

(12) 특허협력조약에 의하여 공개된 국제출원

(19) 세계지식재산권기구
국제사무국



(10) 국제공개번호

(43) 국제공개일
2019년 12월 19일 (19.12.2019) WIPO | PCT

WO 2019/240532 A1

(51) 국제특허분류:
C07D 405/14 (2006.01) C07D 333/76 (2006.01)
C07D 409/14 (2006.01) H01L 51/00 (2006.01)
C07D 307/91 (2006.01) H01L 51/50 (2006.01)

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).

(21) 국제출원번호: PCT/KR2019/007198

(22) 국제출원일: 2019년 6월 14일 (14.06.2019)

(25) 출원언어: 한국어

공개:

(26) 공개언어: 한국어

— 국제조사보고서와 함께 (조약 제21조(3))

(30) 우선권정보:
10-2018-0068054 2018년 6월 14일 (14.06.2018) KR

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

(72) 발명자: 정민우 (JUNG, Min Woo); 34122 대전시 유성구 문지로 188 LG화학 기술연구원, Daejeon (KR). 이동훈 (LEE, Dong Hoon); 34122 대전시 유성구 문지로 188 LG화학 기술연구원, Daejeon (KR). 장분재 (JANG, Boonjae); 34122 대전시 유성구 문지로 188 LG화학 기술연구원, Daejeon (KR). 이정하 (LEE, Jungha); 34122 대전시 유성구 문지로 188 LG화학 기술연구원, Daejeon (KR). 한수진 (HAN, Su Jin); 34122 대전시 유성구 문지로 188 LG화학 기술연구원, Daejeon (KR). 박של찬 (PARK, Seulchan); 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 국내 권리의 보호를 위하여): ARIPO (BW, GH, GM, KE,

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

(54) 발명의 명칭: 헤테로고리 화합물 및 이를 포함하는 유기 발광 소자

4
3
2
1

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

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



WO 2019/240532 A1

명세서

발명의 명칭: 헤테로고리 화합물 및 이를 포함하는 유기 발광 소자 기술분야

- [1] 본 발명은 2018년 6월 14일에 한국 특허청에 제출된 한국 특허 출원 제 10-2018-0068054호의 출원일의 이익을 주장하며, 그 내용 전부는 본 명세서에 포함된다.
- [2] 본 명세서는 헤테로고리 화합물 및 이를 포함하는 유기 발광 소자에 관한 것이다.

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

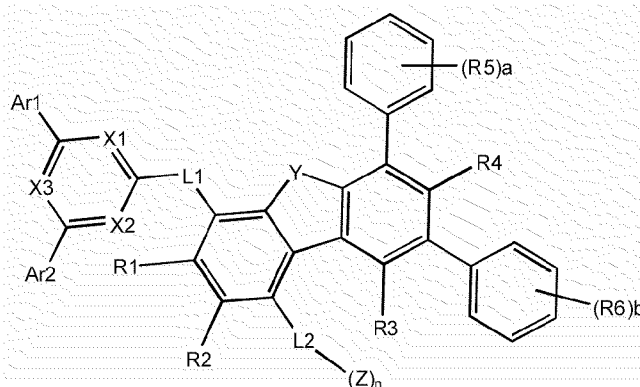
- [5] 본 명세서는 헤테로고리 화합물 및 이를 포함하는 유기 발광 소자를 제공한다.

과제 해결 수단

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

[7] [화학식 1]

[8]



- [9] 상기 화학식 1에서,
 [10] X1 내지 X3은 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로, N 또는 CH이며
 [11] X1 내지 X3 중 적어도 2 이상은 N이며,
 [12] Y는 O 또는 S 이고,
 [13] R1 내지 R6은 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로, 수소, 중수소, 할로젠기, 니트릴기, 치환 또는 비치환된 알킬기, 치환 또는 비치환된 실릴기, 치환 또는 비치환된 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기이고,
 [14] Ar1 및 Ar2는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로, 치환 또는 비치환된 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기이고,
 [15] L1 및 L2는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로, 직접결합, 치환 또는 비치환된 아릴렌기, 또는 치환 또는 비치환된 헤테로아릴렌기이고,
 [16] Z는 니트릴기, 할로젠기, 치환 또는 비치환된 알킬기, 치환 또는 비치환된 실릴기, 치환 또는 비치환된 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기이고,
 [17] n은 0 내지 2의 정수이고,
 [18] n이 0인 경우, L2는 수소가 결합하며,
 [19] n이 2인 경우, Z는 같거나 상이하고,
 [20] a 및 b는 0 내지 5의 정수이고, a 및 b가 복수일 때, 괄호 안의 치환기는 서로 같거나 상이하다.
 [21] 또한, 본 명세서는 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 상기 헤테로고리 화합물을 포함하는 것인 유기 발광 소자를 제공한다.

발명의 효과

- [22] 본 명세서의 일 실시상태에 따른 헤테로고리 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

- [23] 도 1은 본 명세서의 일 실시상태에 따르는 유기 발광 소자를 도시한 것이다.
 [24] 도 2는 본 명세서의 일 실시상태에 따르는 유기 발광 소자를 도시한 것이다.
 [25] [부호의 설명]
 [26] 1: 기판
 [27] 2: 제1 전극
 [28] 3: 유기물층
 [29] 4: 제2 전극
 [30] 5: 정공주입층
 [31] 6: 정공수송층

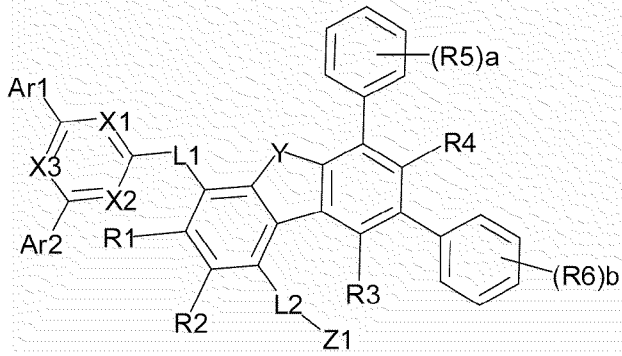
- [32] 7: 전자저지층
- [33] 8: 발광층
- [34] 9: 전자수송층
- [35] 10: 전자주입층

발명의 실시를 위한 최선의 형태

- [36] 이하, 본 명세서에 대하여 더욱 상세하게 설명한다.
- [37] 본 명세서는 상기 화학식 1로 표시되는 헤테로고리 화합물을 제공한다.
- [38] 본 명세서에 있어서, 어떤 부분이 어떤 구성요소를 "포함" 한다고 할 때, 이는 특별히 반대되는 기재가 없는 한 다른 구성요소를 제외하는 것이 아니라 다른 구성요소를 더 포함할 수 있는 것을 의미한다.
- [39] 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.
- [40] 본 명세서에 있어서 치환기의 예시들은 아래에서 설명하나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [41] 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.
- [42] 본 명세서에서 "치환 또는 비치환된"이라는 용어는 중수소; 니트릴기; 치환 또는 비치환된 알킬기; 치환 또는 비치환된 시클로알킬기; 치환 또는 비치환된 실릴기; 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 헤테로고리기, 알킬기로 치환된 아릴기 동일 수 있다.
- [43] 본 명세서에 있어서, 할로젠기는 불소, 염소, 브롬 또는 요오드가 될 수 있다.
- [44] 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, 시클로헵틸메틸, 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.

- [45] 본 명세서에 있어서, 실릴기는 구체적으로 트리메틸실릴기, 트리에틸실릴기, *t*-부틸디메틸실릴기, 비닐디메틸실릴기, 프로필디메틸실릴기, 트리페닐실릴기, 디페닐실릴기, 페닐실릴기 등이 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [46] 본 명세서에 있어서, 아릴기는 특별히 한정되지 않으나, 탄소수 6 내지 30인 것이 바람직하며, 상기 아릴기는 단환식 또는 다환식일 수 있다.
- [47] 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.
- [48] 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.
- [49] 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, 퓨라닐기, 피롤기, 이미다졸릴기, 티아졸릴기, 옥사졸릴기, 옥사디아졸릴기, 피리딜기, 바이피리딜기, 피리미딜기, 트리아지닐기, 트리아졸릴기, 아크리딜기, 피리다지닐기, 피라지닐기, 퀴놀리닐기, 퀴나졸리닐기, 퀴녹살리닐기, 프탈라지닐기, 피리도 피리미딜기, 피리도 피라지닐기, 피라지노 피라지닐기, 이소퀴놀리닐기, 인돌릴기, 카바졸릴기, 벤즈옥사졸릴기, 벤즈이미다졸릴기, 벤조티아졸릴기, 벤조카바졸릴기, 벤조티오펜기, 디벤조티오펜기, 벤조퓨라닐기, 페난쓰롤리닐기(phenanthroline), 이소옥사졸릴기, 티아디아졸릴기, 페노티아지닐기 및 디벤조퓨라닐기 등이 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.
- [50] 본 명세서에 있어서, 아릴렌기는 2가인 점을 제외하고, 아릴기의 정의와 같다.
- [51] 본 명세서에 있어서, 헤테로아릴렌기는 2가인 점을 제외하고, 헤테로아릴기의 정의와 같다.
- [52] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 화학식 1은 하기 화학식 2 또는 3로 표시된다.
- [53] [화학식 2]

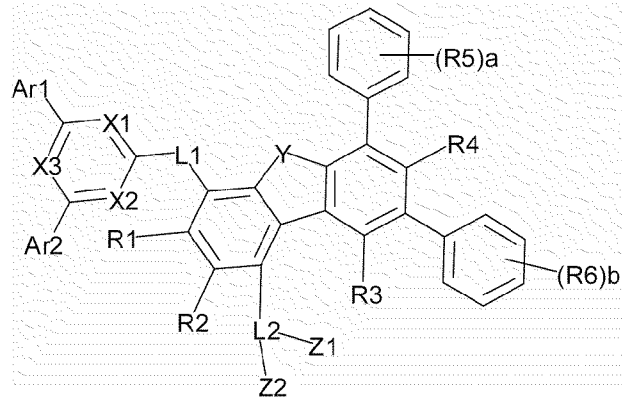
[54]



[55]

[화학식 3]

[56]



[57] 상기 화학식 2 및 3에 있어서, 상기 X1 내지 X3, L1, L2, Y, Ar1, Ar2, R1 내지 R6, n, a 및 b는 상기 화학식 1에서 정의한 바와 같고,

[58] Z1 및 Z2는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 니트릴기, 할로젠기, 치환 또는 비치환된 알킬기, 치환 또는 비치환된 실릴기, 치환 또는 비치환된 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기이다.

[59] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 X1 및 X2는 N이고, X3은 CH이다.

[60] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 X1 및 X3은 N이고, X2는 CH이다.

[61] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 X2 및 X3은 N이고, X1은 CH이다.

[62] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 X1 내지 X3은 N이다.

[63] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 R1 내지 R6은 수소이다.

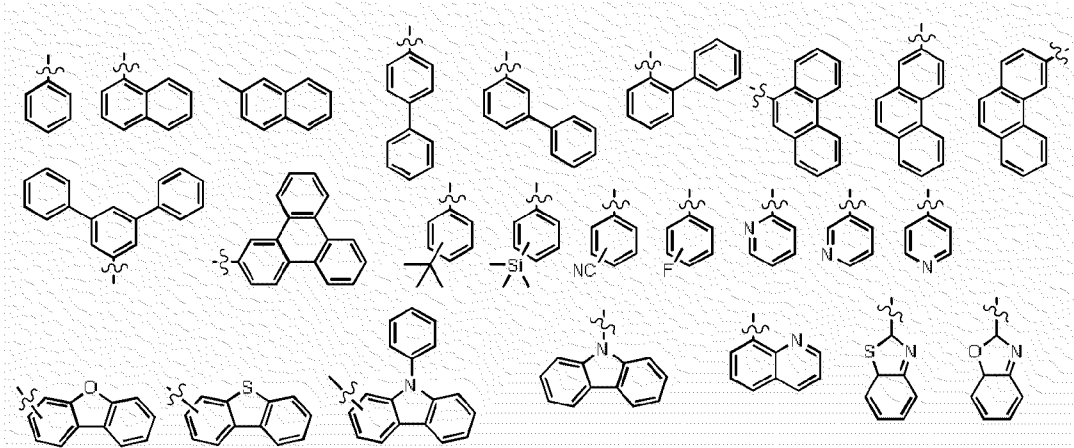
[64] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 Y는 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴기; 또는 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 30의 헤테로아릴기이다.

[65] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 Z1 및 Z2는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 니트릴기, 할로젠기, 치환 또는 비치환된 탄소수 1 내지 10의 알킬기, 탄소수 1 내지 10의 알킬기로 치환 또는 비치환된 실릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 30의 헤테로아릴기이다.

[66] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 Z1 및 Z2는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 니트릴기, 할로젠기, 탄소수 1 내지 10의 알킬기, 탄소수 1 내지

- 10의 알킬기로 실릴기, 탄소수 6 내지 30의 아릴기, 또는 탄소수 3 내지 30의 헤테로아릴기이고,
- [67] 상기 탄소수 1 내지 10의 알킬기, 탄소수 1 내지 10의 알킬기로 실릴기, 탄소수 6 내지 30의 아릴기, 또는 탄소수 3 내지 30의 헤테로아릴기는 할로젠기, 니트릴기, 치환 또는 비치환된 알킬기, 치환 또는 비치환된 실릴기, 치환 또는 비치환된 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기로 치환 또는 비치환된다.
- [68] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 Z1 및 Z2는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 니트릴기, 할로젠기, 탄소수 1 내지 10의 알킬기, 탄소수 1 내지 10의 알킬기로 실릴기, 탄소수 6 내지 30의 아릴기, 또는 탄소수 3 내지 30의 헤테로아릴기이고,
- [69] 상기 탄소수 1 내지 10의 알킬기, 탄소수 1 내지 10의 알킬기로 실릴기, 탄소수 6 내지 30의 아릴기, 또는 탄소수 3 내지 30의 헤테로아릴기는 니트릴기, 불소기, 염소기, 브롬기, 아이오도기, 메틸기, 에틸기, 프로필기, 부틸기, 터부틸기, 메틸기로 치환된 실릴기, 페닐기, 나프틸기, 비페닐기, 터페닐기, 페난트렌기, 안트라센기, 트리페닐렌기, 피리딘기, 피리미딘기, 트리아진기, 디벤조퓨란기, 디벤조티오펜기, 카보졸기, 또는 퀴놀린기로 치환 또는 비치환된다.
- [70] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 Z1 및 Z2는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 페닐기; 나프틸기; 비페닐기; 터페닐기; 페난트렌기; 안트라센기; 트리페닐렌기; 피리딘기; 피리미딘기; 트리아진기; 퓨란기; 티오펜기; 디벤조퓨란기; 디벤조티오펜기; 카바졸기; 퀴놀린기; 벤조티아졸기; 또는 벤도옥사졸기이고,
- [71] 상기 페닐기; 나프틸기; 비페닐기; 터페닐기; 페난트렌기; 안트라센기; 트리페닐렌기; 피리딘기; 피리미딘기; 트리아진기; 퓨란기; 티오펜기; 디벤조퓨란기; 디벤조티오펜기; 카바졸기; 퀴놀린기; 벤조티아졸기; 또는 벤도옥사졸기는 니트릴기, 불소기, 염소기, 브롬기, 아이오도기, 메틸기, 에틸기, 프로필기, 부틸기, 터부틸기, 메틸기로 치환된 실릴기, 페닐기, 나프틸기, 비페닐기, 터페닐기, 페난트렌기, 안트라센기, 트리페닐렌기, 피리딘기, 피리미딘기, 트리아진기, 디벤조퓨란기, 디벤조티오펜기, 카보졸기, 또는 퀴놀린기로 치환 또는 비치환된다.
- [72] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 Z1 및 Z2는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 니트릴기, 플루오로기, 터부틸기, 트리메틸실릴기, 또는 페닐기로 치환 또는 비치환된 페닐기; 나프틸기; 비페닐기; 터페닐기; 페난트렌기; 트리페닐렌기; 피리딘기; 디벤조퓨란기; 디벤조티오펜기; 페닐기로 치환 또는 비치환된 카바졸기; 퀴놀린기; 벤조티아졸기; 또는 벤도옥사졸기이다.
- [73] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 Z1 및 Z2는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 하기 치환기들 중 선택되는 어느 하나일 수 있다.

[74]



[75] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 Ar1 및 Ar2는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 30의 헤테로아릴기이다.

[76] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 Ar1 및 Ar2는 서로 같고, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 30의 헤테로아릴기이다.

[77] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 Ar1 및 Ar2는 서로 같고, 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴기이다.

[78] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 Ar1 및 Ar2는 서로 같고, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 30의 헤테로아릴기이다.

[79] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 Ar1 및 Ar2는 서로 상이하고, 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 30의 헤테로아릴기이다.

[80] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 Ar1 및 Ar2는 서로 상이하고, 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴기이다.

[81] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 Ar1 및 Ar2는 서로 상이하고, 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 30의 헤테로아릴기이다.

[82] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 Ar1 및 Ar2는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 단환의 아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 10 내지 30의 다환의 아릴기, 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 30의 단환의 헤테로아릴기 또는 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 30의 다환의 헤테로아릴기이다.

[83] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 Ar1 및 Ar2는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 페닐기; 비페닐기; 나프틸기; 터페닐기; 플루오렌기; 스피로비플루오렌기; 페난트렌기; 트리페닐렌기; 카바졸기; 디벤조퓨란기; 디벤조티오펜기; 벤조나프토피란기; 또는 벤조나프토티오펜기이고,

[84] 상기 페닐기; 비페닐기; 나프틸기; 터페닐기; 플루오렌기; 스피로비플루오렌기; 페난트렌기; 트리페닐렌기; 카바졸기; 디벤조퓨란기; 디벤조티오펜기;

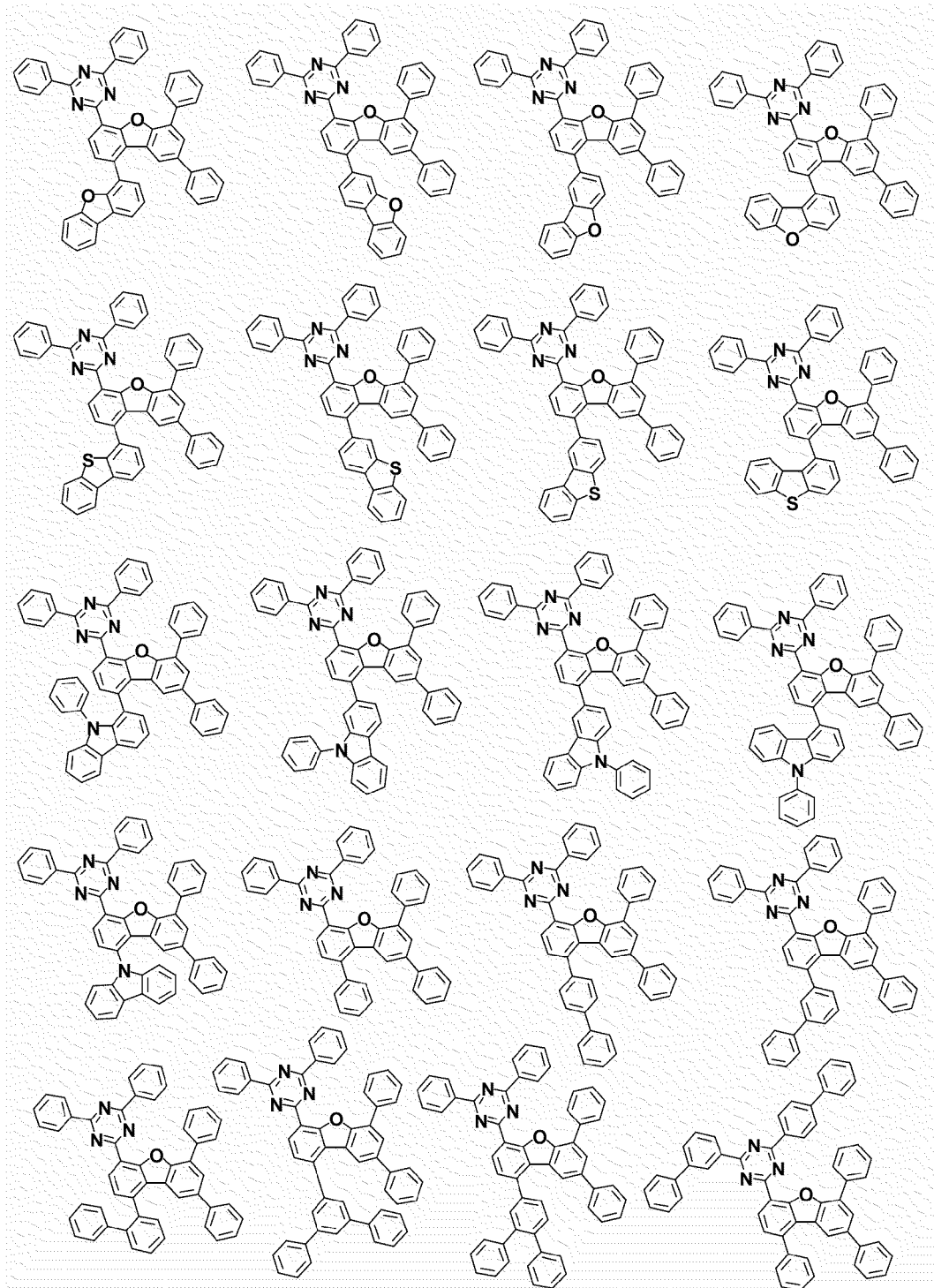
벤조나프토피란기; 또는 벤조나프토티오펜기는 중수소; 할로젠기; 탄소수 1 내지 10의 알킬기; 탄소수 1 내지 10의 알킬기 또는 탄소수 6 내지 30의 아릴기로 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 20의 아릴기; 및 탄소수 6 내지 30의 아릴기로 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 30의 헤테로아릴기로 이루어진 군에서 선택되는 하나 이상의 치환기로 치환 또는 비치환된다.

- [85] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 Ar1 및 Ar2는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 페닐기; 비페닐기; 나프틸기; 터페닐기; 플루오렌기; 스피로비플루오렌기; 페난트렌기; 트리페닐렌기; 카바졸기; 디벤조피란기; 디벤조티오펜기; 벤조나프토피란기; 또는 벤조나프토티오펜기이고,
- [86] 상기 페닐기; 비페닐기; 나프틸기; 터페닐기; 플루오렌기; 스피로비플루오렌기; 페난트렌기; 트리페닐렌기; 카바졸기; 디벤조피란기; 디벤조티오펜기; 벤조나프토피란기; 또는 벤조나프토티오펜기는 중수소; 페닐기; 나프틸기; 및 메틸기로 이루어진 군에서 선택되는 하나 이상의 치환기로 치환 또는 비치환된다.
- [87] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 Ar1 및 Ar2는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 페닐기; 비페닐기; 터페닐기; 나프틸기; 페난트렌기; 페닐기로 치환 또는 비치환된 카바졸기; 디벤조피란기; 또는 디벤조티오펜기이다.
- [88] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 Ar1 및 Ar2는 서로 같고, 페닐기; 비페닐기; 터페닐기; 나프틸기; 페난트렌기; 페닐기로 치환 또는 비치환된 카바졸기; 디벤조피란기; 또는 디벤조티오펜기이다.
- [89] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 Ar1 및 Ar2는 서로 상이하고, 각각 독립적으로 페닐기; 비페닐기; 터페닐기; 나프틸기; 페난트렌기; 페닐기로 치환 또는 비치환된 카바졸기; 디벤조피란기; 또는 디벤조티오펜기이다.
- [90] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 Ar1는 페닐기; 비페닐기; 터페닐기; 나프틸기; 페난트렌기; 페닐기로 치환 또는 비치환된 카바졸기; 디벤조피란기; 또는 디벤조티오펜기이다.
- [91] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 Ar2는 페닐기; 비페닐기; 터페닐기; 나프틸기; 페난트렌기; 페닐기로 치환 또는 비치환된 카바졸기; 디벤조피란기; 또는 디벤조티오펜기이다.
- [92] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 L1 및 L2는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 직접결합, 또는 치환 또는 비치환된 아릴렌기이다.
- [93] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 L1 및 L2는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 직접결합, 또는 탄소수 6 내지 30의 치환 또는 비치환된 아릴렌기이다.
- [94] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 L1 및 L2는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 직접결합, 또는 탄소수 6 내지 30의 단환의 치환 또는 비치환된 아릴렌기이다.
- [95] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 L1 및 L2는 서로 같거나 상이하고,

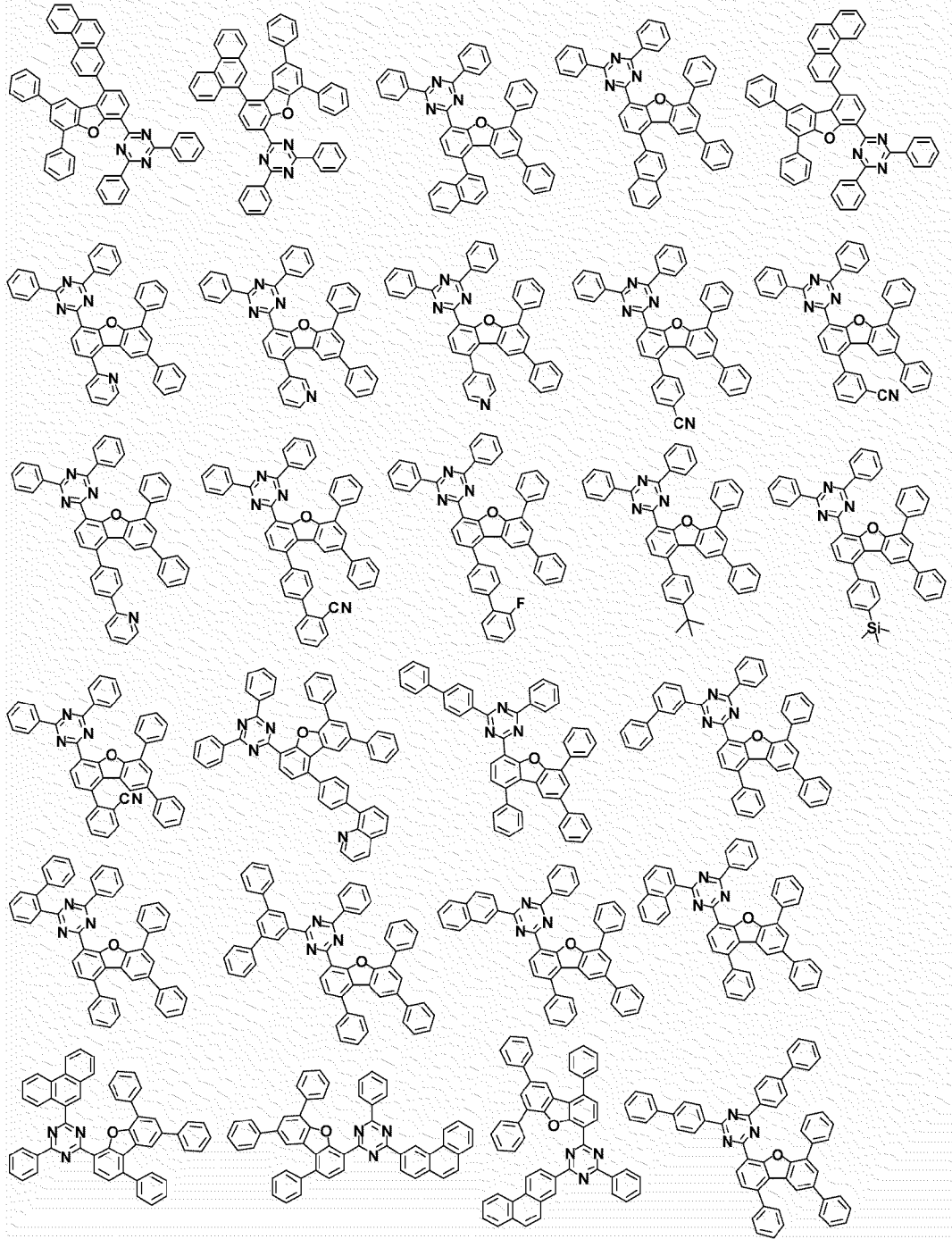
각각 독립적으로 직접결합, 또는 탄소수 10 내지 30의 다환의 치환 또는 비치환된 아릴렌기이다.

- [96] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 L1 및 L2는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 페닐렌기, 치환 또는 비치환된 나프틸렌기, 치환 또는 비치환된 2가의 비페닐기, 치환 또는 비치환된 2가의 터페닐기, 치환 또는 비치환된 2가의 쿼터페닐기, 치환 또는 비치환된 2가의 플루오렌기, 치환 또는 비치환된 2가의 안트라센기, 치환 또는 비치환된 2가의 파이렌기, 치환 또는 비치환된 2가의 트리페닐렌기, 또는 치환 또는 비치환된 2가의 페난트렌기이다.
- [97] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 L1 및 L2는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 탄소수 1 내지 10의 알킬기로 치환 또는 비치환된 페닐렌기, 탄소수 1 내지 10의 알킬기로 치환 또는 비치환된 나프틸렌기, 탄소수 1 내지 10의 알킬기로 치환 또는 비치환된 2가의 비페닐기, 탄소수 1 내지 10의 알킬기로 치환 또는 비치환된 2가의 터페닐기, 탄소수 1 내지 10의 알킬기로 치환 또는 비치환된 2가의 쿼터페닐기, 탄소수 1 내지 10의 알킬기로 치환 또는 비치환된 2가의 플루오렌기, 탄소수 1 내지 10의 알킬기로 치환 또는 비치환된 2가의 안트라센기, 탄소수 1 내지 10의 알킬기로 치환 또는 비치환된 2가의 파이렌기, 탄소수 1 내지 10의 알킬기로 치환 또는 비치환된 2가의 트리페닐렌기, 또는 탄소수 1 내지 10의 알킬기로 치환 또는 비치환된 2가의 페난트렌기이다.
- [98] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 L1 및 L2는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로 페닐렌기, 나프틸렌기, 2가의 비페닐기, 2가의 터페닐기, 2가의 쿼터페닐기, 탄소수 1 내지 10의 알킬기로 치환 또는 비치환된 2가의 플루오렌기, 2가의 안트라센기, 2가의 파이렌기, 2가의 트리페닐렌기, 또는 2가의 페난트렌기이다.
- [99] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 L1은 직접결합이다.
- [100] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 L1은 페닐렌기이다.
- [101] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 L1은 2가의 나프틸기이다.
- [102] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 L2는 직접결합이다.
- [103] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 L2는 페닐렌기이다.
- [104] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 L2는 2가의 나프틸기이다.
- [105] 본 명세서의 또 하나의 실시상태에 따르면, 상기 화학식 1의 헤테로고리 화합물은 하기 구조식들로 표시될 수 있다.

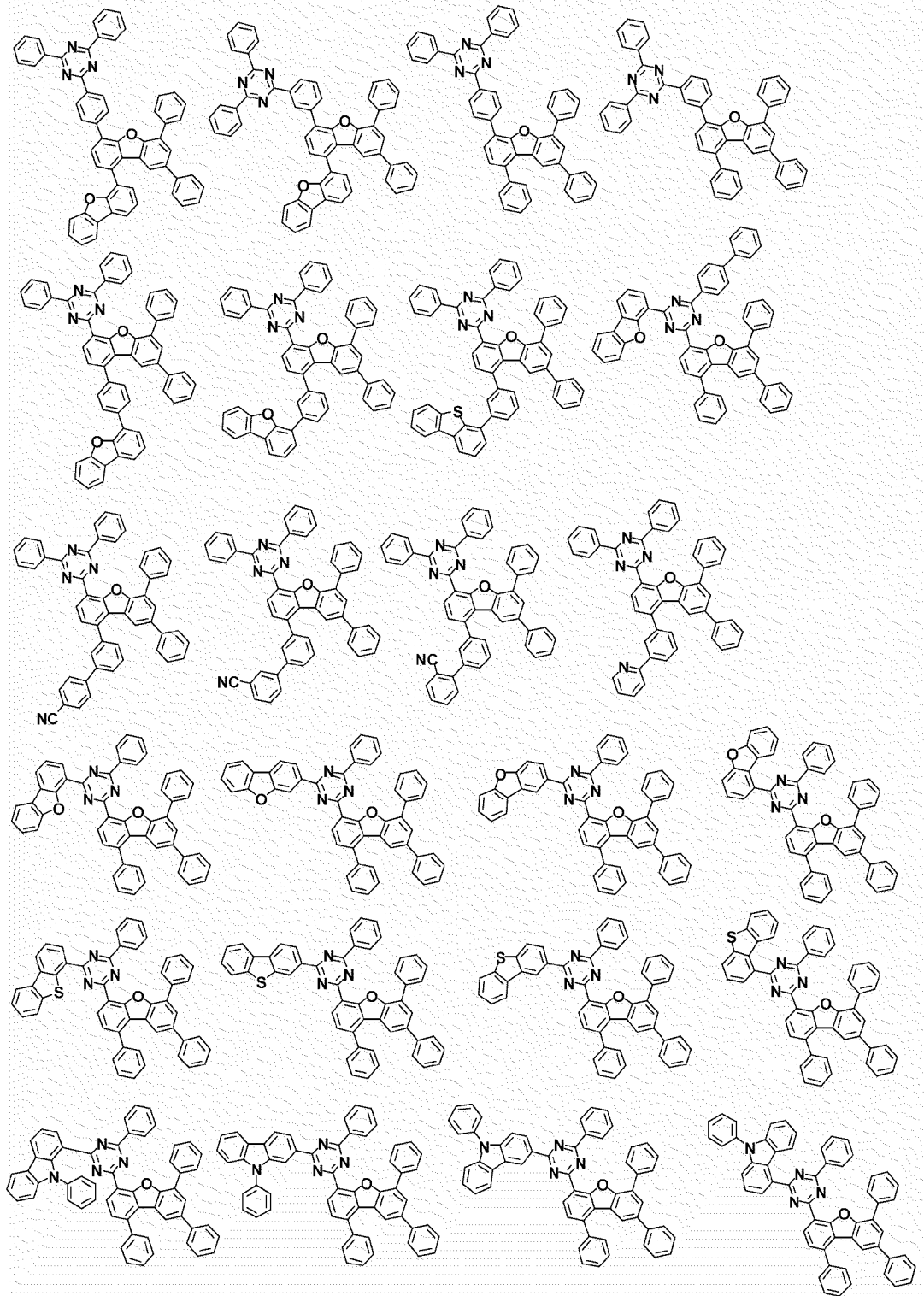
[106]



[107]



[108]



[109]

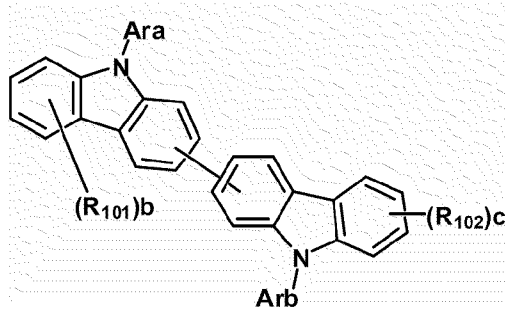
본 발명의 유기 발광 소자의 유기물층은 단층 구조로 이루어질 수도 있으나, 2층 이상의 유기물층이 적층된 다층 구조로 이루어질 수 있다. 예컨대, 본 발명의 유기 발광 소자는 제1 전극; 상기 제1 전극에 대향하여 구비된 제2 전극; 및 상기 제1 전극과 제2 전극 사이에 구비된 1층 또는 2층 이상의 유기물층을 포함하는 유기 발광 소자로서, 상기 유기물층 중 1층 이상은 전술한 헤테로고리 화합물을

포함할 수 있다.

- [110] 도 1에는 기관(1) 위에 제1 전극(2), 유기물층(3), 및 제2 전극(4)이 순차적으로 적층된 유기 발광 소자의 구조가 예시되어 있다.
- [111] 도 2에는 기관(1) 위에 제1 전극(2), 정공주입층(5), 정공수송층(6), 전자저지층(7), 발광층(8), 전자수송층(9), 전자주입층(10), 및 제2 전극(4)이 순차적으로 적층된 유기 발광 소자의 구조가 예시되어 있다. 상기 화학식 1의 헤테로고리 화합물은 바람직하게는 발광층에 포함 될 수 있다.
- [112] 그러나, 본 명세서의 일 실시상태에 따른 유기 발광 소자의 구조는 도 1 및 2에 한정되지 않고, 하기의 구조 중 어느 하나일 수 있다.
- [113] (1) 양극/정공수송층/발광층/전자수송층/음극
- [114] (2) 양극/정공수송층/발광층/전자수송층/전자주입층/음극
- [115] (3) 양극/정공주입층/정공수송층/발광층/전자수송층/전자주입층/음극
- [116] (4) 양극/정공수송층/정공조절층/발광층/전자수송층/전자주입층/음극
- [117] (5)
양극/정공주입층/정공수송층/정공조절층/발광층/전자수송층/전자주입층/음극
- [118] (6) 양극/정공수송층/발광층/전자조절층/전자수송층/음극
- [119] (7) 양극/정공수송층/발광층/전자조절층/전자수송층/전자주입층/음극
- [120] (8) 양극/정공주입층/정공수송층/발광층/전자조절층/전자수송층/음극
- [121] (9)
양극/정공주입층/정공수송층/발광층/전자조절층/전자수송층/전자주입층/음극
- [122] 본 발명의 유기 발광 소자는 기관 위에 제1 전극, 유기물층, 및 제2 전극이 순차적으로 적층되는 구조를 포함하고, 상기 유기물층은 상기 화학식 1의 화합물을 포함할 수 있다.
- [123] 본 발명의 일 실시상태에 있어서, 상기 유기물층은 발광층을 포함하고, 상기 발광층은 상기 화학식 1의 화합물을 포함할 수 있다.
- [124] 본 발명의 일 실시상태에 있어서, 상기 유기물층은 발광층을 포함하고, 상기 발광층은 상기 화학식 1의 화합물을 호스트로 포함할 수 있다.
- [125] 본 발명의 일 실시상태에 있어서, 상기 유기물층은 발광층을 포함하고, 상기 발광층은 상기 화학식 1의 화합물 외에 추가의 호스트 물질을 포함할 수 있다.
- [126] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 본 발명의 화합물을 포함하는 발광층은 유기 화합물을 추가의 호스트 재료를 포함할 수 있다.
- [127] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 본 발명의 화합물을 포함하는 발광층은 N함유 헤테로고리 화합물을 추가의 호스트 재료를 포함할 수 있다.
- [128] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 본 발명의 화합물을 포함하는 발광층은 비스카바졸 화합물을 추가의 호스트 재료를 포함할 수 있다.
- [129] 본 명세서의 일 실시상태에 따르면, 상기 본 발명의 화합물을 포함하는 발광층은 추가의 호스트 재료를 포함할 수 있고, 일 예로서, 상기 발광층은 하기 화학식 B의 화합물을 포함할 수 있다.

[130] [화학식 B]

[131]



[132] 상기 화학식 B에 있어서,

[133] Ara 및 Arb는 서로 같거나 상이하고 각각 독립적으로 헤테로아릴기로 치환 또는 비치환된 아릴기; 또는 아릴기로 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기이고,

[134] R₁₀₁ 및 R₁₀₂는 서로 같거나 상이하고 각각 독립적으로 수소; 중수소; 헤테로아릴기로 치환 또는 비치환된 아릴기; 또는 아릴기로 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기이거나, 인접하는 기가 서로 결합하여 치환 또는 비치환된 방향족 탄화수소 고리를 형성하며, b 및 c는 각각 0 내지 4의 정수이다.

[135] 본 발명의 일 실시상태에 있어서, 상기 유기물층은 발광층을 포함하고, 상기 발광층은 호스트와 도펀트를 99:1 내지 50:50의 질량비로 포함할 수 있다.

[136] 본 발명의 일 실시상태에 있어서, 상기 유기물층은 발광층을 포함하고, 상기 발광층은 호스트와 도펀트를 99:1 내지 80:20의 질량비로 포함할 수 있다.

[137] 본 발명의 일 실시상태에 있어서, 상기 유기물층은 발광층을 포함하고, 상기 발광층은 호스트와 도펀트를 99:1 내지 80:20의 질량비로 포함할 수 있다.

[138] 본 발명의 일 실시상태에 있어서, 상기 유기물층은 발광층을 포함하고, 상기 발광층은 제1 호스트 및 제2 호스트의 합:도펀트를 98:2 내지 80:20의 질량비로 포함할 수 있다.

[139] 본 발명의 일 실시상태에 있어서, 상기 제1 호스트 및 제2 호스트는 1:9 내지 9:1의 비율로 포함될 수 있다.

[140] 본 발명의 일 실시상태에 있어서, 상기 제1 호스트 및 제2 호스트는 3:7 내지 7:3의 비율로 포함될 수 있다.

[141] 본 발명의 일 실시상태에 있어서, 상기 유기물층은 발광층을 포함하고, 상기 발광층은 금속착체를 도펀트로 포함할 수 있고, 금속 착체로는 이리듐 착체, 백금 착체가 사용될 수 있으나 이에 한정하는 것은 아니다.

[142] 본 발명의 일 실시상태에 있어서, 상기 유기물층은 발광층을 포함하고, 상기 발광층은 이리듐 착체를 도펀트로 포함할 수 있다.

[143] 본 발명의 일 실시상태에 있어서, 상기 유기물층은 전자주입층, 전자수송층, 또는 전자주입 및 수송층을 포함하고, 상기 전자주입층, 전자수송층, 또는 전자주입 및 수송층은 상기 화학식 1의 화합물을 포함할 수 있다.

[144] 본 발명의 일 실시상태에 있어서, 상기 유기물층은 전자주입층 전자수송층, 또는 전자주입 및 수송층은 유기 화합물 및 금속을 99:1 내지 1:99의 질량비로

- 포함할 수 있다.
- [145] 본 발명의 일 실시상태에 있어서, 상기 유기물층은 전자주입층 전자수송층, 또는 전자주입 및 수송층은 유기 화합물 및 금속을 99:1 내지 1:1의 질량비로 포함할 수 있다.
- [146] 본 발명의 일 실시상태에 있어서, 상기 전자주입층 전자수송층, 또는 전자주입 및 수송층은 유기 화합물로 나프탈렌 유도체를 포함할 수 있으나, 이에 한정하는 것은 아니다.
- [147] 본 발명의 일 실시상태에 있어서, 상기 전자주입층 전자수송층, 또는 전자주입 및 수송층은 금속으로 리튬을 포함할 수 있으나, 이에 한정하는 것은 아니다.
- [148] 본 발명의 일 실시상태에 있어서, 상기 유기물층은 정공주입층, 정공수송층, 또는 정공주입 및 수송층을 포함하고, 상기 정공주입층, 정공수송층, 또는 정공주입 및 수송층은 상기 화학식 1의 화합물을 포함할 수 있다.
- [149] 본 발명의 일 실시상태에 있어서, 상기 유기물층은 정공저지층을 포함하고, 상기 정공저지층은 상기 화학식 1의 화합물을 포함할 수 있다.
- [150] 본 발명의 일 실시상태에 있어서, 상기 유기물층은 전자저지층을 포함하고, 상기 전자저지층은 상기 화학식 1의 화합물을 포함할 수 있다.
- [151] 본 발명의 일 실시상태에 따르면, 상기 제1 전극은 애노드이고, 상기 제2 전극은 캐소드이다.
- [152] 본 발명의 일 실시상태에 따르면, 상기 제2 전극은 애노드이고, 상기 제1 전극은 캐소드이다.
- [153] 본 발명의 일 실시상태에 있어서, 상기 화학식 1의 화합물을 포함하는 유기물층은 전자 주입층, 전자 수송층, 전자 주입과 전자 수송을 동시에 하는 층 중 적어도 한 층을 포함하고, 상기 층들 중 적어도 한 층이 상기 화학식 1의 화합물을 포함할 수 있다.
- [154] 상기 양극 물질로는 통상 유기물층으로 정공 주입이 원활할 수 있도록 일함수가 큰 물질이 바람직하다. 본 발명에서 사용될 수 있는 양극 물질의 구체적인 예로는 마나뉘, 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-메틸화합물의), 폴리[3,4-(에틸렌-1,2-디옥시)화합물의](PEDT), 폴리피롤 및 폴리아닐린과 같은 전도성 고분자 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.
- [155] 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/Al과 같은 다층 구조 물질 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.
- [156] 상기 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 폴리화합물의 계열의 전도성 고분자 등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.

[157] 상기 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.

[158] 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. 구체적인 예로는 8-히드록시-퀴놀린 알루미늄 착물(Alq₃); 카르바졸 계열 화합물; 이량체화 스티릴(dimerized styr일) 화합물; BALq; 10-히드록시벤조 퀴놀린-금속 화합물; 벤족사졸, 벤즈티아졸 및 벤즈이미다졸 계열의 화합물; 폴리(p-페닐렌비닐렌)(PPV) 계열의 고분자; 스피로(spiro) 화합물; 폴리플루오렌, 루브렌등이 있으나, 이들에만 한정되는 것은 아니다.

[159] 상기 발광층은 호스트 재료 및 도펀트 재료를 포함할 수 있다. 호스트 재료는 축합 방향족환 유도체 또는 헤테로환 함유 화합물 등이 있다. 구체적으로 축합방향족환 유도체로는 안트라센 유도체, 피렌 유도체, 나프탈렌 유도체, 펜타센 유도체, 페난트렌 화합물, 플루오란텐 화합물 등이 있고, 헤테로환 함유 화합물로는 헤테로고리 화합물, 디벤조퓨란 유도체, 래더형 퓨란 화합물, 피리미딘 유도체 등이 있으나, 이에 한정되지 않는다.

[160] 상기 유기 발광 소자가 복수개의 유기물층을 포함하는 경우, 상기 유기물층은 동일한 물질 또는 다른 물질로 형성될 수 있다.

[161] 본 명세서의 유기 발광 소자는 유기물층 중 1층 이상이 상기 헤테로고리 화합물을 이용하여 형성되는 것을 제외하고는 당 기술분야에 알려져 있는 재료와 방법으로 제조될 수 있다.

[162] 도펀트 재료로는 방향족 아민 유도체, 스트릴아민 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 2이상 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.

[163] 상기 정공저지층은 정공의 캐소드 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.

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

발명의 실시를 위한 형태

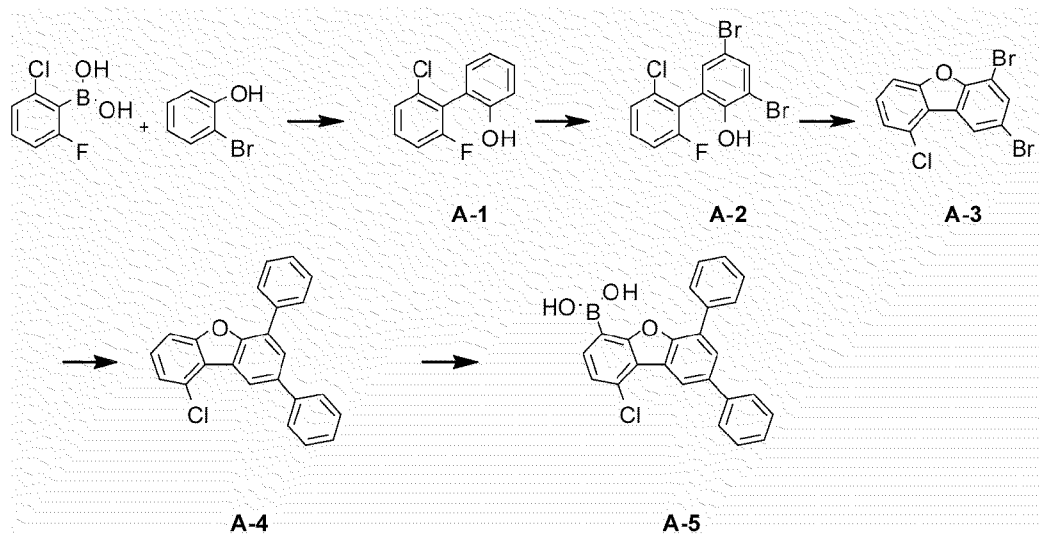
[165] 상기 화학식 1의 헤테로고리 화합물의 제조방법 및 이들을 이용한 유기 발광 소자의 제조는 이하의 실시예에서 구체적으로 설명한다. 그러나, 하기 실시예는 본 발명을 예시하기 위한 것이며, 본 발명의 범위가 이들에 의하여 한정되는 것은 아니다.

[166] 하기 제조방법에서 치환기의 종류 및 치환위치를 달리하여 본 명세서에 기재된 모든 화합물을 제조할 수 있다.

[167] <합성예>

[168] <합성예 1> - 중간체 A-5의 제조

[169]



[170] 1) 화합물 A-1의 합성

[171] 2-브로모-2-펜올 (49.4 g, 287.3 mmol), (2-클로로-6-플루오로페닐)보론산(50.0 g, 287.3 mmol)를 테트라하이드로퓨란(THF)500 ml에 녹였다. 여기에 탄산나트륨(Na₂CO₃) 2 M 용액(430 mL), 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐(0) [Pd(PPh₃)₄](10.0 g, 8.6 mmol)을 넣고 12 시간 환류시켰다. 반응이 끝난 후 상온으로 냉각시키고, 생성된 혼합물을 물과 톨루엔으로 3회 추출하였다. 톨루엔층을 분리한 뒤 황산마그네슘(magnesium sulfate)으로 건조하여 여과한 여액을 감압증류하여 얻은 혼합물을 클로로폼, 헥산을 이용한

컬럼크포마토그래피정제 하여 화합물 A-1(34.4 g, 수율 54 %;MS:[M+H]⁺=223)을 얻었다.

[172] 2) 화합물 A-2의 합성

[173] 화합물 A-1(30 g, 135.1 mmol)를 클로로포름 300 ml에 용해시킨다. 여기에 N-브로모석시드이미드(160.3 g, 270.25 mmol)을 넣고 실온에서 4 h 동안 교반하였다. 반응이 종료된 후 물을 첨가하였다. 이후 층분리 후 소듐싸이오설페이트 솔루션으로 2차례 교반후 층분리 하였다. 이후 증류하여 화합물 A-2(51.1 g, 수율 100 %;MS:[M+H]⁺=379)을 얻었다.

[174] 3) 화합물 A-3의 합성

[175] 화합물 A-2(51.1 g, 135.1 mmol)을 증류된 다이메틸포름아마이드(DMF)(400ml)에 녹인다. 이를 0 °C로 냉각시키고, 여기에 나트륨 하이드리드(sodium hydride)(3.5 g, 145.9 mmol)를 천천히 적가하였다. 20분 동안 교반한 뒤 100°C에서 1시간동안 교반하였다. 반응이 종료된 후 상온으로 냉각하고, 에탄올(Ethanol) 100 ml을 천천히 넣었다. 위 혼합물을 감압증류 하여 얻은 혼합물을 클로로포름, 에틸아세테이트로 재결정하여 화합물 A-3(32.9 g, 수율 68 %;MS:[M+H]⁺=359)을 얻었다.

[176] 4) 화합물 A-4의 합성

[177] 화합물 A-3(32.9 g, 91.9 mmol), 페닐 보론산 (24.7 g, 202.3 mmol)를 테트라하이드로퓨란(THF)300 ml에 녹였다. 여기에 탄산칼륨(K₂CO₃) 2 M 용액(140 mL), 테트라키스(트리페닐포스핀)팔라듐(0) [Pd(PPh₃)₄](2.1 g, 2 mol%)을 넣고 6 시간 환류시켰다. 반응이 끝난 후 상온으로 냉각시키고, 생성된 혼합물을 물과 톨루엔으로 3회 추출하였다. 톨루엔층을 분리한 뒤 황산마그네슘(magnesium sulfate)으로 건조하여 여과한 여액을 감압증류하여 얻은 혼합물을 클로로포름, 에틸아세테이트를 이용해 재결정 하여 화합물 A-4(20.8 g, 수율 64 %;MS:[M+H]⁺=355)을 얻었다.

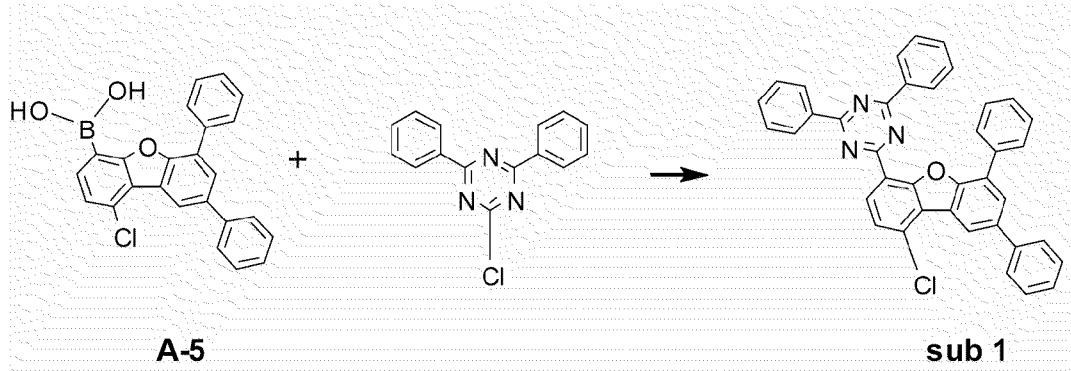
[178] 5) 화합물 A-5의 합성

[179] 화합물 A-4(20.8 g, 58.7 mmol)을 테트라하이드로퓨란(500 ml)에 녹인 후, -78 °C로 온도를 낮추고 1.7 M 터셔리-부틸리튬(t-BuLi)(41.5 ml, 70.5 mmol)을 천천히 가하였다. 이후 상온으로 승온 후 세 시간 동안 교반한 후 다시 -78 °C로 온도를 낮추고 트리아이소프로필보레이트(B(OiPr)₃)(13.3 ml, 70.5 mmol)을 가하고, 상온으로 온도를 서서히 올리면서 3시간동안 교반하였다. 반응 혼합물에 2 N 염산수용액(200 ml)을 가하고 1.5 시간 동안 상온에서 교반하였다. 생성된 침전물을 거르고 물과 에틸에테르(ethyl ether)로 차례로 씻은 후 진공 건조하였다. 건조 후 에틸에테르에 분산시켜 두 시간 동안 교반한 후 여과하고 건조하여 화합물 A-5(16.1 g, 수율 69 %; MS:[M+H]⁺=399)을 제조하였다.

[180] <합성예 2> - sub 1~3 의 제조

[181] 1) 화합물 sub 1 의 합성

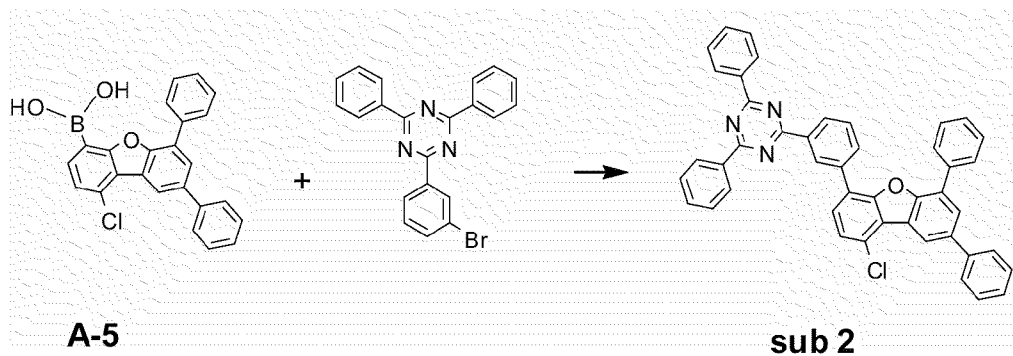
[182]



[183] 화합물 A-5(15.0 g, 37.7 mmol)과 2-클로로-4,6-다이페닐-1,3,5-트리아진(10.1 g, 37.7 mmol)을 테트라하이드로퓨란(300 ml)에 분산시킨 후, 2M 탄산칼륨수용액(aq. K_2CO_3)(57 ml, 113 mmol)을 첨가하고 테트라키스트리페닐포스피노팔라듐[$Pd(PPh_3)_4$](1.3 g, 3 mol%)을 넣은 후 4시간 동안 교반 환류하였다. 상온으로 온도를 낮추고 생성된 고체를 여과하였다. 여과된 고체를 테트라하이드로퓨란과 에틸아세테이트로 재결정하고 여과한 뒤, 건조하여 화합물 sub 1(15.4 g, 수율 70%; MS:[$M+H$] $^+$ =586)를 제조하였다.

[184] 1) 화합물 sub 2 의 합성

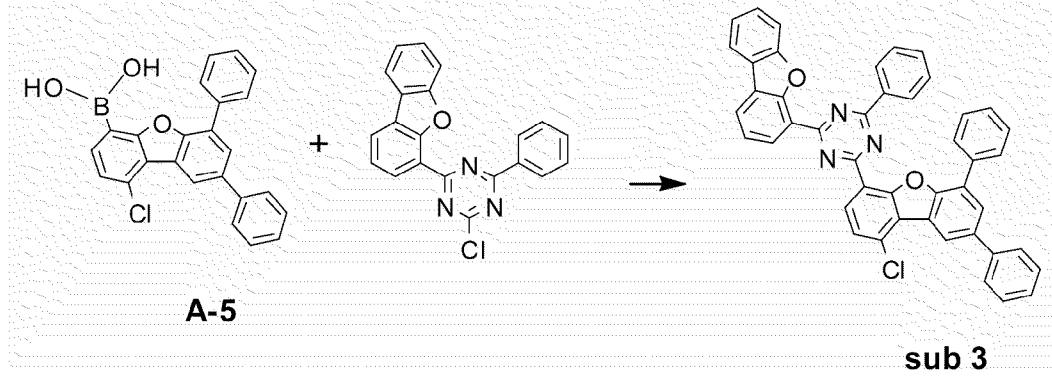
[185]



[186] 화합물 A-5(15.0 g, 37.7 mmol)과 2-(3-브로모페닐)-4,6-다이페닐-1,3,5-트리아진(14.6 g, 37.7 mmol)을 테트라하이드로퓨란(300 ml)에 분산시킨 후, 2M 탄산칼륨수용액(aq. K_2CO_3)(57 ml, 113 mmol)을 첨가하고 테트라키스트리페닐포스피노팔라듐[$Pd(PPh_3)_4$](1.3 g, 3 mol%)을 넣은 후 4시간 동안 교반 환류하였다. 상온으로 온도를 낮추고 생성된 고체를 여과하였다. 여과된 고체를 테트라하이드로퓨란과 에틸아세테이트로 재결정하고 여과한 뒤, 건조하여 화합물 sub 2(20.2 g, 수율 81%; MS:[$M+H$] $^+$ =662)를 제조하였다.

[187] 2) 화합물 sub 3 의 합성

[188]



[189]

화합물 A-5(15.0 g, 37.7 mmol)과 2-클로로-4-(디벤조[b,d]퓨란-4-일)-6-페닐-1,3,5-트리아진 (13.5 g, 37.7 mmol)을 테트라하이드로퓨란(300 ml)에 분산시킨 후, 2M 탄산칼륨수용액(aq. K₂CO₃)(57 ml, 113 mmol)을 첨가하고 테트라키스트리페닐포스피노팔라듐[Pd(PPh₃)₄](1.3 g, 3 mol%)을 넣은 후 4시간 동안 교반 환류하였다. 상온으로 온도를 낮추고 생성된 고체를 여과하였다. 여과된 고체를 테트라하이드로퓨란과 에틸아세테이트로 재결정하고 여과한 뒤, 건조하여 화합물 sub 3(16.3 g, 수율 66 %; MS:[M+H]⁺=658)를 제조하였다.

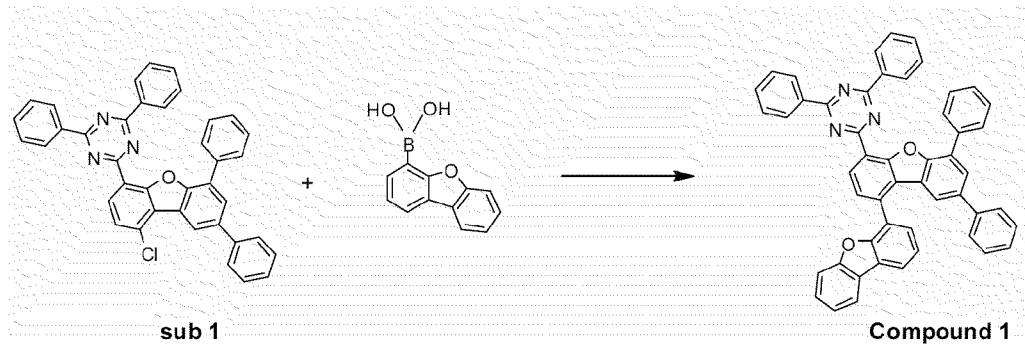
[190]

<합성에 3> - 화합물 1 내지 9 의 제조

[191]

1) 화합물 1 의 합성

[192]



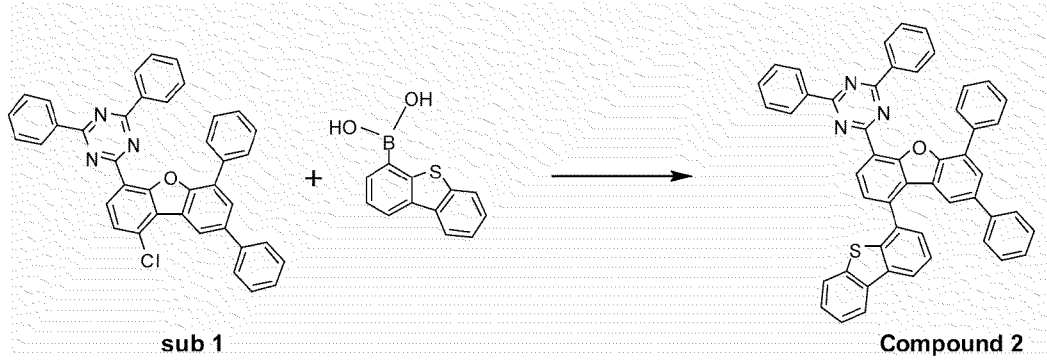
[193]

질소 분위기에서 화합물 sub 1(10 g, 17.1 mmol) 및 디벤조[b,d]퓨란-4-일보론산 (4.5 g, 70.5 mmol)를 다이옥세인 150 ml에 넣고 교반 및 환류하였다. 이 후 포타슘포스페이트(10.9 g, 51.3 mmol)를 물 30 ml에 녹여 투입한 후 충분히 교반 후 비스(디벤질리딘아세톤)팔라듐(0.3 g, 0.5 mmol)과 트리사이클로헥실포스핀(0.3 g, 1.0 mmol)을 투입하였다. 8시간 반응 후 상온으로 온도를 낮추고 여과하였다. 여과물을 클로로포름과 물로 추출한 후 유기층을 황산마그네슘을 이용해 건조하였다. 이후 유기층을 감압증류 후 에틸아세테이트를 이용해 재결정하였다. 생성된 고체를 여과 후 건조하여 화합물 1 (5.5 g, 45%, MS:[M+H]⁺= 718)을 제조하였다.

[194]

2) 화합물 2 의 합성

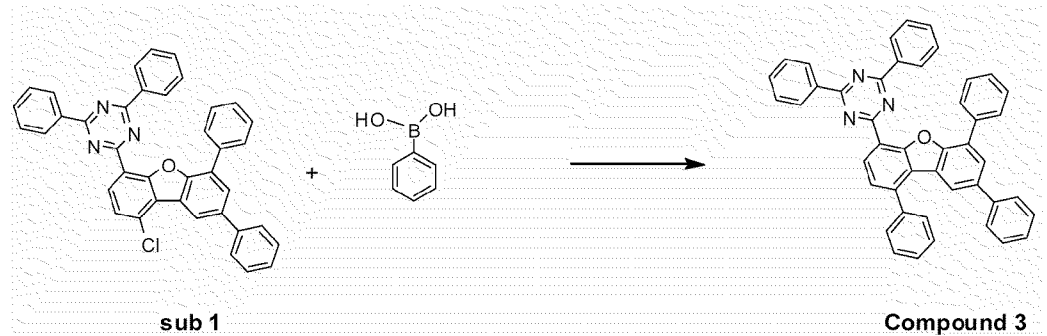
[195]



[196] 상기 반응식과 같이, 디벤조[b,d]푸란-4-일보론산 대신 디벤조[b,d]티오펜-4-일보론산을 반응에 사용하는 것을 것을 제외하고는, 상기 화합물 1의 제조방법과 동일한 방법으로, 화합물 2 (8.8 g, 70%, MS:[M+H]⁺ = 734)을 제조하였다.

[197] 3) 화합물 3의 합성

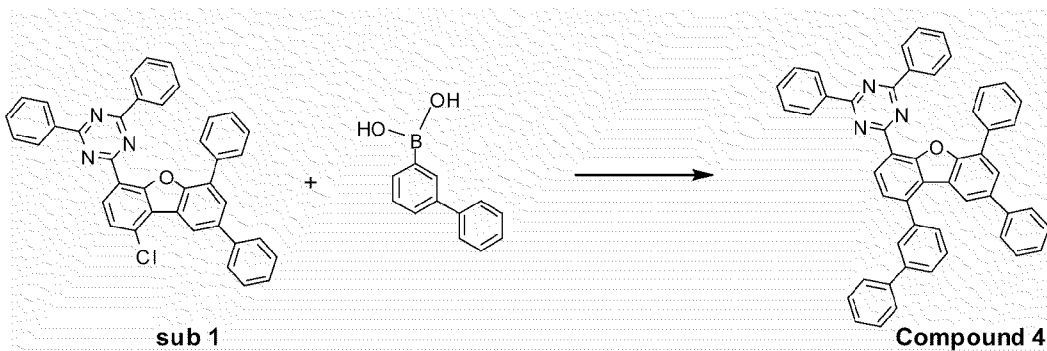
[198]



[199] 상기 반응식과 같이, 디벤조[b,d]푸란-4-일보론산 대신 페닐보론산을 반응에 사용하는 것을 것을 제외하고는, 상기 화합물 1의 제조방법과 동일한 방법으로, 화합물 3 (5.5 g, 51%, MS:[M+H]⁺ = 628)을 제조하였다.

[200] 4) 화합물 4의 합성

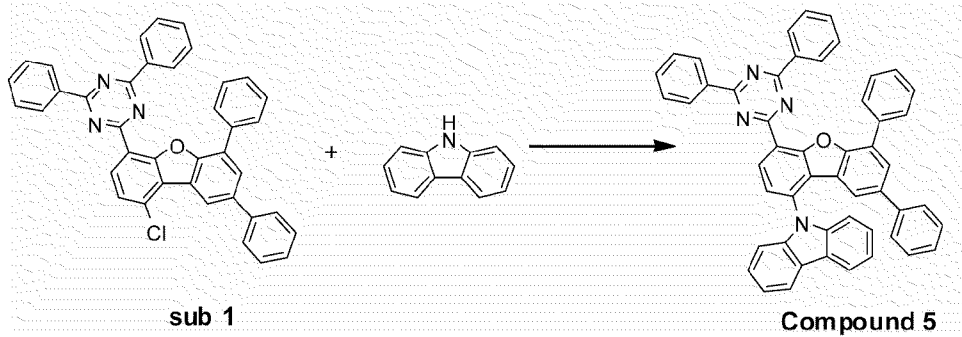
[201]



[202] 상기 반응식과 같이, 디벤조[b,d]푸란-4-일보론산 대신 [1,1'-bi페닐]-3-일보론산을 반응에 사용하는 것을 것을 제외하고는, 상기 화합물 1의 제조방법과 동일한 방법으로, 화합물 4 (5.2 g, 43%, MS:[M+H]⁺ = 704)을 제조하였다.

[203] 5) 화합물 5의 합성

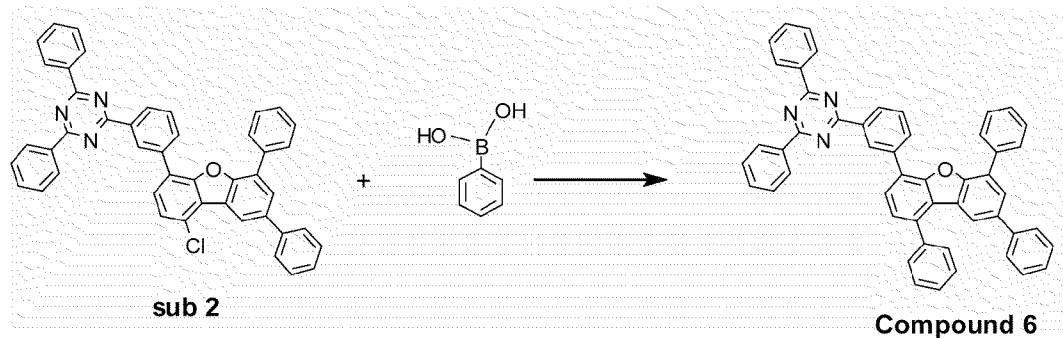
[204]



[205] 질소 분위기에서 화합물 sub 1(10 g, 17.1 mmol)과 9H-카바졸 (2.9 g, 17 mmol)을 자일렌 100mL에 투입하여 녹이고, 나트륨 터셔리-부톡사이드 (3.3g, 34.1 mmol)를 첨가하여 가온하였다. 비스(트리 터셔리-부틸포스핀)팔라듐(0.3g, 3mol%)을 투입하여 4시간 환류 교반 시킨다. 반응이 완결되면 상온으로 온도를 낮춘 후 생성된 고체를 여과하였다. 고체를 클로로포름에 녹이고, 물로 2회 세척 후에 유기층을 분리하여, 무수황산마그네슘을 넣고 교반한 후 여과하여 여액을 감압 증류하였다. 농축한 화합물을 에틸아세테이트와 헥산을 이용하여 실리카 컬럼을 통해 정제하여 옅은 노란색의 고체 화합물 5(7.1 g, 58%, MS:[M+H]⁺=717)을 제조하였다.

[206] 6) 화합물 6 의 합성

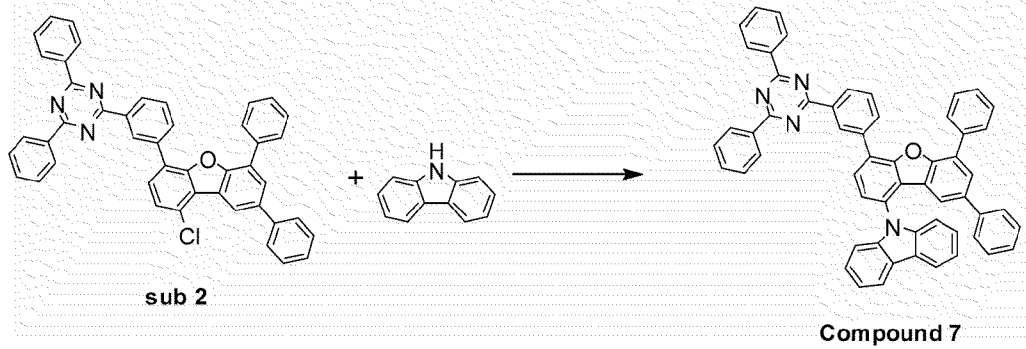
[207]



[208] 질소 분위기에서 화합물 sub 2(10 g, 15.1 mmol) 및 페닐보론산 (4.2 g, 16.6 mmol)를 다이옥세인 150 ml에 넣고 교반 및 환류하였다. 이후 포타슘포스페이트(10.9 g, 51.3 mmol)를 물 30 ml에 녹여 투입한 후 충분히 교반 후 비스(디벤질리딘아세톤)팔라듐(0.3 g, 0.5 mmol)과 트리사이클로헥실포스핀(0.3 g, 1.0 mmol)을 투입하였다. 8시간 반응 후 상온으로 온도를 낮추고 여과하였다. 여과물을 클로로포름과 물로 추출한 후 유기층을 황산마그네슘을 이용해 건조하였다. 이후 유기층을 감압증류 후 에틸아세테이트를 이용해 재결정하였다. 생성된 고체를 여과 후 건조하여 화합물 6 (7.5 g, 71%, MS:[M+H]⁺ = 704)을 제조하였다.

[209] 7) 화합물 7 의 합성

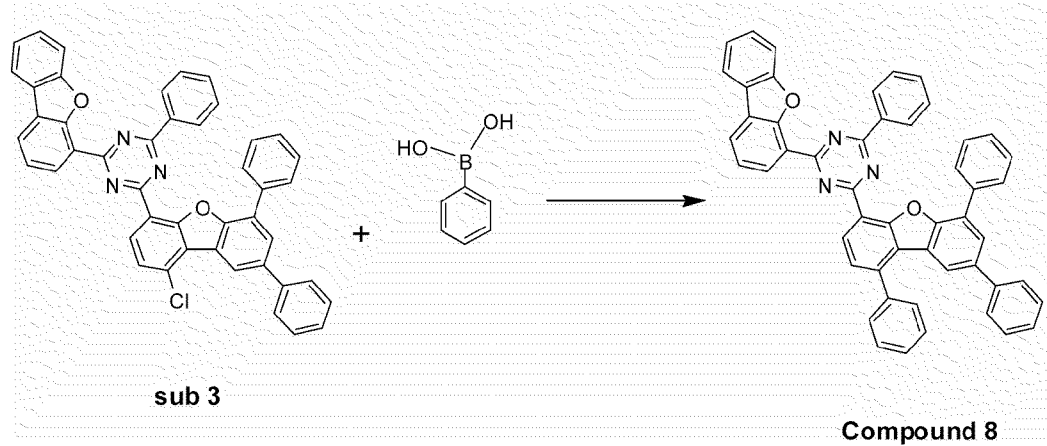
[210]



[211] 질소 분위기에서 화합물 sub 2(10 g, 15.1 mmol)과 9H-카바졸 (2.5 g, 15.1 mmol)을 자일렌 100mL에 투입하여 녹이고, 나트륨 터셔리-부톡사이드 (2.9g, 34.1 mmol)를 첨가하여 가온하였다. 비스(트리 터셔리-부틸포스핀)팔라듐(0.2g, 3mol%)을 투입하여 4시간 환류 교반 시킨다. 반응이 완결되면 상온으로 온도를 낮춘 후 생성된 고체를 여과하였다. 고체를 클로로포름에 녹이고, 물로 2회 세척 후에 유기층을 분리하여, 무수황산마그네슘을 넣고 교반한 후 여과하여 여액을 감압 증류하였다. 농축한 화합물을 에틸아세테이트와 헥산을 이용하여 실리카 컬럼을 통해 정제하여 옅은 노란색의 고체 화합물 7(6.1 g, 51%, MS:[M+H]⁺ =793)을 제조하였다.

[212] 8) 화합물 8 의 합성

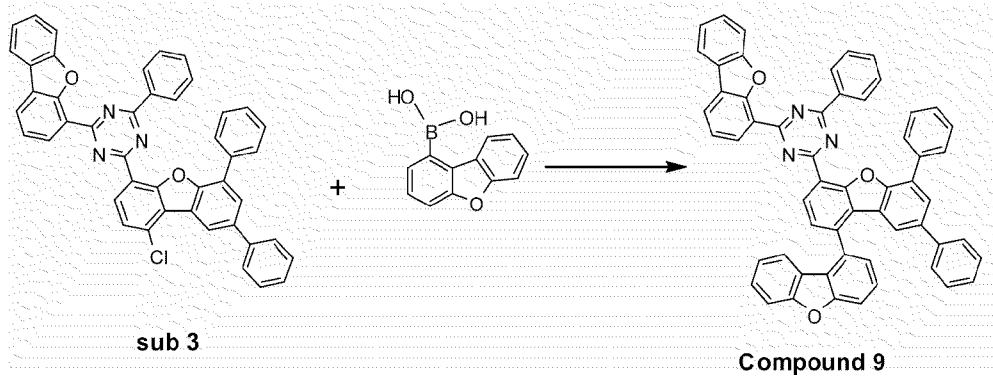
[213]



[214] 질소 분위기에서 화합물 sub 3(10 g, 14.8 mmol) 및 페닐보론산 (2.0 g, 16.3 mmol)를 다이옥세인 150 ml에 넣고 교반 및 환류하였다. 이후 포타슘포스페이트(6.3 g, 29.6 mmol)를 물 30 ml에 녹여 투입한 후 충분히 교반 후 비스(디벤질리딘아세톤)팔라듐(0.3 g, 0.5 mmol)과 트리사이클로헥실포스핀(0.3 g, 1.0 mmol)을 투입하였다. 8시간 반응 후 상온으로 온도를 낮추고 여과하였다. 여과물을 클로로포름과 물로 추출한 후 유기층을 황산마그네슘을 이용해 건조하였다. 이후 유기층을 감압증류 후 에틸 아세테이트를 이용해 재결정하였다. 생성된 고체를 여과 후 건조하여 화합물 8 (6.9 g, 65%, MS:[M+H]⁺ = 718)을 제조하였다.

[215] 9) 화합물 9의 합성

[216]



[217] 상기 반응식과 같이, 페닐보론산 대신 디벤조[b,d]퓨란-1-일보론산 를 반응에 사용하는 것을 것을 제외하고는, 상기 화합물 8과 동일한 방법으로, 화합물 9 (3.9 g, 33%, MS:[M+H]⁺ = 808)을 제조하였다.

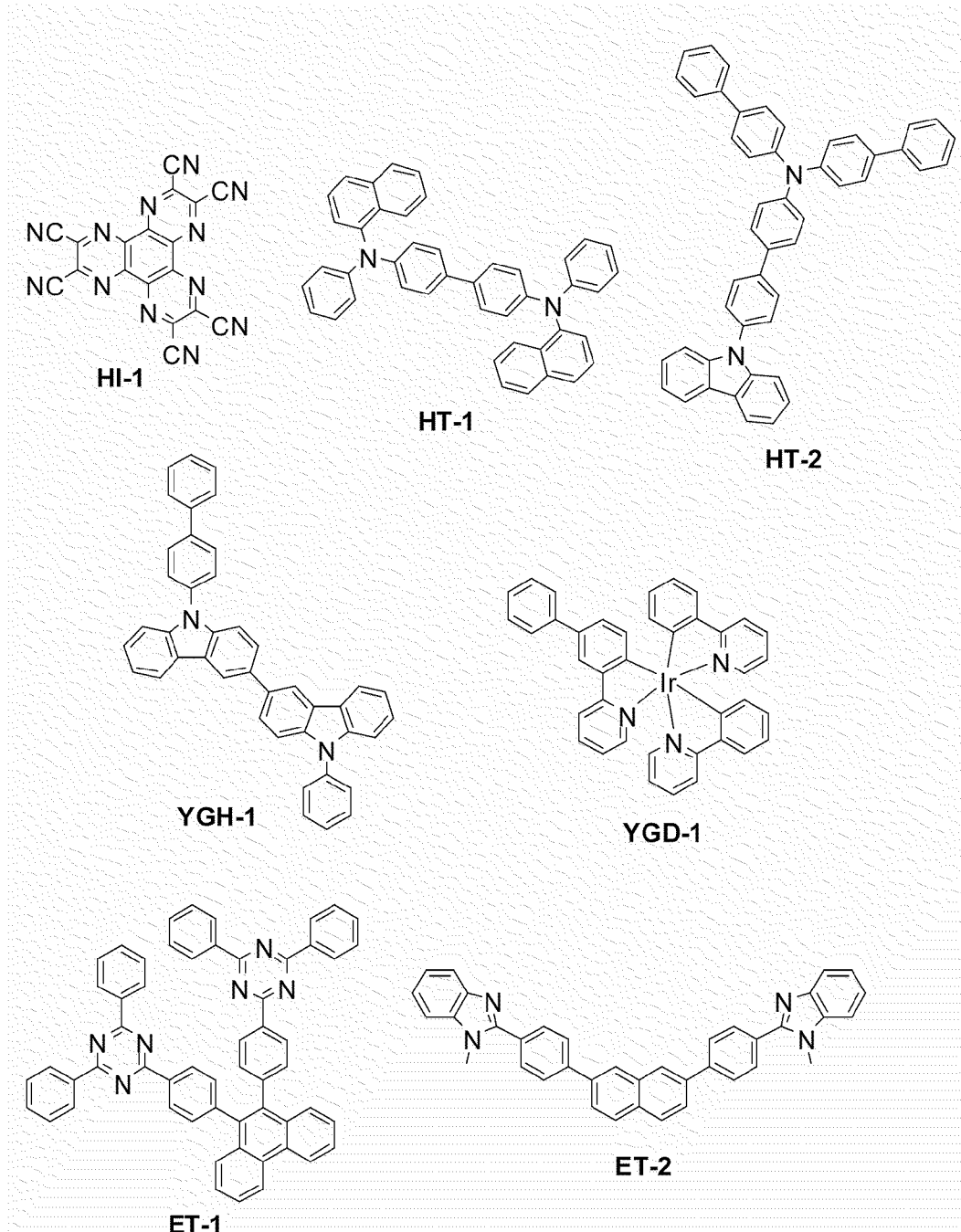
[218] [실험예]

[219] <실험예 1>

[220] ITO(indium tin oxide)가 1,300Å의 두께로 박막 코팅된 유리 기판을 세제를 녹인 증류수에 넣고 초음파로 세척하였다. 이때, 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.

[221] 상기와 같이 준비된 ITO 투명 전극 위에 하기 HI-1 화합물을 50Å의 두께로 열 진공 증착하여 정공주입층을 형성하였다. 상기 정공주입층 위에 하기 HT-1 화합물을 250Å의 두께로 열 진공 증착하여 정공수송층을 형성하고, HT-1 증착막 위에 하기 HT-2 화합물을 50Å 두께로 진공 증착하여 전자저지층을 형성하였다. 상기 HT-2 증착막 위에 발광층으로서 상기 화합물 1, 하기 YGH-1 화합물, 및 인광도펀트 YGD-1을 44:44:12의 중량비로 공증착하여 400Å 두께의 발광층을 형성하였다. 상기 발광층 위에 하기 ET-1 화합물을 250Å의 두께로 진공 증착하여 전자수송층을 형성하고, 상기 전자수송층 위에 하기 ET-2 화합물 및 Li를 98:2의 중량비로 진공 증착하여 100Å 두께의 전자주입층을 형성하였다. 상기 전자주입층 위에 1000Å 두께로 알루미늄을 증착하여 음극을 형성하였다.

[222]



[223] 상기의 과정에서 유기물의 증착속도는 0.4 ~ 0.7 Å/sec를 유지하였고, 알루미늄은 2 Å/sec의 증착 속도를 유지하였으며, 증착시 진공도는 1 x 10⁻⁷ ~ 5 x 10⁻⁸ torr를 유지하였다.

[224] <실험예 2 내지 9>

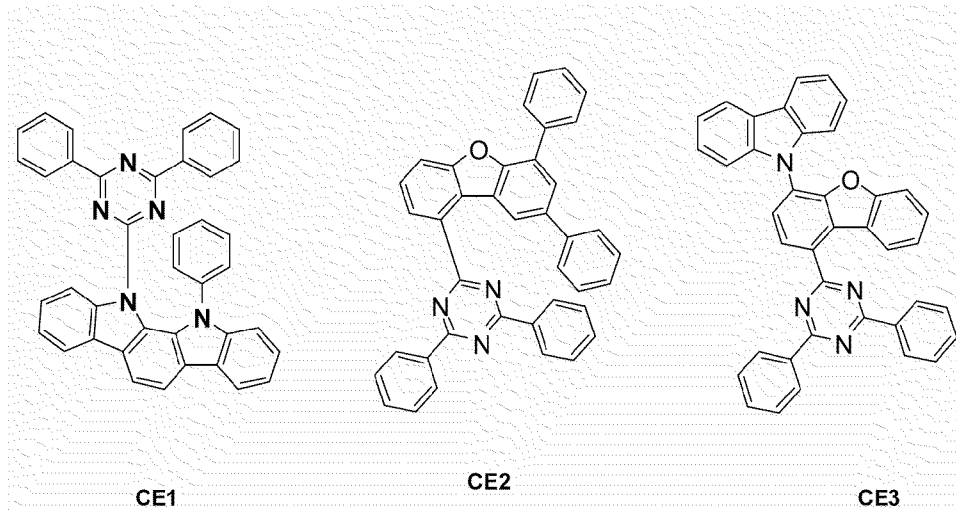
[225] 상기 실험예 1에서 화합물 1 대신 하기 표 1에 기재된 화합물을 사용하는 것을 제외하고는, 상기 실험예 1과 동일한 방법으로 유기 발광 소자를 제조하였다.

[226] <비교 실험예 1 내지 3>

[227] 상기 실험예 1에서 화합물 1 대신 하기 표 1에 기재된 화합물을 사용하는 것을 제외하고는, 상기 실험예 1과 동일한 방법으로 유기 발광 소자를 제조하였다.

하기 표 1의 CE1 내지 CE3의 화합물은 하기와 같다.

[228]



[229] 상기 실험에 및 비교실험에에서 유기 발광 소자를 $10\text{mA}/\text{cm}^2$ 의 전류 밀도에서 전압과 효율을 측정하였고, $50\text{mA}/\text{cm}^2$ 의 전류 밀도에서 수명을 측정하여 그 결과를 하기 표 1에 나타내었다. 이때, LT95는 초기 휘도 대비 95%가 되는 시간을 의미한다.

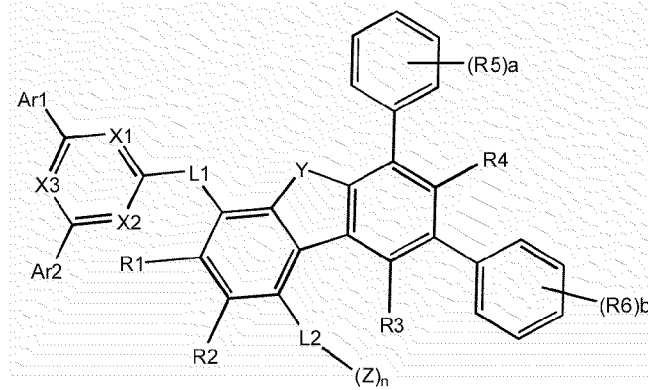
[230] [표1]

	화합물	전압(V)(@10mA/cm ²)	효율(Cd/A)(@10mA/cm ²)	색좌표(x,y)	수명(h)(LT ₉₅ at 50mA/cm ²)
실험예 1	화합물 1	3.8	83	0.45, 0.54	170
실험예 2	화합물 2	3.9	82	0.46, 0.53	190
실험예 3	화합물 3	3.9	85	0.45, 0.53	130
실험예 4	화합물 4	3.9	84	0.45, 0.54	150
실험예 5	화합물 5	4.1	82	0.45, 0.54	160
실험예 6	화합물 6	3.9	84	0.45, 0.54	110
실험예 7	화합물 7	4.0	82	0.46, 0.53	120
실험예 8	화합물 8	4.0	81	0.45, 0.54	180
실험예 9	화합물 9	4.3	80	0.45, 0.54	145
비교실험예 1	CE1	4.5	70	0.46, 0.54	80
비교실험예 2	CE2	4.0	84	0.45, 0.54	100
비교실험예 3	CE3	4.5	70	0.45, 0.55	20

[231] 상기 표 1에서 나타난 바와 같이, 본 발명의 화합물을 발광층 물질로 사용할 경우, 비교 실험예 1 내지 3에 비하여 효율 및 수명이 우수한 특성을 나타내는 것을 확인할 수 있었다. 이는 다이벤조퓨란치환기의 치환위치가 증가함에 따라 전자안정성이 증가된 것으로 보여진다.

청구범위

[청구항 1] 하기 화학식 1로 나타내는 헤테로고리 화합물:
[화학식 1]



상기 화학식 1에서,
 X1 내지 X3은 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로, N 또는 CH이며
 X1 내지 X3 중 적어도 2 이상은 N이며,
 Y는 O 또는 S 이고,
 R1 내지 R6은 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로, 수소, 중수소,
 할로젠기, 니트릴기, 치환 또는 비치환된 알킬기, 치환 또는 비치환된
 실릴기, 치환 또는 비치환된 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된
 헤테로아릴기이고,
 Ar1 및 Ar2는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로, 치환 또는
 비치환된 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기이고,
 L1 및 L2는 서로 같거나 상이하고, 각각 독립적으로, 직접결합, 치환 또는
 비치환된 아릴렌기, 또는 치환 또는 비치환된 헤테로아릴렌기이고,
 Z는 니트릴기, 할로젠기, 치환 또는 비치환된 알킬기, 치환 또는 비치환된
 실릴기, 치환 또는 비치환된 아릴기, 또는 치환 또는 비치환된
 헤테로아릴기이고,
 n은 0 내지 2의 정수이고,
 n이 0인 경우, L2는 수소가 결합하며,
 n이 2인 경우, Z는 같거나 상이하고,
 a 및 b는 0 내지 5의 정수이고, a 및 b가 복수일 때, 괄호 안의 치환기는
 서로 같거나 상이하다.

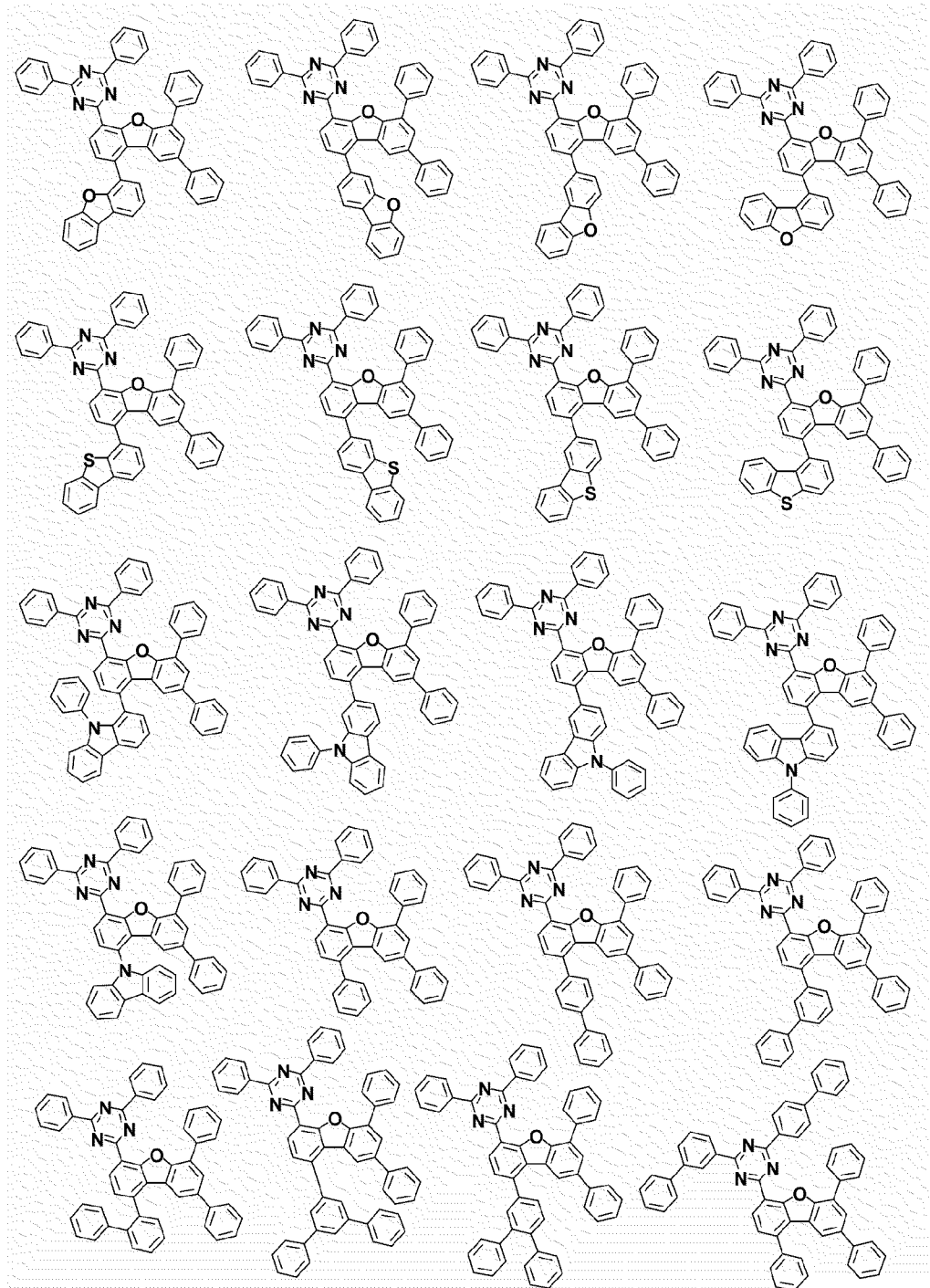
[청구항 2] 청구항 1에 있어서, 상기 Ar1 및 Ar2는 서로 같거나 상이하고, 각각
 독립적으로 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 단환의 아릴기, 치환
 또는 비치환된 탄소수 10 내지 30의 다환의 아릴기, 치환 또는 비치환된
 탄소수 3 내지 30의 단환의 헤테로아릴기, 또는 치환 또는 비치환된
 탄소수 3 내지 30의 다환의 헤테로아릴기인 것인 헤테로고리 화합물.

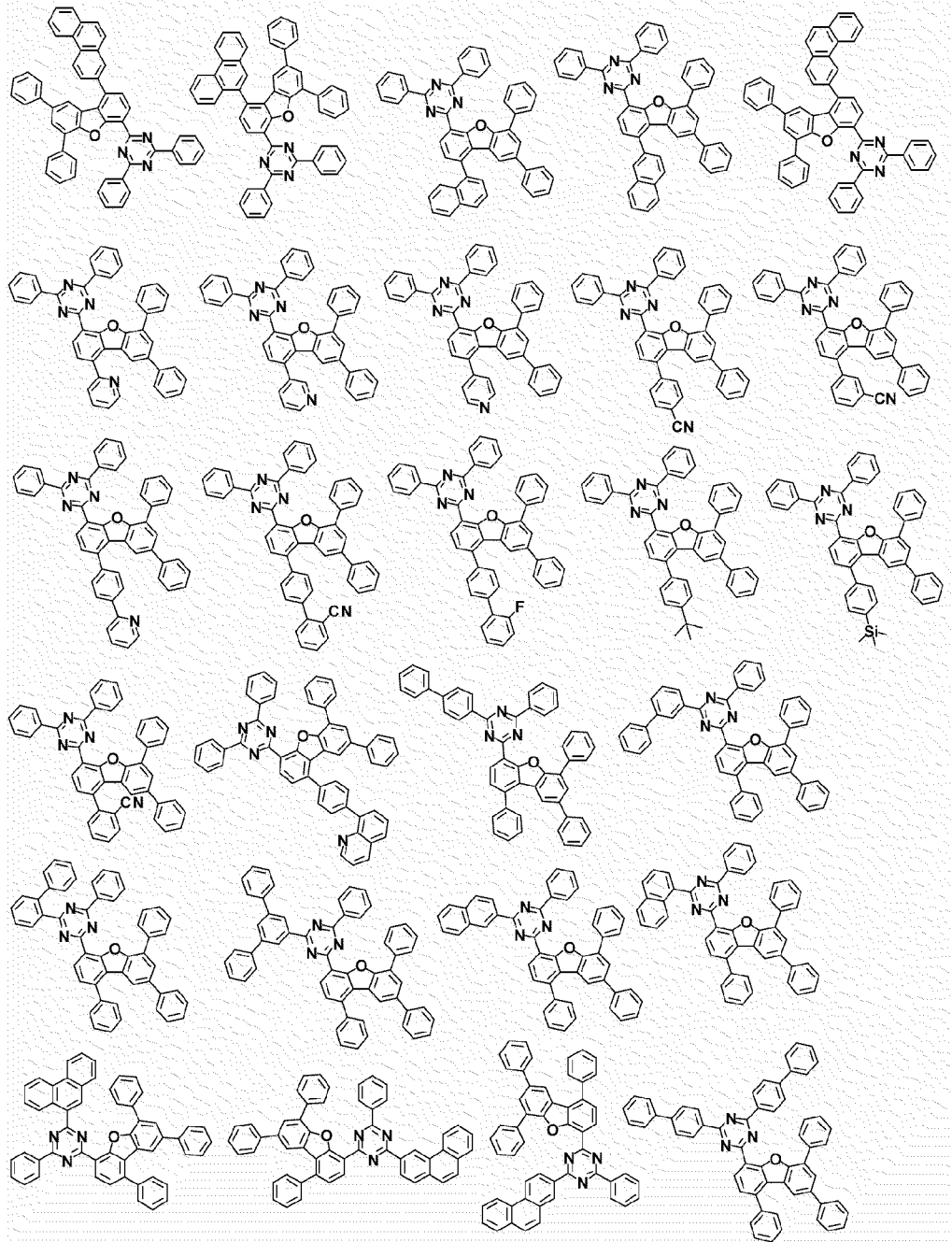
[청구항 3] 청구항 1에 있어서, 상기 L1 및 L2는 서로 같거나 상이하고, 각각

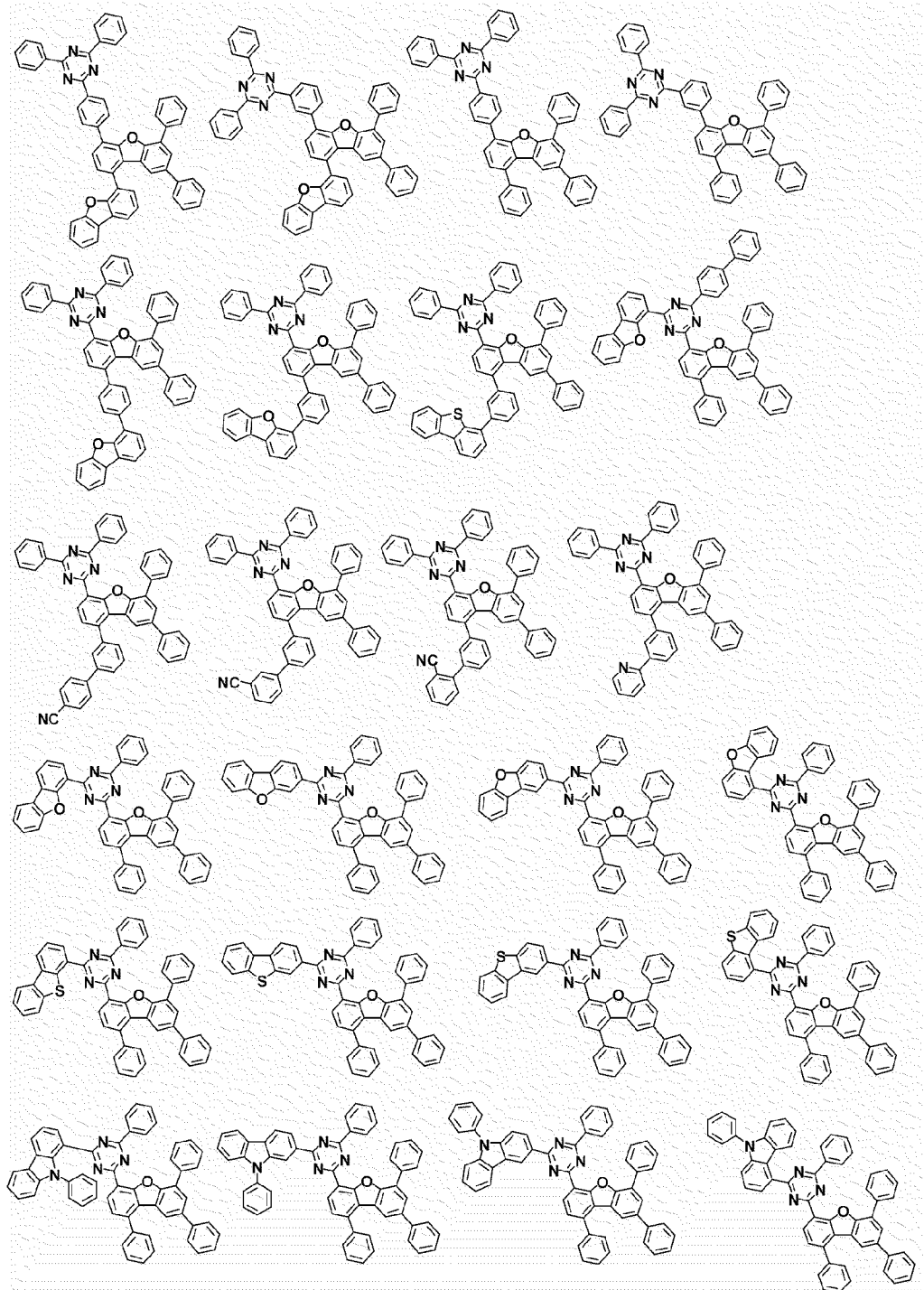
독립적으로 직접결합, 또는 탄소수 6 내지 30의 치환 또는 비치환된 아릴렌기인 것인 헤테로고리 화합물.

[청구항 4] 청구항 1에 있어서, 상기 Z는 치환 또는 비치환된 탄소수 6 내지 30의 아릴기; 또는 치환 또는 비치환된 탄소수 3 내지 30의 N, O, 및 S 중 어느 하나 이상을 포함하는 헤테로아릴기인 것인 헤테로고리 화합물.

[청구항 5] 청구항 1에 있어서, 상기 화학식 1은 하기 화합물 중에서 선택되는 어느 하나인 것인 헤테로고리 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 헤테로고리 화합물을 포함하는 것인 유기 발광 소자.

[도1]

4
3
2
1

[도2]

4
10
9
8
7
6
5
2
1

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/KR2019/007198

A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER

C07D 405/14(2006.01)i, C07D 409/14(2006.01)i, C07D 307/91(2006.01)i, C07D 333/76(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 405/14; C07D 307/91; C07D 403/14; C07D 405/10; C09K 11/06; H01L 51/00; H01L 51/50; C07D 409/14; C07D 333/76

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), Google & Keywords: heterocycle, OLED (Organic Light Emitting Diode), electrode, organic 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 10-2018-0051355 A (LG CHEM, LTD.) 16 May 2018 See claims 1, 10, 11.	1-6
A	US 2016-0093808 A1 (UNIVERSAL DISPLAY CORPORATION) 31 March 2016 See claims 1-9, 34; paragraphs [0003], [0075]-[0094]; compound D40.	1-6
A	KR 10-2016-0028524 A (MERCK PATENT GMBH.) 11 March 2016 See claims 1-15; paragraphs [0001], [0103]-[0126], [0158], [0175], [0190].	1-6
A	JP 2016-128432 A (UNIVERSAL DISPLAY CORP.) 14 July 2016 See claims 1-8; paragraphs [0016], [0056]; compound 1.	1-6
A	KR 10-2016-0054582 A (MERCK PATENT GMBH.) 16 May 2016 See the entire document.	1-6



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

09 SEPTEMBER 2019 (09.09.2019)

Date of mailing of the international search report

10 SEPTEMBER 2019 (10.09.2019)

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/KR2019/007198

Patent document cited in search report	Publication date	Patent family member	Publication date
KR 10-2018-0051355 A	16/05/2018	CN 109071513 A	21/12/2018
		EP 3415512 A2	19/12/2018
		JP 2019-513131 A	23/05/2019
		TW 201817727 A	16/05/2018
		TW 1641606 B	21/11/2018
		US 2019-0047991 A1	14/02/2019
		WO 2018-084423 A2	11/05/2018
		WO 2018-084423 A3	09/08/2018
		US 2016-0093808 A1	31/03/2016
KR 10-2016-0028524 A	11/03/2016	CN 106459018 A	22/02/2017
		EP 3140302 A1	15/03/2017
		EP 3140302 B1	21/08/2019
		JP 2017-514878 A	08/06/2017
		KR 10-1730779 B1	26/04/2017
		TW 201609675 A	16/03/2016
		US 2017-0186965 A1	29/06/2017
		WO 2015-169412 A1	12/11/2015
		JP 2016-128432 A	14/07/2016
EP 3043398 A1	13/07/2016		
EP 3043398 B1	04/04/2018		
KR 10-2016-0085206 A	15/07/2016		
US 2016-0197285 A1	07/07/2016		
US 9406892 B2	02/08/2016		
KR 10-2016-0054582 A	16/05/2016	CN 105518103 A	20/04/2016
		CN 105518103 B	21/12/2018
		EP 3044286 A1	20/07/2016
		EP 3044286 B1	31/01/2018
		JP 2016-536802 A	24/11/2016
		TW 201527291 A	16/07/2015
		TW 1637946 B	11/10/2018
		US 2016-0226001 A1	04/08/2016
		WO 2015-036080 A1	19/03/2015

A. 발명이 속하는 기술분류(국제특허분류(IPC)) C07D 405/14(2006.01)i, C07D 409/14(2006.01)i, C07D 307/91(2006.01)i, C07D 333/76(2006.01)i, H01L 51/00(2006.01)i, H01L 51/50(2006.01)i		
B. 조사된 분야 조사된 최소문헌(국제특허분류를 기재) C07D 405/14; C07D 307/91; C07D 403/14; C07D 405/10; C09K 11/06; H01L 51/00; H01L 51/50; C07D 409/14; C07D 333/76 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), 구글 & 키워드: 헤테로고리(heterocycle), 유기발광소자(OLE), Organic Light Emitting Diode), 전극(electrode), 유기물층 (organic layer)		
C. 관련 문헌		
카테고리*	인용문헌명 및 관련 구절(해당하는 경우)의 기재	관련 청구항
X	KR 10-2018-0051355 A (주식회사 엘지화학) 2018.05.16 청구항 1, 10, 11 참조.	1-6
A	US 2016-0093808 A1 (UNIVERSAL DISPLAY CORPORATION) 2016.03.31 청구항 1-9, 34; 단락 [0003], [0075]-[0094]; 화합물 D40 참조.	1-6
A	KR 10-2016-0028524 A (메르크 파텐트 게엠베하) 2016.03.11 청구항 1-15; 단락 [0001], [0103]-[0126], [0158], [0175], [0190] 참조.	1-6
A	JP 2016-128432 A (UNIVERSAL DISPLAY CORP.) 2016.07.14 청구항 1-8; 단락 [0016], [0056]; 화합물 1 참조.	1-6
A	KR 10-2016-0054582 A (메르크 파텐트 게엠베하) 2016.05.16 전체 문헌 참조.	1-6
<input type="checkbox"/> 추가 문헌이 C(계속)에 기재되어 있습니다. <input checked="" type="checkbox"/> 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 09월 09일 (09.09.2019)	국제조사보고서 발송일 2019년 09월 10일 (10.09.2019)	
ISA/KR의 명칭 및 우편주소  대한민국 특허청 (35208) 대전광역시 서구 청사로 189, 4동 (둔산동, 정부대전청사) 팩스 번호 +82-42-481-8578	심사관 이기철 전화번호 +82-42-481-3353	

국제조사보고서에서 인용된 특허문헌	공개일	대응특허문헌	공개일
KR 10-2018-0051355 A	2018/05/16	CN 109071513 A EP 3415512 A2 JP 2019-513131 A TW 201817727 A TW I641606 B US 2019-0047991 A1 WO 2018-084423 A2 WO 2018-084423 A3	2018/12/21 2018/12/19 2019/05/23 2018/05/16 2018/11/21 2019/02/14 2018/05/11 2018/08/09
US 2016-0093808 A1	2016/03/31	없음	
KR 10-2016-0028524 A	2016/03/11	CN 106459018 A EP 3140302 A1 EP 3140302 B1 JP 2017-514878 A KR 10-1730779 B1 TW 201609675 A US 2017-0186965 A1 WO 2015-169412 A1	2017/02/22 2017/03/15 2019/08/21 2017/06/08 2017/04/26 2016/03/16 2017/06/29 2015/11/12
JP 2016-128432 A	2016/07/14	CN 105753847 A EP 3043398 A1 EP 3043398 B1 KR 10-2016-0085206 A US 2016-0197285 A1 US 9406892 B2	2016/07/13 2016/07/13 2018/04/04 2016/07/15 2016/07/07 2016/08/02
KR 10-2016-0054582 A	2016/05/16	CN 105518103 A CN 105518103 B EP 3044286 A1 EP 3044286 B1 JP 2016-536802 A TW 201527291 A TW I637946 B US 2016-0226001 A1 WO 2015-036080 A1	2016/04/20 2018/12/21 2016/07/20 2018/01/31 2016/11/24 2015/07/16 2018/10/11 2016/08/04 2015/03/19