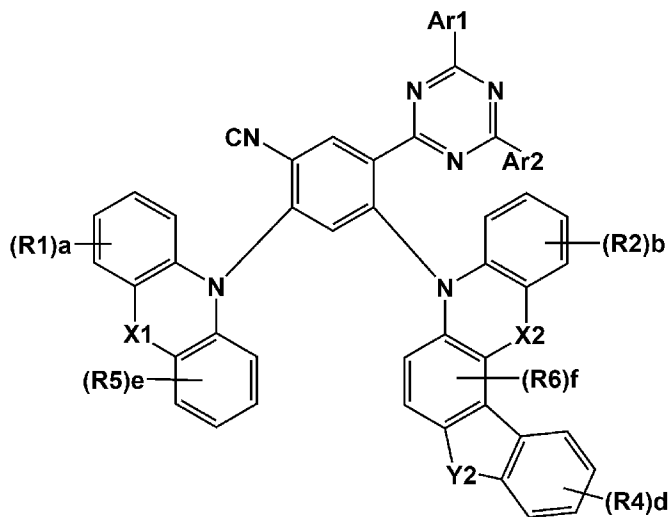
[화학식 7]



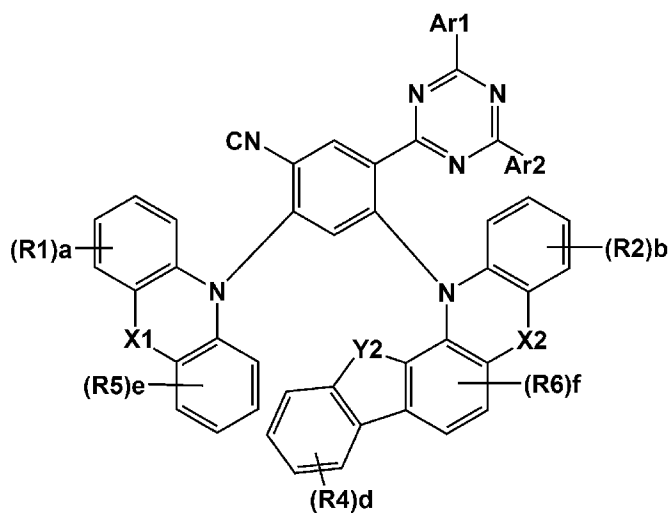
[화학식 8]



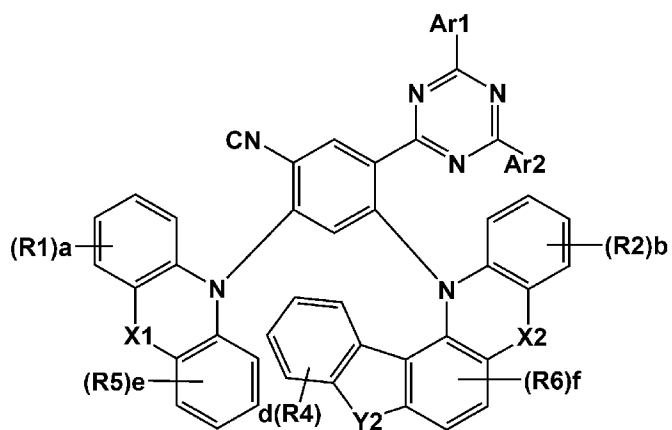
[화학식 9]



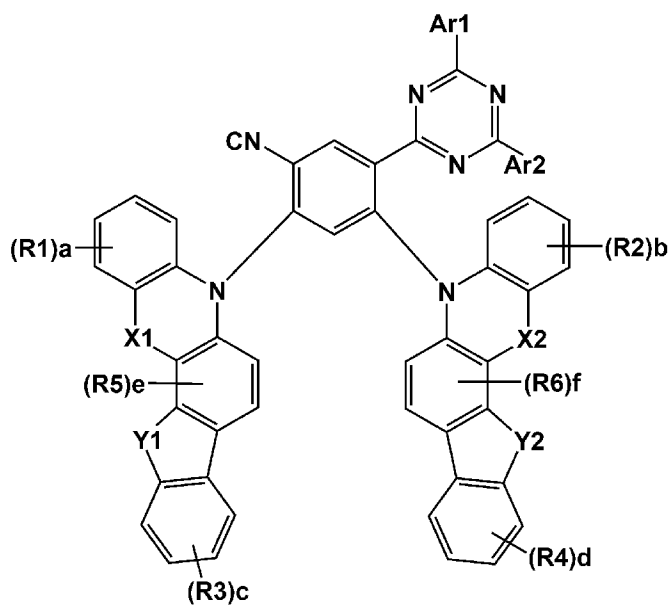
[화학식 10]



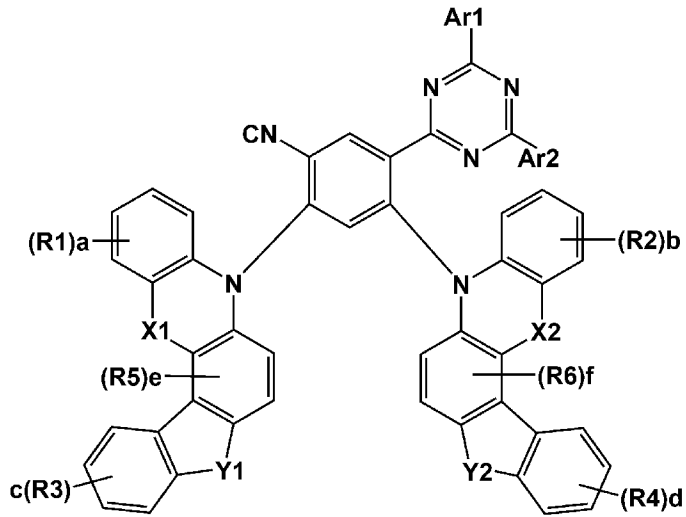
[화학식 11]



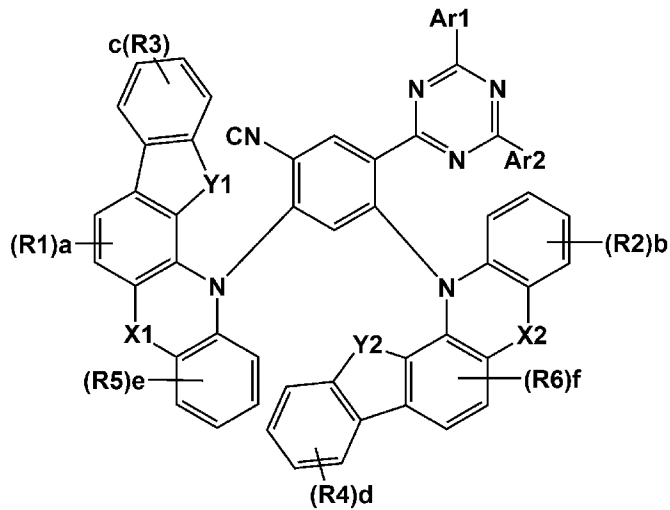
[화학식 12]



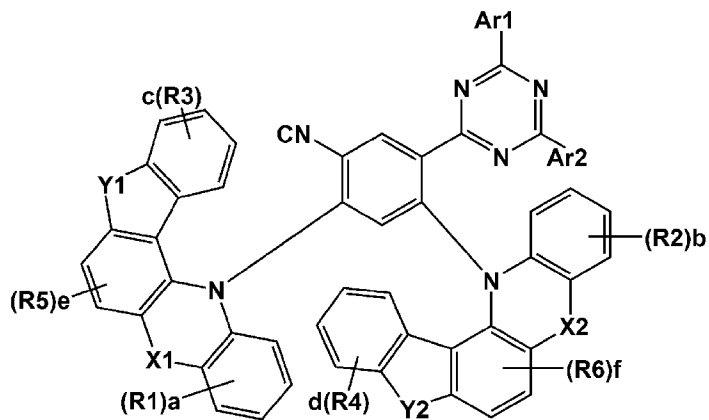
[화학식 13]



[화학식 14]



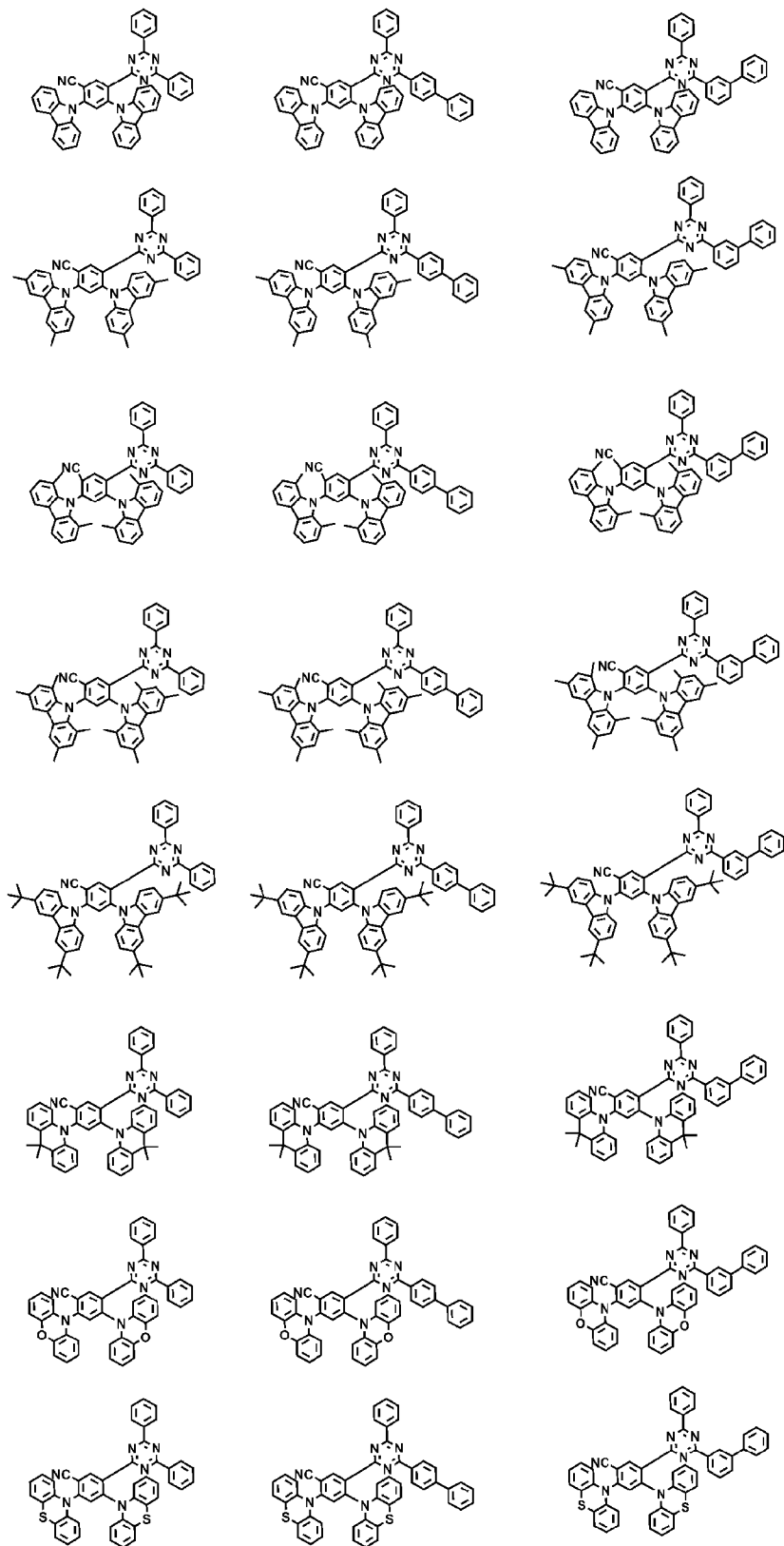
[화학식 15]

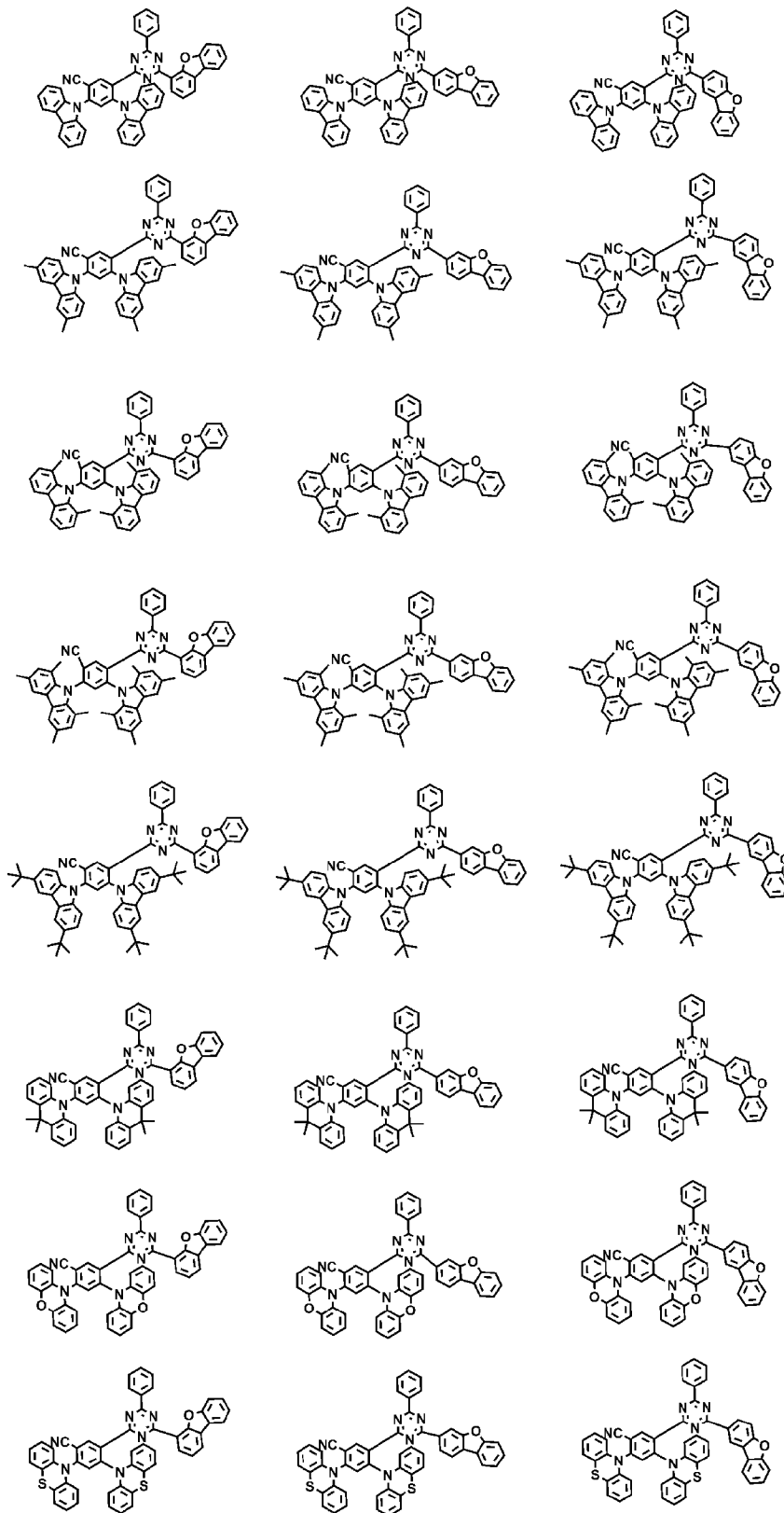


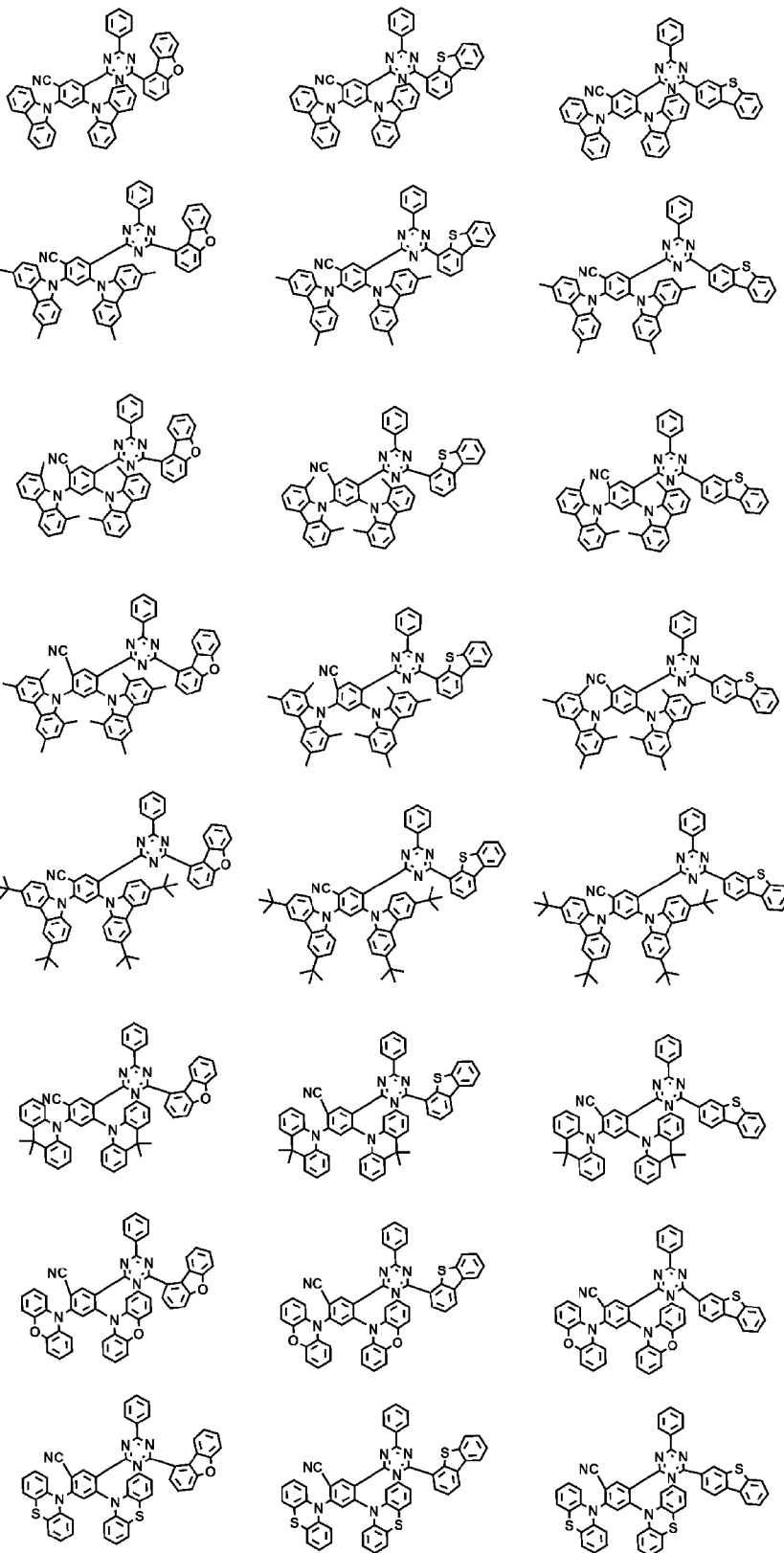
화학식 2 내지 15에 있어서, 치환기 정의는 청구항 1과 같다.

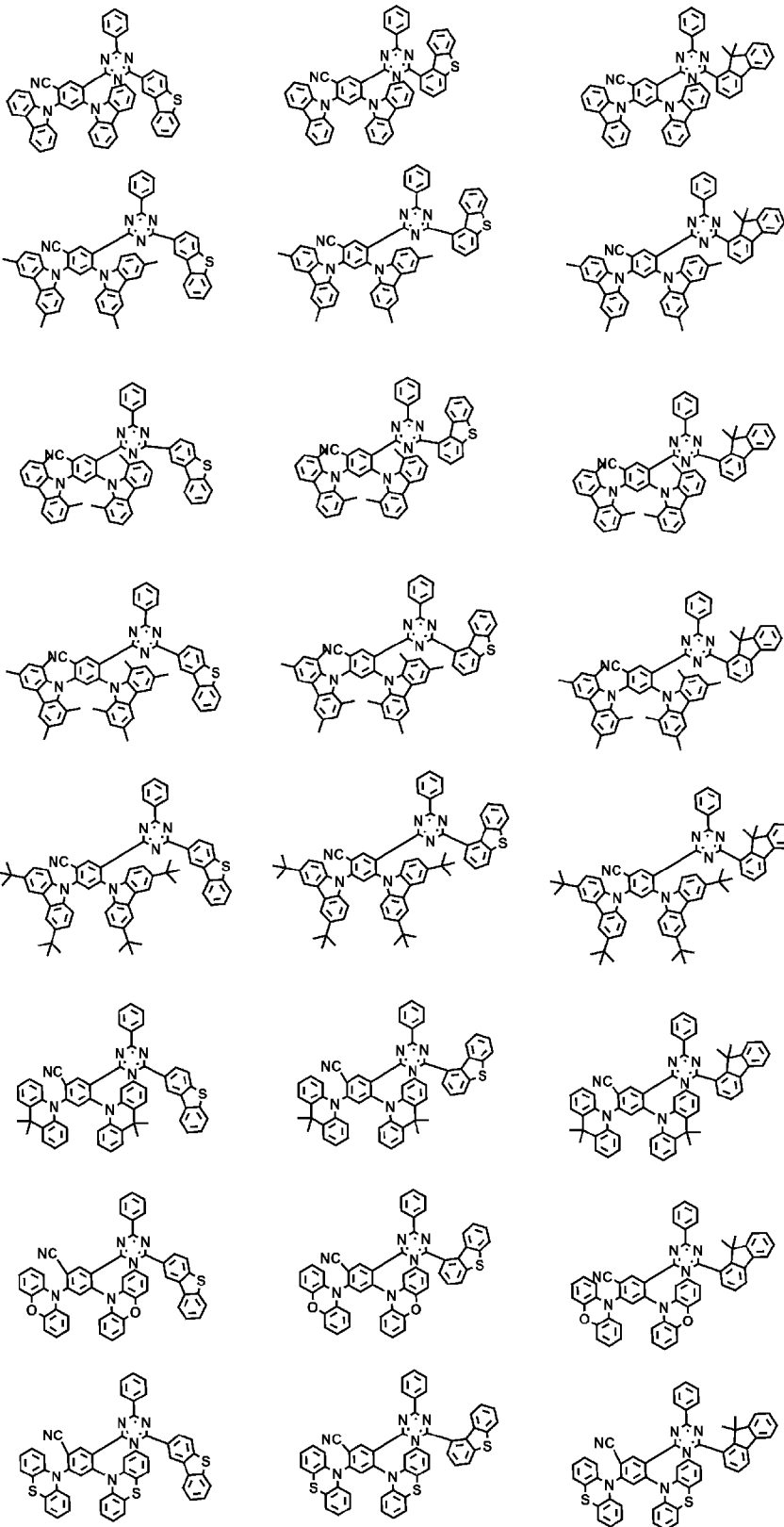
[청구항 5]

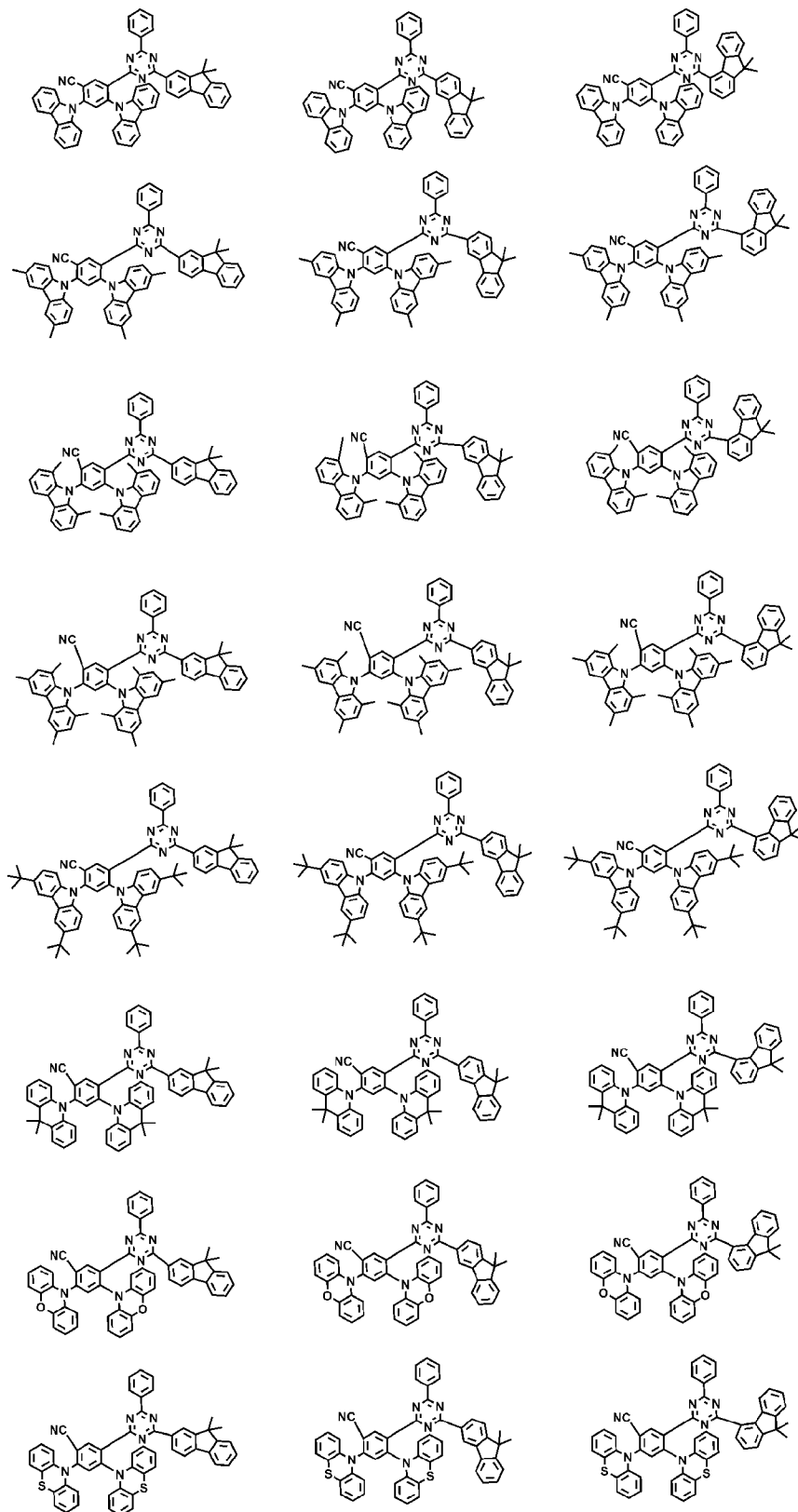
청구항 1에 있어서, 상기 화학식 1은 하기 화합물 중 어느 하나인 것인 화합물:

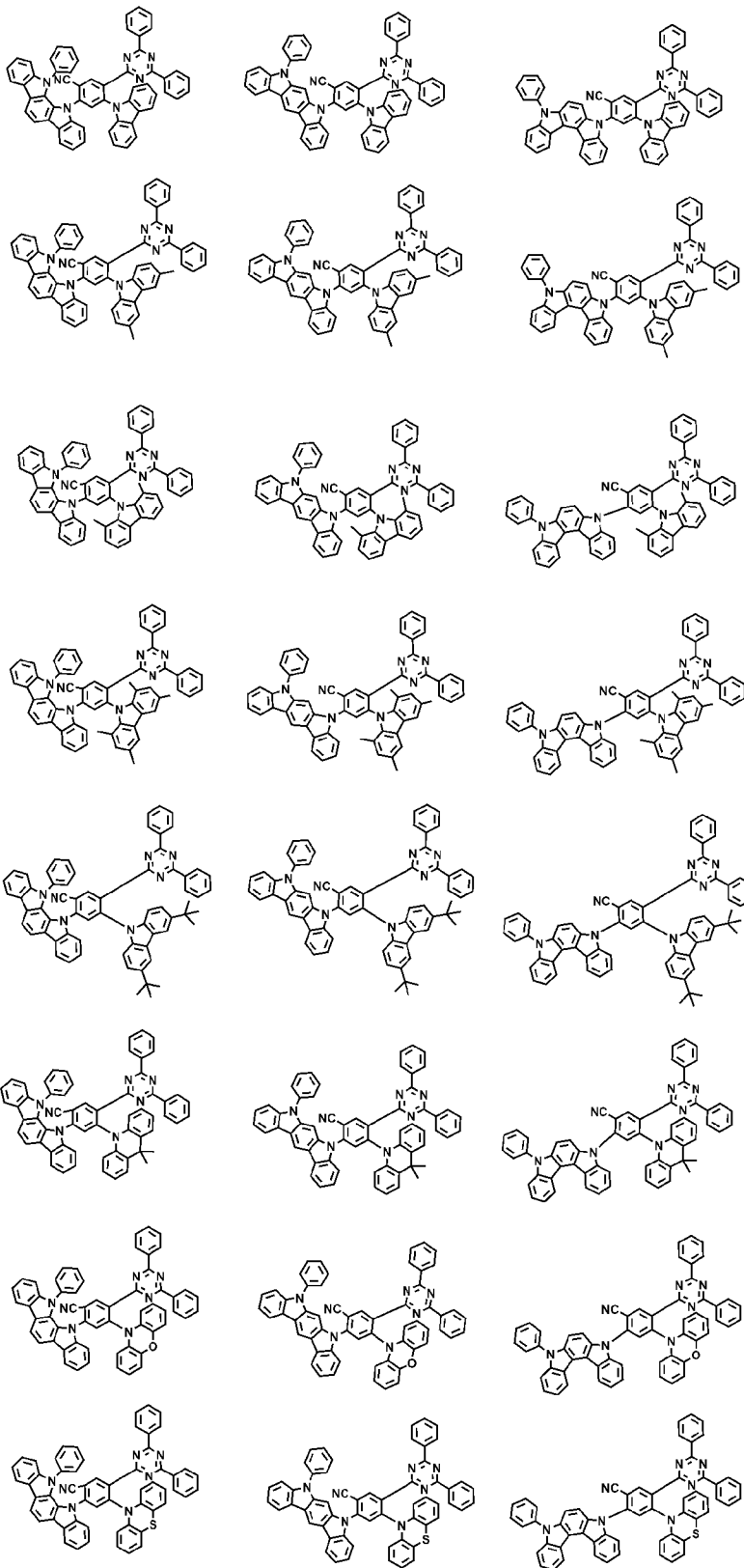


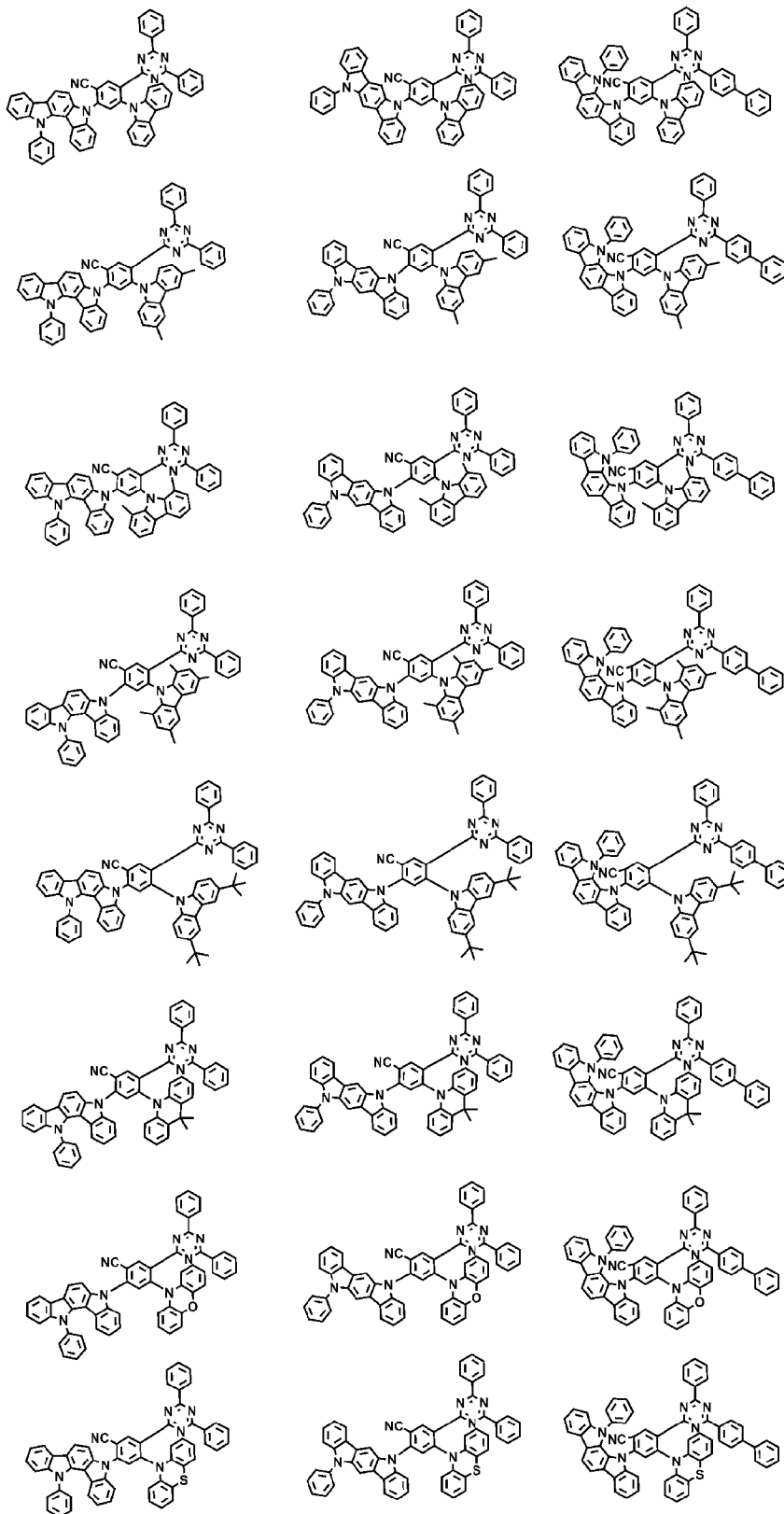


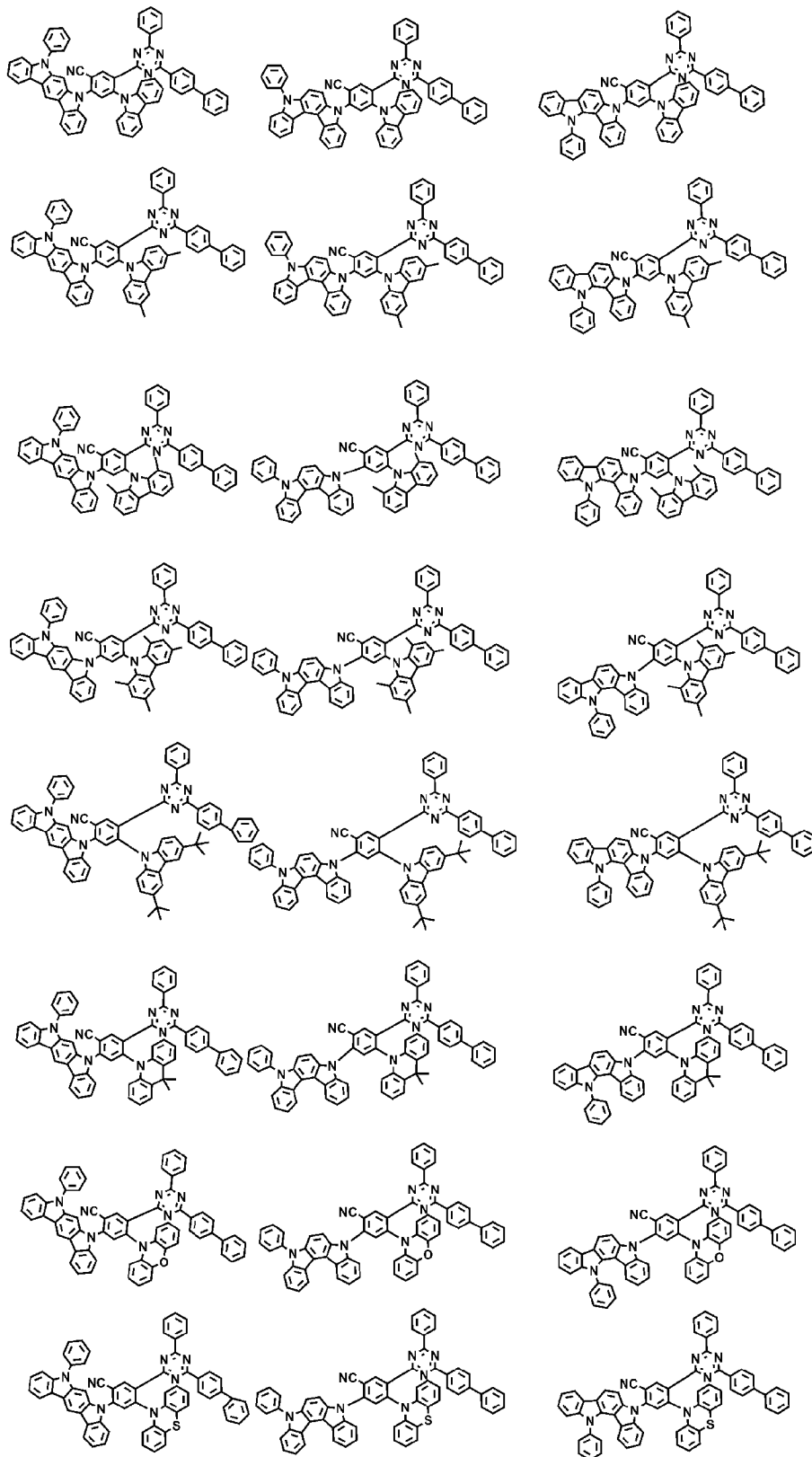


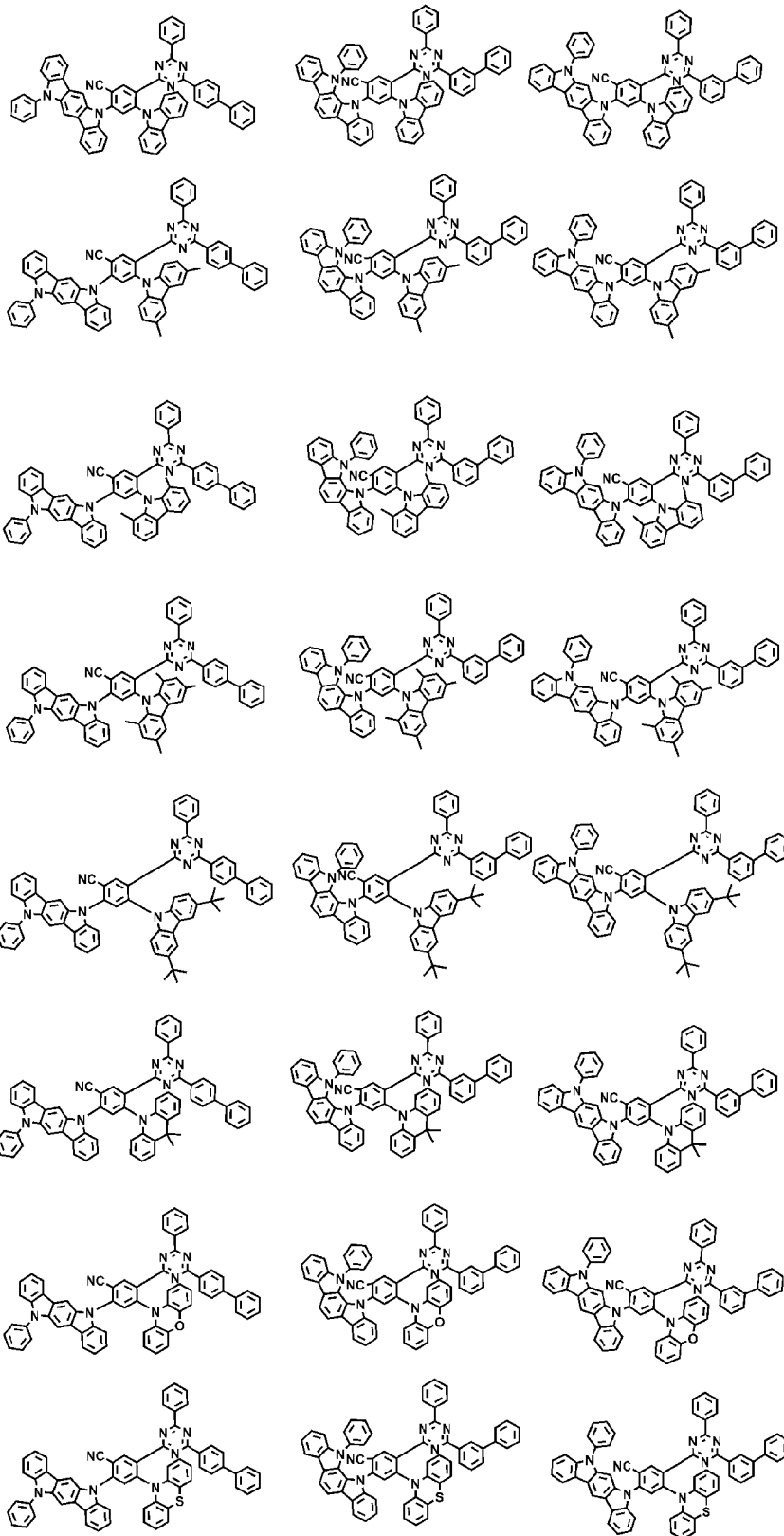


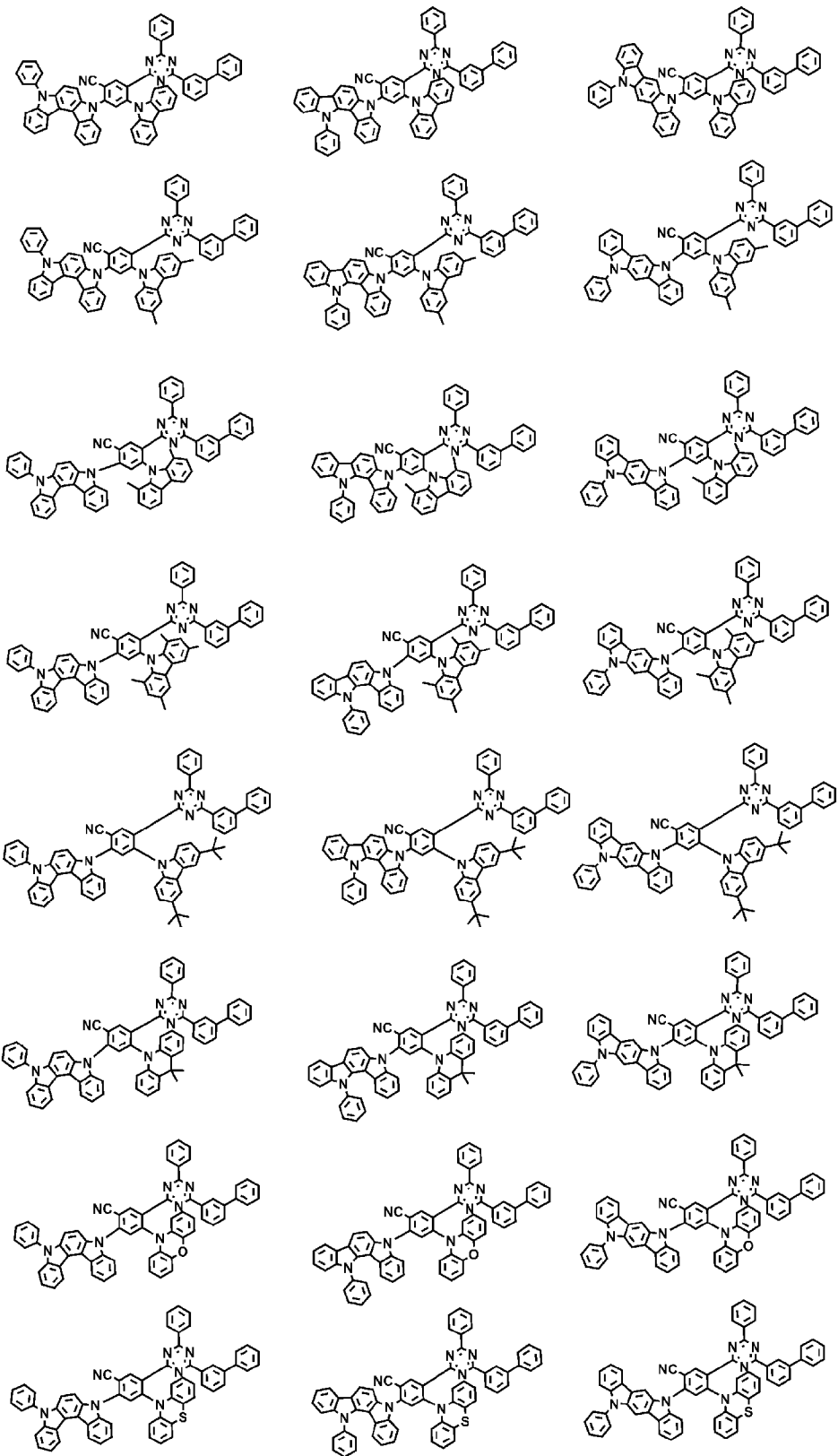


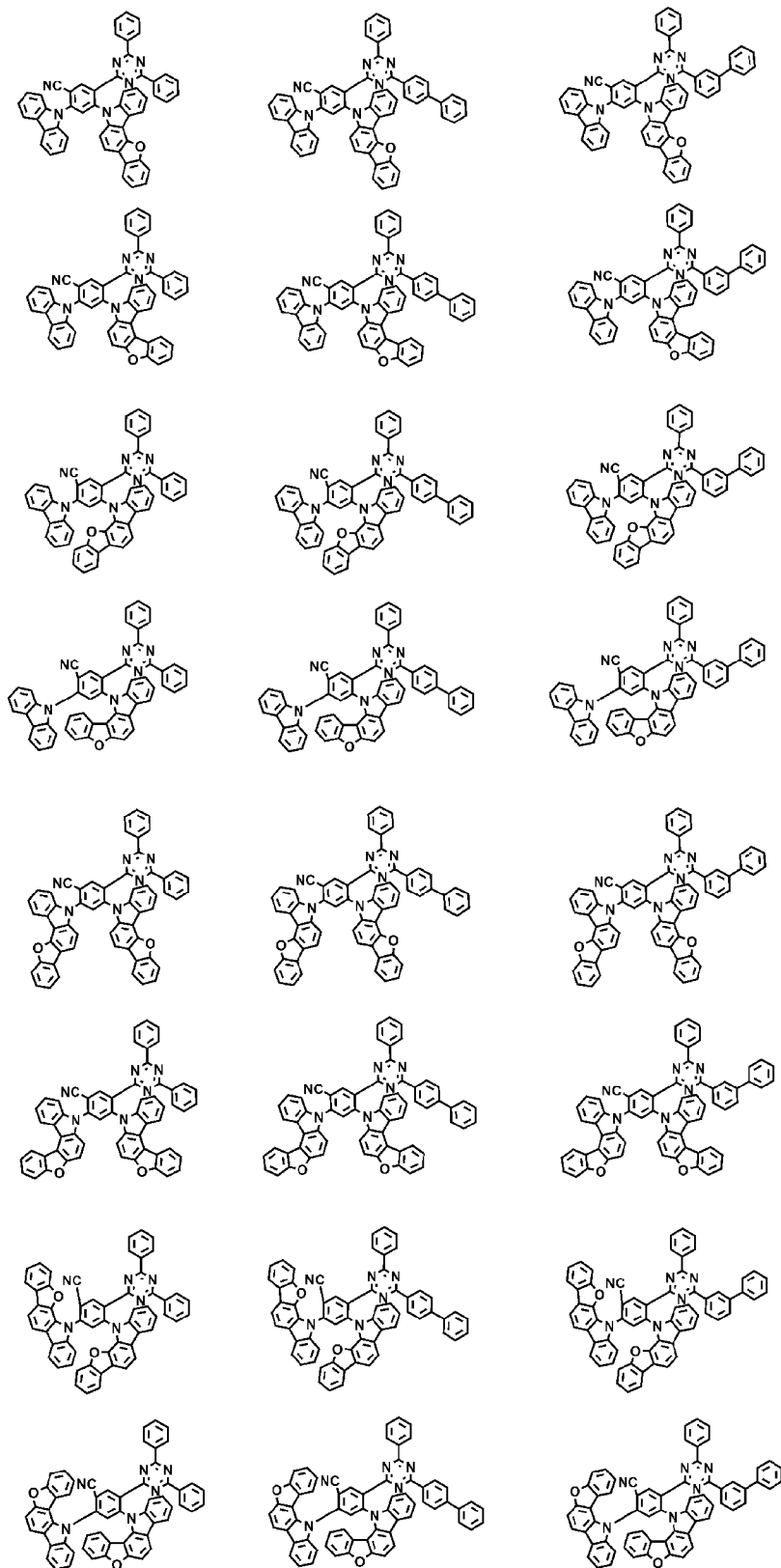


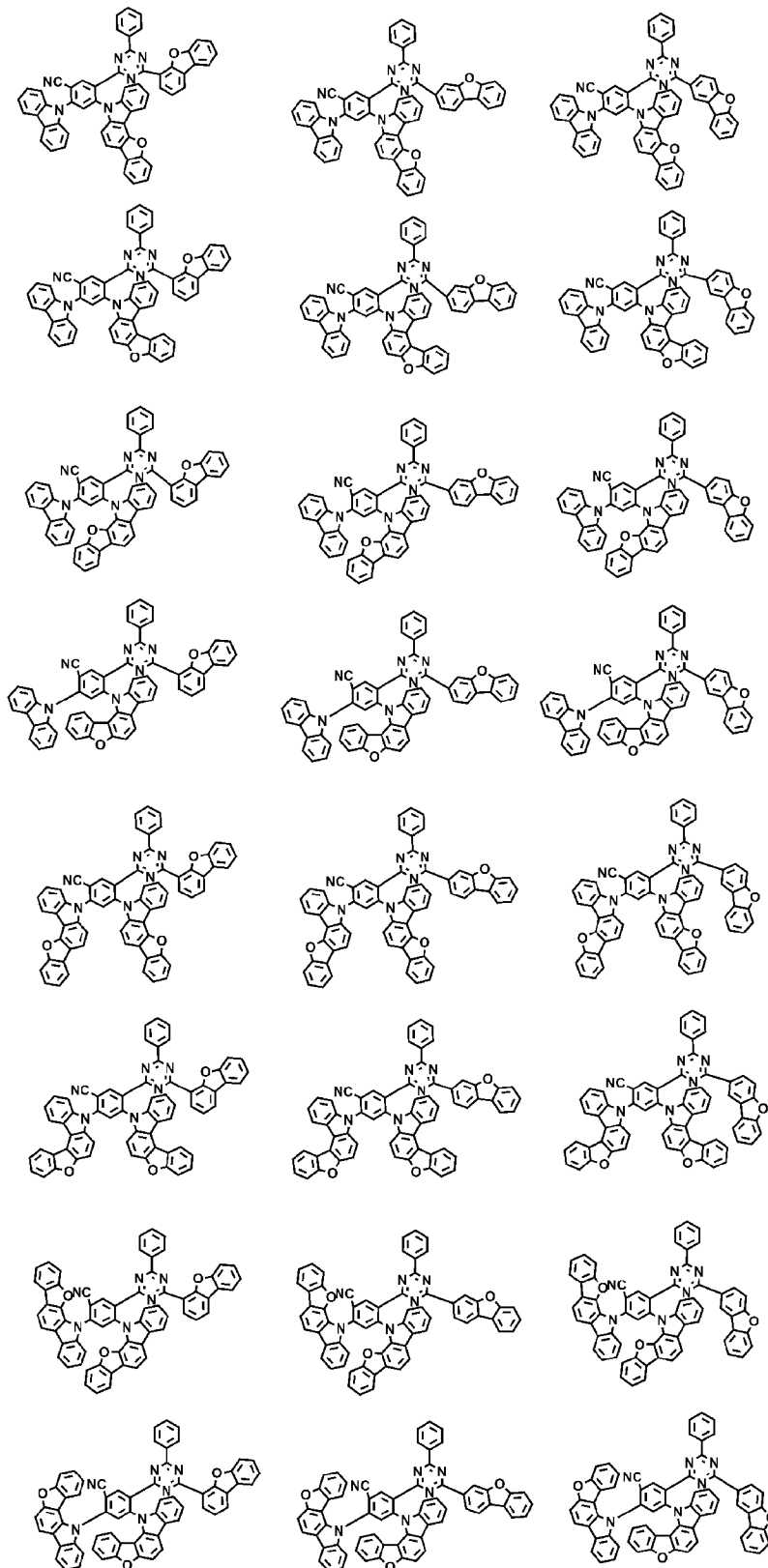


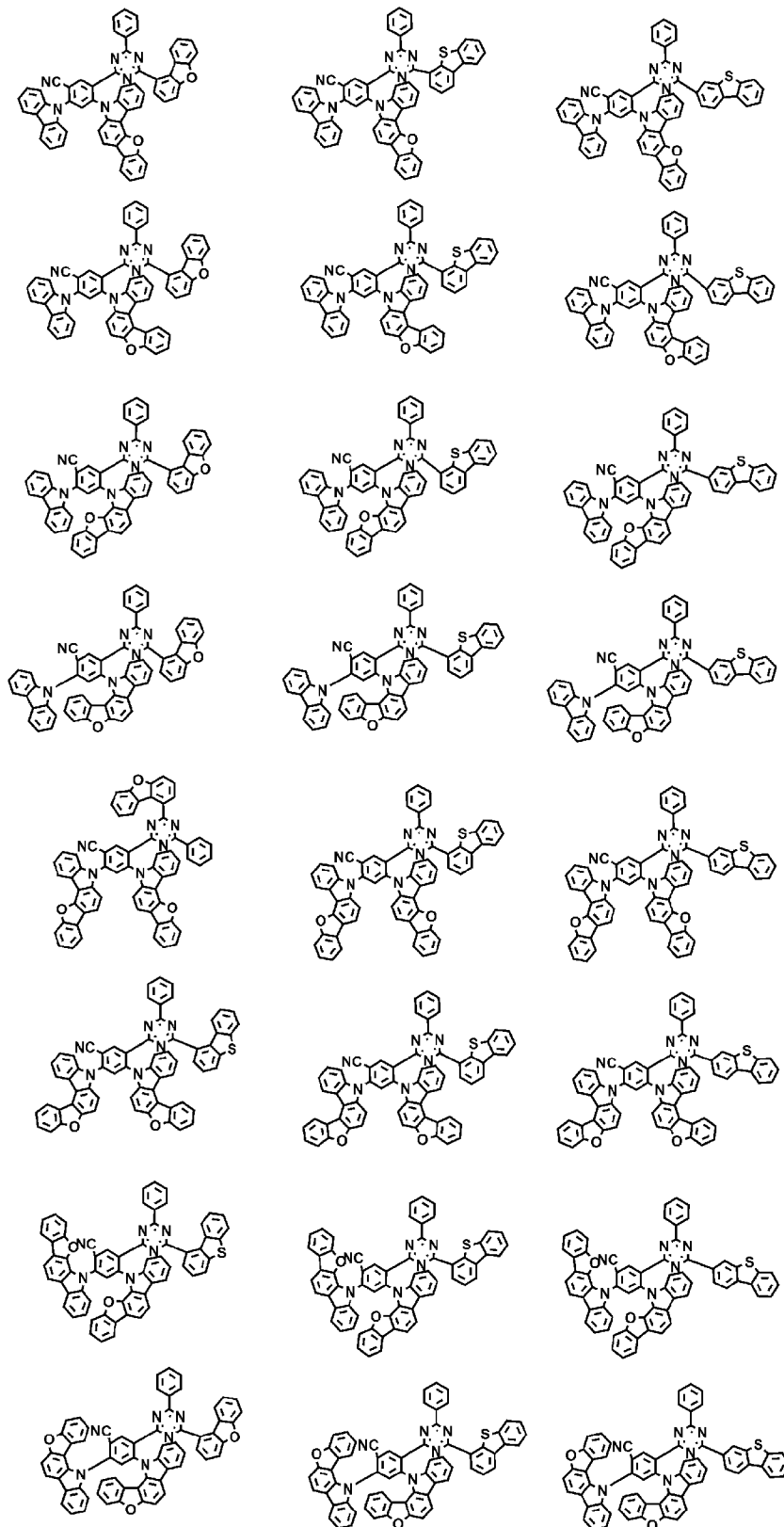


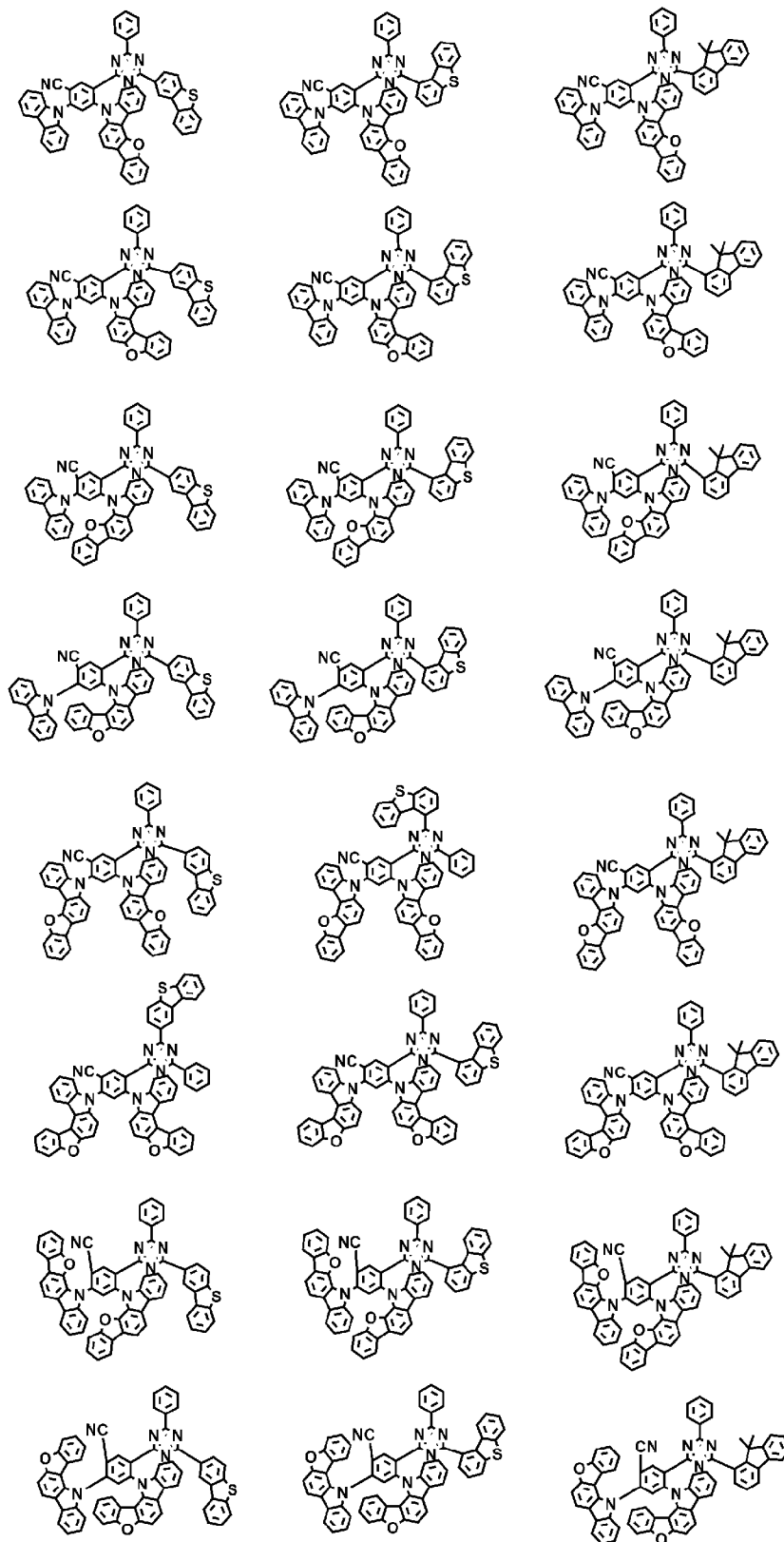


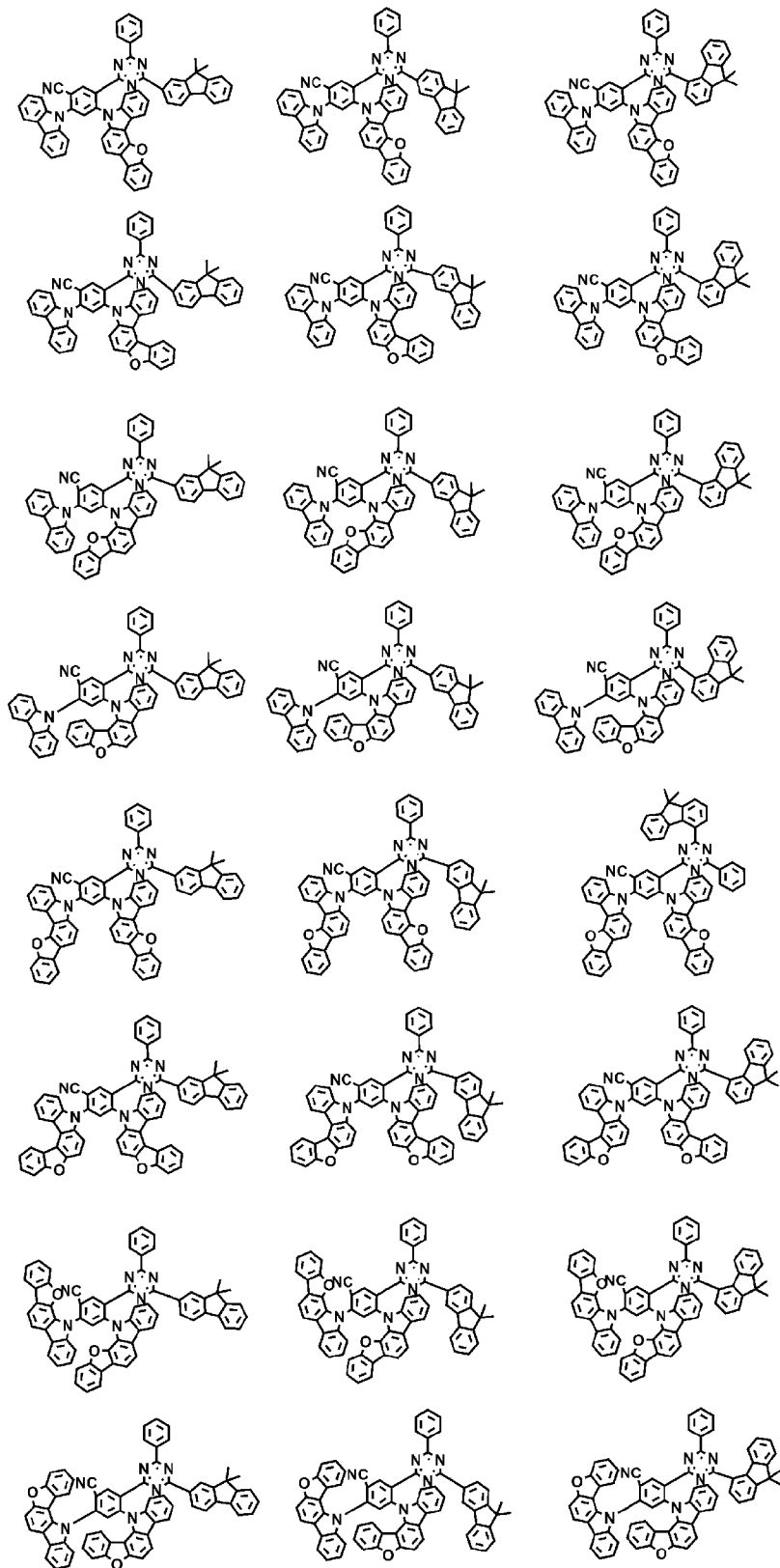


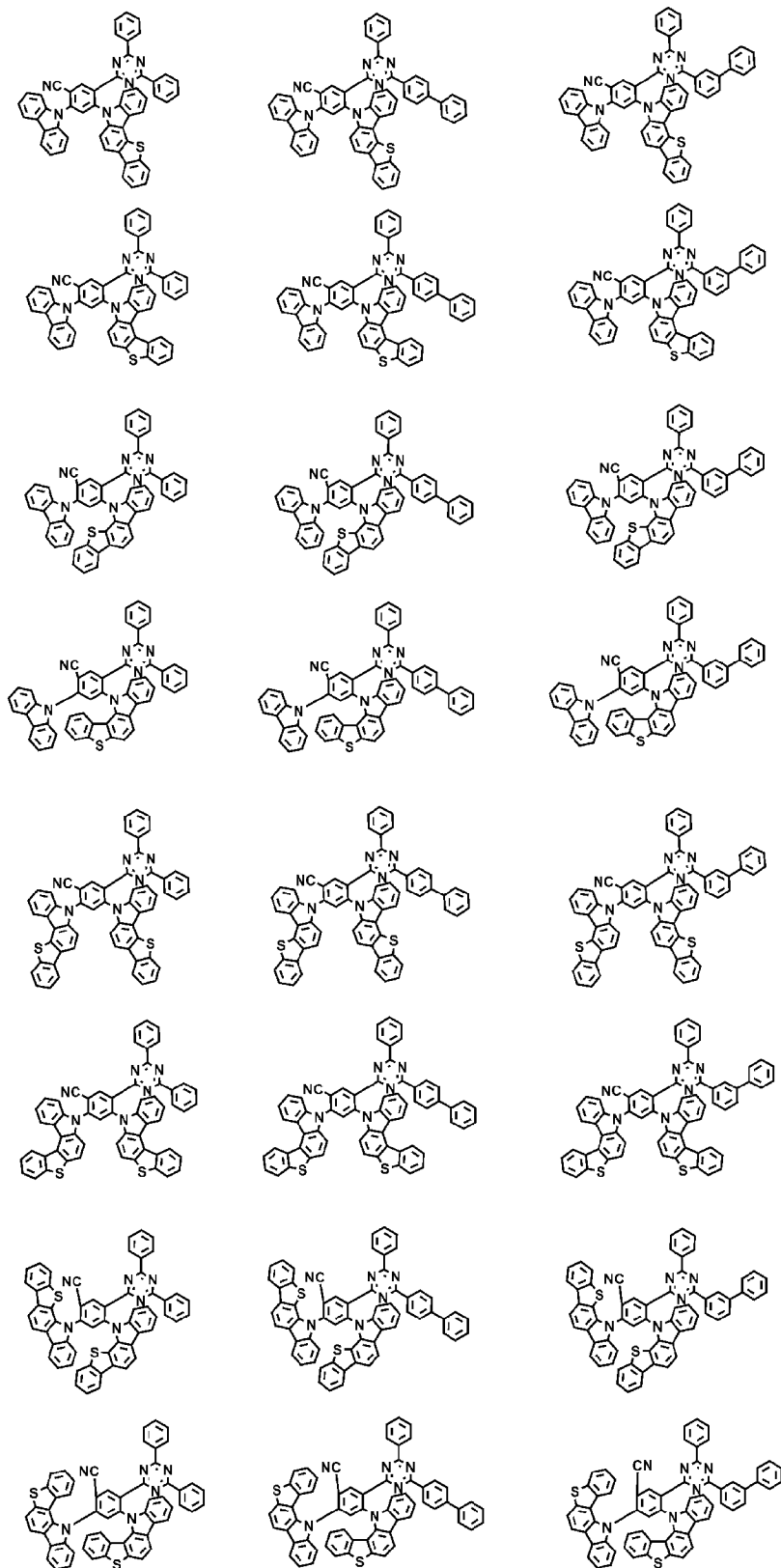


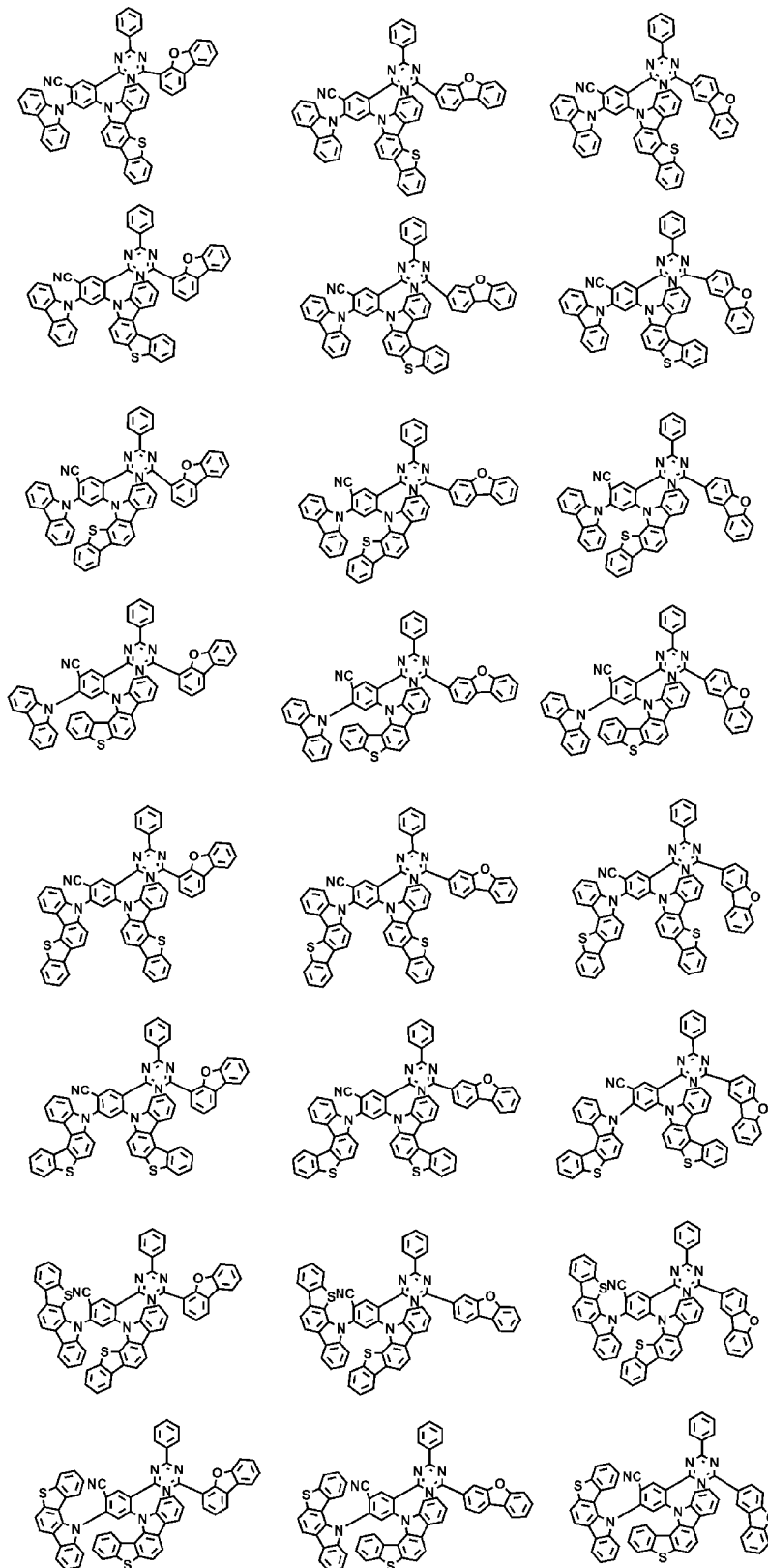


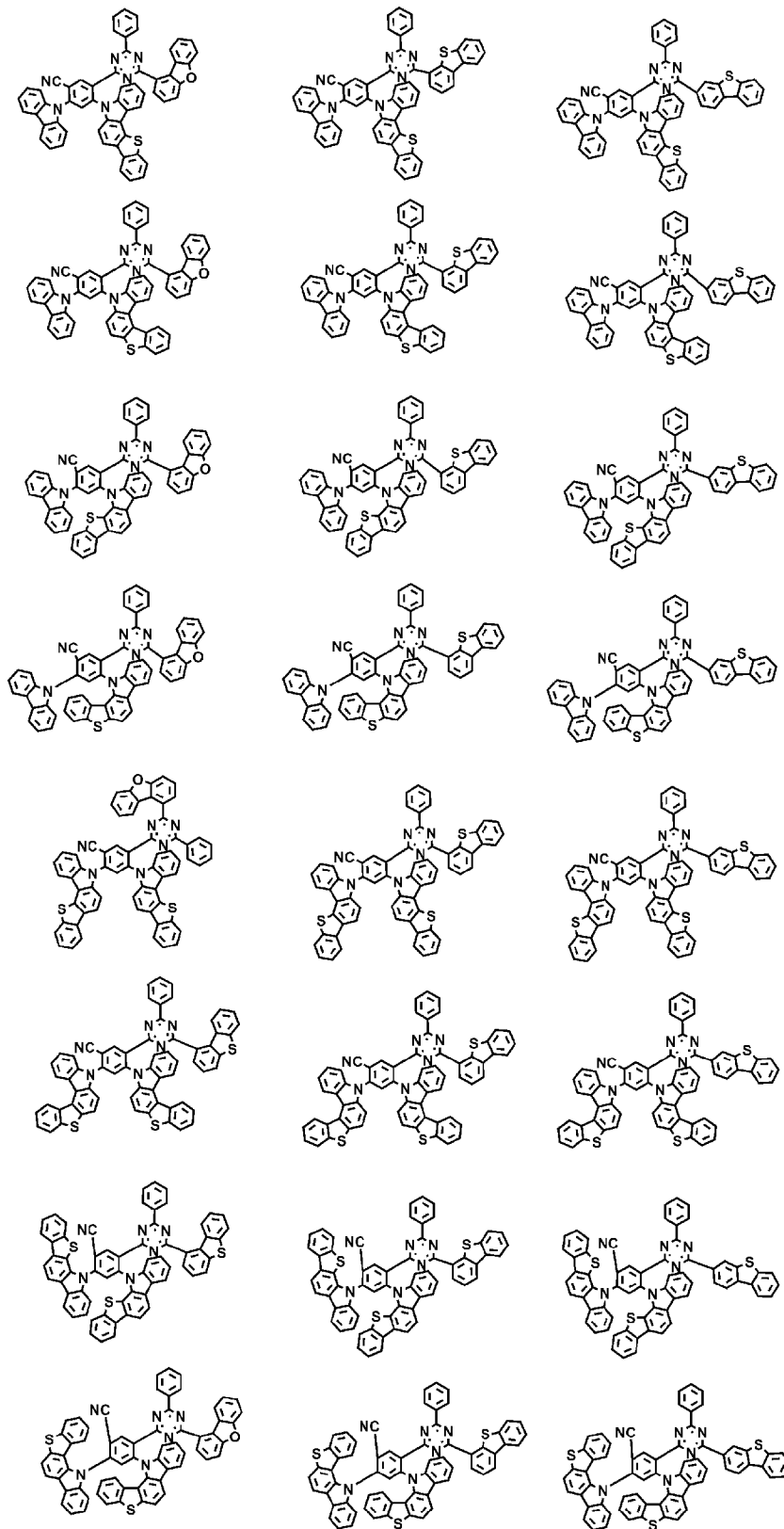


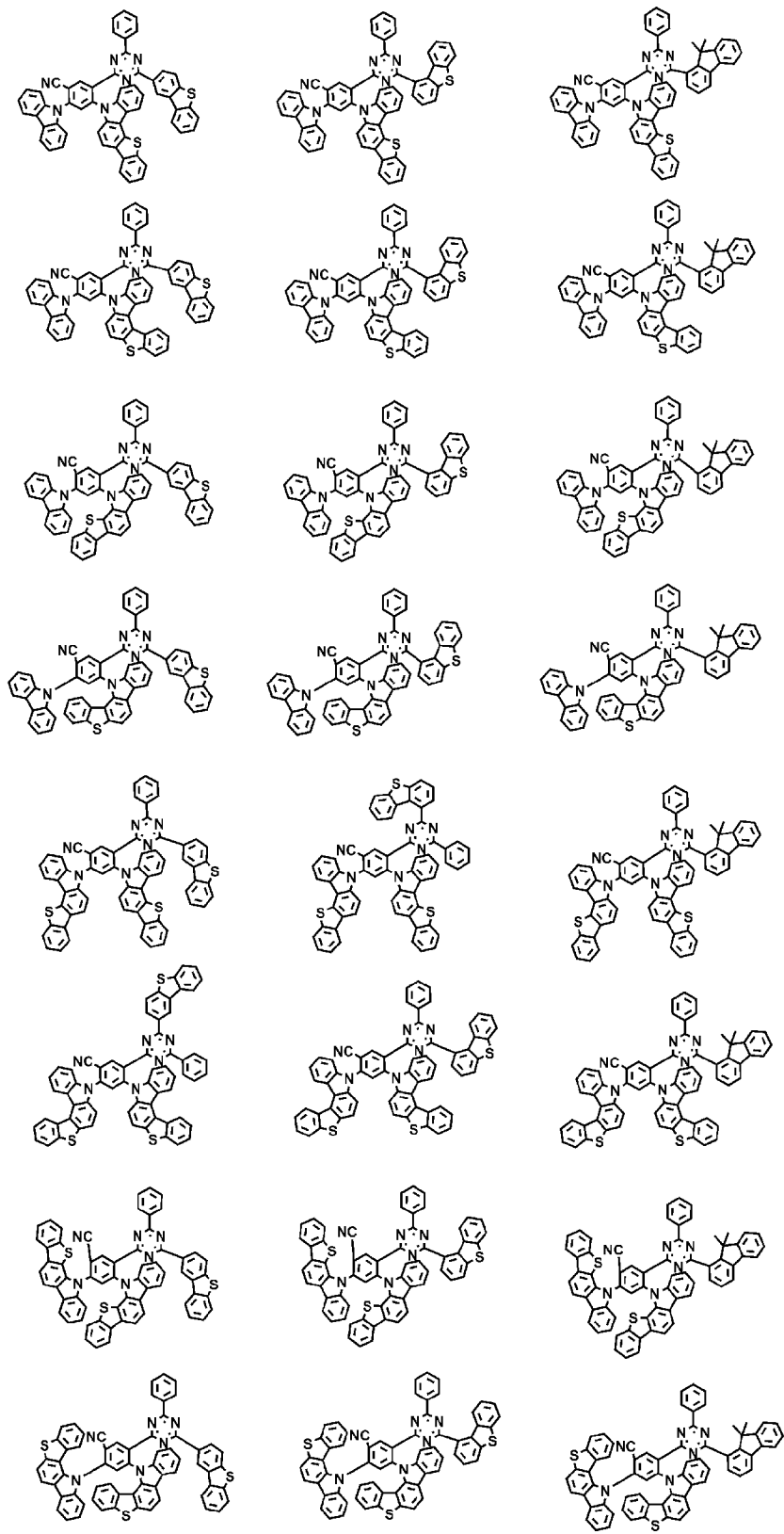


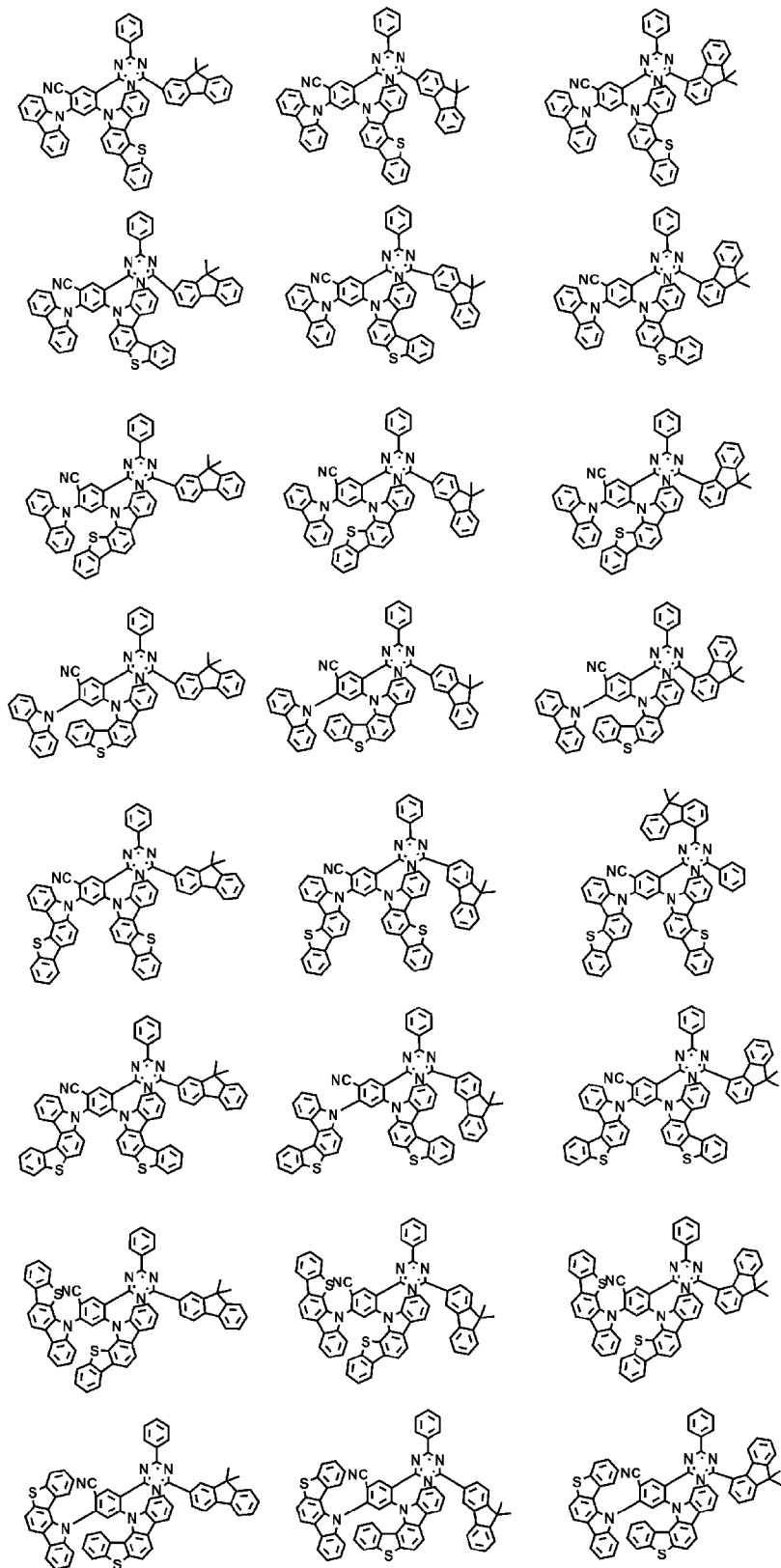


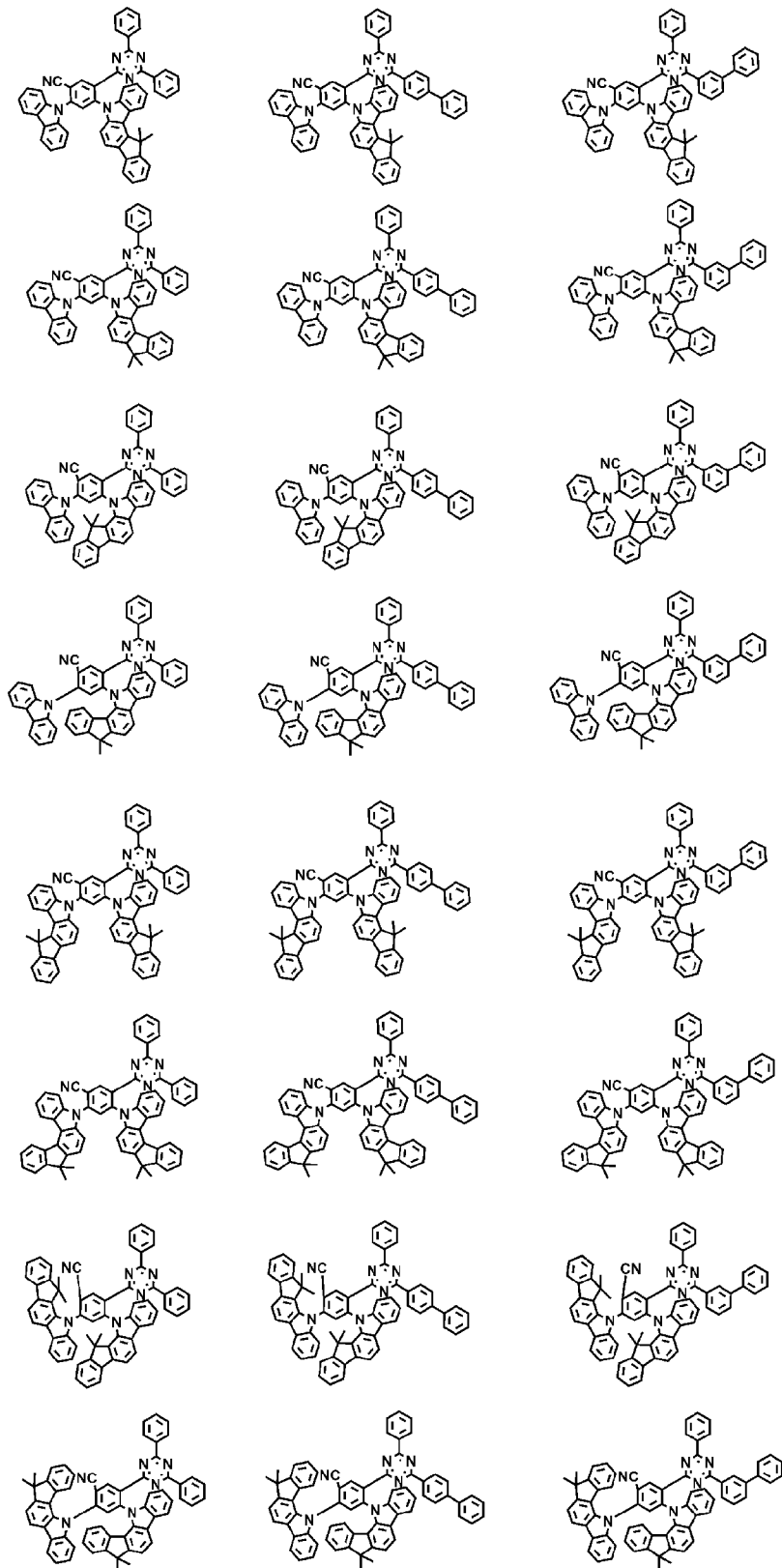


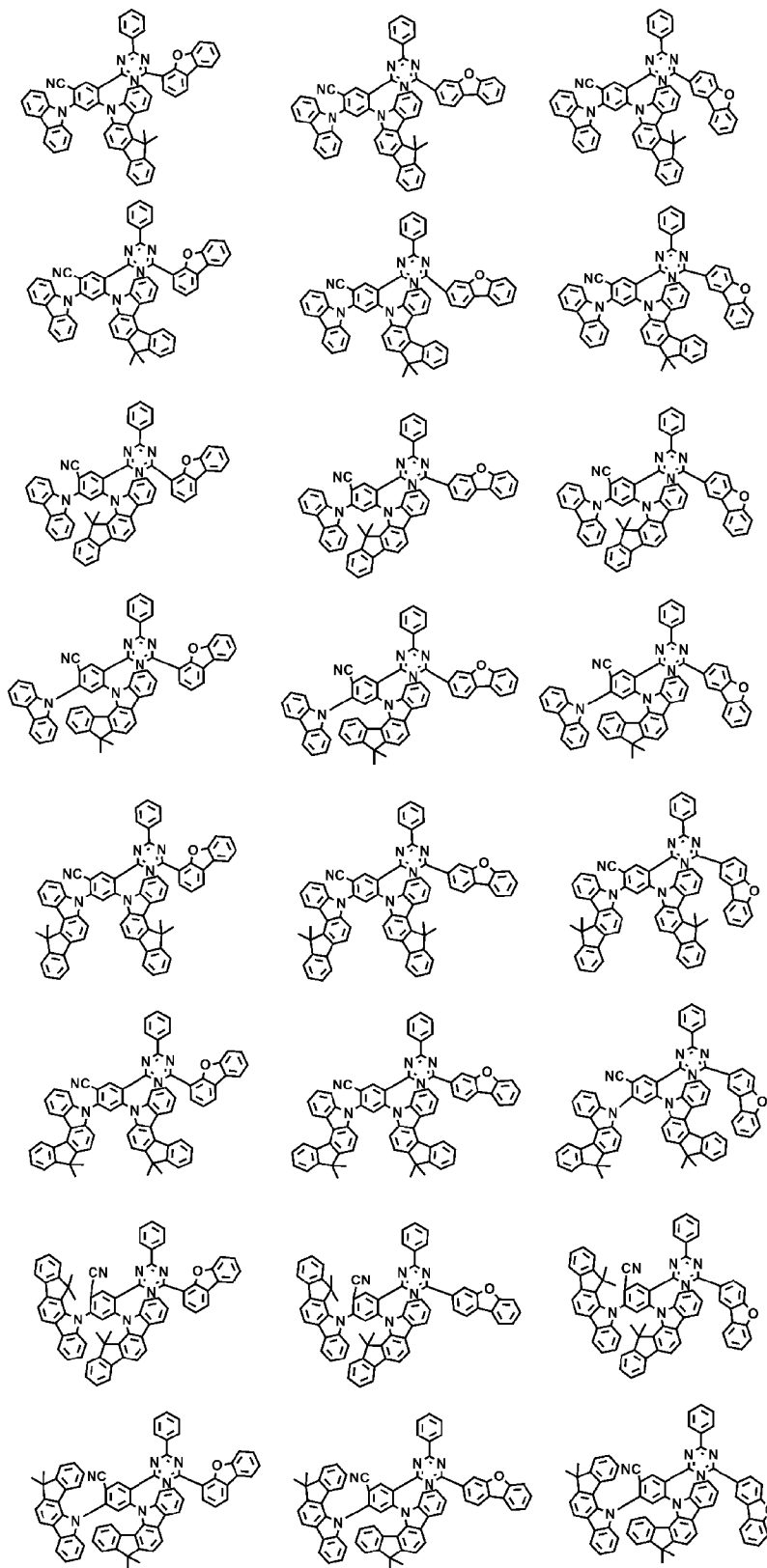


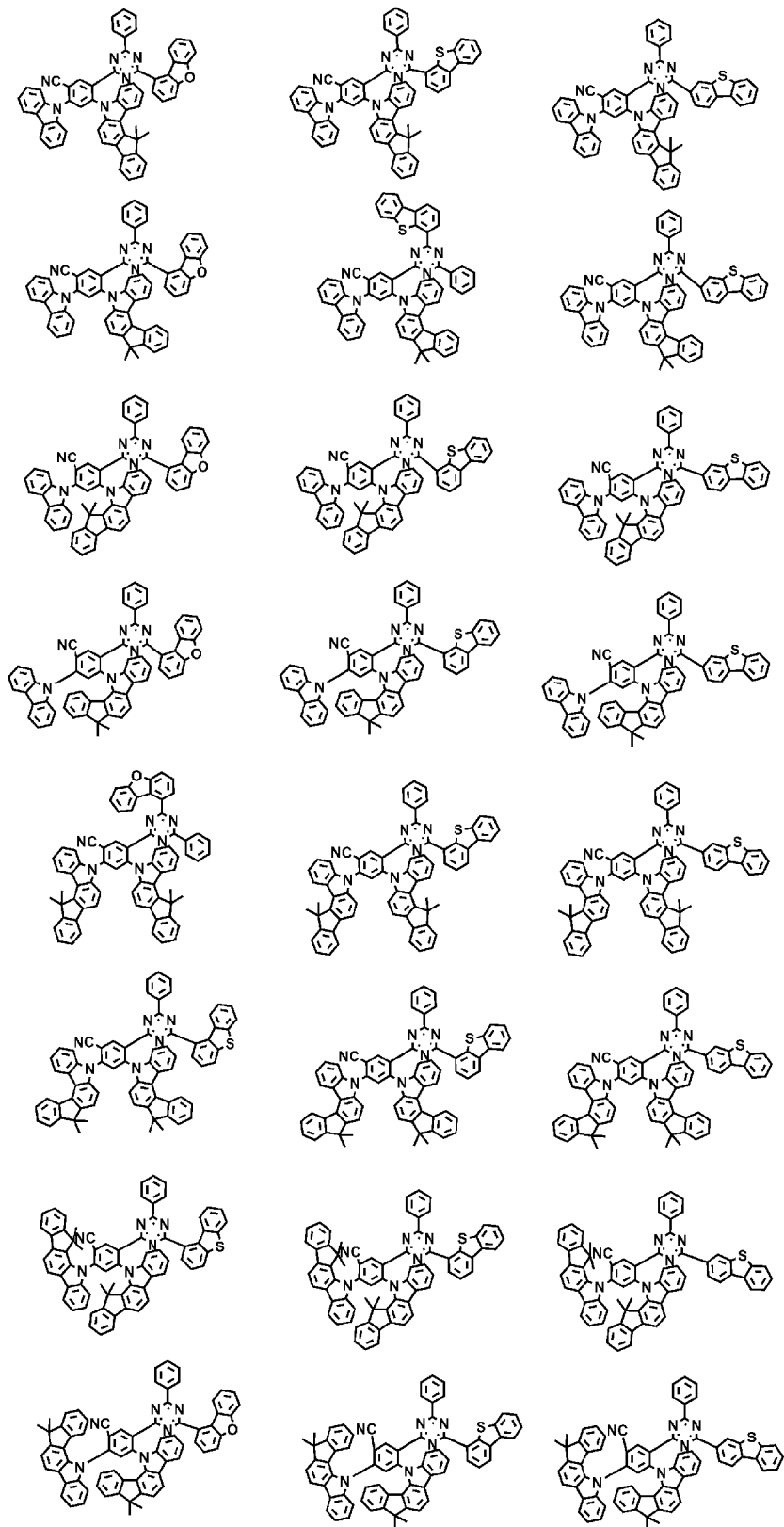


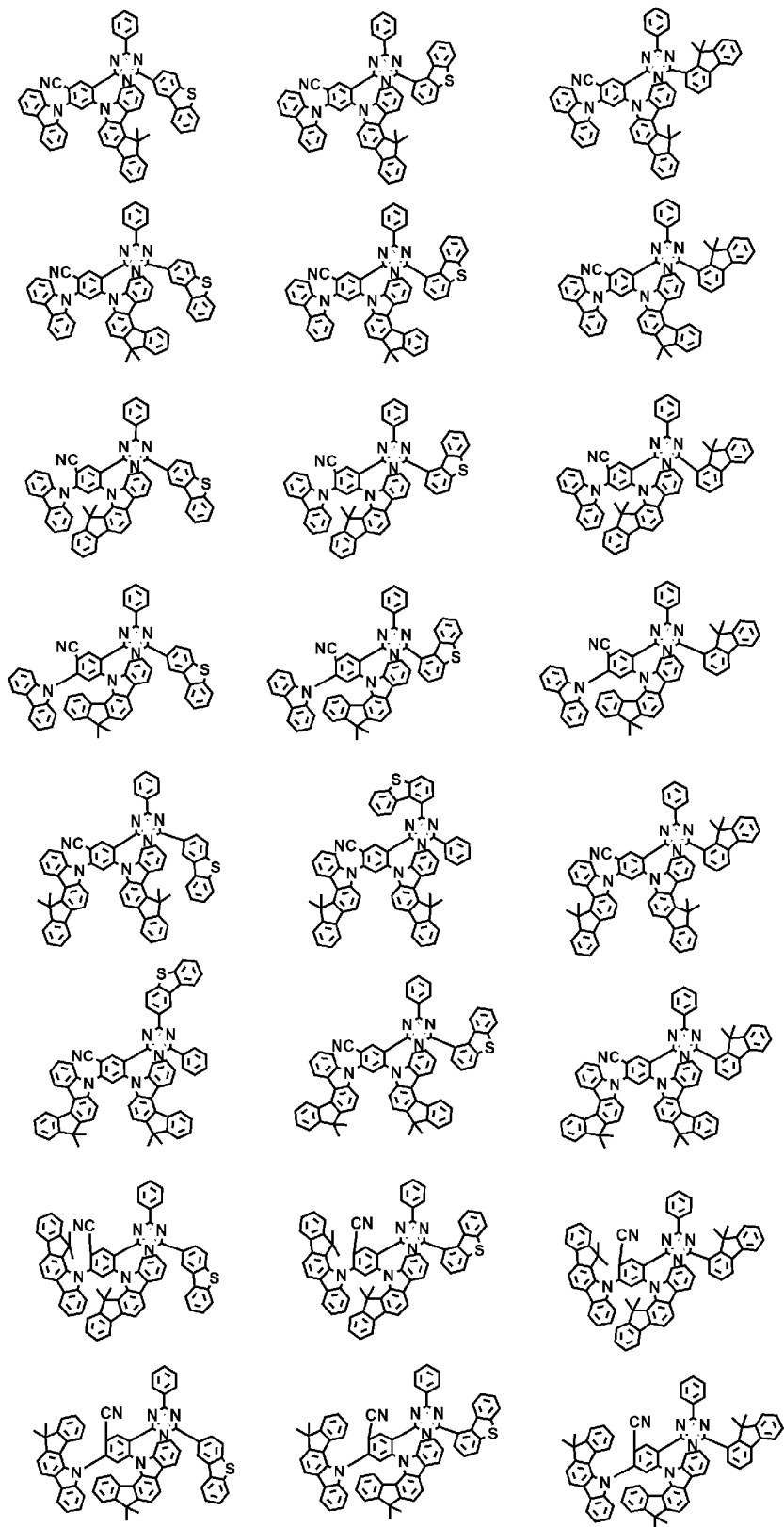


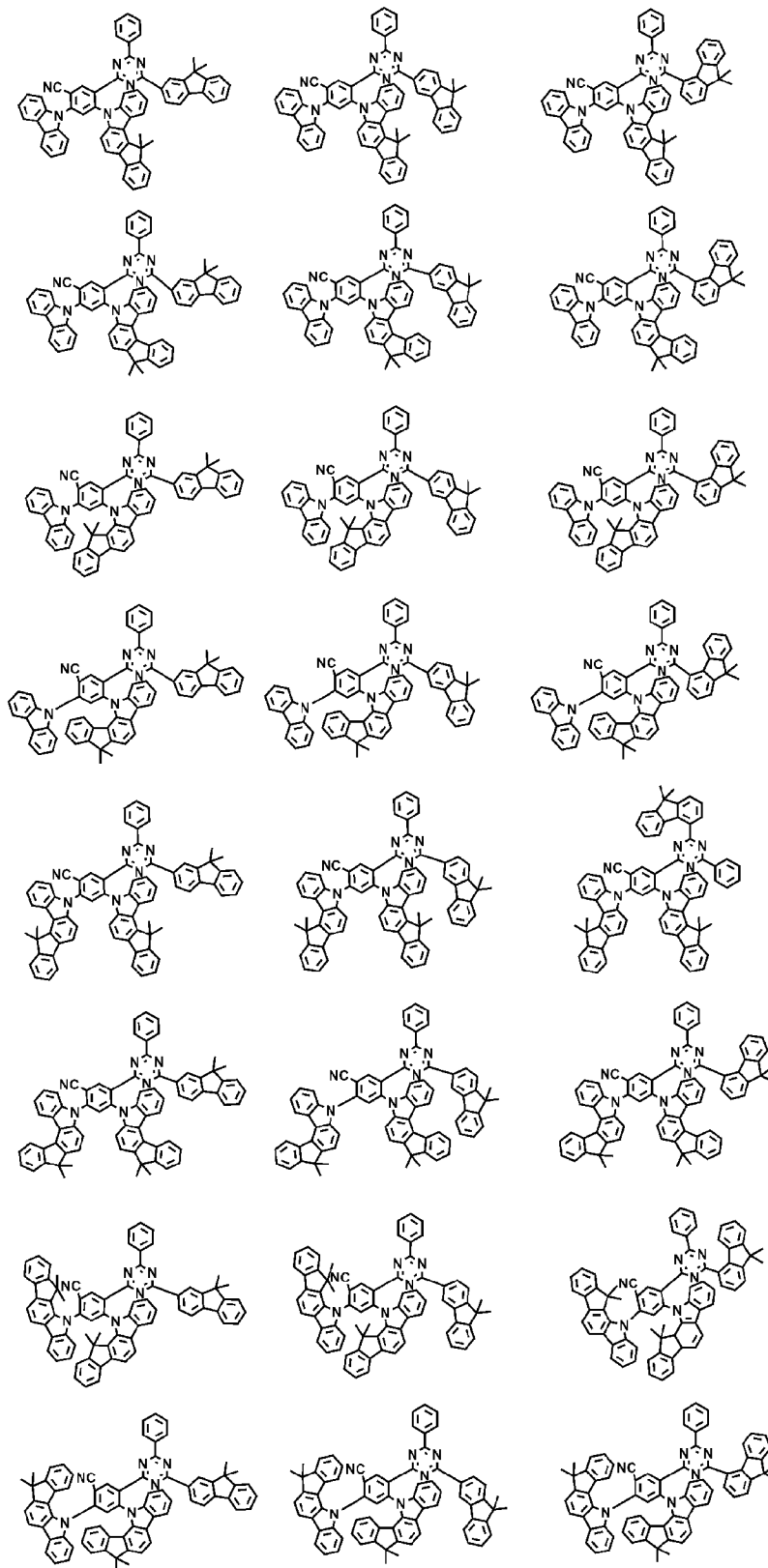


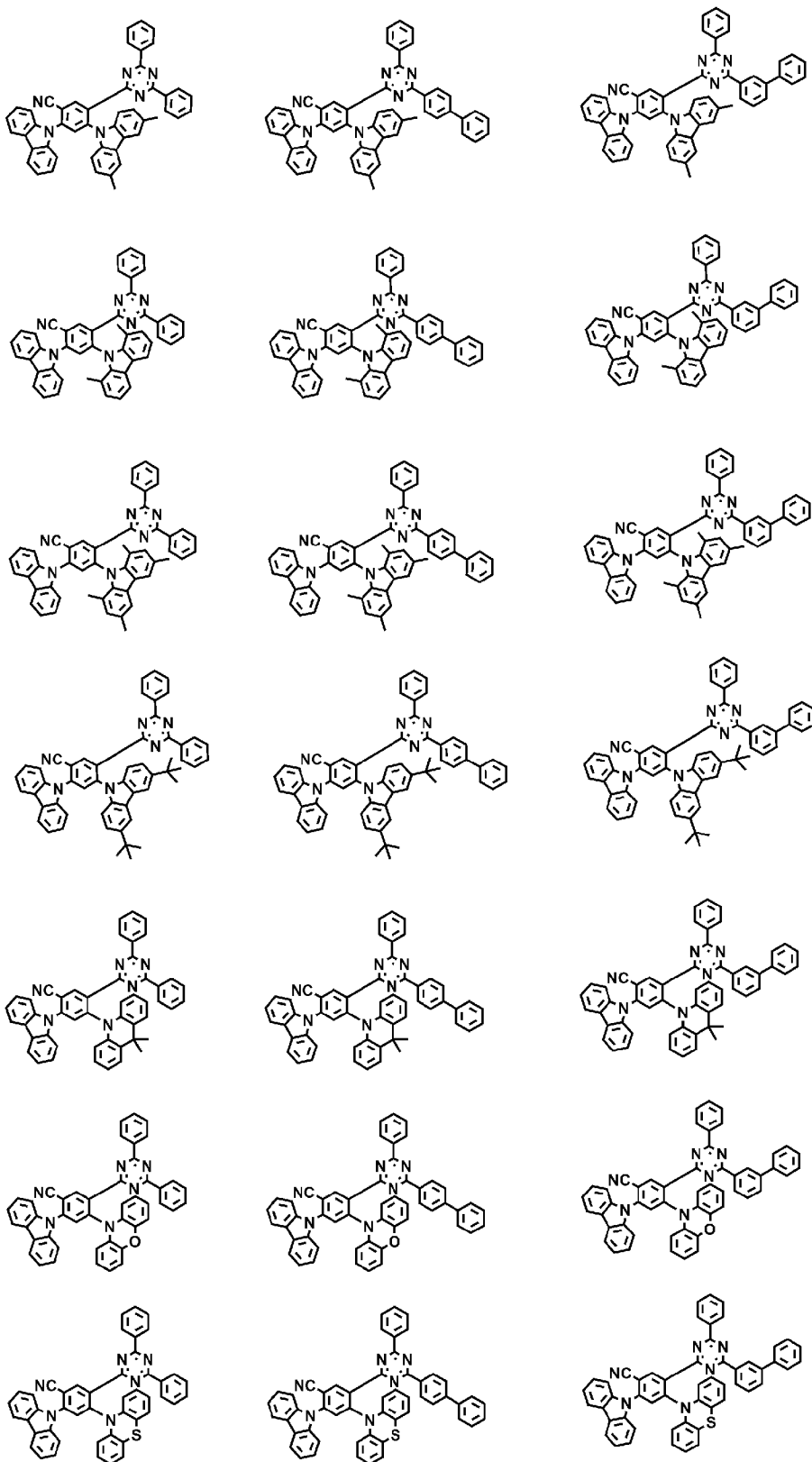


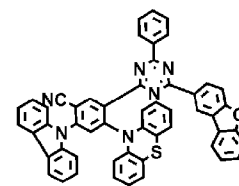
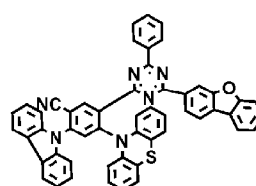
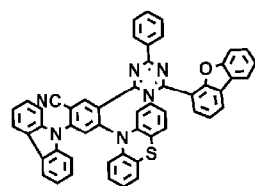
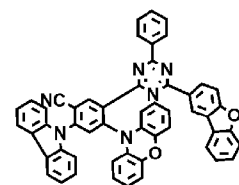
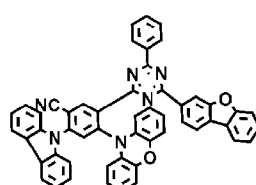
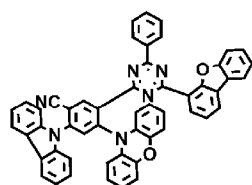
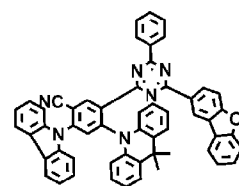
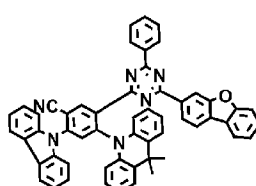
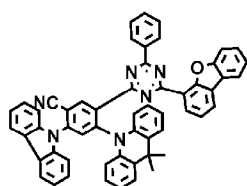
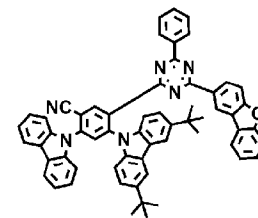
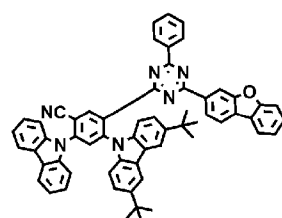
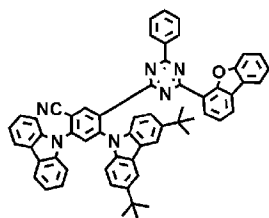
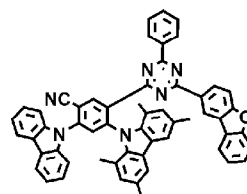
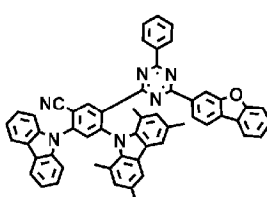
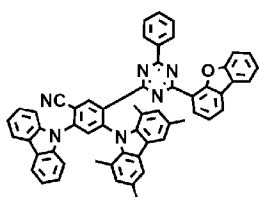
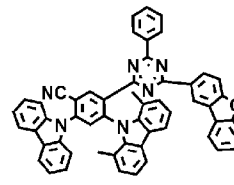
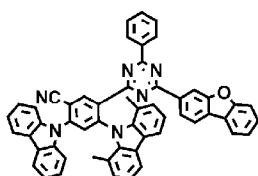
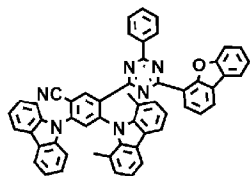
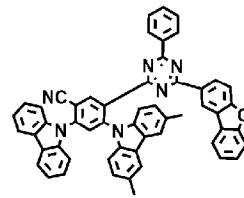
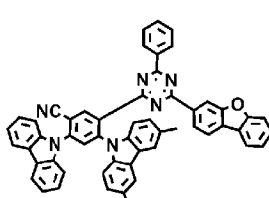
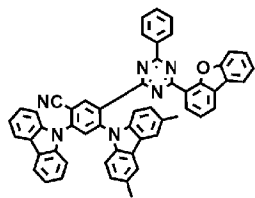


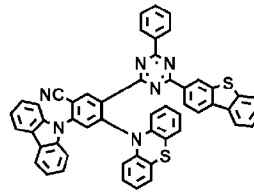
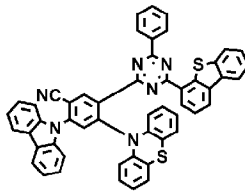
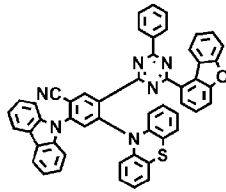
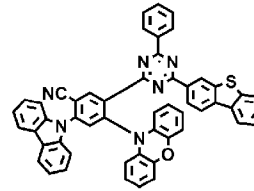
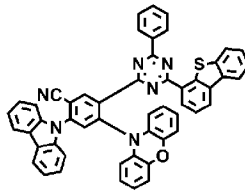
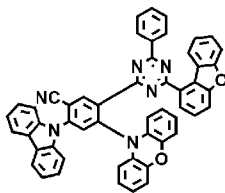
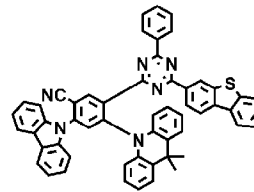
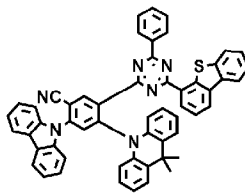
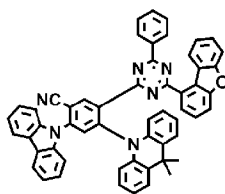
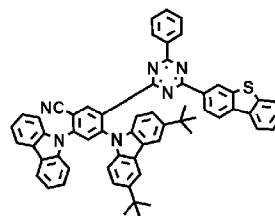
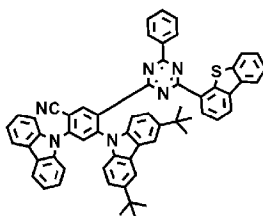
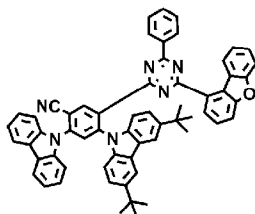
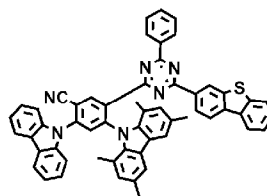
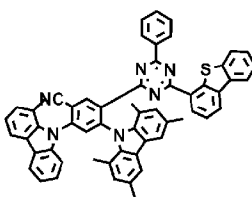
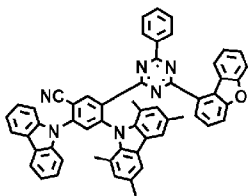
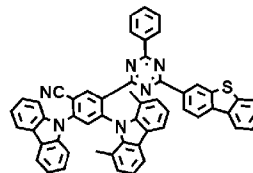
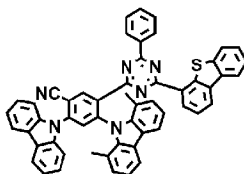
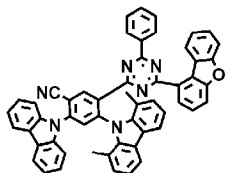
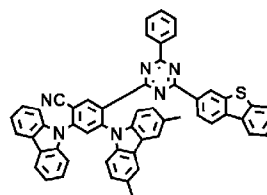
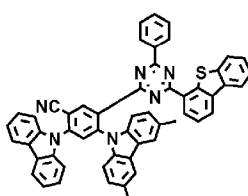
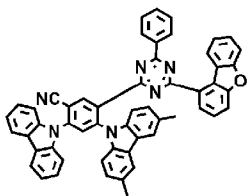


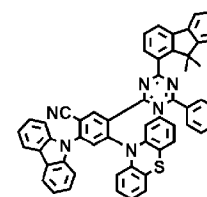
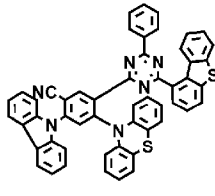
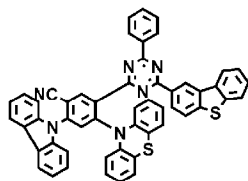
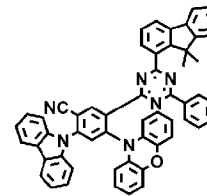
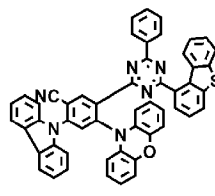
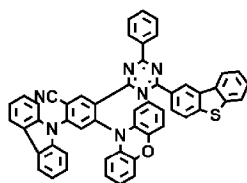
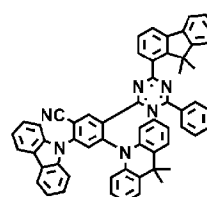
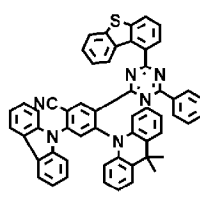
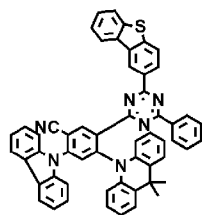
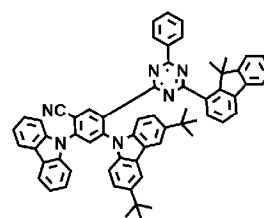
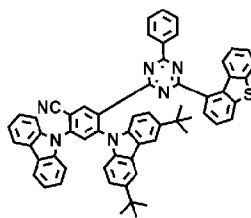
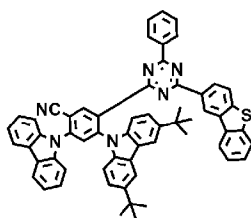
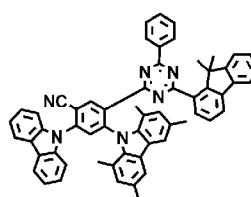
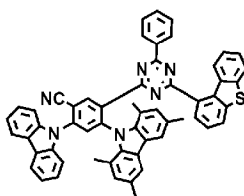
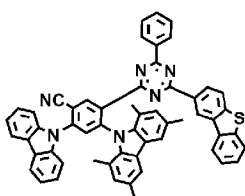
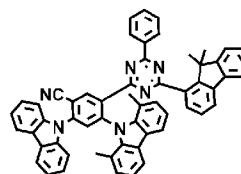
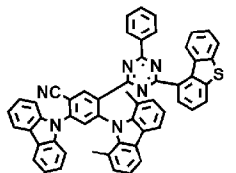
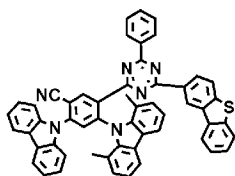
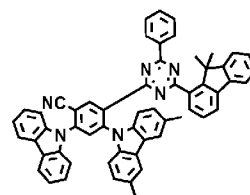
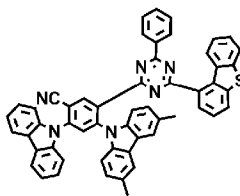
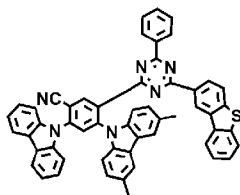


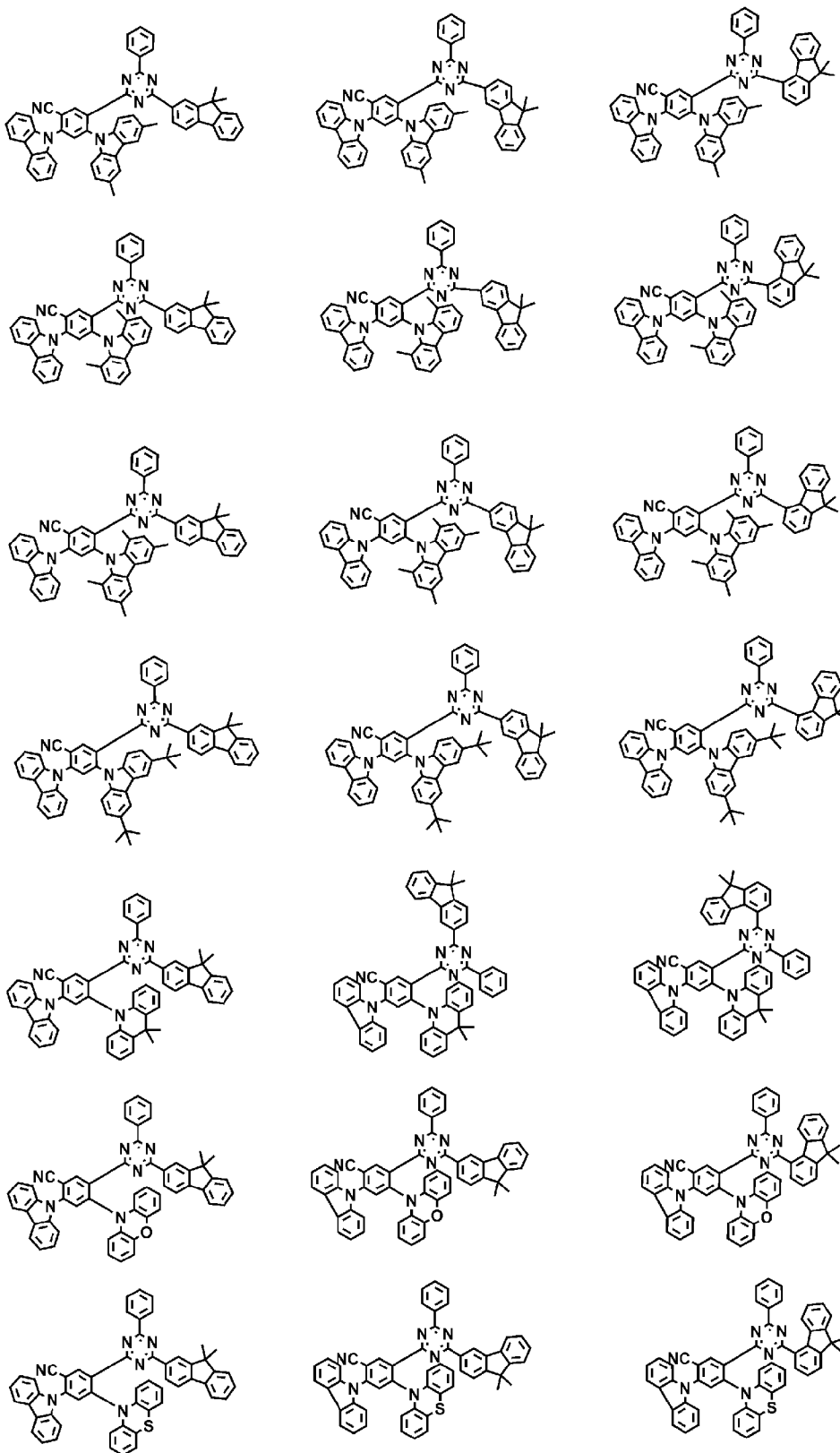


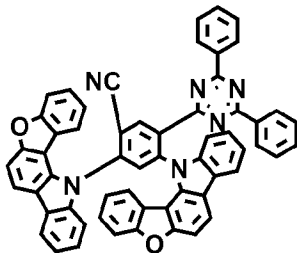
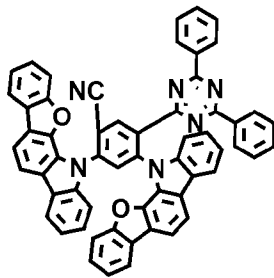
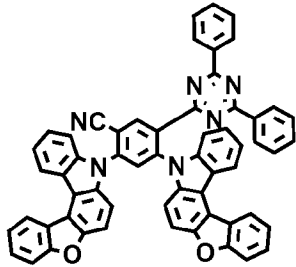
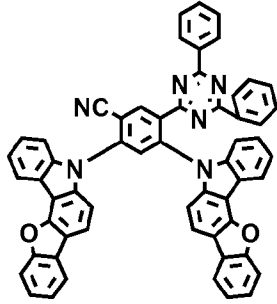












- [청구항 6] 제1 전극; 상기 제1 전극에 대향하여 구비된 제2 전극; 및 상기 제1 전극과 제2 전극 사이에 구비된 1층 또는 2층 이상의 유기물층을 포함하는 유기 발광 소자로서, 상기 유기물층 중 1층 이상은 청구항 1 내지 5 중 어느 한 항의 화합물을 포함하는 것인 유기 발광 소자.
- [청구항 7] 청구항 6에 있어서, 상기 유기물층은 발광층을 포함하고, 상기 발광층은 상기 화합물을 포함하는 것인 유기 발광 소자.
- [청구항 8] 청구항 6에 있어서, 상기 유기물층은 정공주입층, 정공수송층 또는 전자저지층을 포함하고, 상기 정공주입층, 정공수송층 또는 전자저지층은 상기 화합물을 포함하는 것인 유기 발광 소자.

[청구항 9] 청구항 6에 있어서, 상기 유기물층은 정공저지층, 전자수송층 또는 전자주입층을 포함하고, 상기 정공저지층, 전자수송층 또는 전자주입층은 상기 화합물을 포함하는 것인 유기 발광 소자.

[도1]

4
3
2
1

[도2]

4
7
3
6
5
2
1

[도3]

4
10
9
3
8
6
5
2
1

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/KR2019/003641

A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER

C07D 403/14(2006.01)i, C07D 413/14(2006.01)i, C07D 251/24(2006.01)i, C07D 209/82(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 403/14; C07C 255/51; C07D 209/82; C07D 401/14; C09K 11/06; H01L 51/00; H01L 51/50; C07D 413/14; C07D 251/24

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 (Registry, CAplus) & Keywords: triazine, cyano group, organic light-emitting device, organic matter layer

C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
X	KR 10-2017-0131398 A (IDEMITSU KOSAN CO., LTD.) 29 November 2017 See claims 1, 3; paragraphs [0225]-[0228].	1-9
X	WO 2018-041933 A1 (CYNORA GMBH.) 08 March 2018 See claims 1-14; page 58.	1-9
A	KR 10-2017-0128517 A (KONICA MINOLTA, INC.) 22 November 2017 See claims 1-40.	1-9
A	KR 10-2017-0136256 A (SAMSUNG ELECTRONICS CO., LTD. et al.) 11 December 2017 See claims 1-20.	1-9
A	LEE, D. R. et al. Bis(diphenyltriazine) as a new acceptor of efficient thermally activated delayed fluorescent emitters. Dyes and Pigments. 2018 (electronic publication date 27 December 2017), vol. 151, pages 75-80 See abstract; formula 1.	1-9



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

03 JULY 2019 (03.07.2019)

Date of mailing of the international search report

03 JULY 2019 (03.07.2019)

Name and mailing address of the ISA/KR

 Korean Intellectual Property Office
Government Complex Daejeon Building 4, 189, Cheongsa-ro, Seo-gu,
Daejeon, 35208, Republic of Korea
Facsimile No. +82-42-481-8578

Authorized officer

Telephone No.

INTERNATIONAL SEARCH REPORT
Information on patent family members

International application No.

PCT/KR2019/003641

Patent document cited in search report	Publication date	Patent family member	Publication date
KR 10-2017-0131398 A	29/11/2017	CN 107431136 A EP 3276697 A1 EP 3276697 A4 US 2018-0053901 A1 WO 2016-158540 A1	01/12/2017 31/01/2018 07/11/2018 22/02/2018 06/10/2016
WO 2018-041933 A1	08/03/2018	CN 109641880 A DE 102016123105 A1	16/04/2019 01/03/2018
KR 10-2017-0128517 A	22/11/2017	CN 107531628 A US 2018-0170914 A1 WO 2016-181846 A1	02/01/2018 21/06/2018 17/11/2016
KR 10-2017-0136256 A	11/12/2017	US 2017-0352816 A1	07/12/2017

A. 발명이 속하는 기술분류(국제특허분류(IPC))
C07D 403/14(2006.01)i, C07D 413/14(2006.01)i, C07D 251/24(2006.01)i, C07D 209/82(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 403/14; C07C 255/51; C07D 209/82; C07D 401/14; C09K 11/06; H01L 51/00; H01L 51/50; C07D 413/14; C07D 251/24

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(Registry, CAplus) & 키워드:트리아진, 시아노기, 유기 발광 소자, 유기물층


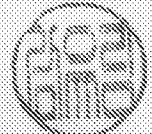
C. 관련 문헌

카테고리*	인용문헌명 및 관련 구절(해당하는 경우)의 기재	관련 청구항
X	KR 10-2017-0131398 A (이데미쓰 고산 가부시기가이샤) 2017.11.29 청구항 1, 3; 단락 [0225]-[0228] 참조.	1-9
X	WO 2018-041933 A1 (CYNORA GMBH) 2018.03.08 청구항 1-14; 페이지 58 참조.	1-9
A	KR 10-2017-0128517 A (코니카 미놀타 가부시기가이샤) 2017.11.22 청구항 1-40 참조.	1-9
A	KR 10-2017-0136256 A (삼성전자주식회사 등) 2017.12.11 청구항 1-20 참조.	1-9
A	LEE, D. R. 등, "Bis(diphenyltriazine) as a new acceptor of efficient thermally activated delayed fluorescent emitters", Dyes and Pigments, 2018 (전자공개일 2017.12.27), 제151권, 페이지 75-80 초록; 도식 1 참조.	1-9

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
 "E" 국제출원일보다 빠른 출원일 또는 우선일을 가지나 국제출원일 이후에 공개된 선출원 또는 특허 문헌
 "L" 우선권 주장에 의문을 제기하는 문헌 또는 다른 인용문헌의 공개일 또는 다른 특별한 이유(이유를 명시)를 밝히기 위하여 인용된 문헌
 "O" 구두 개시, 사용, 전시 또는 기타 수단을 언급하고 있는 문헌
 "P" 우선일 이후에 공개되었으나 국제출원일 이전에 공개된 문헌
 "T" 국제출원일 또는 우선일 후에 공개된 문헌으로, 출원과 상충하지 않으며 발명의 기초가 되는 원리나 이론을 이해하기 위해 인용된 문헌
 "X" 특별한 관련이 있는 문헌. 해당 문헌 하나만으로 청구된 발명의 신규성 또는 진보성이 없는 것으로 본다.
 "Y" 특별한 관련이 있는 문헌. 해당 문헌이 하나 이상의 다른 문헌과 조합하는 경우로 그 조합이 당업자에게 자명한 경우 청구된 발명은 진보성이 없는 것으로 본다.
 "&" 동일한 대응특허문헌에 속하는 문헌

국제조사의 실제 완료일: 2019년 07월 03일 (03.07.2019)
 국제조사보고서 발송일: 2019년 07월 03일 (03.07.2019)

ISA/KR의 명칭 및 우편주소
 대한민국 특허청
 (35208) 대전광역시 서구 청사로 189, 4동 (둔산동, 정부대전청사)
 팩스 번호 +82-42-481-8578
 심사관: 김유림
 전화번호 +82-42-481-3516


국제조사보고서에서 인용된 특허문헌	공개일	대응특허문헌	공개일
KR 10-2017-0131398 A	2017/11/29	CN 107431136 A EP 3276697 A1 EP 3276697 A4 US 2018-0053901 A1 WO 2016-158540 A1	2017/12/01 2018/01/31 2018/11/07 2018/02/22 2016/10/06
WO 2018-041933 A1	2018/03/08	CN 109641880 A DE 102016123105 A1	2019/04/16 2018/03/01
KR 10-2017-0128517 A	2017/11/22	CN 107531628 A US 2018-0170914 A1 WO 2016-181846 A1	2018/01/02 2018/06/21 2016/11/17
KR 10-2017-0136256 A	2017/12/11	US 2017-0352816 A1	2017/12/07