

(12) 특허협력조약에 의하여 공개된 국제출원

(19) 세계지식재산권기구
국제사무국

(43) 국제공개일
2017년 3월 2일 (02.03.2017)



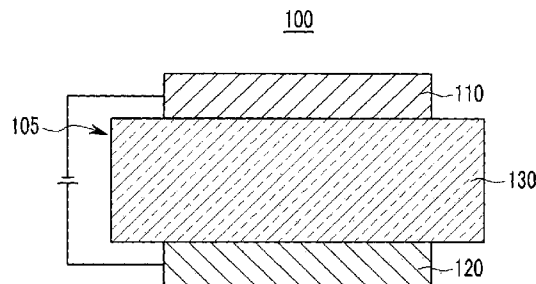
(10) 국제공개번호
WO 2017/034085 A1

- (51) 국제특허분류:
C07D 403/04 (2006.01) *H01L 51/50* (2006.01)
C07D 209/82 (2006.01) *H01L 51/42* (2006.01)
C09K 11/06 (2006.01)
- (21) 국제출원번호: PCT/KR2015/012413
- (22) 국제출원일: 2015년 11월 18일 (18.11.2015)
- (25) 출원언어: 한국어
- (26) 공개언어: 한국어
- (30) 우선권정보:
10-2015-0119667 2015년 8월 25일 (25.08.2015) KR
- (71) 출원인: 삼성에스디아이 주식회사 (SAMSUNG SDI CO., LTD.) [KR/KR]; 17084 경기도 용인시 기흥구 공세로 150-20, Gyeonggi-do (KR).
- (72) 발명자: 김준석 (KIM, Jun Seok); 16678 경기도 수원시 영통구 삼성로 130, Gyeonggi-do (KR). 김영권 (KIM, Young-Kwon); 16678 경기도 수원시 영통구 삼성로 130, Gyeonggi-do (KR). 민수현 (MIN, Soo-Hyun); 16678 경기도 수원시 영통구 삼성로 130, Gyeonggi-do (KR). 유은선 (YU, Eun Sun); 16678 경기도 수원시 영통구 삼성로 130, Gyeonggi-do (KR). 김병구 (KIM, Byung-Ku); 16678 경기도 수원시 영통구 삼성로 130, Gyeonggi-do (KR). 이병관 (LEE, Byoung-Kwan); 16678 경기도 수원시 영통구 삼성로 130, Gyeonggi-do (KR). 장기포 (JANG, Kipo); 16678 경기도 수원시 영통구 삼성로 130, Gyeonggi-do (KR). 정성현 (JUNG, Sung-Hyun); 16678 경기도 수원시 영통구 삼성로 130, Gyeonggi-do (KR).
- (74) 대리인: 팬코리아특허법인 (PANKOREA PATENT AND LAW FIRM); 06234 서울시 강남구 논현로 85길 70, 13층, 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, DK, DM, DO, DZ, EC, EE, EG, ES, FI, GB, GD, GE, GH, GM, GT, HN, HR, HU, ID, IL, IN, IR, IS, JP, KE, KG, KN, KP, KZ, LA, LC, LK, LR, LS, LU, LY, MA, MD, ME, MG, MK, MN, MW, MX, MY, MZ, NA, NG, NI, NO, NZ, OM, PA, PE, PG, PH, PL, PT, QA, RO, RS, RU, RW, SA, SC, SD, SE, SG, SK, SL, SM, ST, SV, SY, TH, TJ, TM, TN, TR, TT, TZ, UA, UG, US, UZ, VC, VN, ZA, ZM, ZW.
- (84) 지정국 (별도의 표시가 없는 한, 가능한 모든 종류의 역내 권리의 보호를 위하여): ARIPO (BW, GH, GM, KE, LR, LS, MW, MZ, NA, RW, SD, SL, ST, SZ, TZ, UG, ZM, ZW), 유라시아 (AM, AZ, BY, KG, KZ, RU, TJ, TM), 유럽 (AL, AT, BE, BG, CH, CY, CZ, DE, DK, EE, ES, FI, FR, GB, GR, HR, HU, IE, IS, IT, LT, LU, LV, MC, MK, MT, NL, NO, PL, PT, RO, RS, SE, SI, SK, SM, TR), OAPI (BF, BJ, CF, CG, CI, CM, GA, GN, GQ, GW, KM, ML, MR, NE, SN, TD, TG).
- 공개:
— 국제조사보고서와 함께 (조약 제 21 조(3))

(54) Title: ORGANIC COMPOUND, ORGANIC OPTOELECTRONIC DEVICE AND DISPLAY DEVICE

(54) 발명의 명칭 : 유기 화합물, 유기 광전자 소자 및 표시장치

[Fig. 1]



(57) Abstract: The present invention relates to an organic compound represented by a combination of chemical formulae 1 and 2, an organic optoelectronic device and a display device.

(57) 요약서: 화학식 1 과 2 의 조합으로 표현되는 유기 화합물, 유기 광전자 소자 및 표시 장치에 관한 것이다.



WO 2017/034085 A1

【발명의 설명】**【발명의 명칭】**

유기 화합물, 유기 광전자 소자 및 표시 장치

【기술분야】

5 유기 화합물, 유기 광전자 소자 및 표시 장치에 관한 것이다.

【배경기술】

유기 광전자 소자(organic optoelectronic diode)는 전기 에너지와 광 에너지를 상호 전환할 수 있는 소자이다.

유기 광전자 소자는 동작 원리에 따라 크게 두 가지로 나눌 수 있다. 하나는
10 광 에너지에 의해 형성된 엑시톤(exciton)이 전자와 정공으로 분리되고 상기 전자와 정공이 각각 다른 전극으로 전달되면서 전기 에너지를 발생하는 광전 소자이고, 다른 하나는 전극에 전압 또는 전류를 공급하여 전기 에너지로부터 광 에너지를 발생하는 발광 소자이다.

유기 광전자 소자의 예로는 유기 광전 소자, 유기 발광 소자, 유기 태양 전지
15 및 유기 감광체 드럼(organic photo conductor drum) 등을 들 수 있다.

이 중, 유기 발광 소자(organic light emitting diode, OLED)는 근래 평판 표시 장치(flat panel display device)의 수요 증가에 따라 크게 주목받고 있다. 상기 유기 발광 소자는 유기 발광 재료에 전류를 가하여 전기 에너지를 빛으로 전환시키는 소자로서, 통상 양극(anode)과 음극(cathode) 사이에 유기 층이 삽입된 구조로
20 이루어져 있다.

유기 발광 소자의 성능은 상기 유기 층의 특성에 의해 영향을 많이 받으며, 그 중에서도 상기 유기 층에 포함된 유기 재료에 의해 영향을 많이 받는다.

특히 상기 유기 발광 소자가 대형 평판 표시 장치에 적용되기 위해서는 정공 및 전자의 이동성을 높이는 동시에 전기화학적 안정성을 높일 수 있는 유기 재료의
25 개발이 필요하다.

【발명의 내용】**【해결하려는 과제】**

일 구현예는 고효율 및 장수명 유기 광전자 소자를 구현할 수 있는 유기 화합물을 제공한다.

30 다른 구현예는 상기 유기 화합물의 합성 방법을 제공한다.

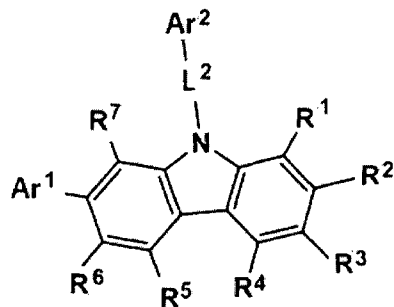
또 다른 구현예는 상기 유기 화합물을 포함하는 유기 광전자 소자를 제공한다.

또 다른 구현예는 상기 유기 광전자 소자를 포함하는 표시 장치를 제공한다.

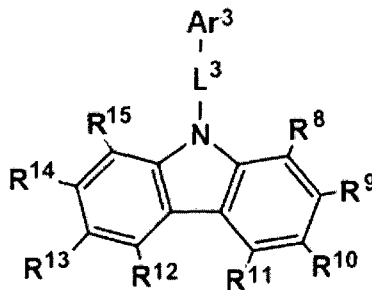
【과제의 해결 수단】

- 5 일 구현예에 따르면, 하기 화학식 1과 2의 조합으로 표현되는 유기 화합물을 제공한다.

[화학식 1]



[화학식 2]



상기 화학식 1 또는 2에서,

- 10 Ar^1 내지 Ar^3 는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기이고,

L^2 및 L^3 는 각각 독립적으로 단일 결합, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴렌기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30의 2가의 헤테로고리기 또는 이들의 조합이고,

- 15 R^1 내지 R^{15} 는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C20 사이클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 헤테로고리기, 할로젠, 시아노기, 실릴기 또는 이들의 조합이거나 화학식 1 또는 2와의 연결 지점이고,

- 20 R^1 내지 R^7 중 어느 하나는 화학식 2와의 연결 지점이고,

R^8 내지 R^{15} 중 어느 하나는 화학식 1과의 연결 지점이다.

또 다른 구현예에 따르면, 서로 마주하는 애노드와 캐소드, 그리고 상기 애노드와 상기 캐소드 사이에 위치하는 적어도 1층의 유기층을 포함하고, 상기 유기층은 상기 유기 화합물을 포함하는 유기 광전자 소자를 제공한다.

- 25 또 다른 구현예에 따르면, 상기 유기 광전자 소자를 포함하는 표시 장치를

제공한다.

【발명의 효과】

고효율 장수명 유기 광전자 소자를 구현할 수 있다.

【도면의 간단한 설명】

- 5 도 1은 일 구현예에 따른 유기 발광 소자를 보여주는 단면도이고,
 도 2는 다른 구현예에 따른 유기 발광 소자를 보여주는 단면도이다.

【발명을 실시하기 위한 구체적인 내용】

- 이하, 본 발명의 구현예를 상세히 설명하기로 한다. 다만, 이는 예시로서
 제시되는 것으로, 이에 의해 본 발명이 제한되지는 않으며 본 발명은 후술할
 10 청구범위의 범주에 의해 정의될 뿐이다.

- 본 명세서에서 "치환"이란 별도의 정의가 없는 한, 치환기 또는 화합물 중의
 적어도 하나의 수소가 중수소, 할로젠기, 히드록시기, 아미노기, 치환 또는 비치환된
 C1 내지 C30 아민기, 니트로기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C40 실릴기, C1 내지
 C30 알킬기, C1 내지 C10 알킬실릴기, C6 내지 C30 아릴기, C2 내지 C30
 15 헤테로고리기, C1 내지 C20 알콕시기, 트리플루오로메틸기 등의 C1 내지 C10
 트리플루오로알킬기 또는 시아노기로 치환된 것을 의미한다.

- 또한 상기 치환된 할로젠기, 히드록시기, 아미노기, 치환 또는 비치환된 C1
 내지 C20 아민기, 니트로기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C40 실릴기, C1 내지 C30
 알킬기, C1 내지 C10 알킬실릴기, C6 내지 C30 아릴기, C3 내지 C30 헤테로고리기,
 20 C1 내지 C20 알콕시기, 트리플루오로메틸기 등의 C1 내지 C10 트리플루오로알킬기
 또는 시아노기 중 인접한 두 개의 치환기가 융합되어 고리를 형성할 수도 있다.
 예를 들어, 상기 치환된 C6 내지 C30 아릴기는 인접한 또 다른 치환된 C6 내지 C30
 아릴기와 융합되어 치환 또는 비치환된 플루오렌 고리를 형성할 수 있다.

- 본 명세서에서 "헤테로"란 별도의 정의가 없는 한, 하나의 작용기 내에
 25 적어도 하나의 헤테로 원자를 포함하고 나머지는 탄소인 것을 의미한다. 상기
 헤테로 원자는 N, O, S, P 및 Si 에서 선택될 수 있다.

- 본 명세서에서 "아릴기(aryl group)"는 카보사이클릭 방향족 모이어티를 하나
 이상 갖는 그룹을 의미하며 넓게는 카보사이클릭 방향족 모이어티들이 단일
 결합으로 연결된 형태 및 카보사이클릭 방향족 모이어티들이 직접 또는 간접적으로
 30 융합된 비방향족 융합 고리 또한 포함한다. 아릴기는 모노시클릭, 폴리시클릭 또는

융합된 폴리시클릭(즉, 탄소원자들의 인접한 쌍들을 나눠 가지는 고리) 작용기를 포함한다.

본 명세서에서 "헤테로고리기(heterocyclic group)"는 아릴기, 사이클로알킬기, 이들의 융합고리 또는 이들의 조합과 같은 고리 화합물 내에 N, O, S, P 및 Si에서
5 선택되는 헤테로 원자를 적어도 한 개를 함유하고, 나머지는 탄소인 것을 의미한다. 상기 헤테로고리기가 융합고리인 경우, 상기 헤테로고리기 전체 또는 각각의 고리마다 헤테로 원자를 한 개 이상 포함할 수 있다.

보다 구체적으로, 치환 또는 비치환된 아릴기 및/또는 치환 또는 비치환된 헤테로 고리기는, 치환 또는 비치환된 페닐기, 치환 또는 비치환된 나프틸기, 치환
10 또는 비치환된 안트라세닐기, 치환 또는 비치환된 페난트릴기, 치환 또는 비치환된 나프타세닐기, 치환 또는 비치환된 피레닐기, 치환 또는 비치환된 바이페닐기, 치환 또는 비치환된 터페닐기, 치환 또는 비치환된 퀴터페닐기, 치환 또는 비치환된 크리세닐기, 치환 또는 비치환된 트리페닐레닐기, 치환 또는 비치환된 페릴레닐기, 치환 또는 비치환된 인데닐기, 치환 또는 비치환된 퓨라닐기, 치환 또는 비치환된 티오펜기, 치환 또는 비치환된 피롤릴기, 치환 또는 비치환된 피라졸릴기, 치환
15 또는 비치환된 이미다졸일기, 치환 또는 비치환된 트리아졸일기, 치환 또는 비치환된 옥사졸일기, 치환 또는 비치환된 티아졸일기, 치환 또는 비치환된 옥사디아졸일기, 치환 또는 비치환된 티아디아졸일기, 치환 또는 비치환된 피리디닐기, 치환 또는 비치환된 피리미디닐기, 치환 또는 비치환된 피라지닐기, 치환 또는 비치환된 트리아지닐기, 치환 또는 비치환된 벤조퓨라닐기, 치환 또는 비치환된 벤조티오펜기, 치환 또는 비치환된 벤즈이미다졸일기, 치환 또는 비치환된 인돌일기, 치환 또는 비치환된 퀴놀리닐기, 치환 또는 비치환된 이소퀴놀리닐기, 치환 또는 비치환된 퀴나졸리닐기, 치환 또는 비치환된 퀴녹살리닐기, 치환 또는 비치환된 나프티리디닐기, 치환 또는 비치환된
20 벤즈옥사진일기, 치환 또는 비치환된 벤즈티아진일기, 치환 또는 비치환된 아크리디닐기, 치환 또는 비치환된 페나진일기, 치환 또는 비치환된 페노티아진일기, 치환 또는 비치환된 페녹사진일기, 치환 또는 비치환된 플루오레닐기, 치환 또는 비치환된 디벤조퓨란일기, 치환 또는 비치환된 디벤조티오펜기, 치환 또는 비치환된 카바졸기, 이들의 조합 또는 이들의 조합이 융합된 형태일 수 있으나,
30 이에 제한되지는 않는다.

본 명세서에서, 정공 특성이란, 전기장(electric field)을 가했을 때 전자를 공여하여 정공을 형성할 수 있는 특성을 말하는 것으로, HOMO 준위를 따라 전도 특성을 가져 양극에서 형성된 정공의 발광층으로의 주입, 발광층에서 형성된 정공의 양극으로의 이동 및 발광층에서의 이동을 용이하게 하는 특성을 의미한다.

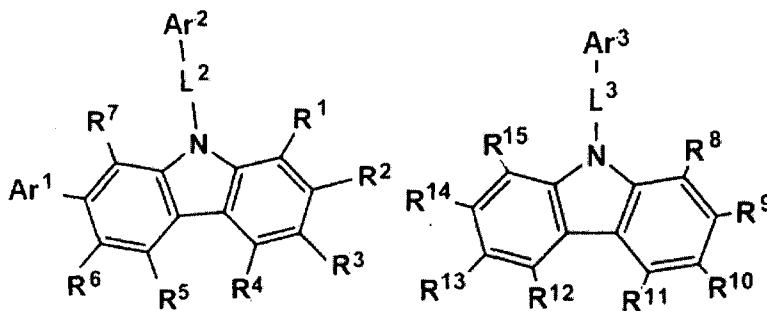
또한 전자 특성이란, 전기장을 가했을 때 전자를 받을 수 있는 특성을 말하는 것으로, LUMO 준위를 따라 전도 특성을 가져 음극에서 형성된 전자의 발광층으로의 주입, 발광층에서 형성된 전자의 음극으로의 이동 및 발광층에서의 이동을 용이하게 하는 특성을 의미한다.

이하 일 구현예에 따른 유기 화합물을 설명한다.

일 구현예에 따른 유기 화합물은 하기 화학식 1과 2의 조합으로 표현될 수 있다.

[화학식 1]

[화학식 2]



상기 화학식 1 또는 2에서,

Ar¹ 내지 Ar³는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기이고,

L² 및 L³는 각각 독립적으로 단일 결합, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴렌기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30의 2가의 헤테로고리기 또는 이들의 조합이고,

R¹ 내지 R¹⁵는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C20 사이클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 헤테로고리기, 할로젠, 시아노기, 실릴기 또는 이들의 조합이거나 화학식 1 또는 2와의 연결 지점이고,

R¹ 내지 R⁷ 중 어느 하나는 화학식 2와의 연결 지점이고,

R^8 내지 R^{15} 중 어느 하나는 화학식 1과의 연결 지점이다.

상기 유기 화합물은 특정 위치에 아릴 치환된 비스카바졸 화합물로, 높은 유리전이온도(glass transition temperature, T_g)에 의해 개선된 내열 안정성을 가질 수 있다.

5 유리전이온도(T_g)는 유기 화합물 및 이를 적용한 소자의 열안정성과 관련될 수 있다. 즉 높은 유리전이온도(T_g)를 가지는 유기 화합물은, 유기발광소자에 박막 형태로 적용되었을 때, 상기 유기 화합물을 증착한 후에 이루어지는 후속 공정, 예컨대 봉지(encapsulation) 공정에서 온도에 의해 열화되는 것이 방지되어 유기 화합물 및 소자의 수명 특성을 확보할 수 있다.

10 상기 유기 화합물의 유리전이온도(T_g)는 예컨대 약 70°C 이상일 수 있고, 상기 범위 내에서 약 90°C 이상인 경우가 보다 효과적이다.

또한 상기 유기 화합물은 넓은 에너지 밴드갭 및 높은 삼중항 에너지를 구현할 수 있어서 상기 유기 화합물이 적용된 소자의 구동 전압을 낮추고 효율 및 수명 특성을 개선할 수 있다.

15 일 예로, 상기 유기 화합물은 비대칭 구조의 비스카바졸 화합물일 수 있다.

일 예로, 상기 Ar^1 내지 Ar^3 는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 페닐기, 치환 또는 비치환된 바이페닐기, 치환 또는 비치환된 나프틸기, 치환 또는 비치환된 터페닐기, 치환 또는 비치환된 안트라세닐기, 치환 또는 비치환된 페난트레닐기, 치환 또는 비치환된 퀴터페닐기 또는 치환 또는 비치환된 트리페닐레닐기일 수
20 있다.

일 예로, 상기 Ar^1 내지 Ar^3 는 각각 독립적으로 플루오란테닐기(fluoranthenyl group)가 아닐 수 있다.

일 예로, 상기 치환된 페닐기, 치환된 바이페닐기, 치환된 나프틸기, 치환된 안트라세닐기, 치환된 페난트레닐기, 치환된 퀴터페닐기 또는 치환된

25 트리페닐레닐기는 각각 C1 내지 C20 알킬 치환된 페닐기, C1 내지 C20 알킬 치환된 바이페닐기, C1 내지 C20 알킬 치환된 나프틸기, C1 내지 C20 알킬 치환된 안트라세닐기, C1 내지 C20 알킬 치환된 페난트레닐기, C1 내지 C20 알킬 치환된 퀴터페닐기 또는 C1 내지 C20 알킬 치환된 트리페닐레닐기일 수 있다.

일 예로, L^2 및 L^3 는 각각 독립적으로 단일 결합, 치환 또는 비치환된
30 페닐렌기, 치환 또는 비치환된 바이페닐렌기 또는 치환 또는 비치환된 나프틸렌기일

수 있다.

일 예로, R^3, R^6, R^{10} 및 R^{13} 은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C20 사이클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 알콕시기, 할로젠, 시아노기, 실릴기 또는 이들의 조합이거나 화학식 1 또는 2와의 연결 지점일 수 있다.

일 예로, R^3, R^6, R^{10} 및 R^{13} 은 각각 독립적으로 수소일 수 있다.

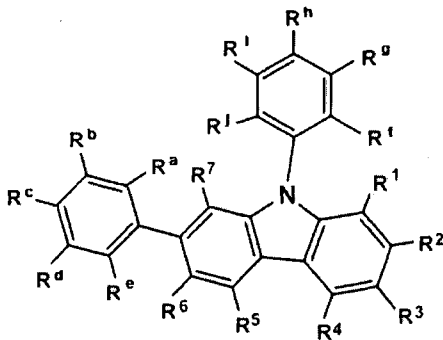
일 예로, R^8 내지 R^{15} 는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C20 사이클로알킬기, 실릴기 또는 이들의 조합이거나 화학식 1과의 연결 지점일 수 있다.

일 예로, R^8 내지 R^{15} 는 각각 독립적으로 수소일 수 있다.

일 예로, R^1 내지 R^4 중 어느 하나는 화학식 2와의 연결 지점일 수 있고 R^8 내지 R^{15} 중 어느 하나는 화학식 1과의 연결 지점일 수 있다.

일 예로, 화학식 1은 하기 화학식 1A로 표현될 수 있다.

[화학식 1A]



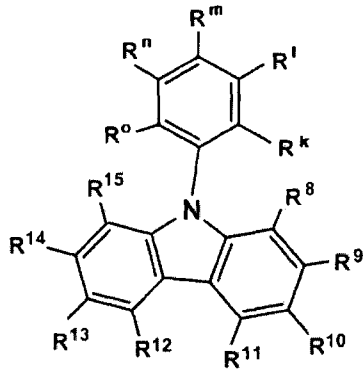
상기 화학식 1A에서,

R^1 내지 R^7 은 전술한 바와 같고,

R^8 내지 R^{15} 는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C20 사이클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 헤테로고리, 할로젠, 시아노기, 실릴기 또는 이들의 조합일 수 있다.

일 예로, 화학식 2는 하기 화학식 2A로 표현될 수 있다.

[화학식 2A]



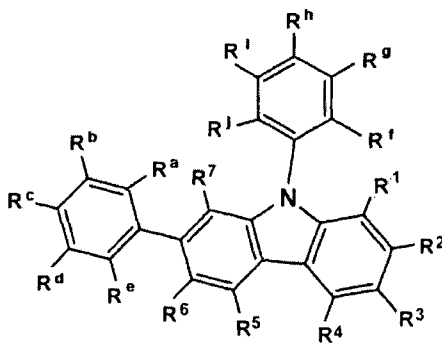
상기 화학식 2A에서,

R^8 내지 R^{15} 는 전술한 바와 같고,

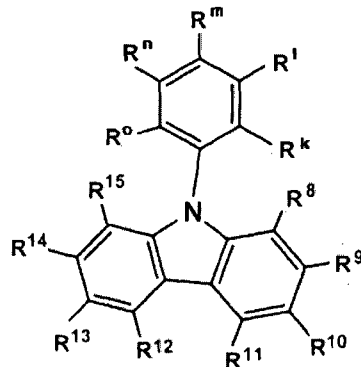
- 5 R^k 내지 R^0 는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C20 사이클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 헤테로고리기, 할로젠, 시아노기, 실릴기 또는 이들의 조합일 수 있다.

- 10 일 예로, 상기 유기 화합물은 화학식 1A와 화학식 2A의 조합으로 표현될 수 있다.

[화학식 1A]



[화학식 2A]

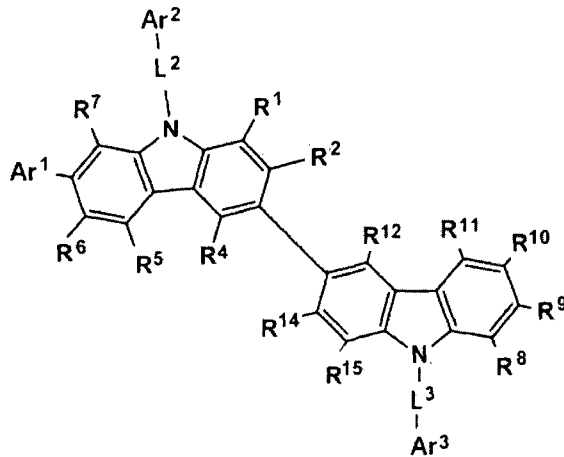


상기 화학식 1A 또는 2A에서,

- 15 R^1 내지 R^{15} 는 전술한 치환기이거나 화학식 1A 또는 2A와의 연결 지점이고,
 R^1 내지 R^7 중 어느 하나는 화학식 2A와의 연결 지점이고,
 R^8 내지 R^{15} 중 어느 하나는 화학식 1A과의 연결 지점이고,
 R^a 내지 R^0 는 전술한 바와 같다.

상기 유기 화합물은 예컨대 하기 화학식 3으로 표현될 수 있다.

[화학식 3]



상기 화학식 3에서,

Ar¹ 내지 Ar³, L² 및 L³, R¹, R², R⁴ 내지 R¹², R¹⁴ 및 R¹⁵는 전술한 바와 같다.

5 일 예로, 상기 화학식 3으로 표현되는 유기 화합물은 비대칭 구조일 수 있다.

일 예로, R⁹는 Ar¹과 동일하지 않을 수 있으며, R⁹는 예컨대 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C20

사이클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 헤테로고리기, 할로젠, 시아노기, 실릴기 또는 이들의 조합일 수 있다.

10 일 예로, R⁶ 및 R¹⁰은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C20 사이클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 헤테로고리기, 할로젠, 시아노기, 실릴기 또는 이들의 조합일 수 있다.

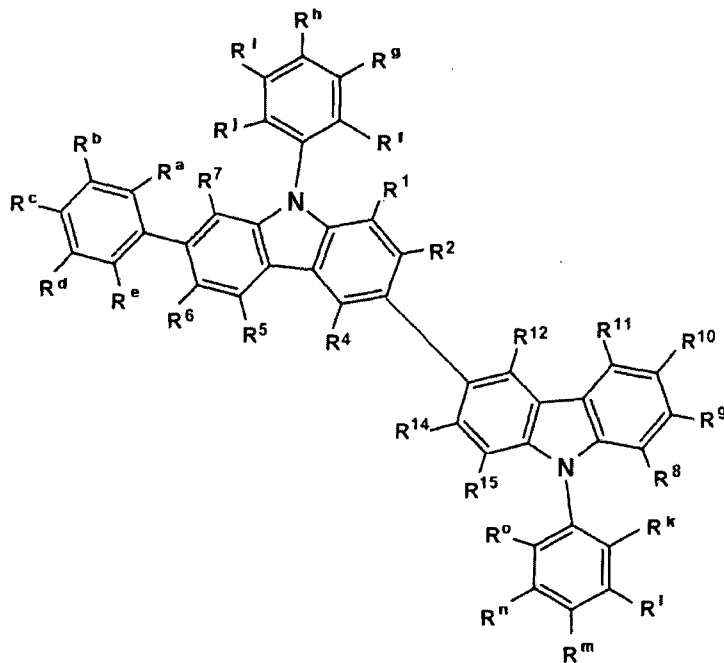
일 예로, R⁶ 및 R¹⁰은 각각 독립적으로 수소일 수 있다.

15 일 예로, R⁸ 내지 R¹², R¹⁴ 및 R¹⁵는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C20 사이클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 헤테로고리기, 할로젠, 시아노기, 실릴기 또는 이들의 조합일 수 있다.

일 예로, R⁸ 내지 R¹², R¹⁴ 및 R¹⁵는 각각 독립적으로 수소일 수 있다.

20 일 예로, 상기 유기 화합물은 예컨대 하기 화학식 3A로 표현될 수 있다.

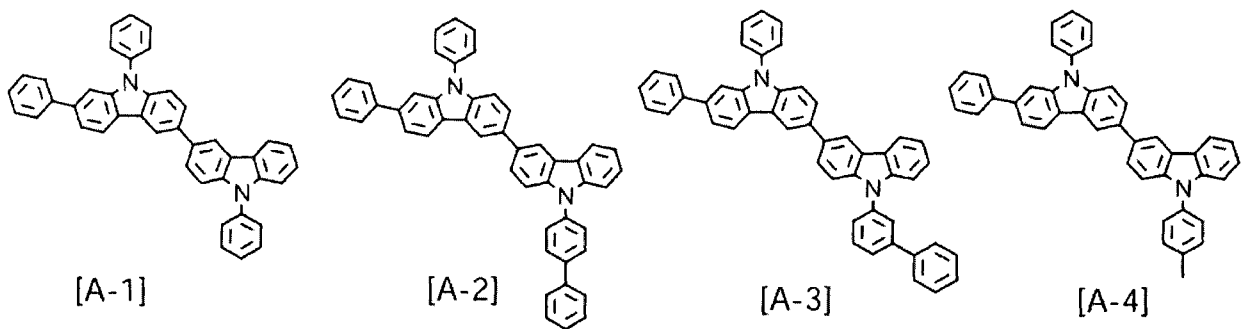
[화학식 3A]

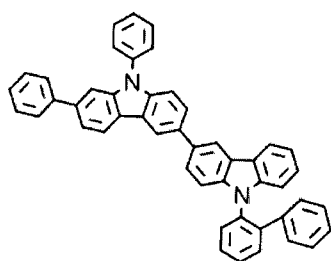


상기 화학식 3A에서, R¹, R², R⁴ 내지 R¹², R¹⁴, R¹⁵ 및 R⁰ 내지 R⁹는 전술한 바와 같다.

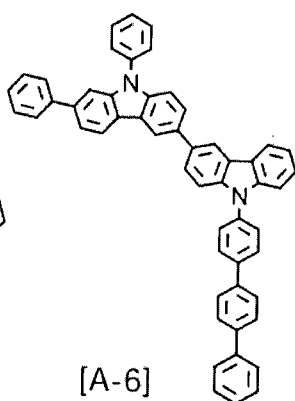
- 5 일 예로, 화학식 3A의 R¹, R², R⁴ 내지 R¹², R¹⁴ 및 R¹⁵는 모두 수소일 수 있다.
 상기 유기 화합물은 예컨대 하기 그룹 1에 나열된 화합물 중 하나일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[그룹 1]

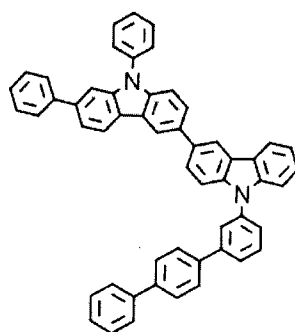




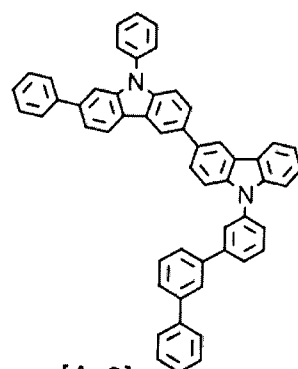
[A-5]



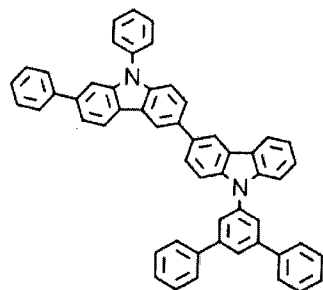
[A-6]



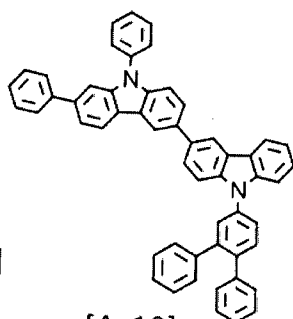
[A-7]



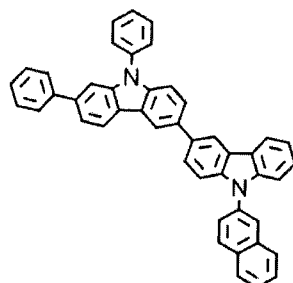
[A-8]



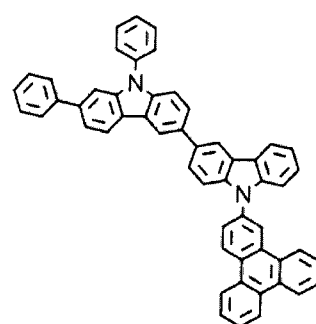
[A-9]



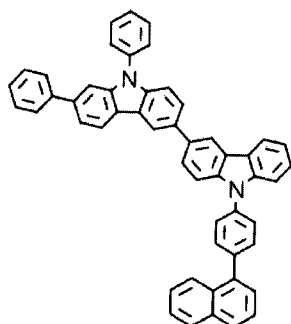
[A-10]



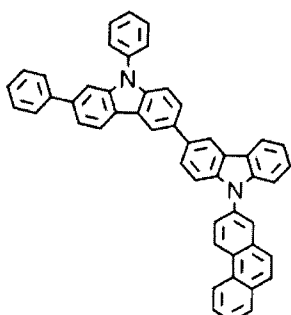
[A-11]



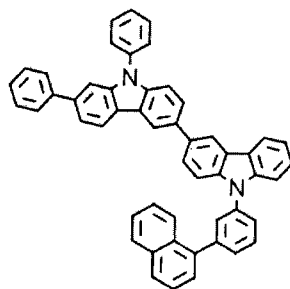
[A-12]



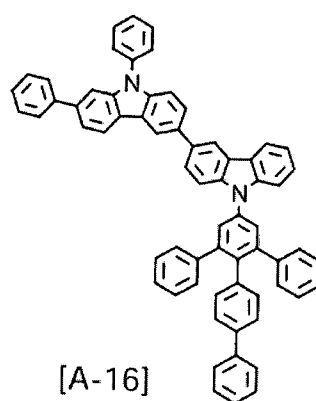
[A-13]



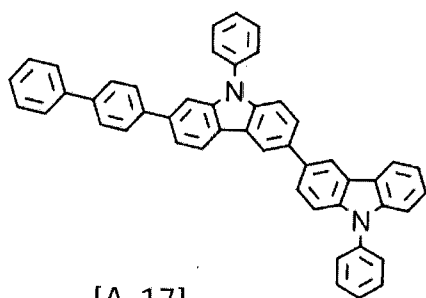
[A-14]



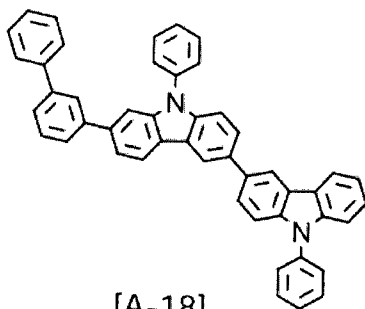
[A-15]



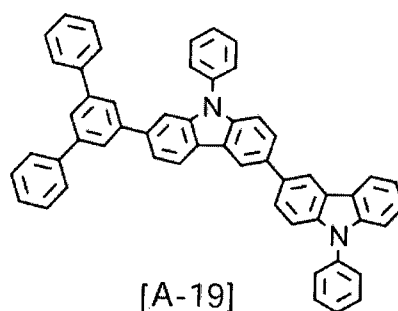
[A-16]



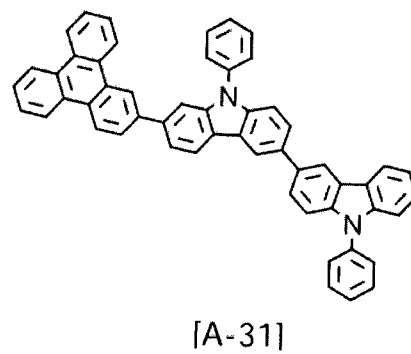
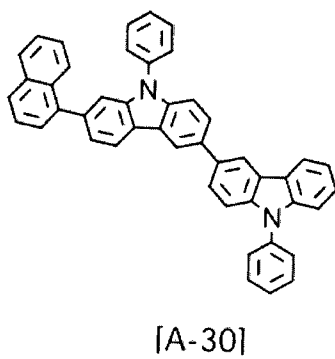
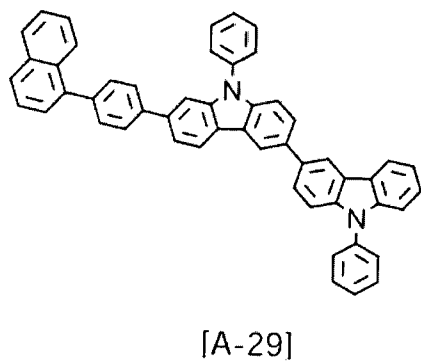
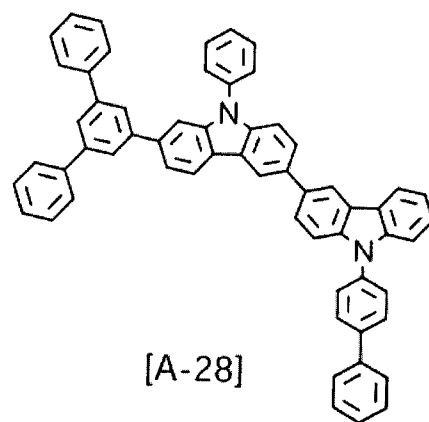
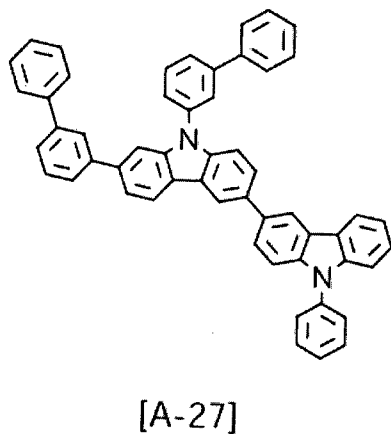
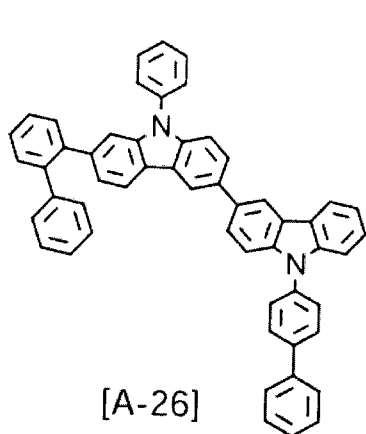
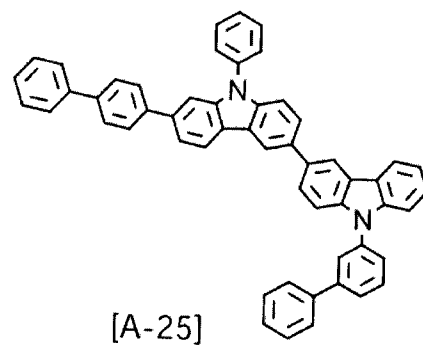
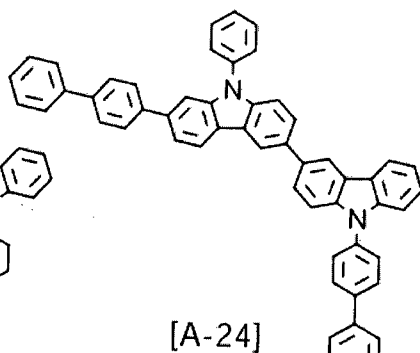
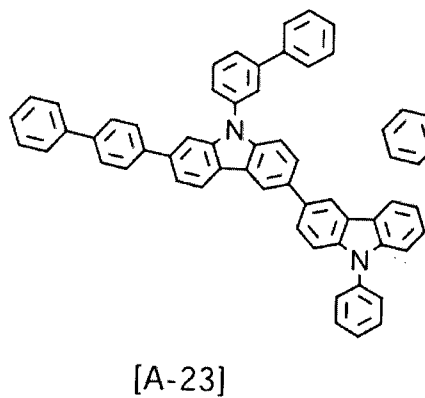
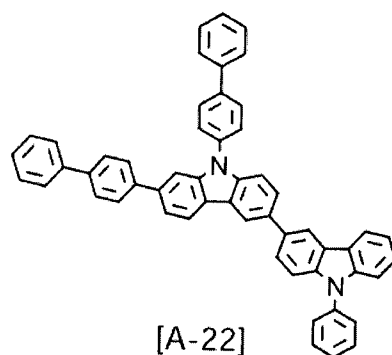
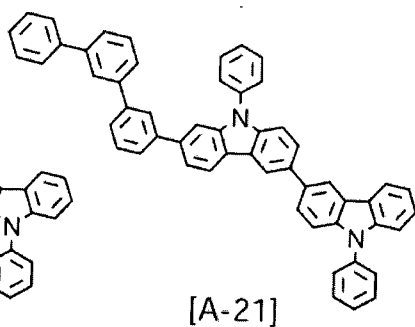
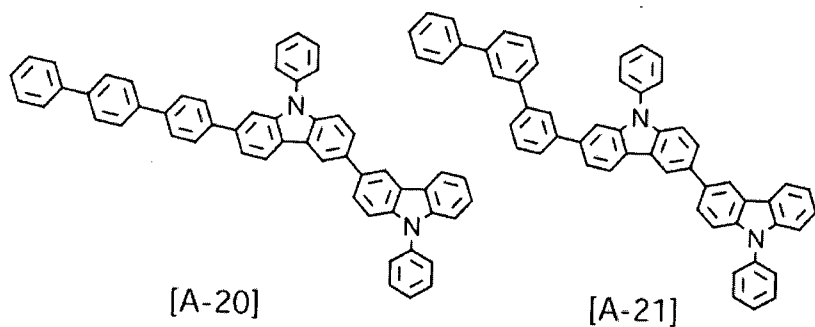
[A-17]

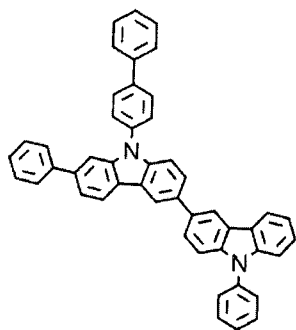


[A-18]

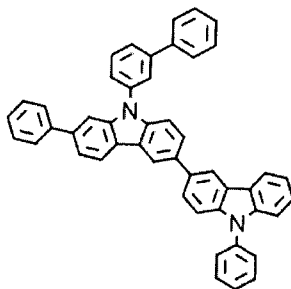


[A-19]

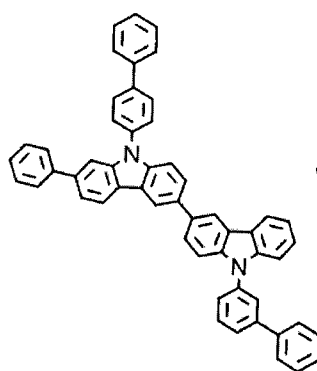




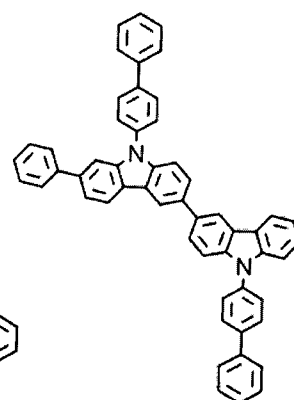
[A-32]



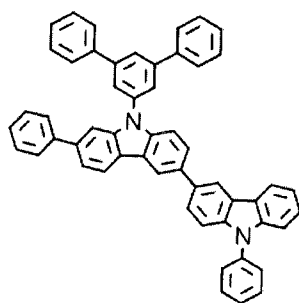
[A-33]



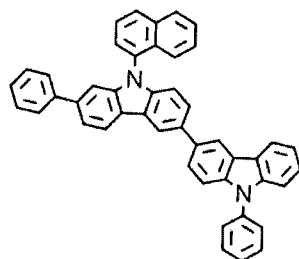
[A-34]



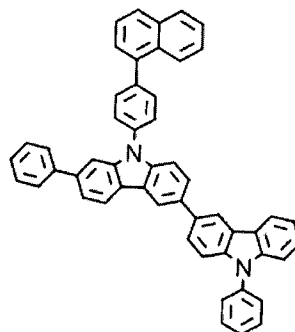
[A-35]



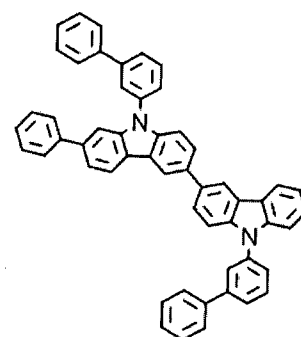
[A-36]



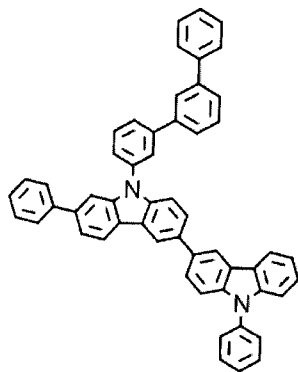
[A-37]



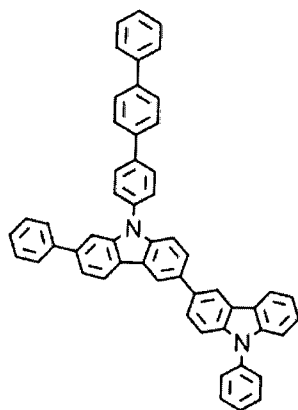
[A-38]



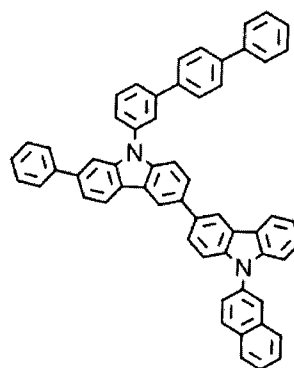
[A-39]



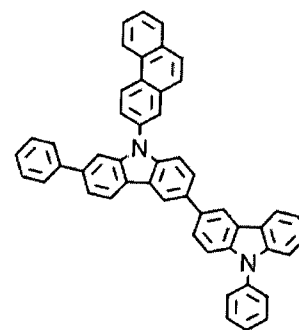
[A-40]



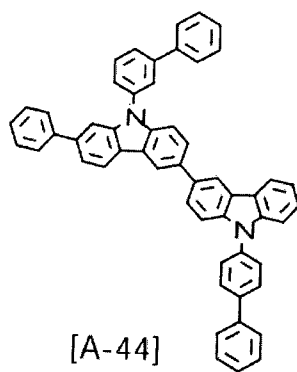
[A-41]



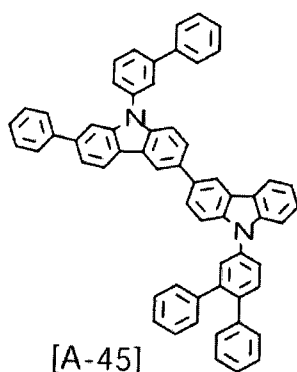
[A-42]



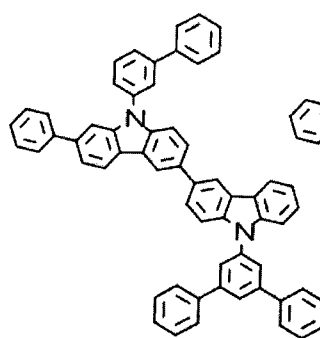
[A-43]



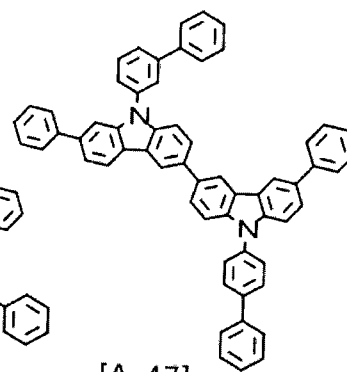
[A-44]



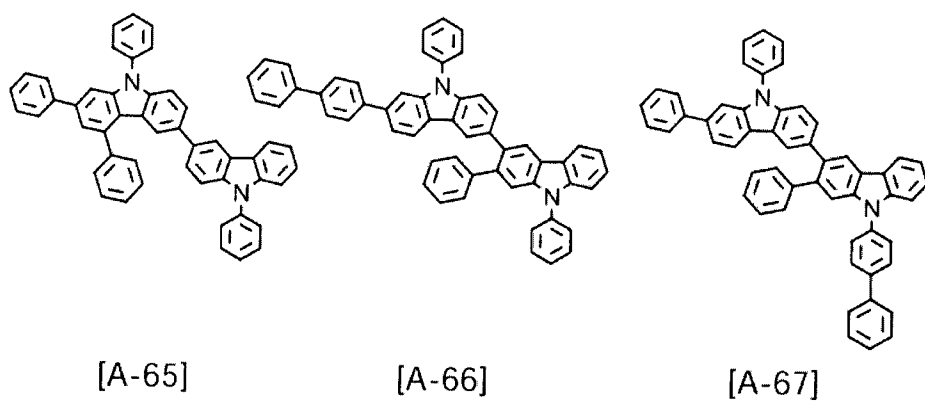
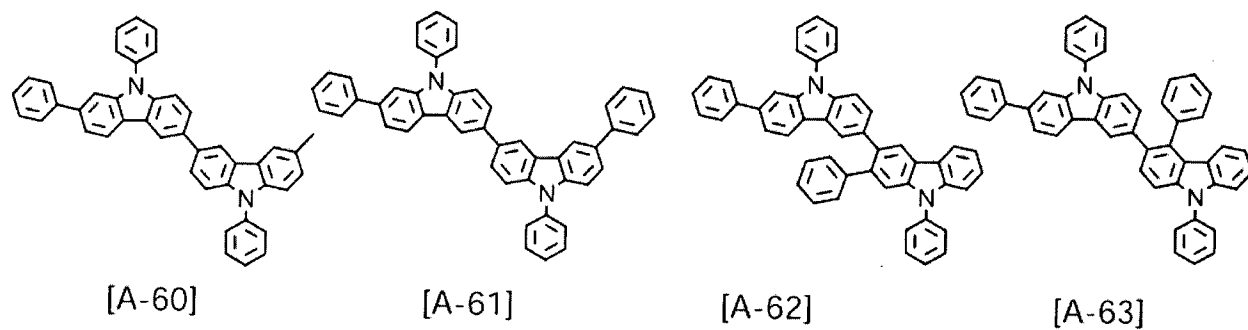
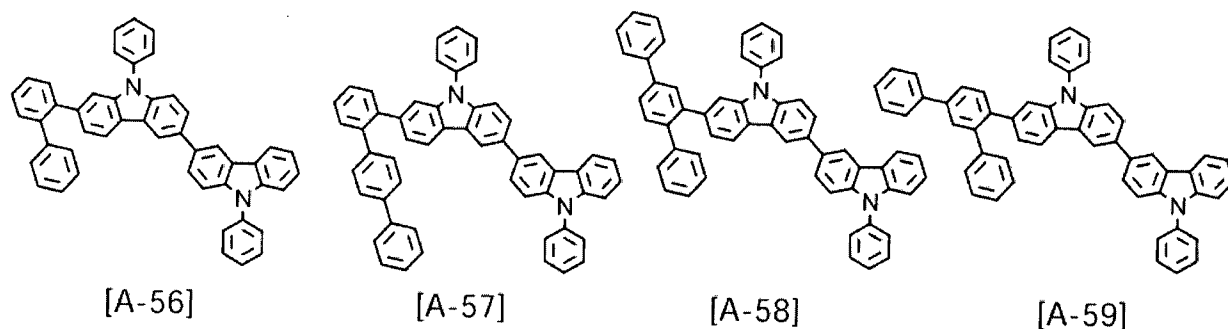
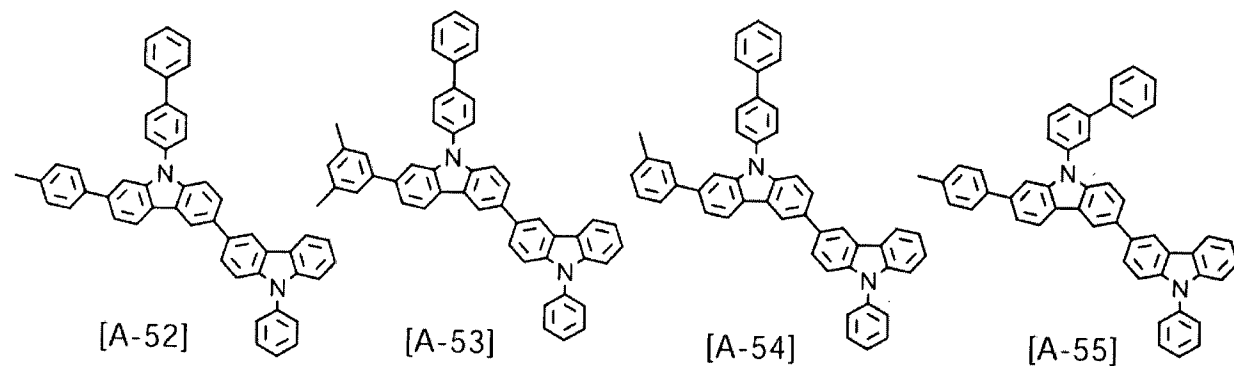
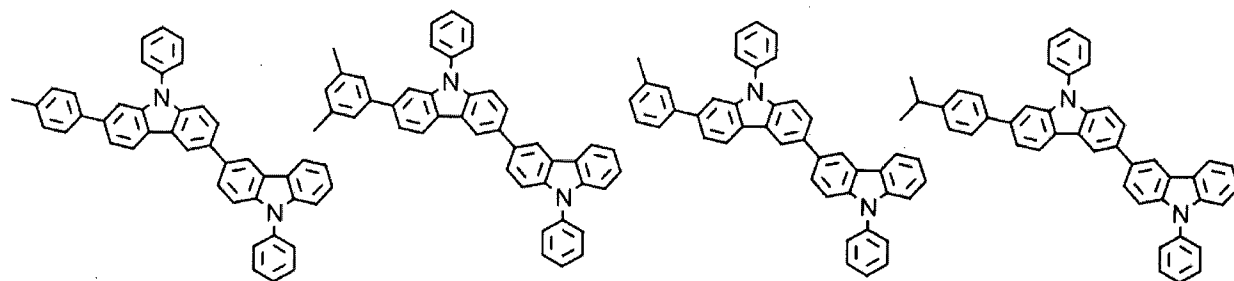
[A-45]



[A-46]



[A-47]



상술한 유기 화합물은 유기 광전자 소자에 적용될 수 있다. 상술한 유기 화합물은 단독으로 또는 다른 유기 화합물과 함께 유기 광전자 소자에 적용될 수 있다.

이하 상술한 유기 화합물을 적용한 유기 광전자 소자를 설명한다.

- 5 상기 유기 광전자 소자는 전기 에너지와 광 에너지를 상호 전환할 수 있는 소자이면 특별히 한정되지 않으며, 예컨대 유기 광전 소자, 유기 발광 소자, 유기 태양 전지 및 유기 감광체 드럼 등을 들 수 있다.

상기 유기 광전자 소자는 서로 마주하는 애노드와 캐소드, 그리고 상기 애노드와 상기 캐소드 사이에 위치하는 적어도 1층의 유기층을 포함할 수 있고,
10 상기 유기층은 전술한 유기 화합물을 포함할 수 있다.

일 예로, 상기 유기층은 상기 유기 화합물을 포함하는 발광층을 포함할 수 있다.

일 예로, 상기 유기층은 발광층, 애노드와 발광층 사이 및/또는 캐소드와 발광층 사이에 위치하는 보조층을 포함할 수 있고, 상기 보조층은 상기 유기
15 화합물을 포함할 수 있다.

여기서는 유기 광전자 소자의 일 예인 유기 발광 소자를 도면을 참고하여 설명한다.

도 1은 일 구현예에 따른 유기 발광 소자를 보여주는 단면도이다.

도 1을 참고하면, 일 구현예에 따른 유기 발광 소자(100)는 서로 마주하는 애노드(110)와 캐소드(120), 그리고 애노드(110)와 캐소드(120) 사이에 위치하는 유기층(105)을 포함한다.
20 애노드(110)는 예컨대 정공 주입이 원활하도록 일 함수가 높은 도전체로

만들어질 수 있으며, 예컨대 금속, 금속 산화물 및/또는 도전성 고분자로 만들어질 수 있다. 양극(120)은 예컨대 니켈, 백금, 바나듐, 크롬, 구리, 아연, 금과 같은 금속 또는 이들의 합금; 아연산화물, 인듐산화물, 인듐주석산화물(ITO), 인듐아연산화물(IZO)과 같은 금속 산화물; ZnO와 Al 또는 SnO₂와 Sb와 같은 금속과 산화물의 조합; 폴리(3-메틸티오펜), 폴리(3,4-(에틸렌-1,2-
25 디옥시)티오펜)(polyethylenedioxythiophene: PEDOT), 폴리피롤 및 폴리아닐린과 같은 도전성 고분자 등을 들 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

30 캐소드(120)는 예컨대 전자 주입이 원활하도록 일 함수가 낮은 도전체로

만들어질 수 있으며, 예컨대 금속, 금속 산화물 및/또는 도전성 고분자로 만들어질 수 있다. 음극(110)은 예컨대 마그네슘, 칼슘, 나트륨, 칼륨, 타이타늄, 인듐, 이트륨, 리튬, 가돌리늄, 알루미늄, 은, 주석, 납, 세슘, 바륨 등과 같은 금속 또는 이들의 합금; LiF/Al, LiO₂/Al, LiF/Ca, LiF/Al 및 BaF₂/Ca와 같은 다층 구조 물질을 들 수
5 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

유기층(105)은 전술한 유기 화합물을 포함하는 발광층(130)을 포함한다.

발광층(130)은 호스트(host)로서 상기 유기 화합물을 포함할 수 있으며, 전술한 유기 화합물을 단독으로 포함할 수도 있고 전술한 유기 화합물 중 적어도 두 종류를 혼합하여 포함할 수도 있고 전술한 유기 화합물과 다른 유기 화합물을
10 혼합하여 포함할 수도 있다.

발광층(130)은 도펀트(dopant)를 더 포함할 수 있다. 상기 도펀트는 적색, 녹색 또는 청색의 도펀트일 수 있으며, 예컨대 인광 도펀트일 수 있다.

상기 도펀트는 상기 유기 화합물에 미량 혼합되어 발광을 일으키는 물질로, 일반적으로 삼중항 상태 이상으로 여기시키는 다중항 여기(multiple excitation)에 의해
15 발광하는 금속 착체(metal complex)와 같은 물질이 사용될 수 있다. 상기 도펀트는 예컨대 무기, 유기, 유무기 화합물일 수 있으며, 1종 또는 2종 이상 포함될 수 있다.

상기 도펀트는 상기 유기 화합물에 미량 혼합되어 발광을 일으키는 물질로, 일반적으로 삼중항 상태 이상으로 여기시키는 다중항 여기(multiple excitation)에 의해 발광하는 금속 착체(metal complex)와 같은 물질이 사용될 수 있다. 상기 도펀트는
20 예컨대 무기, 유기, 유무기 화합물일 수 있으며, 1종 또는 2종 이상 포함될 수 있다.

발광층(130)은 건식 성막법 또는 용액 공정으로 형성될 수 있다. 상기 건식 성막법은 예컨대 화학기상증착법, 스퍼터링, 플라즈마 도금 및 이온도금 일 수 있고, 둘 이상의 화합물을 동시에 성막하거나 증착 온도가 같은 화합물을 혼합하여 같이 성막할 수 있다. 상기 용액 공정은 예컨대 잉크젯 인쇄, 스핀 코팅, 슬릿 코팅, 바
25 코팅 및/또는 딥 코팅일 수 있다.

도 2는 다른 구현예에 따른 유기 발광 소자를 보여주는 단면도이다.

도 2를 참고하면, 일 구현예에 따른 유기 발광 소자(200)는 서로 마주하는 애노드(110)와 캐소드(120), 그리고 애노드(110)와 캐소드(120) 사이에 위치하는 유기층(105)을 포함한다.

유기층(105)은 발광층(230)과 캐소드(120) 사이에 위치하는 보조층(140)을

포함한다. 보조층(140)은 캐소드(120)와 발광층(230) 사이의 전하 주입 및 이동을 용이하게 할 수 있다.

전술한 유기 화합물은 발광층(230)에 호스트로서 포함될 수 있다.

발광층(230)은 전술한 유기 화합물을 단독으로 포함할 수도 있고 전술한 유기

- 5 화합물 중 적어도 두 종류를 혼합하여 포함할 수도 있고 전술한 유기 화합물과 다른 유기 화합물을 혼합하여 포함할 수도 있다. 발광층(230)은 도펀트를 더 포함할 수 있다.

전술한 유기 화합물은 보조층(140)에 포함될 수 있다. 보조층(140)은 전술한 유기 화합물을 단독으로 포함할 수도 있고 전술한 유기 화합물 중 적어도 두

10 종류를 혼합하여 포함할 수도 있고 전술한 유기 화합물과 다른 유기 화합물을 혼합하여 포함할 수도 있다.

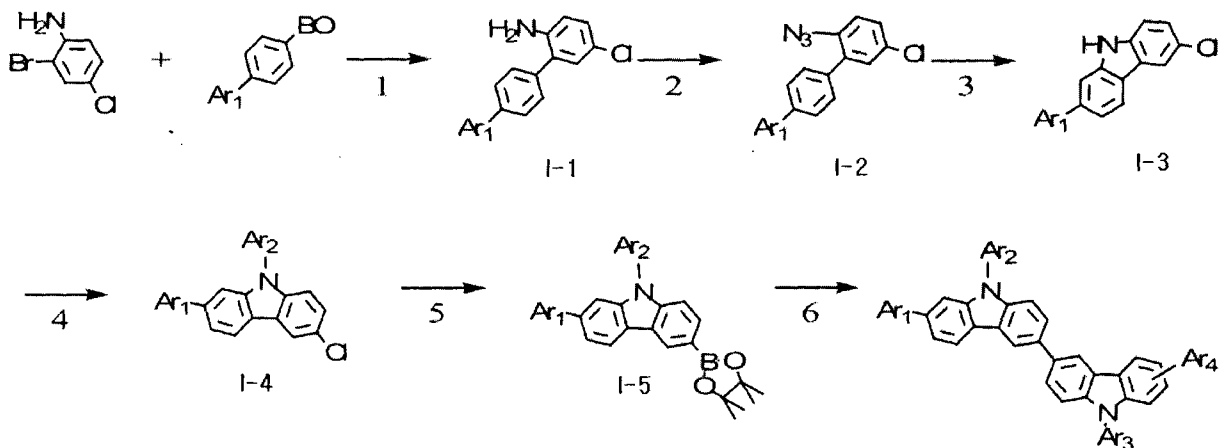
도 2에서 유기층(105)으로서 추가로 애노드(110)와 발광층(230) 사이에 위치하는 적어도 1층의 보조층(도시하지 않음)을 더 포함할 수 있다.

상술한 유기 발광 소자는 유기 발광 표시 장치에 적용될 수 있다.

- 15 이하에서는 본 발명의 구체적인 실시예들을 제시한다. 다만, 하기에 기재된 실시예들은 본 발명을 구체적으로 예시하거나 설명하기 위한 것에 불과하며, 이로서 본 발명이 제한되어서는 아니된다.

유기화합물의 합성

[대표 합성법]



20

(대표 합성법에서, 'BO'는 보론산 또는 보론에스테르의 치환체를 의미한다)

단계 1:

2-브로모-4-클로로-아닐린 1eq와 보론에스테르 혹은 보로닉 엑시드가 치환된

아릴(Ar1) 1eq와 Pd(PP3)4 5mol%, K2CO3 2mol%를 톨루엔(고형분의 12배수)과 증류수(K2CO3량의 5배수)에 현탁시킨 후 질소기류 하에서 18 시간 동안 환류 교반하였다. 반응 종료 후 톨루엔과 증류수로 추출 후 유기층을 마그네슘 설페이트로 건조, 여과하고 여과액을 감압 농축하였다. 유기 용액을 제거하고
5 헥산:디클로로메탄=8:2(v/v)로 실리카겔 컬럼하여 생성물 고체를 디클로로메탄과 에틸아세테이트로 재결정하여 중간체 I-1을 얻었다.

단계 2:

중간체 I-1 1eq를 다이옥산에 교반하여 녹인 후 염산(35%) 3eq을 천천히 투입하였다. 이어서 소듐나이트레이트 1eq 및 소듐아자이드 1eq를 증류수에 녹여
10 1시간 간격으로 투입한다. 반응이 완료되면, NaOH로 중화한 다음 메탄올로 침전시키고, 헥산:디클로로메탄=9:1(v/v)로 실리카겔 컬럼하여 중간체 I-2를 얻었다.

단계 3:

중간체 I-2 1eq 를 o-다이클로로벤젠에 환류교반하여 중간체 I-3을 얻었다.

단계 4:

15 중간체 I-3 1eq 를 브롬화 Ar2 1eq 와 소듐티부톡사이드 2eq, Pd2(dba)3 0.03eq를 톨루엔 (고형분의 10배수)에 현탁시킨 후 트리-터셔리-부틸포스핀 0.09eq를 넣고 18 시간 동안 환류 교반하였다. 반응 종료 후 톨루엔과 증류수로 추출 후 유기층을 마그네슘 설페이트로 건조, 여과하고 여과액을 감압 농축하였다. 유기 용액을 제거하고 헥산:디클로로메탄=8:2(v/v)로 실리카겔 컬럼하여 생성물 고체를
20 디클로로메탄과 에틸아세테이트로 재결정하여 중간체 I-4를 얻었다.

단계 5:

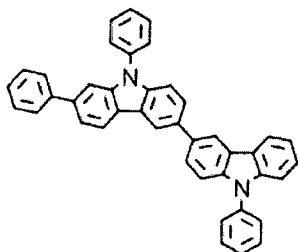
중간체 I-4 1eq 와 피나콜다이보론 1.2eq, Pd(dppf)Cl2 0.2eq 포타슘아세테이트 2eq 를 무수 디메틸포름아미드(Dimethylformamide)(고형분의 12배수)에 넣고 환류교반하였다. 반응 종료 후 증류수로 침전시켰다. 증류수를 건조한 다음
25 디클로로메탄과 에틸아세테이트로 재결정하여 중간체 I-5를 얻었다.

단계 6:

중간체 I-5 1eq 와 “브롬화Ar3” 1eq와 Pd(PP3)4 5mol%, K2CO3 2mol%를 톨루엔(고형분의 12배수)과 증류수(K2CO3량의 5배수)에 현탁시킨 후 질소기류 하에서 18시간 동안 환류 교반하였다. 반응 종료 후 톨루엔과 증류수로 추출 후
30 유기층을 마그네슘 설페이트로 건조, 여과하고 여과액을 감압 농축하였다. 유기

용액을 제거하고 헥산:디클로로메탄=8:2(v/v)로 실리카겔 컬럼하여 생성물 고체를 디클로로메탄과 에틸아세테이트으로 재결정하여 최종 유기 화합물을 얻었다

합성예 1: 화합물 A-1의 합성



[A-1]

5 단계 1:

2-브로모-4-클로로-아닐린 1eq(73.8g)와 다이페닐-4-보로닉 엑시드 1eq(74.3g)와 Pd(PP3)₄ 5mol%(20.7g), K₂CO₃ 2eq(98.8g)를 톨루엔(고형분의 12배수, 1200ml)과 증류수(K₂CO₃량의 5배수, 600ml)에 현탁시킨 후 질소기류 하에서 18 시간 동안 환류 교반하였다. 반응 종료 후 톨루엔과 증류수로 추출 후 유기층을

10 마그네슘설페이트(MgSO₄)로 건조, 여과하고 여과액을 감압 농축하였다. 유기 용액을 제거하고 헥산:디클로로메탄=8:2(v/v)로 실리카겔 컬럼하여 생성물 고체를 디클로로메탄과 아세톤으로 재결정하여 중간체 1(5-클로로-[1,1',4',1'']터페닐-2''-일아민)을 76g(Y=76%) 얻었다.

단계 2:

15 중간체 1 1eq(76g)를 다이옥산에 교반하여 녹인 후 염산(35%) 3eq(72ml)을 천천히 투입하였다. 이어서 소듐나이트레이트 1eq(20.6g) 및 소듐아자이드 1eq(17.7g)를 증류수에 녹여 1시간 간격으로 투입한다. 반응이 완료되면, NaOH로 중화한 다음 메탄올로 침전시키고, 물, 메탄올로 씻어준 다음 건조한다. 그렇게 얻어진 헥산:디클로로메탄=9:1(v/v)로 실리카겔 컬럼하여 중간체 2(2-아줄로-5'-클로로-[1,1',4',1'']터페닐, 78g, Y=94%)를 얻었다.

단계 3:

중간체 2 (78g)를 o-다이클로로벤젠에 18시간 환류교반하여 반응이 완료되면, 용매를 제거한다음, 디클로로메탄/헥산으로 재결정하여 중간체 3(6-클로로-2-페닐-9H-카바졸, 68g Y=96%)을 얻었다.

25 단계 4:

중간체 3 1eq(20g) 를 브로모벤젠 1eq(11.3g) 와 소듐티부톡사이드 2eq(13.8g), Pd2(dba)3 0.03eq(2.0g)를 톨루엔 (240ml)에 현탁시킨 후 트리-터셔리-부틸포스핀 0.09eq를 넣고 18 시간 동안 환류 교반하였다. 반응 종료 후 톨루엔과 증류수로 추출 후 유기층을 마그네슘 설페이트로 건조, 여과하고 여과액을 감압 농축하였다. 유기 용액을 제거하고 헥산:디클로로메탄=8:2(v/v)로 실리카겔 컬럼하여 생성물 고체를 디클로로메탄과 에틸아세테이트으로 재결정하여 중간체 4(6-클로로-2-페닐-9-페닐-카바졸, 17.5g Y=74%)를 얻었다.

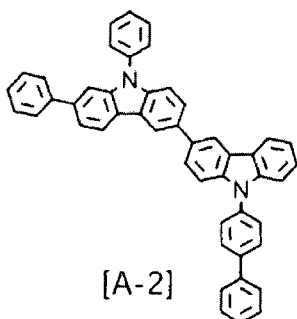
단계 5:

중간체 4 1eq(17.5g) 와 피나콜다이보론 1.2eq(16.3g), Pd(dppf)Cl₂ 0.5eq(2.2g) 포타슘아세테이트 2eq(10.5g) 를 무수디메틸포름아미드 (Dimethylformamide)(고형분의 12배수, 210ml)에 넣고 36시간 환류교반하였다. 반응 종료 후 증류수로 침전시켰다. 침전시킨 유기고형분의 증류수를 완벽히 건조한 다음 디클로로메탄과 에틸아세테이트으로 재결정하여 중간체 5(6-다이보론에스터-2-페닐-9-페닐-카바졸, 10.5g Y=44%)를 얻었다.

단계 6:

중간체 5 1eq(10.5g) 와 3-브로모-9-페닐-카바졸 1eq(7.6g)와 Pd(PP3)₄ 5mol%(1.4g), K₂CO₃ 2eq(6.5g)를 톨루엔(고형분의 12배수, 125ml)과 증류수(K₂CO₃량의 5배수, 33ml)에 현탁시킨 후 질소기류 하에서 18시간 동안 환류 교반하였다. 반응 종료 후 톨루엔과 증류수로 추출 후 유기층을 마그네슘 설페이트로 건조, 여과하고 여과액을 감압 농축하였다. 유기 용액을 제거하고 헥산:디클로로메탄=8:2(v/v)로 실리카겔 컬럼하여 생성물 고체를 디클로로메탄과 에틸아세테이트으로 재결정하여 화합물 A-1(7,9,9'-트리페닐-9H,9'H,[3,3']바이카바졸릴, 6.3g Y=48%)을 얻었다. LC-Mass 측정 (이론치: 560.69g/mol, 측정치: M = 561g/mol)

합성예 2: 화합물 A-2의 합성

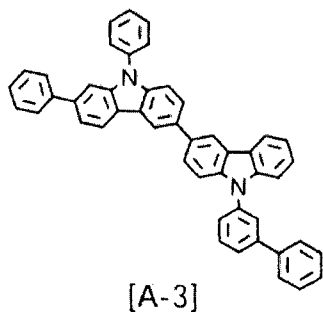


합성에 1의 단계 1 내지 5는 동일하다.

단계 6:

중간체 5 1eq(10.5g) 와 3-브로모-9-파라바이페닐-카바졸 1eq(9.4g)와 Pd(PP3)₄ 5mol%(1.4g), K₂CO₃ 2eq(6.5g)를 톨루엔(고형분의 12배수, 125ml)과 증류수(K₂CO₃량의 5배수, 33ml)에 현탁시킨 후 질소기류 하에서 18시간 동안 환류 교반하였다. 반응 종료 후 톨루엔과 증류수로 추출 후 유기층을 마그네슘 설페이트로 건조, 여과하고 여과액을 감압 농축하였다. 유기 용액을 제거하고 헥산:디클로로메탄=8:2(v/v)로 실리카겔 컬럼하여 생성물 고체를 디클로로메탄과 에틸아세테이트으로 재결정하여 화합물 A-2(10.4g Y=69%)를 얻었다. LC-Mass 측정 (이론치: 636.78g/mol, 측정치: M = 637g/mol)

합성에 3: 화합물 A-3의 합성

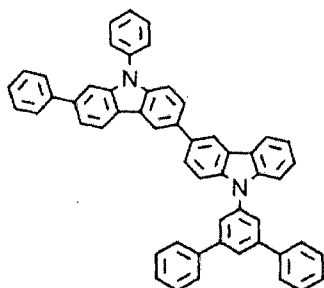


합성에1의 단계 1 내지 5는 동일하다.

단계 6:

중간체 5 1eq(10.5g) 와 3-브로모-9-메타바이페닐-카바졸 1eq(9.4g)와 Pd(PP3)₄ 5mol%(1.4g), K₂CO₃ 2eq(6.5g)를 톨루엔(고형분의 12배수, 125ml)과 증류수(K₂CO₃량의 5배수, 33ml)에 현탁시킨 후 질소기류 하에서 18시간 동안 환류 교반하였다. 반응 종료 후 톨루엔과 증류수로 추출 후 유기층을 마그네슘 설페이트로 건조, 여과하고 여과액을 감압 농축하였다. 유기 용액을 제거하고 헥산:디클로로메탄=8:2(v/v)로 실리카겔 컬럼하여 생성물 고체를 디클로로메탄과 에틸아세테이트으로 재결정하여 화합물 A-3(9.5g Y=63%)을 얻었다. LC-Mass 측정 (이론치: 636.78g/mol, 측정치: M = 637g/mol)

합성에 4: 화합물 A-9의 합성



[A-9]

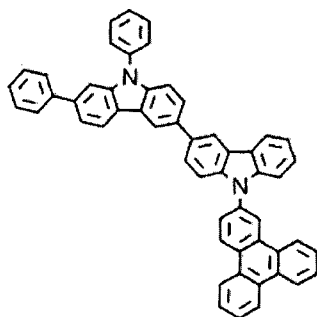
합성예 1의 단계 1 내지 5는 동일하다.

단계 6:

중간체 5 1eq(9.4g) 와 3-브로모-9-터페닐-카바졸 1eq(10.0g)와 Pd(PP3)₄

- 5 5mol%(1.2g), K₂CO₃ 2eq(5.8g)를 톨루엔(고형분의 12배수, 120ml)과 증류수(K₂CO₃량의 5배수, 30ml)에 현탁시킨 후 질소기류 하에서 18시간 동안 환류 교반하였다. 반응 종료 후 톨루엔과 증류수로 추출 후 유기층을 마그네슘 설페이트로 건조, 여과하고 여과액을 감압 농축하였다. 유기 용액을 제거하고 헥산:디클로로메탄=8:2(v/v)로 실리카겔 컬럼하여 생성물 고체를 디클로로메탄과 에틸아세테이트으로 재결정하여
- 10 화합물 A-9(11.0g Y=33%)을 얻었다. LC-Mass 측정 (이론치: 712.88g/mol, 측정치: M = 713g/mol)

합성예 5: 화합물 A-12의 합성



[A-12]

합성예1의 단계 1 내지 5는 동일하다.

단계 6:

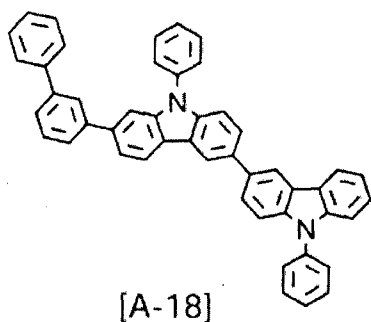
- 15 중간체 5 1eq(18.4g) 와 3-브로모-9H-카바졸 1eq(10.2g)와 Pd(PP3)₄ 5mol%(2.4g), K₂CO₃ 2eq(11.4g)를 톨루엔(고형분의 12배수, 120ml)과 증류수(K₂CO₃량의 5배수, 30ml)에 현탁시킨 후 질소기류 하에서 18시간 동안 환류 교반하였다. 반응 종료 후 톨루엔과 증류수로 추출 후 유기층을 마그네슘 설페이트로 건조, 여과하고
- 20 여과액을 감압 농축하였다. 유기 용액을 제거하고 헥산:디클로로메탄=8:2(v/v)로

실리카겔 컬럼하여 생성물 고체를 디클로로메탄과 에틸아세테이트으로 재결정하여
중간체 6(13.7g Y=69%)을 얻었다.

단계 7:

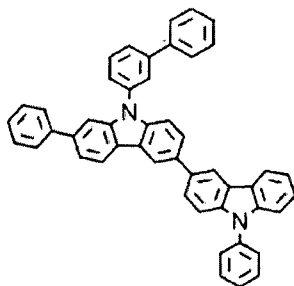
- 중간체 6 1eq(13.7g) 를 2브로모트리페닐렌 1eq(8.7g) 와 소듐티부톡사이드
5 2eq(5.4g), Pd2(dba)3 0.03eq(0.8g)를 톨루엔 (240ml)에 현탁시킨 후 트리-터셔리-
부틸포스핀 0.09eq를 넣고 18 시간 동안 환류 교반하였다. 반응 종료 후 톨루엔과
증류수로 추출 후 유기층을 마그네슘 설페이트로 건조, 여과하고 여과액을 감압
농축하였다. 유기 용액을 제거하고 헥산:디클로로메탄=8:2(v/v)로 실리카겔 컬럼하여
10 생성물 고체를 디클로로메탄과 에틸아세테이트으로 재결정하여 화합물 A-12(15.4g
Y=77%)을 얻었다. LC-Mass 측정 (이론치: 710.86g/mol, 측정치: M = 711g/mol)

합성예 6: 화합물 A-18의 합성



- 합성예 1의 단계 1에서 반응물질로 다이페닐-4-보론닉 에시드 대신에
1,1',3',1''-터페닐-4-보론닉 엑시드 1eq을 사용한 것을 제외하고 합성예 1과 동일한
15 방법으로 합성하여 화합물 A-18(4.1g Y=40%)을 얻었다. LC-Mass 측정 (이론치:
636.78g/mol, 측정치: M = 637g/mol)

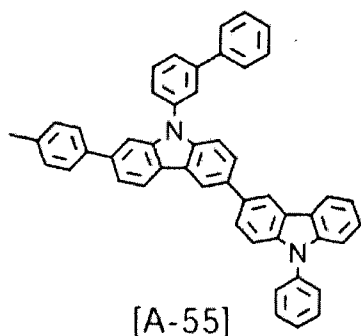
합성예 7: 화합물 A-33의 합성



합성예 1의 단계 4에서 브로모벤젠 대신 3-브로모바이페닐을 사용한 것을

제외하고 합성에 1과 동일한 방법으로 합성하여 화합물 A-33(13.9g Y=72%)을 얻었다.
LC-Mass 측정 (이론치: 636.78g/mol, 측정치: M = 637g/mol)

합성예 8: 화합물 A-55의 합성



5 단계 1:

2-브로모-4-클로로-아닐린 1eq(25.0g)와 4'-메틸-다이페닐-4-보로닉 엑시드 1eq(25.7g)와 Pd(PP3)4 5mol%(7.0g), K₂CO₃ 2eq(35.2g)를 톨루엔(고형분의 12배수, 300ml)과 증류수(K₂CO₃량의 5배수, 175ml)에 현탁시킨 후 질소기류 하에서 18 시간 동안 환류 교반하였다. 반응 종료 후 톨루엔과 증류수로 추출 후 유기층을 10 마그네슘설페이트(MgSO₄)로 건조, 여과하고 여과액을 감압 농축하였다. 유기 용액을 제거하고 헥산:디클로로메탄=8:2(v/v)로 실리카겔 컬럼하여 생성물 고체를 디클로로메탄과 아세톤으로 재결정하여 중간체 1을 27.6g(Y=78%) 얻었다.

단계 2:

중간체 1 1eq(27.6g)를 다이옥산에 교반하여 녹인 후 염산(35%) 3eq(25ml)을 15 천천히 투입하였다. 이어서 소듐ไน트레이트 1eq(7.1g) 및 소듐아자이드 1eq(6.1g)를 증류수에 녹여 1시간 간격으로 투입한다. 반응이 완료되면, NaOH로 중화한 다음 메탄올로 침전시키고, 물, 메탄올로 씻어준 다음 건조한다. 그렇게 얻어진 헥산:디클로로메탄=9:1(v/v)로 실리카겔 컬럼하여 중간체 2(27.5g, Y=92%)를 얻었다.

단계 3:

20 중간체 2 (27.5g)를 o-다이클로로벤젠에 18시간 환류교반하여 반응이 완료되면, 용매를 제거한다음, 디클로로메탄/헥산으로 재결정하여 중간체 3(22.2g Y=88%)을 얻었다.

단계 4:

25 중간체 3 1eq(22.2g)를 3-브로모바이페닐 1eq(17.8g)와 소듐티부톡사이드 2eq(14.6g), Pd₂(dba)₃ 0.03eq(2.0g)를 톨루엔 (300ml)에 현탁시킨 후 트리-터셔리-

부틸포스핀 0.09eq를 넣고 18 시간 동안 환류 교반하였다. 반응 종료 후 톨루엔과 증류수로 추출 후 유기층을 마그네슘 설페이트로 건조, 여과하고 여과액을 감압 농축하였다. 유기 용액을 제거하고 헥산:디클로로메탄=8:2(v/v)로 실리카겔 컬럼하여 생성물 고체를 디클로로메탄과 에틸아세테이트으로 재결정하여 중간체 4(16.8g Y=50%)를 얻었다.

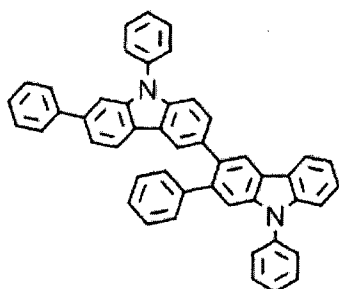
단계 5:

중간체 4 1eq(16.8g) 와 피나콜다이보론 1.2eq(11.6g), Pd(dppf)Cl₂ 0.5eq(1.6g) 포타슘아세테이트 2eq(7.5g) 를 무수디메틸포름아미드 (Dimethylformamide)(고형분의 12배수, 200ml)에 넣고 36시간 환류교반하였다. 반응 종료 후 증류수로 침전시켰다. 침전시킨 유기고형분의 증류수를 완벽히 건조한 다음 디클로로메탄과 에틸아세테이트으로 재결정하여 중간체 5(8.5g Y=42%)를 얻었다.

단계 6:

중간체 5 1eq(8.5g) 와 3-브로모-9-페닐-카바졸 1eq(5.1g)와 Pd(PP3)₄ 5mol%(0.9g), K₂CO₃ 2eq(4.4g)를 톨루엔(고형분의 12배수, 100ml)과 증류수(K₂CO₃량의 5배수, 22ml)에 현탁시킨 후 질소기류 하에서 18시간 동안 환류 교반하였다. 반응 종료 후 톨루엔과 증류수로 추출 후 유기층을 마그네슘 설페이트로 건조, 여과하고 여과액을 감압 농축하였다. 유기 용액을 제거하고 헥산:디클로로메탄=8:2(v/v)로 실리카겔 컬럼하여 생성물 고체를 디클로로메탄과 에틸아세테이트으로 재결정하여 화합물 A-55(3.9g Y=38%)을 얻었다. LC-Mass 측정 (이론치: 650.81g/mol, 측정치: M = 651g/mol)

합성예 9: 화합물 A-62의 합성



[A-62]

합성예1의 단계5까지는 동일하며,

단계6:

2-브로모-9페닐-카바졸 1eq(20.0g) 와 페닐보로닉 엑시드 1eq(7.4g)와 Pd(PP3)₄

5mol%(3.5g), K₂CO₃ 2eq(16.7g)를 톨루엔(고형분의 12배수, 240ml)과 증류수(K₂CO₃량의 5배수, 85ml)에 현탁시킨 후 질소기류 하에서 18시간 동안 환류 교반하였다. 반응 종료 후 톨루엔과 증류수로 추출 후 유기층을 마그네슘 설페이트로 건조, 여과하고 여과액을 감압 농축하였다. 유기 용액을 제거하고 헥산:디클로로메탄=8:2(v/v)로 실리카겔 컬럼하여 생성물 고체를 디클로로메탄과 에틸아세테이트으로 재결정하여 2-페닐-9페닐-카바졸(17.0g Y=88%)을 얻었다.

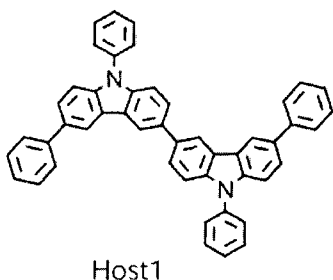
단계 7:

2-페닐-9페닐-카바졸 1eq(17.0g) 와 N-브로모석신이미드(NBS) 0.95eq(9.0g)을 디클로로메탄 200ml에 현탁시킨 후 질소 기류하에 8시간 교반하였다. 반응 종료 후 물로 세척한 다음 물층을 제거하고, 유기층만 여과하여 여과액을 아세톤으로 재결정하여 2-페닐-3브로모-9페닐-카바졸(20.2g, 95%)을 얻었다.

단계 8:

중간체 5 1eq(10.5g) 와 2-페닐-3브로모-9페닐-카바졸 1eq(9.4g)와 Pd(PP3)₄ 5mol%(1.4g), K₂CO₃ 2eq(6.5g)를 톨루엔(고형분의 12배수, 125ml)과 증류수(K₂CO₃량의 5배수, 33ml)에 현탁시킨 후 질소기류 하에서 18시간 동안 환류 교반하였다. 반응 종료 후 톨루엔과 증류수로 추출 후 유기층을 마그네슘 설페이트로 건조, 여과하고 여과액을 감압 농축하였다. 유기 용액을 제거하고 헥산:디클로로메탄=8:2(v/v)로 실리카겔 컬럼하여 생성물 고체를 디클로로메탄과 에틸아세테이트으로 재결정하여 화합물 A-62(7.2g Y=48%)을 얻었다. LC-Mass 측정 (이론치: 636.78g/mol, 측정치: M = 637g/mol)

비교합성예 1: HOST 1의 합성



단계 1:

3,6-다이브로모-9-페닐-카바졸 1eq(100.7g) 와 페닐보로닉 엑시드 1eq(30.6g)와 Pd(PP3)₄ 5mol%(14.5g), K₂CO₃ 2eq(69.4g)를 톨루엔(고형분의 12배수, 1200ml)과 증류수(K₂CO₃량의 5배수, 350ml)에 현탁시킨 후 질소기류 하에서 18시간 동안 환류

교반하였다. 반응 종료 후 톨루엔과 증류수로 추출 후 유기층을 마그네슘 설페이트로 건조, 여과하고 여과액을 감압 농축하였다. 유기 용액을 제거하고 헥산:디클로로메탄=9:1(v/v)로 실리카겔 컬럼하여 생성물 고체를 디클로로메탄과 아세톤으로 재결정하여 중간체 1(53.7g Y=54%)을 얻었다.

5 단계 2:

중간체 1 1eq(20.0g) 와 피나콜다이보론 1.2eq(15.3g), Pd(dppf)Cl₂ 0.5eq(2.1g) 포타슘아세테이트 2eq(9.9g) 를 무수디메틸포름아미드 (Dimethylformamide)(고형분의 12배수, 240ml)에 넣고 36시간 환류교반하였다. 반응 종료 후 증류수로 침전시켰다. 침전시킨 유기고형분의 증류수를 완벽히 건조한 다음 디클로로메탄과

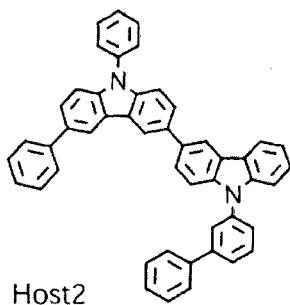
10 에틸아세테이트로 재결정하여 중간체 2(15.6g Y=70%)를 얻었다.

단계 3:

중간체 2 1eq(15.6g) 와 중간체 1 1eq(14.0g)와 Pd(PP3)₄ 5mol%(2.0g), K₂CO₃ 2eq(9.7g)를 톨루엔(고형분의 12배수, 190ml)과 증류수(K₂CO₃량의 5배수, 50ml)에 현탁시킨 후 질소기류 하에서 18시간 동안 환류 교반하였다. 반응 종료 후 톨루엔과 증류수로 추출 후 유기층을 마그네슘 설페이트로 건조, 여과하고 여과액을 감압 농축하였다. 유기 용액을 제거하고 헥산:디클로로메탄=8:2(v/v)로 실리카겔 컬럼하여 생성물 고체를 디클로로메탄과 에틸아세테이트로 재결정하여 화합물 Host1(10.4g Y=47%)을 얻었다.

LC-Mass 측정 (이론치: 636.78g/mol, 측정치: M = 637g/mol)

20 비교합성예 2: HOST 2의 합성



비교합성예1의 단계1 및 2는 동일하다.

단계 3:

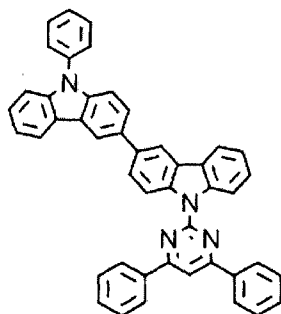
중간체 2 1eq(14.0g) 와 3브로모-9-메타바이페닐-카바졸 1 1eq(12.5g)와 Pd(PP3)₄ 5mol%(1.8g), K₂CO₃ 2eq(8.7g)를 톨루엔(고형분의 12배수, 125ml)과 증류수(K₂CO₃량의

25

- 5 배수, 33ml)에 현탁시킨 후 질소기류 하에서 18시간 동안 환류 교반하였다. 반응 종료 후 톨루엔과 증류수로 추출 후 유기층을 마그네슘 설페이트로 건조, 여과하고 여과액을 감압 농축하였다. 유기 용액을 제거하고 헥산:디클로로메탄=8:2(v/v)로 실리카겔 컬럼하여 생성물 고체를 디클로로메탄과 에틸아세테이트으로 재결정하여
- 5 화합물 Host 2(12.9g Y=65%)을 얻었다.

LC-Mass 측정 (이론치: 636.78g/mol, 측정치: M = 637g/mol)

비교합성예 3: HOST 3의 합성



Host3

단계 1:

- 10 9-페닐-카바졸-3-보론 에스터 1eq(11.1g) 와 3브로모-9-(4,6-다이페닐-피리미딘-2-일)카바졸 1eq(14.9g)와 Pd(PP3)4 5mol%(1.8g), K2CO3 2mol%(8.7g)를 톨루엔(고형분의 12배수, 180ml)과 증류수(K2CO3량의 5배수, 45ml)에 현탁시킨 후 질소기류 하에서 18시간 동안 환류 교반하였다. 반응 종료 후 톨루엔과 증류수로 추출 후 유기층을 마그네슘 설페이트로 건조, 여과하고 여과액을 감압 농축하였다. 유기 용액을
- 15 제거하고 헥산:디클로로메탄=8:2(v/v)로 실리카겔 컬럼하여 생성물 고체를 디클로로메탄과 에틸아세테이트으로 재결정하여 Host3(14.3g Y=72%)을 얻었다.

평가 1: 열 안정성

합성예 1 내지 9와 비교합성예 3에 따른 유기 화합물의 열 안정성을 평가하였다.

- 20 열 안정성은 열중량분석(Thermo Gravimetric Analysis, TGA) 및 시차주사열량측정법(Differential Scanning Calorimetry, DSC)을 사용하여 질소 분위기에서 상온부터 800℃(TGA) 및 상온부터 400℃(DSC)까지 10℃/min의 속도로 승온하면서 열분석하였다.

그 결과는 표 1과 같다.

[표 1]

		유리전이온도(Tg)	결정화온도(Tc)
합성예 1	A-1	139	ND
합성예 2	A-2	148	ND
합성예 3	A-3	145	ND
합성예 4	A-9	156	ND
합성예 5	A-12	ND	ND
합성예 6	A-18	140	ND
합성예 7	A-33	146	ND
합성예 8	A-55	146	ND
합성예 9	A-62	148	ND
비교합성예 1	HOST 1	139	ND
비교합성예 2	HOST 2	137	ND
비교합성예 3	HOST 3	119	226

표 1을 참고하면, 합성예 1 내지 9에서 얻은 유기 화합물은 비교합성예 1 내지 3에서 얻은 유기 화합물과 비교하여 열 안정성이 높은 것을 확인할 수 있다.

유기 발광 소자의 제작 I

실시예 1

ITO 전극이 형성된 유리 기판을 50mm x 50mm x 0.5mm 크기로 잘라서 아세톤 이소프로필 알콜과 순수물 속에서 각 15분 동안 초음파 세정한 후, 30분 동안 UV 오존 세정하였다.

상기 ITO 전극 상에 m-MTDATA를 증착 속도 1 Å/sec로 진공 증착하여 600 Å 두께의 정공 주입층을 형성하고, 상기 정공 주입층 상에 바이페닐-4-일-(9,9'-다이메틸-9H-플루오렌-2-일-)-[4-(9-페닐-9H-카바졸-3-일)-페닐]-아민)을 증착 속도 1 Å/sec로 진공 증착하여 300 Å 두께의 정공 수송층을 형성하였다. 이어서, 상기 정공 수송층 상에 Ir(ppy)₃(도펀트)과 합성예 1에서 얻은 화합물 A-1을 10:90의 중량비로 공증착하여 400 Å의 두께의 발광층을 형성하였다. 이어서 상기 발광층 상에 BAlq을 증착 속도 1 Å/sec로 진공 증착하여 50 Å의 두께의 정공 저지층을 형성한 후, 상기 정공 저지층 상에 Alq₃를 진공 증착하여 300 Å 두께의 전자

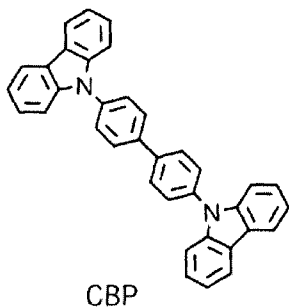
수송층을 형성하였다. 상기 전자 수송층 상에 LiF 10Å(전자 주입층)과 Al 2000Å(캐소드)을 순차적으로 진공 증착하여, 유기 발광 소자를 제작하였다.

실시에 2 내지 9

합성예 1에서 얻은 화합물 A-1 대신 합성예 2 내지 합성예 9에서 얻은 A-2, A-3, A-9, A-12, A-18, A-33, A-55 및 A-62을 각각 사용한 것을 제외하고 실시예 1과 동일한 방법으로 실시예 2 내지 9에 따른 유기 발광 소자를 제작하였다.

비교예 1

합성예 1에서 얻은 화합물 A-1 대신 CBP를 사용한 것을 제외하고 실시예 1과 동일한 방법으로 유기 발광 소자를 제작하였다.



비교예 2 내지 4

합성예 1에서 얻은 화합물 A-1 대신 비교합성예 1 내지 3에 따른 HOST 1, HOST 2, HOST 3을 각각 사용한 것을 제외하고 실시예 1과 동일한 방법으로 비교예 2 내지 4에 해당하는 유기 발광 소자를 제작하였다.

평가 2: 유기 발광 소자의 성능 I

실시예 1 내지 9와 비교예 1 내지 4에 따른 유기발광소자의 전압에 따른 전류밀도 변화, 휘도 변화 및 발광효율을 측정하였다.

구체적인 측정방법은 하기와 같고, 그 결과는 표 2와 같다.

(1) 전압변화에 따른 전류밀도의 변화 측정

제조된 유기발광소자에 대해, 전압을 0V 부터 10V까지 상승시키면서 전류-전압계(Keithley 2400)를 이용하여 단위소자에 흐르는 전류값을 측정하고, 측정된 전류값을 면적으로 나누어 결과를 얻었다.

(2) 전압변화에 따른 휘도변화 측정

제조된 유기발광소자에 대해, 전압을 0V 부터 10V까지 상승시키면서 휘도계(Minolta Cs-1000A)를 이용하여 그 때의 휘도를 측정하여 결과를 얻었다.

(3) 발광효율 측정

상기(1) 및 (2)로부터 측정된 휘도와 전류밀도 및 전압을 이용하여 동일 전류밀도(10 mA/cm^2)의 전류 효율(cd/A) 을 계산하였다.

(4) 수명 측정

- 5 휘도(cd/m^2)를 5000 cd/m^2 로 유지하고 전류 효율(cd/A)이 90%로 감소하는 시간을 측정하여 결과를 얻었다.

[표 2]

No.	발광층호스트	구동전압(eV)	색
실시예 1	A-1	3.9	Green
실시예 2	A-2	4.6	Green
실시예 3	A-3	4.8	Green
실시예 4	A-9	4.5	Green
실시예 5	A-12	4.5	Green
실시예 6	A-18	4.7	Green
실시예 7	A-33	4.6	Green
실시예 8	A-55	4.3	Green
실시예 9	A-62	3.8	Green
비교예 1	CBP	5.2	Green
비교예 2	Host 1	4.8	Green
비교예 3	Host 2	4.9	Green
비교예 4	Host 3	4.9	Green

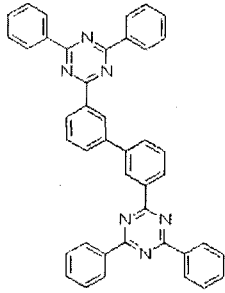
- 표 2를 참고하면, 실시예 1 내지 9에 따른 유기발광소자는 비교예 1 내지 4에
10 다른 유기발광소자와 비교하여 낮은 구동 전압 특성을 가지는 것을 확인할 수 있다.

유기 발광 소자의 제작 II

실시예 10

- 발광층 형성시 Ir(ppy)_3 (도펀트)와 합성예 1 에서 얻은 화합물 A-1 대신
15 Ir(ppy)_3 (도펀트), 합성예 2 에서 얻은 화합물 A-2 및 ETH-1 을 10:45:45 의 중량비로
공증착하여 $400 \text{ \AA}$ 의 두께의 발광층을 형성한 것을 제외하고 실시예 1 과 동일한
방법으로 유기발광소자를 제작하였다.

[ETH-1]

**실시예 11 내지 16**

합성예 2에서 얻은 화합물 A-2 대신 합성예 3, 4, 6, 7, 8 및 9에서 얻은 A-3, A-9, A-18, A-33, A-55 및 A-62을 각각 사용한 것을 제외하고 실시예 10과 동일한 방법으로 실시예 11 내지 16에 대한 유기 발광 소자를 제작하였다.

비교예 5 내지 8

합성예 1에서 얻은 화합물 A-1 대신 CBP, HOST1, HOST2, HOST3을 각각 사용한 것을 제외하고 실시예 10과 동일한 방법으로 비교예 5 내지 8에 해당하는 유기 발광 소자를 제작하였다.

평가 3: 유기 발광 소자의 성능 II

실시예 10 내지 16과 비교예 5 내지 8에 따른 유기발광소자의 전압에 따른 전류밀도 변화, 휘도 변화 및 발광효율을 측정하였다.

구체적인 측정방법은 상술한 바와 같고, 그 결과는 표 3과 같다.

[표 3]

No.	발광층호스트	구동전압	색	효율	90% 수명(h) At 5000cd/m2
실시예 10	A-2 + ETH-1	4.0	Green	88	1160
실시예 11	A-3 + ETH-1	4.1	Green	87	2050
실시예 12	A-9 + ETH-1	4.2	Green	82	1480
실시예 13	A-18 + ETH-1	4.2	Green	83	1860
실시예 14	A-33 + ETH-1	4.1	Green	88	2130
실시예 15	A-55 + ETH-1	4.1	Green	83	1740
실시예 16	A-62 + ETH-1	3.6	Green	83	1050
비교예 5	CBP + ETH-1	4.8	Green	41	40

비교예 6	Host 1 + ETH-1	4.2	Green	75	700
비교예 7	Host 2 + ETH-1	4.6	Green	80	940
비교예 8	Host 3 + ETH-1	4.8	Green	85	45

표 3을 참고하면, 실시예 10 내지 16에 따른 유기발광소자는 비교예 5 내지 8에 따른 유기발광소자와 비교하여 낮은 구동 전압, 동등 또는 그 이상의 발광 효율 및 높은 수명 특성을 가지는 것을 확인할 수 있다.

본 발명은 상기 실시예들에 한정되는 것이 아니라 서로 다른 다양한 형태로
5 제조될 수 있으며, 본 발명이 속하는 기술분야에서 통상의 지식을 가진 자는 본 발명의 기술적 사상이나 필수적인 특징을 변경하지 않고서 다른 구체적인 형태로 실시될 수 있다는 것을 이해할 수 있을 것이다. 그러므로 이상에서 기술한 실시예들은 모든 면에서 예시적인 것이며 한정적이 아닌 것으로 이해해야만 한다.

10 【부호의 설명】

100, 200: 유기 발광 소자 110: 음극

120: 양극 105: 유기층

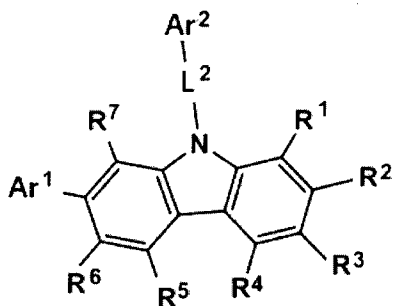
130, 230: 발광층 140: 정공 보조층

【특허청구범위】

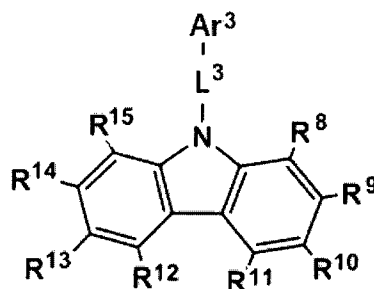
【청구항 1】

하기 화학식 1과 2의 조합으로 표현되는 유기 화합물:

[화학식 1]



[화학식 2]



상기 화학식 1 또는 2에서,

Ar¹ 내지 Ar³는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기이고,

L² 및 L³는 각각 독립적으로 단일 결합, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴렌기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30의 2가의 헤테로고리기 또는 이들의 조합이고,

R¹ 내지 R¹⁵는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C20 사이클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 헤테로고리기, 할로젠, 시아노기, 실릴기 또는 이들의 조합이거나 화학식 1 또는 2와의 연결 지점이고,

R¹ 내지 R⁷ 중 어느 하나는 화학식 2와의 연결 지점이고,

R⁸ 내지 R¹⁵ 중 어느 하나는 화학식 1과의 연결 지점이며,

여기서, 치환 또는 비치환된에서 “치환”은 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C20 사이클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 헤테로고리기, 실릴기 또는 이들의 조합으로 치환된 것을 의미한다.

【청구항 2】

제1항에서,

R³, R⁶, R¹⁰ 및 R¹³은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1

내지 C20 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C20 사이클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 알콕시기, 할로젠, 시아노기, 실릴기 또는 이들의 조합이거나 화학식 1 또는 2와의 연결 지점인 유기 화합물.

【청구항 3】

제1항에서,

R^8 내지 R^{15} 는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C20 사이클로알킬기, 실릴기 또는 이들의 조합이거나 화학식 1과의 연결 지점인 유기 화합물.

【청구항 4】

제1항에서,

R^1 내지 R^4 중 어느 하나는 화학식 2와의 연결 지점이고 R^8 내지 R^{15} 중 어느 하나는 화학식 1과의 연결 지점인 유기 화합물.

【청구항 5】

제1항에서,

Ar^1 내지 Ar^3 는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 페닐기, 치환 또는 비치환된 바이페닐기, 치환 또는 비치환된 나프틸기, 치환 또는 비치환된 터페닐기, 치환 또는 비치환된 안트라세닐기, 치환 또는 비치환된 페난트레닐기, 치환 또는 비치환된 쿼터페닐기 또는 치환 또는 비치환된 트리페닐레닐기인 유기 화합물.

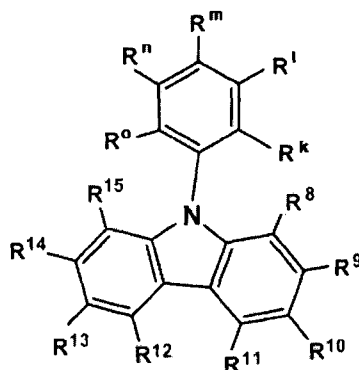
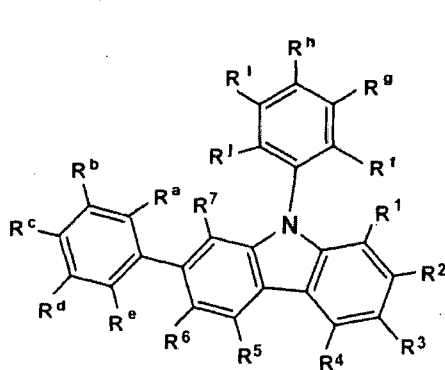
【청구항 6】

제1항에서,

상기 화학식 1 및 2는 각각 하기 화학식 1A 및 2A로 표현되는 유기 화합물:

[화학식 1A]

[화학식 2A]



상기 화학식 1A 또는 2A에서,

R^1 내지 R^{15} 는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C20 사이클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 헤테로고리기, 할로젠, 시아노기, 실릴기 또는 이들의 조합이거나 화학식 1A 또는 2A와의 연결 지점이고,

R^1 내지 R^7 중 어느 하나는 화학식 2A와의 연결 지점이고,

R^8 내지 R^{15} 중 어느 하나는 화학식 1A과의 연결 지점이며,

R^a 내지 R^o 는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C20 사이클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 헤테로고리기, 할로젠, 시아노기, 실릴기 또는 이들의 조합이고,

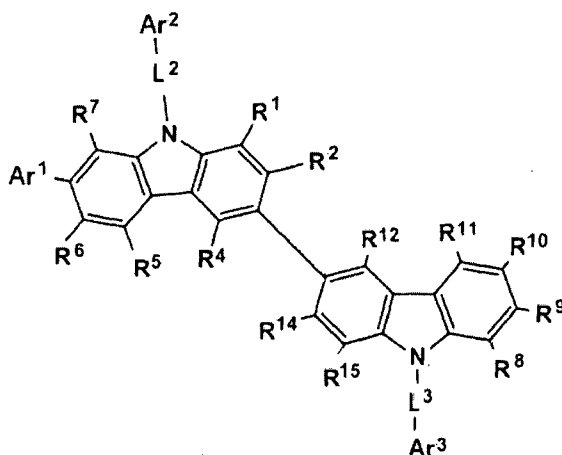
여기서, 치환 또는 비치환된에서 “치환”은 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C20 사이클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 헤테로고리기, 실릴기 또는 이들의 조합으로 치환된 것을 의미한다.

【청구항 7】

제1항에서,

하기 화학식 3으로 표현되는 유기 화합물:

[화학식 3]



상기 화학식 3에서,

Ar^1 내지 Ar^3 는 각각 독립적으로 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30

아릴기이고,

L^2 및 L^3 는 각각 독립적으로 단일 결합, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴렌기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30의 2가의 헤테로고리기 또는 이들의 조합이고,

R^1, R^2, R^4 내지 R^{12}, R^{14} 및 R^{15} 는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C20 사이클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 헤테로고리기, 할로젠, 시아노기, 실릴기 또는 이들의 조합이며,

여기서, 치환 또는 비치환된에서 “치환”은 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C20 사이클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C6 내지 C30 아릴기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 헤테로고리기, 실릴기 또는 이들의 조합으로 치환된 것을 의미한다.

【청구항 8】

제7항에서,

R^6 및 R^{10} 은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C20 사이클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 헤테로고리기, 할로젠, 시아노기, 실릴기 또는 이들의 조합인 유기 화합물.

【청구항 9】

제7항에서,

R^9 는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C20 사이클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 헤테로고리기, 할로젠, 시아노기, 실릴기 또는 이들의 조합인 유기 화합물.

【청구항 10】

제7항에서,

R^8 내지 R^{12}, R^{14} 및 R^{15} 는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 알킬기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C20 사이클로알킬기, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 알콕시기, 치환 또는 비치환된 C3 내지 C30 헤테로고리기,

할로젠, 시아노기, 실릴기 또는 이들의 조합인 유기 화합물.

【청구항 11】

제1항에서,

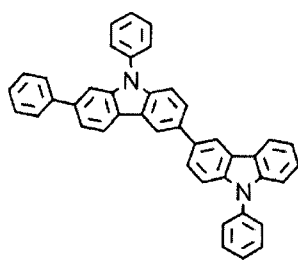
화학식 1 또는 화학식 2와 결합하지 않는 R^1 내지 R^{15} 는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 치환 또는 비치환된 C1 내지 C20 알킬기 또는 치환 또는 비치환된 C3 내지 C20 사이클로알킬기인 유기 화합물.

【청구항 12】

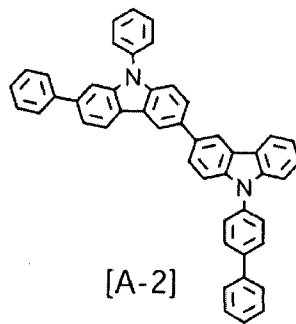
제1항에서,

하기 그룹 1에 나열된 유기 화합물.

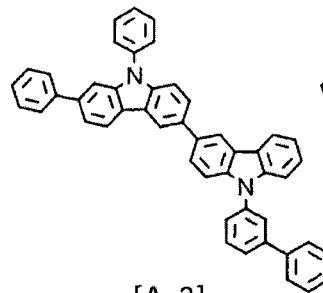
[그룹 1]



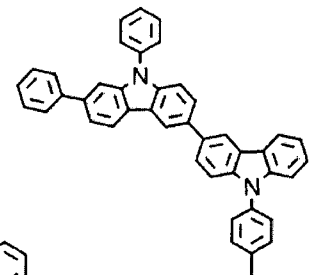
[A-1]



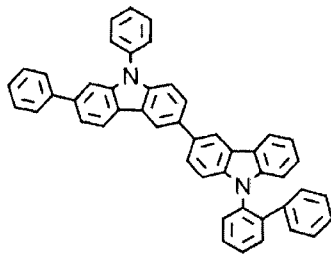
[A-2]



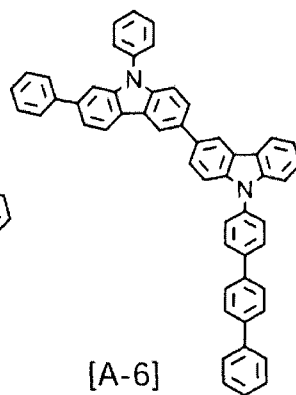
[A-3]



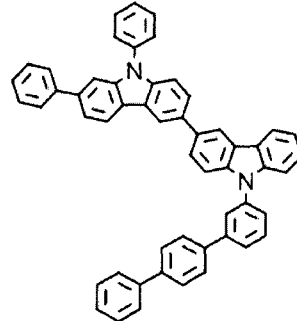
[A-4]



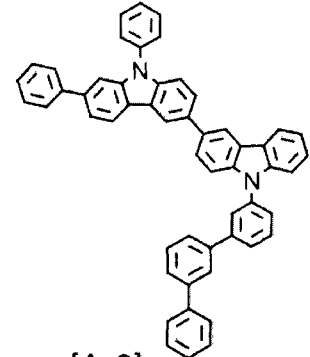
[A-5]



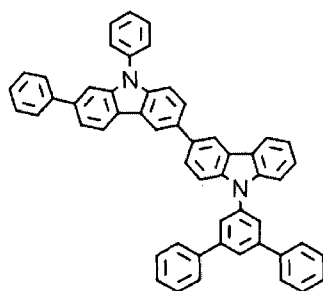
[A-6]



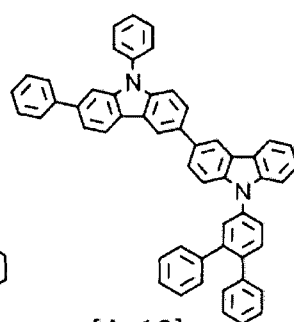
[A-7]



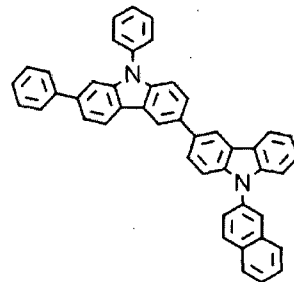
[A-8]



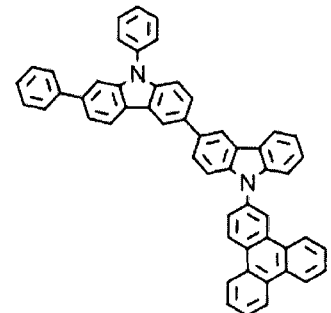
[A-9]



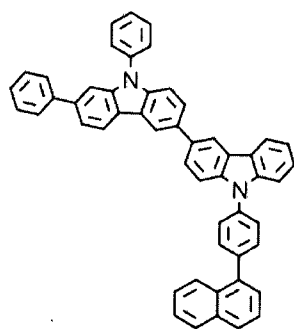
[A-10]



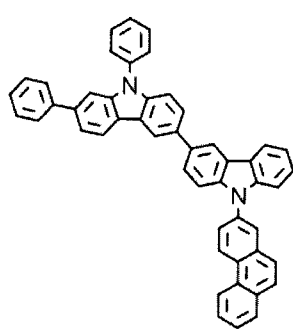
[A-11]



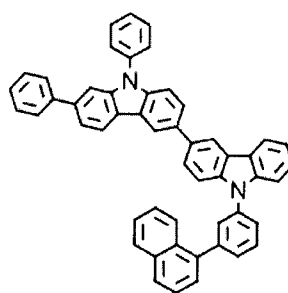
[A-12]



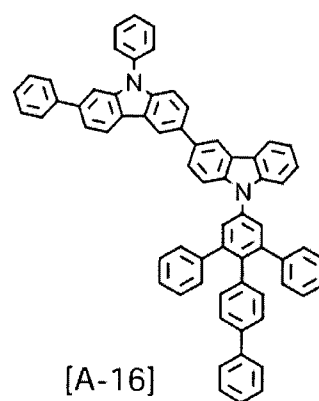
[A-13]



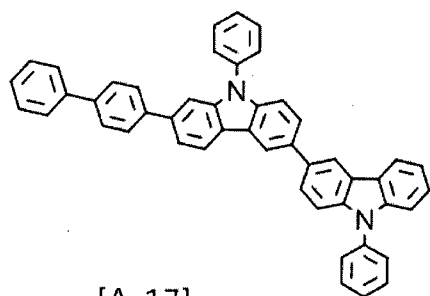
[A-14]



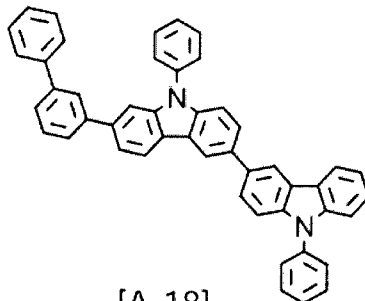
[A-15]



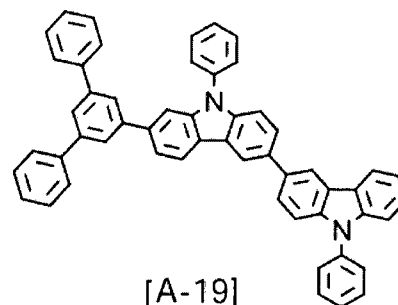
[A-16]



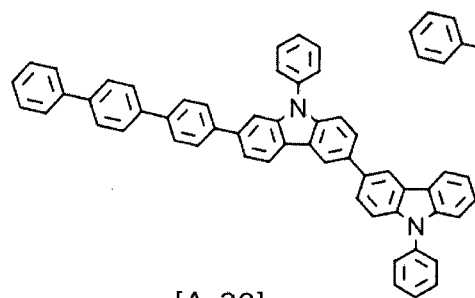
[A-17]



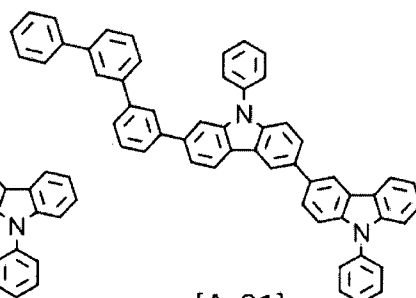
[A-18]



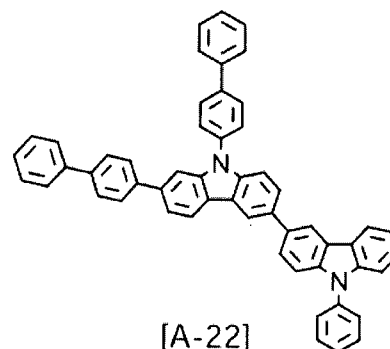
[A-19]



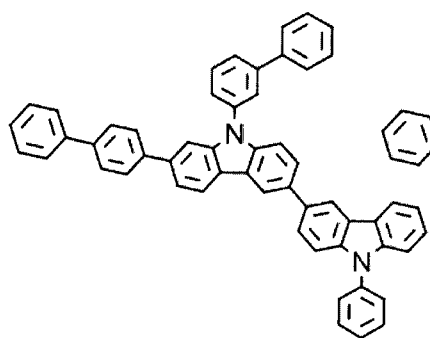
[A-20]



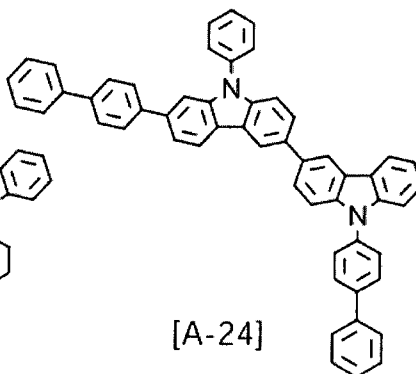
[A-21]



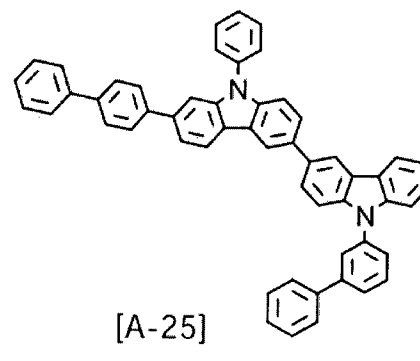
[A-22]



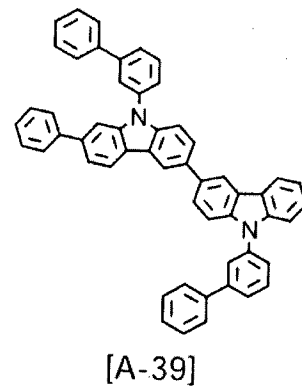
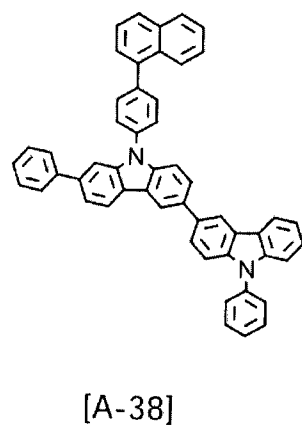
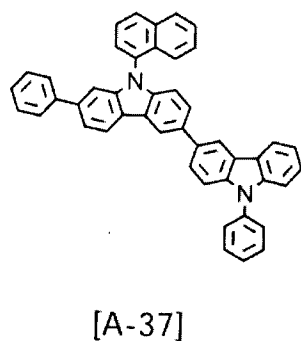
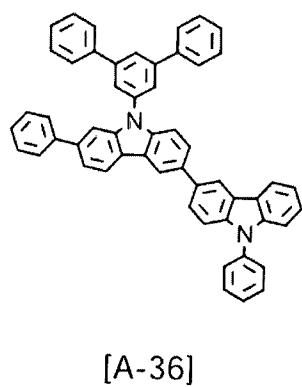
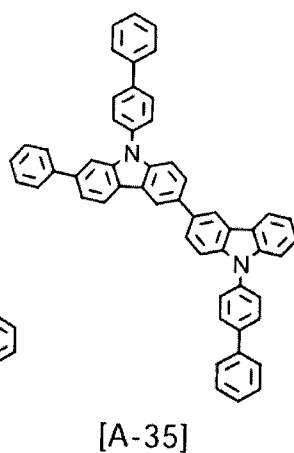
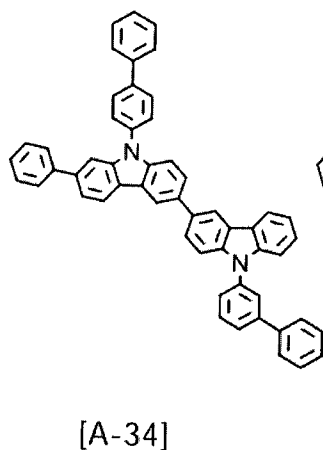
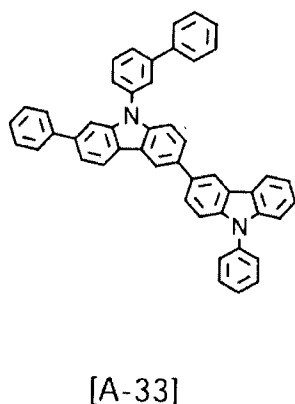
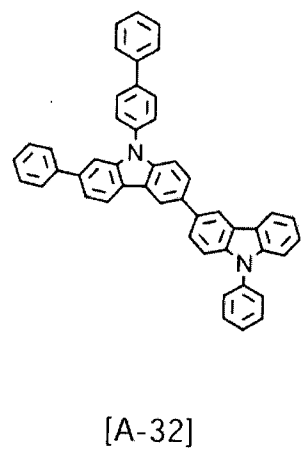
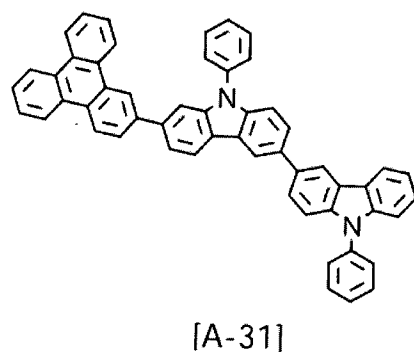
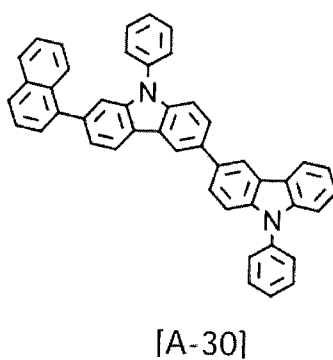
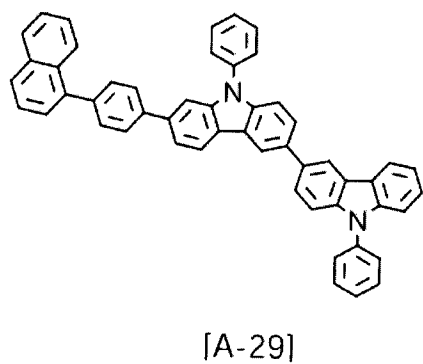
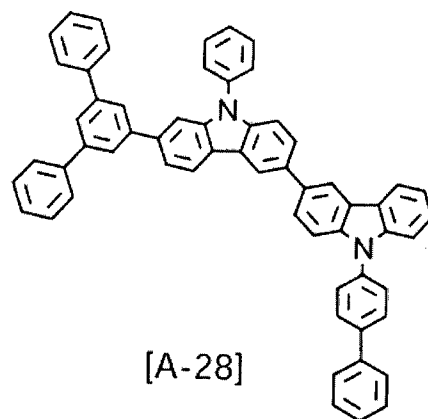
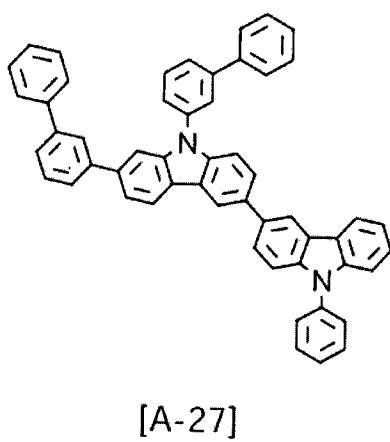
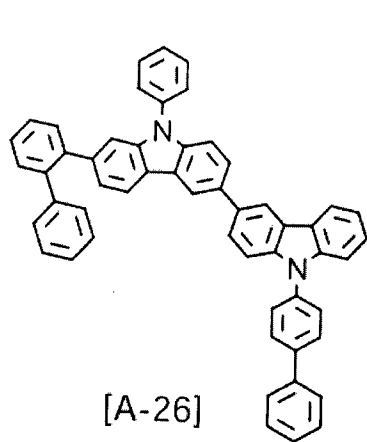
[A-23]

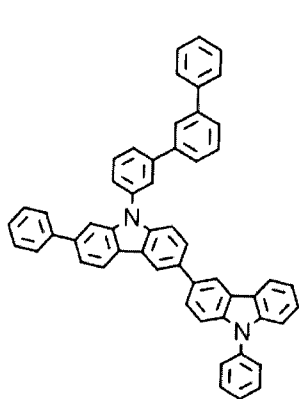


[A-24]

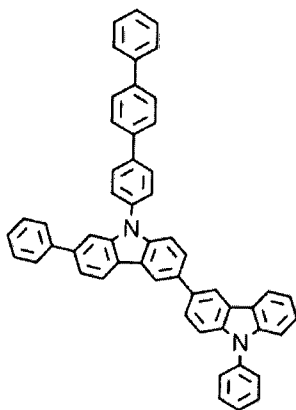


[A-25]

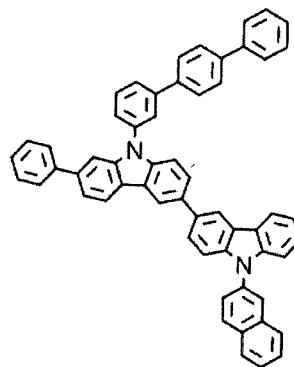




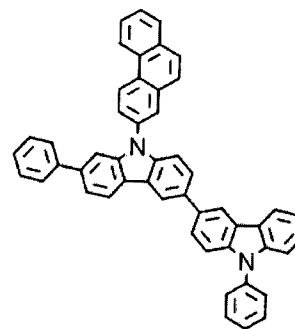
[A-40]



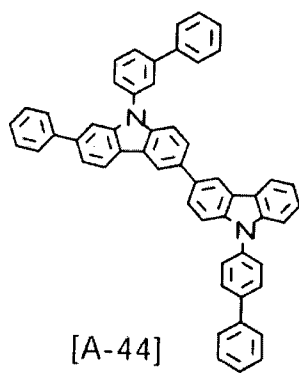
[A-41]



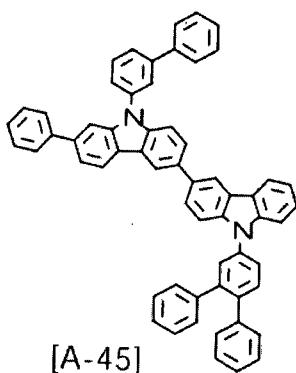
[A-42]



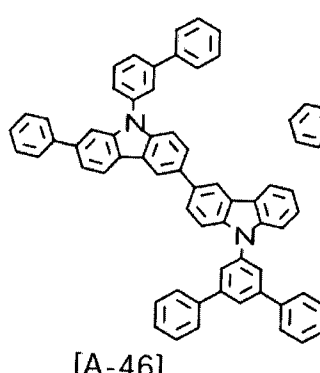
[A-43]



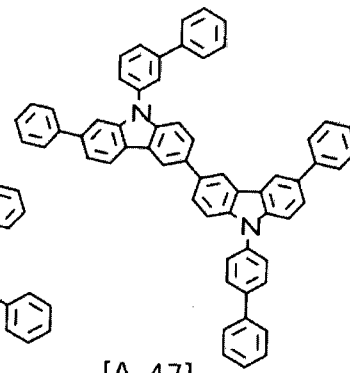
[A-44]



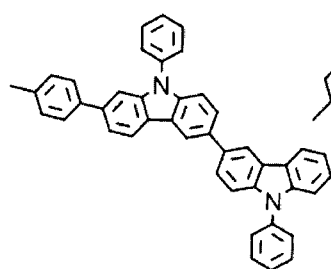
[A-45]



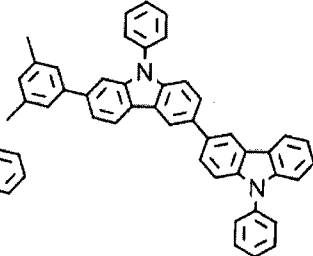
[A-46]



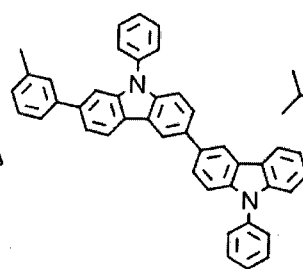
[A-47]



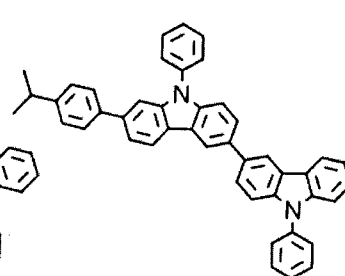
[A-48]



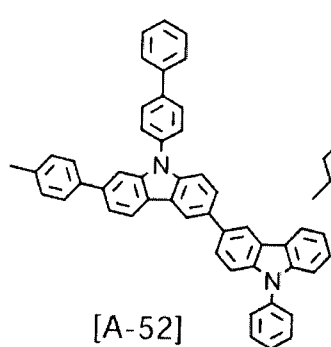
[A-49]



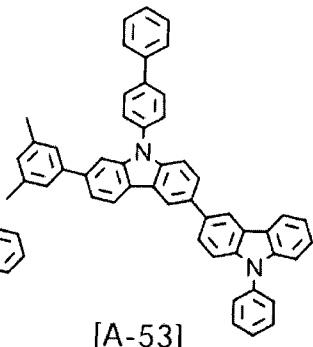
[A-50]



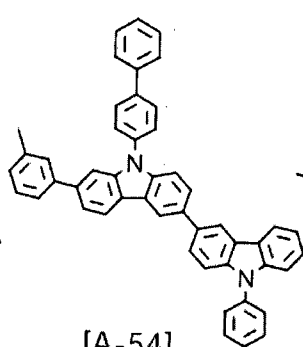
[A-51]



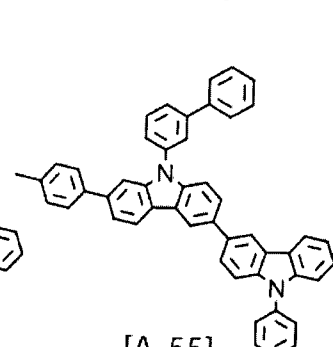
[A-52]



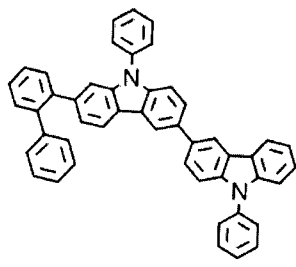
[A-53]



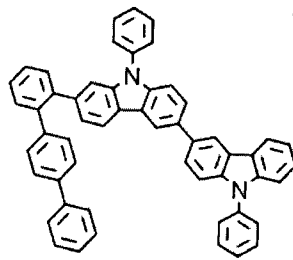
[A-54]



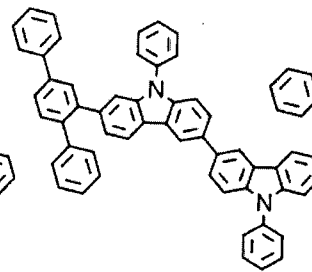
[A-55]



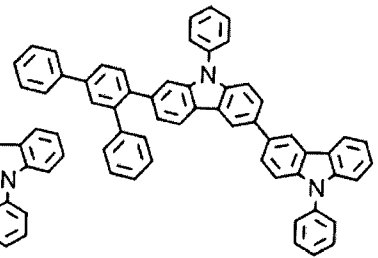
[A-56]



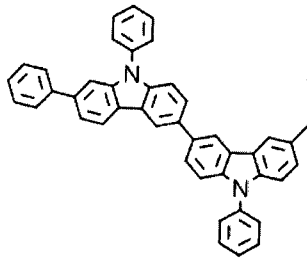
[A-57]



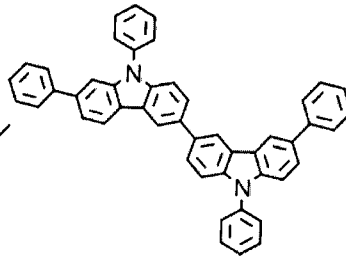
[A-58]



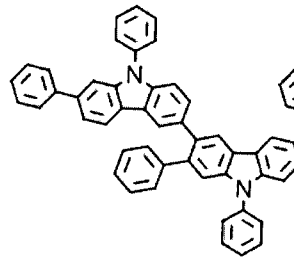
[A-59]



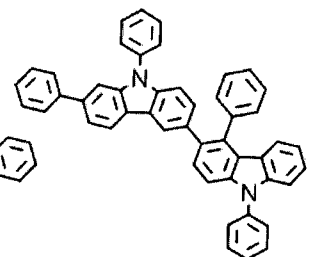
[A-60]



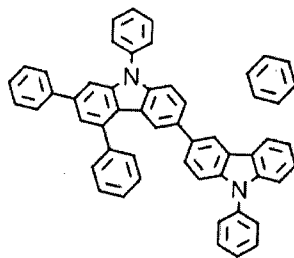
[A-61]



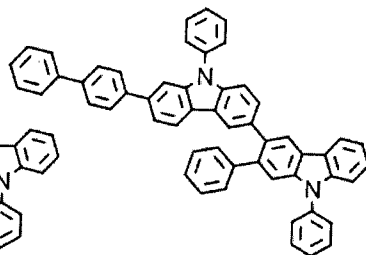
[A-62]



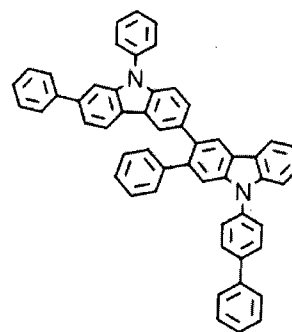
[A-63]



[A-65]



[A-66]



[A-67]

【청구항 13】

서로 마주하는 애노드와 캐소드, 그리고

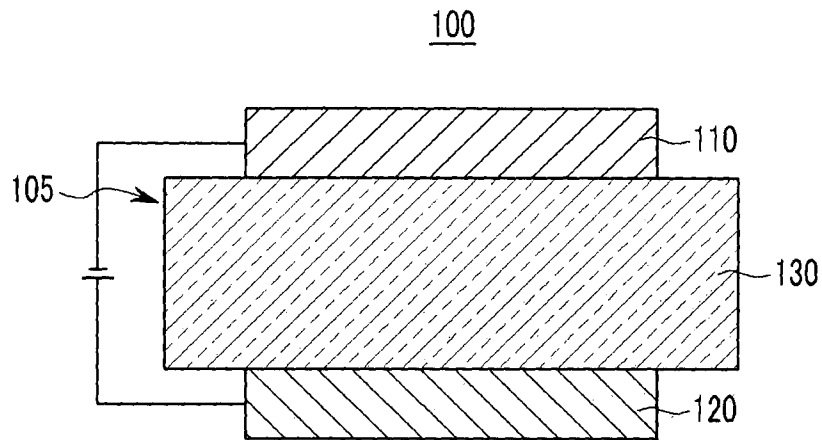
상기 애노드와 상기 캐소드 사이에 위치하는 적어도 1층의 유기층을 포함하고,

상기 유기층은 제1항 내지 제12항 중 어느 한 항에 따른 유기 화합물을 포함하는 유기 광전자 소자.

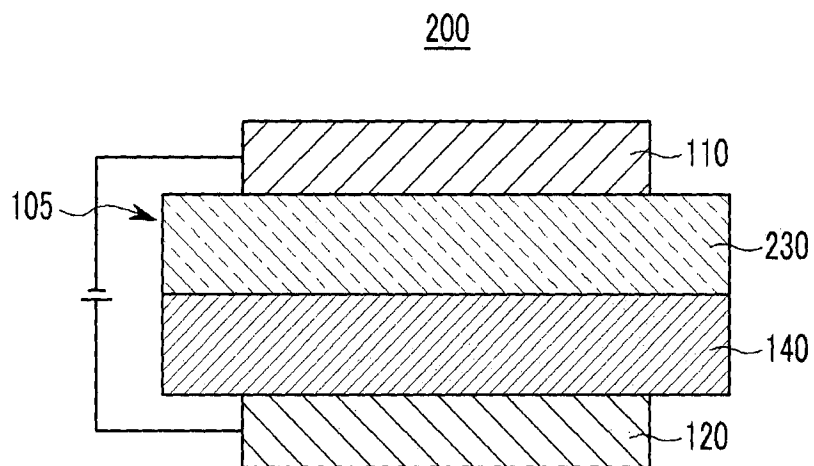
【청구항 14】

제13항에 따른 유기 광전자 소자를 포함하는 표시 장치.

[Fig. 1]



[Fig. 2]



INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/KR2015/012413**A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER*****C07D 403/04(2006.01)i, C07D 209/82(2006.01)i, C09K 11/06(2006.01)i, H01L 51/50(2006.01)i, H01L 51/42(2006.01)i***

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

B. FIELDS SEARCHED

Minimum documentation searched (classification system followed by classification symbols)

C07D 403/04; H01L 51/54; C07D 209/82; C07D 251/24; C09K 11/06; H01L 51/50; C07D 403/12; C07D 401/10; C07D 401/14; H01L 51/42

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

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

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

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

eKOMPASS (KIPO internal), STN Express(Registry, Caplus), Google & Keywords: optoelectronic, light emitting, oled, carbazole, bis-carbazole

C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
X	KR 10-2015-0088712 A (SAMSUNG SDI CO., LTD.) 03 August 2015 See abstract; and claims 11-14, 18, 21.	1-14
X	KR 10-2015-0043669 A (DUK SAN NEOLUX CO., LTD.) 23 April 2015 See abstract; and claims 1-3, 4, 10.	1-14
A	KR 10-2014-0001568 A (SK CHEMICALS CO., LTD.) 07 January 2014 See abstract; and claims 3, 5, 7.	1-14
A	KR 10-2013-0134426 A (INDUSTRY-ACADEMIC COOPERATION FOUNDATION, DANKOOK UNIVERSITY) 10 December 2013 See abstract; paragraphs [0136], [0210]; and claim 9.	1-14
A	KR 10-2013-0102673 A (ROHM AND HAAS ELECTRONIC MATERIALS KOREA LTD.) 23 September 2013 See abstract; and claims 1, 5.	1-14



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

25 JULY 2016 (25.07.2016)

Date of mailing of the international search report

26 JULY 2016 (26.07.2016)

Name and mailing address of the ISA/KR

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

Facsimile No. 82-42-472-7140

Authorized officer

Telephone No.

INTERNATIONAL SEARCH REPORT
Information on patent family members

International application No.

PCT/KR2015/012413

Patent document cited in search report	Publication date	Patent family member	Publication date
KR 10-2015-0088712 A	03/08/2015	TW 201533027 A WO 2015-111848 A1	01/09/2015 30/07/2015
KR 10-2015-0043669 A	23/04/2015	WO 2015-056965 A1	23/04/2015
KR 10-2014-0001568 A	07/01/2014	NONE	
KR 10-2013-0134426 A	10/12/2013	KR 10-1525500 B1	03/06/2015
KR 10-2013-0102673 A	23/09/2013	NONE	

A. 발명이 속하는 기술분류(국제특허분류(IPC))

C07D 403/04(2006.01)i, C07D 209/82(2006.01)i, C09K 11/06(2006.01)i, H01L 51/50(2006.01)i, H01L 51/42(2006.01)i

B. 조사된 분야

조사된 최소문헌(국제특허분류를 기재)

C07D 403/04; H01L 51/54; C07D 209/82; C07D 251/24; C09K 11/06; H01L 51/50; C07D 403/12; C07D 401/10; C07D 401/14; H01L 51/42

조사된 기술분야에 속하는 최소문헌 이외의 문헌

한국등록실용신안공보 및 한국공개실용신안공보: 조사된 최소문헌란에 기재된 IPC

일본등록실용신안공보 및 일본공개실용신안공보: 조사된 최소문헌란에 기재된 IPC

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

eKOMPASS(특허청 내부 검색시스템), STN Express(Registry, Caplus), Google & 키워드: 광전자, 발광, oled, 카바줄, 비스카마줄

C. 관련 문헌

카테고리*	인용문헌명 및 관련 구절(해당하는 경우)의 기재	관련 청구항
X	KR 10-2015-0088712 A (삼성에스디아이 주식회사) 2015.08.03 요약; 및 청구항 11-14, 18, 21 참조.	1-14
X	KR 10-2015-0043669 A (덕산네오룩스 주식회사) 2015.04.23 요약; 및 청구항 1-3, 4, 10 참조.	1-14
A	KR 10-2014-0001568 A (에스케이케미칼주식회사) 2014.01.07 요약; 및 청구항 3, 5, 7 참조.	1-14
A	KR 10-2013-0134426 A (단국대학교 산학협력단) 2013.12.10 요약; 단락 [0136], [0210]; 및 청구항 9 참조.	1-14
A	KR 10-2013-0102673 A (롬엔드하스전자재료코리아유한회사) 2013.09.23 요약; 및 청구항 1, 5 참조.	1-14

☐ 추가 문헌이 C(계속)에 기재되어 있습니다.☒ 대응특허에 관한 별지를 참조하십시오.

* 인용된 문헌의 특별 카테고리:

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

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

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

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

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

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

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

“&” 동일한 대응특허문헌에 속하는 문헌

“P” 우선일 이후에 공개되었으나 국제출원일 이전에 공개된 문헌

국제조사의 실제 완료일

2016년 07월 25일 (25.07.2016)

국제조사보고서 발송일

2016년 07월 26일 (26.07.2016)

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 10-2015-0088712 A	2015/08/03	TW 201533027 A WO 2015-111848 A1	2015/09/01 2015/07/30
KR 10-2015-0043669 A	2015/04/23	WO 2015-056965 A1	2015/04/23
KR 10-2014-0001568 A	2014/01/07	없음	
KR 10-2013-0134426 A	2013/12/10	KR 10-1525500 B1	2015/06/03
KR 10-2013-0102673 A	2013/09/23	없음	