

(12) 특허협력조약에 의하여 공개된 국제출원

(19) 세계지식재산권기구
국제사무국

(43) 국제공개일
2024년 5월 2일 (02.05.2024)



(10) 국제공개번호
WO 2024/091024 A1

(51) 국제특허분류:

C07D 251/24 (2006.01) C07D 405/14 (2006.01)
C07D 239/26 (2006.01) C07D 413/14 (2006.01)
C07D 403/10 (2006.01) C07D 417/14 (2006.01)
C07D 401/10 (2006.01) C07D 403/14 (2006.01)
C07D 401/14 (2006.01) C07D 409/14 (2006.01)

MG, MK, MN, MU, 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, ST, SV, SY, TH, TJ, TM, TN,
TR, TT, TZ, UA, UG, US, UZ, VC, VN, WS, ZA, ZM, ZW.

(21) 국제출원번호: PCT/KR2023/016753

(22) 국제출원일: 2023년 10월 26일 (26.10.2023)

(25) 출원언어: 한국어

(26) 공개언어: 한국어

(30) 우선권정보:
10-2022-0139484 2022년 10월 26일 (26.10.2022)KR

(71) 출원인: 주식회사 엘지화학 (LG CHEM, LTD.) [KR/
KR]; 07336 서울특별시 영등포구 여의대로 128, Seoul
(KR).

(84) 지정국 (별도의 표시가 없는 한, 가능한 모든 종류의
역내 권리의 보호를 위하여): ARIPO (BW, CV, GH, GM,
KE, LR, LS, MW, MZ, NA, RW, SC, 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,
ME, 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))

(72) 발명자: 한수진 (HAN, Su Jin); 34122 대전광역시
유성구 문지로 188 LG화학 기술연구원, Daejeon (KR).
윤정민 (YOON, Jung Min); 34122 대전광역시 유성구
문지로 188 LG화학 기술연구원, Daejeon (KR). 윤희경
(YUN, Heekyung); 34122 대전광역시 유성구 문지로
188 LG화학 기술연구원, Daejeon (KR). 이재탁 (LEE,
Jae Tak); 34122 대전광역시 유성구 문지로 188
LG화학 기술연구원, Daejeon (KR). 허동욱 (HEO, Dong
Uk); 34122 대전광역시 유성구 문지로 188 LG화학
기술연구원, Daejeon (KR). 홍성길 (HONG, Sung
Kil); 34122 대전광역시 유성구 문지로 188 LG화학
기술연구원, Daejeon (KR).

(74) 대리인: 최희경 등 (CHOI, Hee-Kyeong et al.); 06253
서울특별시 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, CV, CZ, DE, DJ, DK, DM, DO, DZ,
EC, EE, EG, ES, FI, GB, GD, GE, GH, GM, GT, HN, HR,
HU, ID, IL, IN, IQ, IR, IS, IT, JM, JO, JP, KE, KG, KH,
KN, KP, KW, KZ, LA, LC, LK, LR, LS, LU, LY, MA, MD,

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

(54) 발명의 명칭: 화합물 및 이를 포함하는 유기 발광 소자

4
3
2
1

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

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

WO 2024/091024 A1

명세서

발명의 명칭: 화합물 및 이를 포함하는 유기 발광 소자

기술분야

- [1] 본 출원은 2022년 10월 26일 한국특허청에 제출된 한국 특허 출원 제 10-2022-0139484 호의 출원일의 이익을 주장하며, 그 내용 전부는 본 명세서에 포함된다.
- [2] 본 명세서는 화합물 및 이를 포함하는 유기 발광 소자에 관한 것이다.

배경기술

- [3] 본 명세서에서, 유기 발광 소자란 유기 반도체 물질을 이용한 발광 소자로서, 전극과 유기 반도체 물질 사이에서의 정공 및/또는 전자의 교류를 필요로 한다. 유기 발광 소자는 동작 원리에 따라 하기와 같이 크게 두 가지로 나눌 수 있다. 첫째는 외부의 광원으로부터 소자로 유입된 광자에 의하여 유기물층에서 엑시톤(exiton)이 형성되고, 이 엑시톤이 전자와 정공으로 분리되고, 이 전자와 정공이 각각 다른 전극으로 전달되어 전류원(전압원)으로 사용되는 형태의 발광 소자이다. 둘째는 2개 이상의 전극에 전압 또는 전류를 가하여 전극과 계면을 이루는 유기 반도체 물질층에 정공 및/또는 전자를 주입하고, 주입된 전자와 정공에 의하여 작동하는 형태의 발광 소자이다.
- [4] 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, 전자억제층, 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. 이러한 유기 발광 소자는 자발광, 고휘도, 고효율, 낮은 구동 전압, 넓은 시야각, 높은 콘트라스트 등의 특성을 갖는 것으로 알려져 있다.
- [5] 유기 발광 소자에서 유기물층으로 사용되는 재료는 기능에 따라, 발광 재료와 전하 수송 재료, 예컨대 정공 주입 재료, 정공 수송 재료, 전자 억제 물질, 전자 수송 재료, 전자 주입 재료 등으로 분류될 수 있다. 발광 재료는 발광색에 따라 청색, 녹색, 적색 발광 재료와 보다 나은 천연색을 구현하기 위해 필요한 노란색 및 주황색 발광 재료가 있다.
- [6] 또한, 색순도의 증가와 에너지 전이를 통한 발광 효율을 증가시키기 위하여, 발광 재료로서 호스트/도펀트 계를 사용할 수 있다. 그 원리는 발광층을 주로 구성하는 호스트보다 에너지 대역 간극이 작고 발광 효율이 우수한 도펀트를 발광층

에 소량 혼합하면, 호스트에서 발생한 엑시톤이 도펀트로 수송되어 효율이 높은 빛을 내는 것이다. 이 때 호스트의 파장이 도펀트의 파장대로 이동하므로, 이용하는 도펀트의 종류에 따라 원하는 파장의 빛을 얻을 수 있다.

- [7] 전술한 유기 발광 소자가 갖는 우수한 특징들을 충분히 발휘하기 위해서는 소자 내 유기물층을 이루는 물질, 예컨대 정공 주입 물질, 정공 수송 물질, 발광 물질, 전자 억제 물질, 전자 수송 물질, 전자 주입 물질 등이 안정하고 효율적인 재료에 의하여 뒷받침되므로 새로운 재료의 개발이 계속 요구되고 있다.

발명의 상세한 설명

기술적 과제

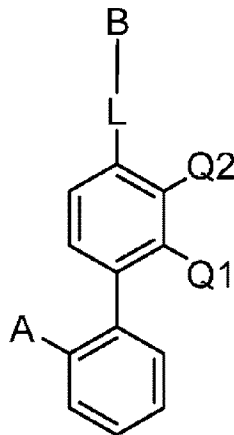
- [8] 본 명세서에는 화합물 및 이를 포함하는 유기 발광 소자가 기재된다.

과제 해결 수단

- [9] 본 명세서의 일 실시상태는 하기 화학식 1의 화합물을 제공한다.

- [10] [화학식 1]

- [11]



- [12] 상기 화학식 1에 있어서,
 [13] A는 치환 또는 비치환된 아릴기로 치환된 N을 포함하는 6원 고리를 포함하는 헤테로아릴기이고,
 [14] B는 치환 또는 비치환된 아릴기로 치환된 N을 포함하는 6원 고리를 포함하는 헤테로아릴기이고,
 [15] L은 직접결합, 또는 치환 또는 비치환된 아릴렌기이고,
 [16] Q1 및 Q2 중 하나는 탄소수 6 내지 30의 아릴기이고, 나머지는 수소 또는 탄소수 6 내지 30의 아릴기이고,
 [17] Q1 및 Q2 중 하나가 수소인 경우, 나머지는 중수소, 니트로기, 할로젠기, 치환 또는 비치환된 알킬기, 치환 또는 비치환된 아릴기, 및 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기 중 선택되는 하나 이상의 치환기로 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴기이고,
 [18] Q1 및 Q2가 모두 탄소수 6 내지 30의 아릴기일 때, 상기 탄소수 6 내지 30의 아릴기는 중수소, 니트릴기, 니트로기, 할로젠기, 치환 또는 비치환된 알킬기, 치환

또는 비치환된 아릴기, 및 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기 중 선택되는 하나 이상의 치환기로 치환 또는 비치환된다.

발명의 효과

- [19] 본 발명의 화합물은 유기 발광 소자의 유기물층의 재료로서 사용될 수 있다. 본 발명의 화합물을 포함하여 유기 발광 소자를 제조하는 경우, 고효율, 저전압 및 장수명 특성을 갖는 유기 발광 소자를 얻을 수 있으며, 본 발명의 화합물을 유기 발광 소자의 전자 수송층에 포함하는 경우, 분자 내 분극성이 높아 전자전달의 효과가 높아서 장수명 특성을 가지는 유기 발광 소자를 제조할 수 있다.
- [20] 본 발명의 화합물은 전자 수송 특성을 가진 N함유 6원 고리를 포함하는 헤테로 고리가 2개 이상으로 치환 되어있고, 페닐의 오쏘 위치에 이웃하고 있어 구조적 뒤틀림이 발생하여 전자 수송 능력이 다양하게 조절할 수 있다.

도면의 간단한 설명

- [21] 도 1 및 2는 본 발명에 따른 유기 발광 소자의 예를 도시한 것이다.
- [22] [부호의 설명]
- [23] 1: 기판
- [24] 2: 양극
- [25] 3: 유기물층
- [26] 4: 음극
- [27] 5: 정공주입층
- [28] 6: 정공수송층
- [29] 7: 발광층
- [30] 8: 전자주입 및 수송층

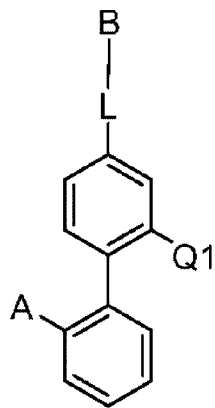
발명의 실시를 위한 최선의 형태

- [31] 이하 본 명세서에 대하여 더욱 상세히 설명한다.
- [32] 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.
- [33] 본 명세서에 있어서, 어떤 부제가 다른 부제 "상에" 위치하고 있다고 할 때, 이는 어떤 부제가 다른 부제에 접해 있는 경우뿐 아니라 두 부제 사이에 또 다른 부제가 존재하는 경우도 포함한다.
- [34] 본 명세서에서 치환기의 예시들은 아래에서 설명하나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [35] 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.

- [36] 본 명세서에서 "치환 또는 비치환된"이라는 용어는 중수소; 할로젠기; 시아노기(-CN); 실릴기; 붕소기; 치환 또는 비치환된 알킬기; 치환 또는 비치환된 사이클로알킬기; 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 치환되었거나, 또는 어떠한 치환기도 갖지 않는 것을 의미한다. 예컨대, "2 이상의 치환기가 연결된 치환기"는 바이페닐기일 수 있다. 즉, 바이페닐기는 아릴기일 수도 있고, 2개의 페닐기가 연결된 치환기로 해석될 수도 있다.
- [37] 상기 치환기들의 예시들은 아래에서 설명하나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [38] 본 명세서에 있어서, 상기 할로젠기의 예로는 불소(F), 염소(Cl), 브롬(Br) 또는 요오드(I)가 있다.
- [39] 본 명세서에 있어서, 상기 실릴기는 중수소; 치환 또는 비치환된 알킬기; 또는 치환 또는 비치환된 아릴기 등으로 치환 또는 비치환될 수 있다. 상기 실릴기는 구체적으로 트리메틸실릴기, 트리에틸실릴기, t-부틸디메틸실릴기, 비닐디메틸실릴기, 프로필디메틸실릴기, 트리페닐실릴기, 디페닐실릴기, 페닐실릴기 등이 있으나 이에 한정되지 않는다.
- [40] 본 명세서에 있어서, 상기 붕소기는 중수소; 치환 또는 비치환된 알킬기; 또는 치환 또는 비치환된 아릴기로 치환 또는 비치환될 수 있다. 상기 붕소기는 구체적으로 트리메틸붕소기, 트리에틸붕소기, t-부틸디메틸붕소기, 트리페닐붕소기, 페닐붕소기 등이 있으나 이에 한정되지 않는다.
- [41] 본 명세서에 있어서, 상기 알킬기는 직쇄 또는 분지쇄일 수 있고, 탄소수는 특별히 한정되지 않으나 1 내지 60인 것이 바람직하다. 일 실시상태에 따르면, 상기 알킬기의 탄소수는 1 내지 30이다. 또 하나의 실시상태에 따르면, 상기 알킬기의 탄소수는 1 내지 20이다. 또 하나의 실시상태에 따르면, 상기 알킬기의 탄소수는 1 내지 10이다. 알킬기의 구체적인 예로는 메틸기, 에틸기, 프로필기, 이소프로필기, 부틸기, 이소부틸기, tert-부틸기, 펜틸기, 헥실기, 헵틸기, 옥틸기 등이 있으나, 이들에 한정되지 않는다.
- [42] 본 명세서에 있어서, 상기 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-메틸안트라세닐아민기; 디페닐아민기; 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.

- [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 헤테로아릴기가 치환된 아민기를 의미한다.
- [46] 본 명세서에 있어서, 알킬아민기, N-아릴알킬아민기, 알킬티옥시기, 알킬술폭시기, N-알킬헤테로아릴아민기 중의 알킬기는 전술한 알킬기의 예시와 같다. 구체적으로 알킬티옥시기로는 메틸티옥시기; 에틸티옥시기; tert-부틸티옥시기; 헥실티옥시기; 옥틸티옥시기 등이 있고, 알킬술폭시기로는 메실; 에틸술폭시기; 프로필술폭시기; 부틸술폭시기 등이 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [47] 본 명세서에 있어서, 상기 사이클로알킬기는 특별히 한정되지 않으나, 탄소수 3 내지 60인 것이 바람직하며, 일 실시상태에 따르면, 상기 사이클로알킬기의 탄소수는 3 내지 30이다. 또 하나의 실시상태에 따르면, 상기 사이클로알킬기의 탄소수는 3 내지 20이다. 또 하나의 실시상태에 따르면, 상기 사이클로알킬기의 탄소수는 3 내지 6이다. 구체적으로 사이클로프로필기, 사이클로부틸기, 사이클로펜틸기, 사이클로헥실기, 사이클로헵틸기, 사이클로옥틸기 등이 있으나, 이에 한정되지 않는다.
- [48] 본 명세서에 있어서, 상기 아릴기는 특별히 한정되지 않으나 탄소수 6 내지 60인 것이 바람직하며, 단환식 아릴기 또는 다환식 아릴기일 수 있다. 일 실시상태에 따르면, 상기 아릴기의 탄소수는 6 내지 30이다. 일 실시상태에 따르면, 상기 아릴기의 탄소수는 6 내지 20이다. 상기 아릴기가 단환식 아릴기로는 페닐기, 바이페닐기, 터페닐기 등이 될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다. 상기 다환식 아릴기로는 나프틸기, 안트라세닐기, 페난트레닐기, 파이레닐기, 페릴레닐기, 트리페닐렌기, 크라이세닐기, 플루오레닐기 등이 될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [49] 본 명세서에 있어서, 상기 헤테로아릴기는 이종원자로 N, O, P, S, Si 및 Se 중 1개 이상을 포함하는 고리기로서, 탄소수는 특별히 한정되지 않으나 탄소수 2 내지 60인 것이 바람직하다. 일 실시상태에 따르면, 상기 헤테로고리기의 탄소수는 2 내지 30이다. 헤테로고리기의 예로는 피리딘기, 피롤기, 피리미딘기, 피리다지닐기, 퓨란기, 티오펜기, 이미다졸기, 피라졸기, 디벤조퓨란기, 디벤조티오펜기, 카바졸기 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.
- [50] 본 명세서에 있어서, 상기 아릴렌기는 2가기인 것을 제외하고, 상기 아릴기에서 정의한 바와 같다.
- [51] 본 명세서에 있어서, 상기 헤테로아릴렌기는 2가기인 것을 제외하고, 상기 헤테로아릴기에서 정의한 바와 같다.
- [52] 본 명세서에 있어서, 상기 화학식 1은 아래 화학식 1-1 또는 1-2이다.
- [53] [화학식 1-1]

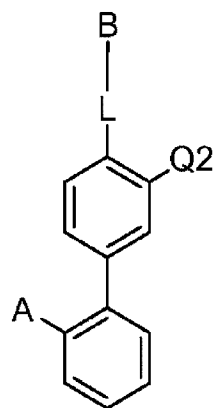
[54]



[55]

[화학식 1-2]

[56]



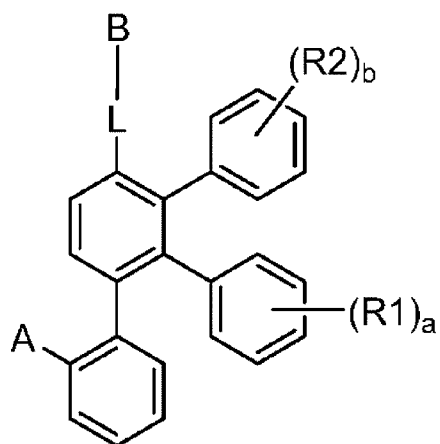
[57] 상기 화학식 1-1 및 1-2에 있어서, 상기 A, B, L, Q1 및 Q2는 상기 화학식 1에서 정의한 것과 같다.

[58] 본 명세서에 있어서, 상기 화학식 1은 아래 화학식 1-3이다.

[59]

[화학식 1-3]

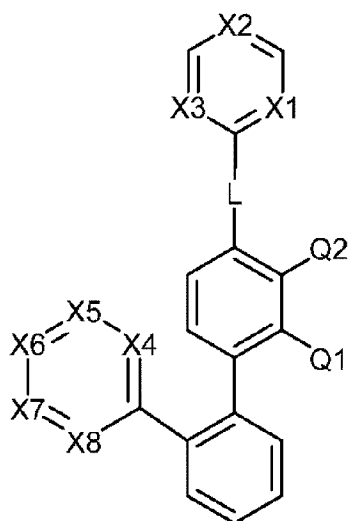
[60]



[61] 상기 화학식 1-3에 있어서, 상기 A, B, 및 L는 상기 화학식 1에서 정의한 것과 같고,

- [62] R1 및 R2는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소, 중수소, 니트릴기, 니트로기, 할로젠기, 치환 또는 비치환된 알킬기, 치환 또는 비치환된 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기이거나, 인접한 기와 결합하여 치환 또는 비치환된 고리를 형성하고,
- [63] a 및 b는 1 내지 5의 정수이고,
- [64] a가 2 이상일 때, R1은 서로 같거나 상이하고,
- [65] b가 2 이상일 때, R2는 서로 같거나 상이하다.
- [66] 본 명세서에 있어서, 상기 화학식 1은 아래 화학식 1-4이다.
- [67] [화학식 1-4]

[68]



- [69] 상기 화학식 1-4에 있어서, 상기 L, Q1, 및 Q2는 상기 화학식 1에서 정의한 것과 같고,
- [70] X1 내지 X3 중 하나는 N이고, 나머지는 각각 N 또는 CR이고,
- [71] R은 중수소, 니트릴기, 니트로기, 할로젠기, 치환 또는 비치환된 알킬기, 치환 또는 비치환된 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기이고,
- [72] X4 내지 X8 중 하나는 N이고, 나머지는 각각 N 또는 CR1이고,
- [73] R1은 중수소, 니트릴기, 니트로기, 할로젠기, 치환 또는 비치환된 알킬기, 치환 또는 비치환된 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기이거나, 인접한 치환기와 서로 결합하여 치환 또는 비치환된 고리를 형성한다.
- [74] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 A는 피리딘, 피리미딘, 트리아진, 퀴놀린, 퀴나졸린, 또는 퀴녹살린이고,
- [75] 상기 피리딘, 피리미딘, 트리아진, 퀴놀린, 퀴나졸린, 또는 퀴녹살린은 각각 독립적으로 중수소, 니트릴기, 니트로기, 할로젠기, 또는 치환 또는 비치환된 알킬기로 치환 또는 비치환된 아릴기로 치환된다.
- [76] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 B는 피리딘, 피리미딘, 또는 트리아진이고, 상기 피리딘, 피리미딘, 또는 트리아진은 각각 독립적으로 중수소, 니트릴

기, 니트로기, 할로젠기, 또는 치환 또는 비치환된 알킬기로 치환 또는 비치환된 아릴기로 치환된다.

[77] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 R1 및 R2는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로, 수소, 중수소, 니트릴기, 니트로기, 할로젠기, 탄소수 1 내지 10의 알킬기, 탄소수 6 내지 30의 아릴기, 또는 탄소수 3 내지 30의 헤테로아릴기이거나, 인접한 기와 결합하여 치환 또는 비치환된 벤젠고리를 형성한다.

[78] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 R1 및 R2는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로, 수소, 중수소, 니트릴기, 니트로기, F, Cl, 메틸기, 에틸기, 프로필기, 터부틸기, 페닐기, 나프틸기, 안트라센기, 비페닐기, 카바졸기, 디벤조퓨란기, 또는 디벤조티오펜기이거나, 인접한 기와 결합하여 벤젠고리를 형성한다.

[79] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, A는 아릴기로 치환된 트리아진, 아릴기로 치환된 피리미딘, 아릴기로 치환된 피리딘, 또는 아릴기로 치환된 퀴나졸기이다.

[80] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, A는 트리아진, 피리미딘, 피리딘, 또는 퀴나졸기이고, 상기 치환기들은 중수소로 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴기로 치환된다.

[81] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, B는 아릴기로 치환된 트리아진, 아릴기로 치환된 피리미딘, 아릴기로 치환된 피리딘, 또는 아릴기로 치환된 퀴나졸기이다.

[82] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, B는 트리아진, 피리미딘, 피리딘, 또는 퀴나졸기이고, 상기 치환기들은 중수소로 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴기로 치환 또는 비치환된다.

[83] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 L은 직접결합, 또는 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴렌기이다.

[84] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 L은 직접결합, 또는 중수소로 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴렌기이다.

[85] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 L은 직접결합, 중수소로 치환 또는 비치환된 페닐기, 또는 중수소로 치환 또는 비치환된 2가의 나프탈렌기이다.

[86] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 L은 직접결합, 페닐렌기, 또는 2가의 나프탈렌기이다.

[87] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 Q1 및 Q2 중 하나는 탄소수 6 내지 30의 아릴기이고, 나머지는 수소 또는 탄소수 6 내지 30의 아릴기이고,

[88] Q1 및 Q2 중 하나가 수소인 경우, 나머지는 중수소, 니트로기, 할로젠기, 알킬기, 아릴기, 및 헤테로아릴기 중 선택되는 하나 이상의 치환기로 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴기이고,

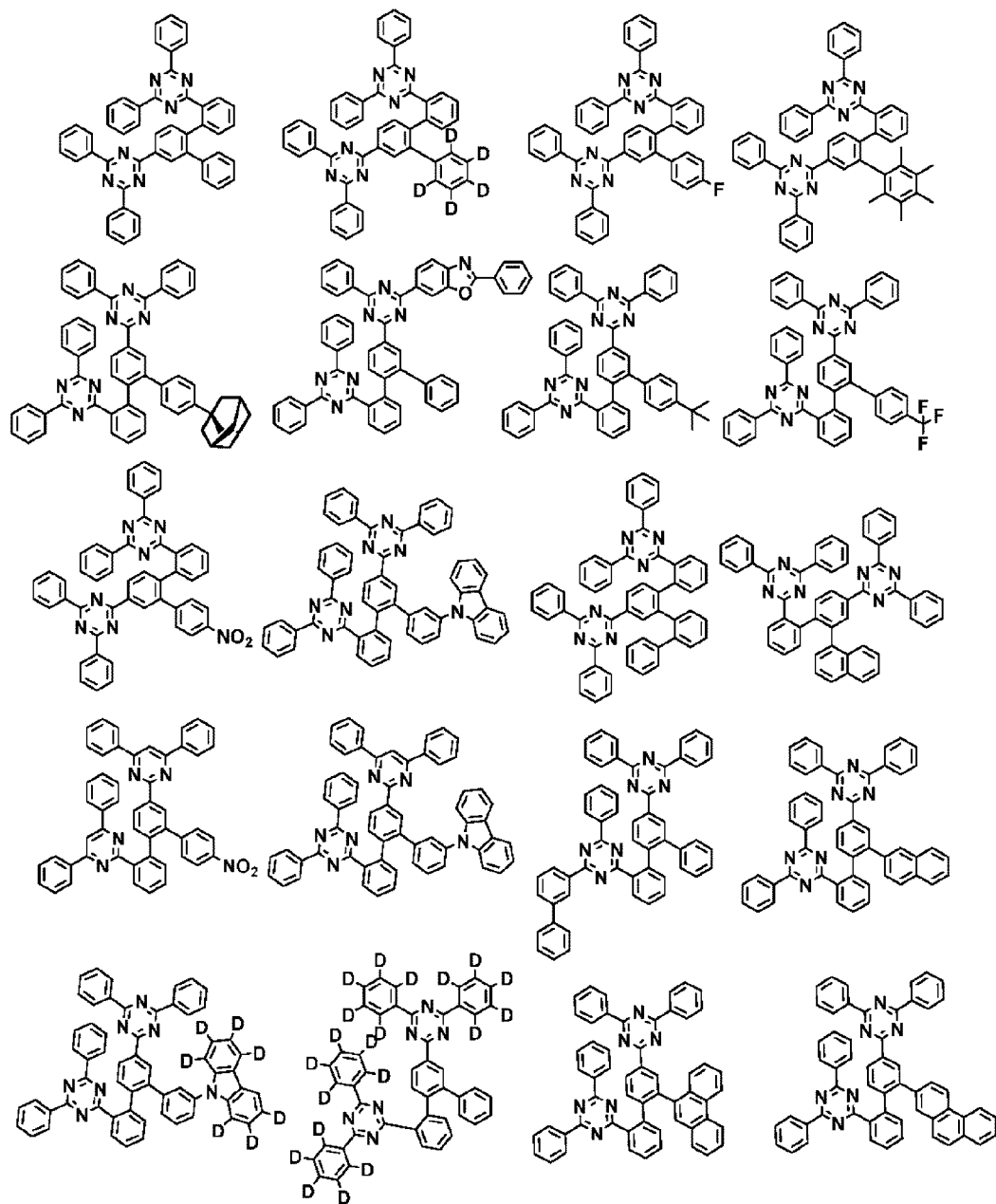
[89] Q1 및 Q2가 모두 탄소수 6 내지 30의 아릴기일 때, 상기 탄소수 6 내지 30의 아릴기는 중수소, 니트릴기, 니트로기, 할로젠기, 알킬기, 아릴기, 및 헤테로아릴기 중 선택되는 하나 이상의 치환기로 치환 또는 비치환된다.

[90] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 Q1 및 Q2 중 하나가 수소일 때, 나머지는 페닐기, 나프틸기, 페난트렌기, 플루오란텐기, 또는 페난트렌기이고, 상기 치

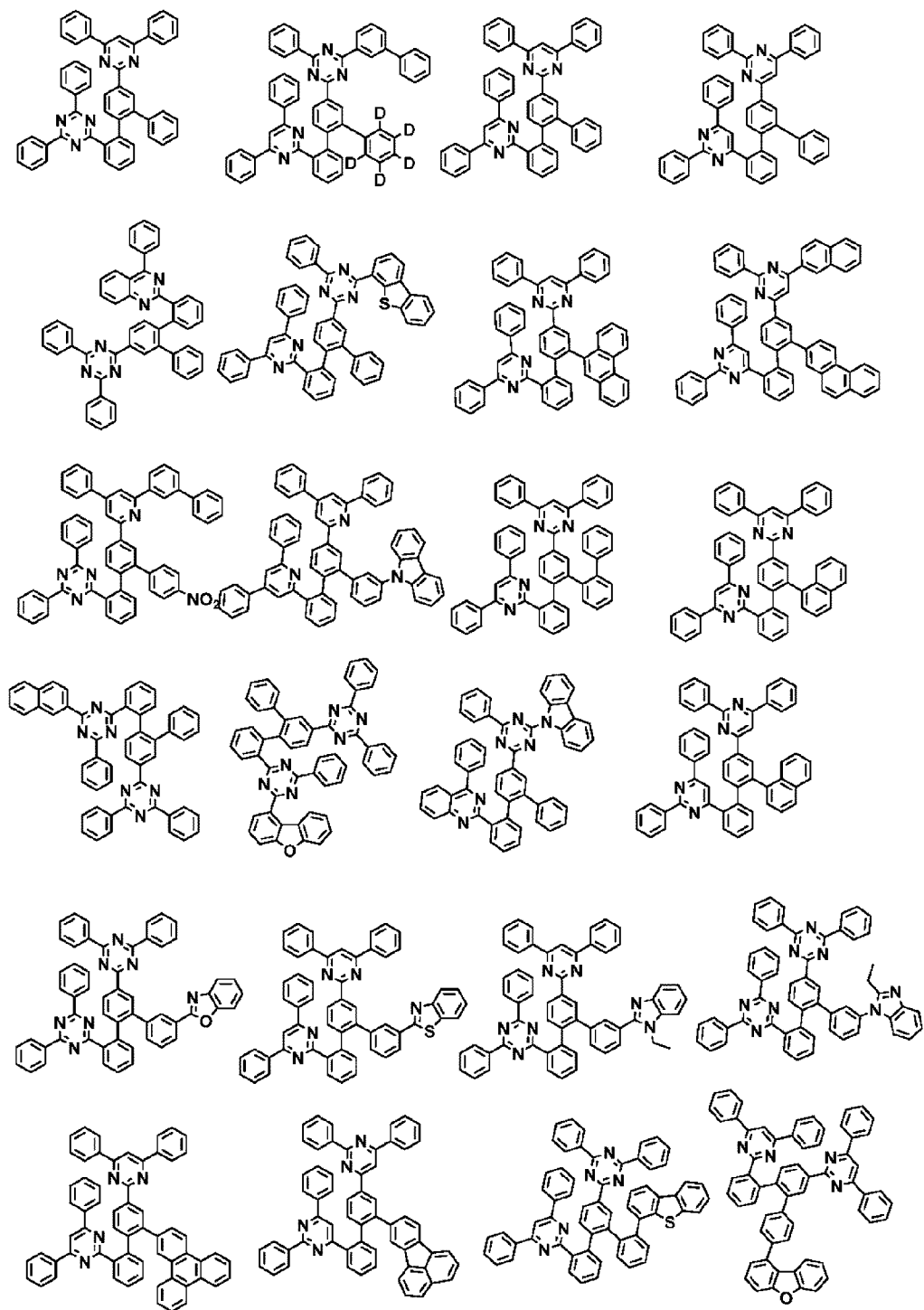
환기는 중수소, 니트로기, F, 탄소수 1 내지 10의 알킬기, 탄소수 1 내지 10의 할로알킬기, 탄소수 3 내지 10의 시클로알킬기, 또는 중수소 및 탄소수 1 내지 10의 알킬기로 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 30의 헤테로아릴기로 치환 또는 비치환된다.

- [91] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 Q1 및 Q2는 페닐기, 나프틸기, 페난트렌기, 플루오란텐기, 또는 페난트렌기일 때, 상기 치환기는 중수소, 니트로기, 니트릴기, F, 탄소수 1 내지 10의 알킬기, 탄소수 1 내지 10의 할로알킬기, 탄소수 3 내지 10의 시클로알킬기, 또는 중수소 및 탄소수 1 내지 10의 알킬기로 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 30의 헤테로아릴기로 치환 또는 비치환된다.
- [92] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 Q1 및 Q2는 페닐기, 나프틸기, 페난트렌기, 플루오란텐기, 또는 페난트렌기일 때, 상기 치환기는 중수소, 니트릴기, F, 메틸기, F로 치환된 메틸기, 터부틸기, 디벤조퓨란기, 디벤조티오펜기, 아다만틸기, 니트로기, 중수소로 치환 또는 비치환된 카바졸기, 벤조티아졸기, 벤조옥사졸기, 또는 에틸기로 치환 또는 비치환된 벤즈이미다졸기로 치환 또는 비치환된다.
- [93] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 Q1 및 Q2 중 하나가 수소일 때, 나머지는 페닐기, 나프틸기, 페난트렌기, 플루오란텐기, 또는 페난트렌기일 때, 상기 치환기는 중수소, F, 메틸기, F로 치환된 메틸기, 터부틸기, 디벤조퓨란기, 디벤조티오펜기, 아다만틸기, 니트로기, 중수소로 치환 또는 비치환된 카바졸기, 벤조티아졸기, 벤조옥사졸기, 또는 에틸기로 치환 또는 비치환된 벤즈이미다졸기로 치환 또는 비치환된다.
- [94] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 Q1 및 Q2는 페닐기, 나프틸기, 페난트렌기, 플루오란텐기, 또는 페난트렌기일 때, 상기 페닐기는 중수소, 니트릴기, F, 메틸기, F로 치환된 메틸기, 터부틸기, 디벤조퓨란기, 디벤조티오펜기, 아다만틸기, 니트로기, 중수소로 치환 또는 비치환된 카바졸기, 벤조티아졸기, 벤조옥사졸기, 또는 에틸기로 치환 또는 비치환된 벤즈이미다졸기로 치환 또는 비치환되고,
- [95] 상기 나프틸기, 페난트렌기, 플루오란텐기, 및 페난트렌기는 비치환된다.
- [96] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 Q1 및 Q2 중 하나가 수소일 때, 나머지는 페닐기, 나프틸기, 페난트렌기, 플루오란텐기, 또는 페난트렌기일 때, 상기 페닐기는 중수소, F, 메틸기, F로 치환된 메틸기, 터부틸기, 디벤조퓨란기, 디벤조티오펜기, 아다만틸기, 니트로기, 중수소로 치환 또는 비치환된 카바졸기, 벤조티아졸기, 벤조옥사졸기, 또는 에틸기로 치환 또는 비치환된 벤즈이미다졸기로 치환 또는 비치환되고,
- [97] 상기 나프틸기, 페난트렌기, 플루오란텐기, 및 페난트렌기는 비치환된다.
- [98] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 화학식 1은 아래 구조식 중 어느 하나이다.

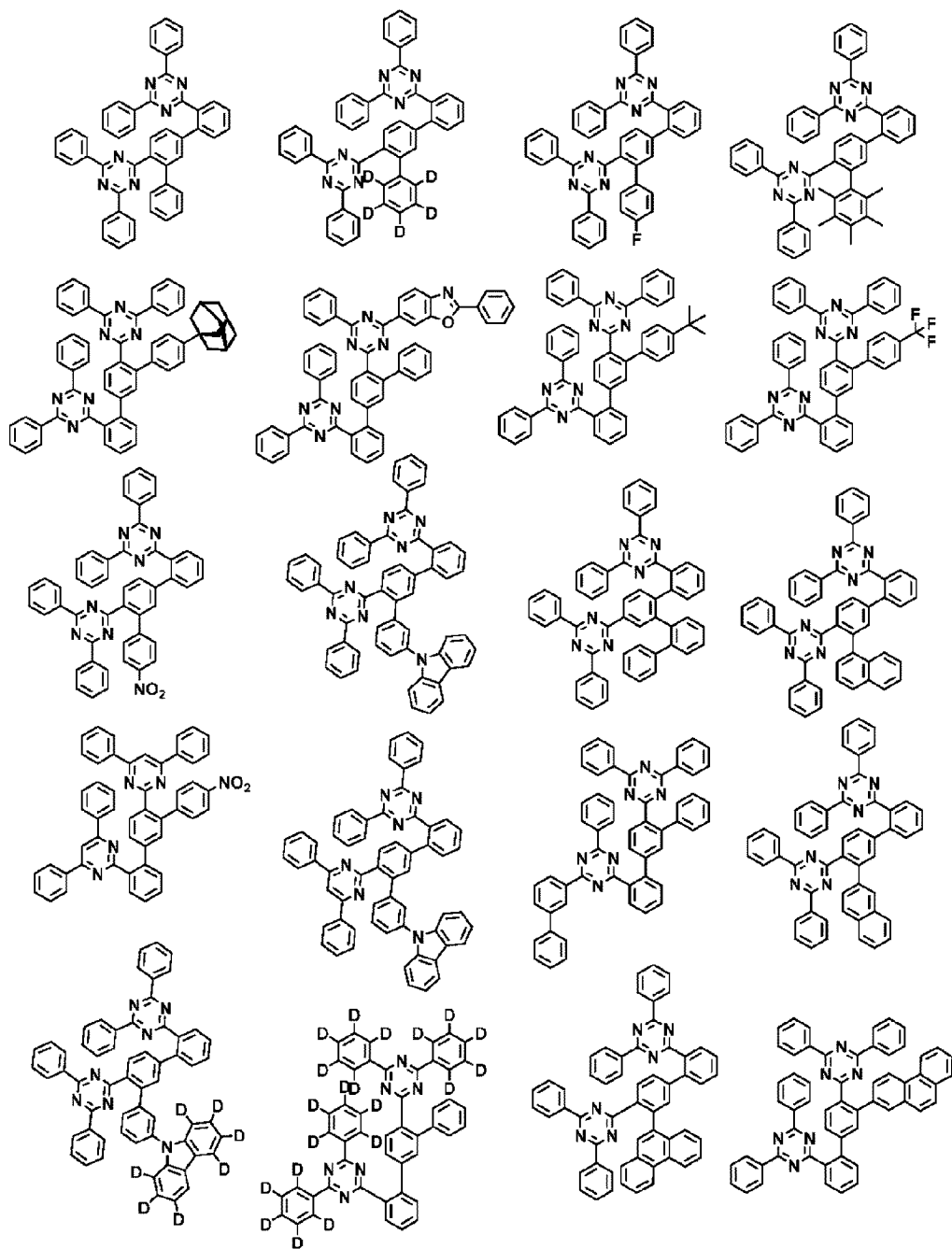
[99]



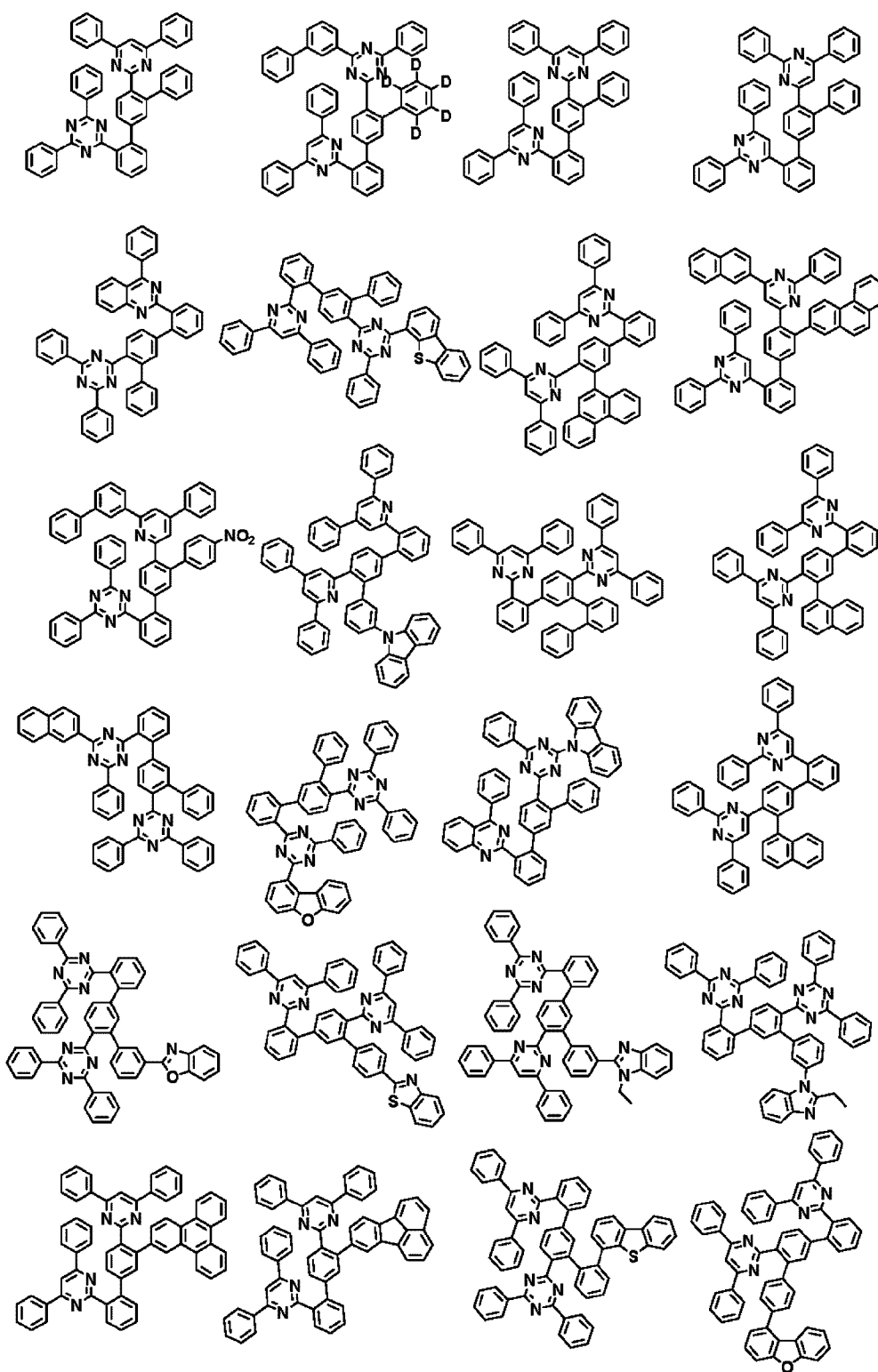
[100]



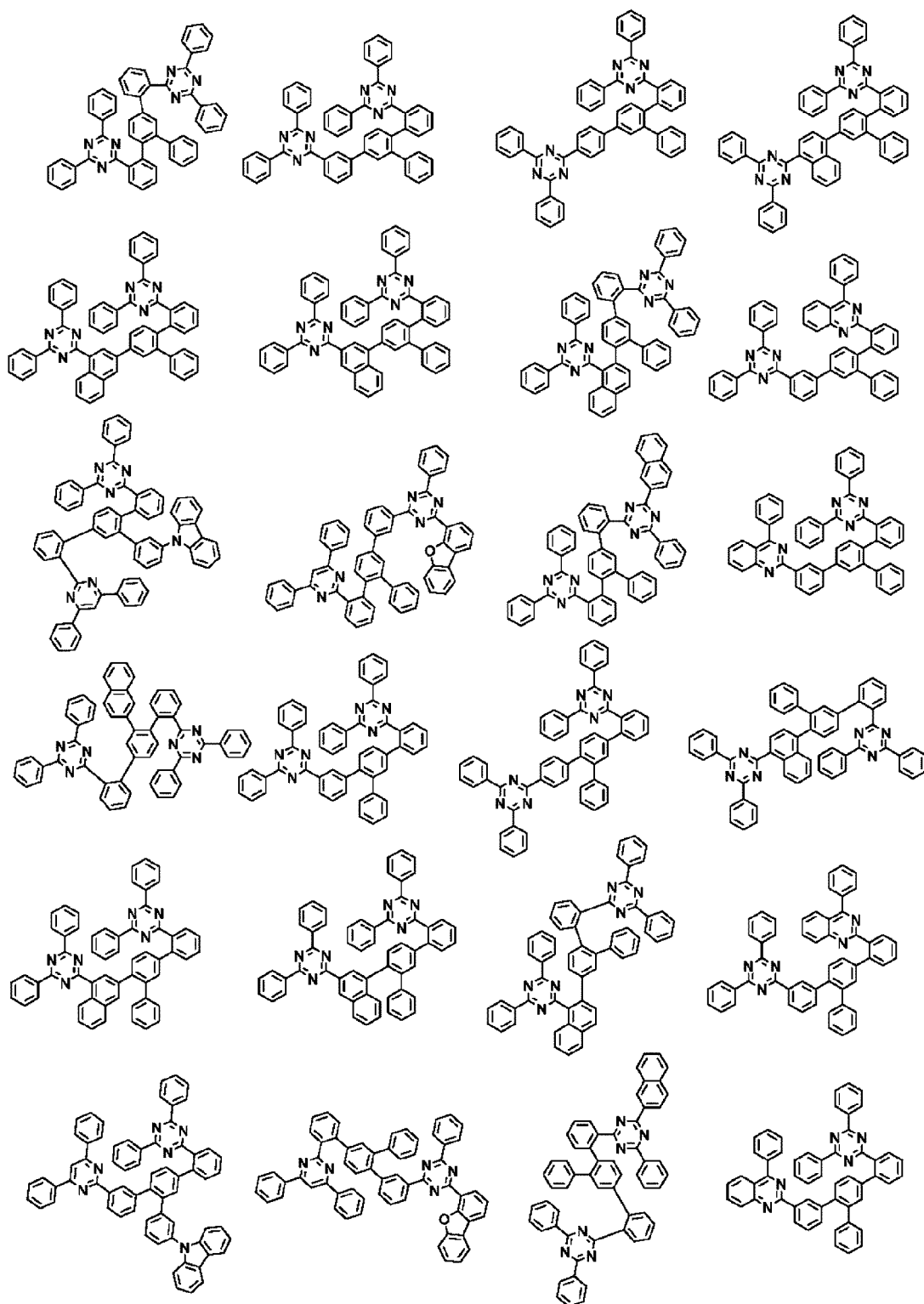
[101]



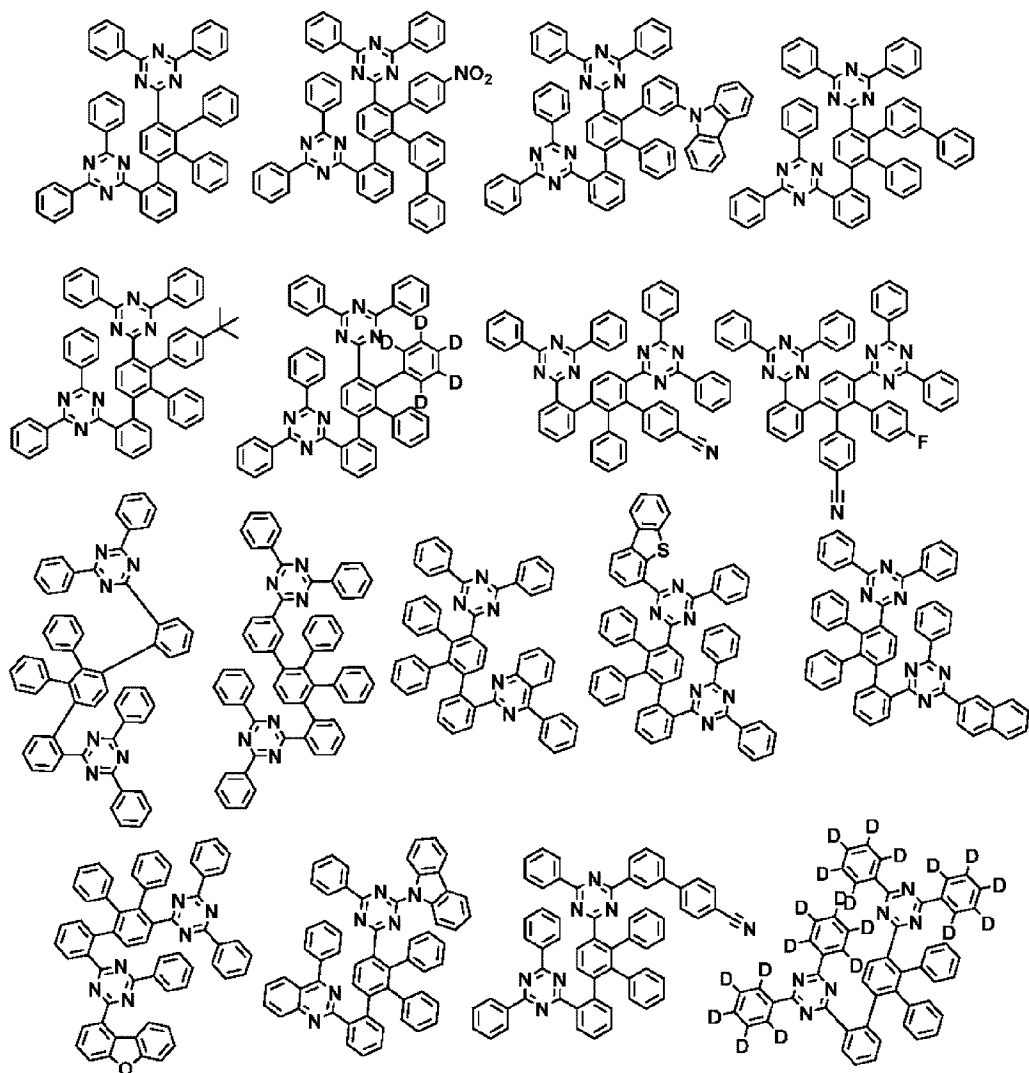
[102]



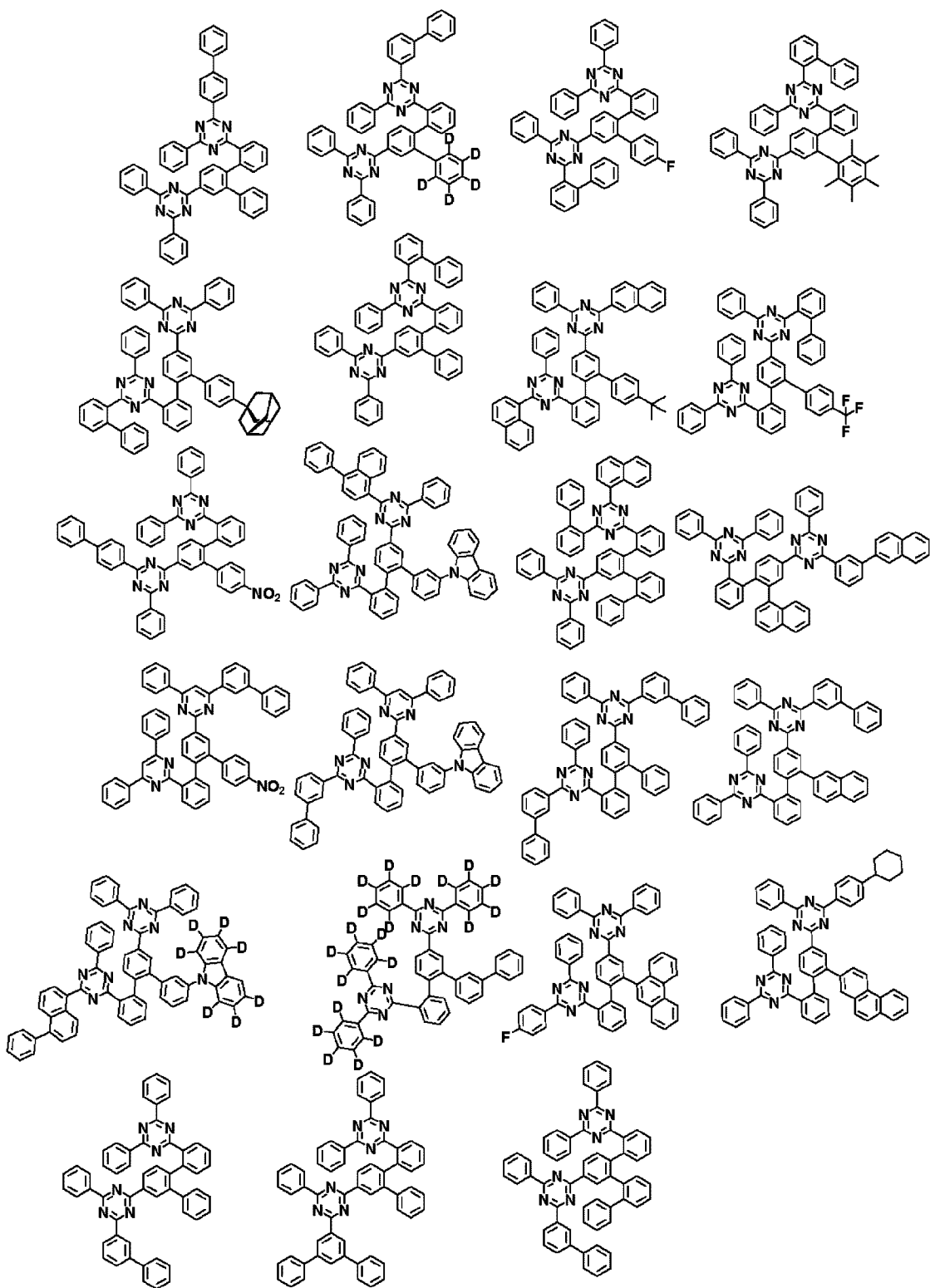
[103]



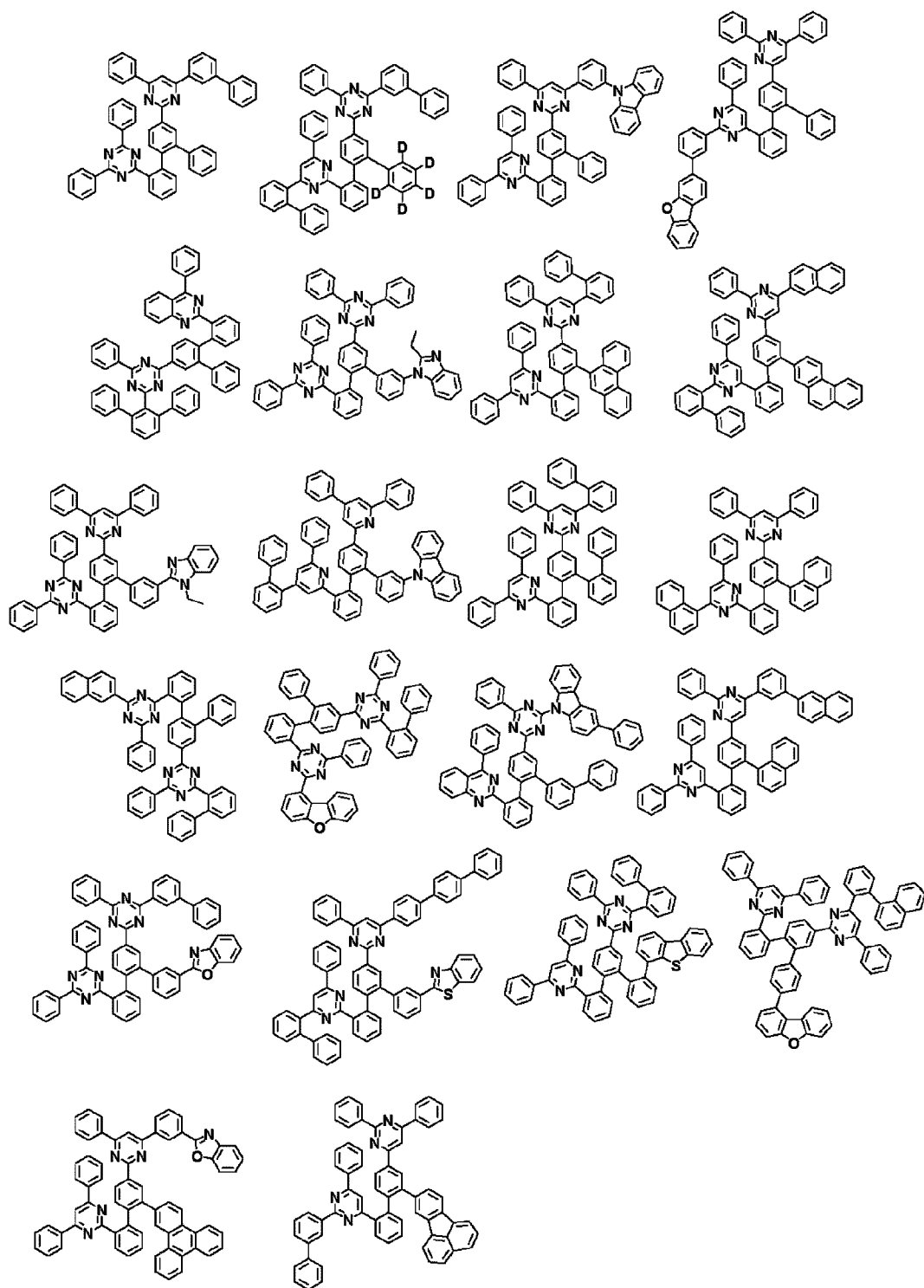
[104]



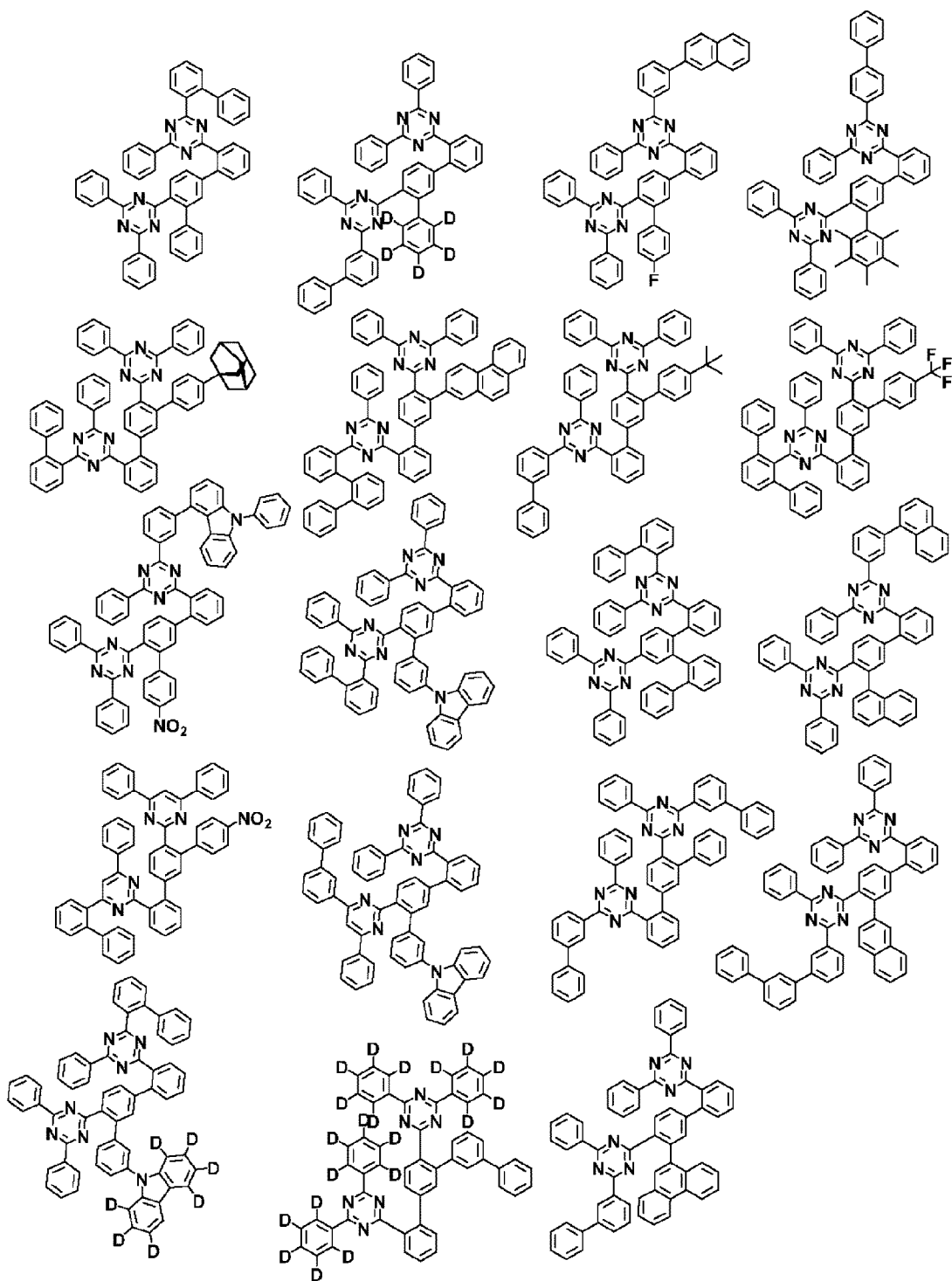
[105]



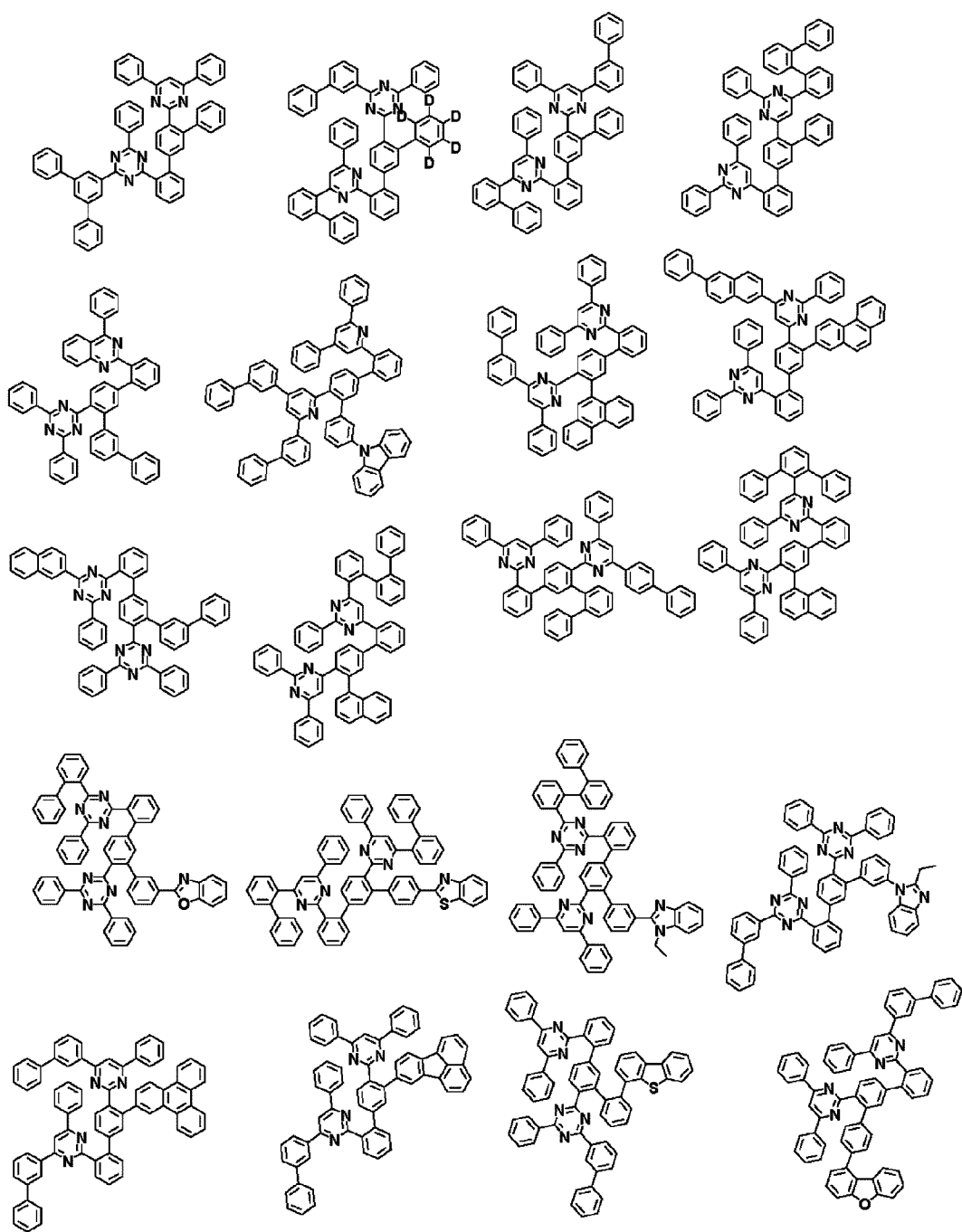
[106]



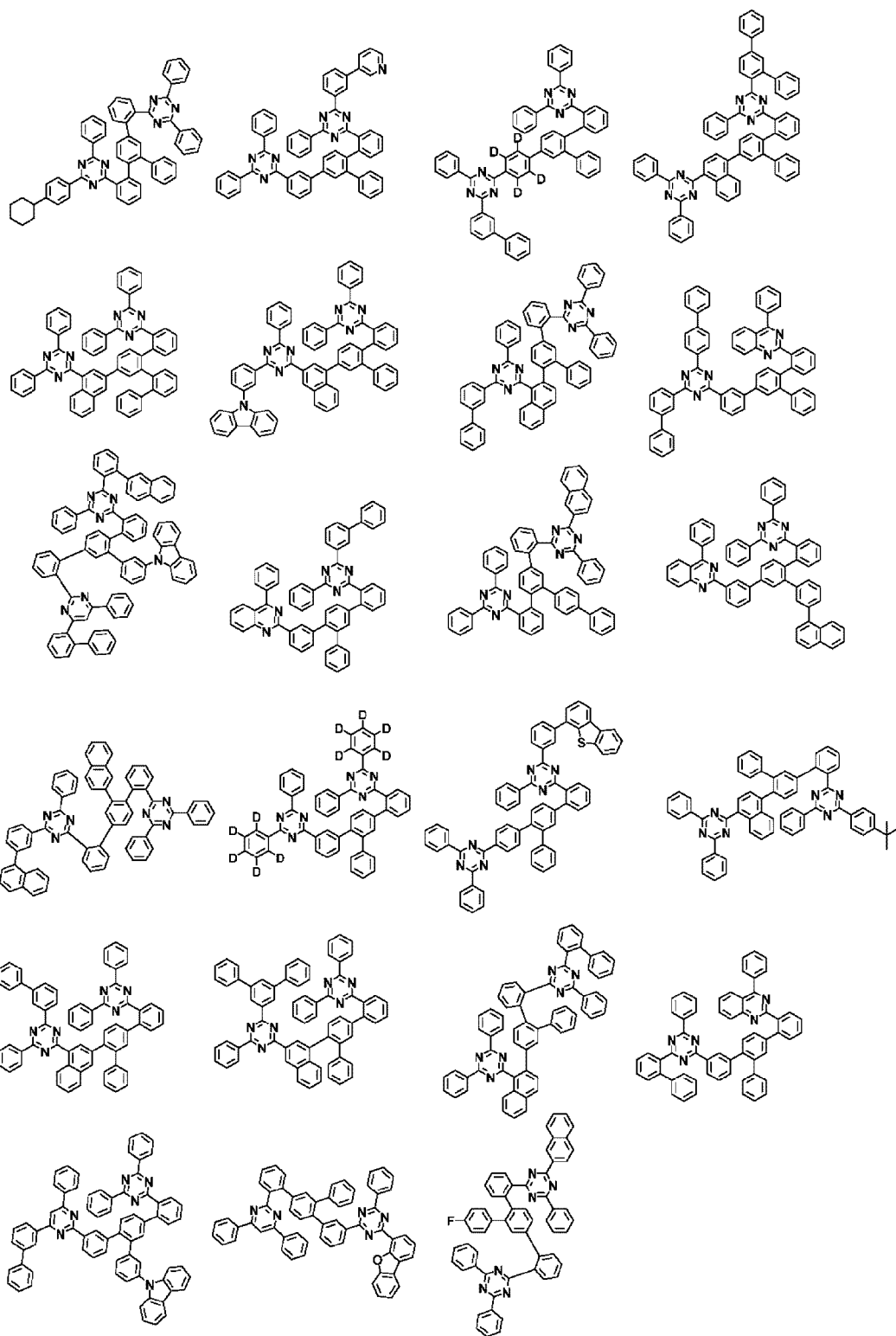
[107]



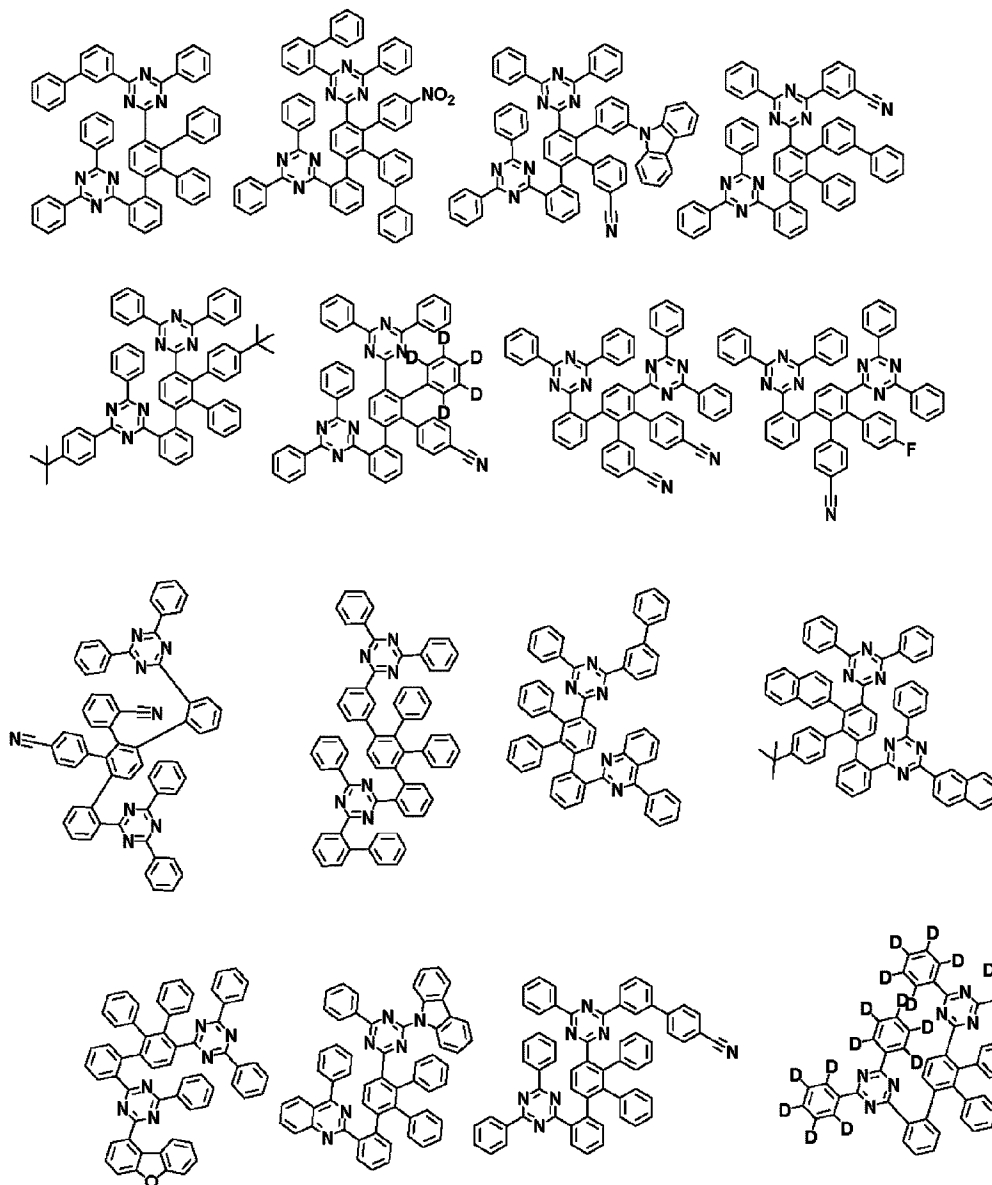
[108]



[109]



[110]



[111] 상기 화학식 1의 화합물의 치환기는 당 기술분야에 알려져 있는 방법에 의하여 결합될 수 있으며, 치환기의 종류, 위치 또는 개수는 당 기술분야에 알려져 있는 기술에 따라 변경될 수 있다.

[112] 또한, 상기와 같은 구조의 코어 구조에 다양한 치환기를 도입함으로써 도입된 치환기의 고유 특성을 갖는 화합물을 합성할 수 있다. 예컨대, 유기 발광 소자 제조시 사용되는 정공 주입층 물질, 정공 수송층 물질, 발광층 물질 및 전자 수송층 물질에 주로 사용되는 치환기를 상기 코어 구조에 도입함으로써 각 유기물층에서 요구하는 조건들을 충족시키는 물질을 합성할 수 있다.

[113] 또한, 본 발명에 따른 유기 발광 소자는 제1 전극; 상기 제1 전극과 대향하여 구비되는 제2 전극; 및 상기 제1 전극과 상기 제2 전극 사이에 구비되는 1층 이상의 유기물층을 포함하는 유기 발광 소자로서, 상기 유기물층 중 1층 이상은 상기 전술한 화합물을 포함하는 것을 특징으로 한다.

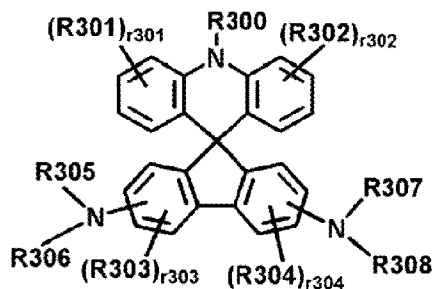
- [114] 본 발명의 유기 발광 소자는 전술한 화합물을 이용하여 한 층 이상의 유기물층을 형성하는 것을 제외하고는, 통상의 유기 발광 소자의 제조방법 및 재료에 의하여 제조될 수 있다.
- [115] 상기 화합물은 유기 발광 소자의 제조시 진공 증착법 뿐만 아니라 용액 도포법에 의하여 유기물층으로 형성될 수 있다. 여기서, 용액 도포법이라 함은 스핀 코팅, 딥 코팅, 잉크젯 프린팅, 스크린 프린팅, 스프레이법, 롤 코팅 등을 의미하지만, 이들만으로 한정되는 것은 아니다.
- [116] 본 발명의 유기 발광 소자의 유기물층은 단층 구조로 이루어질 수도 있으나, 2층 이상의 유기물층이 적층된 다층 구조로 이루어질 수 있다. 예컨대, 본 발명의 유기 발광 소자는 유기물층으로서 정공주입층, 정공수송층, 정공주입 및 정공수송을 동시에 하는 층, 발광층, 전자수송층, 전자주입층 등을 포함하는 구조를 가질 수 있다. 그러나, 유기 발광 소자의 구조는 이에 한정되지 않고 더 적은 수의 유기물층 또는 더 많은 수의 유기물층을 포함할 수 있다.
- [117] 본 발명의 유기 발광 소자에서, 상기 유기물층은 전자수송층, 전자주입층, 및 전자주입 및 수송 층 중 1층 이상을 포함할 수 있고, 상기 층들 중 1층 이상이 상기 화학식 1의 화합물을 포함한다.
- [118] 또 하나의 유기 발광 소자에서, 상기 유기물층은 전자수송층 또는 전자주입층을 포함할 수 있고, 상기 전자수송층 또는 전자주입층이 상기 화학식 1의 화합물을 포함한다.
- [119] 본 발명의 유기 발광 소자에서, 상기 전자주입 및 수송층은 상기 화학식 1의 화합물과 금속 착체를 포함한다.
- [120] 본 발명의 유기 발광 소자에서, 상기 유기물층은 정공주입층, 정공수송층 및 정공주입과 정공수송을 동시에 하는 층 중 1층 이상을 포함할 수 있고, 상기 층들 중 1층 이상이 상기 화학식 1의 화합물을 포함한다.
- [121] 또 하나의 유기 발광 소자에서, 상기 유기물층은 정공주입층 또는 정공수송층을 포함할 수 있고, 상기 정공수송층 또는 정공주입층이 상기 화학식 1의 화합물을 포함할 수 있다.
- [122] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 제1 전극은 양극이고, 제2 전극은 음극이다.
- [123] 또 하나의 일 실시상태에 따르면, 상기 제1 전극은 음극이고, 제2 전극은 양극이다.
- [124] (1) 양극/정공수송층/발광층/음극
- [125] (2) 양극/정공주입층/정공수송층/발광층/음극
- [126] (3) 양극/정공주입층/정공버퍼층/정공수송층/발광층/음극
- [127] (4) 양극/정공수송층/발광층/전자수송층/음극
- [128] (5) 양극/정공수송층/발광층/전자수송층/전자주입층/음극
- [129] (6) 양극/정공주입층/정공수송층/발광층/전자수송층/음극
- [130] (7) 양극/정공주입층/정공수송층/발광층/전자수송층/전자주입층/음극

- [131] (8) 양극/정공주입층/정공버퍼층/정공수송층/발광층/전자수송층/음극
- [132] (9) 양극/정공주입층/정공버퍼층/정공수송층/발광층/전자수송층/전자주입층 / 음극
- [133] (10) 양극/ 정공수송층/전자억제층/발광층/전자수송층/음극
- [134] (11) 양극/ 정공수송층/전자억제층/발광층/전자수송층/전자주입층/음극
- [135] (12) 양극/정공주입층/정공수송층/전자억제층/발광층/전자수송층/음극
- [136] (13)양극/정공주입층/정공수송층/전자억제층/발광층/전자수송층/전자주입 층/ 음극
- [137] (14) 양극/정공수송층/발광층/정공억제층/전자수송층/음극
- [138] (15) 양극/정공수송층/발광층/ 정공억제층/전자수송층/전자주입층/음극
- [139] (16) 양극/정공주입층/정공수송층/발광층/정공억제층/전자수송층/음극
- [140] (17)양극/정공주입층/정공수송층/발광층/정공억제층/전자수송층/전자주입 층/ 음극
- [141] (18)양극/정공주입층/정공수송층/전자억제층/발광층/정공저지층/전자주입및 수송층/음극
- [142] 본 발명의 유기 발광 소자의 구조는 도 1 및 2에 나타낸 것과 같은 구조를 가질 수 있으나, 이에만 한정되는 것은 아니다.
- [143] 도 1에는 기판(1) 위에 양극(2), 유기물층(3) 및 음극(4)이 순차적으로 적층된 유기 발광 소자의 구조가 예시되어 있다. 이와 같은 구조에 있어서, 상기 화학식 1의 화합물은 상기 유기물층(3)에 포함될 수 있다.
- [144] 도 2에는 기판(1) 위에 양극(2), 정공주입층(5), 정공수송층(6), 발광층(7), 전자주입 및 수송층(8), 및 음극(4)이 순차적으로 적층된 유기 발광 소자의 구조가 예시되어 있다. 이와 같은 구조에 있어서, 상기 화학식 1의 화합물은 상기 전자주입 및 수송층(8)에 포함된다.
- [145] 예컨대, 본 발명에 따른 유기 발광 소자는 스퍼터링(sputtering)이나 전자빔 증발(e-beam evaporation)과 같은 PVD(physical vapor deposition) 방법을 이용하여, 기판 상에 금속 또는 전도성을 가지는 금속 산화물 또는 이들의 합금을 증착시켜 양극을 형성하고, 그 위에 정공주입층, 정공수송층, 정공수송 및 정공주입을 동시에 하는 층, 발광층, 전자수송층, 전자주입층, 및 전자수송 및 전자주입을 동시에 하는 층으로 이루어진 균으로부터 선택된 1층 이상을 포함하는 유기물층을 형성한 후, 그 위에 음극으로 사용할 수 있는 물질을 증착시킴으로써 제조될 수 있다. 이와 같은 방법 외에도, 기판 상에 음극 물질부터 유기물층, 양극 물질을 차례로 증착시켜 유기 발광 소자를 만들 수도 있다.
- [146] 상기 유기물층은 정공주입층, 정공수송층, 발광층 및 전자수송층 등을 포함하는 다층 구조일 수도 있으나, 이에 한정되지 않고 단층 구조일 수 있다. 또한, 상기 유기물층은 다양한 고분자 소재를 사용하여 증착법이 아닌 용매 공정(solvent process), 예컨대 스핀 코팅, 딥 코팅, 닥터 블레이딩, 스크린 프린팅, 잉크젯 프린팅 또는 열 전사법 등의 방법에 의하여 더 적은 수의 층으로 제조할 수 있다.

- [147] 상기 양극은 정공을 주입하는 전극으로, 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, Indium Tin Oxide), 인듐아연 산화물(IZO, Indium Zinc Oxide)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.
- [148] 상기 음극은 전자를 주입하는 전극으로, 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/Al과 같은 다층 구조 물질 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.
- [149] 상기 정공주입층은 양극으로부터 발광층으로 정공의 주입을 원활하게 하는 역할을 하는 층이며, 정공 주입 물질로는 낮은 전압에서 양극으로부터 정공을 잘 주입 받을 수 있는 물질로서, 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(porphyrine), 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. 정공주입층의 두께는 1 내지 150nm일 수 있다. 상기 정공주입층의 두께가 1nm 이상이면, 정공 주입 특성이 저하되는 것을 방지할 수 있는 이점이 있고, 150nm 이하이면, 정공주입층의 두께가 너무 두꺼워 정공의 이동을 향상시키기 위해 구동전압이 상승되는 것을 방지할 수 있는 이점이 있다.
- [150] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 정공주입층은 하기 화학식 HI-1로 표시되는 화합물을 포함하나, 이에만 한정되는 것은 아니다.

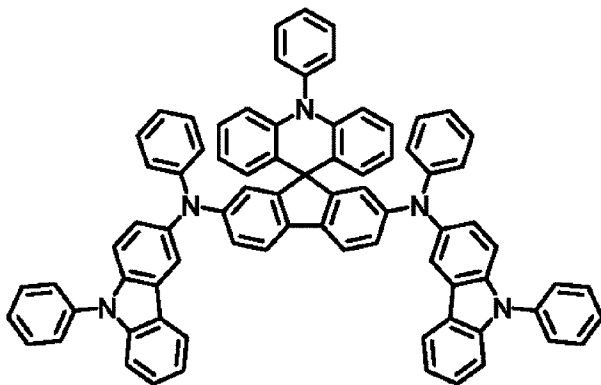
[151] [화학식 HI-1]

[152]



[153] 상기 화학식 HI-1에 있어서,

- [170]

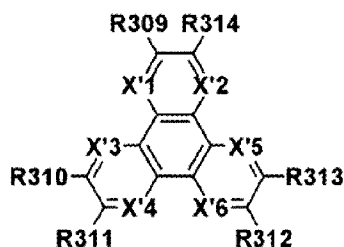


[171] 상기 정공수송층은 정공의 수송을 원활하게 하는 역할을 할 수 있다. 정공 수송 물질로는 양극이나 정공 주입층으로부터 정공을 수송받아 발광층으로 옮겨줄 수 있는 물질로 정공에 대한 이동성이 큰 물질이 적합하다. 구체적인 예로는 아릴아민 계열의 유기물, 전도성 고분자, 및 공액 부분과 비공액 부분이 함께 있는 블록 공중합체 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.

[172] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 정공수송층은 하기 화학식 HT-1로 표시되는 화합물을 포함하나, 이에만 한정되는 것은 아니다.

[173] [화학식 HT-1]

[174]



[175] 상기 화학식 HT-1에 있어서,

[176] X'1 내지 X'6 중 적어도 하나는 N이고, 나머지는 CH이며,

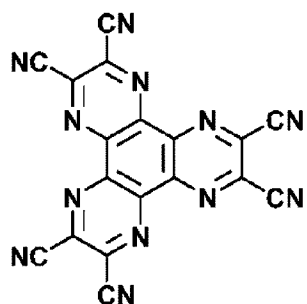
[177] R309 내지 R314는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; 중수소; 니트릴기; 치환 또는 비치환된 알킬기; 치환 또는 비치환된 아민기; 치환 또는 비치환된 아릴기; 또는 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기이거나, 인접한 기와 서로 결합하여 치환 또는 비치환된 고리를 형성한다.

[178] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 X'1 내지 X'6는 N이다.

[179] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 R309 내지 R314는 니트릴기다.

[180] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 화학식 HT-1은 하기 화합물로 표시된다.

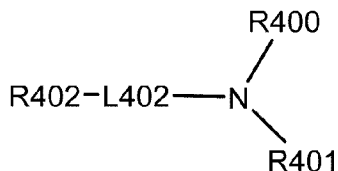
[181]



[182] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 정공수송층은 하기 화학식 HT-2로 표시되는 화합물을 포함하나, 이에만 한정되는 것은 아니다.

[183] [화학식 HT-2]

[184]



[185] 상기 화학식 HT-2에 있어서,

[186] R400 내지 R402는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; 중수소; 치환 또는 비치환된 알킬기; 치환 또는 비치환된 아릴기; 치환 또는 비치환된 아민기; 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기; 및 이들의 조합으로 이루어진 군에서 선택되는 어느 하나이거나, 인접한 기와 서로 결합하여 치환 또는 비치환된 고리를 형성하고,

[187] L402는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 아릴렌기, 또는 치환 또는 비치환된 헤테로아릴렌기이다.

[188] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 R400 내지 R402는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 아릴기; 치환 또는 비치환된 아민기; 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기; 및 이들의 조합으로 이루어진 군에서 선택되는 어느 하나이다.

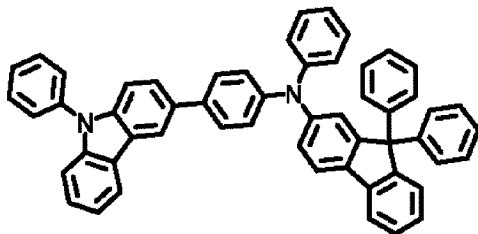
[189] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 R400 및 R401는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 아릴기이거나, 인접한 기와 서로 결합하여 알킬기로 치환된 방향족 탄화수소고리를 형성한다.

[190] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 R400 및 R401는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 페닐기 또는 디페닐플루오렌기이다.

[191] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 R402는 페닐기로 치환 또는 비치환된 카바졸기이다.

[192] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 화학식 HT-2는 하기 화합물들 선택된다.

[193]



[194] 정공수송층과 발광층 사이에 전자억제층이 구비될 수 있다. 상기 전자억제층은 전술한 스피로 화합물 또는 당 기술분야에 알려져 있는 재료가 사용될 수 있다.

[195] 상기 발광층은 적색, 녹색 또는 청색을 발광할 수 있으며, 인광 물질 또는 형광 물질로 이루어질 수 있다. 상기 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. 구체

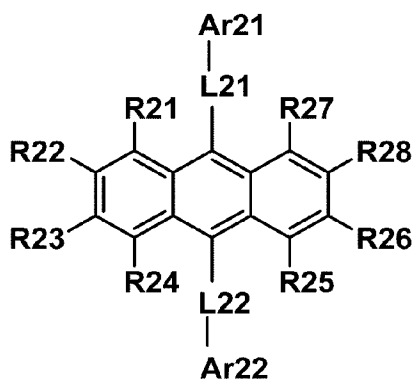
적인 예로는 8-히드록시-퀴놀린 알루미늄 착물(Alq_3); 카르바졸 계열 화합물; 이량체화 스티릴(dimerized styryl) 화합물; BAIq ; 10-히드록시벤조 퀴놀린-금속 화합물; 벤조사졸, 벤즈티아졸 및 벤즈이미다졸 계열의 화합물; 폴리(p-페닐렌비닐렌)(PPV) 계열의 고분자; 스피로(spiro) 화합물; 폴리플루오렌, 루브렌 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.

[196] 발광층의 호스트 재료로는 축합 방향족환 유도체 또는 헤테로환 함유 화합물 등이 있다. 구체적으로 축합 방향족환 유도체로는 안트라센 유도체, 피렌 유도체, 나프탈렌 유도체, 펜타센 유도체, 페난트렌 화합물, 플루오란텐 화합물 등이 있고, 헤테로환 함유 화합물로는 카바졸 유도체, 디벤조퓨란 유도체, 래더형 퓨란 화합물, 피리미딘 유도체 등이 있으나, 이에 한정되지 않는다.

[197] 본 명세서의 일 실시상태에 따른 유기 발광 소자는 발광층을 포함하고, 상기 발광층은 호스트 물질로 하기 화학식 H로 표시되는 화합물을 포함한다.

[198] [화학식 H]

[199]



[200] 상기 화학식 H에 있어서,

[201] L_{21} 및 L_{22} 는 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 직접결합; 치환 또는 비치환된 아릴렌기; 또는 치환 또는 비치환된 헤테로아릴렌기이고,

[202] R_{21} 내지 R_{28} 은 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; 중수소; 치환 또는 비치환된 알킬기; 치환 또는 비치환된 시클로알킬기; 치환 또는 비치환된 실릴기; 치환 또는 비치환된 아릴기; 또는 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기이고,

[203] Ar_{21} 및 Ar_{22} 는 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 아릴기; 또는 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기이고,

[204] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 R_{21} 내지 R_{28} 은 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소 또는 중수소이다.

[205] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 Ar_{21} 및 Ar_{22} 는 서로 상이하다.

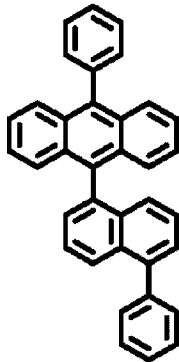
[206] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 Ar_{21} 및 Ar_{22} 는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 아릴기이다.

[207] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 Ar_{21} 및 Ar_{22} 는 나프틸기이다.

[208] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 L21 및 L22는 서로 동일하거나 상이하고, 각각 독립적으로 직접결합; 치환 또는 비치환된 페닐렌기; 치환 또는 비치환된 비페닐렌기; 치환 또는 비치환된 나프틸렌기; 치환 또는 비치환된 2가의 디벤조퓨란기; 또는 치환 또는 비치환된 2가의 디벤조티오펜기이다.

[209] 본 명세서의 일 실시상태에 있어서, 상기 화학식 H는 하기 화합물로 표시된다.

[210]

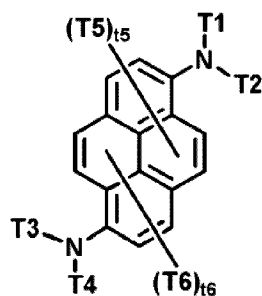


[211] 발광층이 적색 발광을 하는 경우, 발광 도펀트로는 PIQIr(acac) (bis(1-phenylisoquinoline)acetylacetonateiridium), PQIr(acac)(bis(1-phenylquinoline)acetylacetonate iridium), PQIr(tris(1-phenylquinoline)iridium), PtOEP(octaethylporphyrin platinum)와 같은 인광 물질이나, Alq₃(tris(8-hydroxyquinolino)aluminum)와 같은 형광 물질이 사용될 수 있으나, 이에만 한정된 것은 아니다. 발광층이 녹색 발광을 하는 경우, 발광 도펀트로는 Ir(ppy)₃(fac tris(2-phenylpyridine)iridium)와 같은 인광물질이나, Alq₃(tris(8-hydroxyquinolino)aluminum)와 같은 형광 물질이 사용될 수 있으나, 이에만 한정된 것은 아니다. 발광층이 청색 발광을 하는 경우, 발광 도펀트로는 (4,6-F2ppy)₂Iripic와 같은 인광 물질이나, spiro-DPVBi, spiro-6P, 디스틸벤젠(DSB), 디스트릴아릴렌(DSA), PFO계 고분자, PPV계 고분자와 같은 형광 물질이 사용될 수 있으나, 이에만 한정된 것은 아니다.

[212] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 도펀트는 하기 화학식 D-1로 표시되는 화합물을 포함하나, 이에만 한정되는 것은 아니다.

[213] [화학식 D-1]

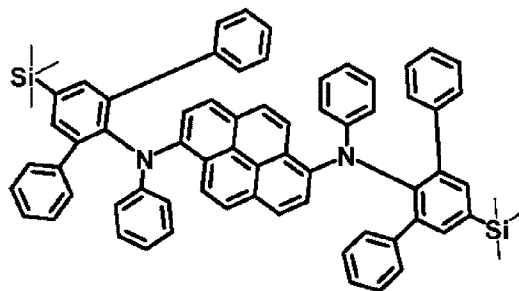
[214]



[215] 상기 화학식 D-1에 있어서,

- [216] T1 내지 T6은 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; 치환 또는 비치환된 알킬기; 치환 또는 비치환된 아릴기; 또는 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기이고,
- [217] t5 및 t6은 각각 1 내지 4의 정수이며,
- [218] 상기 t5가 2 이상인 경우, 상기 2 이상의 T5는 서로 같거나 상이하고,
- [219] 상기 t6가 2 이상인 경우, 상기 2 이상의 T6는 서로 같거나 상이하다.
- [220] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 T1 내지 T6은 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 30의 직쇄 또는 분지쇄의 알킬기; 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 단환 또는 다환의 아릴기; 또는 치환 또는 비치환된 탄소수 2 내지 30의 단환 또는 다환의 헤테로아릴기이다.
- [221] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 T1 내지 T6은 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; 탄소수 1 내지 30의 직쇄 또는 분지쇄의 알킬기; 니트릴기, 또는 탄소수 1 내지 30의 직쇄 또는 분지쇄의 알킬기로 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 단환 또는 다환의 아릴기; 또는 탄소수 2 내지 30의 단환 또는 다환의 헤테로아릴기이다.
- [222] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 T1 내지 T6은 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소; 이소프로필기; 메틸기로 치환된 페닐기; 또는 디벤조퓨란기이다.
- [223] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 화학식 D-1는 하기 화합물로 표시된다.

[224]



- [225] 전자수송층과 발광층 사이에 정공억제층이 구비될 수 있으며, 당 기술분야에 알려져 있는 재료가 사용될 수 있다.
- [226] 상기 전자수송층은 전자의 수송을 원활하게 하는 역할을 할 수 있다. 전자 수송 물질로는 음극으로부터 전자를 잘 주입 받아 발광층으로 옮겨줄 수 있는 물질로서, 전자에 대한 이동성이 큰 물질이 적합하다. 구체적인 예로는 8-히드록시퀴놀린의 Al 착물; Alq₃를 포함한 착물; 유기 라디칼 화합물; 히드록시플라본-금속 착물 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다. 전자수송층의 두께는 1 내지 50nm일 수 있다. 전자수송층의 두께가 1nm 이상이면, 전자 수송 특성이 저하되는 것을 방지할 수 있는 이점이 있고, 50nm 이하이면, 전자수송층의 두께가 너무 두꺼워 전자의 이동을 향상시키기 위해 구동전압이 상승되는 것을 방지할 수 있는 이점이 있다.

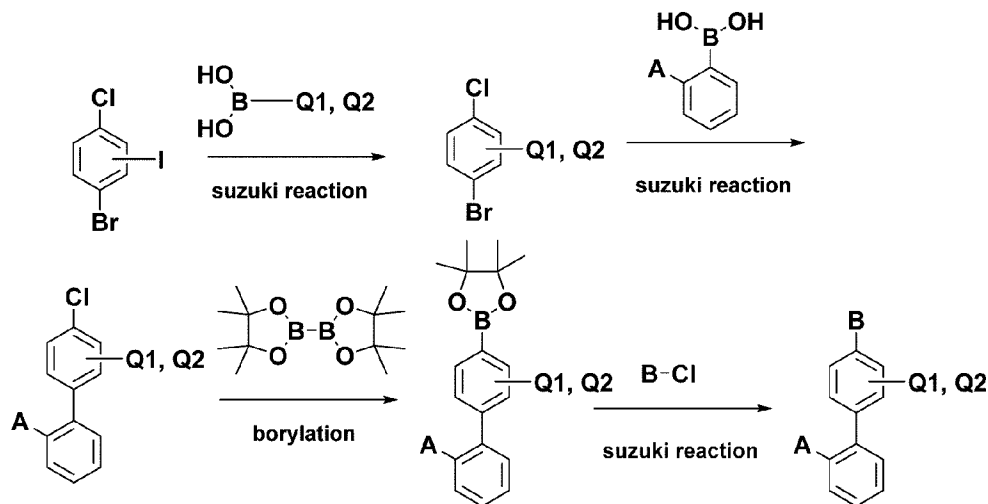
- [227] 상기 전자주입층은 전자의 주입을 원활하게 하는 역할을 할 수 있다. 전자 주입 물질로는 전자를 수송하는 능력을 갖고, 음극으로부터의 전자주입 효과, 발광층 또는 발광 재료에 대하여 우수한 전자주입 효과를 가지며, 발광층에서 생성된 여기자의 정공 주입층에의 이동을 방지하고, 또한, 박막형성능력이 우수한 화합물이 바람직하다. 구체적으로는 플루오레논, 안트라퀴노다이메탄, 다이페노퀸, 티오피란 다이옥사이드, 옥사졸, 옥사디아아졸, 트리아졸, 이미다졸, 페릴렌테트라카복실산, 프레오레닐리텐 메탄, 안트론 등과 그들의 유도체, 금속 착체 화합물 및 합질소 5원환 유도체 등이 있으나, 이에 한정되지 않는다.
- [228] 상기 전자주입 및 수송층은 전자 주입 및 수송을 동시에 하는 역할을 할 수 있다. 전자 수송 물질 및 전자 주입 물질을 이용하여 층을 형성할 수 있다.
- [229] 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.
- [230] 상기 정공차단층은 정공의 음극 도달을 저지하는 층으로, 일반적으로 정공주입층과 동일한 조건으로 형성될 수 있다. 구체적으로 옥사디아졸 유도체나 트리아졸 유도체, 페난트롤린 유도체, BCP, 알루미늄 착물 (aluminum complex) 등이 있으나, 이에 한정되지 않는다.
- [231] 본 발명에 따른 유기 발광 소자는 사용되는 재료에 따라 전면 발광형, 후면 발광형 또는 양면 발광형일 수 있다.
- [232] 본 발명의 유기 발광 소자는 전술한 화합물을 이용하여 한 층 이상의 유기물층을 형성하는 것을 제외하고는, 통상의 유기 발광 소자의 제조방법 및 재료에 의하여 제조될 수 있다.
- [233] 상기 화학식 1의 화합물의 제조방법 및 이들을 이용한 유기 발광 소자의 제조는 이하의 실시예에서 구체적으로 설명한다. 그러나, 하기 실시예는 본 발명을 예시하기 위한 것이며, 본 발명의 범위가 이들에 의하여 한정되는 것은 아니다.
- [234] 하기 반응식에 있어서, 치환기의 종류 및 개수는 당업자가 공지된 출발물질을 적절히 선택함에 따라 다양한 종류의 중간체를 합성할 수 있다. 반응 종류 및 반응 조건은 당기술분야에 알려져 있는 것들이 이용될 수 있다.

발명의 실시를 위한 형태

- [235] 상기 화학식 1의 화합물의 제조방법 및 이들을 이용한 유기 발광 소자의 제조는 이하의 실시예에서 구체적으로 설명한다. 그러나, 하기 실시예는 본 발명을 예시하기 위한 것이며, 본 발명의 범위가 이들에 의하여 한정되는 것은 아니다.

[236] 하기 반응식에 있어서, 치환기의 종류 및 개수는 당업자가 공지된 출발물질을 적절히 선택함에 따라 다양한 종류의 중간체를 합성할 수 있다. 반응 종류 및 반응 조건은 당기술분야에 알려져 있는 것들이 이용될 수 있다.

[237]



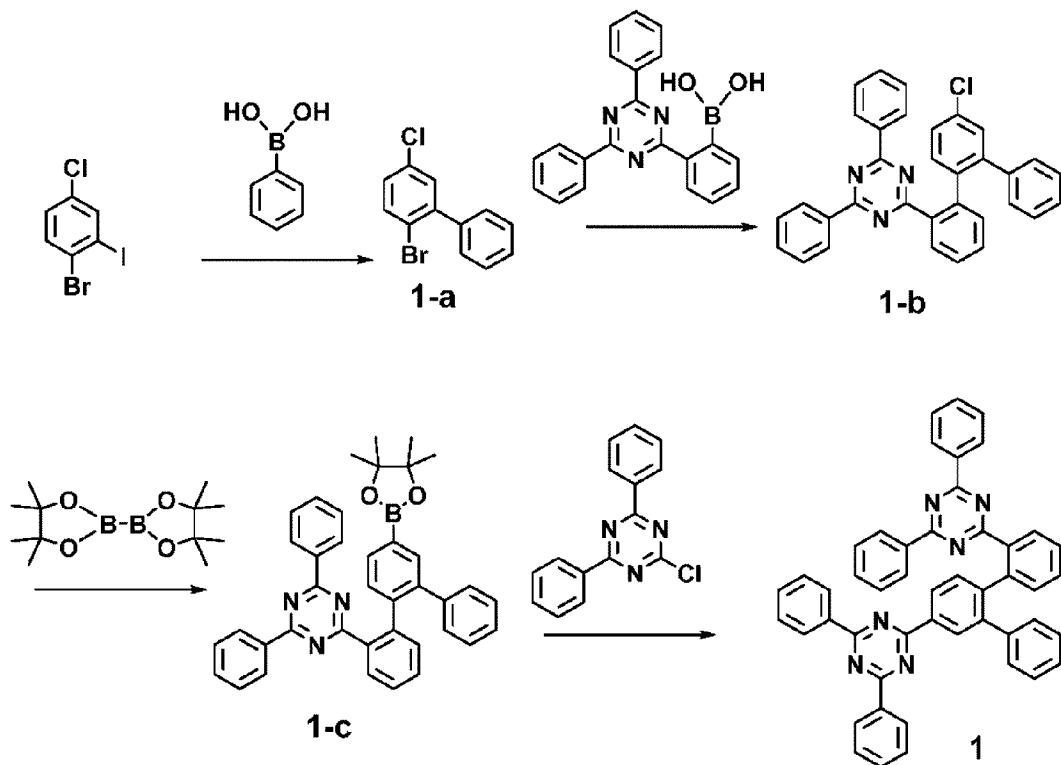
[238] 상기 Q1, Q2, A 및 B는 상기 화학식 1에서 정의한 것과 같다.

[239] 본 명세서의 실시예에 기재된 제조식과 상기 중간체들을 통상의 기술상식을 바탕으로 적절히 조합하면, 본 명세서에 기재되어 있는 상기 화학식 1의 화합물들을 모두 제조할 수 있다.

[240] [합성예]

[241] 합성예 1: 화합물 1의 합성

[242]



[243] 단계 1) 화합물 1-a의 합성

[244] 질소 분위기에서 1-브로모-4-클로로-2-아이오도벤젠(50 g, 157.6 mmol)와 페닐 보론산(19.2 g, 157.6mmol)를 테트라하이드로퓨란 1000ml에 넣고 교반 및 환류하였다. 이 후 소듐카보네이트(50.1 g, 472.7mmol)를 물 50ml에 녹여 투입하고 충분히 교반한 후 테트라키스트리페닐-포스피노팔라듐(5.5 g, 4.7mmol)을 투입하였다. 1시간 반응 후 상온으로 식인 후 유기층과 물층을 분리 후 유기층을 증류하였다. 이를 다시 톨루엔 20배 843 mL에 투입하여 녹이고, 물로 2회 세척 후에 유기층을 분리하여, 무수황산마그네슘을 넣고 교반한 후 여과하여 여액을 감압 증류하였다. 농축한 화합물을 톨루엔과 에틸아세테이트재결정을 통해 흰색의 고체 화합물 1-a(35.8g, 85%, MS: $[M+H]^+ = 268.6$)을 제조하였다.

[245] 단계 2) 화합물 1-b의 합성

[246] 질소 분위기에서 화합물 1-a(50 g, 186.9 mmol)와 (2-(4,6-디페닐-1,3,5-트리아진-2-일)페닐)보론산(66 g, 186.9mmol)를 테트라하이드로퓨란 1000ml에 넣고 교반 및 환류하였다. 이 후 포타슘카보네이트(77.5 g, 560.6mmol)를 물 77 ml에 녹여 투입하고 충분히 교반한 후 테트라키스트리페닐-포스피노팔라듐(6.5 g, 5.6mmol)을 투입하였다. 1시간 반응 후 상온으로 식인 후 유기층과 물층을 분리 후 유기층을 증류하였다. 이를 다시 톨루엔 20배 1854 mL에 투입하여 녹이고, 물로 2회 세척 후에 유기층을 분리하여, 무수황산마그네슘을 넣고 교반한 후 여과하여 여액을 감압 증류하였다. 농축한 화합물을 톨루엔과 에틸아세테이트재결정을 통해 흰색의 고체 화합물 1-b(64.9g, 70%, MS: $[M+H]^+ = 497.3$)을 제조하였다.

[247] 단계 3) 화합물 1-c의 합성

[248] 질소 분위기에서 화합물 1-b(50 g, 100.8 mmol)와 비스(피나콜라토)디보론(25.6 g, 100.8mmol)를 1,4-다이옥산 1000ml에 넣고 교반 및 환류하였다. 이 후 포타슘아세테이트(64.2 g, 302.4mmol)를 투입하고 충분히 교반한 후 팔라듐디벤질리덴아세톤팔라듐(1.7 g, 3mmol)을 투입하였다. 5시간 반응 후 상온으로 식인 후 유기층을 필터처리하여 염을 제거한 후 걸러진 유기층을 증류하였다. 이를 다시 클로로포름 10 배 592 mL에 투입하여 녹이고, 물로 2회 세척 후에 유기층을 분리하여, 무수황산마그네슘을 넣고 교반한 후 여과하여 여액을 감압 증류하였다. 농축한 화합물을 클로로포름과 에탄올재결정을 통해 흰색의 고체 화합물 1-c(29.6g, 50%, MS: $[M+H]^+ = 588.5$)을 제조하였다.

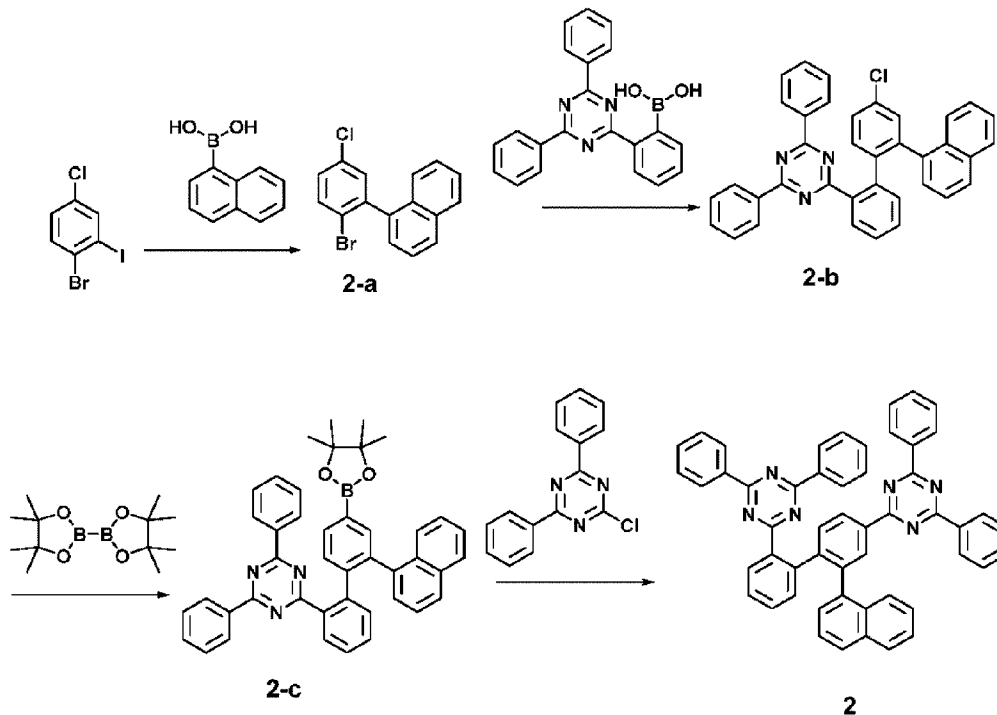
[249] 단계 4) 화합물 1의 합성

[250] 질소 분위기에서 화합물 1-c(50 g, 85.1 mmol)와 2-클로로-4,6-디페닐-1,3,5-트리아진(22.8 g, 85.1mmol)를 테트라하이드로퓨란 1000ml에 넣고 교반 및 환류하였다. 이 후 포타슘카보네이트(35.3 g, 255.3mmol)를 물 35 ml에 녹여 투입하고 충분히 교반한 후 테트라키스트리페닐-포스피노팔라듐(2.9 g, 2.6mmol)을 투입하였다. 2시간 반응 후 상온으로 식인 후 유기층과 물층을 분리 후 유기층을 증류하였다. 이를 다시 톨루엔 20배 1179 mL에 투입하여 녹이고, 물로 2회 세척 후에 유기

층을 분리하여, 무수황산마그네슘을 넣고 교반한 후 여과하여 여액을 감압 증류하였다. 농축한 화합물을 톨루엔과 에틸아세테이트재결정을 통해 흰색의 고체 화합물 1(45.4g, 77%, MS: $[M+H]^+ = 693.8$)을 제조하였다.

[251] 합성예 2: 화합물 2의 합성

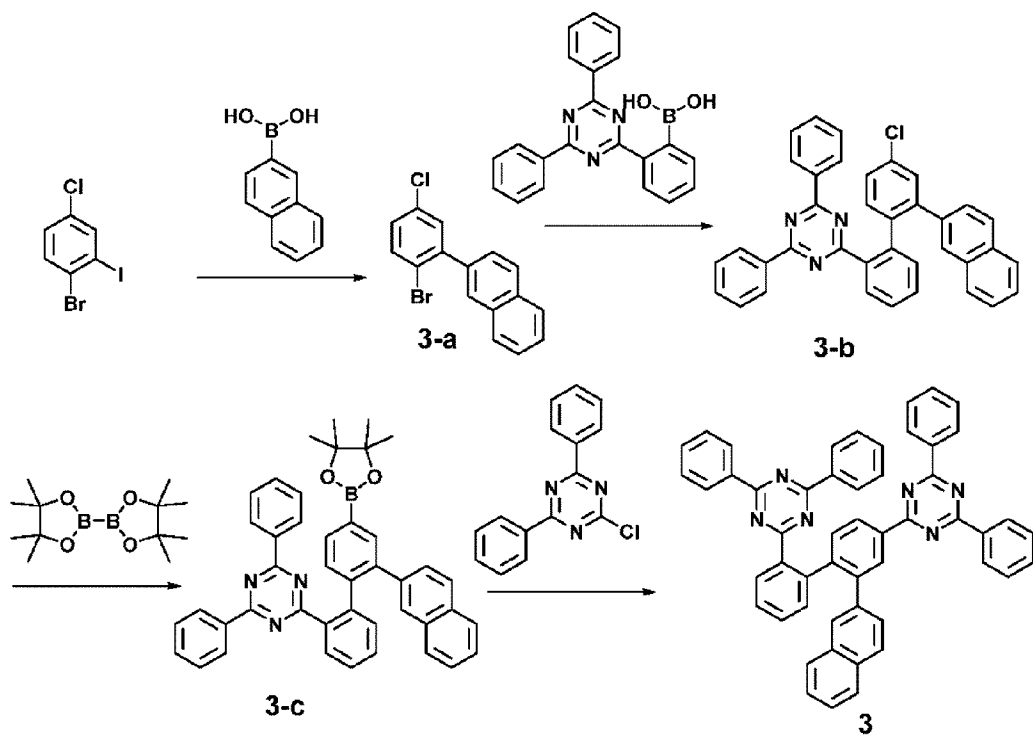
[252]



[253] 합성예 1에서, 페닐보론산을 나프탈렌-1-일보론산으로 변경하여 사용한 것을 제외하고는, 화합물 1의 제조 방법과 동일한 제조 방법으로 화합물 2($MS[M+H]^+ = 743.9$)을 제조하였다.

[254] 합성예 3: 화합물 3의 합성

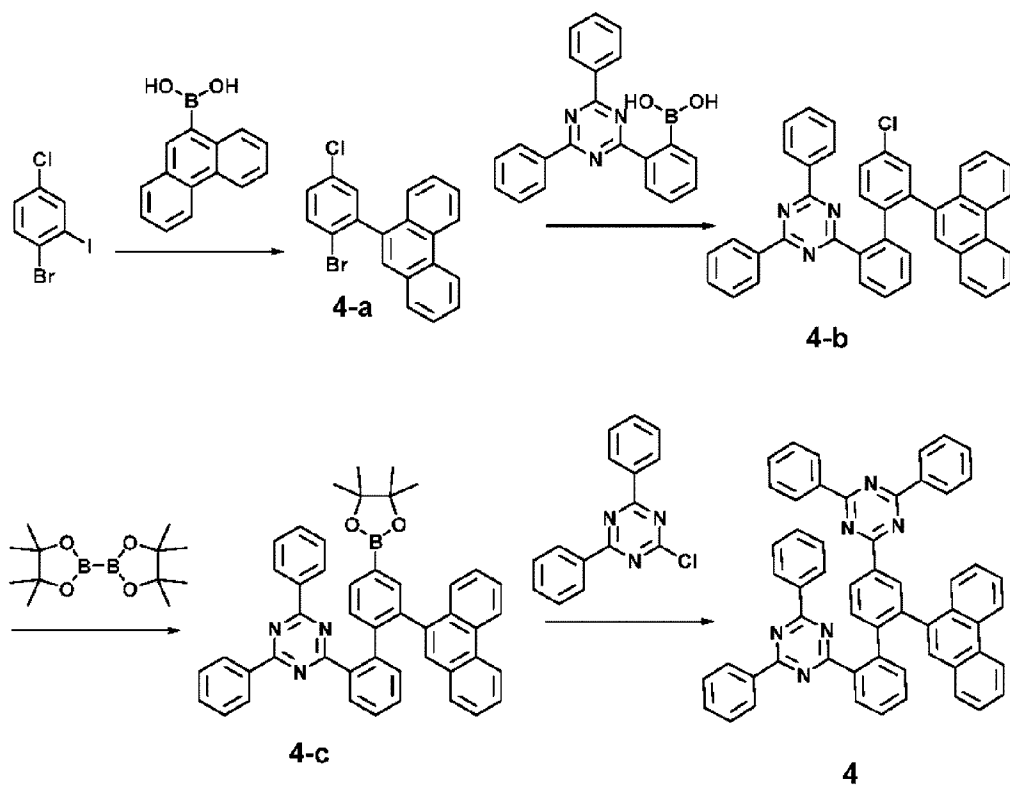
[255]



[256] 합성예 1에서, 페닐보론산을 나프탈렌-2-일보론산으로 변경하여 사용한 것을 제외하고는, 화합물 1의 제조 방법과 동일한 제조 방법으로 화합물 3($MS[M+H]^+ = 743.9$)을 제조하였다.

[257] 합성예 4: 화합물 4의 합성

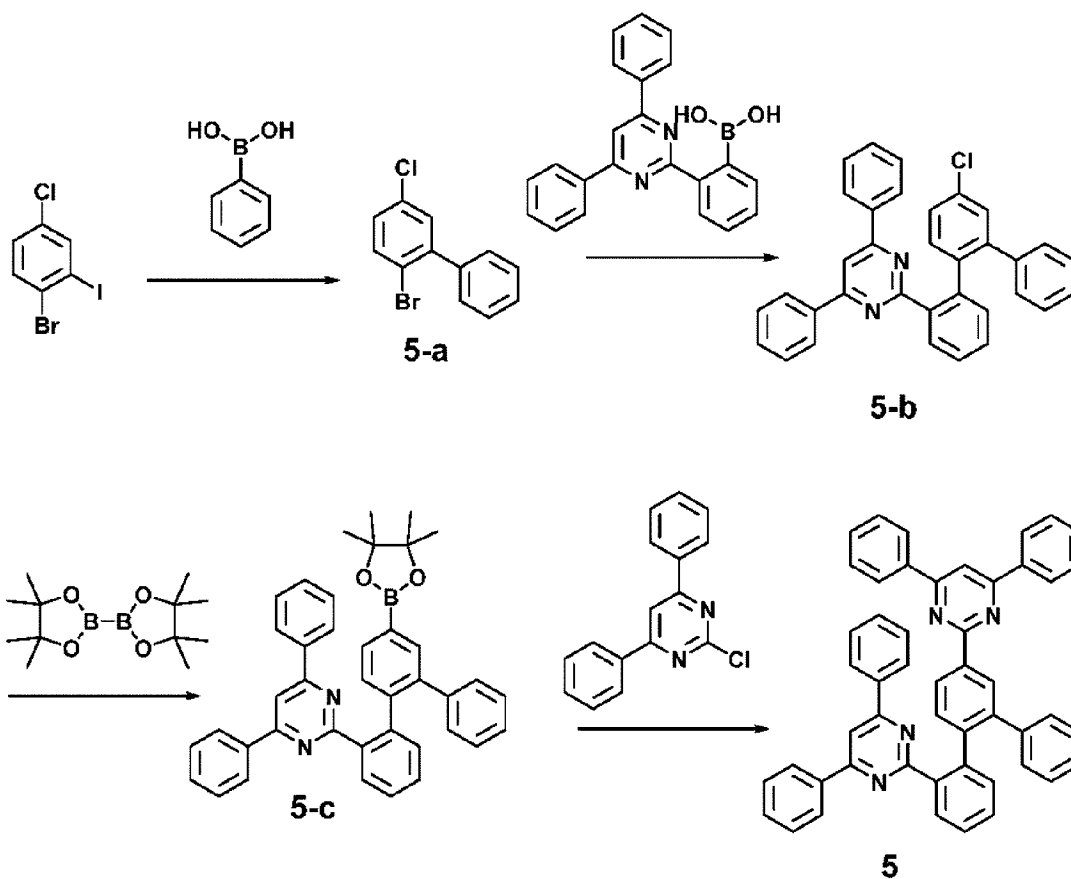
[258]



[259] 합성예 1에서, 페닐보론산을 페난트렌-9-일보론산으로 변경하여 사용한 것을 제외하고는, 화합물 1의 제조 방법과 동일한 제조 방법으로 화합물 4($\text{MS}[\text{M}+\text{H}]^+ = 793.9$)을 제조하였다.

[260] 합성예 5: 화합물 5의 합성

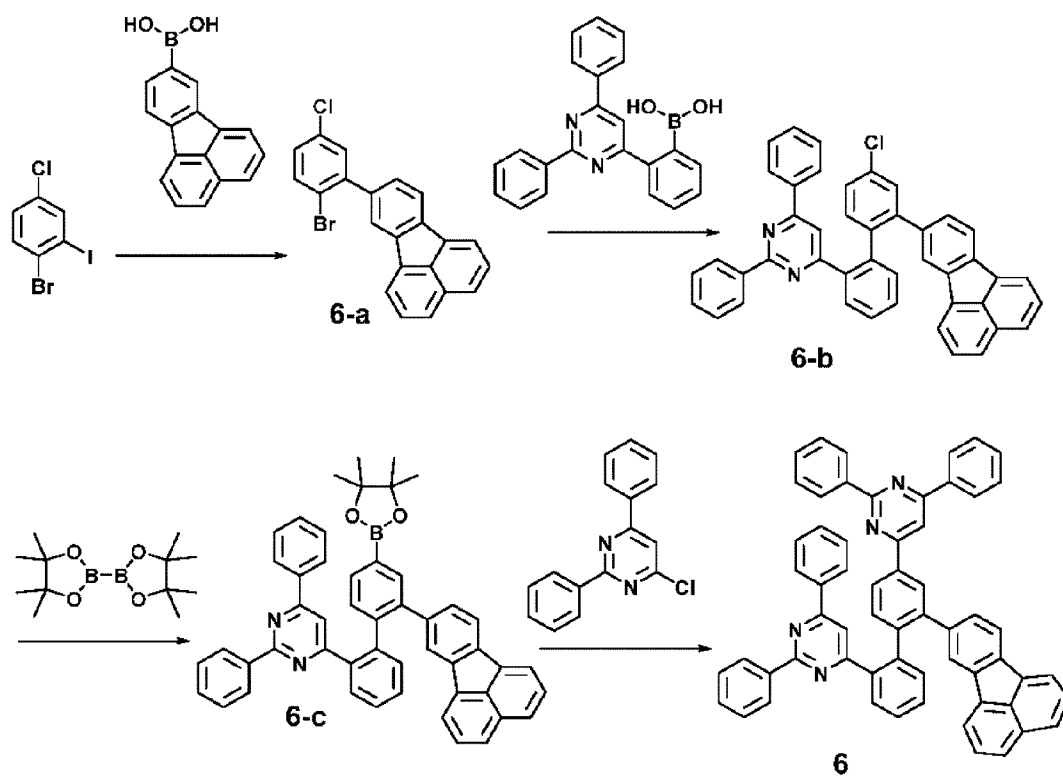
[261]



[262] 합성예 1에서, (2-(4,6-디페닐-1,3,5-트리아진-2-일)페닐)보론산 및 2-클로로-4,6-디페닐-1,3,5-트리아진을 (2-(4,6-디페닐피리미딘-2-일)페닐)보론산 및 2-클로로-4,6-디페닐피리미딘으로 변경하여 사용한 것을 제외하고는, 화합물 1의 제조 방법과 동일한 제조 방법으로 화합물 5($\text{MS}[\text{M}+\text{H}]^+ = 691.9$)을 제조하였다.

[263] 합성예 6: 화합물 6의 합성

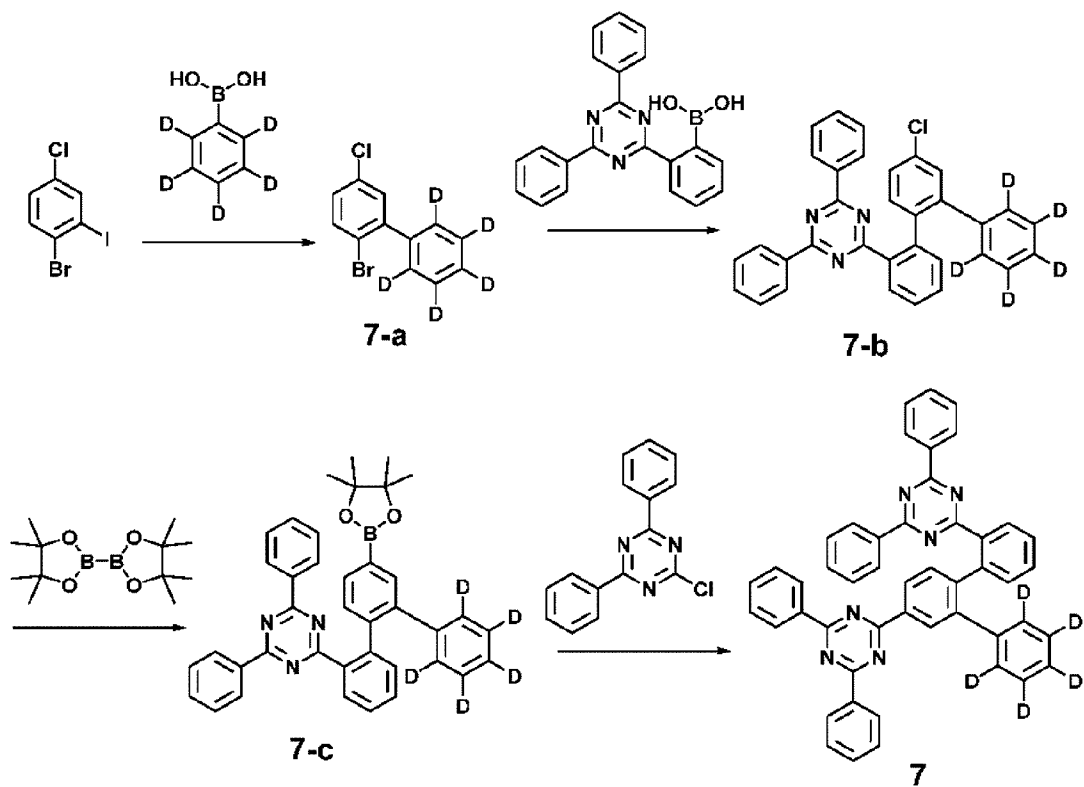
[264]



[265] 합성예 1에서, 페닐보론산, (2-(4,6-디페닐-1,3,5-트리아진-2-일)페닐)보론산 및 2-클로로-4,6-디페닐-1,3,5-트리아진을 플루오란텐-8-일보론산, (2-(2,6-디페닐피리미딘-4-일)페닐)보론산 및 4-클로로-2,6-디페닐피리미딘으로 변경하여 사용한 것을 제외하고는, 화합물 1의 제조 방법과 동일한 제조 방법으로 화합물 6($MS[M+H]^+ = 815.4$)을 제조하였다.

[266] 합성예 7: 화합물 7의 합성

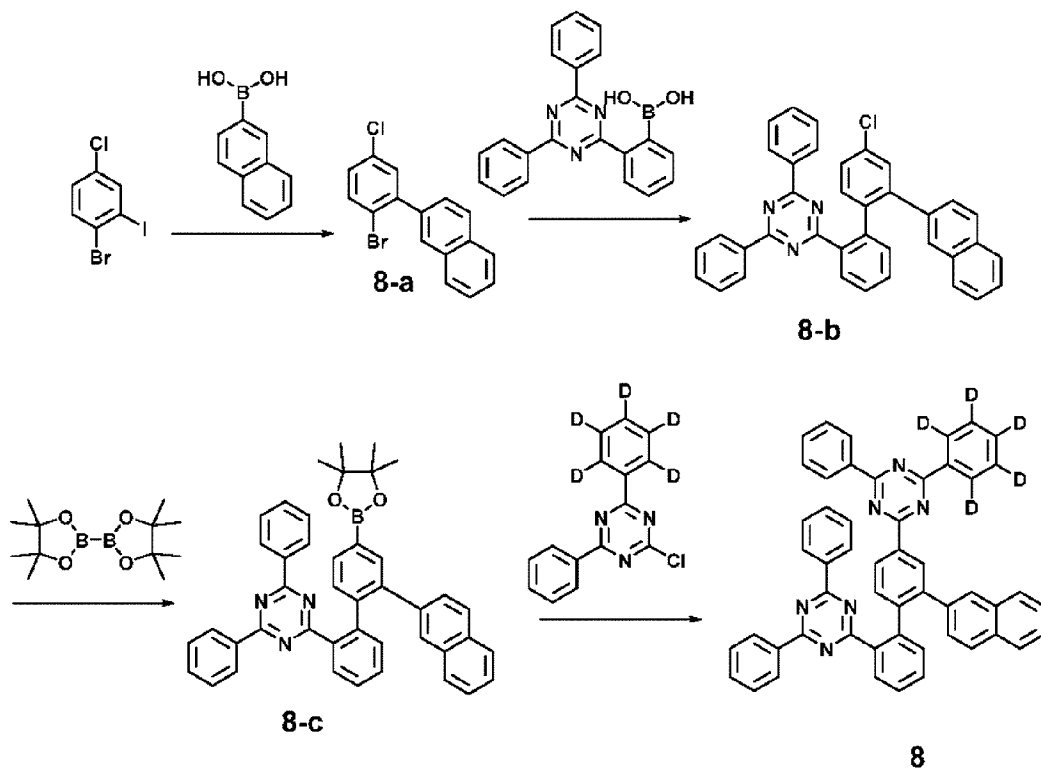
[267]



[268] 합성예 1에서, 페닐보론산을 (페닐-d₅)보론산으로 변경하여 사용한 것을 제외하고는, 화합물 4의 제조 방법과 동일한 제조 방법으로 화합물 7(MS[M+H]⁺=698.3)을 제조하였다.

[269] 합성예 8: 화합물 8의 합성

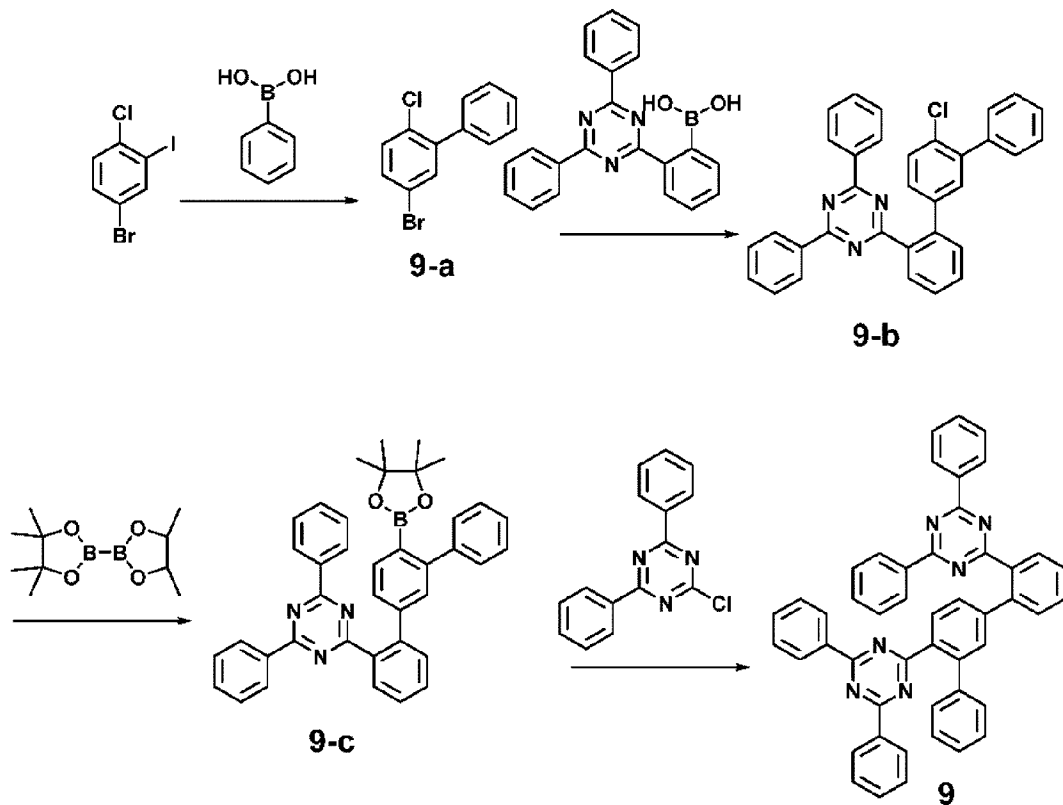
[270]



[271] 합성예 1에서, 페닐보론산 및 2-클로로-4,6-디페닐-1,3,5-트리아진을 나프탈렌-2-일보론산 및 2-클로로-4-페닐-6-(페닐-d5)-1,3,5-트리아진으로 변경하여 사용한 것을 제외하고는, 화합물 1의 제조 방법과 동일한 제조 방법으로 화합물 8($MS[M+H]^+ = 748.3$)을 제조하였다.

[272] 합성예 9: 화합물 9의 합성

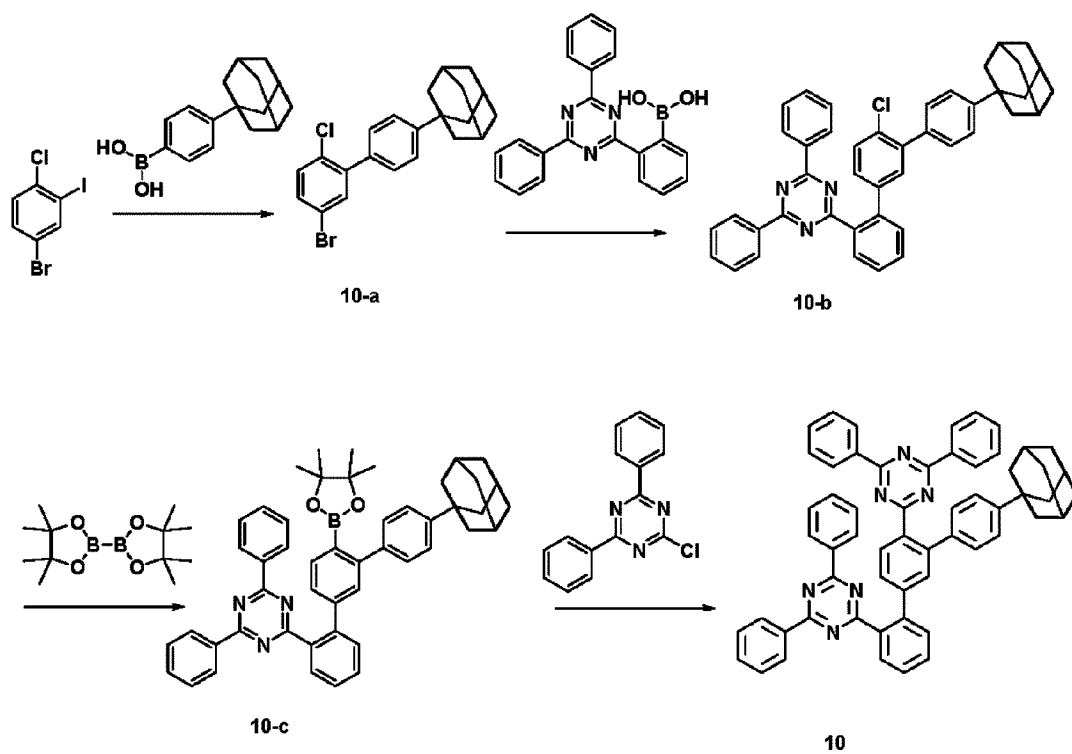
[273]



[274] 합성예 1에서, 1-브로모-4-클로로-2-아이오도벤젠을 4-브로모-1-클로로-2-아이오도벤젠으로 변경하여 사용한 것을 제외하고는, 화합물 1의 제조 방법과 동일한 제조 방법으로 화합물 9($\text{MS}[\text{M}+\text{H}]^+ = 693.3$)을 제조하였다.

[275] 합성예 10: 화합물 10의 합성

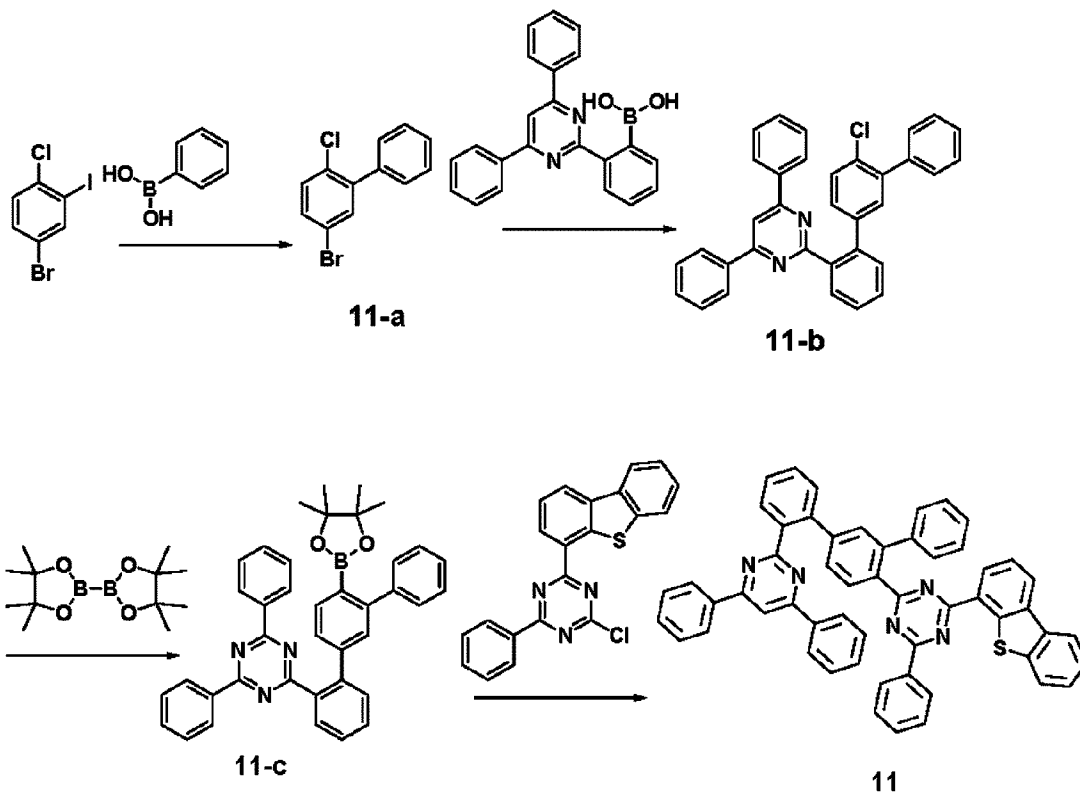
[276]



[277] 합성예 1에서, 1-브로모-4-클로로-2-아이오도벤젠 및 보론산을 4-브로모-1-클로로-2-아이오도벤젠 및 (4-(아다만탄-1-일)보론산으로 변경하여 사용한 것을 제외하고는, 화합물 1의 제조 방법과 동일한 제조 방법으로 화합물 10($MS[M+H]^+ = 827.4$)을 제조하였다.

[278] 합성예 11: 화합물 11의 합성

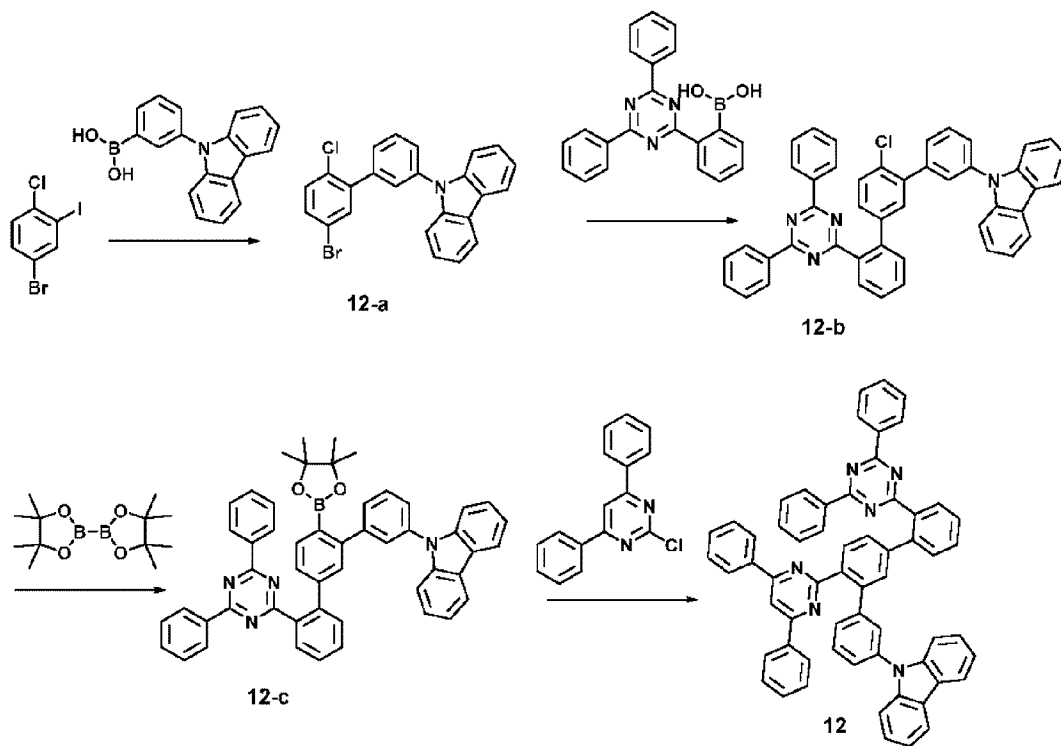
[279]



[280] 합성예 1에서, 1-브로모-4-클로로-2-아이오도벤젠, (2-(4,6-디페닐-1,3,5-트리아진-2-일)페닐)보론산 및 2-클로로-4,6-디페닐-1,3,5-트리아진을 4-브로모-1-클로로-2-아이오도벤젠, (2-(4,6-디페닐피리미딘-2-일)페닐)보론산 및 2-클로로-4-(디벤조[b,d]티오펜-4-일)-6-페닐-1,3,5-트리아진으로 변경하여 사용한 것을 제외하고는, 화합물 1의 제조 방법과 동일한 제조 방법으로 화합물 11($MS[M+H]^+ = 798.3$)을 제조하였다.

[281] 합성예 12: 화합물 12의 합성

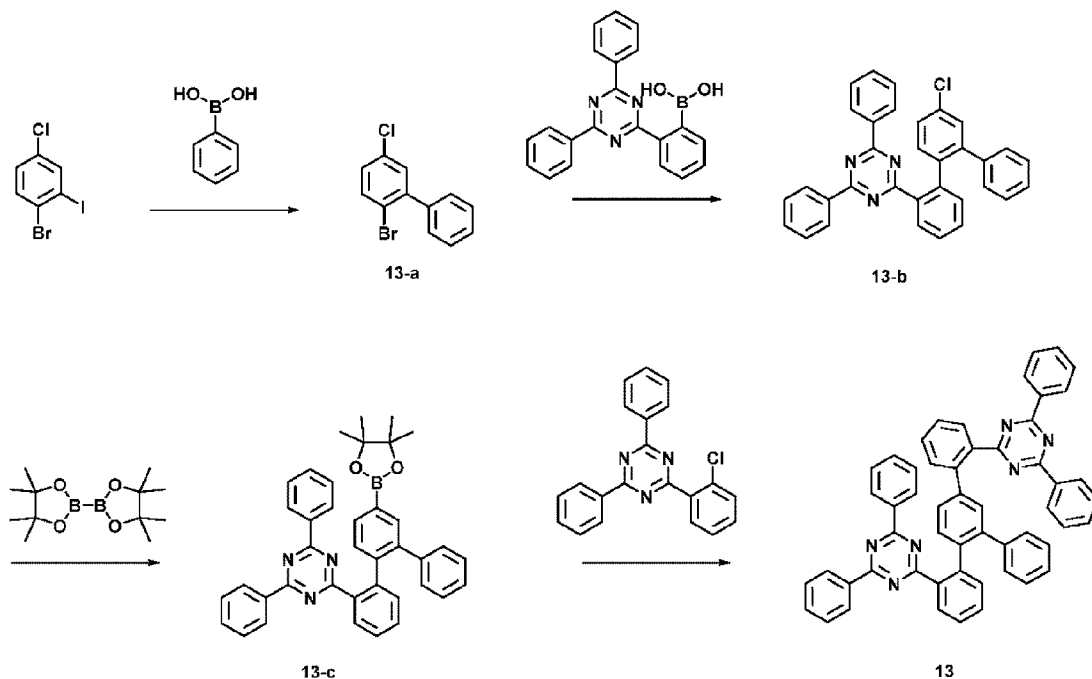
[282]



[283] 합성예 1에서, 1-브로모-4-클로로-2-아이오도벤젠, 페닐보론산 및 2-클로로-4,6-디페닐-1,3,5-트리아진을 4-브로모-1-클로로-2-아이오도벤젠, (3-(9H-카바졸-9-일)페닐)보론산 및 2-클로로-4,6-디페닐피리미딘으로 변경하여 사용한 것을 제외하고는, 화합물 1의 제조 방법과 동일한 제조 방법으로 화합물 12($MS[M+H]^+ = 857.3$)을 제조하였다.

[284] 합성예 13: 화합물 13의 합성

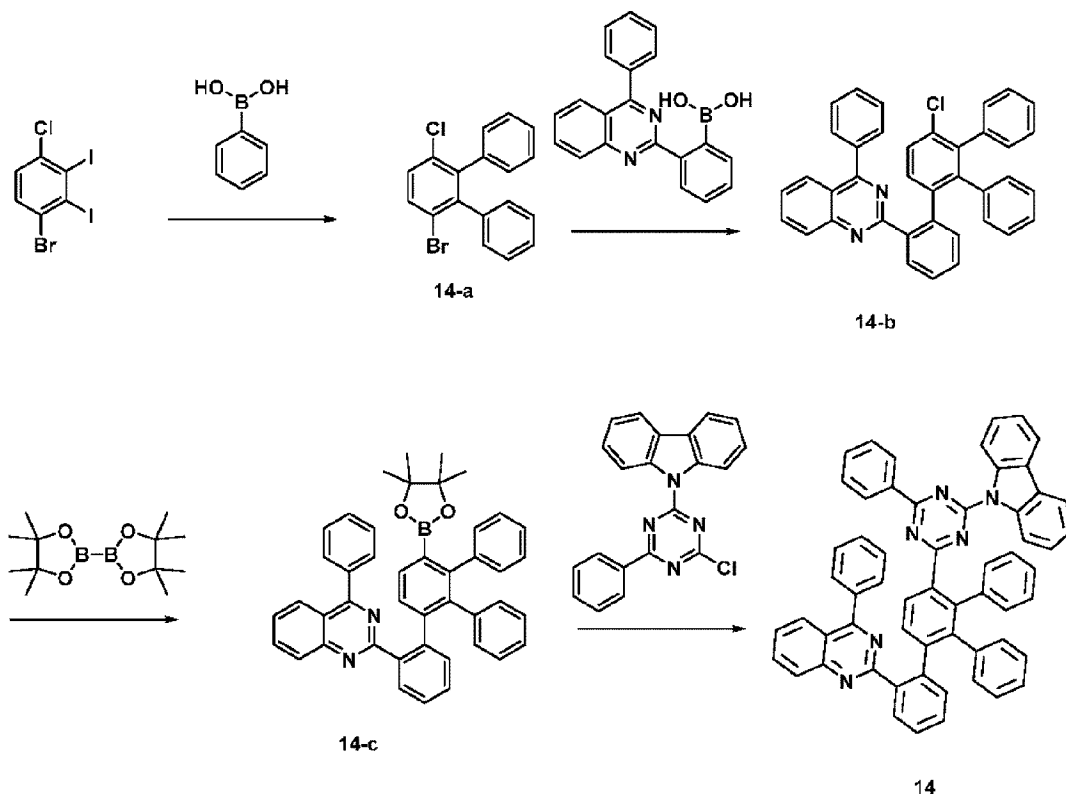
[285]



[286] 합성예 1에서, 2-클로로-4,6-디페닐-1,3,5-트리아진을 2-(2-클로로페닐)-4,6-디페닐-1,3,5-트리아진으로 변경하여 사용한 것을 제외하고는, 화합물 1의 제조 방법과 동일한 제조 방법으로 화합물 13($MS[M+H]^+=769.3$)을 제조하였다.

[287] 합성예 14: 화합물 14의 합성

[288]



[289] 합성예 1에서, 1-브로모-4-클로로-2-아이오도벤젠, (2-(4,6-디페닐-1,3,5-트리아진-2-일)페닐)보론산 및 2-클로로-4,6-디페닐-1,3,5-트리아진을 1-브로모-4-클로로-2,3-다이오도벤젠, (2-(4-페닐퀴나졸린-2-일)페닐)보론산 및 9-(4-클로로-6-페닐-1,3,5-트리아진-2-일)-9H-카바졸로 변경하여 사용한 것을 제외하고는, 화합물 1의 제조 방법과 동일한 제조 방법으로 화합물 14($MS[M+H]^+=831.3$)을 제조하였다.

[290] 실험예 1

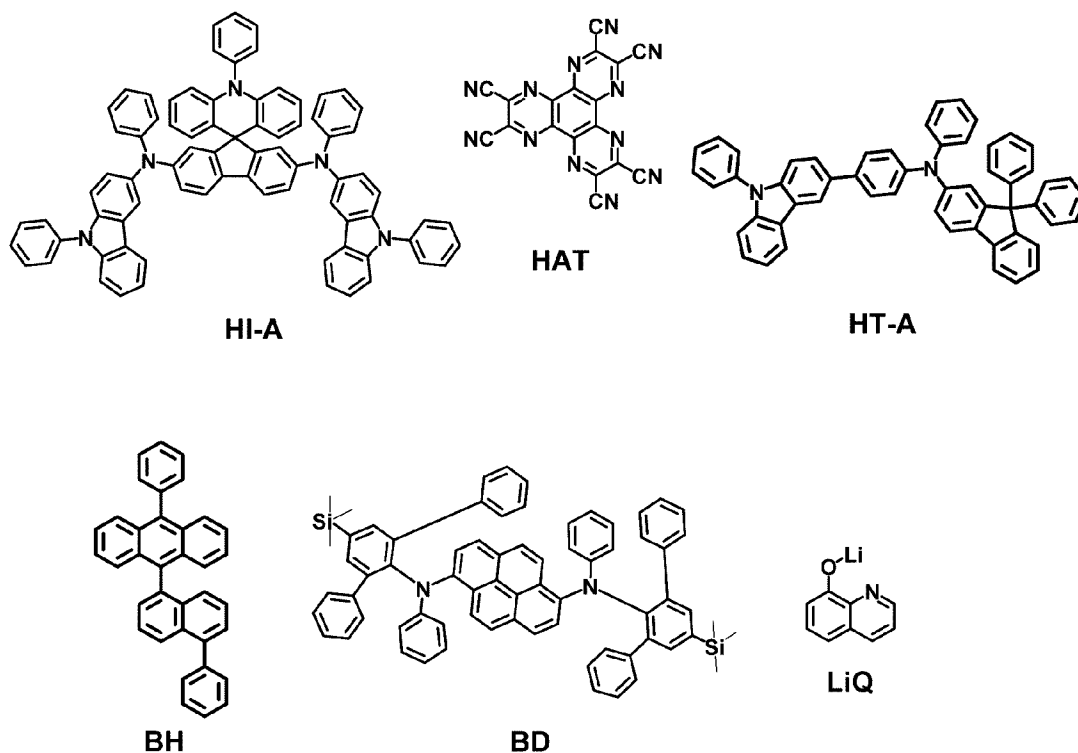
[291] ITO(indium tin oxide)가 1,000Å의 두께로 박막 코팅된 유리 기판을 세제를 녹인 증류수에 넣고 초음파로 세척하였다. 이 때, 세제로는 피셔사(Fischer Co.) 제품을 사용하였으며, 증류수로는 밀리포어사(Millipore Co.) 제품의 필터(Filter)로 2차로 걸러진 증류수를 사용하였다. ITO를 30분간 세척한 후 증류수로 2회 반복하여 초음파 세척을 10분간 진행하였다. 증류수 세척이 끝난 후, 이소프로필알콜, 아세톤, 메탄올의 용제로 초음파 세척을 하고 건조시킨 후 플라즈마 세정기로 수송시켰다. 또한, 산소 플라즈마를 이용하여 상기 기판을 5분간 세정한 후 진공 증착기로 기판을 수송시켰다.

[292] 이렇게 준비된 ITO 투명 전극 위에 하기 화합물 HI-A를 600Å의 두께로 열 진공 증착하여 정공주입층을 형성하였다. 상기 정공주입층 위에 하기 화학식의 헥사니트릴 헥사아자트리페닐렌(hexaazatriphenylene; HAT, 50Å) 및 하기 화합물 HT-A(600Å)를 순차적으로 진공증착하여 정공수송층을 형성하였다.

[293] 이어서, 상기 정공수송층 위에 막 두께 200Å으로 하기 화합물 BH와 BD를 25:1의 중량비로 진공증착하여 발광층을 형성하였다.

[294] 상기 발광층 위에 합성예 1에서 제조한 화합물 1과 하기 화합물 [LiQ] (Lithiumquinolate)를 1:1 중량비로 진공증착하여 360Å의 두께로 전자주입 및 수송층을 형성하였다. 상기 전자주입 및 수송층 위에 순차적으로 10Å 두께로 리튬플루오라이드(LiF)와 1,000Å 두께로 알루미늄을 증착하여 음극을 형성하였다.

[295]



[296] 상기의 과정에서 유기물의 증착속도는 0.4 ~ 0.9 Å/sec를 유지하였고, 음극의 리튬 플루오라이드는 0.3 Å/sec, 알루미늄은 2 Å/sec의 증착 속도를 유지하였으며, 증착 시 진공도는 $1 \times 10^{-7} \sim 5 \times 10^{-8}$ torr를 유지하여, 유기 발광 소자를 제작하였다.

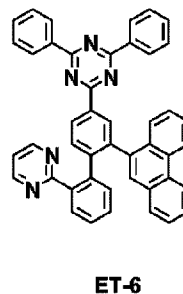
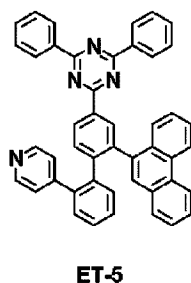
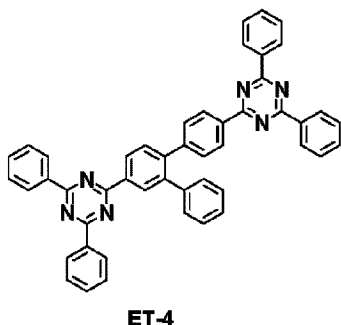
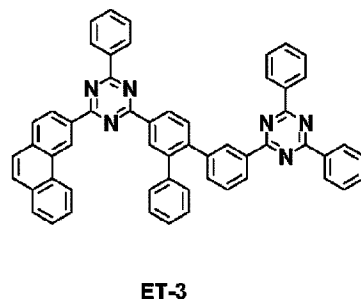
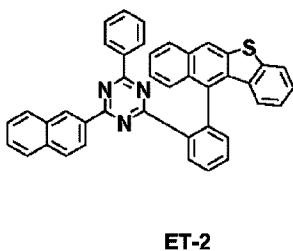
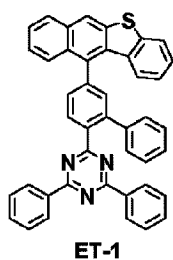
[297] 실험예 2 내지 14

[298] 실험예 1의 화합물 1 대신 하기 표 1의 화합물을 사용한 것을 제외하고는 실험예 1과 동일한 방법으로 유기 발광 소자를 제조하였다.

[299] 비교 실험예 1 내지 6

[300] 실험예 1의 화합물 1 대신 하기 표 1의 화합물을 사용한 것을 제외하고는 실험예 1과 동일한 방법으로 유기 발광 소자를 제조하였다. 하기 표 1에서 사용한 ET-1 내지 ET-6의 화합물은 하기와 같다.

[301]



[302] 상기 실험에 및 비교실험에에서 제조한 유기 발광 소자에 대하여, 10 mA/cm²의 전류밀도에서 구동 전압, 발광 효율 및 색좌표를 측정하였고, 20 mA/cm²의 전류밀도에서 초기 휘도 대비 90%가 되는 시간(T₉₀)을 측정하였다. 그 결과를 하기 표 1에 나타내었다.

[303] [표1]

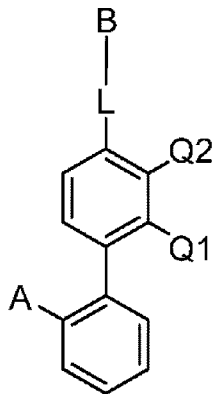
	화합물 (전자주입 및 수송층)	전압 (V@10 mA/cm ²)	효율 (cd/A@1 0mA/cm ²)	색좌표 (x,y)	T ₉₀ (hr@20 mA/cm ²)
실험예 1	화합물1	3.15	4.25	(0.136, 0.112)	180
실험예 2	화합물2	3.20	4.38	(0.136, 0.111)	177
실험예 3	화합물3	3.19	4.44	(0.136, 0.112)	198
실험예 4	화합물4	3.25	4.19	(0.136, 0.111)	169
실험예 5	화합물5	3.09	4.21	(0.136, 0.111)	172
실험예 6	화합물6	3.22	4.39	(0.136, 0.111)	159
실험예 7	화합물7	3.15	4.25	(0.136, 0.112)	220
실험예 8	화합물8	3.19	4.46	(0.136, 0.111)	240
실험예 9	화합물9	3.17	4.27	(0.136, 0.112)	171
실험예 10	화합물10	3.26	4.26	(0.136, 0.111)	165
실험예 11	화합물11	3.05	4.78	(0.136, 0.111)	158

실험예 12	화합물 12	3.29	4.66	(0.136, 0.111)	160
실험예 13	화합물 13	3.23	4.28	(0.136, 0.111)	189
실험예 14	화합물 14	3.26	4.5	(0.136, 0.111)	177
비교실험예 1	ET-1	4.93	3.01	(0.136, 0.111)	91
비교실험예 2	ET-2	4.88	3.05	(0.136, 0.111)	95
비교실험예 3	ET-3	4.75	3.08	(0.136, 0.112)	99
비교실험예 4	ET-4	5.13	3.19	(0.136, 0.111)	54
비교실험예 5	ET-5	5.55	2.78	(0.136, 0.112)	45
비교실험예 6	ET-6	5.25	2.85	(0.136, 0.111)	59

- [304] 상기 표 1에 기재된 바와 같이, 본 발명의 화학식 1로 표시되는 화합물을 사용한 유기 발광 소자의 경우, 전압, 효율 및/또는 수명(T_{90})에서 우수한 특성을 나타내는 것을 확인하였다. 상기 표 1의 실험예 1 내지 14과 비교실험예 1 및 2을 비교하면, 본 발명의 화학식 1의 화합물을 포함하는 유기 발광소자는 전자 수송 특성을 가진 N함유 6원 고리를 포함하는 헤테로고리가 2개 이상으로 치환되어 있어 전자 수송 능력이 다양하게 조절할 수 있다. 따라서 N함유 고리가 1개 치환된 화합물을 사용한 유기 발광 소자보다 효율 및 수명 면에서 현저히 우수한 특성을 보임을 확인할 수 있었다.
- [305] 상기 표 1의 실험예 1 내지 14과 비교실험예 3 및 4를 비교하면, 본 발명의 화학식 1의 화합물을 포함하는 유기 발광소자는 전자 수송 특성을 가진 N함유 6원 고리를 포함하는 헤테로고리가 페닐의 오쏘 위치로 이웃하고 있어 구조적 뒤틀림이 발생하여 전자 수송에 유리하다. 따라서, N함유 6원 고리를 포함하는 헤테로고리가 페닐의 메타 및 파라로 사용한 유기 발광 소자보다 전압, 효율 및 수명면에서 현저히 우수한 특성을 보임을 확인할 수 있었다.
- [306] 비교실험예 5 및 6의 경우, A가 비치환된 N함유 6원고리를 포함하는 헤테로아릴이다. 본 발명의 실험예 1 내지 14는 A와 B가 아릴기로 치환된 N함유 6원 고리를 포함하는 헤테로아릴기인 점이 상이하다.
- [307] 본 발명의 화합물들을 사용하는 실험예 1 내지 14의 경우, 비교실험예 5 및 6보다 저전압, 고효율, 장수명의 특성을 보임을 알 수 있다.

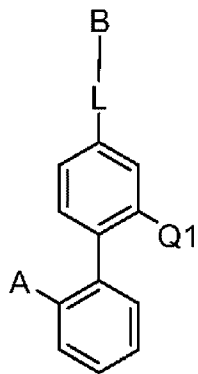
청구범위

[청구항 1] 하기 화학식 1의 화합물:
[화학식 1]

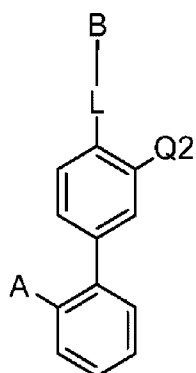


상기 화학식 1에 있어서,
A는 치환 또는 비치환된 아릴기로 치환된 N을 포함하는 6원 고리를 포함하는 헤테로아릴기이고,
B는 치환 또는 비치환된 아릴기로 치환된 N을 포함하는 6원 고리를 포함하는 헤테로아릴기이고,
L은 직접결합, 또는 치환 또는 비치환된 아릴렌기이고,
Q1 및 Q2 중 하나는 탄소수 6 내지 30의 아릴기이고, 나머지는 수소 또는 탄소수 6 내지 30의 아릴기이고,
Q1 및 Q2 중 하나가 수소인 경우, 나머지는 중수소, 니트로기, 할로젠기, 치환 또는 비치환된 알킬기, 치환 또는 비치환된 아릴기, 및 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기 중 선택되는 하나 이상의 치환기로 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴기이고,
Q1 및 Q2가 모두 탄소수 6 내지 30의 아릴기일 때, 상기 탄소수 6 내지 30의 아릴기는 중수소, 니트릴기, 니트로기, 할로젠기, 치환 또는 비치환된 알킬기, 치환 또는 비치환된 아릴기, 및 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기 중 선택되는 하나 이상의 치환기로 치환 또는 비치환된다.

[청구항 2] 청구항 1에 있어서, 상기 화학식 1은 아래 화학식 1-1 또는 1-2인 것인 화합물:
[화학식 1-1]



[화학식 1-2]

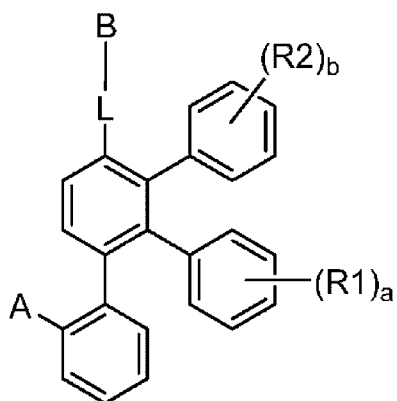


상기 화학식 1-1 및 1-2에 있어서, 상기 A, B, L, Q1 및 Q2는 상기 화학식 1에서 정의한 것과 같다.

[청구항 3]

청구항 1에 있어서, 상기 화학식 1은 아래 화학식 1-3인 것인 화합물:

[화학식 1-3]



상기 화학식 1-3에 있어서, 상기 A, B, 및 L는 상기 화학식 1에서 정의한 것과 같고,

R1 및 R2는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 수소, 중수소, 니트릴기, 니트로기, 할로젠기, 치환 또는 비치환된 알킬기, 치환 또는 비치환된

아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기이거나, 인접한 기와 결합하여 치환 또는 비치환된 고리를 형성하고,

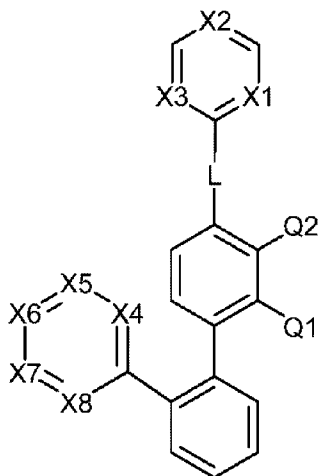
a 및 b는 1 내지 5의 정수이고,

a가 2 이상일 때, R1은 서로 같거나 상이하고,

b가 2 이상일 때, R2는 서로 같거나 상이하다.

[청구항 4] 청구항 1에 있어서, 상기 화학식 1은 아래 화학식 1-4인 것인 화합물:

[화학식 1-4]



상기 화학식 1-4에 있어서, 상기 L, Q1, 및 Q2는 상기 화학식 1에서 정의한 것과 같고,

X1 내지 X3 중 하나는 N이고, 나머지는 각각 N 또는 CR이고,

R은 중수소, 니트릴기, 니트로기, 할로젠기, 치환 또는 비치환된 알킬기, 치환 또는 비치환된 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기이고,

X4 내지 X8 중 하나는 N이고, 나머지는 각각 N 또는 CR1이고,

R1은 중수소, 니트릴기, 니트로기, 할로젠기, 치환 또는 비치환된 알킬기, 치환 또는 비치환된 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기이거나, 인접한 치환기와 서로 결합하여 치환 또는 비치환된 고리를 형성한다.

[청구항 5] 청구항 1에 있어서, 상기 A는 피리딘, 피리미딘, 트리아진, 퀴놀린, 퀴나졸린, 또는 퀴녹살린이고,

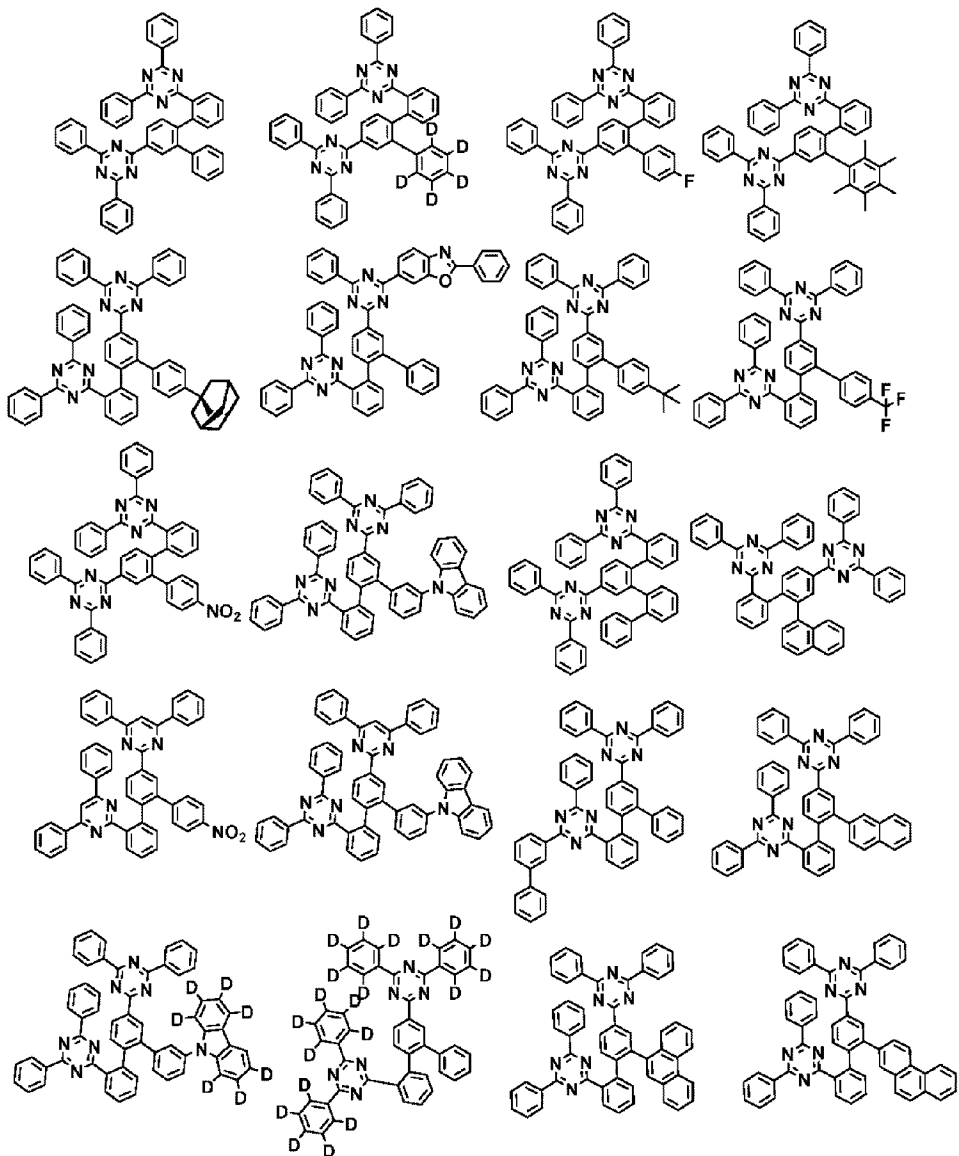
상기 피리딘, 피리미딘, 트리아진, 퀴놀린, 퀴나졸린, 또는 퀴녹살린은 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 20의 아릴기로 치환된 것인 화합물.

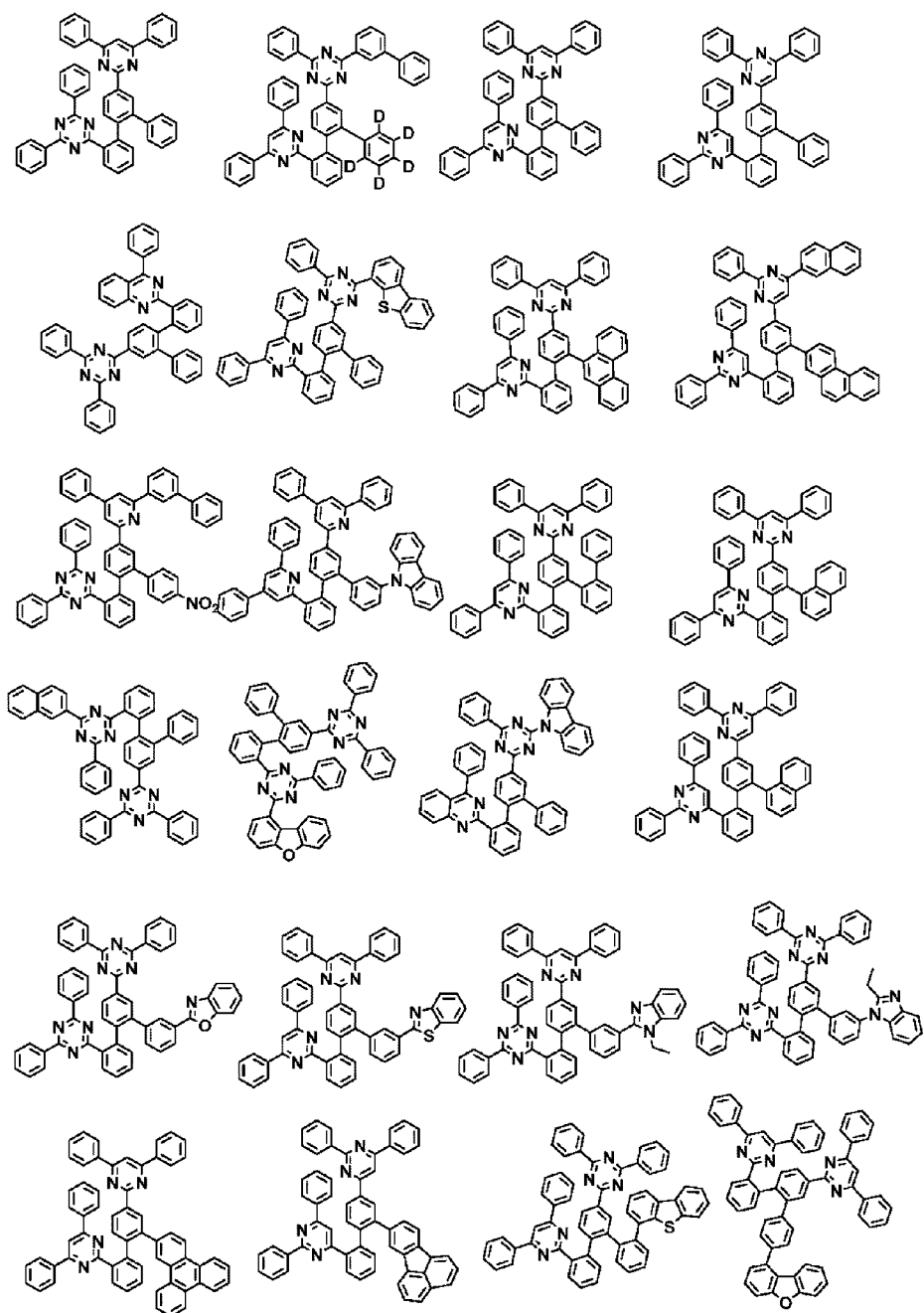
[청구항 6] 청구항 1에 있어서, 상기 B는 피리딘, 피리미딘, 또는 트리아진이고, 상기 피리딘, 피리미딘, 또는 트리아진은 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 20의 아릴기로 치환된 것인 화합물.

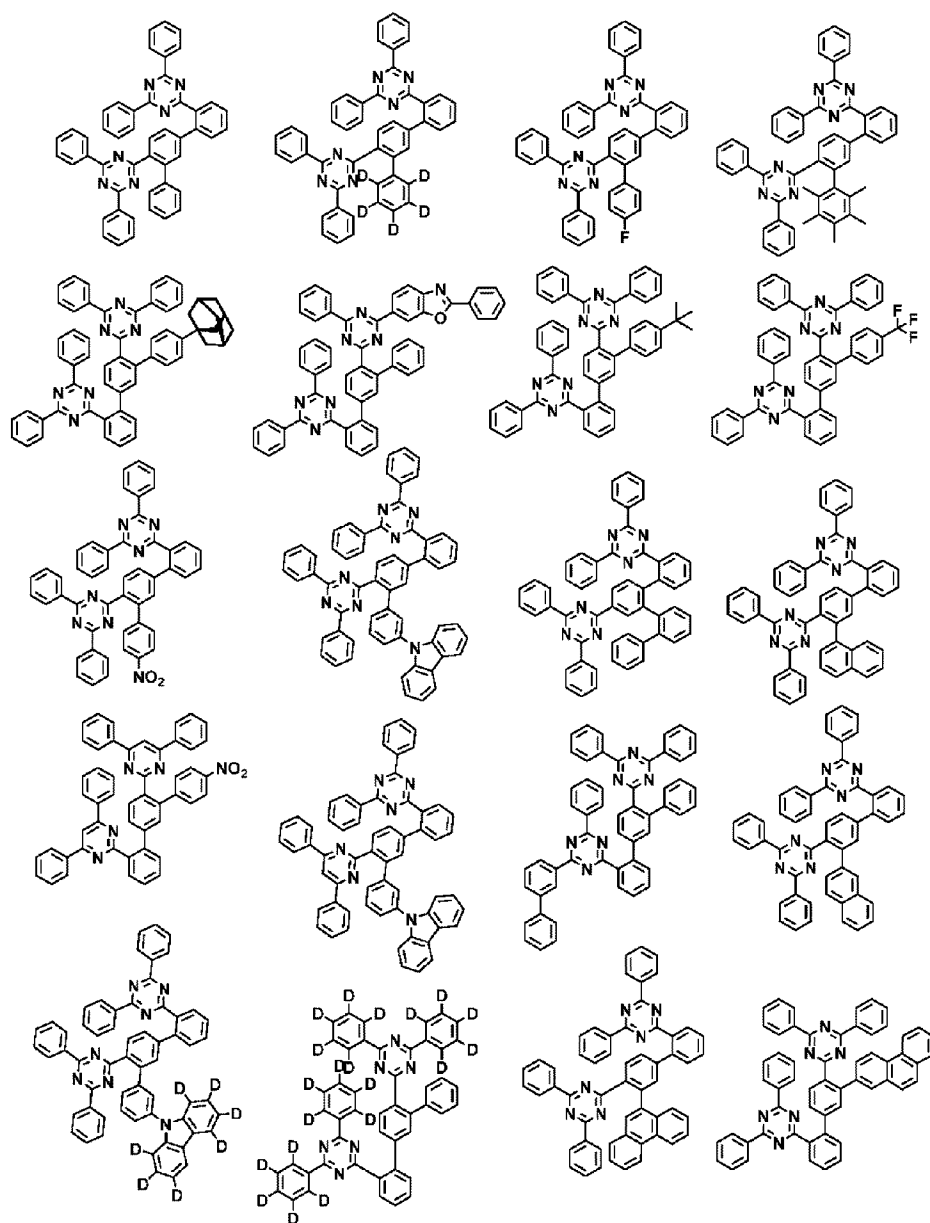
[청구항 7] 청구항 3에 있어서, 상기 R1 및 R2는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로, 수소, 중수소, 니트릴기, 니트로기, 할로젠기, 탄소수 1 내지 10의 알

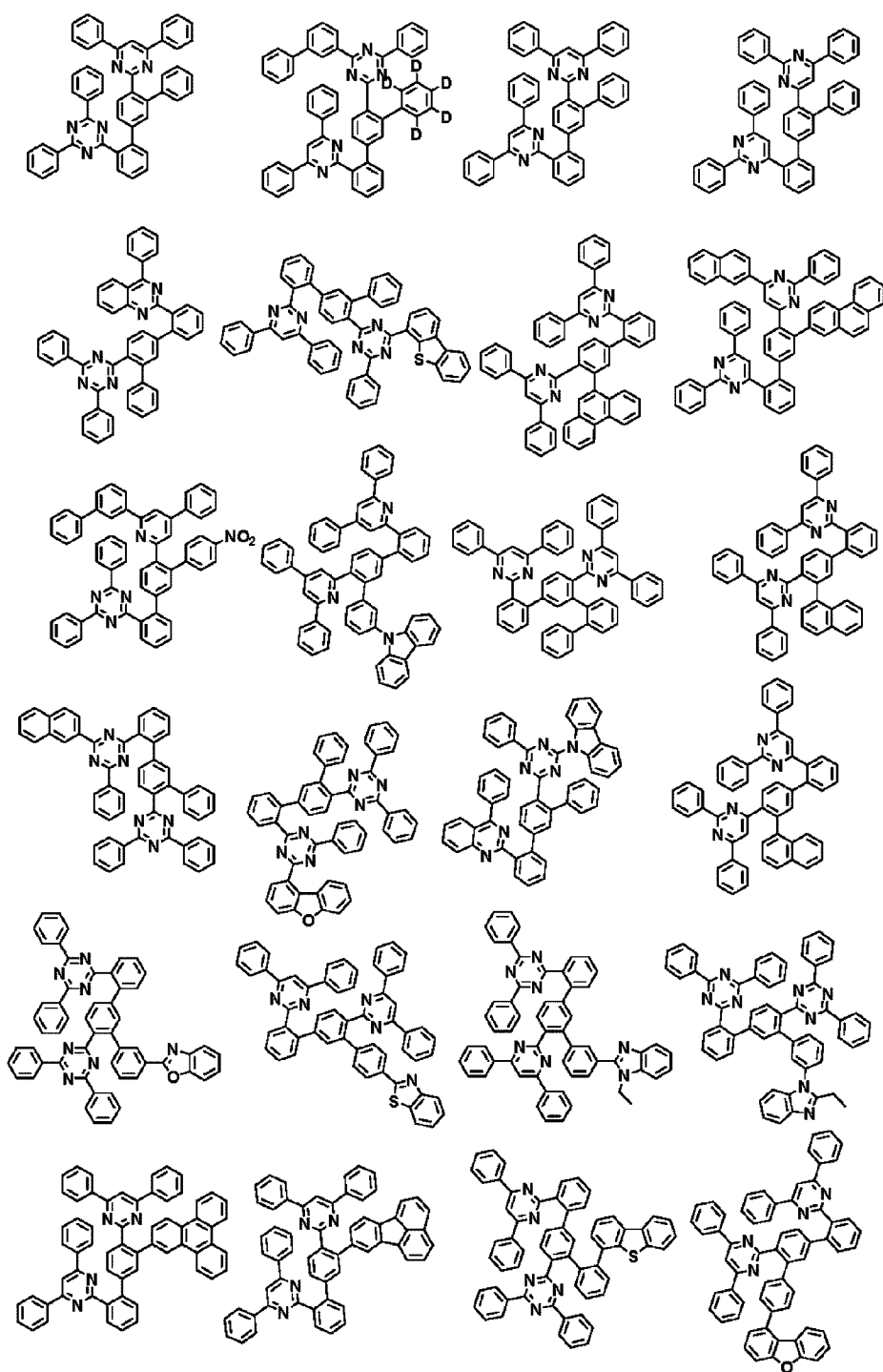
킬기, 탄소수 6 내지 30의 아릴기, 또는 탄소수 3 내지 30의 헤테로아릴기인 것인 화합물.

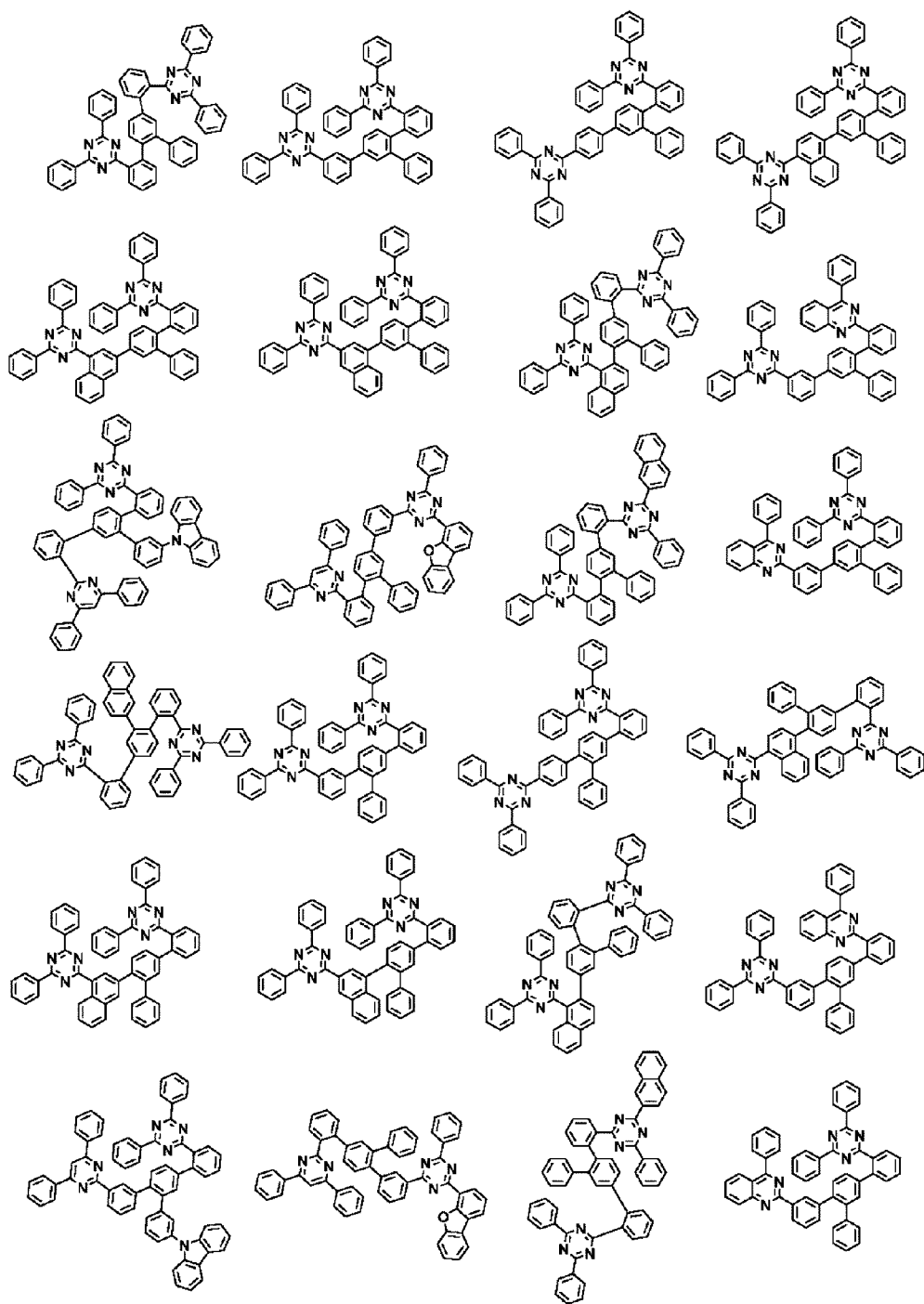
[청구항 8] 청구항 1에 있어서, 상기 화학식 1은 아래 화합물 중 어느 하나인 것인 화합물:

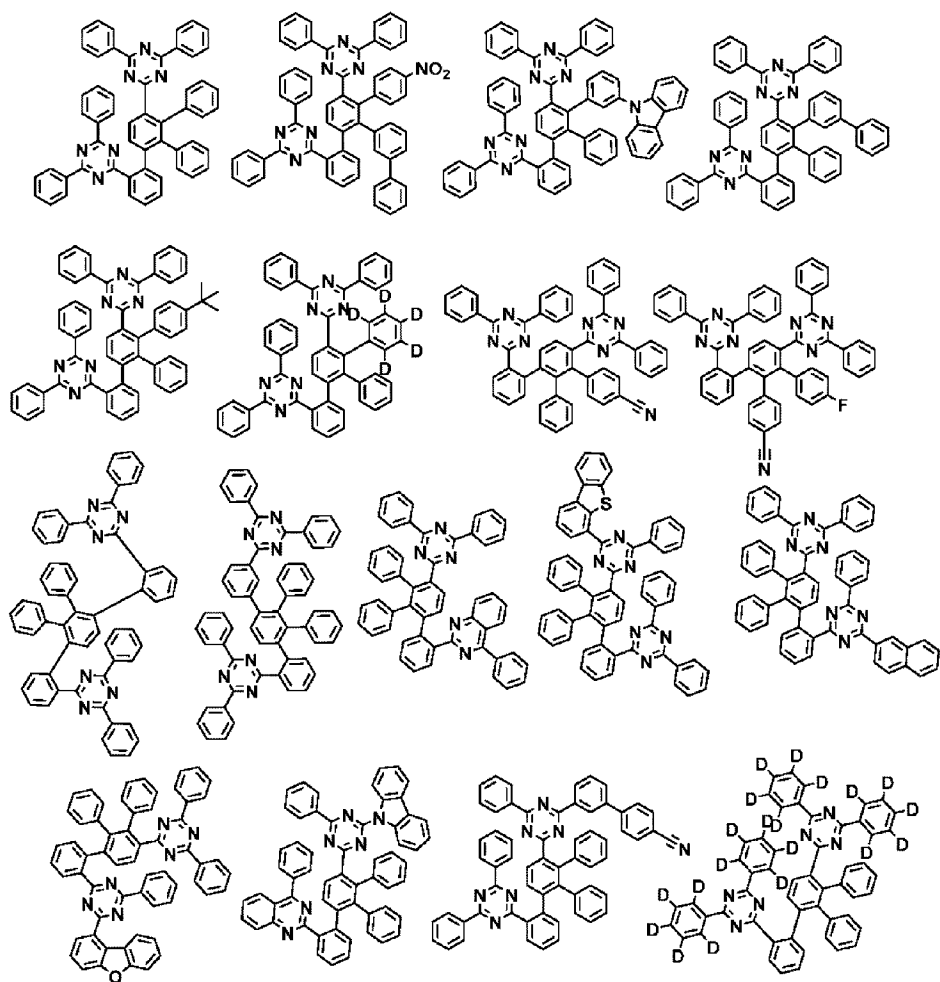


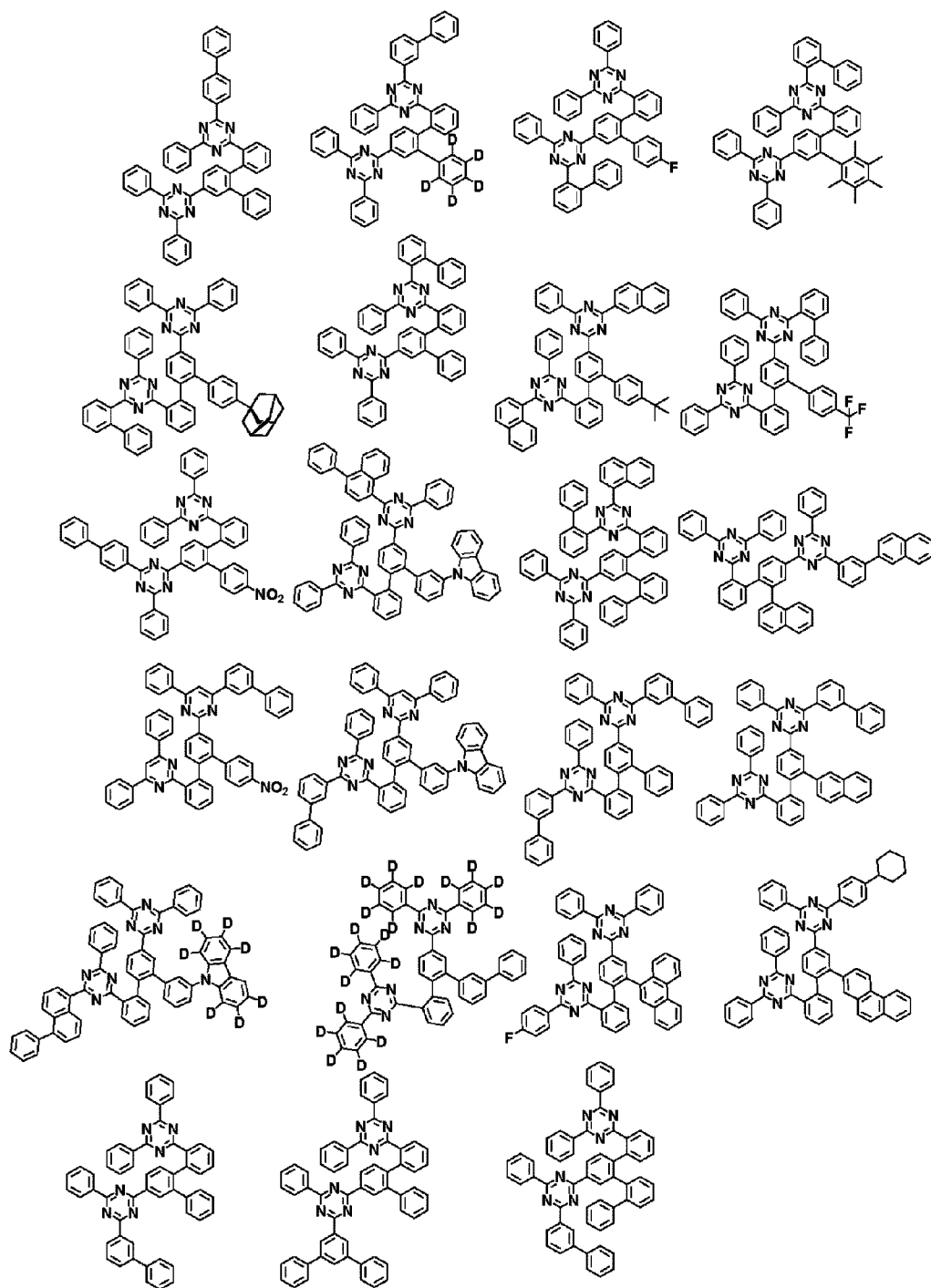


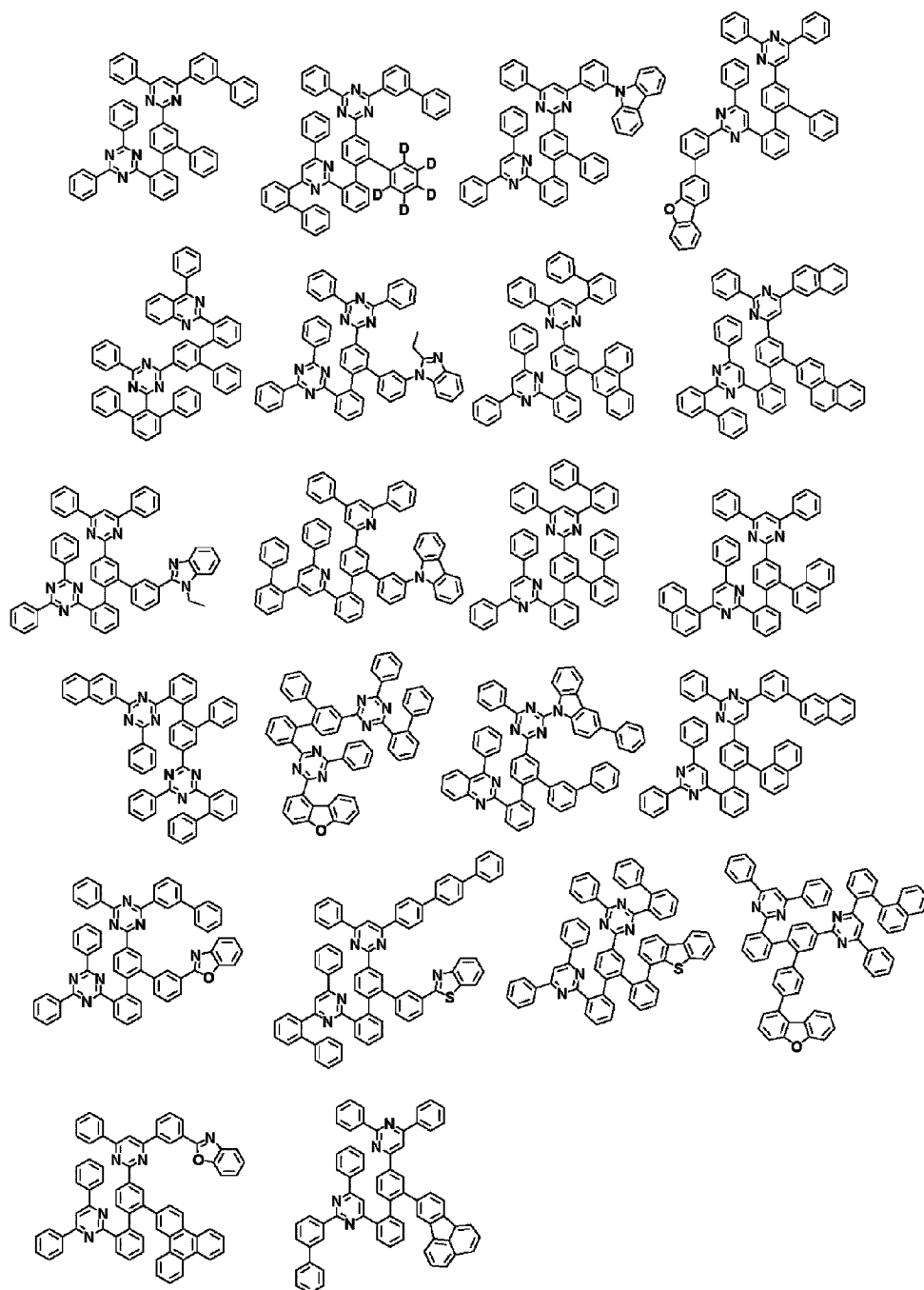


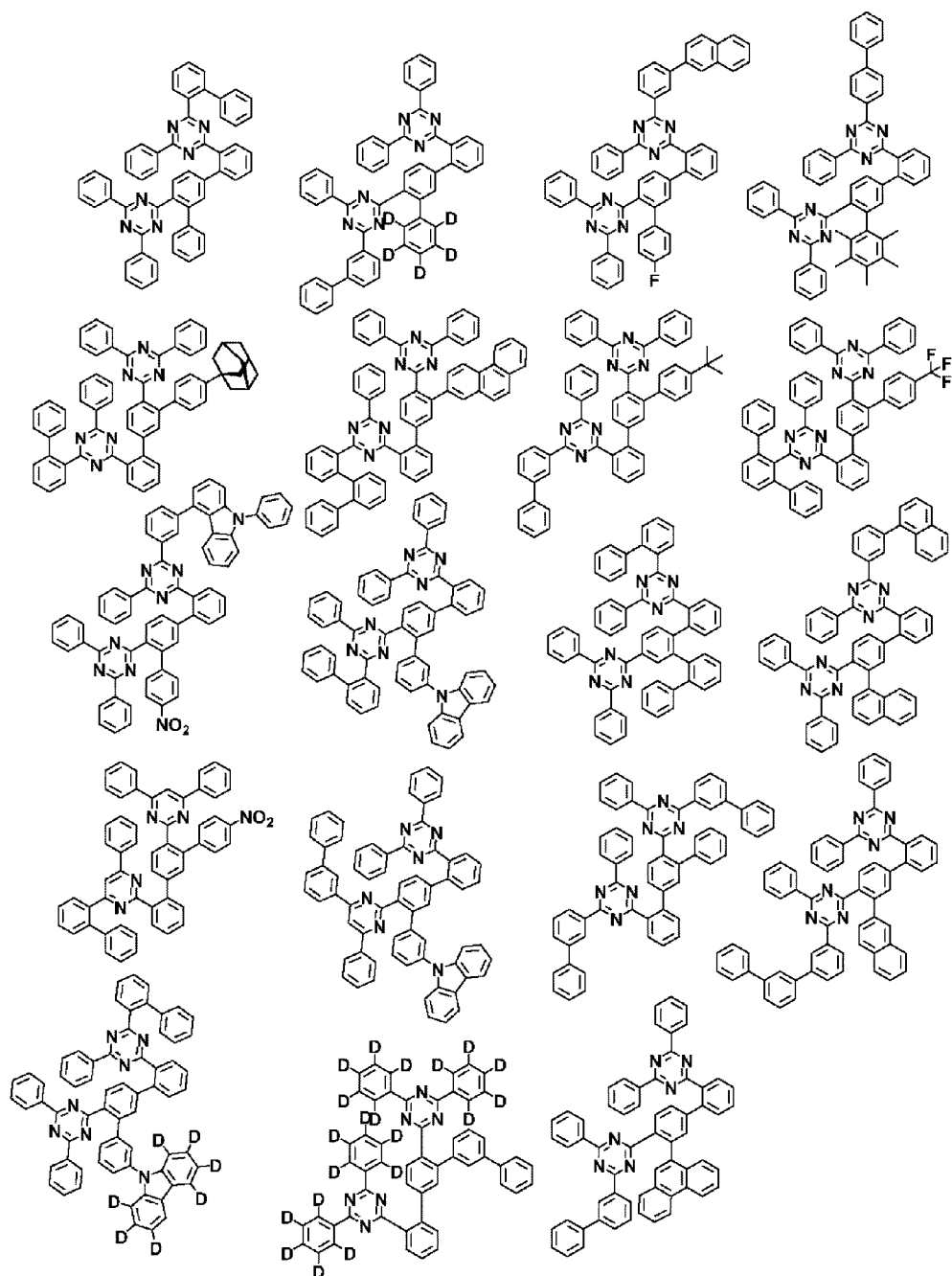


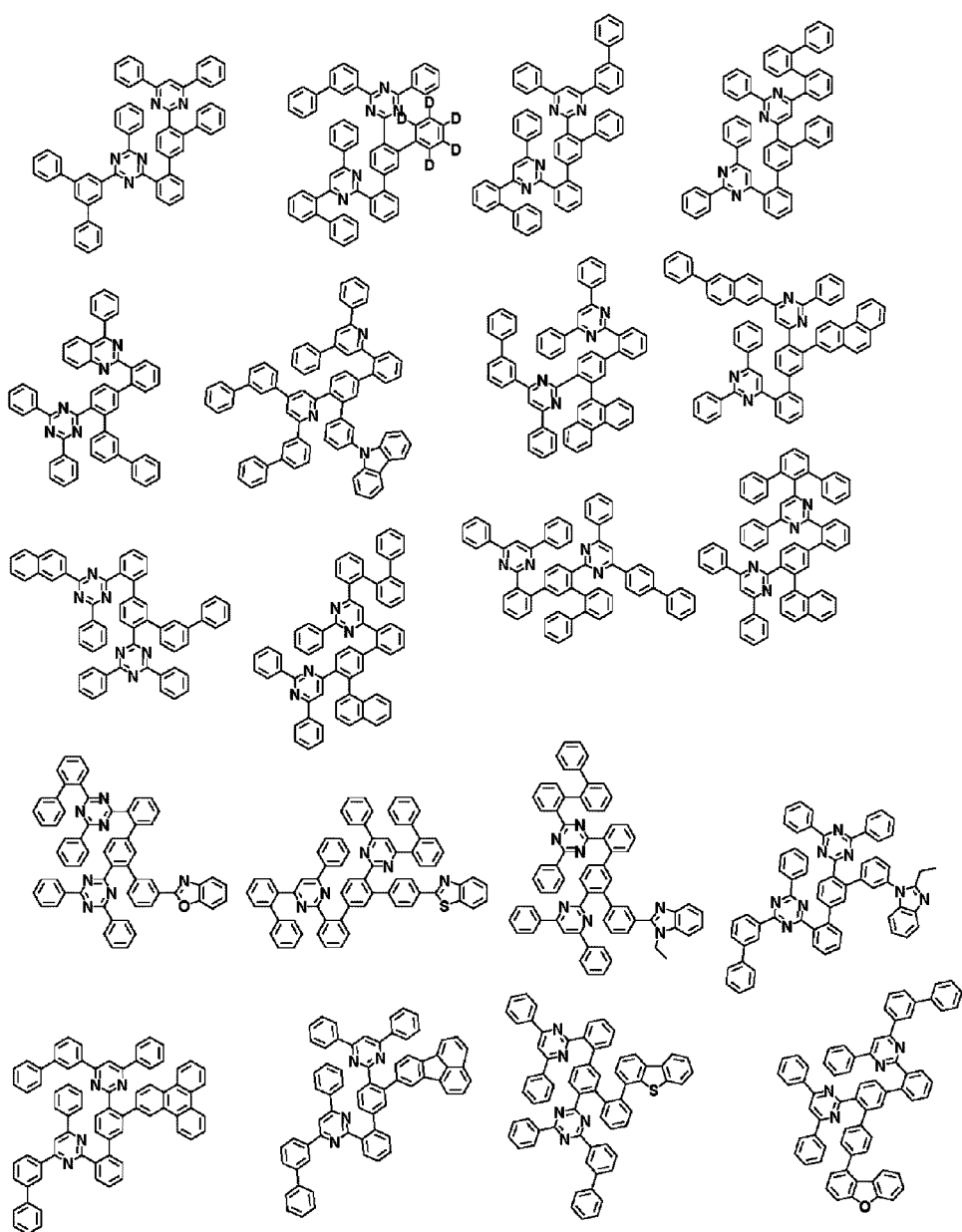


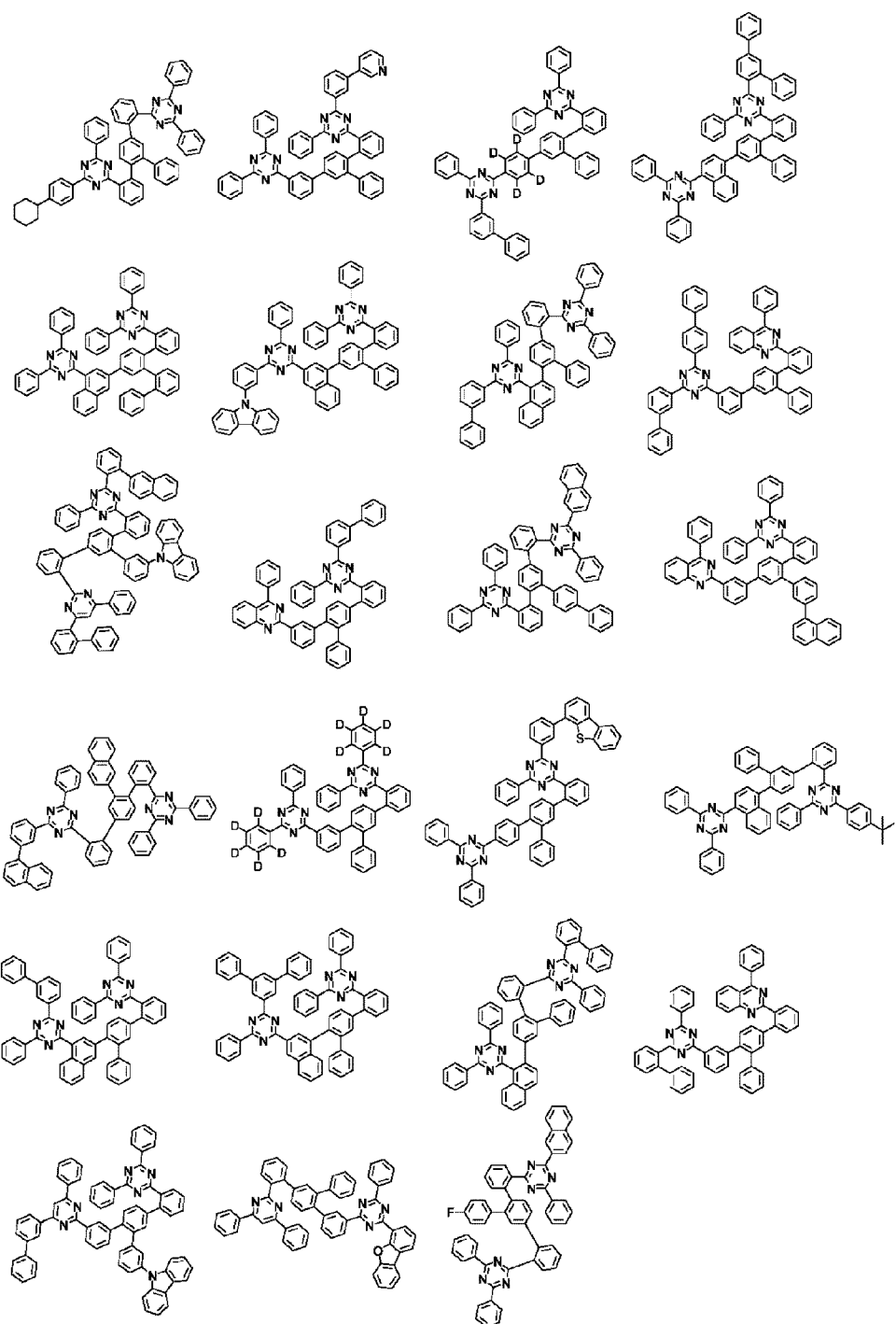


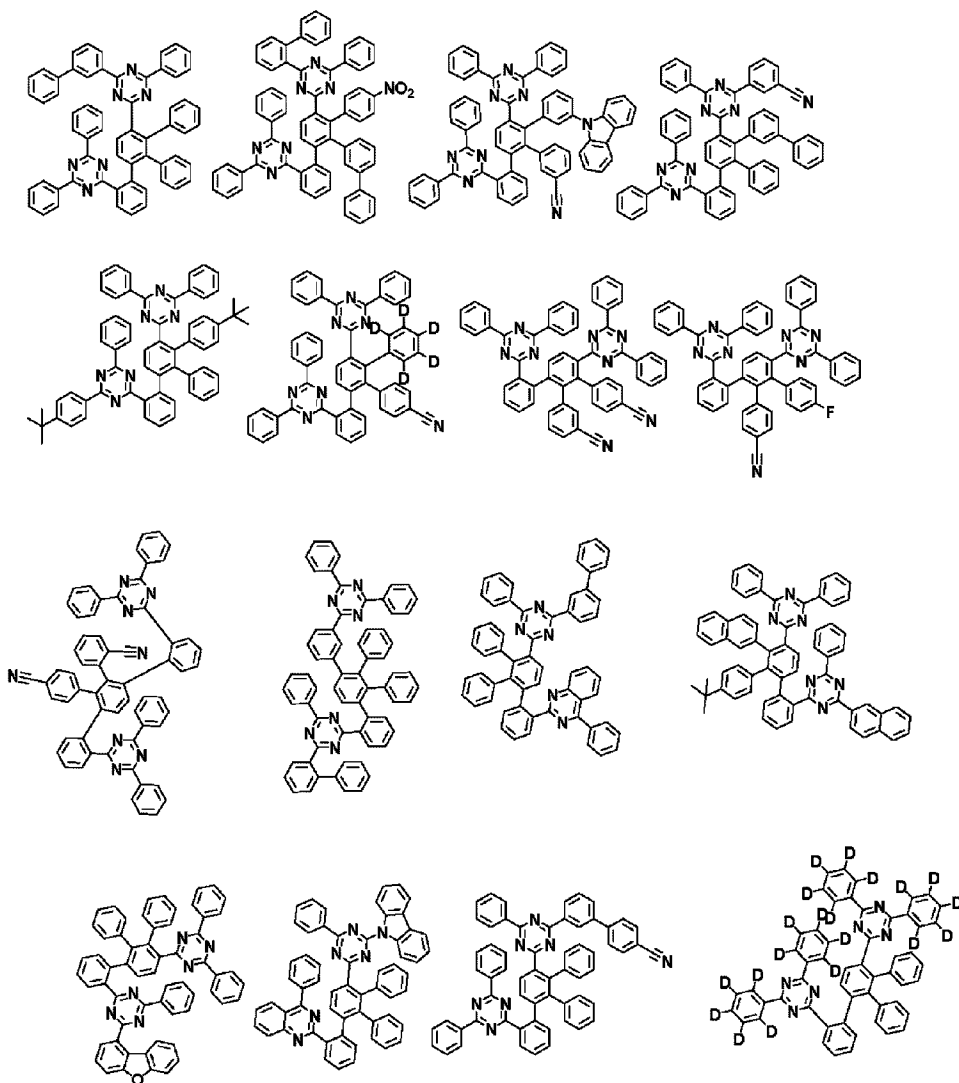












- [청구항 9] 제1 전극; 상기 제1 전극과 대향하여 구비되는 제2 전극; 및 상기 제1 전극과 상기 제2 전극 사이에 구비되는 1층 이상의 유기물층을 포함하는 유기 발광 소자로서, 상기 유기물층 중 1층 이상이 청구항 1 내지 8 중 어느 한 항에 따른 화합물을 포함하는 유기 발광 소자.
- [청구항 10] 청구항 9에 있어서, 상기 유기물층은 전자수송층, 전자주입층, 및 전자주입 및 수송 층 중 1층 이상을 포함하고, 상기 층들 중 1층 이상이 상기 화합물을 포함하는 유기 발광 소자.

[도1]

4
3
2
1

[도2]

4
8
7
6
5
2
1

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/KR2023/016753

A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER

C07D 251/24(2006.01)i; **C07D 239/26**(2006.01)i; **C07D 403/10**(2006.01)i; **C07D 401/10**(2006.01)i; **C07D 401/14**(2006.01)i;
C07D 405/14(2006.01)i; **C07D 413/14**(2006.01)i; **C07D 417/14**(2006.01)i; **C07D 403/14**(2006.01)i; **C07D 409/14**(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 251/24(2006.01); C07D 213/53(2006.01); C07D 251/12(2006.01); C07D 401/10(2006.01); C07D 401/14(2006.01);
 C09K 11/06(2006.01); H01L 51/50(2006.01); H10K 50/00(2023.01); H10K 99/00(2023.01)

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: 유기 발광소자(OLED, organic light emitting diode), 페닐
 (phenyl), 헤테로아릴(heteroaryl), 전자수송층(electron transfer layer)

C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
X A	KR 10-2021-0097688 A (TOSOH CORPORATION et al.) 09 August 2021 (2021-08-09) See claims 1 and 6; and paragraphs [0134]-[0143], [0289], [0290], [0348] and [0349].	1,2,4-6,8-10 3,7
A	KR 10-2019-0085041 A (MERCK PATENT GMBH) 17 July 2019 (2019-07-17) See entire document.	1-10
A	KR 10-2016-0126698 A (SAMSUNG SDI CO., LTD.) 02 November 2016 (2016-11-02) See entire document.	1-10
A	JP 2014-141467 A (TOSOH CORP.) 07 August 2014 (2014-08-07) See entire document.	1-10
A	WO 2020-184379 A1 (HODOGAYA CHEMICAL CO., LTD. et al.) 17 September 2020 (2020-09-17) See entire document.	1-10



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
 “D” document cited by the applicant in the international application
 “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

07 February 2024

Date of mailing of the international search report

07 February 2024

Name and mailing address of the ISA/KR

**Korean Intellectual Property Office
 Government Complex-Daejeon Building 4, 189 Cheongsaro, Seo-gu, Daejeon 35208**

Facsimile No. +82-42-481-8578

Authorized officer

Telephone No.

INTERNATIONAL SEARCH REPORT
Information on patent family members

International application No.

PCT/KR2023/016753

Patent document cited in search report			Publication date (day/month/year)	Patent family member(s)			Publication date (day/month/year)
KR	10-2021-0097688	A	09 August 2021	CN	113166098	A	23 July 2021
				JP	2020-094034	A	18 June 2020
				WO	2020-111225	A1	04 June 2020
KR	10-2019-0085041	A	17 July 2019	CN	109890938	A	14 June 2019
				EP	3538623	A1	18 September 2019
				EP	3538623	B1	20 December 2023
				EP	4271163	A2	01 November 2023
				EP	4271163	A3	10 January 2024
				JP	2020-500187	A	09 January 2020
				JP	7225094	B2	20 February 2023
				KR	10-2585418	B1	05 October 2023
				TW	201833100	A	16 September 2018
				TW	I756292	B	01 March 2022
				US	11711976	B2	25 July 2023
				US	2020-0203624	A1	25 June 2020
				WO	2018-087346	A1	17 May 2018
KR	10-2016-0126698	A	02 November 2016	CN	107001292	A	01 August 2017
				CN	107001292	B	19 May 2020
				EP	3287505	A1	28 February 2018
				EP	3287505	B1	28 April 2021
				JP	2018-518036	A	05 July 2018
				JP	6714002	B2	24 June 2020
				KR	10-1888934	B1	16 August 2018
				TW	201710243	A	16 March 2017
				TW	I668212	B	11 August 2019
				US	10797245	B2	06 October 2020
				US	2017-0309830	A1	26 October 2017
WO	2016-171358	A1	27 October 2016				
JP	2014-141467	A	07 August 2014	JP	6264877	B2	24 January 2018
				TW	201443036	A	16 November 2014
				WO	2014-104235	A1	03 July 2014
WO	2020-184379	A1	17 September 2020	CN	113557233	A	26 October 2021
				TW	202045479	A	16 December 2020
				US	2022-0177454	A1	09 June 2022

A. 발명이 속하는 기술분류(국제특허분류(IPC))

C07D 251/24(2006.01)i; C07D 239/26(2006.01)i; C07D 403/10(2006.01)i; C07D 401/10(2006.01)i; C07D 401/14(2006.01)i;
C07D 405/14(2006.01)i; C07D 413/14(2006.01)i; C07D 417/14(2006.01)i; C07D 403/14(2006.01)i; C07D 409/14(2006.01)i

B. 조사된 분야

조사된 최소문헌(국제특허분류를 기재)

C07D 251/24(2006.01); C07D 213/53(2006.01); C07D 251/12(2006.01); C07D 401/10(2006.01); C07D 401/14(2006.01);
C09K 11/06(2006.01); H01L 51/50(2006.01); H10K 50/00(2023.01); H10K 99/00(2023.01)

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: 유기발광소자(OLED, organic light emitting diode), 페닐(phenyl), 헤테로아릴(heteroaryl), 전자수송층(electron transfer layer)

C. 관련 문헌

카테고리*	인용문헌명 및 관련 구절(해당하는 경우)의 기재	관련 청구항
X A	KR 10-2021-0097688 A (토소가부시키가이샤 등) 2021.08.09 청구항 1, 6; 단락 [0134]-[0143], [0289], [0290], [0348], [0349]	1,2,4-6,8-10 3,7
A	KR 10-2019-0085041 A (베르크 파텐트 게엠베하) 2019.07.17 전체 문헌	1-10
A	KR 10-2016-0126698 A (삼성에스디아이 주식회사) 2016.11.02 전체 문헌	1-10
A	JP 2014-141467 A (TOSOH CORP.) 2014.08.07 전체 문헌	1-10
A	WO 2020-184379 A1 (HODOGAYA CHEMICAL CO., LTD. 등) 2020.09.17 전체 문헌	1-10

☐ 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

“D” 본 국제출원에서 출원인이 인용한 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

2024년02월07일(07.02.2024)

국제조사보고서 발송일

2024년02월07일(07.02.2024)

ISA/KR의 명칭 및 우편주소

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

팩스 번호 +82-42-481-8578

심사관

허주형

전화번호 +82-42-481-5373

국제조사보고서에서 인용된 특허문헌	공개일	대응특허문헌	공개일
KR 10-2021-0097688 A	2021/08/09	CN 113166098 A	2021/07/23
		JP 2020-094034 A	2020/06/18
		WO 2020-111225 A1	2020/06/04
KR 10-2019-0085041 A	2019/07/17	CN 109890938 A	2019/06/14
		EP 3538623 A1	2019/09/18
		EP 3538623 B1	2023/12/20
		EP 4271163 A2	2023/11/01
		EP 4271163 A3	2024/01/10
		JP 2020-500187 A	2020/01/09
		JP 7225094 B2	2023/02/20
		KR 10-2585418 B1	2023/10/05
		TW 201833100 A	2018/09/16
		TW I756292 B	2022/03/01
		US 11711976 B2	2023/07/25
		US 2020-0203624 A1	2020/06/25
		WO 2018-087346 A1	2018/05/17
KR 10-2016-0126698 A	2016/11/02	CN 107001292 A	2017/08/01
		CN 107001292 B	2020/05/19
		EP 3287505 A1	2018/02/28
		EP 3287505 B1	2021/04/28
		JP 2018-518036 A	2018/07/05
		JP 6714002 B2	2020/06/24
		KR 10-1888934 B1	2018/08/16
		TW 201710243 A	2017/03/16
		TW I668212 B	2019/08/11
		US 10797245 B2	2020/10/06
		US 2017-0309830 A1	2017/10/26
		WO 2016-171358 A1	2016/10/27
JP 2014-141467 A	2014/08/07	JP 6264877 B2	2018/01/24
		TW 201443036 A	2014/11/16
		WO 2014-104235 A1	2014/07/03
WO 2020-184379 A1	2020/09/17	CN 113557233 A	2021/10/26
		TW 202045479 A	2020/12/16
		US 2022-0177454 A1	2022/06/09